Министерство науки и высшего образования РФ

Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Суперкомпьютерные дни в России

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Труды XXI Международной конференции

Нижний Новгород, 22–26 ноября 2021 г.

Нижний Новгород
Издательство Нижегородского госуниверситета
2021

УДК 004.942+519.876.5+519.6
ББК 22.18я43+22.19я43
М34

М34 **Математическое моделирование и суперкомпьютерные технологии.** Труды XXI Международной конференции (Н. Новгород, 22–26 ноября 2021 г.) / Под ред. проф. Д.В. Баландина. – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2021. – 423 с.

Отв. за выпуск К.А. Баркалов

ISBN 978-5-91326-702-3

Сборник материалов Двадцать первой Международной конференции «Математическое моделирование и суперкомпьютерные технологии», состоявшейся 22−26 ноября 2021 г. на базе Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, содержит тезисы докладов и короткие статьи, посвященные математическому моделированию сложных процессов и явлений, численным методам их исследования, а также проблемам разработки методов суперкомпьютерных вычислений для решения актуальных задач в различных областях науки, промышленности и образования.

Подробную информацию о конференции можно найти в сети Интернет по адресу http://agora.guru.ru/hpc2021.

Поддержка конференции

Корпорация Intel

Научно-образовательный математический центр «Математика технологий будущего»

ISBN 978-5-91326-702-3

УДК 004.942+519.876.5+519.6
ББК 22.18я43+22.19я43

ПРЕДИСЛОВИЕ

22–26 ноября 2021 г. в рамках Международного конгресса «Суперкомпьютерные дни в России» на базе Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского при поддержке корпорации Intel и научно-образовательного математического центра «Математика технологий будущего» проведена XXI Международная конференция и молодежная школа «Математическое моделирование и суперкомпьютерные технологии».

Тематика конференции охватывала основные направления в математического моделирования и суперкомпьютерных технологий:

- математическое моделирование динамики систем и процессов управления;
- теория динамических систем и бифуркаций;
- колебательные процессы в динамических сетях;
- модели и методы поддержки принятия решений;
- модели и методы искусственного интеллекта;
- математическое модели в биологии и медицине;
- математическое моделирование природных процессов;
- алгебра, геометрия и дискретная математика;
- технологии параллельных и распределенных вычислений;
- применение суперкомпьютерных технологий для решения вычислительно-сложных задач.

В рамках молодежной школы была организована трехдневная интенсивная онлайн-программа, посвященная изучению новой модели гетерогенного программирования oneAPI и языка программирования Data Parallel C++. Были проведены лекции и мастер-классы ведущих специалистов ННГУ и компании Intel, продемонстрированы примеры портирования на DPC++ программного обеспечения для научного моделирования.

Основными задачами проведения мероприятия являлись представление актуальных результатов в области математического моделирования сложных процессов и явлений, обсуждение различных аспектов организации суперкомпьютерных вычислений, расширение контактов между специалистами для решения ресурсоемких прикладных задач, обмен опытом научно-образовательной деятельности при подготовке специалистов в области математического моделирования и параллельных вычислений.

Все перечисленные темы нашли отражение в настоящем сборнике тезисов докладов и коротких статей, представленных на конференцию (публикуются частично в авторской редакции).

MODELLING STRUCTURAL BREAKS IN STOCK PRICE TIME SERIES USING STOCHASTIC DIFFERENTIAL EQUATIONS

D. Karzanov

National Research University Higher School of Economics, Moscow

This paper studies the effect of quarterly earnings reports on the stock price. The profitability of the stock is modelled by geometric Brownian diffusion and the Constant Elasticity of Variance model. We fit several variations of stochastic differential equations to the pre-and after-report period using the Maximum Likelihood Estimation and Grid Search of parameters method. By examining the change in the model parameters after reports' publication, the study reveals that the reports have enough evidence to be a structural breakpoint, meaning that all the forecast models exploited are not applicable for forecasting and should be refitted shortly.

List of keywords: stock market, earnings reports, financial time series, structural breaks, stochastic differential equations.

1. Introduction

The paper aims to consider the publication of quarterly earnings reports as a point of structural change in the stock price time series. A quarterly earnings report is a filing released by public firms to report their performance. They consist of a balance sheet, cash-flow statement, and income statement. By studying reports, investors can assess the financial health of the firm and decide if it deserves their investment or not.

We discuss a way of describing the price time series not by a parametric distribution but by a stochastic differential equation (SDE). It will allow us to make a mathematical formulation through a variational statement to reveal when the parameters producing the series move from one principal component to another principal component. So, when the nature of the series changes (this is not a smooth change), it is called a structural break.

If we succeeded in writing the stock price (or profit) in the form of a differential equation, then we would add more value to the effort that many econometricians had made in the works dedicated to structural break identification using statistical tests. SDEs would move us towards a more correct, mathematically formulated problem. Many have done various empirical studies and now we should add a mathematical description of the problem.

2. Data

First things first, we need to say a few words about the data that we will study, as well as mention its sources. We collect the information about the companies that reported on the given date using the *yahoo_earnings_calendar* module in *Python*. The output contains the most important information after the report in tabular form. The companies are obliged to report while the market is closed. It is important to understand that a firm may provide the report before market opening or after market closure (e.g. before 09:30 or after 16:00 for NASDAQ). Therefore, if a firm publishes a report after market closure, we add one day to the report day.

We do not wish to confuse a report's effect on a ticker with an effect after weekends when the stock market had two days off. Many tickers have a tendency to soar or plunge on Mondays and then stabilize. Therefore, we exclude the tickers that were reported on Monday. Also, we want the market to be open after the report for some continuous period (for at least two working days), so we do not consider Friday's reports as well.

As soon as we collect the tickers that reported in April 2021, we are ready to move to the price collection. To download the prices from the target period we use different APIs such as *yfinance* from yahoo finance and *IEX*. We request the prices for one week before and after the report with a 5-minute interval.

3. Modelling

3.1 Geometric Brownian Diffusion

To begin with, we add a mathematical description of the problem. Usually, financial analysts and quant-researchers apply stochastic differential equations to describe the profitability of a stock. Our base is a diffusion process, namely geometric Brownian motion from Black&Scholes model:

$$\frac{dS_t}{S_t} = \mu dt + \sigma dW_t$$

where S_t is the stock price, μdt is the trend component, σdW_t is the risk component.

If we manage to estimate these two parameters using the data before and after the report release, we can compare quantitatively the change caused by a structural break.

Since the equation has a solution, we can use Maximum Likelihood Estimators (MLE) to find the estimates. We fit the model to a week before and after the report (left and right further on) data, and compare the values. A similar problem was discussed by Jakob Croghan (2017), where the GBM estimators for oil price were calculated using the following formulas:

$$\bar{X} = \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} log\left(\frac{X_t}{X_{t-1}}\right) \qquad \hat{\mu} = \bar{X} + \frac{\hat{\sigma}^2}{2}$$

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{t=1}^{n}\left(log\left(\frac{X_t}{X_{t-1}}\right) - \bar{X}\right)^2}$$

given that X_t is oil price at time t. After fitting this model to two subsets and comparing the estimates, we obtain table 1. An example of a fitted curve is shown in figure 1.

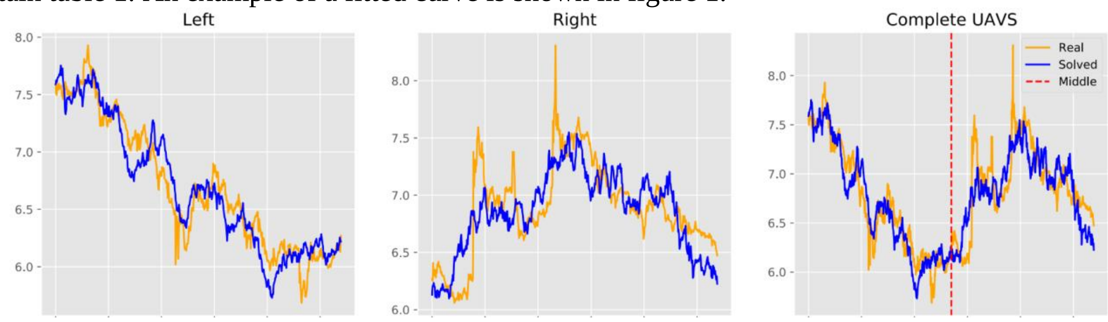


Fig. 1. MLE SDE fitted to UAVS prices. UAVS - AgEagle Aerial Systems Stock, report date: 2021-03-21. A red dashed line - report publication

Table 2. Numeric results from MLE for 20 tickers. The figures show the percentage change and the right-to-left ratio of the parameters for μ and σ

ticker	mu change %	mu ratio r/l	sigma change %	sigma ratio r/l	ticker	mu change %	mu ratio r/l	sigma change %	sigma ratio r/l
AIKI	-339.96	-2.40	-36.32	+0.64	WAFU	-121.22	-0.21	-75.55	+0.24
INPX	+16.72	+1.17	-24.58	+0.75	GBOX	+16.82	+1.17	+34.85	+1.35
AACG	+18,579.93	+186.80	-36.46	+0.64	HITIF	-993.72	-8.94	+7.49	+1.07
SILV	-170.23	-0.70	+4.17	+1.04	PRPO	+538.48	+6.38	-9.81	+0.90
GTEC	+414.21	+5.14	+0.81	+1.01	NEXI	-1,209,087.14	-12,089.87	+2.27	+1.02
TRTC	+134.93	+2.35	+5.91	+1.06	VISL	-22.82	+0.77	-24.51	+0.75
SPRT	-91.60	+0.08	-86.49	+0.14	RXMD	-168.20	-0.68	+19.82	+1.20
MMEDF	-205.15	-1.05	-6.50	+0.93	CWCO	+25.87	+1.26	-9.90	+0.90
UAVS	-140.74	-0.41	+28.90	+1.29	MLSS	+30.38	+1.30	-10.01	+0.90
ESGC	-64.26	+0.36	-34.42	+0.66	PLNHF	-90.02	+0.10	-22.38	+0.78

Table 3. Numeric results using CEV model with jump-diffusion modification

ticker	mu change %	mu ratio r/l	sigma change %	sigma ratio r/l	jump %	gamma change %	gamma ratio r/l
AIKI	+221.41	+3.21	-88.55	+0.11	+0.00	+36.36	+1.36
INPX	-37.90	+0.62	-24.58	+0.75	+0.00	+57.14	+1.57
AACG	+30.41	+1.30	-94.24	+0.06	+0.00	+400.00	+5.00
SILV	-187.40	-0.87	-83.32	+0.17	+0.00	+1,200.00	+13.00
GTEC	+160.87	+2.61	-60.77	+0.39	+10.00	+133.33	+2.33
TRTC	+173.90	+2.74	+1,068.47	+11.68	+10.00	+1,900.00	+20.00
SPRT	-79.86	+0.20	-95.40	+0.05	-10.00	+266.67	+3.67
MMEDF	-163.17	-0.63	+419.90	+5.20	+10.00	-65.00	+0.35
UAVS	-134.12	-0.34	-44.25	+0.56	+0.00	+0.00	+1.00
ESGC	-60.83	+0.39	-77.79	+0.22	+0.00	+400.00	+5.00
WAFU	-139.48	-0.39	-59.76	+0.40	+10.00	-18.18	+0.82
GBOX	-6.04	+0.94	+101.81	+2.02	-10.00	+0.00	+1.00
HITIF	-25,119.13	-250.19	-67.03	+0.33	+0.00	-76.67	+0.23
PRPO	+377.22	+4.77	-31.82	+0.68	+0.00	+28.57	+1.29
NEXI	-178.04	-0.78	+27.24	+1.27	-10.00	+57.14	+1.57
VISL	-44.08	+0.56	+113.78	+2.14	-10.00	-85.71	+0.14
RXMD	-412.55	-3.13	+819.99	+9.20	+0.00	+53.85	+1.54
CWCO	-11.48	+0.89	-77.21	+0.23	+0.00	+600.00	+7.00
MLSS	+52.73	+1.53	+72.07	+1.72	+0.00	-35.00	+0.65
PLNHF	-111.89	-0.12	+178.17	+2.78	-10.00	-85.71	+0.14
RCON	-248.90	-1.49	-40.40	+0.60	+0.00	+40.00	+1.40

3.2 Constant Elasticity of Variance

Another model which can be applied in our settings is CEV formulated by Cox, J (1975) as

$$\mathrm{d}S_t = \mu S_t \mathrm{d}t + \sigma S_t^{\gamma} \mathrm{d}W_t$$

Parameter γ controls the volatility. $\gamma > 0$ means that in the given markets volatility rises when the price of the stock rises. Unfortunately, the equation does not have a closed-form solution, so we need to use another way of estimating its parameters. A computationally expensive but effective method is Grid Search which considers every combination of parameters and finds which set results in the lowest error. As a minimization criterion, we tried different metrics such as Mean Absolute Percentage Error and Kullback–Leibler divergence (relative entropy). However, the most reasonable fit was demonstrated by Mean Squared Error, which we consequently applied to all models in the summary.

3.3 Grid Search

The main problem with this approach is computational expenses - even for 20 drift values and 30 volatility values, the algorithm has to consider 600 options for one series. Another issue that we encounter is the determination of the grid range for parameters knowing the array of points only. If a search interval does not include the true parameter value, the results will likely be inferior. We propose using the following intervals for trend and volatility. Given that y_i is the stock price at time i and $z_i = y_i - y_{i-1}$:

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=2}^{n}(y_i - y_{i-1}) \qquad [\hat{\mu} - 5 \cdot s.d.(z/n), \hat{\mu} + 5 \cdot s.d.(z/n)]$$

We faced many difficulties while choosing the correct borders for the volatility interval. It appeared to be a more complicated task because the interval is not necessarily symmetric around the point estimate. After all, the volatility cannot be negative, so the interval is $[\hat{\sigma}/10, \hat{\sigma} \cdot 25]$. As a point estimate for σ, we use the estimation of oil price volatility described by Croghan J. (2017):

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}\left(\log\frac{y_t}{y_{t-1}} - \bar{y}\right)^2} \qquad \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}\log\frac{y_t}{y_{t-1}}$$

3.4 Jump Diffusion

After analysing the indices, we noticed that the series demonstrated a leap or a jump which is not considered in the initial model. The quants usually add a jump component to the theoretical equation, which is modelled using Poisonous-like distributions:

$$\frac{dS_t}{S_t} = \mu_t dt + \sigma dW_t + (Y_t - 1)dN_t$$

In our implementation, we use the discussed CEV model, but consider three different initial values for the equation. For the right model, the last point of the left subsample is taken as the initial value scaled by jump parameter, $Y_t, \in \{.9, 1., 1.1\}$. The results from the grid search algorithm are presented in table 2.

4. Results discussion

As can be clearly seen, in both models parameters experience a notable change after report release. Many tickers halved or doubled the trend component, and some even changed the direction of the drift. Additionally, some of the tickers experienced a notable change in volatility after the report release. The jump component appeared to be relevant in several cases meaning that the prices indeed experienced a sharp immediate change after reports' publication. Since the elasticity of the variance parameter happens to change in the breakpoint, the price sensitivity is affected as well.

To conclude, we have empirically verified the effect of quarterly reports on the stock price and acknowledged the presence of a disruptive event in the series. Therefore, time-series models are no longer applicable for forecasting, and classical statistical learning models with cross-sectional data should be used instead.

References

1. Dsouza J., Thathaiah M. (2016), Quarterly Earnings and Stock Prices Reactions, Amity Journal of Finance, 1, 9-35
2. Croghan J., Jackman J., Min J. (2017), Estimation of Geometric Brownian Motion Parameters for Oil Price Analysis, Industrial and Manufacturing Systems Engineering Conference Proceedings and Posters, 193
3. Cox J. (1975), Notes on Option Pricing I: Constant Elasticity of Diffusions, Stanford University
4. Duffy D. (2006), Finite Difference Methods in Financial Engineering: A Partial Differential Equation Approach, ISBN-13: 978-0470858820
5. Muthuramu P., Maheswari T. (2019), Tests for Structural Breaks in Time Series Analysis, Shanlax International Journal of Economics, 7, 66-79

ADAPTIVE EVENT DETECTION FROM SOCIAL MEDIA

A.B. Mussina[1], S.S. Aubakirov[1], P. Trigo[2]

[1]Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
[2]ISEL - Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; GulAA; LASIGE, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Lisbon, Portugal

This paper proposes improvements to the SEDTWik (Segment-based Event Detection from Tweets using Wikipedia) algorithm for event detection. The SEDTWik algorithm is designed to detect events without contextual guidance. The overall SEDTWik detection process excludes the perspective of a topic, or multi-topic, guided (or semi-supervised) event detection approach. As a result some interesting events are not detected as they are weakly relevant in a broader context (e.g., Wikipedia) although acquiring relevance within a conditioned context. Therefore, we identify the need for an adaptive perspective where data is to be analysed against a set of (narrower) topics of interest. In this paper we show that SEDTWik gains expressive power after being extended with multi-topic semi-supervision. We evaluated our proposal using the same corpora (Events2012) as SEDTWik.

Key words: event-detection with multi-topic semi-supervision, SEDTWik, Social Media, dictionary, Events2012.

1. Introduction

Social media has a huge impact on people's daily life. It has become common for people to publish each moment of their life on the Internet. This trend foresees a scenario where everything that is of value for a person in the real world is reflected in the virtual one. Researchers are looking for benefits derived from analysing the data generated daily by people on social networks. One of the analysis processes is named event detection and its goal is to gather the most discussed topics and extract their features.

The analysis process of social media includes deals with continuously growing data. In a previous work we have already addressed and presented our proposal for a data crawling and pre-processing system [1]. In this work, we extend the previous one by proceeding with data analysis for event detection by improving the SEDTWik (Segment-based Event Detection from Tweets using Wikipedia) [2] algorithm. The SEDTWik is a state-of-the-art algorithm based on the Twevent previous technique [3].

The SEDTWik algorithm uses Wikipedia as its base input and therefore words and phrases describing events are taken in accordance with the titles from Wikipedia. We have a different perspective as we assume that event detection should contemplate the notion of relevance that is assigned by users according to their topic of interest. For example, it would be convenient for various TV awards to follow the opinion of the public on social networks in the context of their activities without other events noise. Given this motivation, we propose an extension of the algorithm to replace the use of Wikipedia by the inclusion of multiple topics (multi-topic) where each topic is represented by a dictionary-like structure. Although we have not yet fully obliterated the Wikipedia usage, it has been replaced in the major places. Those major places are tweet segmentation and segment bursty extraction. Segments extracted according to Wikipedia titles. The bursty of a segments, calculated via text probability derived from Wikipedia.

Twitter is one of the biggest online social media. It is usual to find researches about Event Detection based on data from Twitter [2-5]. Furthermore, it has advanced developer APIs available through developer account. Using APIs we crawled tweets and analysed them. The evaluation of our proposal uses the well-known corpora with labelled events, Events2012, that consists of tweets from 10.10.2012 to 07.11.2012 [4]. The results obtained indicate that the use of topic dictionaries improve event detection in the category under consideration.

2. Related work

During our research we favoured the articles that have publicly available programming code [6].

One of the idea is to find "explicit event descriptors" by answering questions. For example, from the journalist's practice it could be taken 5Ws with 1H: What? Who? Where? When? Why? and How? [7]. Questions also could be almost natural [8]. Since OSN messages usually are short it is hard to answer all questions. It is more likely to use such algorithms on complete news articles.

In another work, the authors draw attention to multiple events extraction from a single sentence [9]. The fact that the work uses such small texts as sentences suggests that it can be used on data from Online Social Networks (OSN). Nevertheless, the code was difficult to reproduce as we were not able to get it up and executing. Also the dataset ACE 2005 is it not free which makes it too hard to explore.

Our vision of an event emerging in a social media (network) is that it is likely to be a burst of messages related to a certain topic, time and place. An article close to our vision detects an event from the identification of segments taken from tweets and proposes the SEDTWik algorithm that the authors have made publicly available [2]. The SEDTWik core idea is that an N-gram from a tweet text becomes a segment if it is in the Wikipedia Titles Dataset [10]. The most discussed segments are called bursty segments, but segment frequency is not the only metric and the process also takes into account the user who posted the text, the hashtags and the presence of the user mention. This work was accurately written with explanations. The SEDTWik algorithm reveals acceptable results when compared with previous Twevent work.

3. Methodology

In this section we describe what was changed in SEDTWik and what was left intact. At first we present the SEDTWik overall workflow and then we formulate our SEDTWik extension.

The SEDTWik workflow goes through the following processes: a) tweet segmentation, b) bursty segment extraction, and c) bursty segment clustering. The Wikipedia data has a role in all three of those processes. The Wikipedia Titles Dataset is used in tweet segmentation because if a word or phrase from a tweet exists in the title dataset then it is considered to be a segment. The bursty segment calculation uses the expected probability that the segment will appear in the tweet. The expected probability is calculated resorting to Events2012 corpora, which is also used for SEDTWik evaluation. The clustering process uses the Wikipedia Keyphraseness value which is a probability that a word or phrase will appear in the article as an anchor text [11]. The anchor is an HTML tag, means the text has hyperlinks to another article.

The first SEDTWik test on the currently available tweets from the Events2012 corpora resulted in 1 to 5 number of events of different categories during each day from 10/10/2012 to 07/11/2012. The segmentation of the tweet is based on the Wikipedia Titles Dataset, therefore segment variations are limited to titles only. Then SEDTWik calculates the segment bursty using the probability taken from the Events2012 corpora. From the above statements, we can conclude that the variety of detected events depends on the initially identified segments and their expected probability which are highly related to the broad data provided by the Wikipedia.

We replaced Wikipedia titles and segment probability, respectively, with topic dictionaries and thematicity value. The thematicity value is a coefficient that denotes the degree of belonging of a word to the topic dictionary; the higher the value, the more the word relates to the dictionary.

The next sections describe topic dictionaries extraction and new input data (instead of Wikipedia) in SEDTWik.

3.1. Topic dictionary

In the Events2012 dataset used notation category for events, meaning that events are combined by certain topic. In this paper we use 'category' notation towards corpora text and 'topic' notation towards dictionary. So certain topic-dictionary refers to certain event category tweets.

In our previous work, we had already performed the extraction of a topic dictionary of words related to the scenario of emergency situations [12]. The idea is that words specific to a certain category of events may appear in texts of other categories, but most often they will occur in their own category. The methodology for such dictionary extraction [13] needs two corpora: a) the target corpora that contains text about the topic of interest and b) the common corpora that contains mixed topics. In this research stage we only use unigrams in our dictionaries because our current version of the architecture for event detection only calculates unigram frequency.

As an example, let's consider that we want to build a topic dictionary for "Sports". The target corpora should consist of text about sport only. The common corpora should contain text of other topics. If the word 'cycling' appears in both corpora and if the frequency in the target corpora is higher than in the common corpora, then we may conclude that 'cycling' is a word about "Sports".

The process of thematicity calculation and including word to the topic dictionary is based on the expression 1. The M_w is the thematicity coefficient and it is calculated only if the word w occurs in both target and common corpora. The N_w^{target} is the frequency of word w in the target corpora. The N_w^{common} is the frequency of word w in the common corpora. From the expression 1 we know that if the word w occurs more often in the target corpora, then M_w is a positive value. On the other case M_w will be negative value representing that word w may occur in the target corpora, but it is considered more as a common word.

$$M_w = log\frac{N_w^{target}}{N_w^{common}} \tag{1}$$

3.2. SEDTWik with topic dictionaries

The simplified form of the SEDTWik algorithm could be presented as shown in a figure 1. We consider SEDTWik as a "black box" with its own formulation for bursty extraction and clustering. The overall process accepts two inputs:

a) a data stream from OSNs (Online Social Networks) such as Twitter and Telegram

b) the Wikipedia Tile Dataset and the Wikipedia segment probability.

The final version of the SEDTWik with topic dictionaries is presented in the figure 2. We replaced the Wikipedia input with the topic dictionaries. As a result segments will be focused on the selected topic and SEDTWik will find the most relevant events according to the available topics of interest.

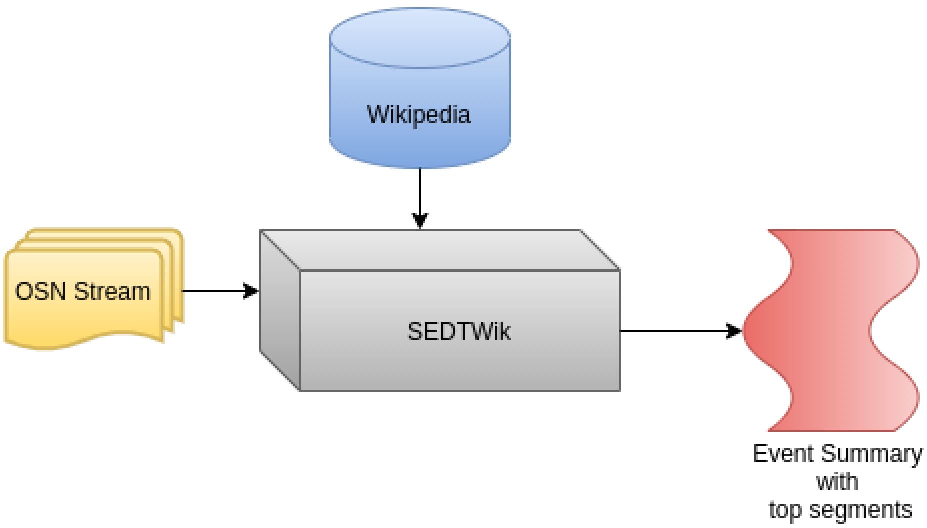


Figure 1. Simplified SEDTWik

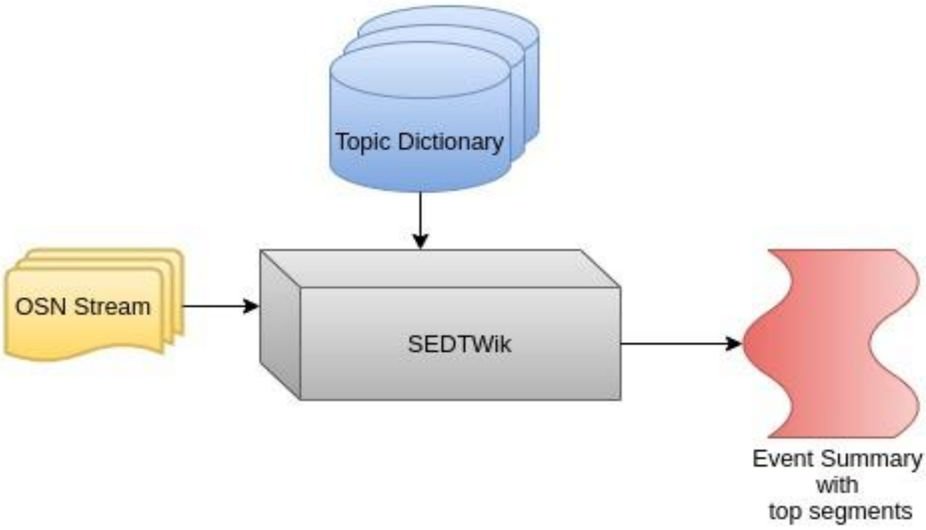


Figure 2. SEDTWik with Topic Dictionaries

4. Results

The tests were conducted using Events2012 corpora which consists of tweet ids, event code and 8 event categories. Each tweet is labelled as one of 506 events and each event has a corresponding category. For example, events connected to the hostilities and terrorist attacks combined to the "Armed Conflicts & Attacks" category. The time period of tweets is from 10.10.2012 to 07.11.2012. Since we need a tweet text and other metadata we used the public Twitter API with guest tokens and tweet ids. The test data has 152 952 labelled tweet ids, but only 63 271 tweets are currently available for public API usage. Some tweets were deleted and some tweets belong to private accounts. In this section we present the result of topic dictionary extraction and SEDTWik improvements via topic dictionaries.

4.1. Topic dictionary

Corpora Events2012 has 8 categories of events: "Armed Conflicts & Attacks", "Arts, Culture & Entertainment", "Business & Economy", "Disasters & Accidents", "Law, Politics & Scandals", "Miscellaneous", "Science & Technology", "Sports".

We have extracted topic dictionary for each event according to expression 1. The target corpora is a set of all tweet text from target event. The common corpora is a set of all tweet text from other events. For example, in the table 1 we present the top-5 words from three categories with their thematicity value.

Indeed, words in a dictionary describe the name of the topic dictionary. The higher the thematicity value, the more the word applies to the topic.

Table 1. Top-5 words from topic dictionaries

Armed conflicts & Attacks		**Disaster & Accidents**		**Science & Technology**	
word	**thematicity**	**word**	**thematicity**	**word**	**thematicity**
brahimi	5.236	marathon	5.468	shuttle	5.121
taliban	5.108	surfer	4.920	dragon	4.401
yemen	4.970	katrina	4.753	chemistry	4.098
baghdad	4.812	columbia	4.673	patents	3.951
haram	4.673	taiwan	4.644	roth	3.871

4.2. SEDTWik with topic dictionaries

The SEDTWik algorithm was used as provided by the authors from github [14]. The Wikipedia Titles Dataset and expected segment probability were substituted with our topic dictionaries.

The value of our thematicity concept is not constrained to the probability range (from 0 to 1) so we had to normalize the thematicity values to fit the SEDTWik formulation. We normalized thematicity by the maximum observed value multiplied by 1000. Here we applied the scaling to satisfy the sigmoid function values within SEDTWik formulation. The expected segment probability from Wikipedia has a degree usually of 10^{-8} . However, using a degree of 10^{-3} also resolved our issue with sigmoid function errors.

We checked SEDTWik with topic dictionaries across all categories. Since we have labelled corpora we calculated the accuracy for each category. The accuracy is calculated as a ratio from dividing the number of events of certain category, as determined by the algorithm, by the total number of events in this category for the entire period of time. The accuracy is presented in Figure 3, where along X-axis: 1 – Armed Conflicts & Attacks, 2 – Arts Culture & Entertainment, 3 – Business & Economy, 4 – Disasters & Accidents, 5 – Law Politics & Scandals, 6 – Miscellaneous, 7 – Science & Technology, 8 – Sports.

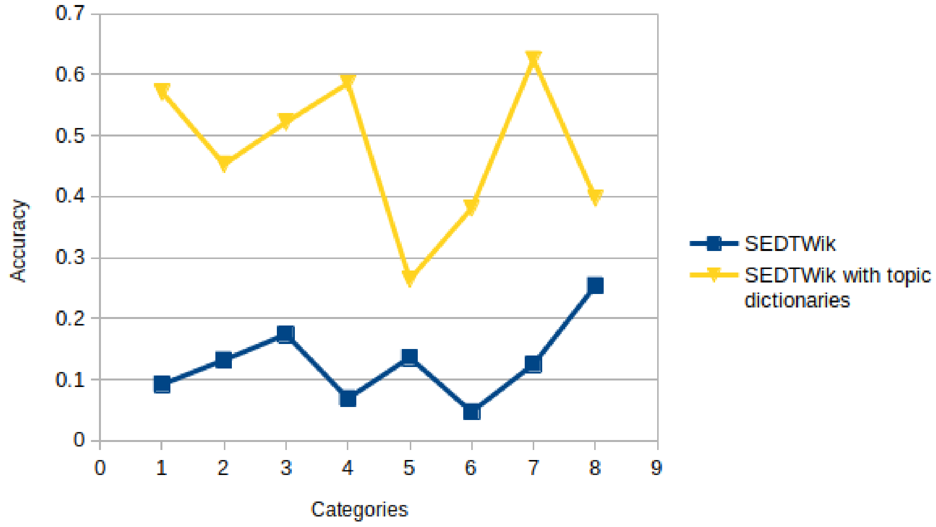


Figure 3. SEDTWik and SEDTWik with topic dictionaries accuracy

In consonance with results it is clear that using dictionary representation of topics of interest we are able to improve event detection from bursty messages.

5. Conclusion

In this paper we analysed the state-of-the-art algorithm, SEDTWik, for event detection. From the idea that people need to detect events in line with some topics of interest (ToI) we proposed to replace the Wikipedia broad and general-purpose data with ToI-focused dictionaries. We were able to improve the accuracy of event detection because valuable events are not missed. However, the clustering process (used in SEDTWik) still resorts to the Wikipedia keyphraseness and newsworthiness. In the future work we intend to follow the process of topic dictionary extraction in line with the SEDTWik approach but completely removing the Wikipedia source. We want our software to be adaptive to a new ToI in real-time with all process being (possibly) executed over streaming data.

References

1. Mussina A.B., Aubakirov S.S., Trigo P. An Architecture for Real-Time Massive Data Extraction from Social Media // In: Balandin D., Barkalov K., Gergel V., Meyerov I. (eds) Mathematical Modeling and Supercomputer Technologies. MMST 2020. Communications in Computer and In-

formation Science, 2021. vol 1413. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-78759-2_11.
2. Morabia, K., Murthy, N.L.B., Malapati, A. and Samant, S. SEDTWik: segmentation-based event detection from tweets using Wikipedia // In Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Student Research Workshop, 2019, June. (pp. 77-85).
3. Li, C., Sun, A. and Datta, A. Twevent: segment-based event detection from tweets // In Proceedings of the 21st ACM international conference on Information and knowledge management, 2012, October. (pp. 155-164).
4. McMinn, A.J., Moshfeghi, Y. and Jose, J.M. Building a large-scale corpus for evaluating event detection on twitter // In Proceedings of the 22nd ACM international conference on Information & Knowledge Management, 2013, October. (pp. 409-418).
5. Bekoulis, G., Deleu, J., Demeester, T. and Develder, C. Sub-event detection from twitter streams as a sequence labeling problem, 2019. arXiv preprint arXiv:1903.05396.
6. Papers with code. URL: https://paperswithcode.com/ (date of access: 2021-08-25).
7. Hamborg, F., Breitinger, C. and Gipp, B. Giveme5w1h: A universal system for extracting main events from news articles, 2019. arXiv preprint arXiv:1909.02766.
8. Du, X. and Cardie, C. Event extraction by answering (almost) natural questions, 2020. arXiv preprint arXiv:2004.13625.
9. Liu, X., Luo, Z. and Huang, H. Jointly multiple events extraction via attention-based graph information aggregation, 2018. arXiv preprint arXiv:1809.09078.
10. Wikipedia. Wikipedia Titles Dataset. URL: http://dumps.wikimedia.org/enwiki/latest/enwiki-latest-all-titles-in-ns0.gz (date of access: 2021-08-26).
11. Sun A. Wikipedia Keyphraseness. URL: https://personal.ntu.edu.sg/axsun/datasets.html (date of access: 2021-08-26).
12. Mussina, A. and Aubakirov, S. Dictionary extraction based on statistical data // Вестник КазНУ. Серия математика, механика, информатика, 2017. 94(2), pp.72-82.
13. Iain. Heavy Metal and Natural Language Processing - Part 1. URL: http://www.degeneratestate.org/posts/2016/Apr/20/heavy-metal-and-natural-language-processing-part-1/. (date of access: 2016-09-20).
14. Github. SEDTWik-Event-Detection-from-Tweets. URL: https://github.com/kevalmorabia97/SEDTWik-Event-Detection-from-Tweets (date of access: 2021-08-26).

ARCHITECTURE IMPLEMENTATION OF A DISTRIBUTED COMPUTING SYSTEM BASED ON GLOBAL DATA STORAGE TECHNOLOGY

Stefan Popov, Sergei Vostokin

Samara National Research University

This article states an analysis of the architecture of a distributed computing system based on the technology of global data storage. The system of distributed computing and a description of its architecture are considered. Also, the problem of data storage is formulated and the need to use technologies of the global distributed data storage are presented. The usage of the IPFS global data storage technology is discussed. The advantages and disadvantages of using the described approaches are given.

Keywords: distributed computing, global data storage, InterPlanetary File System.

1. Introduction

At present, scientific realities are such that researchers need to have access to a huge amount of computing resources in order to successfully conduct any research. For example, such a situation arises when studying the processes of nonlinear dynamics and chaotic behavior of complex systems based on numerical methods [1]. This and similar tasks cannot be performed using the computing power of one resource - in this case, the usage of distributed computing is required, and therefore the authors decided to develop such a system [2]. The main advantage of distributed computing is the reduction in computational experiment time. However, this approach has a significant drawback - storing data on a centralized server and its constant transferring from system resources limits the possible acceleration.

A description of the architecture of the distributed computing system using the IPFS technology as the global distributed data storage will be presented. Also, the advantages and disadvantages of using the described approaches are given.

2. System architecture description

The system consists of three main components: (a) a control component, (b) an intermediate component, and (c) a computational component (Fig. 1).

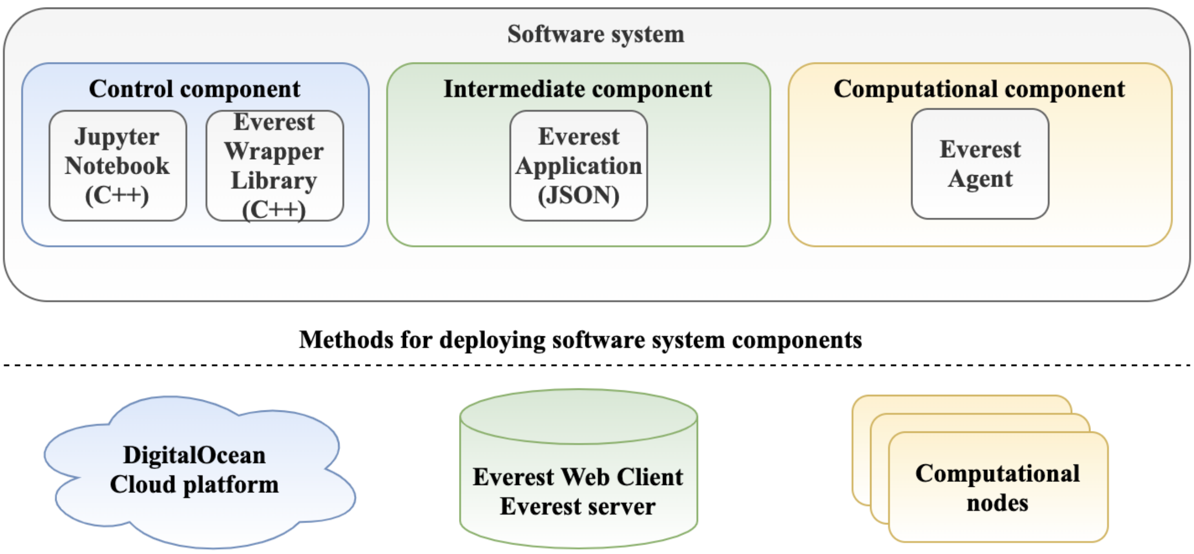


Fig. 1. Software architecture

The control component is used to create parallel tasks. It consists of two parts: the first part is a Jupyter Notebook that generates parallel tasks; the second part is a library that allows users to interact with the Everest [3] platform server using the REST protocol. Both components of the system are implemented using the C ++ programming language. One of the main features of the implementation of parallelism of tasks [4] is the ability to dynamically generate new tasks based on the results of completed tasks. The management component is deployed along with the JupyterHub server [5] on the DigitalOcean cloud platform [6].

The intermediate component is a special program that comes preinstalled on the Everest server. The Everest application defines how to handle task parameters that are automatically passed from the control component to the Everest server to invoke the task on the compute component.

The Everest resource agent is a computational component.

During analyzing the problems with decentralized data storage, it was decided to consider possible collaborations with the IPFS technology [7].

3. Usage of IPFS technology

IPFS stands for Interplanetary File System. It is a peer-to-peer distributed file system that makes the Internet faster, safer, and more open. It can be used on each of the computing components, thus representing a decentralized data storage (Fig. 2).

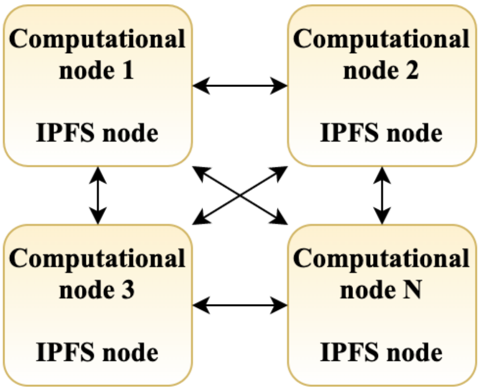


Fig. 2. Decentralized data storage

The main advantages of this approach are full control over the operation of the distributed file system, as well as the absence of the need to deploy additional nodes. The potential drawback is connections between the computing components which may affect the network throughput, since they are also the nodes of the global data storage. The complexity of deploying such nodes also increases.

4. Conclusion

During the research, an analysis of the architecture of a distributed computing system based on the technology of a global data storage was presented. A distributed computing system and a description of its architecture were considered. The problem of data storage was also posed and the need for the use of global data storage technologies was discussed. The use of IPFS technology was considered. Finally, the advantages and disadvantages of using the described approaches were presented. Since no critical shortcomings were identified during the process of analyzing the proposed architecture, in the future it is planned to implement this approach in practice, as well as test it within the example of calculating orthogonal pairs of diagonal Latin squares [8].

References

1. Popov S.N., Vostokin S.V., Doroshin A.V. Dynamical systems analysis using many-task interactive cloud computing / Journal of Physics: Conference Series, Volume 1694, Information Tech-

nology, Telecommunications and Control Systems (ITTCS), 2020 17-18 December 2020 Innopolis, Russia.
2. Vostokin, S.V., Sukhoroslov O.V., Bobyleva I.V., Popov S.N. Implementing computations with dynamic task dependencies in the desktop grid environment using Everest and Templet Web / CEUR Workshop Proceedings, Volume 2267, pp. 271-275. CEUR-WS, Dubna (2018).
3. Sukhoroslov O.V., Volkov S., Afanasiev A.A. Web-Based Platform for Publication and Distributed Execution of Computing Applications / 14th International Symposium on Parallel and Distributed Computing (ISPDC), pp. 175-184. IEEE (2015).
4. Thoman, P., et al. A taxonomy of task-based parallel programming technologies for high-performance computing / The Journal of Supercomputing, vol. 74, No. 4, pp. 1422-1434. Springer (2018).
5. Zonca A., Sinkovits R. Deploying Jupyter Notebooks at scale on XSEDE resources for Science Gateways and workshops / PEARC ’18, pp. 1-2, Pittsburgh, PA, USA (2018).
6. Xiaomin W., Xin Z., Tianhe C. Data Processing and Application of Digital Ocean / 2008 Congress on Image and Signal Processing, Sanya, Hainan, China (2008).
7. Steichen M., Fiz B., Norvill R., Shbair W., State R. Blockchain-Based, Decentralized Access Control for IPFS / 2018 IEEE International Conference on Internet of Things (iThings) and IEEE Green Computing and Communications (GreenCom) and IEEE Cyber, Physical and Social Computing (CPSCom) and IEEE Smart Data (SmartData), Halifax, NS, Canada, 2018, pp. 1499-1506.
8. Du B. The existence of orthogonal diagonal Latin squares with subsquares / Discrete Mathematics, vol. 148, issues 1–3, pp. 37-48, 1996.

РЕШЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ МЕТОДАМИ ЧАСТИЧНЫХ ОБЛАСТЕЙ И КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Г.В. Абгарян

Казанский (Приволжский) федеральный университет

В наиболее общей постановке задача дифракции электромагнитной волы состоит в нахождении решений уравнений Максвелла, удовлетворяющих определенным краевым условиям. Для единственности решения к этим условиям, обычно, добавляются условия излучения Зоммерфельда и условия, учитывающие поведение электромагнитного поля в окрестности острых ребер.

Предположим, что искомое поле не зависит от одной из координат. В этом случае система уравнений Максвелла распадается на две независимые подсистемы, которые дают два типа частных решений. Эти решения называются ТЕ и ТМ поляризованными и удовлетворяют первой и второй краевым задачам для двумерного уравнения Гельмгольца соответственно. Таким образом, граничные задачи и задачи сопряжения для системы уравнений Максвелла сводятся к граничным задачам и задачам сопряжения для уравнения Гельмгольца.

Решение краевой задачи для уравнения Гельмгольца в полуполосе, которая соответствует физической задаче дифракции электромагнитной волны в полубесконечном волноводе с диафрагмой, расположенной перед заглушкой, приводится в работе [2]. Для решения используется метод частичных областей (МЧО) [1].

В этой работе для решения краевой задачи предлагается метод конечных элементов (МКЭ). Для численной реализации метода конечных элементов используется треугольная сетка и метод конформных линейных треугольных элементов. Приводится сравнение решений методами частичных областей и конечных элементов. Показана абсолютная разность решений и хорошая согласованность этих методов.

Литература

1. Миттра, Р. Аналитические методы теории волноводов / Р. Миттра, С. Ли. – Москва: Наука, 1974. – 327.
2. Abgaryan G.V., Pleshchinskii N.B. On Resonant Frequencies in the Diffraction Problems of Electromagnetic Waves by the Diaphragm in a Semi-Infinite Waveguide // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2020. – Vol.41, No.7. – P. 1325 – 1336.
3. Даутов, Р.З. Введение в теорию метода конечных элементов / Р.З. Даутов, М.М. Карчевский. – Казань: Казанский государственный университет, 2004. – 239.

ТЕХНОЛОГИЯ И 3D КОДЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СПЛОШНЫХ СРЕД НА ОСНОВЕ МНОГОСЕТОЧНЫХ АЛГОРИТМОВ И МОДИФИЦИРОВАННОЙ СХЕМЫ ГОДУНОВА[1*]

М.Х. Абузяров, Е.Г. Глазова, А.В. Кочетков, С.В. Крылов, И.А. Модин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Описана технология численного решения трехмерных задач импульсного взаимодействия конструкций и сред на основе эйлерово-лагранжевых многосеточных алгоритмов и модифицированной схемы Годунова. Используется три вида расчетных сеток для каждого тела с явным лагранжевым выделением подвижных свободных и контактных поверхностей. Приводятся результаты численного моделирования процессов удара осколков льда о закрепленную титановую пластину, разгона продуктами детонации деформируемых упругопластических тел различной формы и пробивания стальными ударниками алюминиевой плиты.

Ключевые слова: численное моделирование, схема Годунова, трехмерные процессы, эйлерово-лагранжевы методы, многосеточные алгоритмы, повышенная точность, распад разрыва.

Для моделирования высокоскоростных процессов, как в газожидкостных так и упругопластических средах используется модифицированная схема Годунова повышенной точности, единая как для уравнений Эйлера, так и уравнений Эйлера-Коши, и три типа разностных сеток. Повышение точности схемы достигается только за счет изменения шага “предиктор” оригинальной схемы Годунова. Применяется трехмерное и зависящее от времени решение задачи распада разрыва, обеспечивающее второй порядок аппроксимации по времени и пространству в области гладких решений. Монотонность в области разрывных решений обеспечивается переходом на шаг “предиктор” схемы первого порядка. Это же решение задачи распада разрыва используется на контакте “газ-жидкость” – “твердое деформируемое тело”. Первый тип используемых сеток - это Лагранжева поверхностная сетка в виде непрерывного набора треугольников (файл STL), которая применяется как для задания начальной геометрии объекта, так и для его сопровождения в процессе расчета, и два вида объемных трехмерных сеток. Это базовая декартова фиксированная сетка для каждого объекта, и вспомогательные подвижные локальные эйлерово-лагранжевы сетки, связанные с каждым треугольником поверхностной сетки. Количество треугольников поверхностной сетки и ячеек базовой декартовой сетки в процессе счета может меняться. Контактные алгоритмы строятся на основе точных решений задачи распада произвольного разрыва, как между средами с шаровым тензором, так и с полным тензором напряжений. В областях, удаленных от границ, интегрирование происходит на неподвижной декартовой сетке, а в областях, примыкающих к границам, на подвижных локальных сетках. Обмен параметрами между сетками производится с помощью операций интерполирования с весовыми коэффициентами. Для описания необратимого деформирования элементов конструкций используется теория пластического течения с изотропным упрочнением и зависимостью параметров от скорости деформирования и накопления повреждений. Численный алгоритм строится на основе принципа расщепления для упругопластических течений. Оригинальность предлагаемой технологии состоит в создании расчетной модели (расчетных трехмерных сеток каждого объекта) на основе поверхностных сеток рассчитываемых объектов, заданных в виде наборов плоских треугольников (STL файлов) , полученных конструкторами с помощью инженерных CAD систем проектирования (КОМПАС, SOLIDWORK и др.). На основе этих поверхностей автоматически строятся регулярные трехмерные сетки внутри расчетных областей и локальные трехмерные сетки для каждого треугольника поверхности. Такая технология является

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 19-08-00320).

новой по сравнению с используемыми технологиями в известных вычислительных системах (ЛОГОС, ANSYS, LS-DYNA, ALE3D, EUROPLEXUS, DYTRAN и др.), существенно сокращает этап подготовки трехмерной расчетной модели и позволяет эффективно выделять и отслеживать свободные и контактные поверхности при больших перемещениях и деформациях. Подробное описание методики приведено в [1].

Рассматриваются трехмерные процессы удара ледяных градин цилиндрической и сферической формы массой 13 грамм о защемленную слева (см. рис.1) титановую пластину размерами 15x5x0.5 см с использованием различных моделей деформирования льда.

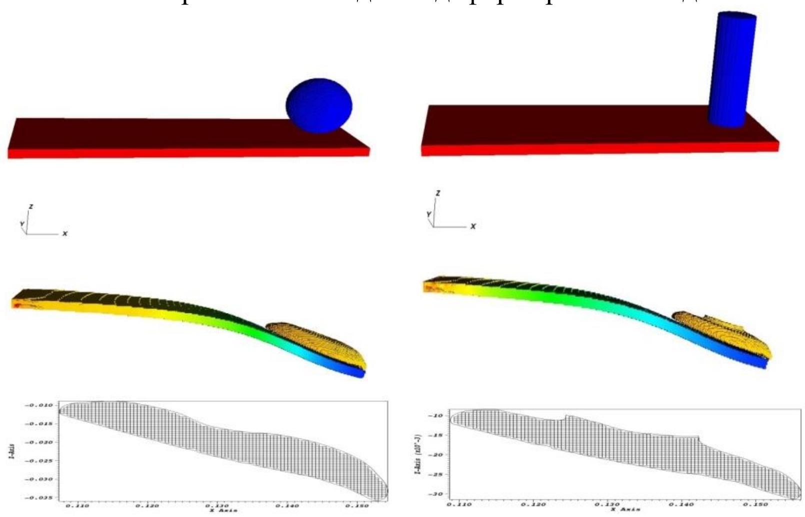


Рис. 1. Удар шаром слева и цилиндром справа

В процессе удара градины и пластина претерпевают значительные перемещения и деформации, происходит разрушение градин. На рис.1 приведены также положения объектов и расчетная сетка в продольной плоскости симметрии по шару и цилиндру на момент 800 мкс. На рис.2 приведены скорости пластины от времени на оси симметрии шара, отмечено красным и цилиндра - зеленым, в левой части от начала взаимодействия до 120 мкс, в правой соответственно до 800 мкс. Различие в начальный момент связано с большей начальной площадью взаимодействия для цилиндрического объекта.

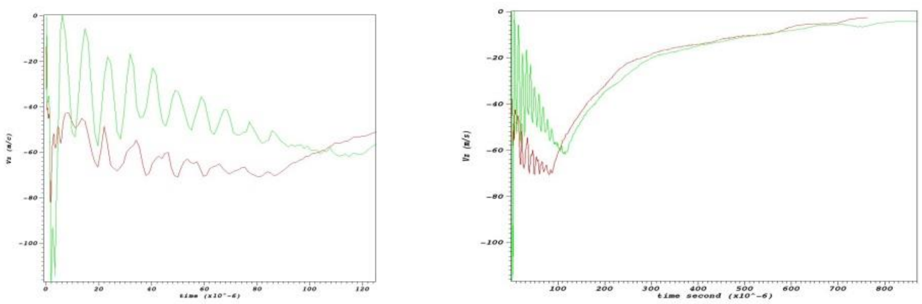


Рис. 2. Скорости пластины на оси симметрии от времени

На рис. 3 показана постановка задачи разгона твердых деформируемых тел продуктами детонации твердого заряда взрывчатого вещества - заряд ТГ36/64 сферической формы, инициируется в центре, три примыкающих к заряду стальных кубика и соответствующие сетки. Сечение проходит через центр заряда и центры кубиков.

На рис.4 приведено распределение плотности на момент окончания деформирования кубиков под действием детонационной волны и соответственно положение и формы кубиков на этот и начальный момент времени. Кубики сильно и необратимо деформируются, потоки продуктов детонации движутся существенно быстрее, формируются газовые струи, обтекающие кубики.

На рис.5 приведена скорость на поверхности кубика, разгоняемого в вертикальном направлении, нижняя кривая соответствует центру верхней (дальней от заряда) поверхности, соответственно верхняя кривая центру нижней (ближней к заряду) поверхности кубика.

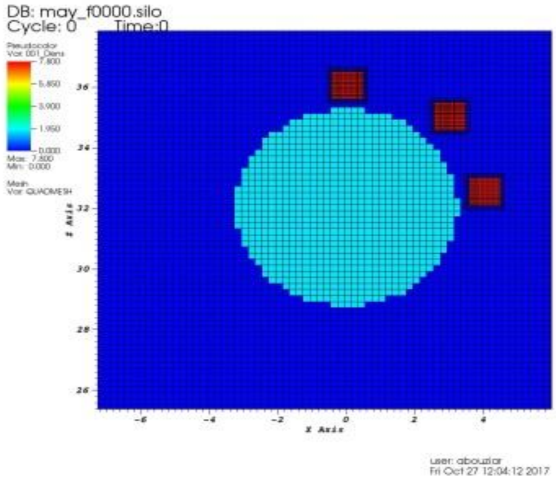


Рис. 3. Заряд ВВ и начальное положение осколков

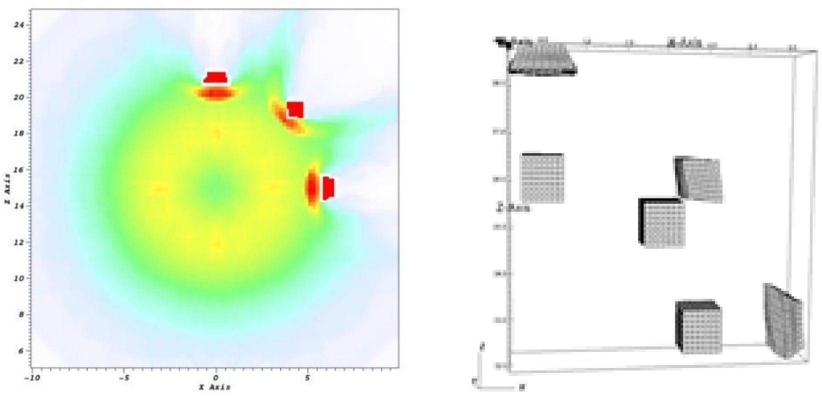


Рис. 4. Положение осколков на момент окончания деформирования

На рис.6 приведены зависимости скоростей центров масс от времени соответственно для цилиндра, тетраэдра и кубика с одинаковыми массами, разгоняемых вдоль вертикальной оси. Очевидна существенная зависимость скорости от геометрии разгоняемых тел.

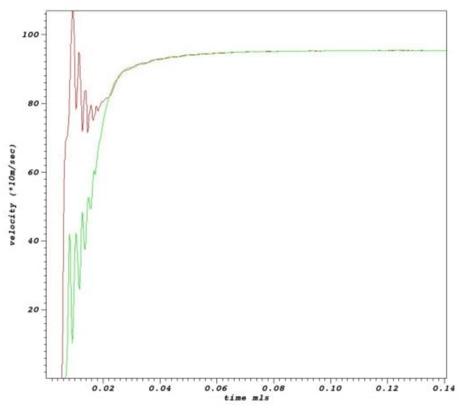


Рис. 5. Скорости дна и верха кубика

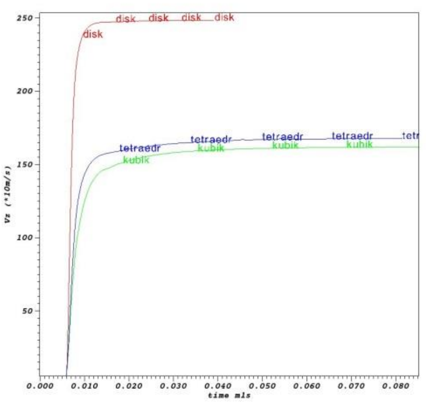


Рис. 6. Скорости центров масс

На рис. 7 изображены остаточные формы этих тел. Моделирование позволило выявить закономерности процесса разгона при инициации детонации в центре сферического заряда, в частности, скорость разгоняемых тел существенно меньше скорости истечения продуктов детонации; длительность времени разгона тела сопоставима с временем выхода детонационной волны на поверхность контакта, взаимодействие с детонационной волной может вызывать в упругопластическом теле напряжения, значительно превосходящие предел текучести и существенно его деформировать в процессе контакта, процесс деформирования очень кратковременен и фактически продуктами детонации может разгоняться тело, форма которого значительно изменяется и отличается от начальной.

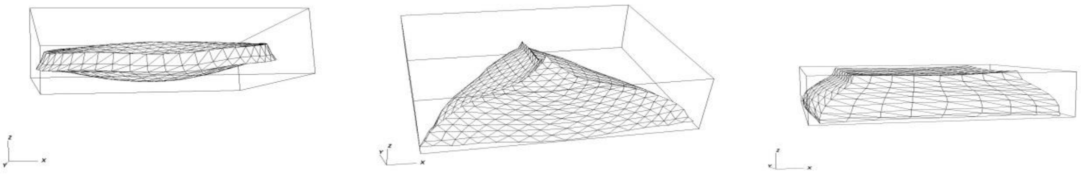


Рис. 7. Остаточные формы, цилиндр, тетраэдр, куб, разгон по оси Z

На рис.8 приведена постановка задачи пробивания стальным ударником, скорость 863 м/с, алюминиевой плиты [2] вертикально и под углом 30 градусов, изображены поверхности ударника и мишени (STL файлы). В эксперименте плита 55x55x2.63 см, в расчетах плита 10x10 x2.63см со свободными границами, опирается на жесткую стенку (рис.9) шириной 1см. На рис.10 сетки на момент 86 мкс, вертикальный удара. На рис. 11а и 11б сетки на момент 116 мкс, изображенные под разными углами, удар под углом 30 градусов.

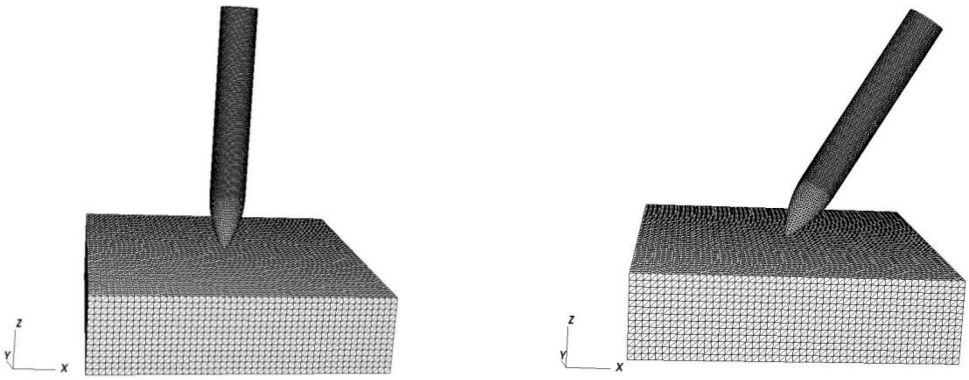


Рис. 8. Стальной ударник, 860 м/с, нормально и под углом 30 градусов

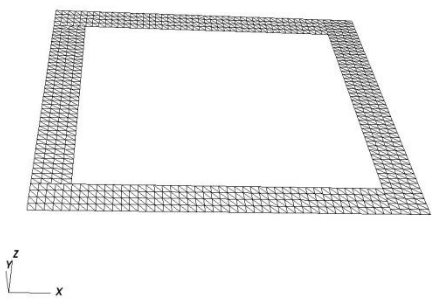


Рис. 9. Жесткая опора алюминиевой плиты

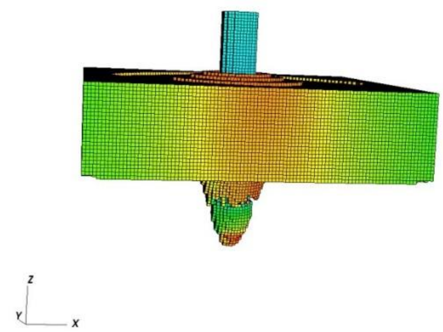
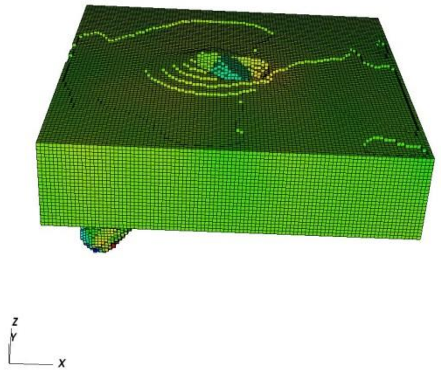


Рис. 10. Сетки, пробитие, 86 мкс



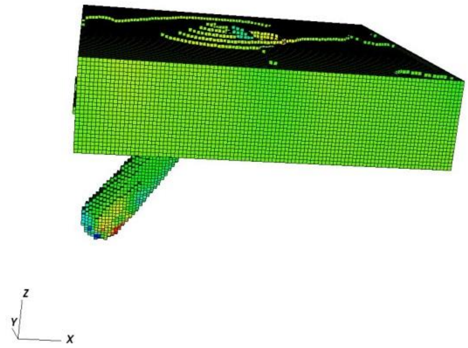


Рис. 11а. Сетки, пробитие, 116 мкс

Рис. 11б. Сетки, пробитие, 116 мкс

Литература

1. Абузяров М.Х., Глазова Е.Г., Кочетков А.В., Крылов С.В. Численная методика решения трехмерных задач взаимодействия высокоскоростных газовых струй с упругопластическими преградами. //ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. – 2021. – Вып.4. – С.24-40.
2. Piekutowski AJ, Forrestal MJ, Poormon KL, Warren TL. Perforation of aluminum plates with ogive nose steel rods at normal and oblique impacts. Int J Impact Eng 1996;7–8:877.

СТРУКТУРНОЕ ОПИСАНИЕ КЛАССОВ ДВУДОЛЬНЫХ ГРАФОВ, ЗАМКНУТЫХ ОТНОСИТЕЛЬНО СИММЕТРИЧЕСКОЙ РАЗНОСТИ ГРАФОВ

В.Е.Алексеев, ***Д.В. Захарова***

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Введение

В работе продолжается исследование линейных пространств графов, начатое в работах [1,2], т.е. множеств графов, замкнутых относительно сложения по модулю 2. В [2] были описаны все линейные пространства графов, замкнутые относительно изоморфизма (СЛПГ). Здесь аналогичный результат получен для двудольных графов.

Под двудольным графом понимается граф, множество вершин которого уже разбито на две доли, т.е. *двудольный граф* – это тройка $G = (A, B, E)$, где $E \subseteq A \times B$. Двудольные графы $G_1 = (A, B, E_1)$ и $G_2 = (A', B', E_2)$ *двудольно изоморфны*, если существуют биекции $f_1: A \to A'$, $f_2: B \to B'$ такие, что $(x_1, x_2) \in E_1$ тогда и только тогда, когда $(f_1(x_1), f_2(x_2)) \in E_2$. Далее под изоморфизмом понимается двудольный изоморфизм.

Далее рассматриваются двудольные графы, у которых одна доля является подмножеством множества $A = \{a_1, a_2, \dots, a_l\}$, а другая – подмножеством множества $B = \{b_1, b_2, \dots, b_r\}$. Множество всех таких графов обозначим через $\Gamma(A, B)$. Предполагаем, что $l \geq 3$, $r \geq 3$. Ребро (a_i, b_j) будем кратко записывать как (i, j), полагая, что первый элемент пары всегда есть индекс элемента из множества A, второй – из B. Будем использовать обозначения $O_{l,r} = (A, B, \emptyset)$ и $K_{p,q} = (X, Y, X \times Y)$, где $X = \{a_1, a_2, \dots, a_p\}$, $\{Y = b_1, b_2, \dots, b_q\}$. Если G – двудольный граф, долями которого являются подмножества множеств A и B, то через GO обозначаем граф из $\Gamma(A, B)$, полученный к добавлением к G отсутствующих вершин в качестве изолированных.

Сумма по модулю 2 двух двудольных графов с одинаковыми долями $G_1 = (A, B, E_1)$ и $G_2 = (A, B, E_2)$ есть граф $G_1 \oplus G_2 = (A, B, (E_1 - E_2) \cup (E_2 - E_1))$. Множество двудольных графов с фиксированными долями A и B назовем *симметрическим линейным пространством двудольных графов* (СЛПДГ), если оно замкнуто относительно суммы по модулю 2 и двудольного изоморфизма.

Целью работы является описание всех СЛПДГ. Отметим, что двудольные графы, изоморфные в обычном смысле, могут не быть двудольно изоморфными. Поэтому СЛПДГ, вообще говоря, не является симметрическим линейным пространством графов, как оно определено в [2].

Если $G_1, \dots, G_k$ – графы из $\Gamma(A, B)$, то через $[G_1, \dots, G_k]$ будем обозначать замыкание множества $\{G_1, \dots, G_k\}$ относительно суммы по модулю 2 и переименования вершин в долях, т.е. минимальное СЛПДГ, содержащее все эти графы.

1. Предварительная классификация

Очевидно, все множество $\Gamma(A, B)$, множество $\{O_{l,r}\}$, и множество $\{O_{l,r}, K_{l,r}\}$, являются СЛПДГ. Легко также видеть, что сумма по модулю 2 двух графов, каждый из которых имеет четное число ребер, – тоже граф с четным числом ребер. Поэтому множество всех графов из $\Gamma(A, B)$ с четным числом ребер, которое будем обозначать $E0$, тоже есть СЛПДГ. Отметим, что не существует СЛПДГ, промежуточных между $\Gamma(A, B)$ и $E0$. Эти четыре СЛПДГ будем называть *тривиальными*. Остальные (нетривиальные) СЛПДГ разделим на два семейства.

Двудольный граф назовем *биполным*, если он является дизъюнктным объединением двух полных двудольных графов (двудольный граф, у которого одна доля – пустое множество, тоже считается полным двудольным, так что граф $O_{l,r}$ – биполный). Граф $K_{l,r}$ также считаем биполным. Если нетривиальное СЛПДГ состоит только из биполных графов, будем говорить, что оно принадлежит серии C, в противном случае – серии D. Далее эти два семейства рассматриваются по отдельности.

2. Серия D

Пусть α и β – элементы множества $\{0,1,*\}$. Обозначим через $D(\alpha,\beta)$ множество всех графов из $\Gamma_{A,B}$, у которых степени вершин в доле A

– все четны, если $\alpha = 0$,
– все нечетны, если $\alpha = 1$,
– могут быть любыми, если $\alpha = *$.

Аналогичный смысл имеет параметр β для доли B. Например, $D(*,1)$ есть множество графов, у которых все вершины в доле B имеют нечетные степени. Введем еще значение параметра eq, означающее, что в соответствующей доле степени всех вершин имеют одинаковую четность, и положим

- $D(0,eq) = D(0,0) \cup D(0,1)$,
- $D(eq,0) = D(0,0) \cup D(1,0)$,
- $D(eq) = D(0,0) \cup D(1,1)$,
- $D(eq,eq) = D(0,0) \cup D(0,1) \cup D(1,0) \cup D(1,1)$,
- $D(eq,*) = D(0,*) \cup D(1,*)$,
- $D(*,eq) = D(*,0) \cup D(*,1)$

Теорема 1. *Любое СЛПДГ серии D совпадает с одним из следующих множеств:* $D(0,0)$, $D(0,*)$, $D(*,0)$, $D(0,eq)$, $D(eq,0)$, $D(eq)$, $D(eq,eq)$, $D(eq,*)$, $D(*,eq)$.

То, что каждое из этих множеств является СЛПДГ, следует из того легко проверяемого факта, что при сложении графов по модулю 2 четности степеней вершин также складываются по модулю 2. Ни одно из них не состоит только из биполных графов, значит, все они относятся к серии D.

Отметим, что среди множеств, упоминаемых в формулировке теоремы 1, могут быть одинаковые. Например, если l четно, а r нечетно, то $D(eq) = D(0,eq) = D(0,0)$, $D(eq,eq) = D(eq,0)$, а если оба параметра нечетны, то $D(0,eq) = D(eq,0) = D(0,0)$, $D(eq,eq) = D(eq)$.

3. Серия C

Два полных двудольных подграфа, составляющих биполный граф, будем называть его *крыльями.* Сумма двух биполных графов – всегда биполный граф, так что множество всех биполных графов из $\Gamma(A,B)$ образует СЛПДГ, его будем обозначать $2C$. В нем есть два очевидных подпространства: $C(A)$ состоит из всех биполных графов, у которых у одного из крыльев одной из долей является все множество B (а у второго крыла, следовательно, одна доля пустая), аналогично определяется $C(B)$ (граф $K_{l,r}$ принадлежит обоим). Легко видеть, что у $C(A)$ есть единственное нетривиальное подпространство $C(A,0)$, состоящее из всех графов множества $C(A)$, у которых степени всех вершин из B четны, аналогично у $C(B)$. Далее рассмотрим другие подпространства пространства $2C$. Их будем называть *двусторонними*.

Теорема 2. *Любое двустороннее СЛПДГ является пересечением* $2C$ *с* $E0$ *или каким-нибудь из пространств серии D.*

Литература

1. Алексеев В.Е., Захарова Д.В. О симметрических пространствах графов. // Дискретный анализ и исследование операций. Серия 1.– 2007.– Т.14, вып.1.– С. 21-26.
2. Захарова Д.В. Симметрические линейные пространства графов. Дискретная математика.– 2011.–Т. 23, вып.2.– С.104-107.

ШИРОКОДИАПАЗОННОЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ

***И.Н. Арапов*[1,2]*, Л.Ф. Гударенко*[2]*, А.А. Каякин*[2]*, В.А. Карепов*[2]**

[1]СарФТИ НИЯУ МИФИ
[2]РФЯЦ-ВНИИЭФ

Представлено полуэмпирическое широкодиапазонное уравнение состояния карбоната кальция, описывающее термодинамические свойства соединения, как в области сравнительно небольших плотностей, давлений и энергий, доступной для экспериментальных исследований, так и в области сверхвысоких плотностей, давлений и энергий, в настоящее время доступной только для расчетов по теоретическим моделям. Возможности уравнения состояния продемонстрированы на примере описания экспериментальных и расчетных данных, характеризующих термодинамические и теплофизические свойства карбоната кальция.

Ключевые слова: карбонат кальция, широкодиапазонное уравнение состояния, модель РОСА-МИ, кальцит, арагонит.

Введение

Карбонат кальция ($CaCO_3$) это неорганическое химическое вещество, которое в природе встречается в виде минералов – кальцита и арагонита, является главной составляющей частью известняка, мрамора, мела и др. Известно четыре полиморфных модификации $CaCO_3$: кальцит, арагонит, пост-арагонит и пост-пост-арагонит. Данное соединение в качестве планетарного материала является одним из главных источников атмосферного диоксида углерода из-за свойства разложения карбоната кальция на углекислый газ и оксид кальция при повышении температуры или высокоэнергетическом ударном воздействии на него. Такое воздействие на нашу планету оказывало большое число астероидов во времена, так называемой, поздней тяжелой бомбардировки [1]. Происходившие при этом процессы разложения карбонатов сыграли важную роль на образование атмосферы нашей планеты и, соответственно, на её обитаемость.

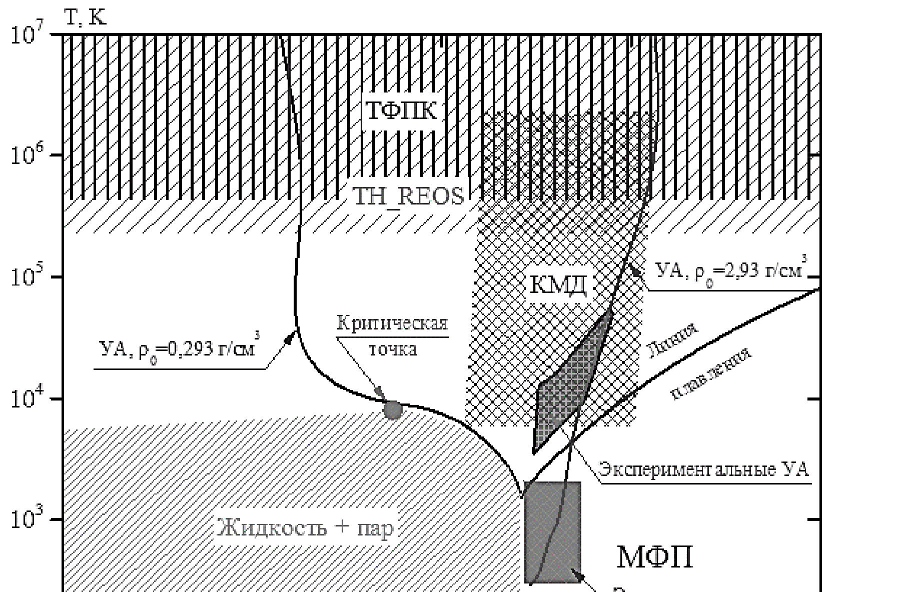


Рис. 1. Область применимости УРС и термодинамические состояния, исследованные в экспериментах и расчетах по разным моделям

Термодинамические свойства карбоната кальция исследованы в экспериментах с использованием статических [2-16] и динамических [17-19] экспериментов. Экспериментально исследованная область фазовой диаграммы небольшая, поэтому для разработки широкодиапазонного уравнения состояния необходимо использовать расчеты из «первых принципов».

На рис. 1 показано положение типовых данных, которые характеризуют термодинамические свойства карбоната кальция. Линии на рисунке, а также двухфазная область жидкость-пар получены на основании расчетов по представленному в данной работе уравнению состояния. Расчетные данные получены с использованием: модели Томаса-Ферми с поправками (ТФПК) [20,21]; метода функционала плотности (МФП) по программе LMTART [22]; метода квантовой молекулярной динамики (КМД) при помощи пакета программ ABINIT [23]; модели Либермана в программной реализации TH_REOS [24].

Уравнение состояния карбоната кальция

Для построения уравнения состояния карбоната кальция в данной работе использовалась полуэмпирическая модель УРС - РОСА-МИ [25]. Здесь, как и в большинстве современных моделей уравнений состояния, свободная энергия Гельмгольца представлялась в виде суммы трех слагаемых:

$$F(\delta, T) = E_x(\delta) + F_p(\delta, T) + F_e(\delta, T)$$

где $E_x(\delta)$ – потенциальная («холодная») составляющая энергии; $F_p(\delta, T)$ – тепловая («решеточная») составляющая свободной энергии, связанная с тепловым движением атомов (ядер); $F_e(\delta, T)$ – тепловая составляющая, учитывающая движение термически возбужденных электронов; $\delta=\rho/\rho_0$ – относительное сжатие. Расчет компонент свободной энергии осуществляется по аналогичным выражениям, приведенным в статье [25]. Для определения свободных (подбираемых) параметров модели использованы разнородные данные, показанные на рисунке 1. С описанием модели РОСА-МИ и подбором параметров можно ознакомиться в указанной статье. Ниже на рисунках подробно показано сравнение ряда изолиний, рассчитанных по УРС карбоната кальция в сравнении с экспериментальными и расчётными данными.

По причине того, что кальцит претерпевает фазовый переход уже при 3 ГПа, а низкая область давлений при моделировании высокоэнергетических процессов обычно не рассматривается, то представленное в данной работе уравнение состояния разработано для карбоната кальция в фазе арагонита. Состояния в фазе кальцита рассчитываются в приближении пористого арагонита.

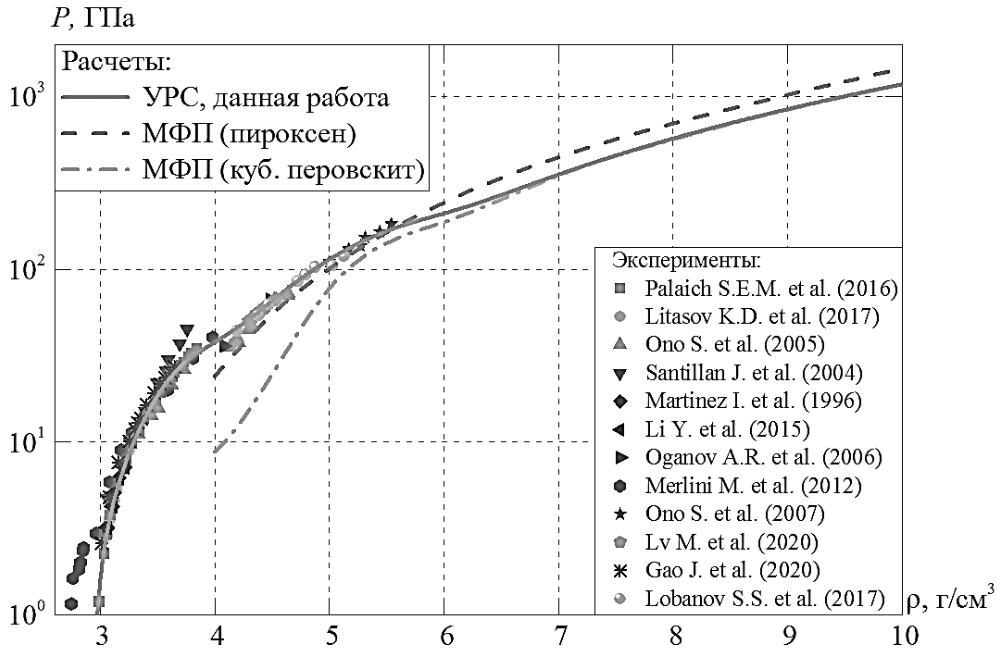


Рис. 2. Нормальная изотерма (T=293 K) карбоната кальция

При описании нормальной изотермы карбоната кальция (рис. 2) использовались результаты экспериментов, выполненных на алмазных наковальнях [2-13]. В литературе обсуждается структура пост-пост-арагонита (существует при давлениях выше 105 ГПа). Авторы одних работ полагают, что пост-пост-арагонита имеет структуру типа пироксена, других - структуру типа перовскита. При выполнении настоящей работы методом функционала плотности по программе LMTART [22] выполнены расчеты нулевых изотерм (T=0 K) для обоих вариантов структурных типов: пироксена и кубического перовскита. При высоких давлениях энергетически более выгодной оказалась структура типа перовскита. Поэтому при давлениях выше примерно 200 ГПа при определении потенциальной составляющей УРС использовалась расчёты МФП структуры перовскита.

При построении уравнения состояния использовались не только данные, полученные по статическим экспериментам, но и данные по ударно-волновому сжатию. Но данных по такому типу экспериментальных исследований карбоната кальция не так много [17-19]. Для дополнения картины авторы использовали расчеты по различным теоретическим моделям с целью получения информации о поведении вещества в высокой области давлений и плотностей.

На рис. 3 приводятся ударные адиабаты (УА), как для сплошного карбоната кальция в фазах кальцита и арагонита (ρ_0=2,665 г/см^3 и ρ_0=2,93 г/см^3 соответственно), так и для пористого (ρ_{00}=1,365 г/см^3, ρ_{00}=1,705 г/см^3 и ρ_{00}=2,02 г/см^3). Нижняя область, построенных ударных адиабат, опирается на экспериментальные результаты, далее был сделан переход на расчеты по методу квантовой молекулярной динамики и следом УА основываются на результатах расчетов по модели Либермана (TH_REOS). Модель РОСА-МИ не позволяет в точности описать все осцилляции полученные в расчете TH_REOS, а описывает их «в среднем».

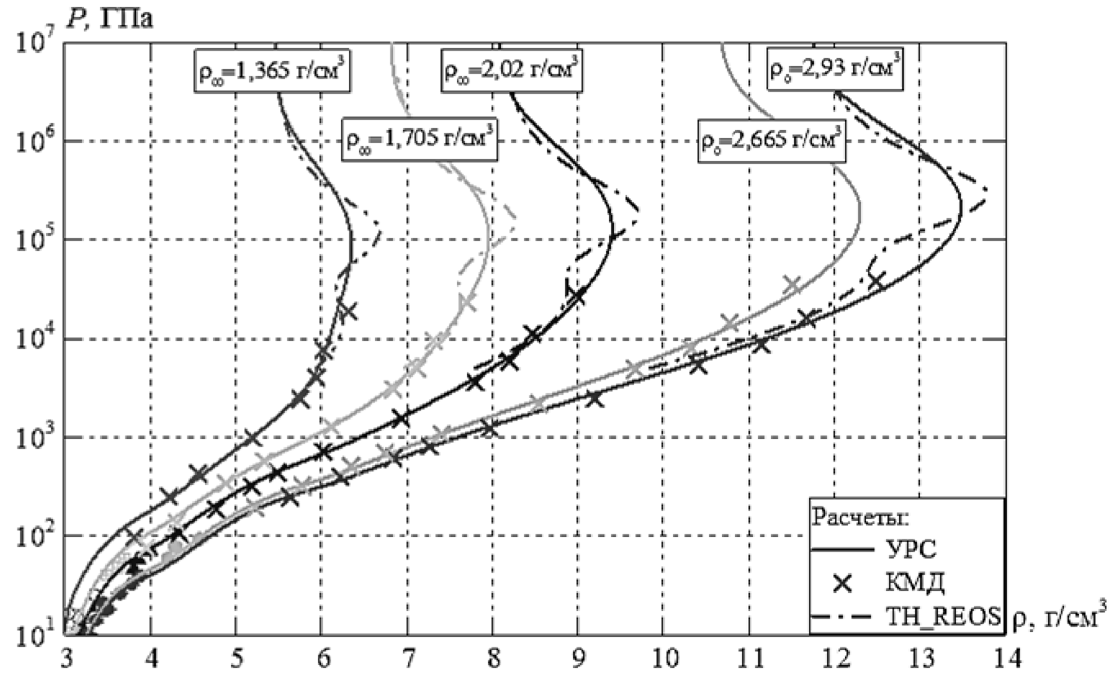


Рис. 3. Ударные адиабаты для сплошного и пористого карбоната кальция

Значения плотности, давления и температуры, рассчитанные по разработанному УРС на изолиниях и границе твердое тело - жидкость представлены в таблице 1.

Зависимость теплоемкости при постоянном давлении от температуры $C_p(T)$ представлена на рисунке 4. В разработанном уравнении состояния теплоемкость описывается при помощи моделей Дебая и Эйнштейна. Разработанное УРС с хорошей точностью описывает экспериментальные [14-16] и расчетные данные [26].

Таблица 1. Термодинамические параметры на нормальной изотерме, ударных адиабатах арагонита и кальцита и на линии плавления арагонита, рассчитанные по разработанному УРС карбоната кальция

Нормальная изотерма (T=293 K)		Ударная адиабата арагонита ρ_0=2,93 г/см^3			Ударная адиабата кальцита ρ_0=2,665 г/см^3			Линия плавления арагонита		
ρ, г/см^3	P, ГПа	ρ, г/см^3	P, ГПа	T, К	ρ, г/см^3	P, ГПа	T, К	ρ, г/см^3	P, ГПа	T, К
2,93	$1\cdot10^{-4}$	2,934	0,10	293,7	2,935	0,10	295,8	2,62	$1\cdot10^{-4}$	1529
3,03	2,31	3,03	2,31	308,7	3,02	2,31	356,5	2,69	1,43	1640,4
3,14	5,11	3,14	5,20	330,1	3,12	5,20	435,7	3,75	43,91	3022,1
3,25	8,45	3,24	8,41	360,6	3,22	8,41	526,5	5,21	166,5	4842,3
3,53	19,96	3,51	19,91	525,4	3,47	19,91	882,1	7,25	464,8	7442,2
4,28	50,08	4,21	50,82	1160	4,10	50,82	2009	10,09	1335	$1,1\cdot10^4$
4,64	78,03	4,52	78,16	2205	4,43	78,16	3401	14,04	3342	$1,6\cdot10^4$
5,25	140,3	4,96	140,0	5041	4,84	140,0	7063	19,54	8024	$2,2\cdot10^4$
7,25	400,5	6,37	405,5	$1,7\cdot10^4$	6,12	405,5	$2,4\cdot10^4$	27,18	$1,8\cdot10^4$	$3,0\cdot10^4$
8,72	759,5	7,21	763,8	$4,0\cdot10^4$	6,95	763,8	$4,7\cdot10^4$	37,82	$3,7\cdot10^4$	$4,0\cdot10^4$
10,86	1505	8,22	1514	$7,8\cdot10^4$	7,88	1514	$8,8\cdot10^4$	52,62	$7,3\cdot10^4$	$5,1\cdot10^4$
15,68	4204	9,90	4276	$1,9\cdot10^5$	9,37	4276	$2,1\cdot10^5$	73,21	$1,4\cdot10^5$	$6,5\cdot10^4$
19,15	7180	10,70	7096	$2,8\cdot10^5$	10,05	7096	$3,1\cdot10^5$	101,9	$2,8\cdot10^5$	$8,2\cdot10^4$
22,76	$1,1\cdot10^4$	11,36	$1,1\cdot10^4$	$4,0\cdot10^5$	10,61	$1,1\cdot10^4$	$4,3\cdot10^5$	141,7	$5,4\cdot10^5$	$1,0\cdot10^5$
40,26	$4,0\cdot10^4$	12,78	$4,1\cdot10^4$	$1,1\cdot10^6$	11,77	$4,1\cdot10^4$	$1,2\cdot10^6$	197,2	$1,0\cdot10^6$	$1,3\cdot10^5$
54,16	$7,5\cdot10^4$	13,21	$7,7\cdot10^4$	$1,8\cdot10^6$	12,11	$7,7\cdot10^4$	$1,9\cdot10^6$	274,3	$1,9\cdot10^6$	$1,5\cdot10^5$
67,98	$1,2\cdot10^5$	13,40	$1,2\cdot10^5$	$2,6\cdot10^6$	12,26	$1,2\cdot10^5$	$2,8\cdot10^6$	381,7	$3,6\cdot10^6$	$1,8\cdot10^5$
125,2	$4,1\cdot10^5$	13,36	$4,1\cdot10^5$	$7,5\cdot10^6$	12,15	$4,1\cdot10^5$	$8,1\cdot10^6$	498,7	$5,9\cdot10^6$	$2,1\cdot10^5$
196,3	$9,9\cdot10^5$	12,85	$9,9\cdot10^5$	$1,8\cdot10^7$	11,64	$9,9\cdot10^5$	$1,9\cdot10^7$	517,8	$6,3\cdot10^6$	$2,2\cdot10^5$

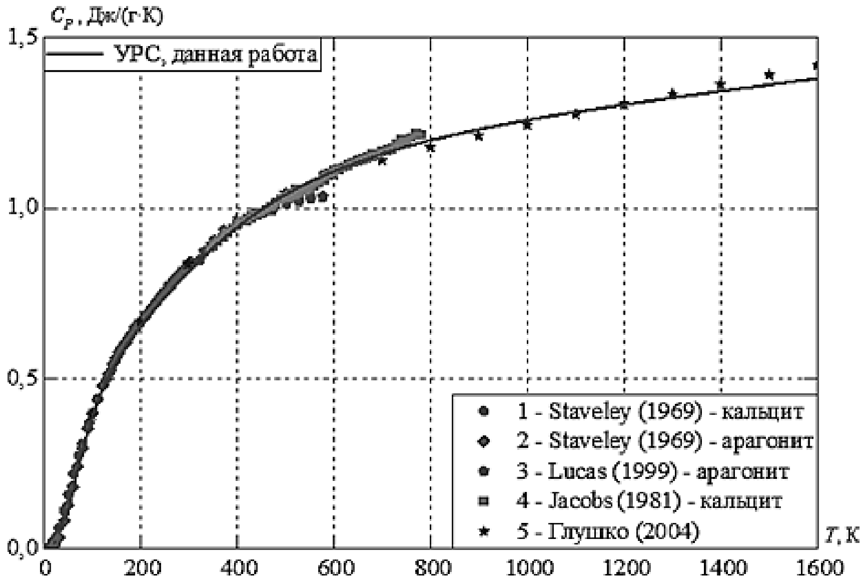


Рис. 4. Зависимость изобарической теплоемкости карбоната кальция от температуры

Заключение

С использованием модельных соотношений, экспериментальных и расчетных данных, характеризующих термодинамические свойства карбоната кальция, разработано уравнение состояния этого соединения в фазе арагонита. Расчеты по УРС согласуются с экспериментальными данными и расчетами по другим моделям. Уравнение состояния рекомендуется к применению для расчетов термодинамических функций, как в области сравнительно невысоких давлений и температур, доступной для экспериментальных исследований, так и в области высоких давлений, температур и плотностей, состояния в которых пока могут быть оценены только по теоретическим моделям УРС.

Литература

1. Gomes R., Levison H.F., Tsiganis K., Morbidelli A. Orgin of the cataclysmic late heavy bombardment period of the terrestrial planets // Nature. 2005. Vol. 435. P. 466-469. DOI: 10.1038/nature03676.
2. Palaich S.E.M., Heffern R.A., Hanfland M., Lausi A., Kavner A., Manning C.E., Merlini M. High pressure compressibility and thermal expansion of aragonite // American Mineralogist, 2016. Vol. 101. P. 1651-1658. DOI: 10.2138/am-2016-5528.
3. Litasov K.D., Shatskiy A., Gavrushkin P.N., Bekhtenova A.E., Dorogokupets P.I., Danilov B.S., HugoY., Akilbekov A.T., Inerbaev T.M. P-V-T equation of state of CaCO3 aragonite to 29 GPa and 1673 K In sity X-ray diffraction study // Physics of Earth and planetary interiors. 2017. Vol. 265. P. 82-91. DOI: 10.2138/am-2016-5528.
4. Ono S., Kikegava T., Ohishi Y., Tsuchiya J. Post-aragonite phase transformation in CaCO3 at 40 GPa // American Mineralogist. 2005. Vol. 90. P. 667-671. DOI: 10.2138/am.2005.1610.
5. Santillan J., Willams Q. A high pressure X-ray diffraction study of aragonite and the post-aragonite phase transition in CaCO3 // American mineralogist. 2004. Vol. 89. P. 1348-1352. DOI: 10.2138/am-2004-8-925.
6. Martinez I., Zhang J., Reeder R. J. In sity X-ray diffraction of aragonite and dolomite at high pressure and high temperature: Evidence for dolomite breakdown to aragonite and magnesite // American mineralogist. 1996. Vol. 81. P. 611-624. DOI: 10.2138/am-1996-5-608.
7. Li Y., Zou Y., Chen T., Wang X., Qi X., Chen H., Du J., Li B. P-V-T equation of state and high pressure behavior of CaCO3 aragonite // American mineralogist. 2015. Vol. 100. P. 2323-2329. DOI: 10.2138/am-2015-5246.
8. Oganov A. R., Glass C. W., Ono S. High-pressure phases of CaCO3: Crystal structure prediction and experiment // Earth and planetary science letters. 2006. Vol. 241. P. 95-103. DOI: 10.1016/j.epsl.2005.10.014.
9. Merlini M., Hanfland M., Crichton W. A. CaCO3- III and CaCO3-VI, high-pressure polymorphs of calcite: Possible host structures for carbon in the Earth's mantle // Earth and planetary science letters. 2012. Vol. 333-334. P. 265-271. DOI: 10.1016/j.epsl.2012.04.036.
10. Ono S., Kikegava T., Ohishi Y. High pressure transition of CaCO3 // American mineralogist. 2007. Vol. 34. P. 215-221. DOI: 10.2138/am.2007.2649.
11. Lv M., Liu J., Greenberg E., Prakapenka V. B., Dorfman S. M. Thermal equation of state of post-aragonite CaCO3 – Pmmn // American Minearalogist. 2020. Vol. 105. P. 1365-1374. DOI: 10.2138/am-2020-7279.
12. Gao J., Liu Y., Wu X., Yuan X., Liu Y., Su W. Structural modification of single crystal aragonite CaCO3 beginning at ~15 GPa: in situ vibrational spectroscopy and X-ray diffraction evidence // Minerals. 2020. Vol. 10, №924. P. 1-18. DOI: 10.3390/min10100924.
13. Lobanov S.S., Dong X., Martirosyan N.S., et al. Raman spectroscopy and x-ray diffraction of sp3 CaCO3 at lower mantle pressures // Physical review. 2017. Vol. 96, №10. P. 104-112. DOI: 10.1103/PhysRevB.96.104101.
14. Staveley L. A. K., Linford R. G. The heat capacity and entropy of calcite and aragonite, and their interpretation // J. Chem. Thermodynamics. 1969. Vol. 1. P. 1-11. DOI: 10.1016/0021-9614(69)90031-7 .
15. Lucas A., Mouallem-Bahout M., Carel C., Gaude J., Matecki M. Thermal expansion of synthetic aragonite condensed review of elastic properties // Journal of solid state chemistry. 1999. Vol. 146. P. 73-78. DOI: 10.1006/jssc.1999.8310.
16. Jacobs G. K., Kerrick D. M., Krupka K. M. The high-temperature heat capacity of natural calcite (CaCO3) // Phys. Chem. Minerals. 1981. Vol. 7. P. 55-59. DOI: 10.1007/BF00309451.
17. Калашников Н.Г., Павловский М.Н., Симаков Г.В., Трунин Р.Ф. Динамическая сжимаемость минералов группы кальцита // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1973. №23. С. 13-30.

18. Grady D. E., Moody R. L., Drumheller D. S. Release equation of state of dry and water-saturated porous calcite // Sandia Report. 1986. 61 p.
19. Vizgirda J., Ahrens T. J. Shock compression of aragonite and implications for the equation of state of carbonates // J. of geophysical research. 1982. Vol. 87, №6. P. 4747-4758. DOI: 10.1029/JB087iB06p04747.
20. Копышев В.П. О термодинамике ядер одноатомного вещества. Препринт. М.: ИПМ АН СССР. 1978. №59. 12 с.
21. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт №35. М.: ИПМ АН СССР. 1975. 73 с.
22. Savrasov S. Yu., Savrasov D. Yu. Full-potential linear-muffin-tin-orbital method for calculating total energies and forces // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 46, no 19. P. 12181-12195. DOI: 10.1103/PhysRevB.46.12181.
23. Gonze X., Beuken J.-M., Caracas R., Detraux F., et al. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project // Computational Materials Science. 2002. Vol. 25, № 3. P. 478-492. DOI: 10.1016/S0927-0256(02)00325-7.
24. Овечкин А.А, Новиков В.Г., Грушин А.С. Особенности вычисления энтропии в моделях самосогласованного поля // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2010. №24. 25 с.
25. Каякин А.А., Гударенко Л.Ф., Гордеев Д.Г. Уравнение состояния соединений изотопов лития с изотопами водорода // Физика горения и взрыва. 2014. Т. 50, №5. С. 109-122.
26. Гурвич Л. В., Бергман Г. А., Вейц И.В. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. 3-е изд. В 4-х т., 8-ми книгах / Под ред. Глушко В.П. М.: Наука. 2004.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЕКТРОИМПЕНДАНСНОЙ ТОМОГРАФИИ

А.А. Афанасьева, А.В. Старченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Данная работа связана с одним из методов медицинской визуализации – электроимпедансной томографией (ЭИТ). Численная модель ЭИТ представляет собой краевую задачу для уравнения эллиптического типа с разными граничными условиями. Для этой модели с помощью программы Gambit построено 4 типа сеток с разным сгущением на границе. Для решения задачи EIT получены разностные схемы, эти схемы построены методом конечных объемов на неструктурированных сетках. Полученные результаты в сравнении с аналитическими результатами указывают на необходимость сгущения сетки на электродах как для простых граничных условий Неймана, так и для граничных условий полной электродной модели.

Ключевые слова: электроимпедансная томография, задача Неймана, неструктурированные сетки, метод конечного объема, барицентрические ячейки, полная электродная модель.

1. Введение

Электроимпедансная томография (ЭИТ) – это метод, который позволяет реконструировать внутреннюю структуру объектов живой природы по сечениям на основе измерения напряжения электрического тока, проходящего через сетку электродов, с последующим считыванием напряжения на границе объекта. Актуальность данной темы в том, что необходимо создание безопасного для пациента метода визуализирующей диагностики. Однако, качество изображений, получаемых с помощью ЭИТ не самое высокое. Методика может получить более широкое распространение, если удастся достигнуть более высокого качества изображений, для чего также необходимо разработать высокоточные численные методы решения задач ЭИТ. ЭИТ делится на 2 задачи: прямую и обратную. Прямая задача ЭИТ вычисляет электрические напряжения на электродах на основе подаваемого тока и предполагаемого распределения проводимости. Обратная задача ЭИТ восстанавливает распределение проводимости по измерениям напряжения на электродах.

2. Физическая постановка задачи

Физически прямую задачу ЭИТ можно описать следующим образом [1]. Предполагается, что исследуемый биологический объект D находится в воздухе, имеет достаточно гладкую границу Г и характеризуется значениями коэффициента электропроводности σ, который зависит от координат $(x,y) \in D$. I_1 и I_2 отмечают места крепления на поверхности объекта электродов, к которым подаётся электрический ток (рис. 1). Из-за отсутствия источников тока внутри объекта сумма входящего и выходящего токов должна быть равна нулю по закону сохранения заряда.

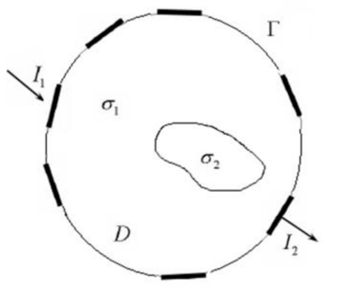


Рис. 1. Модель биологического объекта

3. Математическая постановка задачи

Математическая постановка задачи получена с использованием уравнений Максвелла в проводниках, закона Ома для стационарных проводников и необходимых для получения решения граничных условий.

Прямая задача электроимпедансной томографии в двумерном случае (нахождение электрического потенциала u(x,y) по известному распределению электропроводности σ(x,y)>0 внутри области и плотности электрического тока J на границе) была поставлена следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\sigma(x,y)\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\sigma(x,y)\frac{\partial u}{\partial y}\right)=0.$$

На электродах $E_i \in \Gamma$ для полной электродной модели [2]:

$$u+z_i\sigma\frac{\partial u}{\partial n}=\frac{1}{E_i}\left(\int_{E_i} uds+z_iI_i\right), \mathrm{i}=1,\dots,\mathrm{L}-\text{число электродов,} \tag{1}$$

где z_i – сопротивление электрода, E_i – поверхность электрода, I_i - плотность тока.

Граничное условие (1) нового типа – интегро-дифференциальное.

Вне электродов:

$$\sigma\frac{\partial u}{\partial n}=0 \tag{2}$$

4. Построение расчетных сеток

В настоящее время существует ряд программ, разработанных для создания сеток. Они позволяют строить вычислительные сетки для произвольно сложных геометрических объектов. В качестве примера можно указать следующие генераторы сеток: GAMBIT, Tgrid, GMSH и т.д [3].

В данной работе расчетные сетки построены с помощью программы Gambit. Идея работы в Gambit заключается в том, что моделирование объекта происходит постепенно, сначала определяются точки, затем строятся линии, после чего строится сетка и определяются граничные условия. А в дальнейшем получившуюся сетку можно будет экспортировать в текстовый файл и продолжить работу с данными.

В качестве тестовой задачи ЭИТ рассмотрим задачу Неймана для уравнения Лапласа в круге единичного радиуса $x^2 + y^2 \leq 1$. Электроды полуширины w расположены при $\varphi = \frac{\pi}{2}$ и $\varphi = \frac{3\pi}{2}$.

Построим для рассматриваемой области неструктурированную треугольную расчётную сетку с различным числом ячеек с помощью сеточного генератора Gambit (Рис. 2).

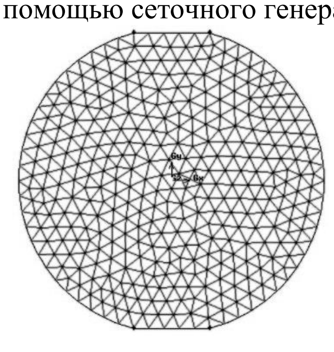


Рис. 2. Расчётная сетка с 696 ячейками

4.1. Сгущение конечноэлементной сетки с помощью размерной функции

Для получения качественных решений в местах с большими градиентами изменения параметров неструктурированные и структурированные сетки необходимо сгущать. Чтобы сетка сгущалась в нужных местах и не сгущалась в остальных в программе Gambit используется так называемая размерная функция (Size function) [3]. Данная функция позволяет сгустить сетку вблизи необходимого элемента.

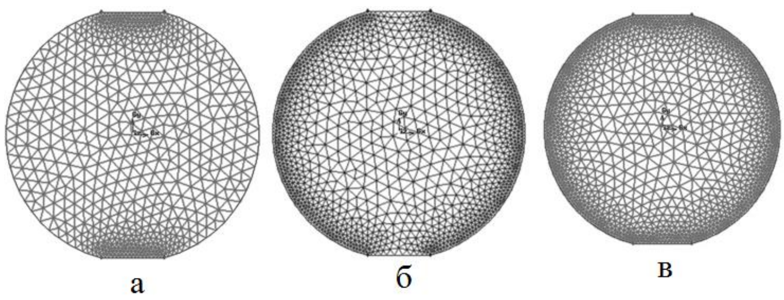


Рис. 3. Расчётная сетка: а – сгущение на электродах (1258 ячейки); б – сгущение на границе с воздухом (2572 ячейки); в – сгущение по всей границе (2744 ячейки)

5. Разностная схема для численного решения эллиптических задач на неструктурированных сетках

Для решения прямой двумерной задачи воспользуемся методом конечных объемов.

На первом этапе выбранная область триангулируется, в данной работе это круг радиуса 1. Полученные треугольники не должны иметь пересечений. Поскольку край круга гладкий, в результате триангуляции необходимо будет аппроксимировать его ломаной линией. Количество треугольников области обозначено через N. В качестве конечного объема выбираем ячейку (Рис. 4), ограниченную ломаной линией, соединяющей барицентрические центры треугольников с общей вершиной P, которая является центром этой ячейки. Множество всех ячеек задается сеткой $\overline{\omega_h} = \{P_i\}_{i=1}^{N}$, где P_i – центральная точка ячейки, N – количество смежных вершин треугольников.

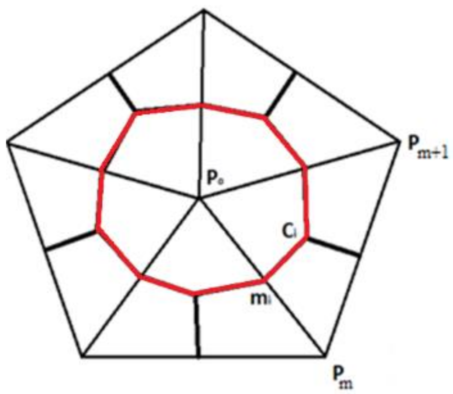


Рис. 4. Ячейка внутри триангулированной области

Решение в представленной области ищется в следующем виде:

$$u^h(x,y) = \sum_{n=1}^{N} u_n \Psi_n(x,y), \tag{3}$$

где – $\Psi_n(x,\mathrm{y})$ – базисная функция, u_n – значение сеточной функции u^h в n-й вершине сетки. Нумерация вершин треугольников производится против часовой стрелки.

Каждая базисная функция задается локально на ячейке треугольной сетки узловыми значениям, и её значение не равно нулю только в одной вершине треугольника [4]. Рассмотрим треугольник $\Delta P_0 P_m P_{m+1}$, m=1, для каждой вершины будет записана своя базисная функция:

$$\Psi_{P_0}^{(m)}(x,y) = \frac{1}{2S_m}\begin{vmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_{P_m} & y_{P_m} \\ 1 & x_{P_{m+1}} & y_{P_{m+1}} \end{vmatrix}, \Psi_{P_m}^{(m)}(x,y) = \frac{1}{2S_m}\begin{vmatrix} 1 & x_{P_0} & y_{P_0} \\ 1 & x & y \\ 1 & x_{P_{m+1}} & y_{P_{m+1}} \end{vmatrix},$$

$$\Psi_{P_{m+1}}^{(m)}(x,y) = \frac{1}{2S_m}\begin{vmatrix} 1 & x_{P_0} & y_{P_0} \\ 1 & x_{P_m} & y_{P_m} \\ 1 & x & y \end{vmatrix}, S_m = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} 1 & x_{P_0} & y_{P_0} \\ 1 & x_{P_m} & y_{P_m} \\ 1 & x_{P_{m+1}} & y_{P_{m+1}} \end{vmatrix},$$

где S_m – площадь треугольника $\Delta P_0 P_m P_{m+1}$, m = 1, 2,…,Mp, Mp – число треугольников вокруг точки P_0.

Для одного треугольника базисные функции в сумме дают 1.

Затем распределение потенциала на каждом треугольнике интерполируется линейной функцией, принимающей значения потенциала в его вершинах. Для $\Delta P_0 P_m P_{m+1}$ выражение (3) будет содержаться только 3 ненулевые базисные функции,

$$u^h(x,y) = u_{P_0}\Psi_{P_0}(x,y) + u_{P_m}\Psi_{P_m}(x,y) + u_{P_{m+1}}\Psi_{P_{m+1}}(x,y).$$

Схема для конечного объёма вокруг узла P_0 будет записана как:

$$\sum_{m=1}^{Mp} \frac{\sigma_m}{4S_m}[u_{P_0}\left(\left(y_{P_m} - y_{P_{m+1}}\right)^2 + \left(x_{P_{m+1}} - x_{P_m}\right)^2\right) +$$
$$+u_{P_m}\left(\left(y_{P_{m+1}} - y_{P_0}\right)\left(y_{P_m} - y_{P_{m+1}}\right) + \left(x_{P_0} - x_{P_{m+1}}\right)\left(x_{P_{m+1}} - x_{P_m}\right)\right) + \quad (4)$$
$$+u_{P_{m+1}}\left(\left(y_{P_0} - y_{P_m}\right)\left(y_{P_m} - y_{P_{m+1}}\right) + \left(x_{P_m} - x_{P_0}\right)\left(x_{P_{m+1}} - x_{P_m}\right)\right)] = 0$$

где суммирование выполняется по всем треугольным элементам сетки с общей вершиной P_0, причем, когда значение индекса m в выражении выше больше Mp, то m = 1.

Пусть P – узел, лежащий на границе области. M_1 и M_2 – узлы, лежащие на границе области. Рассмотрим конечный объем, границы которого составляют отрезки медиан $\Delta M_1 P M_3$ и $\Delta P M_2 M_3$. C_1, C_2, C_3 - середины сторон M_1P, PM_2, PM_3, соответственно, т.е. мы рассматриваем конечный объем $C_1C_3C_2P$. Отрезки C_1P и PC_2 лежат на границе области исследования, остальные границы конечного объема – внутри области (рис. 5).

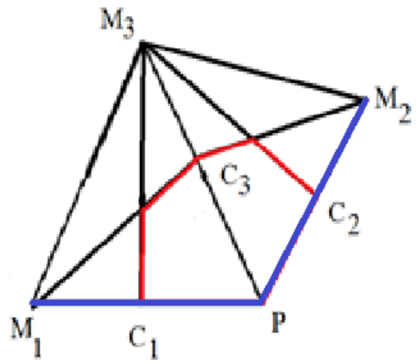


Рис. 5. Ячейка на границе триангулированной области (M_1P и PM_2 – граница и выделена синим цветом)

Интеграл по замкнутому контуру представим, как сумму интегралов по каждому отрезку, образующему контур:

$$\oint_{C_1C_3C_2} \sigma\frac{\partial u}{\partial n}dl = \int_{C_2}^{m_2} \sigma\frac{\partial u}{\partial n}dl + \int_{m_2}^{C_3} \sigma\frac{\partial u}{\partial n}dl + \int_{C_3}^{m_1} \sigma\frac{\partial u}{\partial n}dl + \int_{m_1}^{C_1} \sigma\frac{\partial u}{\partial n}dl +$$
$$+\int_{C_1}^{P} \sigma\frac{\partial u}{\partial n}dl + \int_{P}^{C_2} \sigma\frac{\partial u}{\partial n}dl = 0.$$

Первые 4 интеграла приближенно представляем, как и для внутренних границ конечных объемов. Два последних интеграла запишутся с учетом вида принятых граничных условий.

Для полной электродной модели с интегро-дифференциальным граничным условием (1) получаем следующую разностную схему для граничных ячеек:

$$0 = \int_{C_2}^{C_1} \sigma\frac{\partial u}{\partial n}dl - \frac{1}{z_e}\left(\frac{3}{4}u_P + \frac{1}{4}u_{M_1}\right)|C_1P| - \frac{1}{z_e}\left(\frac{3}{4}u_{M_2} + \frac{1}{4}u_P\right)|PC_2| +$$
$$+\frac{|C_1P|+|C_2P|}{E_e z_e}\sum_{k=1}^{k-1}\left(\frac{1}{2}u_{N_k} + \frac{1}{2}u_{N_{k+1}}\right)|N_kN_{k+1}| + \frac{|C_1P|+|C_2P|}{E_e z_e}I_e. \quad (5)$$

Исследование аппроксимационных свойств полученной разностной схемы затруднено из-за нерегулярной структуры расчетной сетки. Полученные разностные схемы являются устойчивыми. Это следует из применения мажоранты Гершгорина.

6. Решение для постановки полной электродной модели

Для решения тестовой задачи полной электродной задачи воспользуемся разностной схемой (4) – (5) с параметром σ = 1, полуширина электрода w = 0,25. Аналитическое решение для полной электродной модели с заданной силой тока было получено на основе модифицированного метода, изложенного в [6]. Численное решение сеточных уравнений найдено методом Гаусса с выбором главного элемента.

На рис. 6 приведено сравнение результатов с аналитическим решением на границе. Графики показывают, что каждое численное решение совпадает с аналитическим, и на первый взгляд видно, что графики совпадают друг с другом, но имеют разницу на электродах.

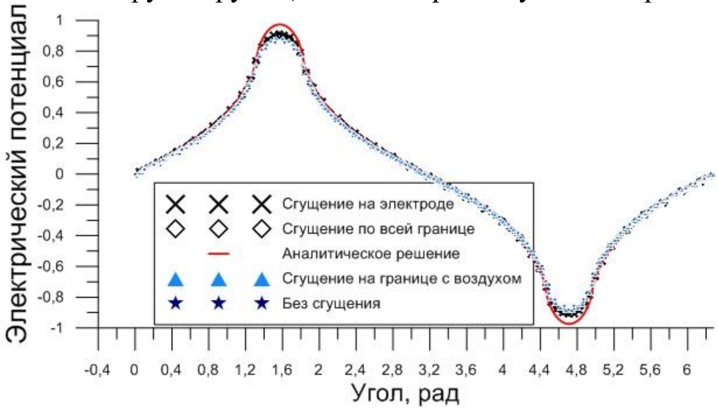


Рис. 6. Сравнение численного решения и аналитического

Проверим отклонение от аналитического решения по формуле средней абсолютной ошибки (MAE) и запишем результаты в табл. 1:

$$MAE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|U_{num_i} - U_{an_i}\right|,$$

где N – количество значений, U_{num_i} – электрический потенциал, найденный численным методом, U_{an_i} – значения аналитического решения.

Таблица 1. Отклонение численных результатов от аналитического

Сетка	Отклонение
Без сгущения	0.03017
Сгущение на электродах	0.01435
Сгущение на границе с воздухом	0.01681
Сгущение на всей границе	0.02062

Из табл. 1 видно, что более лучшая расчетная сетка для решения полной электродной модели – сетка со сгущением на электродах.

7. Заключение

Таким образом, для рассматриваемой области, в которой решается прямая задача ЭИТ, была построена неструктурированная треугольная сетка с использованием генераторов сеток Gambit и Tgrid, с помощью функции Size function проведено сгущение сетки вблизи необходимых участков границы, а также рассмотрено качество полученных сеток. Выполнена аппроксимация дифференциальной задачи ЭИТ на основе метода конечных объемов на барицентрических ячейках. На тестовой задаче показана сходимость решения разностной задачи к ее точному решению. В ходе тестирования на неструктурированных сетках был сделан вывод, что сетку лучше сгущать на электродах.

Решена прямая задача ЭИТ в полной электродной модели с интегро-дифференциальным граничным условием на неструктурированных сетках. Проведен анализ сравнения численного решения с аналитическим и сделан вывод, что и для этой модели сетку лучше сгущать на электродах.

Литература

1. Пеккер Я. С. Электроимпедансная томография / Я.С. Пеккер, К.С. Бразовский, В. Ю. Усов и др. – Томск: НТЛ, 2004. 192 с.
2. Шерина Е.С., Старченко А.В. Численное моделирование задачи электроимпедансной томографии и исследование подхода на основе метода конечных объемов // Бюллетень сибирской медицины. 2014. Т. 13. № 4. С. 156–164.
3. Батурин О.В. Построение расчетных моделей в препроцессоре Gambit универсального программного комплекса Fluent / О.В. Батурин, Н.В. Батурин, В.Н. Матвеев - Электронное учебное пособие, 2010. – 166 с.
4. Шерина Е.С. Разностные схемы на основе метода конечных объёмов для задачи электроимпедансной томографии/ Е.С. Шерина, А.В. Старченко, Вестн. Томск. гос. ун-та. Матем. и мех. – 2014 – №3 (29), 25–38 С.
5. Pidcock M.K. Analytic and semi-analytic solutions in electrical impedance tomography. I. Two-dimensional problems /M. K. Pidcock, M. Kuzuoglu and K. Leblebicioglu//Physiol Meas, - 1995 - №16 (2). – P.77-90.
6. Demidenko E. An analytic solution to the homogeneous EIT problem on the 2D disk and its application to estimation of electrode contact impedances // Physiol Meas. № 32(9), 2011. – P. 1453–1471.

МНОЖЕСТВА ДОСТИЖИМОСТИ В ЗАДАЧЕ ОТСЛЕЖИВАНИЯ ТРАЕКТОРИИ ПРИ ДВИЖЕНИИ СФЕРИЧЕСКОГО РОБОТА С МАЯТНИКОВЫМ ПРИВОДОМ[1*]

Д.В. Баландин[1], Р.С. Бирюков[1,2], М.М. Коган[1,2]

[1]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
[2]Нижегородский архитектурно-строительный университет

В работе рассматривается математическая модель безотрывного движения сферического робота по наклонной плоскости. Предложен способ синтеза законов управления в форме линейной обратной связи по состоянию, обеспечивающих движение робота в заданной эллипсоидальной трубчатой окрестности желаемой траектории движения. Работоспособность построенных законов управления подтверждается результатами компьютерного моделирования.

Ключевые слова: сферический робот, математическая модель, области достижимости, отслеживание траектории.

1. Введение

В последнее время активно ведутся работы, направленные на разработку мобильных роботов, в том числе и сферических, применяемых в различных областях человеческой деятельности. В общем случае сферический робот представляет собой сферическую оболочку с движущимися внутри нее материальными телами. В качестве движителей могут быть использованы различные технические конструкции такие, как система вращающихся маховиков, набор перемещающихся масс, расположенных на взаимно перпендикулярных осях, маятник, связанный при помощи шарнира со сферической оболочкой и приводимый в движение системой моторов [1-7]. Сферические роботы относятся к классу систем с внутренними перемещающимися массами и обладают рядом отличительных свойств, характерных для таких систем. Во-первых, движение сферического робота осуществляется за счет сил трения, приложенных к сферической оболочке в точке контакта с поверхностью, по которой он движется. Во-вторых, сферическая форма надежно защищает внутренности робота от внешних воздействий и загрязнения. В-третьих, сферический робот, постоянно переворачиваясь, остается между тем все время в рабочем состоянии.

В данной работе рассматривается модель сферического робота, представляющего собой две тонкостенные концентрические сферические оболочки. Подвижным элементом такой конструкции, приводящим робот в движение, является внутренняя оболочка, вращающаяся относительно внешней сферической оболочки робота. Это вращение может осуществляться, например, за счет электромагнитов, распределенных по сферической поверхности робота. Как показывает дальнейший анализ, управление таким роботом реализовать гораздо проще, чем роботом с маятником, подвешенным в центре сферической оболочки и приводимым в движение двигателем.

2. Уравнения движения сферического робота

Рассмотрим модель сферического робота, представляющего собой две сферические оболочки с общим центром [8-10]. Внешняя оболочка имеет массу M и радиус R, а момент инерции относительно любой оси, проходящей через ее центр, равен J. На внутренней оболочке, массой которой в дальнейшем будем пренебрегать, закреплены шесть шариков таким

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0729-2020-0055) и научно-образовательного математического центра “Математика технологий будущего” (соглашение № 075-02-2021-1394).

образом, что они образуют вершины правильного октаэдра и могут свободно вращаться (рис. 1). Масса каждого шарика равна m. Силами трения между шариками и внешней оболочкой в дальнейшем пренебрежем. Предполагается, что внутренняя оболочка вращается с угловой скоростью $\boldsymbol{\omega}$.

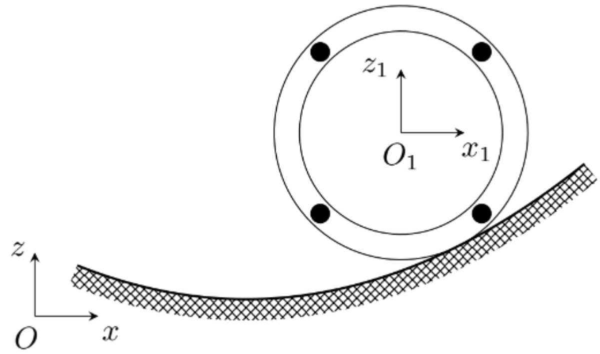


Рис. 1. Схематическое изображение сферического робота

Для построения математической модели движения робота введем в рассмотрение неподвижную систему координат $Oxyz$, жестко связанную с опорной плоскостью, и примем, что ось Oz направлена вертикально вверх (на рисунке показано сечение робота плоскостью Oxz). Кроме этого определим подвижную прямоугольную систему координат $O_1x_1y_1z_1$, центр O_1 которой жестко связан с геометрическим центром сферической оболочки робота. Оси системы координат $O_1x_1y_1z_1$ параллельны осям неподвижной системы координат $Oxyz$.

Определим в координатах неподвижной системы координат $Oxyz$ единичный вектор нормали $\boldsymbol{n}$ к опорной плоскости и вектор $\boldsymbol{k} = (0, 0, 1)$, противоположный направлению силы тяжести. Обозначим координаты центра масс робота и его угловую скорость через $\boldsymbol{\xi} = (x, y, z)$ и $\boldsymbol{\Omega}$ соответственно, тогда динамика системы в безразмерных переменных описывается следующими дифференциальными уравнениями:

$$\begin{gathered} \ddot{\boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{F}_{\text{тр}} + N\,\boldsymbol{n} - \boldsymbol{k}, \\ \dot{\boldsymbol{\Omega}} = \boldsymbol{Q} - \gamma[\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{F}_{\text{тр}}], \\ \boldsymbol{F}_{\text{тр}} = -\kappa\,\boldsymbol{v}_c/|\boldsymbol{v}_c|, \quad \boldsymbol{v}_c = \dot{\boldsymbol{\xi}} - [\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{n}], \end{gathered} \tag{1}$$

где $\boldsymbol{F}_{\text{тр}}$ – сила трения между оболочкой и опорной поверхностью, $N = \langle \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{k} \rangle$ – величина силы нормального давления, κ – коэффициент сухого трения, $\boldsymbol{v}_c$ – скорость точки контакта оболочки с поверхностью, $\boldsymbol{Q} = -\boldsymbol{\omega}$ – вектор управления и $\gamma = R^2(M + 6m)/J \geq 3/2$. Приведенное выражение справедливо, если $\boldsymbol{v}_c \neq 0$, в противном случае скольжение отсутствует и движение осуществляется с учетом неголономной связи

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = [\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{n}]. \tag{2}$$

В этом случае уравнения (1) можно упростить. Для этого исключим силу трения $\boldsymbol{F}_{\text{тр}}$, учтем соотношение (2) и предположим, что отсутствует верчение сферической оболочки относительно вектора нормали $\boldsymbol{n}$, то есть $\langle \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n} \rangle = 0$, тогда

$$\left((1 + \gamma)I - \gamma\,\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}\right)\dot{\boldsymbol{\Omega}} = \boldsymbol{Q} - \gamma[\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{k}]. \tag{3}$$

В отсутствие скольжения должно выполняться условие $|\boldsymbol{F}_{\text{тр}}| < \kappa\,N$, где $\boldsymbol{F}_{\text{тр}} = \ddot{\boldsymbol{\xi}} - N\,\boldsymbol{n} + \boldsymbol{k}$ и величина силы реакции опоры N вычисляется согласно третьему уравнению (1).

3. Синтез законов управления

Теперь рассмотрим вопрос об организации движения вдоль заданной траектории, которую описывает центр сферической оболочки. Будем считать, что движение по поверхности происходит без проскальзывания и траектория движения описывается параметрическим уравнением $\boldsymbol{\xi}_0 = \Xi(t)$, где $\Xi(t)$ – дважды непрерывно дифференцируемая функция. Будем искать вектор управления $\boldsymbol{Q}$, обеспечивающий приближение центра робота к заданной траектории, следующим образом:

$$\boldsymbol{Q} = \left((1+\gamma)\boldsymbol{I} - \gamma\, \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\mathbf{T}}\right)\dot{\boldsymbol{\Omega}}_0 + \boldsymbol{\Theta}(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\zeta_0}),\ \ \boldsymbol{\zeta} = \mathrm{column}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\Omega}), \tag{4}$$

где матрица коэффициентов обратной связи $\boldsymbol{\Theta}$, вообще говоря, может быть функцией времени. Заметим, что первое слагаемое в (4) представляет из себя программное управление в случае, когда справедливо условие $\boldsymbol{\Omega}(0) = \left[\boldsymbol{n} \times \dot{\boldsymbol{\xi}}_0(0)\right]$.

Для определения параметров обратной связи $\boldsymbol{\Theta}$ предположим, что $\boldsymbol{\zeta}(0)$ принадлежит эллипсоиду $\mathcal{E}(\boldsymbol{R}) = \left\{\boldsymbol{\zeta_0} + \boldsymbol{R}^{1/2}\boldsymbol{w}: |\boldsymbol{w}| \le 1\right\}$, $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} \succcurlyeq 0$. В этом случае множество достижимости системы в произвольный момент времени t также является эллипсоидом с центром в точке $\boldsymbol{\Xi}(t)$ [11]. Потребуем выполнение следующих условий:

$$\forall t \in [0, T]: \qquad \boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\zeta_0} \in \mathcal{E}(\rho^2\boldsymbol{I}), \qquad (\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\zeta_0})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Theta}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}^{-\mathbf{1}}\boldsymbol{\Theta}(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\zeta_0}) \le 1, \tag{5}$$

где $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \succ 0$. Первое условие обеспечивает нахождение состояния в шаре радиуса ρ в каждый момент времени, а второе - ограниченность вектора корректирующего управления. Справедлива следующая теорема [11].

Теорема 1. Матрица коэффициентов корректирующего управления $\boldsymbol{\Theta}(t)$ обеспечивает выполнение условий (5) при всех начальных состояниях $\boldsymbol{\zeta}(0)$, принадлежащих множеству $\mathcal{E}(\boldsymbol{R})$, если существуют матричные функции $\boldsymbol{Y}(t) \succ 0$ и $\boldsymbol{Z}(t)$, удовлетворяющие матричному дифференциальному уравнению

$$\dot{\boldsymbol{Y}}(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{Y}(t) + \boldsymbol{Y}(t)\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}(t) + \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}(t)\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}, \qquad \boldsymbol{Y}(0) = \boldsymbol{R}, \tag{6а}$$

и неравенствам

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{Y}(t) & \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}(t) \\ \boldsymbol{Z}(t) & \boldsymbol{Q} \end{bmatrix} \succcurlyeq 0, \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{Y}(t) & \boldsymbol{Y}(t)\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{C}\boldsymbol{Y}(t) & \rho^2\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \succcurlyeq 0, \quad \forall t \in [0, T], \tag{6б}$$

где матрицы $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$ и $\boldsymbol{C}$ имеют вид:

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & [\boldsymbol{n}]_{\times}^{\mathrm{T}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{M}^{-\mathbf{1}} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C} = [\boldsymbol{I} \quad 0], \quad [\boldsymbol{n}]_{\times}^{\mathrm{T}} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{M} = (1+\gamma)\boldsymbol{I} - \gamma\, \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\mathbf{T}}.$$

Таким образом, для вычисления матрицы регулятора $\boldsymbol{\Theta}$, обеспечивающей попадание траектории движения $\boldsymbol{\zeta}$ в «наименьшую» эллипсоидальную трубчатую окрестность желаемой траектории движения $\boldsymbol{\zeta_0}$, требуется найти наименьшее значение ρ при ограничениях (6). Для вычисления искомых параметров обратной связи проведем дискретизацию указанной задачи. Введем на отрезке $[0, T]$ равномерную сетку $t_k = t_{k-1} + h$, $k = 1, \dots, N$, где $h = T/N$ и запишем дискретный аналог рассматриваемой задачи

$$\boldsymbol{Y}_{k+1} - \boldsymbol{Y}_k - h\left(\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{Y}_k + \boldsymbol{Y}_k\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{B}_k\boldsymbol{Z}_k + \boldsymbol{Z}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_k^{\mathrm{T}}\right) = 0, \qquad \boldsymbol{Y}_0 = \boldsymbol{R}, \tag{7а}$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{Y}_k & \boldsymbol{Z}_k^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{Z}_k & \boldsymbol{Q} \end{bmatrix} \succcurlyeq 0, \qquad \begin{bmatrix} \boldsymbol{Y}_k & \boldsymbol{Y}_k\boldsymbol{C}_k^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{C}_k\boldsymbol{Y}_k & \rho^2\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \succcurlyeq 0, \qquad \boldsymbol{Y}_k \succ 0, \tag{7б}$$

где индекс $k = 0, \dots, N$ указывает на значение в момент времени t_k. Решив эту задачу полуопределенного программирования относительно неизвестных $\boldsymbol{Y}_k$, $\boldsymbol{Z}_k$ и ρ, найдем матрицы $\boldsymbol{\Theta}_k = \boldsymbol{Z}_k\boldsymbol{Y}_k^{-1}$.

4. Результаты численного моделирования

При проведении числительных экспериментов выберем в качестве опорной поверхности наклонную плоскость с уравнением $x + z = 5$. Примем следующие значения параметров $\kappa = 0.8$, $\gamma = 10.5$ и зададим желаемую траекторию движения центра масс робота в виде окружности радиуса ρ:

$$\boldsymbol{\xi}_0(t) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{5}{\sqrt{2}}\right) + \frac{\rho}{\sqrt{2}}\cos\alpha\, t, \rho\sin\alpha\, t, \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{5}{\sqrt{2}}\right) - \frac{\rho}{\sqrt{2}}\cos\alpha\, t\right).$$

Начальные условия зададим следующим образом:

$$\boldsymbol{\xi}(0) = \left(\frac{1+\rho}{\sqrt{2}} + \frac{5}{2} - 0.1, 0, \frac{1-\rho}{\sqrt{2}} + \frac{5}{2} + 0.1\right), \qquad \dot{\boldsymbol{\xi}}(0) = (0, \alpha\,\rho, 0), \qquad \boldsymbol{\Omega}(0) = \left(-\frac{\alpha\,\rho}{\sqrt{2}}, 0, \frac{\alpha\,\rho}{\sqrt{2}}\right).$$

На рис. 2 при значениях параметров $\rho = 2$ и $\alpha = 0.5$ представлены результаты численного моделирования приближения сферического робота к движению вдоль окружности: линией черного цвета показана желаемая траектория, а красной линией – траектория движения центра сферического робота. Как можно видеть, построенное управление обеспечивает приемлемое решение поставленной задачи.

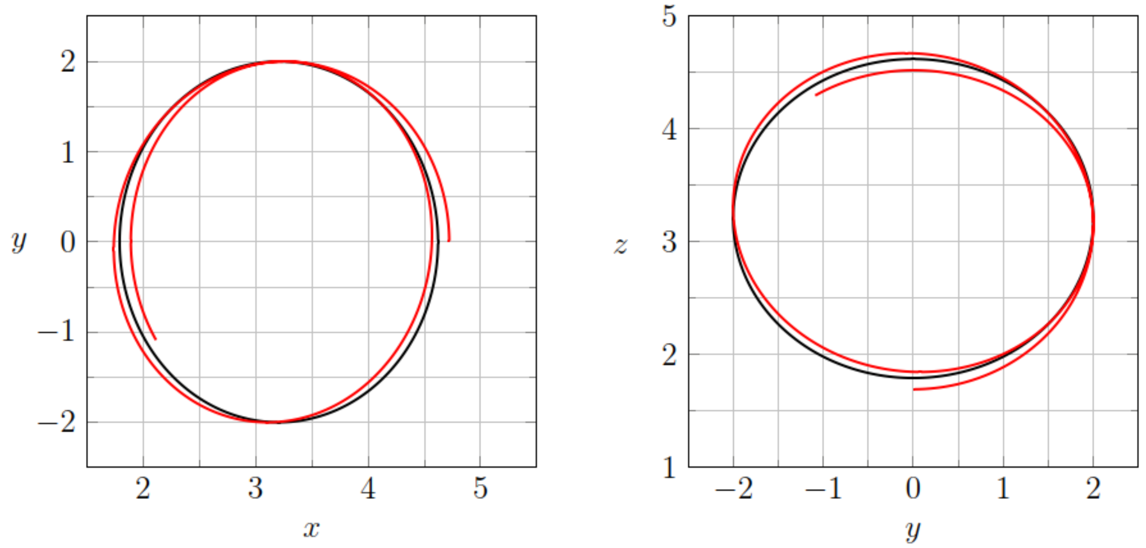


Рис. 2. Приближение сферического робота к заданной траектории, проекции на плоскости Oxy и Oyz

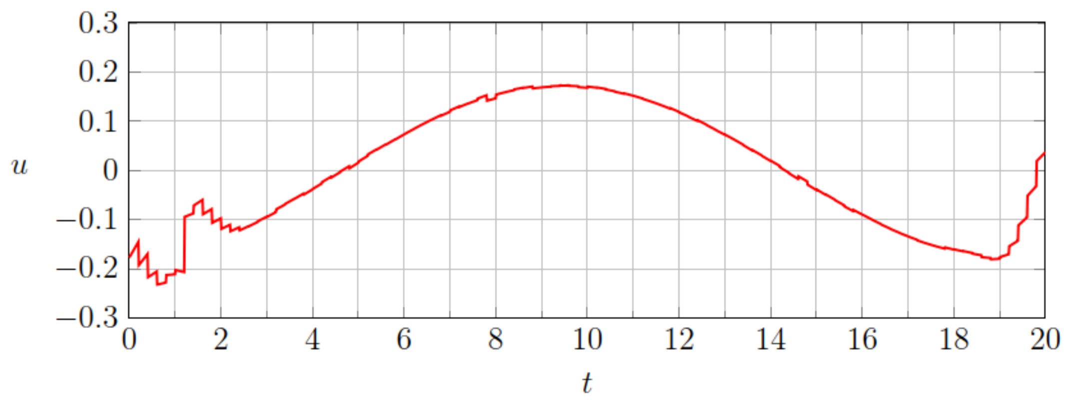


Рис. 3. Зависимость управления от времени

5. Заключение

В работе рассмотрена математическая модель движения сферического робота по наклонной плоскости. Предложен способ синтеза законов управления в форме линейной обратной связи по состоянию, обеспечивающих движение робота в заданной эллипсоидальной трубчатой окрестности желаемой траектории движения. Корректность работы синтезированных законов управления продемонстрирована численными экспериментами.

Литература

1. Баландин Д.В., Комаров М.А., Осипов Г.В. Управление движением сферического робота с маятниковым приводом // Известия РАН. Теория и системы управления. 2013. № 4. С. 150-163.
2. Баландин Д.В., Скучилин М.Ю. Управляемые движения сферического робота на наклонной плоскости // Журнал Средневолжского математического общества. 2013. Т. 15. № 4. С. 47-56.
3. Chase R., Pandya A. A Review of Active Mechanical Driving Principles of Spherical Robots // Robotics. 2012. Vol. 1. P. 3-21.
4. Kilin A.A., Pivovarova E.N., Ivanova T.B. Spherical Robot of Combined Type: Dynamics and Control // Regul. Chaotic Dyn. 2015. Vol. 20. No. 6. P. 716-728.
5. Ivanova T.B., Kilin A.A., Pivovarova E.N. Controlled Motion of a Spherical Robot with Feedback. I // J. Dyn. Control Syst. 2018. Vol. 24. No. 3. P. 497-510.
6. Ivanova T.B., Kilin A.A., Pivovarova E.N. Controlled Motion of a Spherical Robot with Feedback. II // J. Dyn. Control Syst., 2019. Vol. 25. No. 1. P. 1-16.
7. Koshiyama A., Yamafuji K. Design and Control of an All-Direction Steering Type Mobile Robot // International Journal of Robotics Research. 1993. Vol. 12. P. 411-419.
8. Баландин Д.В., Бирюков Р.С., Коган М.М. Управление сферическим роботом с маятниковым приводом нового типа // Материалы XIII Всероссийского совещания по проблемам управления ВСПУ-2019, Москва, Россия. 2019. С. 1187-1191.
9. Баландин Д.В., Бирюков Р.С., Коган М.М. Управление сферическим роботом с маятниковым приводом в задаче отслеживания траектории // XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Уфа, 19–24 августа 2019. С: 173-175.
10. Баландин Д.В., Бирюков Р.С., Коган М.М. Множества достижимости в задаче управления сферическим роботом с маятниковым приводом // Материалы XV Международной конференции "Устойчивость и колебания нелинейных систем управления (конференция Пятницкого)", Москва, Россия. 2020. С. 65-68.
11. Баландин Д.В., Бирюков Р.С., Коган М.М. Эллипсоидальные множества достижимости линейных нестационарных систем в задачах оценивания и управления // Дифференциальные уравнения. 2019. Т. 55, № 11. С. 1485–1498.

ПУТЬ К ХАОСУ ЧЕРЕЗ БИФУРКАЦИИ СКОЛЬЗЯЩИХ ГОМОКЛИНИЧЕСКИХ ОРБИТ В КУСОЧНО-ЛИНЕЙНОЙ СИСТЕМЕ ЛОРЕНЦА[1*]

Н.В. Барабаш[1,2], В.Н. Белых[1,2], И.В. Белых[1,3]

[1]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Россия
[2]Волжский государственный университет водного транспорта, Россия
[3]Государственный университет Джорджии, США

В докладе рассматривается новый сценарий рождения хаотического аттрактора в кусочно-линейной системе лоренцевского типа при наличии скользящих движений. Сценарий состоит из бесконечной последовательности чередующихся гомоклинических бифуркаций и бифуркаций типа «вилка». Показано, что появление сколь угодно малого участка скользящих движений на траекториях аттрактора приводит к его разрушению за счёт появления устойчивых о**рбит большого периода.**

Ключевые слова: странный аттрактор, гомоклиническая орбита, скользящие движения.

1. Введение

Негладкие системы могут порождать динамику и бифуркации, кардинально отличающиеся от своих гладких аналогов. В частности, хорошо известно, что бифуркация гомоклинической орбиты седла с положительной седловой величиной приводит к рождению неустойчивого (седлового) предельного цикла. Однако, в кусочно-гладкой системе при аналогичной бифуркации предельный цикл может рождаться устойчивым.

В данном докладе обсуждаются результаты двух наших недавних работ [1-3], где на примере предложенной кусочно-линейной системы лоренцевского типа было строго доказано, что появление сколь угодно малого участка скользящих движений в гомоклинической орбите седла с положительной седловой величиной может приводить к рождению устойчивой периодической орбиты. Это означает, что исчезновение странного аттрактора лоренцевского типа может происходить из-за появления устойчивой динамики в результате бифуркаций многообходных гомоклинических петель, содержащих сколь угодно малые участки скользящих движений.

2. Модель

Рассмотрим трёхмерную кусочно-линейную систему вида [1]

$$A_s\colon \begin{cases} \dot{x} = x, \\ \dot{y} = -\alpha y, \\ \dot{z} = -\nu z, \end{cases} (x,y,z) \in G_s,\quad A_l\colon \begin{cases} \dot{x} = -\lambda(x+1) + \omega(z-b), \\ \dot{y} = -\beta(y+1), \\ \dot{z} = -\omega(x+1) - \lambda(z-b), \end{cases} (x,y,z) \in G_l,$$
$$A_r\colon \begin{cases} \dot{x} = -\lambda(x-1) - \omega(z-b), \\ \dot{y} = -\beta(y-1), \\ \dot{z} = \omega(x-1) - \lambda(z-b), \end{cases} (x,y,z) \in G_r, \qquad (1)$$

где $\alpha, \nu, \lambda, \omega$, β и b – положительные параметры. Система (1) задана в следующих областях фазового пространства:

[1*] Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00367), а также Министерства науки и высшего образования (проект № 0729-2020-0036). Н.Б. также благодарит Российский фонд фундаментальных исследований (проект № 19-01-00607 А).

$$G_s: |x| < 1, y \in \mathbb{R}^1, z < b,$$

$$G_l: \begin{cases} x \le -1 \text{ при } z \le b, \\ x \le -1 \text{ при } z > b \text{ и } y \ge 0, \\ x < 1 \text{ при } z > b \text{ и } y < 0, \end{cases} \quad G_r: \begin{cases} x \ge 1 \text{ при } z \le b, \\ x \ge 1 \text{ при } z > b \text{ и } y < 0, \\ x > -1 \text{ при } z > b \text{ и } y \ge 0. \end{cases}$$

3. Сценарий рождения хаотического аттрактора

Для строгого исследования бифуркаций в системе (1) в работе [2] было построено двумерное отображение Пуанкаре $D \to D$, $D = \{|x| \le 1, |y| \le 1, z = b\}$, определяемое потоком системы (1) и учитывающее наличие скользящих движений. Полученное отображение имеет треугольную форму, что позволяет полностью охарактеризовать бифуркации в системе (1) с помощью одномерного фактор-отображения. При специальном выборе параметра $b = 2\exp\frac{3\pi\lambda}{2\omega}$ фактор-отображение имеет вид

$$\bar{x} = \begin{cases} -d \operatorname{sign} x, & \text{при } |x| \le \left(\frac{1-d}{2}\right)^{\frac{1}{\nu}}, \\ (-1 + 2|x|^{\nu}) \operatorname{sign} x, & \text{при } |x| > \left(\frac{1-d}{2}\right)^{\frac{1}{\nu}}, \end{cases} \tag{2}$$

где $d = 2\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{\omega}\right)^2} \exp(-\frac{\lambda}{\omega}\arctan\frac{\lambda}{\omega}) - 1$. Тогда сценарий рождения хаотического аттрактора в системе (1) через бесконечную последовательность гомоклинических бифуркаций можно представить в виде следующей теоремы [2].

Теорема 1 (о скользящих многообходных гомоклинических бифуркациях и пути к хаосу).

1. *При* $-1 < d < 0$ *система (1) имеет два устойчивых предельных цикла.*

2. *При* $d = d_{h1} = 0$ *устойчивые циклы образуют «устойчивую» гомоклиническую бабочку.*

3. *При* $0 < d < d_{p1}$, *где* d_{p1} *есть корень уравнения* $2d^{\nu} + d = 1$, *система имеет устойчивый предельный цикл периода 2.*

4. *При* $d = d_{p1}$ *предельный цикл периода 2 теряет устойчивость через бифуркацию типа вилка, приводящую к рождению пары устойчивых предельных циклов периода 2.*

5. *При* $d = d_{h2} = 0.5^{\frac{1}{\nu}}$ *эти устойчивые предельные циклы периода 2 сливаются друг с другом в состоянии равновесия и образуют две симметричных двухобходные гомоклинические орбиты.*

6. *При* $d_{h2} < d < d_{p2}$, *где* d_{p2} *– корень уравнения* $2d^{\nu} - \left(\frac{1-d}{2}\right)^{\frac{1}{\nu}} = 1$, *система (1) имеет устойчивый предельный цикл периода 4, родившийся в результате гомоклинической бифуркации.*

7. *Значения параметров для всех последующих многообходных гомоклинических бифуркаций определены рекурентным соотношением*

$$d_{h(n+1)} = \chi(d_{hn}) = \left(\frac{d_{hn}+1}{2}\right)^{\frac{1}{\nu}}, \tag{3}$$

где $d_{h(n+1)}$ *и* d_{hn} *– значения параметра* d, *при которых образуются* $(n+1)$*-обходные и* n*-обходные гомоклинические орбиты, соответственно.*

8. Отображение (3) имеет устойчивую неподвижную точку $d_{hn} = 1$, *соответствующую странному аттрактору лоренцевского типа в системе (1). Бесконечная последовательность многообходных гомоклинических бифуркаций, накапливающихся к предельному значению* $d = 1$, *которая приводит к появлению аттрактора лоренцевского типа, имеет нормирующий коэффициент (scaling factor)* $\Delta = \lim\limits_{d\to 1} \frac{d_{hn} - d_{h(n-1)}}{d_{h(n-1)} - d_{h(n-2)}} = \frac{1}{2\nu}$.

Доказательство Теоремы 1 приводится в докладе. Численные иллюстрации Теоремы 1 приведены на Рис. 1 и Рис. 2.

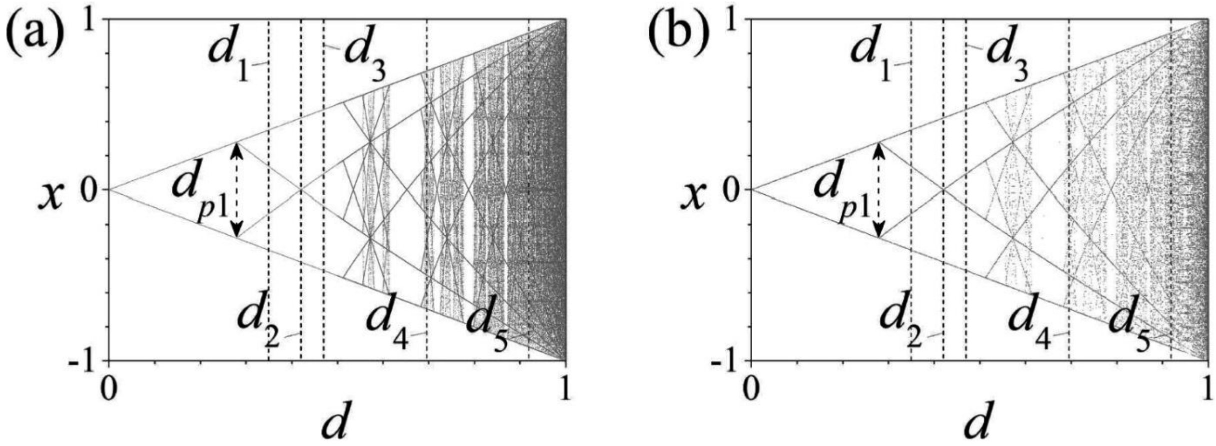


Рис. 1. Численная иллюстрация сценария рождения хаотического аттрактора из Теоремы 1.
(a) Одномерная бифуркационная диаграмма для фактор-отображения (2) при $\nu = 0.8$.
(b) Одномерная бифуркационная диаграмма для системы (1), полученная численно по пересечениям траекторий потока с глобальной секущей $z = b$. Первая гомоклиническая бифуркация при $d = d_{h1} = 0$ приводит к рождению устойчивой орбиты периода 2, которая далее претерпевает бифуркацию вилки при $d = d_{p1} = 0.279$ (двойная стрелка), становясь неустойчивой и порождая две устойчивых орбиты периода 2. Дальнейшее увеличение d порождает каскад чередующихся гомоклинических бифуркаций и «вилок», что приводит к образованию странного аттрактора лоренцевского типа при $d = 1$. Вертикальные штриховые линии на в $d_1 = 0.35$, $d_2 = d_{h2} = 0.4204$, $d_3 = 0.47$, $d_4 = 0.696$, $d_5 = 0.91906$, и $d_6 = 1$ (не показана) соответствуют фазовым портретам на Рис. 2.

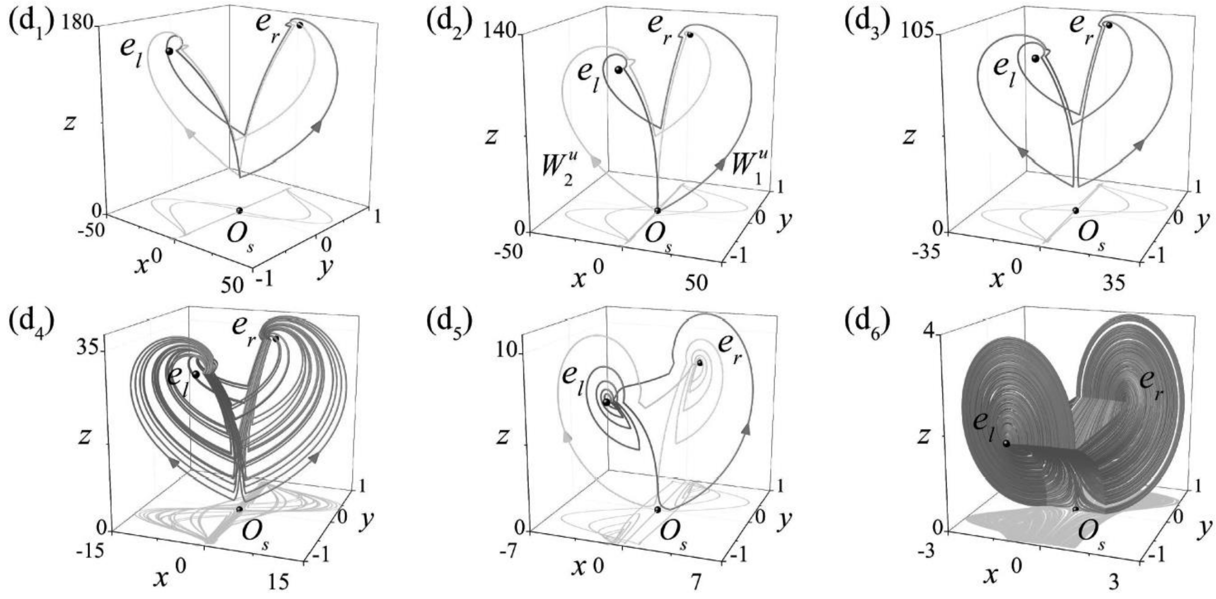


Рис. 2. Фазовые портреты системы (1), соответствующие значениям параметра
$d = d_1, d_2, d_3, d_4, d_5, d_6$ на рис. 1.

Литература

1. Belykh V.N., Barabash N.V., Belykh I.V. A Lorenz-type attractor in a piecewise-smooth system: Rigorous results // Chaos. 2019. Vol. 29, No. 10. P. 103108. DOI: 10.1063/1.5115789.
2. Belykh V.N., Barabash N.V., Belykh I.V. Sliding homoclinic bifurcations in a Lorenz-type system: Analytic proofs // Chaos. 2021. Vol. 31, No. 4. P. 043117. DOI: 10.1063/5.0044731.
3. Белых В.Н., Барабаш Н.В., Белых И.В. Бифуркации хаотических аттракторов в кусочно-гладкой системе лоренцевского типа // Автоматика и телемеханика. 2020. № 8. С. 29–39.

ПАЧЕЧНАЯ АКТИВНОСТЬ В МОДЕЛИ НЕЙРОН-ГЛИАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ[1*]

Н.В. Барабаш[1,2], С.В. Стасенко[1], Т.А. Леванова[1]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Волжский государственный университет водного транспорта*

В докладе рассматривается новая феноменологическая модель нейрон-глиального взаимодействия, построенная на основе модели кратковременной синаптической пластичности. Показано, что данный тип взаимодействия может приводить к возникновению пачечной активности, наблюдаемой в биологических экспериментах, а значит может играть важную роль в понимании сложной динамики нейронных сетей.

Ключевые слова: нейрон, синаптическая пластичность, астроцит, пачечная активность.

1. Введение

Кратковременная синаптическая пластичность (STSP) – это временное увеличение или снижение эффективности синаптической передачи во временном масштабе от нескольких миллисекунд до нескольких минут в ответ на кратковременный стимул [1]. Такие изменения синаптической эффективности влияют на интеграцию пресинаптических импульсов в постсинаптическом нейроне, тем самым влияя на динамику мозга, процессы обучения и памяти. Динамика STSP в различных областях головного мозга может быть описана с помощью модели Цодыкса-Маркрама (ТМ) [1, 2], параметры которой определяются экспериментально в зависимости от типа нейронов [3]. Однако, ТМ-модель не может демонстрировать устойчивую пачечную активность, которая часто сопровождает как нормальные, так и патологические процессы в мозге [4 – 6]. В нашем докладе мы предлагаем расширенную ТМ-модель с дополнительным уравнением, учитывающим влияние астроцитов на синаптическую передачу. С помощью численного исследования построенной модели были получены переходы от устойчивой тонической к устойчивой регулярной и хаотической пачечной активности. Полученные результаты говорят в пользу справедливости гипотезы о существенной роли глиальных клеток в работе головного мозга [7].

2. Модель

Рассмотрим четырёхмерную модель нейрон-глиального взаимодействия в виде

$$\begin{aligned} \tau\dot{E} &= -E + \alpha \ln\left(1 + e^{\frac{JuxE+I_0}{\alpha}}\right), \\ \dot{x} &= \frac{1-x}{\tau_D} - uxE, \\ \dot{u} &= \frac{U(y)-u}{\tau_f} + U(y)(1-u)E, \\ \dot{y} &= -\frac{y}{\tau_y} + \beta H(x), \end{aligned} \tag{1}$$

где $E(t)$ – средняя частота активности популяции идентичных возбуждающих нейронов, $x(t)$ – концентрация нейротрансмиттера, $u(t)$ – вероятность высвобождения нейротрансмиттера, и $y(t)$ – концентрация глиатрансмиттера, а α, β и J – положительные постоянные. Функции $U(y) = U_0 + \frac{\Delta U_0}{1+e^{-50(y-0.5)}}$ с параметрами $U_0, \Delta U_0$, и $H(x) = \frac{1}{1+e^{-20(x-0.9)}}$ – представляют собой сигмоидальные функции, моделирующие активацию u и y, соответственно. Положительные коэффициенты τ, τ_D, τ_f и τ_y отвечают за времена релаксации и лежат в диапазоне от 0.01 до

[1*] Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-72-10128).

1.8, что соответствует различным временным масштабам активности. Постоянная I_0, отвечающая за глобальное торможение, в настоящей работе рассматривается в качестве управляющего параметра.

Построенная модель (1) может демонстрировать богатый набор временных паттернов от состояния покоя (соответствующего устойчивому состоянию равновесия) и тонической активности (соответствующей устойчивому предельному циклу периода 1) до режимов регулярной и нерегулярной пачечной активности (соответствующих устойчивым предельным циклам большого периода и хаотическим аттракторам). В докладе даётся описание этих режимов, а также рассматриваются бифуркации перехода между ними. В частности, было численно установлено, что увеличение I_0 приводит к увеличению количества спайков в одной пачке [см. Рис.1 (a), (b)], и после некоторого критического значения $I_0^* \approx -1{,}7392$ происходит переход от пачечной активности к тонической [см. Рис.1 (c)].

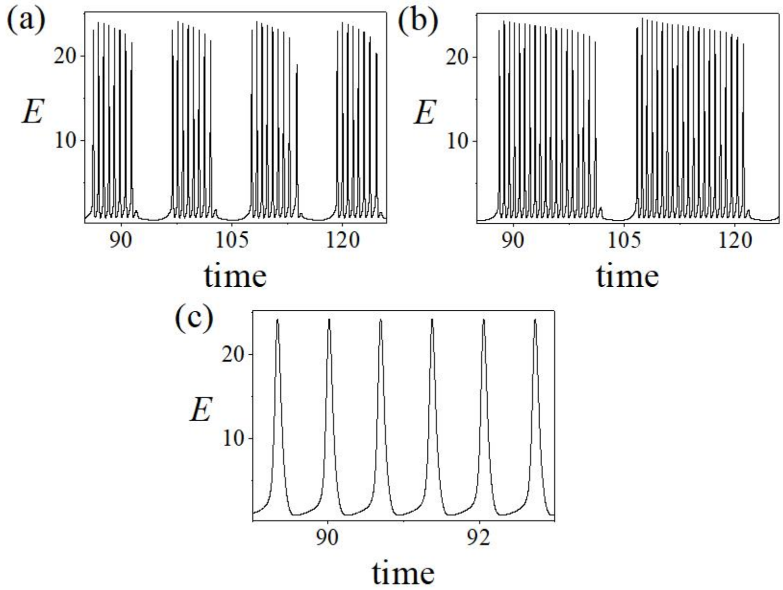


Рис. 1. Временные реализации $E(t)$ при различных значениях параметра I_0. (a) При $I_0 = -1.7415$, система (1) демонстрирует нерегулярную пачечную активности с 8-9 спайками в среднем на пачку. (b) При увеличении управляющего параметра до $I_0 = -1.74$ происходит увеличение среднего числа спайков в пачке. (c) При $I_0 = -1.7385$ (после некоторого бифуркационного значения $I_0 = I_0^*$) система (1) демонстрирует устойчивую тоническую активность.

Литература

1. Tsodyks M., Markram H. The neural code between neocortical pyramidal neurons depends on neurotransmitter release probability // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 1997, Vol. 94, No. 2. P. 719–723. DOI: 10.1073/pnas.94.2.719.
2. Markram H., Tsodyks M. Redistribution of synaptic efficacy between neocortical pyramidal neurons // Nature. 1996, Vol. 382. P. 807–810. DOI: 10.1038/382807a0.
3. Wang Y. et al. Heterogeneity in the pyramidal network of the medial prefrontal cortex // Proc. Nat Neurosci. 2006, Vol. 9, P. 534–542. DOI: 10.1038/nn1670.
4. Meister M. et al. Synchronous bursts of action potentials in ganglion cells of the developing mammalian retina // Science. 1991, Vol. 252, No. 5008. P. 939–943. DOI: 10.1126/science.2035024
5. Krahe R., Gabbiani F. Burst firing in sensory systems // Nature Reviews. 2004, Vol. 5. P. 13–23. DOI: 10.1038/nrn1296.
6. Axmacher N. et al. Memory formation by neuronal synchronization // Brain research reviews. 2006, Vol. 52, No. 1. P. 170–182. DOI: 10.1016/j.brainresrev.2006.01.007.
7. Araque A. et al.. Tripartite synapses: glia, the unacknowledged partner // Trends in neurosciences. 1999, Vol. 22, No. 5. P. 208–215. DOI: 10.1016/S0166-2236(98)01349-6.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ГЛОБАЛЬНОГО ПОИСКА НА ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ[1*]

К.А. Баркалов[1], И.Г. Лебедев[1], М.А. Усова[1], Д.И. Романова[2], Д.А. Рязанов[2], С.В. Стрижак[2]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Институт системного программирования им. В.П. Иванникова РАН*

В работе рассматривается применение алгоритмов глобальной оптимизации в сочетании с машинным обучением к проблеме поиска оптимальных значений параметров в задаче моделирования наклонного потока. В качестве целевой функции в задаче оптимизации рассматривается среднеквадратичная ошибка рассчитанного профиля скорости потока. Аналитическая форма этой функции неизвестна, и расчет ее значений требует трудоемкого численного моделирования. Оптимальные значения коэффициентов модели турбулентности были найдены с помощью алгоритма глобального поиска. Для ускорения процедуры оптимизации целевая функция была аппроксимирована с помощью искусственной нейронной сети.

Ключевые слова: глобальная оптимизация; искусственные нейронные сети; аппроксимация функций.

1. Введение

Изменению климата сопутствуют опасные природные явления, которые происходят все чаще и чаще. Изучение этих вопросов состоит из построения математических моделей и анализа геофизических данных, а также данных численных и натурных экспериментов. Современный тренд анализа геоданных связан с использованием алгоритмов машинного обучения и искусственных нейронных сетей.

В работе рассматривались явления схода оползней, селей и лавин. Проблема прогноза данных явлений является актуальной задачей, т.к. моделирование позволяет прогнозировать разрушения, правильно располагать защитные сооружения и жизненно важные объекты. В модель склоновых потоков, как правило, входят несколько параметров, значения которых нельзя указать заранее, но можно выбрать, исходя из соответствия расчета по модели и имеющихся экспериментальных данных. Подобная задача является задачей глобальной оптимизации с целевой функцией вида черный ящик. При помощи алгоритма глобальной оптимизации подбираются коэффициенты модели турбулентности для склоновых потоков.

2. Постановка задачи

Процесс выбора оптимального набора параметров модели склоновых потоков соответствует задаче глобальной оптимизации вида

$$\begin{gathered}\varphi(y^*) = \min\{\varphi(y) : y \in D\} \\ D = \{y \in R^N : a_i \leq y_i \leq b_i, 1 \leq i \leq N\}\end{gathered} \tag{1}$$

в предположении, что целевая функция $\varphi(y)$ удовлетворяет условию Липшица, что является типичным условием и используется во многих методах глобальной оптимизации [1-4]. В качестве целевой функции $\varphi(y)$ в задаче глобальной оптимизации (1) рассматривается функция потерь (2), представляющая собой среднеквадратическую ошибку рассчитанного профиля скорости потока на выходной плоскости из экспериментального профиля.

[1*] Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 19-07-00242.

$$L_{RMSE} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{\left(v_{EXP}^{i} - v_{k-\omega\, SST}^{i}\right)^2}{N}} \tag{2}$$

Не ограничивая общности с использованием кривых Пеано многомерная задача (1) была сведена к одномерной задаче вида

$$\varphi(y^*) = \varphi(y(x^*)) = \min\{\varphi(y(x)) : x \in [0,1]\},$$

удовлетворяющей равномерному условию Гёльдера.

3. Аппроксимация

В связи с ростом производительности современных суперкомпьютеров наблюдается и усложнение математических моделей, что делает выполнение даже единичного модельного расчета вычислительно затратной операцией. Невозможность выполнения большого количества поисковых испытаний требует применения эффективных алгоритмов поиска. Выбор оптимальных значений коэффициентов осуществлялся с использованием эффективного алгоритма глобального поиска (АГП) для решения липшицевых задач глобальной оптимизации [1, 5].

Для ускорения процедуры оптимизации строилась аппроксимация целевой функции при помощи регрессии нейронной сети (NNR). На первом этапе поиска АГП работал с целевой функцией как с прямым методом. Затем на основе накопленной информации строилась аппроксимация целевой функции. Это приближение использовалось на втором этапе поиска.

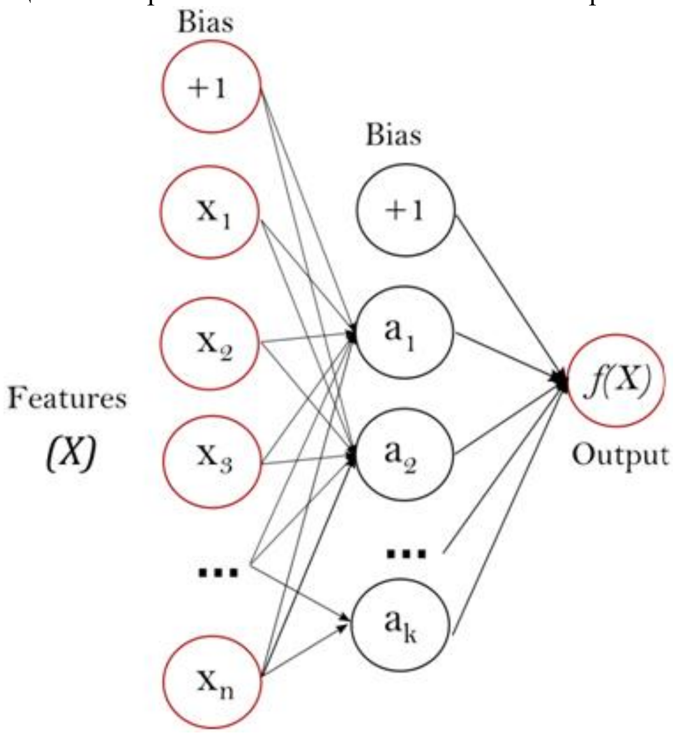


Рис. 1. Трехслойный персептрон со скалярным выходом (source https://scikit-learn.org)

Нейронные сети как аппроксиматоры были реализованы во многих библиотеках машинного обучения. В настоящем исследовании для построения аппроксимации целевой функции использовалась трехслойная искусственная нейронная сеть прямой связи с одним скрытым слоем и алгоритмом обратного распространения ошибки в качестве обучающего алгоритма [6, 7]. Во всех экспериментах использовался класс MLPRegressor из библиотеки машинного обучения scikit-learn, реализующий многослойный перцептрон (MLP), который обучается с помощью обратного распространения ошибок без функции активации в выходном слое [8]. MLP с одним скрытым слоем со скалярным выходом показан на рис. 1.

В ходе проведенных экспериментов по вариации параметров сети была выбрана следующая сетевая архитектура:

```
model = MLPRegressor(activation='logistic',
                     solver='lbfgs',
                     alpha=0.001,
                     hidden_layer_sizes=(20,),
                     max_iter=5000,
                     tol=10e-6,
                     random_state=10)
```

Алгоритм глобального поиска с использованием аппроксимации целевой функции реализован в виде отдельного модуля системы Globalizer [9].

4. Результаты экспериментов

Моделирование проводилось на суперкомпьютере Нижегородского университета им. Лобачевского (операционная система Linux CentOS 7.2). Каждый узел кластера включал в себя два процессора Intel Sandy Bridge E5-2660 2,2 ГГц, 64 ГБ ОЗУ; центральный процессор имел 8 ядер. Для численного решения модельной задачи использовалось программное обеспечение CFD с открытым исходным кодом OpenFOAM v2012 [10]. Одно вычисление целевой функции при заданных значениях параметров занимало в среднем 15 минут с использованием 8 MPI-процессов на узел.

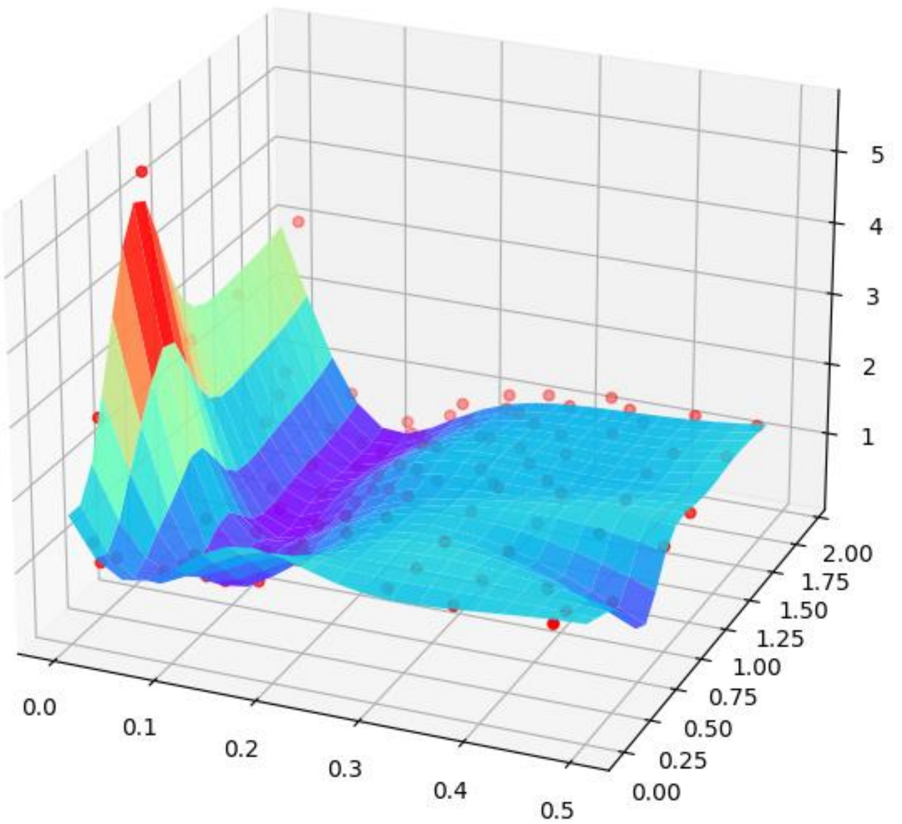


Рис. 2. Значения целевой функции (красные точки) и аппроксимационный график, построенный с помощью нейронной сети

Оптимальные значения параметров корректировались для пар, значения остальных параметров фиксировались. Сначала была выбрана пара наиболее важных параметров β^* и a_1.

В первом эксперименте АГП применялся без использования аппроксимации. Параметры метода были заданы $r = 3$ и $\varepsilon = 10^{-3}$. За 24 часа было выполнено 100 итераций алгоритма; требуемая точность не была достигнута.

Во втором эксперименте для решения той же проблемы был применен АГП с построением аппроксимации. Сначала было выполнено $K_1 = 30$ итераций алгоритма глобального поиска. После этого был запущен алгоритм, использующий аппроксимацию нейронной сетью. Всего было выполнено $K_1 + K_2 = 65$ итераций алгоритма, после чего алгоритм остановился по точности. В результате было найдено лучшее значение целевой функции 0,375. Общее время поиска решения было сокращено до 16 часов, что позволило получить более точное решение задачи в приемлемые сроки.

Пробные точки и аппроксимирующая функция, построенные по этим точкам с помощью нейронной сети, представлены на рис. 2 (параметры β^* и a_1. варьировались). Отчетливо видно наличие нескольких локальных минимумов.

Найденные наилучшие значения параметров β^* и a_1.были исправлены, после чего была произведена оптимизация параметров α_{k1}, $\alpha_{\omega1}$ и α_{k2}, $\alpha_{\omega2}$. Оптимизация этих параметров не привела к значительному улучшению целевой функции: было получено значение 0,3645.

Результаты данных экспериментов позволили найти оптимальные значения шести параметров модели турбулентности с использованием открытой платформы OpenFOAM и Globalizer.

Литература

1. Sergeyev Y. D., Strongin R. G., Lera D. Introduction to global optimization exploiting space-filling curves. Springer Briefs in Optimization. Springer, New York, 2013.
2. Evtushenko Y., Posypkin M. A deterministic approach to global box-constrained optimization // Optimization Letters. 2013. Vol. 7. No. 4. P. 819-829.
3. Jones D.R. The DIRECT global optimization algorithm. The Encyclopedia of Optimization, P. 725–735. Springer, Heidelberg, 2009.
4. Paulavicius R., Zilinskas J. and Grothey A. Investigation of selection strategies in branch and bound algorithm with simplicial partitions and combination of Lipschitz bounds // Optimization Letters. 2010. Vol. 4. No. 2. P. 173-183.
5. Strongin R.G., Sergeyev Y.D. Global optimization with non-convex constraints. Sequential and parallel algorithms. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000.
6. Cybenko G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function // Mathematics of Control, Signals, and Systems. 1989. Vol. 2. No. 4. P. 303-314. DOI: 10.1007/BF02551274.
7. Hassoun M. Fundamentals of Artificial Neural Networks. MIT Press, 1995.
8. Hecht-Nielsen R. Theory of the backpropagation neural network // IJCNN International Joint Conference on Neural Networks. 1989. P. 593-605. DOI: 10.1109/ijcnn.1989.118638.
9. Gergel V.P. and Barkalov K.A. and Sysoyev A.V. A novel supercomputer software system for solving time-consuming global optimization problems // Numerical Algebra, Control & Optimization. 2018. Vol. 8. No. 1. P. 47-62.
10. Moukalled F. and Mangani L. and Darwish M. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab. Springer, 2016. DOI: 10.1007/978-3-319-16874-6.

РАЗРУШЕНИЕ СИНХРОНИЗАЦИИ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ЦЕПОЧКАХ ФАЗОВЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ С ЛОКАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ТИПА КУРАМОТО-САКАГУЧИ[1*]

М.И. Болотов[1], Л.А. Смирнов[1], Г.В. Осипов[1], А.С. Пиковский[2,1]

[1]Научно-образовательный математический центр «Математика технологий будущего», Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Россия
[2]Потсдамский университет, Германия

В данной работе рассматривается процесс разрушения режима полностью синхронных вращений в цепочках фазовых осцилляторов Курамото-Сакагучи с беспорядком. Определены бифуркации, приводящие к нарушению устойчивости синхронного режима в зависимости от фазового сдвига и длины цепочки. Показано, что цепочка при увеличении степени беспорядка после исчезновения синхронного режима демонстрирует турбулентную динамику с нерегулярным поведением синхронных кластеров.

Ключевые слова: синхронизация, кластеры, локальная связь, фазовый осциллятор, беспорядок, турбулентность.

1. Введение

В настоящее время системы связанных осцилляторов по-прежнему остаются актуальной темой для теоретических и экспериментальных исследований. Обусловлено это, прежде всего, тем, что данные системы представляют собой базовые модели в различных областях современной науки и техники. В самой простой ситуации обычно рассматриваются решетки только с локальной связью между соседними ячейками [1]. Можно выделить два больших класса осцилляторных ансамблей, изучаемых в литературе. Речь идет о регулярных и неупорядоченных цепочках. В первом случае основное внимание уделяется свойствам пространственных структур и линейных и нелинейных волн. Здесь в качестве основной модели выступает дискретный аналог комплексного уравнения Гинзбурга-Ландау, для которого в настоящий момент уже известна относительно полная классификация регулярных и нерегулярных режимов [2]. Тем не менее, даже в такой достаточно хорошо изученной области при нестандартных комбинациях параметров могут быть найдены неожиданные решения в виде локализованных нелинейных волновых структур.

Менее исследованными являются проблемы синхронизации в неупорядоченных решетках. В данной области существенного продвижения удалось достигнуть в работах [3, 4], в которых было описано возникновение кластеров. Однако отметим, что проведенный анализ ограничивался лишь случаем синусоидальной связи между фазовыми осцилляторами, что соответствует чисто диссипативному пределу.

В данной работе мы выходим за рамки этих исследований, в основном рассматривая неупорядоченные цепочки фазовых осцилляторов Курамото-Сакагучи как простейший случай неупорядоченных решеток. Здесь мы рассматриваем беспорядок в собственных частотах осцилляторов, взяв в качестве основного параметра фазовый сдвиг в связи, определяющий, является ли взаимодействие притягивающим или нейтральным. В рамках данного исследования мы численно определяем существование и устойчивость синхронных состояний. Стратегия состоит в том, чтобы начать с исчезающе малого беспорядка, когда синхронные состояния имеют регулярный гладкий профиль, и численно протягивать эти стационарные решения, увеличивая уро-

[1*] Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 17-12-01534 (численные результаты), и Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 19-52-12053 (аналитические результаты).

вень беспорядка для различных наборов частот, проверяя устойчивость полученных решений и определяя бифуркации, приводящие к потере устойчивости.

2. Модель

В качестве базовой модели цепочки локально связанных N элементов с беспорядком используется модель осцилляторов Курамото-Сакагучи [5, 6], описываемая фазой φ_n, динамика которой задается системой уравнений

$$\dot{\varphi}_n = \sigma\omega_n + \sin(\varphi_{n+1} - \varphi_n - \alpha) + \sin(\varphi_{n-1} - \varphi_n - \alpha) + 2\sin\alpha, \tag{1}$$

где собственные частоты ω_n представляют собой реализации случайной величины, удовлетворяющей равномерному распределению на отрезке $[-0.5, 0.5]$, параметр σ определяет степень беспорядка цепочки, а фазовый сдвиг α задает тип взаимодействия между элементами цепочки. Граничные условия в цепочке (1) задаются следующим образом:

$$\varphi_0 = \varphi_1,\ \varphi_N = \varphi_{N+1}. \tag{2}$$

3. Разрушение синхронизации

В отсутствии беспорядка при $\sigma = 0$ синхронным режимом в системе (1) будет тривиальное решение $\varphi_1 = \dots = \varphi_N = 0$. При $0 \le \alpha < \pi/2$ оно устойчиво [5]. При введении беспорядка ($\sigma > 0$) устойчивый синхронный режим начинает трансформироваться, пока не теряет свою устойчивость при некотором критическом значении $\sigma_{cr}(\alpha)$. Показано, что потеря устойчивости может происходить в результате бифуркации Андронова-Хопфа (рис. 1), когда рождается устойчивое нестационарное синхронное состояние колебательного характера, которое в дальнейшем разрушается, при этом возникает кластерный вращательный режим. Количество кластеров в дальнейшем увеличивается, и цепочка начинает демонстрировать хаотическую динамику с нерегулярным поведением фаз осцилляторов. Наиболее вероятным переход такого рода является при небольших значениях параметра фазового сдвига $\alpha < \pi/4$, что соответствует большей степени диссипации в системе.

Заметим, что величина фазового сдвига, при котором синхронный вращательный режим наиболее долго остается устойчивым при увеличении степени беспорядка в цепочке есть $\alpha = \pi/4$.

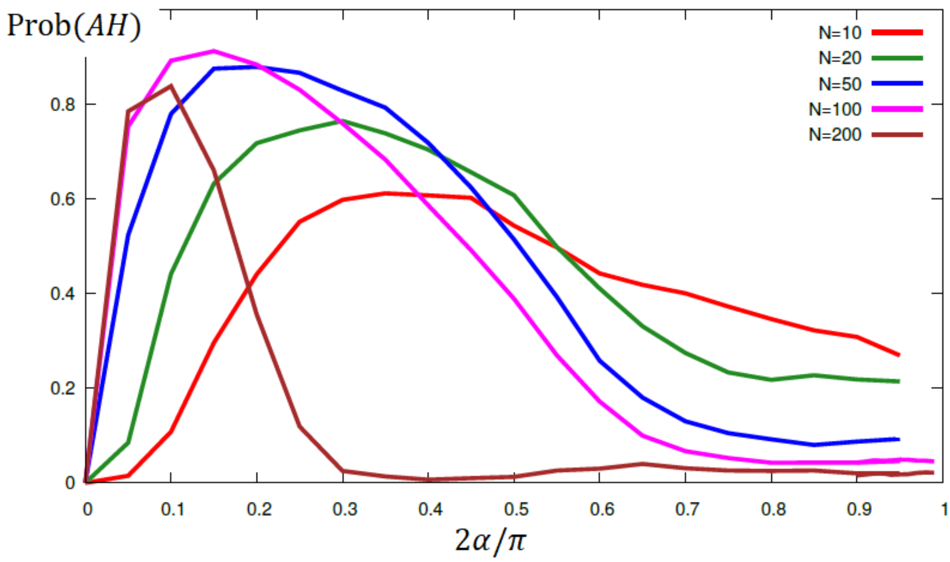


Рис. 1. Вероятность потери устойчивости синхронного состояния в цепочке (1) в результате бифуркации Андронова-Хопфа для различных значений длины цепочки N в зависимости от параметра фазового сдвига α

Литература

1. Afraimovich V. S., Nekorkin V. I., Osipov G. V., Shalfeev V. D. Stability, structures and chaos in nonlinear synchronization networks, World Scientific, Singapore, 1994.
2. Aranson I., Kramer L. The world of the complex Ginzburg-Landau equation // Rev. Mod. Phys. 2002. V. 74, P. 99.
3. Kogan O., Rogers J. L., Cross M. C., Refael G. Renormalization group approach to oscillator synchronization // Phys. Rev. E. 2009. V. 80, P. 036206.
4. Lee T. E., Refael G., Cross M. C., Kogan O., Rogers J. L. Universality in the one-dimensional chain of phase-coupled oscillators // Phys. Rev. E. 2009. V. 80, P. 046210.
5. Ermentrout B., Kopell, N. Frequency plateaus in a chain of weakly coupled oscillators // SIAM J. Math. Anal. 1984. V. 15(2), P. 215.
6. Bolotov M., Levanova T., Smirnov L., Pikovsky A. Dynamics of disordered heterogeneous chains of phase oscillators // Cybernetics and Physics. 2019. V. 8, P. 215.

ОБОБЩЕННЫЙ $\mathcal{H}_2$-КОНСЕНСУС В ИМПУЛЬСНЫХ МНОГОАГЕНТНЫХ СИСТЕМАХ[1*]

Е.С. Бубнова

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Рассматривается задача достижения обобщённого $\mathcal{H}_2$-консенсуса в сети импульсных динамических линейных систем, которые представляют собой линейные системы непрерывного времени, состояние которых претерпевает конечные скачкообразные разрывы в дискретные моменты времени. Сформулированы достаточные условия достижения обобщённого $\mathcal{H}_2$-консенсуса в сети идентичных агентов с постоянной топологией связей в терминах LMI.

Ключевые слова: многоагентные системы, импульсные системы, консенсус, обобщенная $\mathcal{H}_2$-норма.

1. Введение

Исследование условий достижения консенсуса в многоагентных системах привлекает в последние десятилетия все большее число исследователей. Задачам достижения консенсуса посвящено большое количество работ, некоторые из них перечислены в обзорах [1, 2]. Особый интерес представляет случай, когда агенты испытывают воздействие неопределённых внешних возмущений. Одним из подходов к исследованию таких систем является теория $\mathcal{H}\infty$-управления [3], которая позволяет оценить «средние значения» невязки целевого выхода. Однако часто на практике возникает необходимость оценки максимально возможных значений целевых выходов. В этом случае естественным подходом является использование обобщённой $\mathcal{H}2$-нормы [4]. В настоящей работе получены достаточные условия достижения обобщённого $\mathcal{H}2$-консенсуса в сети линейных импульсных агентов.

2. Обобщенный $\mathcal{H}_2$-консенсус в импульсных многоагентных системах

Рассмотрим многоагентную систему, в которой динамика каждого агента описывается линейной системой дифференциальных уравнений со скачками вида

$$\begin{aligned} &\dot{x}_i = A_c x_i + B_c v_i, && t \in [t_k, t_{k+1}), \quad t_{k+1} = t_k + h, \\ &x_i(t_k) = A_d x_i(t_k - 0) + B_d w_{k,i} + H_d u_{k,i}, && i = 1, \dots, N, \end{aligned} \tag{1}$$

где $x_i \in \mathbb{R}_2^{n_x}$ – состояние объекта, $v_i(t) \in L_2([0, +\infty), \mathbb{R}_2^{n_v})$ – непрерывное возмущение, $\{w_{k,i}\} \in l_2([0, +\infty), \mathbb{R}_2^{n_w})$ – дискретное возмущение, $u_{k,i} \in \mathbb{R}^{n_u}$ – управление. A_c, B_c, A_d, B_d, H_d – стационарные матрицы соответствующих размерностей. Топология сети описывается связным неориентированным графом с матрицей Лапласа $L = [l_{ij}]$ и матрицей смежности $\mathcal{A} = [a_{ij}]$.

Рассмотрим задачу достижения консенсуса по состояниям агентов x_i, $i = 1, \dots, N$, в многоагентной системе (1). Консенсус в сети (1) означает, что состояния x_i агентов должны сойтись к общему значению либо к общей заданной траектории

$$\lim_{t\to\infty} |x_i(t) - x_j(t)| = 0 \qquad \forall i, j = 1, \dots, N. \tag{2}$$

Условие достижения консенсуса (2) можно переписать в эквивалентном виде:

$$\lim_{t\to\infty} |z_i(t)| = 0, \qquad z_i = x_i - \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} x_j, \qquad \forall i = 1, \dots, N, \tag{3}$$

где целевой выход z_i характеризует отклонение состояния i-го агента от среднего значения.

В данной системе на каждый агент действует некоторое, в общем случае неизвестное, внешнее возмущение, поэтому будем рассматривать задачу гарантированного достижения

[1*] Работа выполнена при поддержке министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0729-2020-0055) и научно-образовательного центра «Математика технологий будущего» (проект № 075-02-2021-1394).

консенсуса в сети. В качестве критерия достижения консенсуса выберем следующий функционал

$$J(u_1, \dots, u_N) = \sup_{(x_0, v, w) \neq 0} \frac{\max_{i=\overline{1,N}} \sup_{t \geq 0} |z_i(t)|_2}{\sqrt{\|v\|_{L_2}^2 + \|w\|_{l_2}^2 + \xi_0^T R \xi_0}}, \quad (4)$$

где $v = column(v_1, v_2, \dots, v_N)$, $w = column(w_1, w_2, \dots, w_N)$, $\xi = column(x_1, x_2, \dots, x_N)$, $\xi_0 = \xi(0)$, $R = R^T > 0$ – весовая матрица, которая задает приоритет между внешними возмущениями и компонентами начального состояния. Консенсус с минимальным значением критерия (4) будем называть обобщённым $\mathcal{H}_2$-консенсусом, поскольку функционал (4) есть обобщённая $\mathcal{H}_2$-норма расширенной системы.

Введём в рассмотрение распределённый протокол управления по усреднённым значениям состояний соседних агентов в момент времени $t_k - 0$:

$$u_{k,i} = \Theta \sum_{j=1}^{N} a_{ij}(x_i(t_k - 0) - x_j(t_k - 0)). \quad (5)$$

Поставим задачу синтеза оптимального управления, обеспечивающего обобщённый $\mathcal{H}_2$-консенсус в сети (1), замкнутой регулятором (5). Определим следующие операторы:

$$\begin{gathered} \mathcal{F}^0(t) = e^{A_c t} A_d, \qquad \mathcal{F}^1(t) = \lambda_{\min} e^{A_c t} H_d, \qquad \mathcal{F}^2(t) = \lambda_{\max} e^{A_c t} H_d, \\ \mathcal{P}(t) = \int_0^t e^{A_c(t-\tau)} B_c B_c^T e^{A_c^T(t-\tau)} d\tau + e^{A_c t} B_d B_d^T e^{A_c^T t}, \end{gathered} \quad (6)$$

где $\lambda_{\min}$ и $\lambda_{\max}$ – минимальное ненулевое и максимальное собственные числа матрицы Лапласа соответственно.

Теорема 1. Предположим, что матрицы $Y = Y^T > 0$ и Z являются решениями задачи полуопределённого программирования

$$\begin{gathered} \inf \gamma^2 \\ \begin{bmatrix} Y & * \\ \mathcal{F}^0(h)Y + \mathcal{F}^j(h)Z & Y - \mathcal{P}(h) \end{bmatrix} \geq 0, \quad j = 1,2, \\ \begin{bmatrix} Y & * \\ \mathcal{F}^0(t)Y + \mathcal{F}^j(t)Z & \gamma^2 I - \mathcal{P}(t) \end{bmatrix} \geq 0, \quad \begin{matrix} j = 1,2, \\ t \in [0, h]. \end{matrix} \end{gathered} \quad (7)$$

Тогда существует распределенный протокол управления вида (5) с параметрами $\Theta = ZY^{-1}$, обеспечивающий в сети (1) обобщённый $\mathcal{H}_2$-консенсус.

Отметим, что для вычисления искомых параметров обратной связи нужно провести дискретизацию полученной задачи полуопределённого программирования. Решив дискретный аналог данной задачи относительно неизвестных Y, Z и γ^2, найдём матрицы параметров регулятора $\Theta = ZY^{-1}$.

3. Заключение

В данной работе сформулированы достаточные условия достижения обобщённого $\mathcal{H}_2$-консенсуса в сети идентичных линейных гибридных агентов с постоянной топологией связи.

Литература

1. G. Antonelli. Interconnected dynamic systems: An overview on distributed control. IEEE Control Systems Magazine, 33(1):76–88, 2013.
2. S. S. Kia, B. Van Scoy, J. Cortes, R. A. Freeman, K. M. Lynch, and S. Martınez, “Tutorial on dynamic average consensus: The problem, its applications, and the algorithms,” IEEE Control Systems Magazine, vol. 39, no. 3, pp. 40–72, Jun. 2019.
3. P. Lin and Y.M. Jia. Distributed robust H_∞ consensus control in directed networks of agents with time-delay. Systems and Control Letters, 57(8):643–653, 2008.
4. Д. В. Баландин, М. М. Коган, Оптимальное по Парето обобщённое H_2-управление и задачи виброзащиты // Автоматика и телемеханика, 2017, № 8, С. 76–90.

ГИБРИДНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ КВАДРАТИЧНОЙ ЗАДАЧИ О НАЗНАЧЕНИЯХ

М.А. Быкова, Н.А. Хлопцев

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В работе были изучен и применен гибридный алгоритм решения квадратичной задачи о назначениях, включающий в себя эволюционно-генетический алгоритм, а также поиск с запретами с различными комбинациями операторов и параметров. Были найдены оптимальные решения и близкие к оптимальным для известных тестовых примеров.

Ключевые слова: гибридный алгоритм, эволюционно-генетический алгоритм, поиск с запретами, табу поиск, квадратичная задача о назначениях, бинарное кодирование.

1. Введение

В 1961 году Леон Штайнберг поставил задачу “проводки задней панели” [1]. Она состоит в том, чтобы расположить различные устройства на панели с предварительно подготовленными позициями, которые имеют некоторое расстояние между собой. Устройства на этих позициях соединяются друг с другом некоторым количество проводов. Необходимо найти такое расположение устройств, чтобы суммарная длина проводов была минимальной. В годы развития компьютерной промышленности данная задача была одной из самых обсуждаемых в научном обществе. Несмотря на то, что проблема была поставлена около полувека назад, она не теряет своей актуальности – компьютерная промышленность еще развивается, а оборудование для вычислительных систем постоянно обновляется.

Данную задачу можно свести к квадратичной задаче о назначениях. Задача является NP-трудной [2], поэтому имеет смысл использовать эвристические алгоритмы. В данной работе был рассмотрен эволюционно-генетический алгоритм с последующими улучшениями решений.

2. Математическая постановка задачи

Исходные параметры:

n – количество устройств и количество мест расположения устройств.

$W = (w_{ij}), i = \overline{1,n}, j = \overline{1,n}$ – количество проводов, необходимых для соединения элементов i и j.

$D = (d_{ij}), i = \overline{1,n}, j = \overline{1,n}$ – расстояние между позициями i и j.

Варьируемые параметры:

$p = (p_1, \dots, p_n) \in \Pi_n$ – перестановка, отображающая расположение устройства i на позиции $p_i \in p, i = \overline{1,n}$.

Ограничения:

$n \in N$,

$(w_{ij}) \in N, i = \overline{1,n}, j = \overline{1,n}$,

$(d_{ij}) \in N, i = \overline{1,n}, j = \overline{1,n}$.

Критерий:

$\min\limits_{p \in \Pi_n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} w_{ij} d_{p(i)p(j)}$.

3. Гибридный алгоритм

Идея заключается в том, чтобы использовать эволюционно-генетический алгоритм, для нахождения оптимальных решений, и, если были найдены только близкие к оптимальным, несколько лучших из них передаются в поиск с запретами. Далее подробно описаны оба алгоритма.

3.1. Эволюционно-генетический алгоритм

Эволюционно-генетический алгоритм представляет собой популяционно-генетический подход к решению задачи поиска, основанный на математическом моделировании биологических механизмов и процессов в живой природе с помощью принципов популяционной генетики. Выделяют 5 главных этапов алгоритма: формирование начальной популяции, воспроизводство новых особей, оценивание и обработка ограничений, формирование следующего поколения путем отбора [3].

В данной работе для кодирования решения была рассмотрено бинарное кодирование, которое представляет собой бинарную строку, кодирующую переход от текущего решения к новому [4]. Таким образом на каждом поколении алгоритма исследуется разная окрестность текущего решения, и если найдется решение лучше текущего, то оно заменяется найденным. Также были рассмотрены классические операторы алгоритма, такие как: перестановочный кроссовер, β-турнир, утопия [5]. Формирование начальной популяции и выбор родительских пар – случайные. Условие остановки алгоритма – лучшее решение не меняется на протяжении нескольких поколений. Результатом работы алгоритма будет вывод особи, с наилучшей приспособленностью, то есть такая особь, у которой значение целевой функции наименьше, среди всех рассмотренных в алгоритме.

3.2. Поиск с запретами

Поиск с запретами (также известный, как табу-поиск) является мета-алгоритмом, позволяющим “выйти” из локального оптимума в задачах комбинаторной оптимизации. Его основная идея заключается в использовании метода локального поиска, с последующими ограничениями (запретами) перехода к уже посещенным решениям [6-8].

В данной работе для табу-поиска также используется бинарное кодирование, представленное раннее. Вместо того, чтобы в окрестности текущего решения рассматривать другие решения, рассматриваются всевозможные переходы от текущего решения путем перестановки 2 позиций в решении. Каждый такой переход записывается в табу-список, список с запрещенными переходами, запрещающий в дальнейшем его использование на определенное количество прошедших итераций локального поиска L, очевидно также, что L – является максимальным размером табу-списка.

4. Вычислительный эксперимент

Для вычислительного эксперимента были выбраны известные задачи из QAPLIB [9]. Вычислительный эксперимент нацелен на выявление лучшей комбинации размера табу-списка L и общего количества итераций табу-поиска. Характеристики ПК, на котором производились эксперименты: ЦП – 8-ядерный процессор с тактовой частотой 4 ГГц (AMD FX-8350), ОЗУ – 12 Гб.

В таблице 1 приведены результаты работы эволюционно-генетического алгоритма на примере различных задач о 12 до 150 и разными конфигурациями алгоритма. Знаком “*” помечены те размерности задач, для которых соответствуют задачи с доказанным оптимальным решением.

Из полученных данных следует, что были найдены оптимальные и близкие к оптимальным решения. Однако для задач размерности 20, 25 и 150 – это не так, их отклонения слишком большие, чтобы быть близкими к оптимальным решениями. Применив к задачам поиск с запретами с различными комбинациями параметров, удалось исправить эту ситуацию, а также улучшить решения других задач. Результаты работы алгоритма приведены в таблице 2. Расшифровка конфигураций TL – размер табу-списка, IT – количество общих итераций, CN – номер решения полученного из эволюционно-генетического алгоритма.

Таблица 1. Результаты эволюционно-генетического алгоритма

Размер	Значение критерия	Отклонение от известного оптимума	Время (мс)
12*	9916	3.67%	40
15*	9896	0%	51
20*	2430	9.79%	111
25*	4620	17.83%	141
30	1869722	2.79%	491
50	5150388	4.11%	1599
64*	116	0%	2675
100	22201914	5.18%	6650
150	8734464	6.88%	20276

Таблица 2. Результаты алгоритма для второго вычислительного эксперимента

Размер	Конфигурация	Значение критерия	Отклонение от известного оптимума	Время (мс)
12*	TL-24 IT-100 CN-1	9552	0%	1
20*	TL-40 IT-50 CN-18	2222	1.35%	7
25*	TL-50 IT-300 CN-19	3866	1.81%	266
30	TL-90 IT-1000 CN-37	1818146	0%	465
50	TL-25 IT-1000 CN-3	4989080	1%	2406
100	TL-50 IT-1000 CN-10	21363208	1.45%	21677
150	TL-450 IT-1000 CN-17	8184912	0.63%	74358

Из полученных данных следует, что поиск с запретами, действительно улучшает решения, полученные эволюционно-генетическим алгоритмом: приводит к оптимальным и близким к оптимальным решениям. Также можно сделать вывод, что оптимальные размеры табу-списка: размерность задачи, удвоенная размерность задачи и утроенная размерность задачи. Количество общих итераций слишком сильно варьируется, а на задачах размерностью более 30 для лучших полученных решений достигает 1000, поэтому имеет смысл рассмотреть поиск с запретами, используя большее количество общих итераций. Однако, очевидно, что это приведет к большему времени выполнения алгоритма. С учетом того, что время выполнения поиска с запретами значительно возрастает с возрастанием размерности задачи (для задачи с размерностью 150 при значении общих итераций 1000 среднее время составило 74695 мс – 1 мин. 14 сек), увеличение итераций может оказаться неэффективным с точки зрения времени выполнения. Поэтому имеет смысл дальнейшее исследование и усовершенствование поиска с запретами.

Литература

1. N. W. Brixius, K. M. Anstreicher The Steinberg Wiring Problem // The sharpest cut: the impact of Manfred Padberg and his work. 2004. P. 293-307. DOI: 10.1137/1.9780898718805.
2. Sahni S., Gonzalez T., P-complete approximation problems // Journal of the Association of Com¬puting Machinery. 1976. Vol. 23. No. 3. P. 555-565. DOI: 10.1145/321958.321975.
3. Батищев Д. И., Костюков В. Е., Неймарк Е. А., Старостин Н. В., Решение дискретных задач с помощью эволюционно-генетических алгоритмов: Учебное пособие. – Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н. И. Лобачевского. 2009. 88 с.
4. Быкова М.А. Многоуровневые методы архитектурно-зависимой декомпозиции в области высокопроизводительных вычислений. Нижний Новгород. 2017. С. 77-82.
5. М.А. Быкова, Н.А. Хлопцев, С.В. Небайкин, Решение квадратичной задачи о назначениях с помощью эволюционно-генетического алгоритма, Математическое моделирование и суперкомпьютерные технологии. Труды XX Международной конференции (Н. Новгород, 23–27 ноября 2020 г.) / Под ред. проф. В.П. Гергеля. – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета. 2020. С.87-88.
6. F. Glover, Tabu search – Part 1 // ORSA Journal on Computing. 1989. Vol. 1. No. 3. P. 190-206. DOI: 10.1287/ijoc.1.3.190.

7. F. Glover, Tabu search – Part 2 // ORSA Journal on Computing. 1989. Vol. 2. No. 1. P. 4-32. DOI: 10.1287/ijoc.2.1.4.
8. Panos M. Pardalos, Franz Rendl, Henry Wolkowicz The Quadratic Assignment Problem: A Survey and Recent Developments // DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science. 1994. Vol. 16. P. 1-42. DOI: 10.1090/dimacs/016
9. Burkard R.E., Karisch S.E., Rendl. F. QAPLIB – A Quadratic Assignment Problem Library // Journal of Global Optimization, Volume 10, Issue 4, 1997. – P. 391–403. DOI: 10.1023/A:1008293323270.

НЕЙРОСЕТЕВОЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ САМОВОЗДЕЙСТВИЯ ВОЛНОВЫХ ПОЛЕЙ В НЕЛИНЕЙНЫХ СРЕДАХ[1*]

Е.П. Васильев, Д.И. Болотов, М.И. Болотов, Л.А. Смирнов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В данной работе рассматривается задача о распространении оптических импульсов в средах с нелинейностью Керра. В качестве математической модели, описывающей процессы распространения оптического импульса выбрано обобщенное параболическое уравнение, которое в безразмерных переменных имеет вид одномерного модифицированного НУШ. Были проведены эксперименты по обучению полносвязной нейронной сети с различными функциями оптимизации. Проведенные эксперименты показали перспективность использования квази-ньютоновской фунции оптимизации L-BGFS над функциями первого порядка в данной задаче.

Ключевые слова: Нелинейное уравнение Шредингера, нейронные сети, глубокое обучение, функции оптимизации.

1. Введение

В последние годы технологии слабого искусственного интеллекта и глубинного обучения, изначально создавшие большой прорыв в компьютерном зрении, активно применяются как в цифровой и промышленной индустрии, так и в различных областях наук, например, в физике [1,2], биологии [3], медицине [4]. В свою очередь, в основе большого числа базовых математических моделей достоверно описывающих фундаментальные явления и процессы в природе, лежат дифференциальные уравнения в частных производных. В связи с этим в настоящее время существенно возрос интерес к использованию нейросетевого моделирования для анализа возможных решений такого рода задач с учетом различных вариантов начальных и граничных условий, а также потенциально нетривиальной геометрии окружения. Идея применения алгоритмов машинного обучения как альтернативы аналитическим методам исследования проблем, возникающих в нелинейной динамике и математической физике не нова [5], однако ранее такой подход был ограничен доступными вычислительными ресурсами и существующими библиотеками. С распространением параллельных вычислений на графических ускорителях и развитием таких инструментов как TensorFlow, Torch резко увеличилась целесообразность и востребованность программных реализаций и развития идей, позволяющих задействовать средства интеллектуальной обработки больших массивов данных при изучении долговременной эволюции полей и классификации режимов их распространения в композитных средах.

В данной работе для апробации поиска направлений модернизации основных концепций использования искусственных нейронных сетей при построении решений уравнений в частных производных рассмотрена задача о самовоздействии волновых пучков и пакетов в нелинейных и неоднородных средах [6]. Математическое описание подобных волновых процессов обычно проводят в рамках параболического приближения, которое неоднократно подтверждало свою эффективность в различных областях классической физики, в частности, в физике плазмы, гидродинамике и нелинейной оптике, а также при изучении распространения радиоволн в ионосфере и анализе передачи электромагнитного излучения по системам, состоящим из открытых резонаторов или волноводов. Стоит особо отметить, что выбор и актуальность обсуждаемой проблемы обусловлены дополнительно еще одним обстоятельством. Несмотря на принципиальное различие в самой природе явлений, если принять во внимание коллективные эффекты, то в квантовой механике и теории конденсированных сред нередко приходят к аналогичным по

[1*] Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России проект FSWR-2021-013 (решение Бюджетной комиссии Минобрнауки России от 14.09.2021 № БК-П/23).

своей структуре уравнениям. Наиболее наглядно это можно продемонстрировать в случае вырожденных квантовых газов (бозе-частиц) в приближении среднего поля для описания возбуждения эволюции и взаимодействия нелинейных когерентных локализованных образований (светлых и темных солитонов, одиночных квантовых вихрей, вихревых пар и вихревых колец) в бозе-эйнштейновском конденсате среднего поля удается ввести комплексную волновую функцию, играющую роль параметра порядка и удовлетворяющую уравнению Гросса-Питаевского, которое в безразмерных единицах идентично нелинейному уравнению Шредингера (НУШ) при наличии в нем нелинейного потенциала, связанного с внешними неоднородностями.

Ниже представлен ряд результатов по использованию полносвязных искусственных нейронных сетей для предсказаний наиболее вероятного сценария распространения оптических волн сквозь кристалл: произведено сравнение построенного прогноза с данными, получаемым путем прямого численного моделирования с помощью принятых стандартных схем расчета.

2. Постановка задачи

Для большей конкретики нами рассматривается задача о распространении оптических импульсов в средах с нелинейностью Керра [6]. При этом в качестве математической модели, описывающей процессы самовоздействия интенсивного лазерного излучения при прохождении через такой кристалл, выбрано обобщенное параболическое уравнение, которое в безразмерных переменных имеет вид модифицированного НУШ [6]:

$$i\,\frac{\partial\psi}{\partial z}-\frac{1}{2}\Delta_{x,y}\psi-\ \delta(x,y)\psi-\frac{\alpha}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\tau^2}-\beta\left(|\psi|^2\psi+\gamma\frac{\partial(|\psi|^2\psi)}{\partial\tau}\right)=0, \qquad (1)$$

где комплексная функция $\psi(\tau,x,y,z)$пропорционально медленно изменяющейся амплитуде огибающей нестационарного квазимонохроматического поля в слабо неоднородном образце диспергирующего материала, а $\delta(x,y)$ представляет собой относительное изменение его диэлектрической проницаемости. В свою очередь, постоянные α и β могут принимать значения ±1 в зависимости от знака дисперсии групповой скорости и нелинейной составляющей показателя преломления, соответственно. В соотношении (1) учтен не только квазистатический кубический отклик среды на приложенное электромагнитное воздействие, отвечающий за первый член заключенного в скобки составного слагаемого в левой части равенства (1), но и эффект волновой нестационарности, который проявляет себя фактически в форме зависимости групповой скорости от интенсивности поля, т.е. как нелинейная дисперсия, и приводит к возникновению второго члена в окруженном скобками выражении. Коэффициент γ, участвующий там в качестве множителя, вычисляется по следующей формуле: $\gamma=k'_\omega(\omega_0)\,/\,\omega_0k''_{\omega_0}(\omega_0)$, где $k(\omega)$ – волновой вектор, ω_0 – центральная (несущая) частота излучения. Стоит отметить, что данный эффект вызывает «самообострение» фронта импульса, вследствие чего происходит формирование ударной волны огибающей. Подчеркнем также, что уравнение (1) допускает обобщение на векторные поля, а также на другие типы нелинейностей. Кроме того, для тех исследований, где это необходимо, в (1) можно принять во внимание старшие производные по τ, т.е. более высокие порядки дисперсии.

Для моделирования процесса распространения оптического импульса в нелинейном кристалле в рамках параболического приближения на основе НУШ (1) разработан целый ряд численных схем [7,8]. Одним из наиболее популярных и эффективных алгоритмов является метод расщепления с использованием быстрого преобразования Фурье [8]. Однако данная задача остается весьма трудоемкой и затратной с точки зрения вычислений, особенно когда в ходе расчетов появляются все более мелкие характерные масштабы, как по пространственным координатам из-за самофокусировки, так и по связанной со временем переменной τ за счет самообострения. Основная сложность состоит в том, что в какой-то момент размеры возникающей неоднородности становятся сравнимы с расстояниями между узлами (ячейками) расчетной (чаще всего эквидистантной) сетки, с которыми к тому же должен быть согласован элементарный шаг эволюции. В итоге, при попытках избежать нефизичных результатов (в том числе, развития численных неустойчивостей) и повысить разрешающие возможности в ходе моделирования значительно возрастает объем обрабатываемых данных и вместе с тем резко увеличивается количество необходимых итераций используемой процедуры. Поэтому существует необходимость в разработке альтернативных методов расчета динамики волновых полей не только в приложении к нелинейной оптике, но и для других областей физики. В настоящее время перспективным направлением здесь представляется использование достижений слабого искусственного интеллекта, которые позволят делать с высокой степень точности достоверный прогноз о виде функции и выявлять скрытые закономерности в наборе исходных правил на основе сформулированных ограничений на класс искомых зависимостей и априорной информации о семействе возможных ответов для исследуемой проблемы. Данный подход снимает ограничения, которые имеются у классических алгоритмов поиска решений уравнений в частных производных, где проводится процедура дискретизации непрерывных переменных, т.е. их замены на упорядоченный ряд дискретных точек и формирование сетки узлов в многомерном пространстве.

С целью апробации, развития и тестирования идей нейросетевого моделирования (интеллектуальных вычислений) далее нами рассматривается случай распространяющегося в практически однородной среде локализованного лазерного излучения с большой поперечной апертурой, в связи с чем можно пренебречь линейными дифракционными эффектами и считать структуру поля в плоскости x, y заданной и неизменной. Тогда уравнение (1) существенным образом упрощается и сводится к одномерному модифицированному НУШ:

$$i\,\frac{\partial\psi}{\partial z}-\frac{\alpha}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\tau^2}-\beta\left(|\psi|^2\psi+\gamma\frac{\partial(|\psi|^2\psi)}{\partial\tau}\right)=0. \tag{2}$$

Для его решения с помощью методов глубинного обучения прежде всего требуется составить функционал качества $G(\psi(z,\tau))$, который определяет степень выполнения моделью своего назначения и позволяет путем его минимизации осуществить подбор параметров искусственной нейросети (ее весов и смещений). В выделенном нами классе задач подобные функционалы ошибки следует выбирать, исходя из физических соображений и фундаментальных принципов и законов природы (например, на основе законов сохранения). Кроме того, стоит задействовать и дополнительные свойства и особенности изучаемой системы, такие как наличие симметрии и инвариантность относительно специфических преобразований (в частности, сдвигов, смещений, поворотов и т.д.). В качестве первого приближения к построению универсальных схем и рецептов по применению искусственного интеллекта для предсказания режимов эволюции волновых полей нами были рассмотрены процессы самовоздействия оптических импульсов на базе НУШ (2). При этом формирование функционала качества $G\big(\psi(z,\tau)\big)$ выполнялось прежде всего на базе дифференциальных соотношений, вытекающих из (2):

$$\begin{aligned}G_{PDE}(U_n,V_n)=\;&\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial U_n}{\partial z}-\frac{\alpha}{2}\frac{V_n}{\partial\tau^2}-\beta\left(({V_n}^2+{U_n}^2)V_n+\gamma\frac{\partial\big(({V_n}^2+{U_n}^2)V_n\big)}{\partial\tau}\right)\right)^2\\&+\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial V_n}{\partial z}-\frac{\alpha}{2}\frac{U_n}{\partial\tau^2}-\beta\left(({V_n}^2+{U_n}^2)U_n+\gamma\frac{\partial\big(({V_n}^2+{U_n}^2)U_n\big)}{\partial\tau}\right)\right)^2,\end{aligned} \tag{3}$$

где U_n и V_n- соответственно реальная и мнимая части комплексной функции $\psi(z,\tau)=U(z,\tau)+iV(z,\tau)$ в случайно взятых точках (z_n,τ_n), которые лежат внутри счетной области. Кроме того, в $G(\psi(z,\tau))$ необходимо добавить две дополнительные компоненты, которые будут отвечать за согласование предсказания искусственной нейронной сети $\psi(z,\tau)$ с начальными и краевыми условиями:

$$G_{IC}(U_m,V_m)=\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M}\left(\left(U_m-U_m^{(0)}\right)^2+\left(U_m-U_m^{(0)}\right)^2\right), \tag{4}$$

$$G_{BC}(U_k,V_k)=\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\left({U_k}^2+{V_k}^2\right). \tag{5}$$

Здесь пары U_m, V_m и U_k, V_k также представляют собой комбинацию реальной и мнимой частей $\psi(z,\tau)$, взятых соответственно в случайных M точках $(z=0,\tau_m)$ и в K случайных точках $(z_k,\tau=\pm\Gamma)$. Видно, что (4) дает среднеквадратичное отклонение результатов нейросетевой модели от истинного начального распределения $\psi(z=0,\tau)=\psi^{(0)}(\tau)=U^0(\tau)+iV^0(\tau)$, а (5) позволяет оценить близость $\psi(z,\tau=\pm\Gamma)=U(z,\tau=\pm\Gamma)+iV(z,\tau=\pm\Gamma)$ к границам $\tau=\pm\Gamma$ их расчетной области. Отметим, что нулевые граничные условия были выбраны для определенности. Их при необходимости можно заменить на любой другой тип условий. Таким образом, окончательно получаем следующий функционал качества:

$$G = G_{PDE}(U_n, V_n) + G_{IC}(U_m, V_m) + G_{BC}(U_k, V_k). \quad (6)$$

Способ генерации наборов из N, M и K будет обсуждаться ниже. В качестве базовой структуры нейронной сети был использован полносвязный граф. Отдельно стоит выделить вопрос о ширине и глубине конфигурации из внутренних (скрытых) слоев такой модели, а также о функциях активации отдельных элементов.

3. Вычислительный эксперимент

Исходными данными для обучения является численное решение данной системы (2), они представлены с дискретизацией на равномерной сетке: 256 точек по координате z от -5 до 5, 201 точка по времени τ от 0 до $\pi/2$, в каждой полученной точке сетки вычислен действительная и мнимая части функции $\psi(z,\tau)$, таким образом всего имеется 51456 точек. Для обучения в качестве тренировочной выборки используется выборка латинского гиперкуба (Latin hypercube sampling, LHS) [9], для равномерной выборки случайных значений из сетки. В тренировочную выборку S включены 50 случайных точек по z для $\tau = 0$ по 50 случайных точек из интервала значений моментов времени $[0, \pi/2]$ для z = -5 и z = 5, а также 20000 тысяч точек внутри границ.

В качестве модели для экспериментов по обучению используется полносвязная сеть с двумя входами (параметры z и τ), 4 скрытыми слоями по 100 нейронов в каждом слое, и выходной слой с двумя выходами (действительный и мнимый корень НУШ), в качестве функции активации используется гиперболический тангенс. Для начальной инициализации весов используется алгоритм Ксавье[10], начальные веса имеют нормальное распределение и при этом позволяют хорошо обучаться с гиперболическим тангенсом в качестве функции активации.

Проведены эксперименты по использованию в качестве функции оптимизаторов следующих алгоритмов: стохастический градиентный спуск (SGD) [11], RPSProp [12], Adam [13], L-BGFS [14].

Представленные ниже эксперименты по созданию и обучению сети были выполнены в программной библиотеке для машинного обучения TensorFlow v1.14. На рис. 1 представлены графики обучения модели с помощью различных оптимизаторов.

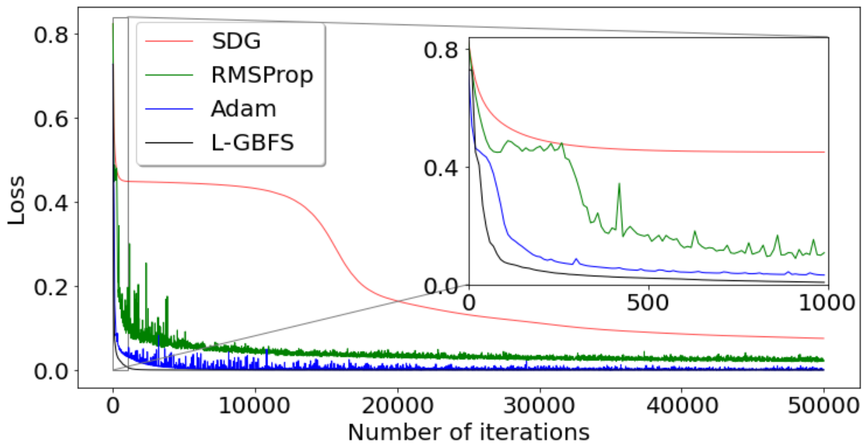


Рис. 1. Значения функции потерь во время обучения модели с помощью различных функций оптимизации для первых 50000 шагов. В графиках выводится значение функции потерь на каждой 10-й итерации

По результатам обучения были получены следующие погрешности относительно заданных значений (таблица 1). Из данной таблицы можно увидеть, что методы SGD и RMSProp показывают наихудшие результаты обучения. Метод Adam справился значительно лучше двух предыдущих, однако ошибка на реальных данных является слишком высокой и не позволяет использовать обученную модель для решения НУШ. Оптимизатор L-BGFS за значительно меньшее число итераций позволяет достичь точности 10^{-3} степени, что показывает перспективность его применения для обучения искусственных нейронных сетей, решающих предсказывающих решение НУШ.

Таблица 1. Значения функции потерь после проведенного обучения и нормализованная среднеквадратическая ошибка для обученных разными оптимизаторами моделей на исходных данных

Оптимизатор	Loss	Ошибка U	Ошибка V	Ошибка ψ
SGD	0.07529	0.8698683	1.163877	0.4125057
RMSProp	0.02175	1.156291	1.197228	0.3141282
Adam	0.0004897	0.06765208	0.1103277	0.01818167
L-BGFS	0.00001284	0.004083095	0.006000219	0.001985626

На рис. 2 представлены восстановленные при помощи обученной нейронной сети значения функции $|\psi(z,\tau)|$.

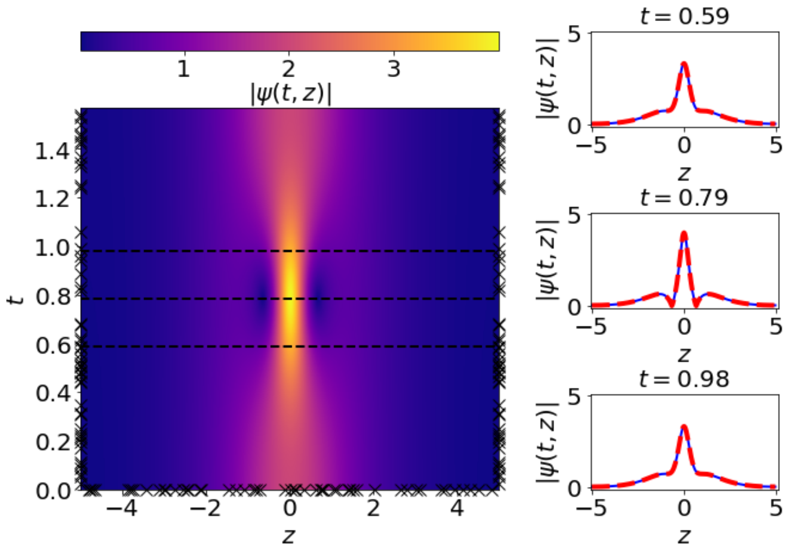


Рис. 2. Слева: график предсказанных значений функции $|\psi(z,\tau)|$ на двумерной сетке $z \in [-5,5]$ и $\tau \in [0,\pi/2]$. Справа: сравнение предсказанных с помощью нейронной сети и полученных в рамках прямого численного моделирования решений $|\psi(z,\tau)|$, соответствующих трем временным снимкам. Сплошная линия – результаты численного моделирования, прерывистая линия – результат результаты предсказания нейронной сети.

Заключение

В статье предлагается решение задачи о распространении оптических импульсов в средах с нелинейностью Керра в форме модифицированного НУШ (2) с помощью нейросетевого подхода: произведено сравнение данных, полученных в результате обучения нейронных сетей с данными, получаемыми путем прямого численного моделирования с помощью принятых стандартных схем расчета.

Проведенные исследования показали возможность применения машинного обучения для решения поставленной задачи. Были проведены эксперименты по использованию различных функций оптимизации для обучения модели, в том числе SGD, RMSProp, Adam, L-BGFS, полученные результаты показывают превосходство квази-ньютоновского оптимизатора над оптимизаторами первого порядка в данной задаче.

На задачах малой размерности использование машинного обучения не всегда является целесообразным, так как обучение занимает значительно большее количество времени, чем решение задачи с помощью прямого численного моделирования. Однако, при увеличении сложности системы, в следствие увеличения количества неизвестных переменных ожидается превосходство методов машинного обучения из-за быстрого вычисления с помощью уже обученной сети. Также открытым и интересным для будущих исследований является вопрос быстрого дообучения уже обученной модели для задачи с новыми параметрами.

Литература

1. George, D., Huerta, E.A.: Deep Learning for real-time gravitational wave detection and parameter estimation: Results with Advanced LIGO data. Physics Letters B 778, 64-70 (2018). https://doi.org/10.1016/j.physletb.2017.12.053.
2. Gonoskov, A., et al.: Employing machine learning for theory validation and identication of experimental conditions in laser-plasma physics. Scientic Reports 9(1), 1-15 (2019). https://doi.org/10.1038/s41598-019-43465-3.
3. Ravi, D., et al.: Deep Learning for Health Informatics. IEEE J. of Biomedical and Health Informatics 21(1), 4-21 (2017). https://doi.org/10.1109/JBHI.2016.2636665.
4. Lachinov D., Vasiliev E., Turlapov V. Glioma Segmentation with Cascaded UNet. BrainLes 2018. LNCS 11384. (2018) https://doi.org/10.1007/978-3-030-11726-9_17.
5. Multilayer perceptrons and radial basis function neural network methods for the solution of differential equations: A survey. Computers and Mathematics with Applications, 62 3796–3811 (2011).
6. Хазанов Е.А., Миронов С.Ю., Муру. Ж. Нелинейное сжатие сверхмощных лазерных импульсов: компрессия после компрессора» Успехи физических наук (189), 1173–1200. (2019). https://doi.org/10.3367/UFNr.2019.05.038564
7. Ахманов С. А., Выслоух В. А., Чиркин А. С. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1988. – 312 с.
8. Moxley F.I. Generalized finite-difference time-domain schemes for solving nonlinear Schrödinger equations. A Dissertation Presented in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree Doctor of Philosophy (2013). https://core.ac.uk/download/pdf/236621293.pdf
9. M. Stein. Large sample properties of simulations using Latin hypercube sampling, Technometrics 29 (1987) 143–151. https://www.jstor.org/stable/1269769
10. Glorot, X., Bengio, Y. (2010). Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks. Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (9), 249-256. (2010). http://proceedings.mlr.press/v9/glorot10a.html
11. Robbins H., Monro S. A stochastic approximation method. The annals of mathematical statistics. – 1951. – Vol. 22. – P. 400–407. https://doi.org/10.1214/aoms/1177729586
12. Hilton G. Neural Networks for Machine Learning. Lecture 6a. Overview of mini-batch gradient descent. (2012) http://www.cs.toronto.edu/~tijmen/csc321/slides/lecture_slides_lec6.pdf
13. Kingma, D., Ba J. Adam: A Method for Stochastic Optimization. Cornell University Library. – 2014. https://arxiv.org/abs/1412.6980
14. Schraudolph, N.N., Yu J., Gunter S. A Stochastic Quasi-Newton Method for Online Convex Optimization. International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, 436-443, (2007). http://proceedings.mlr.press/v2/schraudolph07a/schraudolph07a.pdf.

ОБ ОПЫТЕ УЧАСТИЯ В СОРЕВНОВАНИИ ПО КВАНТОВЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ ICPC QUANTUM COMPUTING CHALLENGE[1*]

П.Е. Ведруков[1], А.В. Линев[1], С.В. Денисов[1,2]

[1]Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Россия
[2]Столичный университет Осло, Норвегия

С 24.02.2021 по 01.03.2021 проходило соревнование по квантовым вычислениям «ICPC Quantum Computing Challenge» при поддержке IBM Quantum [1]. В работе описаны задачи соревнования [2], разработанные решения и их оценка в сравнении с лучшими решениями участников.

Ключевые слова: кубит, квантовый симулятор, квантовый компьютер, квантовая схема, оптимизация квантовой схемы.

1. Введение

При решении задачи на квантовом компьютере за разработкой квантового алгоритма следуют его оптимизация, отображение на конкретную архитектуру квантового компьютера, проверка корректности на каждом шаге, симуляция работы полученной квантовой схемы (квантовой части алгоритма) и оценка ее производительности [3]. Использование специализированных программных средств [4] автоматизации подготовки квантовых схем с использованием специализированных языков квантовых вычислений [5–8] и симуляторов работы квантовых схем [9–12] позволяет сократить полное время разработки. Подготовка специалистов в области квантовых алгоритмов предполагает изучение полного цикла разработки, и участие в соревнованиях, аналогичных олимпиадам по программированию, позволяет улучшать технические навыки и отрабатывать подходы к оптимизации квантовых схем.

С 24.02.2021 по 01.03.2021 проходило соревнование по квантовым вычислениям «ICPC Quantum Computing Challenge», организованное Международной студенческой олимпиадой по программированию (ICPC) при поддержке IBM Quantum. Участники предлагалось 3 задачи на построение квантовых схем. Оптимальность решения оценивалась посредством заданных функций затрат, аппроксимирующих ошибку вычисления на квантовом компьютере, и в основном определялось размером квантовой схемы. К участию в соревновании приглашались все желающие, всего было зарегистрировано 246 участников. Несмотря на то, что соревнование проводилось ICPC [13], многие участники не являлись студентами.

2. Постановки задач

Задача № 1. Требуется вычислить булеву функцию веса Хэмминга для четырех битов:

$$Popcount(x_1, x_2, x_3, x_4) = (y_1, y_2, y_3) = x_4 + x_3 + x_2 + x_1,$$

где $x_i, i = \overline{1,4}$ – значения входных битов (0 или 1), кодируемые начальными состояниями кубитов ($|0\rangle$ или $|1\rangle$), а $y_j, j = \overline{1,3}$ – значения разрядов двоичного представления суммы. Необходимо по отдельности вычислить каждый из y_j, то есть создать три квантовые схемы, которые выполняют следующие преобразования:

$$|x, 0, 0\rangle \rightarrow \left|x, e^{i\theta_j(x)} y_j, 0\right\rangle, j = \overline{1,3},$$

где $\theta_j(x)$ – произвольные вещественные функции от x, то есть $\left|e^{i\theta_j(x)}\right| = 1$. Наличие множителя $\theta_j(x)$ не влияет на значение измерения системы кубитов и позволяет участникам разрабатывать более компактные решения.

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-01-00289), Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0729-2020-0055) и научно-образовательного математического центра «Математика технологий будущего».

Задача № 2. Требуется вычислить функцию веса Хэмминга для 15 и 16 битов:

$$Popcount(x_1, \dots, x_n) = (y_1, \dots, y_m) = x_n + \dots + x_1,$$

где $n = 15{,}16$, $m = 4{,}5$. Необходимо создать две квантовые схемы, которые выполняют следующее преобразование:

$$|x, 0, 0\rangle \to \left|x, e^{i\theta(x)}y, 0\right\rangle,$$

где $\theta(x)$ – произвольная вещественная функция от x.

Функция затрат квантовой схемы для задач № 1 и № 2 имеет следующий вид:

$$Cost = G + D + \frac{nS}{2},$$

где G – число используемых гейтов *CNOT*, D – максимальная длина последовательности зависимых гейтов *CNOT*, S – число дополнительных кубитов, n – число кубитов, кодирующих x.

Задача № 3. Для каждой булевой функции из заданного набора требовалось создать такую квантовую схему, чтобы выполнялось следующее условие:

$$|x, 0\rangle \to \left|e^{i\beta f(x)}x, 0\right\rangle$$

где β – произвольное вещественное число, определяющее изменение фазы в системе при условии, что $f(x) = 1$.

Список функций:

$$f_0(x_1, x_2, x_3) = 0,$$
$$f_1(x_1, x_2, x_3) = x_1x_2x_3,$$
$$f_2(x_1, x_2, x_3) = x_1x_2x_3 + (1 - x_1)(1 - x_2)(1 - x_3),$$
$$f_3(x_1, x_2, x_3) = x_1 + x_2 + x_3 + x_1x_2x_3,$$
$$f_4(x_1, x_2, x_3) = x_1 + x_2 + x_3.$$

Функция затрат для задачи № 3:

$$Cost = \sum_{m=0}^{4} 10G_m + D_m(3 + A_m),$$

где m – номер функции, G_m – число используемых гейтов *CNOT*, D_m – глубина квантовой схемы, A_m – число дополнительных кубитов.

3. Решения задач

Решение задач выполнялось на платформе IBM Quantum Computing. Для описания квантовых схем использовался язык OpenQASM, для их тестирования – симулятор QISKit (Quantum Information Software Kit). Были подготовлены решения всех 3 задач, решения подзадач задачи № 1 представлены на рис. 1-3. Решения других задач имеют глубину более 70 и содержат более 100 гейтов.

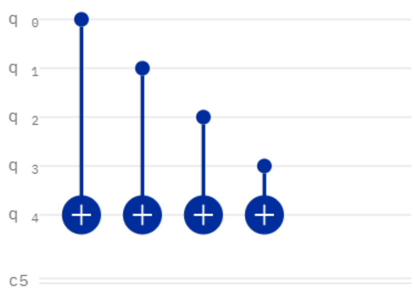


Рис. 1. Квантовая схема, являющаяся решением задачи 1а

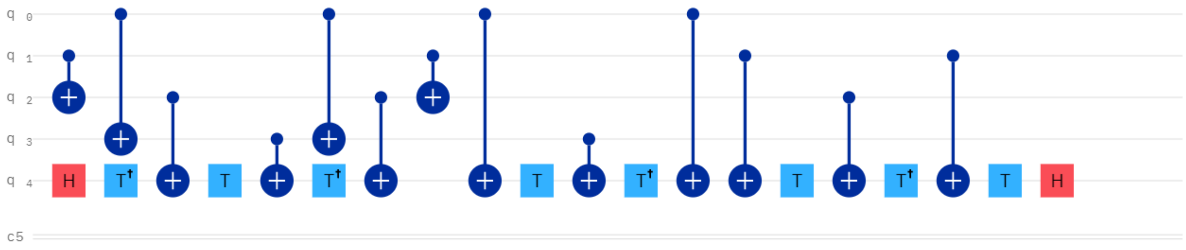


Рис. 2. Квантовая схема, являющаяся решением задачи 1b

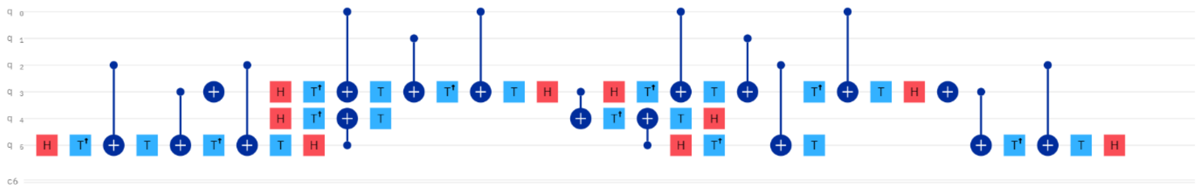


Рис. 3. Квантовая схема, являющаяся решением задачи 1c

Значения функций стоимости для представленных решений и лучших решений каждой из задач приведены в Таблице 1. К сожалению, решения других участников недоступны в открытом доступе.

Таблица 1. Значения функций стоимости по подзадачам для представленного и лучшего решений

Номер задачи/подзадачи	Лучшее решение	Представленное решение
1a	8	8
1b	20	23
1c	28	28
2a	127	158
2b	157	211
3	294	398

Достигнутые значения функций стоимости позволили занять 16 место в общем зачете.

4. Заключение

Инфраструктура разработки квантовых алгоритмов IBM Quantum, предоставленная для свободного использования, включает поддержку языка описания квантовых схем OpenQASM, набор средств автоматизации, симулятор квантовых схем QISKit и возможность использования реальных квантовых процессоров различной архитектуры. Это позволяет выполнить полный цикл разработки квантового алгоритма на одной платформе.

Участие в соревнованиях ICPC Quantum Computing Challenge позволяет оценить уровень подготовки обучающихся, а также повысить квалификацию практикующих специалистов. Предлагаемые задания являются хорошими примерами для обсуждения эффективности квантовых схем.

Литература

1. ICPC Quantum Computing Challenge powered by IBM Quantum. URL: https://challenges.quantum-computing.ibm.com/icpc (дата обращения: 30.10.2021).
2. Github ICPC-Quantum-Challenge-2021. 2021.URL: https://github.com/qiskit-community/ICPC-Quantum-Challenge-2021 (дата обращения: 30.10.2021).
3. Amy M., Gheorghiu V. staq–A full-stack quantum processing toolkit // Quantum Science and Technology. 2020. Vol. 5, no. 3. P. 034016. DOI: 10.1088/2058-9565/ab9359.

4. Wiki Q. List of QC simulators. 2015. URL: https://quantiki.org/wiki/list-qc-simulators (дата обращения: 01.09.2020).
5. Green A.S., Lumsdaine P.L., Ross N.J., Selinger P. et al. Quipper: a scalable quantum programming language // Proceedings of the 34th ACM SIGPLAN conference on Programming language design and implementation. 2013. P. 333–342. DOI: 10.1145/2491956.2462177.
6. Cross A.W., Bishop L.S., Smolin J.A., Gambetta J.M. Open quantum assembly language // arXiv preprint arXiv:1707.03429. 2017.
7. Svore K., Geller A., Troyer M., Azariah J. et al. Q# Enabling Scalable Quantum Computing and Development with a High-level DSL // Proceedings of the Real World Domain Specific Languages Workshop 2018. 2018. P. 1-10. DOI: 10.1145/3183895.3183901.
8. Abhari A.J., Faruque A., Dousti M.J., Svec L. et al. Scaffold: Quantum programming language. Princeton Univ NJ Dept of Computer Science, 2012. 43 p.
9. Jones T., Brown A., Bush I., Benjamin S.C. Quest and high performance simulation of quantum computers // Scientific reports. 2019. Vol. 9, no. 1. P. 1–11. DOI: 10.1038/s41598-019-47174-9.
10. Guerreschi G.G., Hogaboam J., Baruffa F., Sawaya N.P. Intel Quantum Simulator: A cloud-ready high-performance simulator of quantum circuits // Quantum Science and Technology. 2020. Vol. 5, no.3. P. 034007. DOI: 10.1088/2058-9565/ab8505.
11. Smelyanskiy M., Sawaya N.P.D., Aspuru-Guzik A. qHiPSTER: the quantum high per-formance software testing environment // arXiv preprint arXiv:1601.07195. 2016.
12. Aleksandrowicz G.; Alexander T., Barkoutsos P., Bello L. et al. Qiskit: An open-source framework for quantum computing. 2019. URL: https://zenodo.org/record/2562111 (дата обращения: 07.06.2021). DOI: 10.5281/zenodo.2562110.
13. ICPC Foundation. URL: http://icpc.foundation (дата обращения: 30.10.2021).

СУЩЕСТВУЕТ ЛИ ФЛОКЕ-ЛИНДБЛАДИАН? ИССЛЕДОВАНИЕ ОДНОКУБИТНЫХ МОДЕЛЕЙ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ[1*]

В.Д. Волокитин[1], М.В. Иванченко[1], И.Б. Мееров[1], С.В. Денисов[1,2]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского*
[2]*Oslo Metropolitan University*

Изучается вопрос о существовании Флоке-Линдбладиана в открытых квантовых системах. Эта задача может быть сведена к NP-трудной задаче целочисленного программирования, которая, в свою очередь, на практике может быть решена лишь для малых размерностей даже с использованием суперкомпьютеров. В докладе изучается возможность использования методов машинного обучения для приближенного получения ответов "Да"/"Нет" на поставленный вопрос. Для однокубитных моделей продемонстрировано, что в пространстве собственных чисел и собственных векторов матриц Чои удается строить высокоточные классификаторы, ошибки которых в основном сосредоточены на границе областей ответов "Да" и "Нет".

Ключевые слова: открытые квантовые системы, Флоке-Линдбладиан, машинное обучение, целочисленное программирование, классификация.

1. Введение

Вопрос о существовании независимого от времени генератора марковской эволюции (Флоке-Линдбладиана), который дает стробоскопическую динамику, идентичную стробоскопической динамике исходной периодически модулированной квантовой системы, вызывает большой интерес. Строго доказано [1], что ответ на данный вопрос может быть получен путем сведения задачи к NP-полной задаче целочисленного нелинейного программирования. Известно, что данная задача может быть решена алгоритмом Хачияна-Порколаба [2], однако в рассматриваемой задаче условия полиномиального роста времени решения не выполняются и при росте размерности квантовой системы вычислительные затраты увеличиваются экспоненциально. В связи с этим на практике используются различные переборные алгоритмы. Практика показывает, что перебор может быть легко выполнен для однокубитных систем [3,4]. Между тем, уже в случае двухкубитных систем полный перебор возможных альтернатив может занимать продолжительное время. Ранее в работе [5] мы предложили эвристический алгоритм, который позволяет ограничить область поиска в задаче существования независимого от времени генератора и выполнить направленный перебор за приемлемое время для однокубитных и двухкубитных систем. К сожалению, возможности этого алгоритма, по всей видимости, ограничены размерностью 3 даже при использовании суперкомпьютеров, поэтому мы ищем другие способы решения задачи. В данной работе мы изучаем возможность использования методов машинного обучения для того, чтобы а) давать ответ «Да/Нет» с некоторой приемлемой точностью; б) выявить свойства исходных задач, существенно влияющие на ответ.

2. Модель

Одним из наиболее распространенных способов описания динамики открытых квантовых систем (взаимодействующих с окружающей средой) является основное уравнение Линдблада [6, 7]. Данное уравнение описывает эволюцию оператора матрицы плотности $\rho(t)$ с периодически-модулируемым оператором Линдблада (Линдбладианом) $\mathcal{L}(t + T) = \mathcal{L}(t)$, где T – период

[1*] Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 075-15-2020-808. Эксперименты выполнены на суперкомпьютерах МГУ («Ломоносов-2»), ННГУ («Лобачевский») и МСЦ РАН (“МВС-10П”).

модуляции. GKSL-форма [8] данного уравнения, гарантирующая сохранение следа и положительную определенность, выглядит следующим образом:

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}(\mathrm{t})\rho = -i(H\rho - \rho H) + \sum_k \gamma_k \left(A_k \rho A_k^* - \frac{1}{2} A_k^* A_k \rho - \frac{1}{2} \rho A_k^* A_k \right),$$

где первое слагаемое – коммутатор гамильтониана $H(t)$ и матрицы плотности – отвечает за унитарную эволюцию системы, а диссипативные слагаемые описывают взаимодействие системы с окружающей средой посредством набора из K диссипативных операторов A_k $(k = 1, \dots, K)$ со скоростью диссипации γ.

В качестве одной из тестовых задач мы использовали модель с одним спином и с периодически модулированным Гамильтонианом [4]:

$$H(t) = \frac{\Delta}{2}\sigma_z + Ecos(\omega t + \varphi)\sigma_x, A = \sqrt{\gamma}\sigma_-$$

Для проверки обобщающих способностей моделей, построенных методами машинного обучения, мы модифицировали данную задачу для получения иного набора существенно отличных решений. Этой цели удалось достигнуть, добавив в гамильтониан всего одно слагаемое:

$$H(t) = \frac{\Delta}{2}(\sigma_z + \sigma_y) + Ecos(\omega t + \varphi)\sigma_x, A = \sqrt{\gamma}\sigma_-$$

Решение задачи существования независимого от времени генератора марковской эволюции полностью сводится к изучению свойств логарифма оператора отображения $(P(T) = \exp(\int_0^T L(t)dt))$ [1]. Каждый оператор отображения, в свою очередь, может за счет перестановки элементов быть преобразован единственным образом в матрицу состояния (эрмитова матрица с фиксированным следом). Такая матрицы называется матрицей Чои [9]. Поэтому мы вместо того, чтобы работать с операторами отображения (комплексная матрица, сохраняющая все свойства матрицы плотности при воздействии), работаем с получаемыми матрицами Чои. Эти матрицы проще в представлении, обладают рядом полезных свойств и единственным образом соответствуют исходным задачам.

В рамках данной работы выбраны следующие значения параметров: $\Delta = 1$ и $\gamma = 0.01$, а амплитуда (E), частота (ω) и сдвиг (φ) модуляции варьируются для генерации данных для последующей тренировки классификаторов методами машинного обучения.

3. Методы машинного обучения

Ставилась задача бинарной классификации (ответы «Да/Нет» на вопрос о существовании Флоке-Линдбладиана). Изучались разные возможности построения пространства признаков. Классификаторы строились с использованием следующих методов: метод K-соседей, машина опорных векторов (SVM) с линейным, полиномиальным и радиальным ядрами, дерево решений, случайный лес, полносвязная нейронная сеть, AdaBoost и дискриминантный анализ (LDA и QDA). Такой выбор методов позволяет нам проанализировать, какие аспекты влияют на точность классификации.

Для проведения экспериментов мы генерировали выборки для разных сдвигов φ. Для каждого фиксированного сдвига мы равномерно перебирали значение амплитуды (E) от 0 до π и частоты (ω) от 0 до 2π с шагом $\frac{\pi}{25}$. Один набор данных с фазами $\varphi = 0; \frac{\pi}{4}; \frac{\pi}{3}; \frac{\pi}{2}; \frac{2\pi}{3}; \frac{3\pi}{4}$ случайным образом делится на обучающую и тестовую выборку в пропорции 90% и 10%, соответственно. В качестве проверочной выборки использовался набор данных с фазами $\varphi = \frac{\pi}{8}; \frac{5\pi}{8}$.

4. Результаты

В работе рассматривались различные пространства параметризации матриц Чои, в которых происходило обучение моделей и проверка на тестовой выборке. В ходе работы были проверены следующие параметризации:

1. Пространство собственных чисел матриц Чои и различных функций от них. Наилучший результат показали функции квадратного корня и корня 4-й степени.

2. Пространство параметризации эрмитовой матрицы в действительный вектор без повторяющихся элементов. Для этого из матрицы использовались как действительные части элементов, так и мнимые части только из верхнего треугольника.
3. Пространство собственных чисел и параметризованных собственных векторов матрицы Чои. Собственные вектора при этом рассматривались как ограниченный набор углов в сферических координатах.

Полученные результаты точности представлены на рисунке 1. Как можно увидеть из графика, большинство методов отработали хорошо, и многие методы превзошли точность в 98% в третьем из указанных выше пространстве параметров.

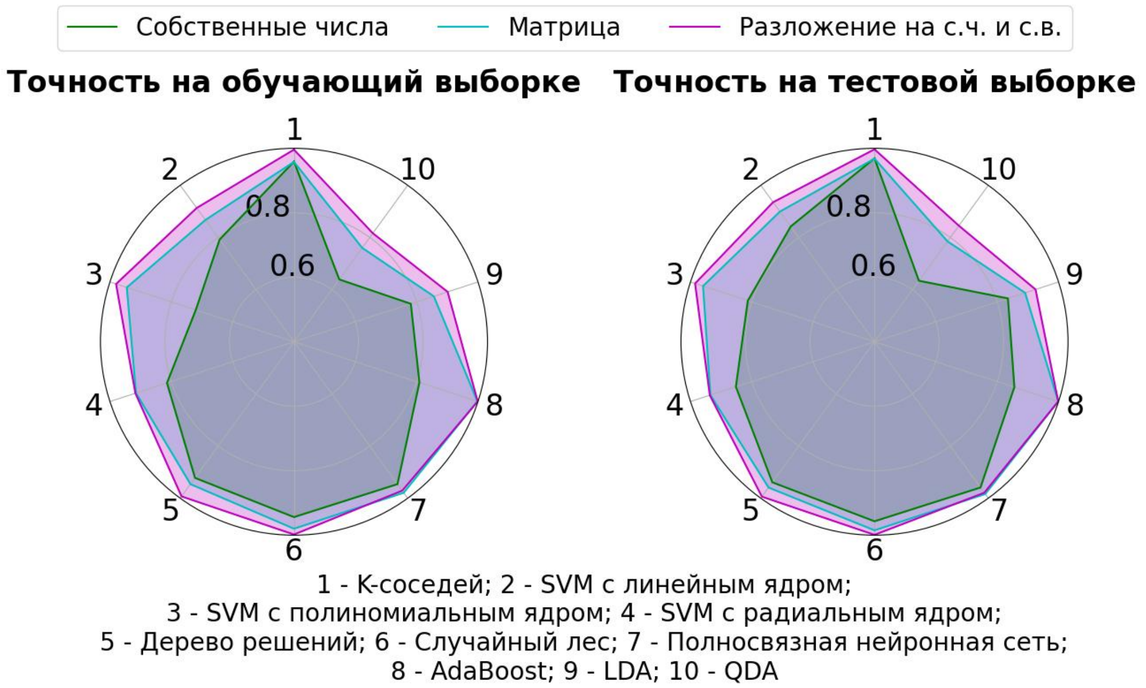


Рис. 1. Лепестковая диаграмма точности классификаторов, достигнутой рассмотренными методами при разных способах параметризации матрицы Чои

5. Заключение

Было продемонстрировано, как методы машинного обучения позволяют решить задачу существования независимого от времени марковского генератора эволюции в открытых квантовых системах, моделирующих динамику одного кубита. Достигнута точность определения марковости в 97%. Выдвинута гипотеза о том, что пространство признаков в виде собственных чисел и собственных векторов матриц Чои перспективно для исследования возможностей успешной классификации в задачах большей размерности. Проверка этого предположения является темой дальнейших исследований.

Литература

1. Wolf M.M. et al. Assessing non-Markovian quantum dynamics //Physical review letters. – 2008. – Т. 101. – №. 15. – С. 150402.
2. Porkolab L., Khachiyan L. On the complexity of semidefinite programs //Journal of Global Optimization. – 1997. – Т. 10. – №. 4. – С. 351-365.
3. Cubitt T.S., Eisert J., Wolf M.M. The complexity of relating quantum channels to master equations //Communications in Mathematical Physics. – 2012. – Т. 310. – №. 2. – С. 383-418.
4. Schnell A., Eckardt A., Denisov S. Is there a Floquet lindbladian? //Physical Review B. – 2020. – Т. 101. – №. 10. – С. 100301.

5. Волокитин В.Д. и др. Об одном алгоритме решения задачи «марковского погружения» для открытых квантовых систем //Математическое моделирование и суперкомпьютерные технологии. – 2020. – С. 99-104.
6. Breuer H.P. et al. The theory of open quantum systems. – Oxford University Press on Demand, 2002.
7. Carmichael H. An open systems approach to quantum optics: lectures presented at the Université Libre de Bruxelles, October 28 to November 4, 1991. – Springer Science & Business Media, 2009. – Т. 18.
8. Gorini V., Kossakowski A., Sudarshan E. C. G. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems //Journal of Mathematical Physics. – 1976. – Т. 17. – №. 5. – С. 821-825.
9. Życzkowski K., Bengtsson I. On duality between quantum maps and quantum states //Open systems & information dynamics. – 2004. – Т. 11. – №. 1. – С. 3-42.

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА ЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ НАД МНОЖЕСТВАМИ ОРТОГОНАЛЬНЫХ МНОГОУГОЛЬНИКОВ

М.М. Годовицын, Ю.А. Живчикова, Н.В. Старостин, А.А. Штанюк

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В рамках разработки отечественных САПР для верификации норм конструкторско-технологических ограничений (КТО) необходима адаптация библиотеки выполнения логических операций над ортогональными многоугольниками для эффективного функционирования в высокопроизводительной вычислительной среде. В работе приводится описание типовой схемы работы алгоритмов библиотеки и её параллельная реализация, основанная на геометрической декомпозиции исходных данных.

Ключевые слова: САПР, проверка конструктивно-технологических ограничений, логические операции, параллельная реализация алгоритма заметающей прямой

1. Введение

Основная задача проектирования интегральной схемы [1, 2, 3, 4] заключается в получении топологии работоспособного кристалла, по которой будет создаваться шаблон для фабричного изготовления. Перед передачей спроектированных решений в производство [5, 6] важно выполнить цикл верификации полученной топологии [7, 8]. Начальный этап верификации заключается в проверке проекта топологии интегральной схемы на соответствие нормам конструктивно-технологических ограничений (КТО), которые описываются системой норм, ограничений, правил и процедур, регламентирующих допустимое взаимное расположение топологических элементов и топологических структур с учетом конструктивных особенностей и возможностей технологического процесса. Структура процессов верификации топологии включает две основные фазы: на первой происходит поиск элементов топологии и специфических областей, на второй осуществляется непосредственно проверка соответствия правилам проектирования. Подавляющее большинство поисковых и проверочных процедур формулируются в терминах логических операций (объединение, пересечение, вычитание) над множествами, содержащими ортогональные многоугольники (полигоны). К алгоритмам, реализующим логические операции, предъявляются жесткие требования по вычислительным издержкам, которые по времени и по памяти не должны превышать квазилинейные оценки.

На практике размер входных данных исчисляется в десятках и сотнях миллионов полигонов и более. При данных порядках время работы алгоритмов в рамках проверочных процедур значительно даже с учетом квазилинейных издержек. Следует отметить, что, если в результате автоматической проверки найдены проблемы, это означает необходимость внесения изменений в синтезированную топологию и предполагает цикл разработки с повторной проверкой до тех пор, пока не будет получено корректное решение. В результате возрастает значимость требований по сокращению временных издержек к программно-техническим средствам верификации, что обуславливает использование высокопроизводительной вычислительной базы и эффективных параллельных реализаций алгоритмов на данном этапе проектирования изделий микроэлектроники.

2. Слои интегральной схемы и последовательная схема реализации логических операций

Рассмотрим последовательную схему работы алгоритмов, формирующих результат работы логических операций над слоями интегральной схемы. В качестве входных данных для логических операций выступают топологические слои. Под топологическим слоем понимается множество попарно непересекающихся плоских ортогональных многоугольников (полигонов).

Каждый полигон характеризуется внутренней областью со своей границей, которая представляется в виде ортогональной ломаной, состоящей только из прямых отрезков параллельных одной из осей плоскости кристалла (контурное представление). На рисунке 1 приведены примеры ортогональных полигонов с границами и внутренними областями.

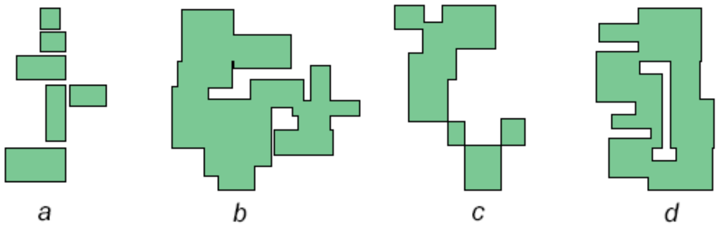


Рис. 1: Примеры ортогональных полигонов

В качестве базовых логических операций выделяют операции: объединение (обозначают OR), пересечение (обозначают AND), вычитание (обозначают NOT) и исключающее «ИЛИ» (обозначают XOR). Результатом операции объединения является новый слой, который включает в себя полигоны, описывающие области, относящиеся к полигонам первого и/или второго слоев. Результатом операции пересечения является новый слой, который включает в себя полигоны, описывающие области, относящиеся одновременно к полигонам первого и второго слоев. Результатом операции вычитания является новый слой, который включает в себя полигоны, описывающие области полигона первого слоя, за исключением совпадающих областей второго слоя. Результатом операции исключающего «ИЛИ» является новый слой, который включает в себя полигоны, описывающие области полигона первого или второго слоев, за исключением совпадающих областей первого и второго слоя. На рисунке 2 приведены примеры результатов работы логических операций над слоями.

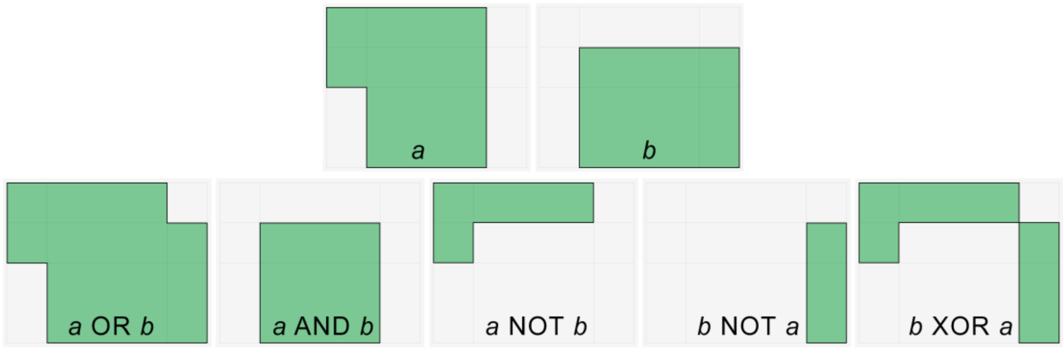


Рис. 2: Примеры результатов работы логических операций над слоями

Процесс вычисления логических операций основан на схеме вычисления внутренних областей полигонов слоя по контурному представлению. Данный процесс выглядит следующим образом. Рассмотрим только горизонтальные ребра полигонов одного слоя. Вычислим ограничивающий прямоугольник, включающий все горизонтальные ребра. Разрежем ограничивающий прямоугольник на горизонтальные полосы так, чтобы разрезы проходили строго по всем горизонтальным ребрам. Упорядочим (пронумеруем) разрезы по порядку их размещения на плоскости «снизу-вверх». Так как любое ребро границы полигона всегда отделяет внутреннюю область многоугольника от внешней, то смена внутренних областей полигона на внешние и наоборот внешних на внутренние происходит строго на разрезах. Тогда схема вычисления внутренних областей фактически заключается в последовательном переборе разрезов «снизу-вверх». Для каждого i-го разреза происходит вычисление результата операции $I_i = B_i$ XOR I_{i-1}, где I_i – интервалы, определяющие внутренние области полигонов слоя над i-м разрезом; B_i – интервалы, соответствующие горизонтальным ребрам, попавшие в i-й разрез. На рисунке 3 приведена иллюстрация работы алгоритма.

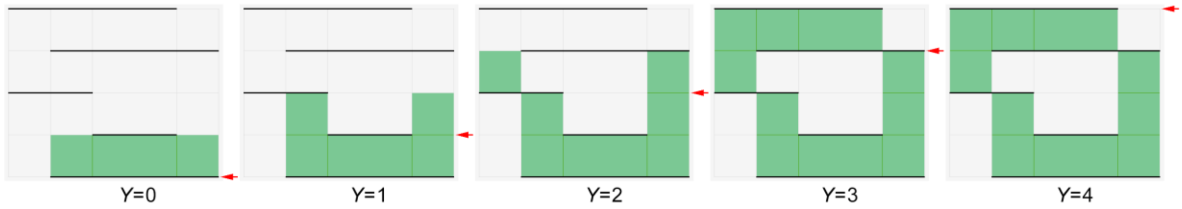


Рис. 3: Схема работы алгоритма вычисления внутренних областей слоя

Вычислительная сложность представленной схемы оценивается как $O(N\,log\,N)$ как по времени работы, так и по пиковому потреблению памяти.

3. Параллельная схема реализации логических операций

Представленная выше схема вычисления внутренних областей полигонов слоя основана на последовательном переборе разрезов строго «снизу-вверх» и не позволяет начать вычисление внутренних областей с произвольного разреза. Дело в том, что для того, чтобы корректно вычислить внутренние области над i-м разрезом I_i необходимо знать интервалы размещения внутренних областей под i-м разрезом, что эквивалентно интервалам размещения внутренних областей над (i-1)-м разрезом I_{i-1}.

Для вычисления внутренних областей над (i-1)-м разрезом воспользуемся свойством границы полигона, которая всегда отделяет внутреннюю область многоугольника от внешней. Однако, при этом будем рассматривать только вертикальные ребра, пересекающие горизонтальную прямую, расположенную между (i-1)-м и i-м разрезами (см. рис. 4). Если упорядочить (пронумеровать, начиная с 1) все такие вертикальные ребра по порядку их размещения на плоскости «слева-направо» (возрастанию координаты X), то каждое нечетное ребро служит индикатором «переключения» внешних областей полигона на внутренние, а каждое четное ребро отмечает факт «переключения» внутренних областей на внешние – что дает возможность построить простую схему вычисления искомых интервалов размещения внутренних областей над (i-1)-м разрезом I_{i-1}.

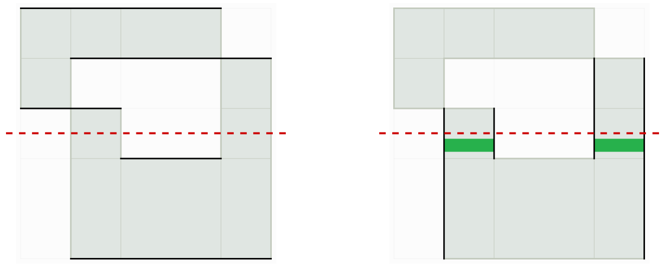


Рис. 4: Распределение горизонтальных ребер по двум частям (слева),
определение вертикальных ребер и вычисление внутренних областей под разрезом (справа)

Таким образом, для обеспечения геометрической декомпозиции исходных данных на заданное количество частей для параллельного независимого расчета необходимо: 1) определить разрезы, по которым будет осуществляться разрезание всей геометрии на части; 2) осуществить декомпозицию горизонтальных ребер по частям; 3) идентифицировать списки вертикальных ребер, пересекающих соответствующие разрезы. Определять места разрезов предлагается по геометрическому принципу – прямоугольник, ограничивающий полигоны слоя, разрезается на заданное число полос равной ширины.

В основу процедур декомпозиции горизонтальных ребер по частям предлагается положить параллельную схему – каждый процесс независимо обрабатывает свою часть массива вертикальных ребер и распределяет их по независимым спискам, которые проассоциированы соответствующим частям декомпозиции. Далее, после фазы параллельного расчета, списки перераспределяются по «своим» частям данным. По аналогии с процессом декомпозиции может быть организована параллельная схема вычисления списков вертикальных ребер, пересекающих соответствующие разрезы.

В результате описанной выше процедуры будут подготовлены данные для независимого параллельного вычисления внутренних областей в рамках каждой из частей. В таком случае оценка ускорения предложенной параллельной схемы вычисления данных с учетом фазы подготовки данных и фазы вычисления оценивается как $O(N/P)$, где N – число ребер; P – число процессов/процессоров.

4. Программное обеспечение системы верификации КТО

Представленные в работе реализации алгоритмов и процедур вошли в состав подключаемой библиотеки функций работы со слоями топологического описания, которая, в свою очередь, является частью разрабатываемой системы верификации норм КТО. Данная библиотека реализована на языке C++, с использованием стандарта C++17. Имплементация параллельных схем реализации логических операций выполнена с использованием библиотеки OpenMP.

5. Результаты вычислительного эксперимента

Для апробации функций библиотеки операций над полигонами были подготовлены тестовые данные, представляющие собой набор координат вершин полигонов для двух слоев. Число полигонов в рамках одного слоя варьируется от 2000 до 50000. Над тестовыми данными выполнялись операции объединения, пересечения, вычитания и исключающего «ИЛИ».

Для тестирования использовался персональный компьютер с 8-ядерным процессором Intel Core i7, 3.8 ГГц и объемом памяти 32 ГБ.

Результаты измерения времени для различных операций приведены на рисунке 5.

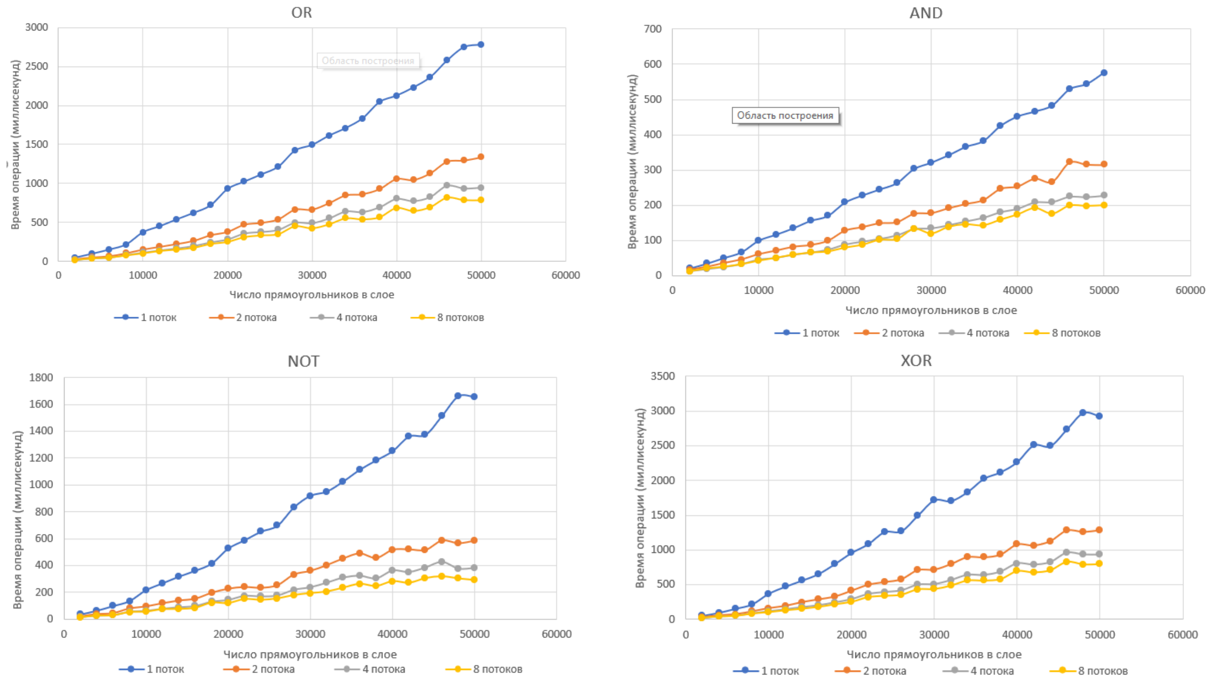


Рис. 5: Зависимости времени операций
от количества полигонов в слое и числа потоков

Из рисунка видно сохранение квазилинейной сложности алгоритма при запуске алгоритма на нескольких процессорах, однако, отсутствует линейное ускорение алгоритма при увеличении числа потоков, а именно, наблюдается резкое снижение прироста производительности при числе потоков больше, чем 2.

Из полученных зависимостей видно, что оценка временных затрат на выполнение операций не соответствует теоретически полученным оценкам. Анализ производительности показал наличие проблемы кэш промахов (cache miss). Была предпринята попытка решения данной проблемы за счет геометрической декомпозиции области на большое количество достаточно маленьких (достаточных для попадания в кэш первого уровня) подмножества ребер. Отчасти это улучшило общую картину – время вычисления результата логических операций в среднем сократилось в 3 раза, однако проблема масштабируемости в контексте параллельных вычислений на общей памяти осталась. Основная причина этого очевидно связана с конкуренцией потоковых вычислений за шину памяти. Данная проблема является характерной для всех многопроцессорных систем при работе с задачами, требующими интенсивного обмена данными по шине память-процессор. Однако стоит заметить, что предложенная схема декомпозиции ребер обеспечивает последующий независимый расчет по каждой отдельной части геометрии, что открывает широкие возможности для использования параллельных вычислений на системах с распределенной памятью.

Заключение

В рамках проекта по созданию отечественной САПР для верификации норм КТО была разработана библиотека, реализующая логические операции над слоями, образующими топологическое описание микросхемы. В основу процедур вычисления результата логических операций положена последовательная схема, обеспечивающая квазилинейную вычислительную временную сложность. Предложена технология ее распараллеливания, основанная на геометрической декомпозиции данных. Теоретический анализ показал линейную масштабируемость предложенных параллельных решений на системах с распределенной памятью. Попытка реализации данной технологии в рамках многопоточного приложения выявила типовые проблемы масштабируемости на системах с общей памятью, связанные с конкуренцией за разделяемый ресурс. Дальнейшее развитие данного направления работ предполагает реализацию предложенных решений для распределенных вычислений – ожидается, что это позволит достичь наибольшего ускорения и масштабируемости.

Литература

1. Батищев Д.И., Старостин Н.В., Филимонов А.В. Многоуровневый алгоритм решения задачи компоновки интегральных схем. Системы управления и информационные технологии. 2007. № 3 (29). С. 48-52.
2. Старостин Н.В., Филимонов А.В., Балашов В.В. Решение задачи размещения элементов специализированных больших интегральных схем на основе базовых матричных кристаллов. Системы управления и информационные технологии. 2009. № 2-1 (36). С. 189-194.
3. Старостин Н.В., Балашов В.В. Использование гиперграфов для решения задачи ортогональной трассировки больших интегральных схем с нерегулярной структурой. Радиотехника и электроника. 2008. Т. 53. № 5. С. 618-623.
4. Власов С.Е., Годовицын М.М., Старостин Н.В. Концепция многоуровневой трассировки цепей интегральных схем с использованием виртуальных каналов. Успехи кибернетики. 2020. Т. 1. № 1. С. 8-16.
5. Афраймович Л.Г., Власов В.С., Куликов М.С., Прилуцкий М.Х., Старостин Н.В., Филимонов А.В. Планирование и оперативное управление процессом изготовления сложных изделий. В сборнике: XII всероссийское совещание по проблемам управления ВСПУ-2014. Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН. 2014. С. 5138-5149.
6. Афраймович Л.Г., Власов В.С., Прилуцкий М.Х., Седаков Д.В., Старостин Н.В., Филимонов А.В., Куликов М.С. Задачи планирования и оперативного управления процессом изготовления интегральных схем с микронными и субмикронными топологическими нормами. Автоматизация в промышленности. 2014. № 8. С. 17-21.
7. Штанюк А.А., Семенов А.О. Проблема анализа топологии интегральных схем на основе GDSII файлов. Инженерные и информационные технологии, экономика и менеджмент в промышленности: Сборник научных статей по итогам второй международной научной конференции. Волгоград, 2020. с. 334-336.

8. Галашов Д.А., Штанюк А.А. Постановка задачи исследования алгоритмов проверки изоморфизма гиперграфов при анализе топологии интегральных схем на основе GDSII и DEF файлов. Информационные системы и технологии ИСТ-2020: сборник трудов Международной научно-технической конференции. - Нижний Новгород, 2020. с.743-749.

АНТИСИММЕТРИЧНЫЕ ДИФФЕОМОРФИЗМЫ И БИФУРКАЦИИ ДВОЙНОГО ОТОБРАЖЕНИЯ ЭНО[1*]

С.В. Гонченко[1,2], Н.Г. Зеленцов[1,2], К.А. Сафонов[1,2]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского*
[2]*Научно-образовательный математический центр «Математика технологий будущего»*

В работе изучаются бифуркации консервативного и обратимого двойного отображения Эно, которое является суперпозицией двух антисимметричных стандартных отображений Эно.

Ключевые слова: отображение Эно, обратимый диф-феоморфизм, бифуркация «вилка», бифуркация удвоения периода.

1. Введение

В работе рассматривается двухпараметрическое семейство отображений вида

$$H_{M,c}: \bar{x} = M + cx - y^2, y = M + c\bar{y} - \bar{x}^2, \qquad (1)$$

где M и c – параметры. Это отображение при c ≠ 0 является сохраняющим площадь диффеоморфизмом плоскости, его якобиан $J \equiv 1$. Кроме того, отображение $H_{M,c}$ является еще и обратимым относительно инволюции $h: (x, y) \to (y, x)$ (см. раздел 2.).

Напомним, что инволюцией называется отображение I, квадрат которого является тождественным, т.е. $I^2 \equiv Id$, а отображение H называется обратимым (относительно инволюции I), если оно сопряжено своему обратному в силу соотношения

$$H = I^{-1} \circ H^{-1} \circ I = I \circ H^{-1} \circ I.$$

Отображение $H_{M,c}$ будем называть двойным отображением Эно, поскольку оно является композицией $H_{M,c} = T_1 \circ T_2$ отображений $T_1: \bar{x} = y, \bar{y} = c^{-1}x - c^{-1}(M - y^2)$ и $T_2: \bar{x} = y, \bar{y} = cx + M - y^2$, которые являются отображениями Эно с якобианами $J_1 = -c^{-1}$ и $J_2 = -c$. Соответственно, $H_{M,c}$ – консервативное отображение. Кроме того, оно еще является обратимым относительно инволюции $h: x \to y, y \to x$, так как составляющие его отображения-сомножители T1 и T2 являются антисимметричными, см. определение 1.

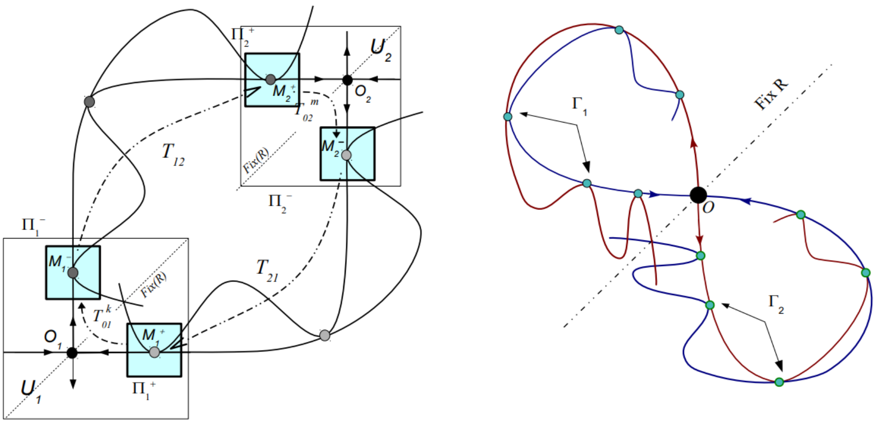


Рис. 1. Примеры обратимых двумерных диффеоморфизмов: (a) диффеоморфизм с симметричным негрубым гетероклиническим контуром; (b) диффеоморфизм с симметричной негрубой гомоклинической восьмеркой – он имеет два симметричных гомоклинических касания инвариантных многообразий одной симметричной седловой неподвижной точки.

[1*] Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-01-00607.

Основные элементы теории антисимметричных отображений представлены в разделе 2. Главное свойство таких отображений – это то, что их композиция является отображением, обратимым относительно заданной инволюции (см. лемму 1).

Заметим, что отображение $H_{M,c}$ было введено в [1,2] как нормальная форма отображений первого возвращения в случае обратимых двумерных диффеоморфизмов с симметричным негрубым гетероклиническим контуром, рис.1а, и с двумя симметричными гомоклиническими касаниями, рис. 1б. Соответственно, отображение $H_{M,c}$ нужно также относить к универсальным гомоклиническим отображениям [3].

2. Антисимметричные отображения

Пусть T1 – диффеоморфизм в R^n, и I – инволюция.

Определение 1. Диффеоморфизмы T_1 и $T_2 = I \circ T_1^{-1} \circ I$ будем называть *антисимметричными* относительно инволюции I, или I-*антисимметричными*.

Лемма 1. Пусть диффеоморфизмы T_1 и T_2 являются I-*антисимметричными*. Тогда диффеоморфизм $H = T_1 T_2$ является *обратимым* диффеоморфизмом с инволюцией I.

Рассмотрим пример, где T1 – это обобщенное отображение Эно

$$T_1 : \bar{x} = y, \bar{y} = bx + F(y), \tag{2}$$

где $F(y)$ – некоторая достаточно гладкая функция. Якобиан отображения (2) равен -b, и поэтому при b≠0 отображение (2) является диффеоморфизмом плоскости. Обратное к нему отображение T_1^{-1} имеет вид

$$T_1^{-1} : \bar{x} = b^{-1}\big(y - F(x)\big), \bar{y} = x. \tag{3}$$

Найдем вид антисимметричного для T1 отображения $T_2 = h \circ T_1^{-1} \circ h$ в случае инволюции $h: x \to y, y \to x$. Сначала найдем вид отображения T_2. Для этого, в правых частях формулы (3) нужно поменять x на y и y на x, а в левых – поменять $\bar{x}$ на $\bar{y}$ и $\bar{y}$ на $\bar{x}$. Тогда получим, что отображение T_2 имеет вид

$$T_2 : \bar{x} = y, \bar{y} = b^{-1}\big(x - F(y)\big). \tag{4}$$

Заметим, что это тоже обобщенное отображение Эно, но уже с якобианом $-b^{-1}$ и с нелинейностью $-b^{-1}F(y)$.

Из (2) и (4) получаем, что отображение $H = T_1 T_2$ имеет вид

$$H : \bar{x} = b^{-1}\big(x - F(y)\big), \bar{y} = by + F(\bar{x}). \tag{5}$$

По лемме 1 оно является обратимым относительно инволюции h. Нетрудно видеть, что в случае $F(y) = M - y^2$ и $b = c$ отображение (5) это в точности наше отображение $H_{M,c}$, см. формулу (1).

Кажется, что указанный метод построения обратимых отображений по данным отображению T и инволюции I является новым. С его помощью можно строить различные конкретные примеры обратимых отображений, в зависимости только от исходных отображения T и инволюции I.

3. Бифуркации в семействе $H_{M,c}$

Отображение $H_{M,c}$ может иметь самое большое четыре неподвижные точки. Две точки O1(x1, y1) и O2(x2, y2) лежат на линии S: x=y неподвижных точек инволюции h и имеют следующие координаты

$$x_1 = y_1 = \frac{1 - c + \sqrt{(1-c)^2 + 4M}}{2}, x_2 = y_2 = \frac{1 - c - \sqrt{(1-c)^2 + 4M}}{2}.$$

Другие две точки O3(x3, y3) и O4(x4, y4) являются симметричным относительно S и имеют координаты

$$x_3 = y_4 = \frac{1 - c - \sqrt{-3(1-c)^2 + 4M}}{2}, x_4 = y_3 = \frac{1 - c + \sqrt{-3(1-c)^2 + 4M}}{2}.$$

Точки O1 и O2 рождаются на кривой Fold: $M = -(1-c)^2/4$. Симметричная пара точек O_3 и O_4 появляется в результате бифуркации «вилки» (pitchfork) на кривой PF1: $M = 3\,(1-c)^2/4$.

На бифуркационной диаграмме, рис. 2(а), на плоскости параметров (c, M) показаны как эти бифуркационные кривые, так и кривые PD1, PD2, PD3, отвечающие бифуркациям удвоения периода для неподвижных точек, а также кривая бифуркации “вилки” PF2 для 2-периодической орбиты, которые имеют следующие уравнения

$$PD_1\colon M = 1 - \frac{(1-c)^2}{4}, PD_2\colon M = \frac{(1+c)(3c-1)}{4},$$

$$PD_3\colon M = \frac{(c-3)(3c-1)}{4} \text{ при } c < 0,\ PF_2\colon M = \frac{3(1+c)^2}{4}.$$

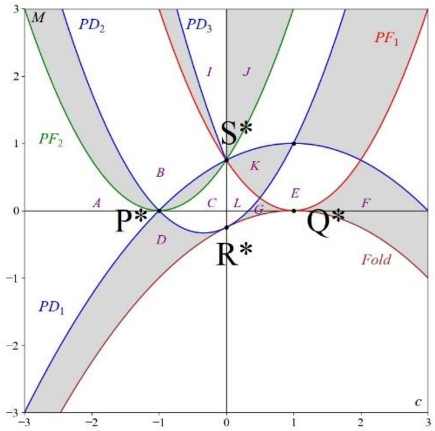


Рис. 2. Бифуркационная диаграмма на плоскости (c, M) для отображения $H_{M,c}$ и соответствующие фазовые портреты

Напомним, что невырожденные консервативные бифуркации «вилки» и удвоения периода бывают двух типов: суперкритическая и субкритическая, когда бифурцируют соответственно эллиптическая и седловая неподвижные точки. Ниже перечислены все указанные выше типы бифуркаций и описаны их свойства.

Параболическая бифуркация (Fold) отвечает рождению пары неподвижных точек O1 и O2, при этом: (а) при $c < 0$ и $c > 1$ точка O1 является эллиптической, а точка O2 – седловой; (б) при $0 < c < 1$ точка O1 является седловой, а точка O2 – эллиптической.

Бифуркация «вилка» (PF1) отвечает рождению симметричная пары неподвижных точек O3 и O4 при этом: (а) при $c < 0$ суперкритическую бифуркацию претерпевает неподвижная точка O1; (б) при $0 < c < 1$ субкритическую бифуркацию претерпевает неподвижная точка O1; (в) при $c > 1$ субкритическую бифуркацию претерпевает неподвижная точка O2.

Бифуркации удвоения периода (PD1, PD2, PD3).

Кривая PD1 отвечает рождению 2-периодической орбиты (P_1, P_2), лежащей на линии S, здесь P1 = (z1, z1) и P2 = (z2, z2), где

$$z_{1,2} = \frac{c + 1 \pm \sqrt{(c+1)^2 - 4(c + 1 - M)}}{2}, z_1 > z_2;$$

при этом: (а) при $c < 1$ и $c > 0$ суперкритическую бифуркацию претерпевает неподвижная точка O1; (б) при $1 < c < 0$ субкритическую бифуркацию претерпевает неподвижная точка O1.

Кривая PD2 соответствует рождению симметричной 2-периодической орбиты (P_3, P_4), не принадлежащей линии S:x=y, здесь P3 = (z3, z4) и P4 = (z4, z3), где

$$z_{3,4} = \frac{-(c+1) \pm \sqrt{(c+1)^2 - 4(c(1+c) - M)}}{2}, z_3 > z_4;$$

при этом: (а) при $c <-1$ субкритическую бифуркацию претерпевает неподвижная точка O1; (б) при $1 < c < 0$ суперкритическую бифуркацию претерпевает неподвижная точка O1; (в) при $c > 0$ суперкритическую бифуркацию претерпевает неподвижная точка O2.

Заметим, что кривая PD_3 существует только при отрицательных значениях c и соответствует суперкритической бифуркации удвоения для симметричной пары неподвижных точек O_3 и O_4.

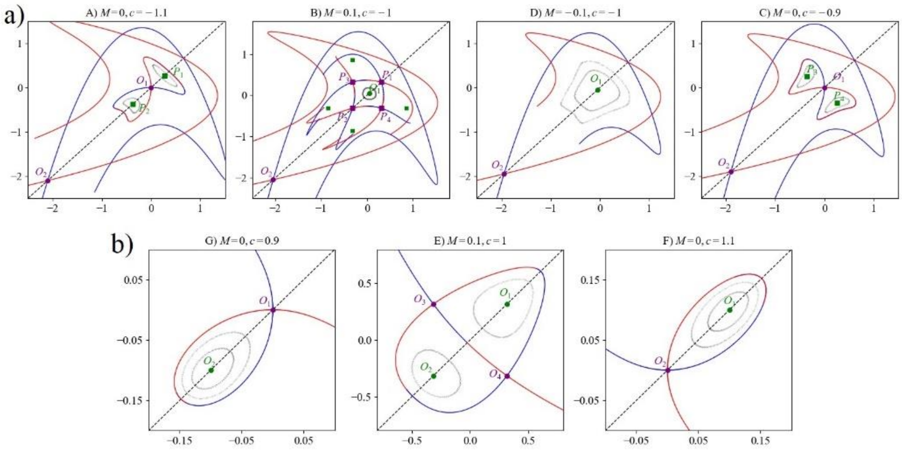


Рис. 3. Фазовые портреты, иллюстрирующие бифуркации коразмерности 2 в точках $P^*(M = 0, c = -1)$ и $Q^*(M = 0, c = 1)$

Бифуркация «вилка» для 2-периодической орбиты.

Бифуркационная кривая PF2 соответствует суперкритической бифуркации “вилка”, при этом: (а) при $c < -1$ бифуркацию претерпевает 2-периодическая орбита (P_1, P_2); (б) при $-1 < c < 0$ бифуркацию претерпевает 2-периодическая орбита (P_3, P_4); (в) при $c > 0$ бифуркацию одновременно претерпевают 2-периодические орбиты (P_1, P_2) и (P_3, P_4).

При $c \neq 0$ отображение $H_{M,c}$ является диффеоморфизмом, а его бифуркации, являются невырожденными, кроме двух точек P$^*(M = 0, c = -1)$ и Q$^*(M = 0, c = 1)$, которые отвечают бифуркациям коразмерности 2. На рис.3 показаны фазовые портреты, иллюстрирующие эти бифуркации: рис.3a (портреты A-D) и 3b (портреты E-G) отвечает бифуркациям вокруг точек P* и Q*, соответственно.

Отметим, что на бифуркационной диаграмме есть еще две особые точки на линии $c = 0$, точка R$^*(M = -1/4, c = 0)$ и S$^*(M = 3/4, c = 0)$, которые отвечают сингулярным бифуркациям. Эти бифуркации также будут рассмотрены в докладе.

Литература

1. A. Delshams, S.V. Gonchenko, V.S. Gonchenko, J.T. Lazaro, O. Sten’kin, Abundance of attracting, repelling and elliptic peri-odic orbits in two-dimensional reversible maps // Nonlinearity, 26 (2013), 1–33.
2. Delshams, M. Gonchenko, S. Gonchenko, T. Lazaro, Mixed dynamics of 2- dimensional reversible maps with a symmetric couple of quadratic homoclinic tangencies// Discrete and Continuous Dynamical Systems - A, 2018, 38 (9) : 4483-4507.
3. S.V. Gonchenko, V.S.Gonchenko, L.P.Shilnikov, On homoclin-ic origin of Henon-like maps // Regular and Chaotic Dynamics, 2010, v.15, Nos.4-5, 462-481.

О СЦЕНАРИЯХ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ГОМОКЛИНИЧЕСКИХ АТТРАКТОРОВ В ТРЁХМЕРНЫХ НЕОРИЕНТИРУЕМЫХ ОТОБРАЖЕНИЯХ[1*]

А.С. Гонченко[1], Е.А. Самылина[2]

[1]Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
[2]Высшая школа экономики

В работе изучаются сценарии возникновения странных гомоклинических аттракторов (содержащих только одну неподвижную точку типа седло) в случае однопараметрических семейств трёхмерных неориентируемых отображений. Описывается несколько типов таких сценариев, которые приводят к появлению дискретных гомоклинических аттракторов, включая аттракторы типа Лоренца и аттракторы восьмерочного типа (которые содержат седловую неподвижную точку), а также два типа спиральных странных аттракторов (которые содержат седло-фокусные неподвижные точки с одномерными и двумерными неустойчивыми многообразиями соответственно). Также подчеркиваются особенности таких сценариев по сравнению с их аналогами в ориентируемом случае. В докладе также приводятся примеры реализации указанных сценариев в случае трёхмерных неориентируемых обобщенных отображений Эно.

Ключевые слова: странный аттрактор, аттрактор Лоренца, спиральный аттрактор, гомоклиническая траектория, инвариантная кривая, трёхмерное обобщенное отображение Эно.

1. Введение

В теории динамических систем темы, связанные с построением и исследованием сценариев возникновения динамического хаоса, являются одними из наиболее приоритетных и востребованных не только для самой теории, но и для многочисленных приложений. Классические работы Э. Лоренца [1], М. Эно [2] и Л. П. Шильникова [3] заложили основу тематики, связанной с изучением странных гомоклинических аттракторов, т. е. таких аттракторов, которые содержат либо положения равновесия в случае потоков, либо неподвижные (периодические) точки в случае отображений вместе со всеми гомоклиническими орбитами.

Для трёхмерных отображений задача изучения дискретных гомоклинических аттракторов и сценариев их возникновения была поставлена в работе [4], в которой также был феноменологически описан ряд таких сценариев и приведены примеры их реализации в конкретных моделях. Эти исследования были продолжены в серии работ, см., например, [5,6], но случай неориентируемых отображений подробно не изучался. В данной работе мы анализируем сценарии появления дискретных гомоклинических аттракторов неориентируемых трёхмерных отображений с двух различных, но дополняющих друг друга позиций: мы строим абстрактные феноменологические сценарии появления таких аттракторов, а также находим примеры их реализации в однопараметрических семействах трёхмерных неориентируемых отображений типа Эно. Мы выделяем 4 типа таких неориентируемых гомоклинических аттракторов: дискретные аттракторы Лоренца и восьмерочные аттракторы, содержащие седла, а также спиральные восьмерочные аттракторы и дискретные аттракторы Шильникова, содержащие седло-фокусы с одномерным и двумерным неустойчивым многообразиями соответственно. Мы показываем особенности феноменологических сценариев и сравниваем их со сценариями для аналогичных аттракторов в ориентируемом случае. Мы также обсуждаем некоторые новые методы (карты седел, обобщенные диаграммы Ляпунова и т.п.), которые существенно упрощают процесс поиска странных гомоклинических аттракторов.

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 17-11-01041).

2. Сценарии возникновения странных аттракторов в неориентируемом случае

Отображение (диффеоморфизм) R^n называется неориентируемым, или меняющим ориентацию, если его якобиан во всех точках R^n отрицательный. Как и в ориентируемом случае [6], у трёхмерных неориентируемых отображений могут существовать дискретные гомоклинические аттракторы различных типов. Здесь мы даём феноменологическое описание сценариев возникновения некоторых таких аттракторов. Все они также могут реализовываться в однопараметрических семействах T_μ трёхмерных неориентируемых отображений, и также все начинаются с тех значений μ, при которых T_μ имеет асимптотически устойчивую неподвижную точку O_μ, которая при некотором значении параметра μ теряет устойчивость.

2.1. Сценарий 1 возникновения дискретного неориентируемого аттрактора Лоренца (путь (a)– (b)– (c)– (d) рисунка 1)

При некотором значении μ точка O_μ теряет устойчивость в результате бифуркации удвоения периода: она сама становится седловой неподвижной точкой типа (2,1), т. е. с двумерным устойчивым и одномерным неустойчивым инвариантными многообразиями, а в её окрестности рождается устойчивый цикл периода 2 (он в этот момент становится аттрактором), рис.1(b). Затем при изменении параметра, инвариантные многообразия седловой точки, пересекаются и, когда $W^u(O)$ целиком лежит в поглощающей области, образуется гомоклинический аттрактор. Поскольку точка O_μ имеет в этот момент мультипликатор $\lambda_1 < -1$, то произведение двух других её устойчивых мультипликаторов λ_2 и λ_3 будет положительным (в силу неориентируемости отображения). Рассмотрим случай, когда

$$0 < \lambda_3 < \lambda_2 < 1.$$

Тогда конфигурация получающегося гомоклинического аттрактора, как и в ориентируемом случае, будет очень похожа на лоренцевскую, см. рис. 1(c). Однако здесь есть существенная разница, состоящая в том, что точки гомоклинических траекторий на $W^u(O)$ будут лежать на одной и той же инвариантной кривой, входящей в O_μ, тогда как в ориентируемом случае они будут накапливаться к O_μ, прыгая поочередно по двум разным кривым, образующим границу некоторого клина [6]. Таким образом, неориентируемый дискретный аттрактор Лоренца, в принципе, не имеет потокового аналога (для соответствующего потока две неустойчивые сепаратрисы должны лечь на одну и ту же траекторию, входящую в состояние равновесия, что невозможно).

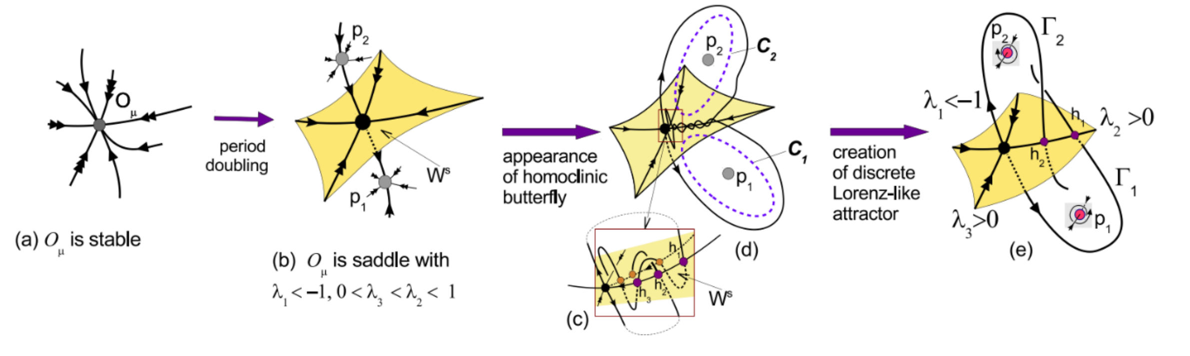


Рис. 1. Иллюстрация бифуркационного сценария, приводящего к возникновению неориентируемого аттрактора Лоренца

2.2. Сценарий 2 возникновения дискретного неориентируемого восьмерочного аттрактора (путь (a)– (b)– (d)– (e) рисунка 2)

Начало этого сценария такое же, как и в первом случае: точка O_μ теряет устойчивость в результате бифуркации удвоения периода и становится седловой, а в её окрестности рождается устойчивый цикл периода 2, рис.2; затем при изменении параметра, после того как инвариантные многообразия точки O_μ пересекутся, образуется гомоклинический аттрактор. Принципиальное отличие состоит в том, что у этого аттрактора мультипликаторы точки O_μ такие, что $\lambda_1 < -1$ и

$$-1 < \lambda_2 < \lambda_3 < 0.$$

Тогда по форме гомоклинический аттрактор, рис.2(d), будет очень похож на восьмерочный аттрактор [8].

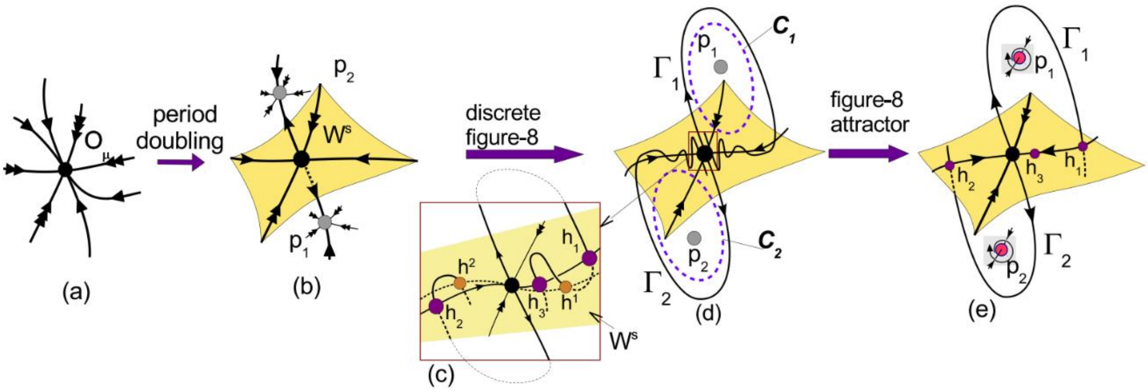


Рис. 2. Иллюстрация бифуркационного сценария, приводящего к возникновению неориентируемого восьмерочного аттрактора

2.3. Сценарий 3 возникновения дискретного неориентируемого спирального восьмерочного аттрактора (путь (a)− (b)− (c)− (d) рисунка 3)

Начало этого сценария такое же, как и в первых двух случаях. Здесь также точка O_μ теряет устойчивость в результате бифуркации удвоения периода. Принципиальное отличие состоит в том, что в момент образования гомоклинического пересечения мультипликаторы точки O_μ такие, что опять $\lambda_1 < -1$, но устойчивые мультипликаторы образуют комплексно-сопряженную пару $\lambda_{2,3} = \lambda e^{\pm i\varphi}$, где $0 < \lambda < 1$ и $\varphi \neq 0, \pi$. Это влечет то, что образовавшийся дискретный гомоклинический аттрактор, см. рис. 3(d), будет очень похож по форме на хорошо известный спиральный аттрактор, встречающийся у трёхмерных потоков с центральной симметрией, имеющих состояние равновесия типа седло-фокус с двумерным устойчивым и одномерным неустойчивым инвариантными многообразиями.

2.4. Сценарий 4 возникновения дискретного неориентируемого аттрактора Шильникова (путь (a)− (b)− (c)− (d)− (e) рисунка 4)

Этот сценарий существенно отличается от всех рассмотренных выше, во-первых, тем, что первой бифуркацией потери устойчивости точки O_μ здесь является бифуркация Андронова-Хопфа, также, как и в случае ориентируемого аттрактора Шильникова [4,5,6], а во-вторых, образующийся гомоклинический аттрактор будет лежать в «двусторонней» воронке (см. рис. 4(e)). В результате бифуркации Андронова-Хопфа неподвижная точка становится седло-фокусом типа (1,2), с мультипликаторами $\lambda_1 < -1$ и $\lambda_{2,3} = \lambda e^{\pm i\varphi}$, где $\lambda > 1$ и $\varphi \neq 0, \pi$, т.е. с одномерным устойчивым и двумерным неустойчивым инвариантными многообразиями, а в её окрестности рождается замкнутая инвариантная кривая L_μ, рис. 4(b). Соответственно предполагается, что при дальнейшем изменении μ сначала аттрактором является эта кривая L_μ, а затем она теряет устойчивость, и формируется странный гомоклинический аттрактор, содержащий седло-фокус и его неустойчивое двумерное многообразие. При этом, как и в ориентируемом случае, важным этапом в становлении аттрактора является образование неориентируемой “воронки Шильникова”. Однако здесь воронка образуется по-другому – после бифуркации удвоения инвариантной кривой L_μ (рис. 4(c)), и последующей смены типа периода 2 инвариантной кривой с узлового на фокусный. В результате неустойчивое многообразие точки O_μ начинает накручиваться одновременно на обе кривые L_μ^1 и L_μ^2, рис. 4(d), и в образовавшуюся двустороннюю воронку будут втягиваться все траектории из поглощающей области.

Подчеркнём ещё раз особенность бифуркации удвоения инвариантной кривой в неориентируемом случае, в результате которой сама устойчивая кривая становится седлового типа, а в её окрестности рождаются две устойчивые периода 2 инвариантные кривые примерно той же длины. В ориентируемом случае при бифуркации удвоения инвариантной кривой в её окрестности рождается одна устойчивая инвариантная кривая двойной длины, обвивающая исходную, см. подробнее в [8].

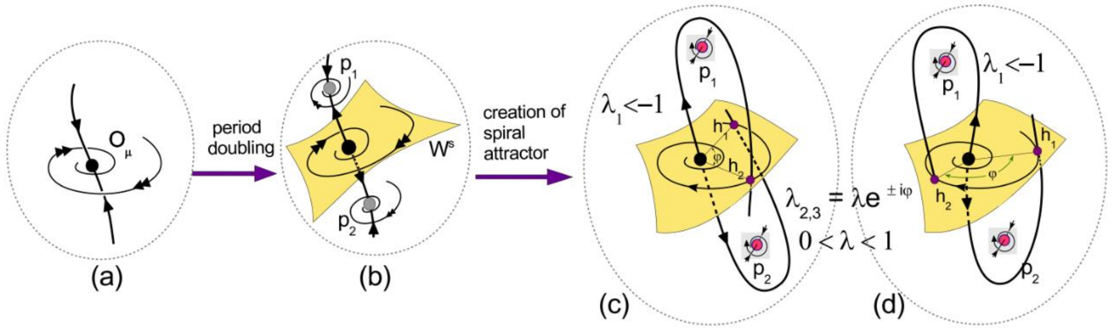


Рис. 3. Иллюстрация бифуркационного сценария, приводящего к возникновению неориентируемого спирального восьмерочного аттрактора

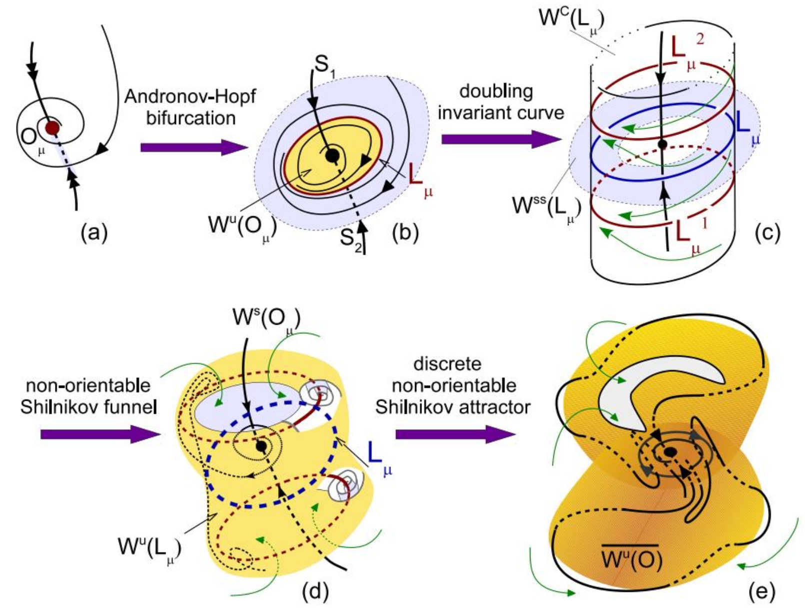


Рис. 4. Иллюстрация бифуркационного сценария, приводящего к возникновению дискретного неориентируемого аттрактора Шильникова

3. Заключение

Сценарии развития хаоса, связанные с появлением дискретных гомоклинических аттракторов в ориентируемых трёхмерных отображениях, были предложены в работе [4]. Впоследствии соответствующая теория и методы поиска таких аттракторов были развиты в [5,6,8]. Неориентируемый случай изучен гораздо меньше, но, как показано в настоящей статье, см. также [9,10], он также очень интересен и важен для теории многомерного хаоса. Так, теория странных аттракторов трёхмерных ориентируемых отображений является важным шагом для понимания структуры хаоса четырехмерных потоков, тогда как аналоги странных аттракторов неориентируемых отображений естественно ожидать только у потоков размерности 5 и выше. Но здесь также возникает много новых вопросов и новых задач. В частности, большой интерес представляет собой развитие теории псевдогиберболичности дискретных неориентируемых гомоклинических аттракторов. Мы пока не нашли примеров таких аттракторов с неподвижными точками. В любом случае, мы не видим никаких принципиальных препятствий для того, чтобы дискретные неориентируемые аттракторы Лоренца и восьмерочные аттракторы не могли бы быть псевдогиперболическими. Однако, пока что в неориентируемом случае псевдогиперболичность доказана только для аттракторов Лоренца периода 2 [11]. Последние аттракторы интересны ещё и тем, что их кризисы приводят к появлению аттракторов (в том числе псевдогиперболических) новых типов, потоковые аналоги которых не были известны даже для трёхмерного случая. Мы отсылаем читателя к работе [11], где соответствующие проблемы были подробно изучены.

Литература

1. Lorenz E. N. Deterministic nonperiodic flow //Journal of the atmospheric sciences. – 1963. – Т. 20. – №. 2. – С. 130-141.
2. Hénon, M. A two-dimensional mapping with a strange attractor. The Theory of Chaotic Attractors. (New York: Springer, 1976), pp. 94–102.
3. Шильников Л. П. Теория бифуркаций и турбулентность //ИЗБРАННЫЕ НАУЧНЫЕ ТРУДЫ. – Изд-во ННГУ, 2017. – С. 128-135.
4. Гонченко А. С., Гонченко С. В., Шильников Л. П. К вопросу о сценариях возникновения хаоса у трёхмерных отображений //Нелинейная динамика. – 2012. – Т. 8. – №. 1. – С. 3-28.
5. Gonchenko A., Gonchenko S., Kazakov A., Turaev D Simple scenarios of onset of chaos in three-dimensional maps //International Journal of Bifurcation and Chaos. – 2014. – Т. 24. – №. 08. – С. 1440005.
6. Gonchenko A. S., Gonchenko S. V. Variety of strange pseudohyperbolic attractors in three-dimensional generalized Hénon maps //Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2016. – Т. 337. – С. 43-57.
7. Gonchenko S.V., Simo C. and Vieiro A., Richness of dynamics and global bifurcations in systems with a homoclinic figure-eight // Nonlinearity, 2013, v.26, No.3, 621-678.
8. Gonchenko A., Gonchenko S., Turaev D., Doubling of invariant curves and chaos in three-dimensional diffeomorphisms // Chaos (to appear).
9. Гонченко А. С., Козлов А. Д. О сценариях возникновения хаоса в трёхмерных неориентируемых отображениях //Журнал Средневолжского математического общества. – 2016. – Т. 18. – №. 4. – С. 17–29.
10. A. S. Gonchenko, M. S. Gonchenko, A. D. Kozlov, E. A. Samylina. On scenarios of the onset of homoclinic attractors in three-dimensional non-orientable maps // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. – 2021. – Т. 31. – №. 4. – С. 043122.
11. Gonchenko S.V., Gonchenko A.S., Kazakov A.O., Samylina E.A. On discrete Lorenz-like attractors. Chaos, 31, 2, 023117, (2021).

О БИФУРКАЦИЯХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ГОМОКЛИНИЧЕСКИМИ ТРАЕКТОРИЯМИ К НЕГРУБЫМ ПЕРИОДИЧЕСКИМ ДВИЖЕНИЯМ[1*]

О.В. Гордеева

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Описываются задачи, связанные с бифуркациями динамических систем с гомоклиническими траекториями.

Ключевые слова: трансверсальное пересечение, касание многообразий, сложное седло, седло-узел, бифуркационная диаграмма, топологическая схема Бернулли.

Одними из основных задач в теории бифуркаций являются задачи, связанные с исследованием структуры множества N траекторий, целиком лежащих в малых окрестностях гомоклинических (двоякоасимптотических) траекторий к периодическим орбитам, а также с исследованием бифуркаций этого множества при изменении параметров системы.

В случае грубой седловой периодической орбиты, двояко-асимптотические к ней траектории называются гомоклиническими траекториями Пуанкаре (в случае потоков используется также термин «гомоклиническая кривая Пуанкаре»). Такая траектория называется грубой или трансверсальной, если устойчивое и неустойчивое многообразия седловой периодической орбиты пересекаются по ней трансверсально. Гомоклинические траектории у многомерных динамических систем были открыты Пуанкаре [1] еще в конце 19-го века. Однако, решение задачи о структуре соответствующего множества N было получено намного позже в работах Смейла [2] и Шильникова [3]. При этом в работе [3] было дано полное описание множества N траекторий, целиком лежащих в окрестности грубой гомоклинической траектории Пуанкаре:

Теорема Шильникова [3]: N является локально максимальным равномерно гиперболическим множеством, траектории которого находятся во взаимно-однозначном соответствии с траекториями топологической схемы Бернулли из двух символов.

С работы Гаврилова и Шильникова [4] началось систематическое исследование бифуркаций систем с негрубыми гомоклиническими траекториями Пуанкаре, или как сейчас принято говорить, систем с гомоклиническими касаниями. В самой работе [4] были рассмотрены трехмерные системы с квадратичными гомоклиническими касаниями. По сути в этой работе были заложены основы математической теории негиперболического хаоса.

В работе Лукьянова и Шильникова [5] были изучены бифуркации в однопараметрическом семействе X_μ многомерных систем таком, что при $\mu=0$ система X_0 имеет трансверсальную гомоклиническую траекторию к негрубой периодической траектории L_0 седло-узлового типа. Было показано, что множество N_μ траекторий, целиком, лежащих в окрестности U гомоклинической структуры имеет разное описание, в зависимости от μ. Пусть в семействе X_μ параметр μ выбран так, что при $\mu<0$ седло-узел L_0 распадается на две периодические траектории, устойчивую L_s и седловую L_u, а при $\mu>0$ исчезает. Тогда

Теорема **1** из [5]. Множество N_μ при $\mu\leq 0$ допускает полное описание: N_0 и N_μ без L_s гомеоморфно надстройке над схемой Бернулли из двух символов.

Случай $\mu>0$ более сложный. Здесь возможны случаи, когда при $\mu\to 0$ в N_μ происходит бесконечное множество бифуркаций (в том числе, связанных с возникновением подков Смейла); бифуркации не происходят, но структура N_μ меняется за счет того, что траектории выходят из рассматриваемой окрестности; N_μ остается гомеоморфным надстройке над схемой Бернулли из двух символов, когда в U выполняются некоторые условия неравномерной гиперболичности (см. Теорема 5 из [5]). Полученные в [5] результаты, помимо их важности для теории глобаль-

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке гранта 0729-2020-0036 Министерства Науки и Высшего Образования РФ.

ных бифуркаций, послужили еще и математическим обоснованием известного сценария «перехода к хаосу через перемежаемость», когда большой странный аттрактор проявляется сразу же после исчезновения устойчивой периодической траектории.

В работах [6,7] были исследованы бифуркации в двухпараметрическом семействе f_μ систем, содержащем систему с квадратичным гомоклиническим касанием инвариантных многообразий седло-узловой периодической траектории, где один параметр μ_1 отвечает за бифуркации седло-узла, а второй μ_2 — за расщепление гомоклинического касания. В этих работах было показано, что отображение первого возвращения при подходящей замене координат и параметров может быть приведено (в некоторой области параметров RD, см. рис.1) к хорошо известному сильно диссипативному отображению Эно. На основании этого была построена бифуркационная диаграмма для однообходных периодических траекторий, см. рис. 1, описание которой дается следующей теоремой.

Теорема 1 [6,7]

1) На плоскости параметров (μ_1, μ_2) в любой достаточно малой окрестности начала координат существует счетное множество непересекающихся областей Δ_k таких, что при $\mu \in \Delta_k$ диффеоморфизм f_μ имеет асимптотически устойчивую однообходную периодическую траекторию.
2) Границами областей Δ_k являются бифуркационные кривые L_k^+ и L_k^-, отвечающие бифуркациям коразмерности один, седло-узловой и удвоения периода соответственно.
3) При $k \to +\infty$ области Δ_k накапливаются к кривой $L_h\{L_+ \cap \{\mu_1 < 0\}\}$

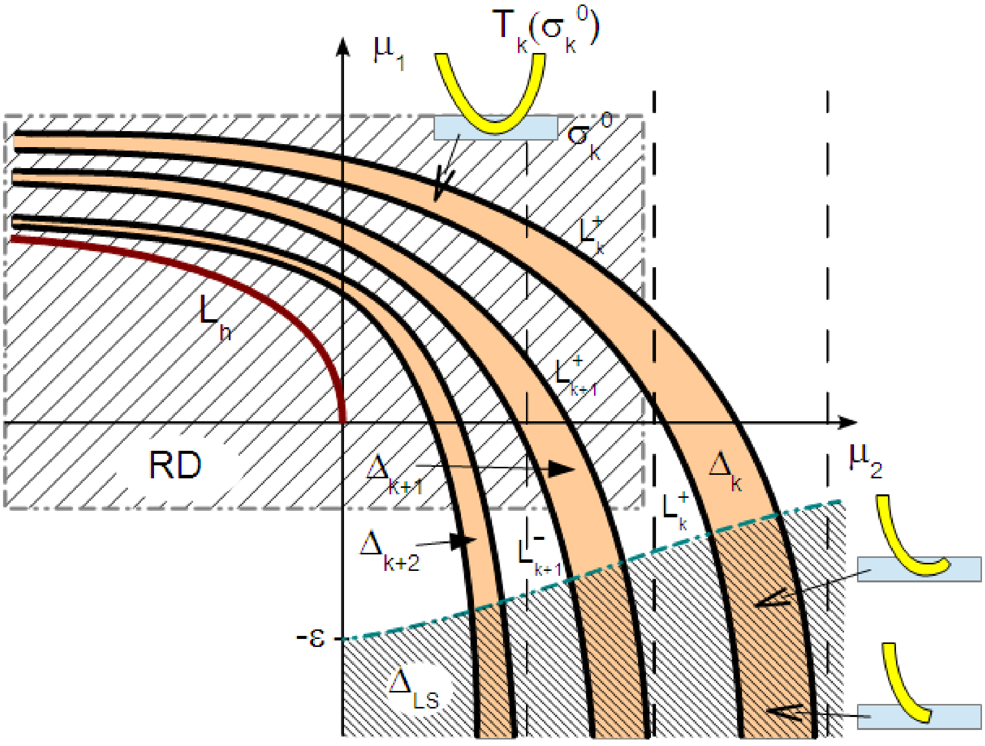


Рис. 1. Бифуркационная диаграмма

Логическим продолжением данных задач является рассмотрение динамических систем с негрубым двукратным вырождением периодического движения типа сложное седло многообразия, которого пересекаются трансверсально [9]. Обозначим через B_2 топологическую схему Бернулли из двух символов, а через N_μ множество траекторий диффеоморфизма f_μ. Показывается, что коразмерность такой динамической системы два. Оба параметра отвечают за бифуркации, связанные со сложным седлом. Основным результатом работы является

Теорема2. При всех малых значениях параметра $\mu = (\mu_1, \mu_2)$множество N_μ всегда содержит нетривиальное подмножество Ω_μ, траектории которого находятся во взаимно-однозначном соответствии с траекториями B_2, и кроме того (i) $N_\mu = \Omega_\mu$ при $\mu \in E_1$; (ii) $N_\mu = \Omega_\mu + O_2 + O_3$ при

$\mu \in E_2$ и здесь множество Ω_μ является равномерно гиперболическим. При $\mu \in L_1$ множество Ω_μ содержит седло-узел O_{12} и $N_\mu = \Omega_\mu + O_3$ (скачок гиперболичности); при $\mu \in L_2$ множество Ω_μ равномерно гиперболично и $N_\mu = \Omega_\mu + O_{23}$ (рисунок 2,3).

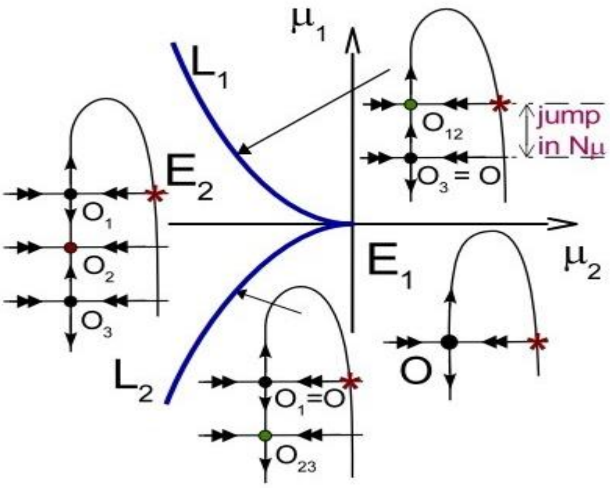


Рис. 2. Бифуркационная диаграмма

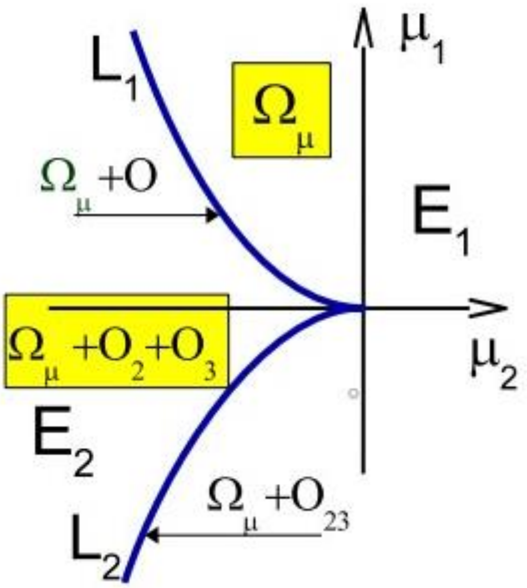


Рис. 3. Бифуркационная диаграмма

Эта задача впервые была поставлена еще в обзоре [8]. Представляет интерес задача квадратичного касания многообразий сложного седла. Данная задача рассмотрена в работе [10], результатом которой служит бифуркационная диаграмма для однообходных периодических траекторий, целиком лежащих в расширенной окрестности гомоклинической структуры.

Литература

1. Poincare H. Les methods nouvells de la mecanique celeste, III, Paris,1899.
2. Smale S. Diffeomorphisms with many periodic points // Diff. And Comb. Topology, Princeton Univ. Press, 1965, 63-80.
3. Шильников Л.П. Об одной задаче Пуанкаре–Биркгофа // Матем. сб. 1967.-т.74(116).-стр.378-397.
4. Н.К. Гаврилов , Л.П. Шильников, О трехмерных динамических системах, близких к системам с негрубой гомоклинической кривой/ I. – Матем сб. – 1972, – т.88(130). – №4. – 475-

492; II. – Матем сб. – 1973. – т.90(132). – №1.- с139-157. Соколинский Л.Б. Организация параллельного выполнения запросов в многопроцессорной машине баз данных с иерархической архитектурой // Программирование. 2001. № 6. С. 13–29.

5. Лукьянов В.И., Шильников Л.П О некоторых бифуркациях динамических систем с гомоклиническими структурами.//ДАН СССР . – 1978. – т. – 243. – №1. – с. 26-29.
6. С.В. Гонченко, О.В. Гордеева, В.И. Лукьянов, И.И. Овсянников. О бифуркациях двумерных диффеоморфизмов с гомоклиническим касанием к седло-узловой неподвижной точке.// Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – Нижний Новгород: Изд-во ННГУ. – 2014. – № 2.
7. Gonchenco S.V, Gordeeva O.V., Lukyyanov V.I., Ovsyannikov I.I. On bifurcations of two-dimensional diffeomorphisms with a quadratic homoclinic tangency to a saddle-node //Regular and chaotic dynamics. V. 19. № 4. 2014. P. 461-473.
8. В.И. Арнольд, В.С. Афраймович, Ю.С. Ильяшенко, Л.П. Шильников , Теория Бифуркаций // Динамические системы-5, Итоги науки и техники, ВИНИТИ, 1986.
9. Gordeeva O.V., Gonchenko S.V. On two-dimensional diffeomorphisms with a transversal homoclinic trajectory to a non-hyperbolic saddle // International Conference-School SHILNIKOV WORKSHOP 2020 17-18 December of 2020. Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 70. 2020. P. 28-30.
10. . Gordeeva O.V. About two-dimensional diffeomorphisms with a quadratic homoclinic tangency to a nonhyperbolic saddle // 7th Bremen Summer School and Symposium Dynamical systems – pure and applied, August 5-9, 2019. The 7th Bremen Summer School and Symposium Dynamical Systems - pure and applied August 5-9, 2019 Faculty of Mathematics University of Bremen. 2019. P. 45-46.

О ДИАГОНАЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ МЕТОДОВ МНОГОЭКСТРЕМАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ ДЛЯ КЛАССА ФУНКЦИЙ С НЕИЗМЕРЯЕМЫМИ ЛИПШИЦЕВЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ ПО НАПРАВЛЕНИЯМ

С.Ю. Городецкий, П.В. Петров

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Предложены многомерные реализации двух методов условной глобальной оптимизации, построенных для класса функций с производными по направлениям, удовлетворяющим условиям Липшица с неизвестным значением константы. Методы разработаны в предположении, что градиенты хотя и существуют, но не могут быть измерены. Указано на результаты представительного тестирования одномерных аналогов методов, показавшие их эффективность. Для многомерной реализации использована двухточечная компонентная безызбыточная диагональная схема, ранее предложенная Я.Д. Сергеевым. Применены нетрадиционные методы оценивания констант Липшица при неизмеряемых производных. Представлена иллюстрация применения метода.

Ключевые слова: условная глобальная оптимизация, многоэкстремальные ограничения, липшицевы производные по направлениям, метод без измерения производных, безызбыточная диагональная схема.

1. Введение

Численные методы, предлагаемые в работе, относятся к достаточно хорошо разработанному классу методов липшицевой многоэкстремальной оптимизации в их различной реализации (укажем лишь на обширную библиографию в [1-4], а также работы [5, 6] и ссылки в [7]). Методы этой группы позволяют эффективно решать сложные многоэкстремальные задачи за счет способности строить существенно неравномерные покрытия исходного множества поиска точками испытаний функций решаемой задачи, адаптирующиеся к ее структуре. Поскольку присущее этим методам планирование места размещения каждого очередного испытания обычно требует существенных вычислительных затрат (что является платой за эффективность такого размещения), областью их применения являются задачи со сложным поведением критериев при значительной затратности их вычисления. Значительная часть построенных методов такого типа не предполагает гладкости критериев, но требует их непрерывности по Липшицу в той или иной метрике.

Для задач, обладающих гладкостью, применяются методы, предполагающие наличие липшицевых производных. В этих методах обычно используются испытания функций задачи, включающие их измерение. Учет производных повышает эффективность методов глобального поиска (см., например, [2], [8]). Однако в приложениях нередко встречаются задачи, критерии в которых хотя и обладают липшицевыми производными, но сами производные недоступны измерению. Замена же точных значений их разностными аппроксимациями устраняет выигрыш от использования оценок производных. Поэтому представляют практический интерес методы, хотя и основанные на предположении о липшицевости производных функций–критериев, но не предполагающие возможности их вычисления.

В разделе 2 описано построение диагонального компонентного метода именно такого типа для задач с функциональными ограничениями. Принятая при построении метода формализация понятия «липшицевость производных» и вытекающие из нее свойства функций приведены в 2.1. Заметим, что данная формализация ранее использовалась автором в [9, 10] при построении триангуляционного компонентного метода многоэкстремальной оптимизации, показавшего свою эффективность. По сравнению с [9] предлагаемый в данной работе метод вычислительно менее трудоемок, и, следовательно, расширяет класс эффективно решаемых прикладных задач.

2. Построение метода условной глобальной оптимизации для выбранного класса функций

Рассматривается задача условной глобальной оптимизации стандартного вида

$$\min f_0(x)\,, x \in X \subset \mathrm{R}^N;\ X = \{x \in D = [0,1]^N : f_i(x) \le 0;\ 1 \le i \le m\}, \tag{1}$$

в которой целевая функция $f_0(x)$, и функции ограничений $f_1(x), \dots, f_\mathrm{m}(x)$ заданы на множестве поиска D в виде единичного гиперкуба $[0,1]^N \subset \mathrm{R}^N$ и относятся к классу $\Phi'_{Lip}(D)$ функций с липшицевыми производными по направлениям, определенному в п.2.1. Значение константы Липшица L неизвестно и подлежит оцениванию. Измерению доступны только значения функций, но не их производные. Поскольку допустимое множество X в условиях задачи замкнуто, то при $X \neq \emptyset$ существуют глобально-оптимальные решения x^* задачи (1), образующие множество глобальных минимумов X^* со значением $f^* = f_0(x^*)$. При пустоте допустимого множества, т.е. при $X = \emptyset$ решения из X^* понимаются в расширенном смысле, как глобальные минимумы невязки в ограничениях задачи (1), а именно:

$$g^* = g(x^*) = \min g(x)\,, x \in D = [0,1]^N;\ g(x) = \max\{f_1(x), \dots, f_\mathrm{m}(x)\}, \tag{2}$$

2.1. Функции с липшицевыми производными по направлениям

Функцию f назовем относящейся к $\Phi'_{Lip}(D)$ – классу функций с липшицевыми производными по направлениям на D, если $\exists L \ge 0$, при котором выполнено:

$$\forall x', x'' \in D \text{ при } x' \neq x'' \text{ для } v = \frac{x'-x''}{\|x'-x''\|}:\ \left|\frac{\partial f(x')}{\partial v} - \frac{\partial f(x'')}{\partial v}\right| \le L\|x' - x''\| \tag{3}$$

В [10, п. 1.4.3] доказано, что для функции $f \in C^1(D)$ условие (3) выполняется при некотором L тогда и только тогда, когда при этом же L выполняется условие вида:

$$\forall x', x'' \in D: |f(x') - (f(x'') + \langle f'(x''), x' - x''\rangle)| \le \frac{L}{2}(x' - x'')^2, \tag{4}$$

где $f'(x)$ – градиент функции f. При этом в [10] доказано, что при известных значениях $f(x^0)$, $f(x^1)$, …, $f(x^N)$ функции f в наборе точек $x^0, x^1, \dots, x^N$, образующих N-мерный симплекс в R^N, для значений x из выпуклой линейной оболочки этих точек точная нижняя оценка $\psi(x)$ значений $f(x)$ имеет вид $\psi(x) = C + \frac{L}{2}\|x - w\|^2$, где C и w определяются из условий $\psi(x^i) = f(x^i)$, для $i = 0, \dots, N$.

2.2. Одномерные прототипы рассматриваемого метода

Одномерные прототипы предлагаемых в работе методов для задачи вида (1) при $N = 1$ построены (для класса функций с неизмеряемой липшицевой производной) в статье [11]. При определении характеристик подынтервалов исходного отрезка поиска, образованных упорядоченными по координате точками проведенных измерений функций задачи, одномерные методы используют (вытекающие из п. 2.1) гладкие квадратичные нижние оценки функций задачи. Поэтому их можно назвать методами парабол.

Приведенные в [11] результаты представительного тестирования методов на двух выборках из 200 одномерных тестовых задач с многоэкстремальными ограничениями показали их высокую эффективность по сравнению с другим известным методом [12] для условной глобальной оптимизации. Тестирование проводилось с помощью специального генератора одномерных многоэкстремальных задач с ограничениями, принципы построения которого описаны в той же работе. Результаты, полученные в [11], указывают на целесообразность разработки многомерных аналогов одномерных методов из [11] для представленного в п.2.1 класса задач. Принципы их построения представлены ниже.

2.3. Принципы построения многомерных реализаций методов по безызбыточной двухточечной диагональной компонентной схеме деления на три

Используем двухточечную безызбыточную диагональную схему деления на три из [2, 3, 13].

Она удобна в качестве основы для получения многомерной реализации методов в задаче (1) с функциями из класса $\Phi'_{Lip}(D)$. Не останавливаясь подробно на описании этой схемы, дадим краткие необходимые пояснения. В исходном гиперинтервале $D_0 = D$ испытания, состоящие в вычислении функций из (1), проводятся в двух его вершинах с наибольшими и наименьшими значениями координат (будем называть эти вершины активными). Далее выбираемый на очередной k-ой итерации наиболее приоритетный гиперинтервал D_t (t зависит от k) разделяется на три равные части по первому из наибольших ребер.

Перед делением у D_t всегда имеется пара вершин a^t и b^t (назовем их активными), в которых испытания уже проведены. Эти вершины лежат на одной из главных диагоналей D_t (назовем ее активной). Пусть R – длина делимого ребра, а e – нормированный вектор, направленный из вершины a^t вдоль этого ребра так, чтобы $e^T(b^t - a^t) > 0$, тогда при делении D_t выбираются две точки u и v, в которых могут проводиться новые испытания: $u = a^t + \frac{2R}{3}e$, $v = b^t - \frac{2R}{3}e$, (рис. 1). В [13] показано, что некоторые из планируемых точек новых испытаний при таком размещении могут совпасть с существующими активными вершинами других смежных гиперинтервалов, и тогда результаты испытаний в них уже известны, не требуют повторного вычисления и извлекаются из специального хранилища точек с возможностью быстрого поиска.

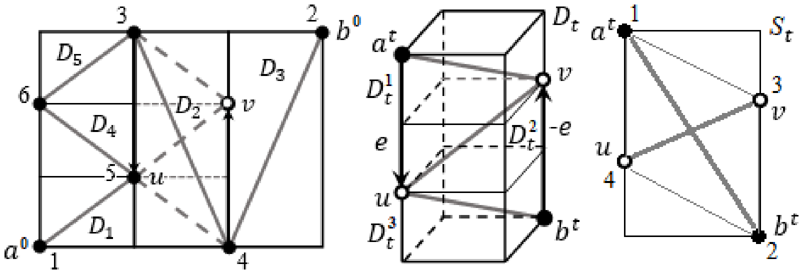


Рис. 1. Слева и в центре – размещение новых точек при делении на три гиперинтервала D_2 при размерности 2 и D_t при $N = 3$; справа – сечение D_t двумерным линейным многообразием, проходящим через точки a^t, b^t, v и u и их нумерация, используемая в разделе 2.4 в методах оценивания констант Липшица

Три новых гиперинтервала D_t^1, D_t^2, D_t^3 порождаются из делимого D_t по следующим парам активных вершин: a^t и v, v и u, u и b^t. Возникающая специально согласованная ориентация активных диагоналей новых гиперинтервалов порождает непрерывную кривую в виде ломаной, проходящей по всем активным диагоналям всех гиперинтервалов текущего разбиения $\{D_i^k\}_{i=1}^{M_k}$ и соединяющей две противолежащие активные вершины исходного гиперинтервала D (рис.1).

Поскольку активные диагонали гиперинтервалов являются одномерными объектами, поставим им в соответствие приоритеты–характеристики, вычисляемые по правилам одномерных прототипов [11] для разрабатываемых многомерных методов. А именно, пусть к началу k-й итерации проведено n_k испытаний и достигнутое рекордное значение целевой функции по допустимым измерениям равно $f_0^*(k)$. Оно конечно, если допустимые точки встречались, и $f_0^*(k) = +\infty$, если допустимых измерений еще не было. Пусть для каждого гиперинтервала D_i уже получены оценки $L_j^k(D_i)$ констант Липшица из (3) для каждой функций $f_j, (j = 0, \dots, m)$ задачи (1). Тогда, согласно п. 2.1, нижняя оценка j-й функции на активной диагонали имеет вид

$$\psi_i^j(s) = c_j(D_i) + 0.5L_j^k(D_i)diam^2(D_i)(s - \mathrm{w}_j(D_i))^2, s \in [0, 1], \qquad (5)$$

где $c_j(D_i)$, $\mathrm{w}_j(D_i)$ вычисляются по известным значениям f_j на концах активной диагонали.

Если метод еще не обнаружил ни одной допустимой точки, т.е. $f_0^*(k) = +\infty$, выполняется решение задачи вида (2). При этом в качестве характеристики активной диагонали для D_i принимается

$$R_k(D_i) = \min_{s\in[0,1]} \max_{j=1,..,m} \psi_i^j(s). \qquad (6)$$

Если же допустимые точки уже обнаружены, т.е. $f_0^*(k)$ конечно, можно использовать два разных способа вычисления приоритета, соответствующие двум разным методам. В первом, более простом для реализации методе, аналогично [11] примем

$$R_k(D_i) = \min_{s\in \mathrm{I}(D_i)} \psi_i^0(s),\ I(D_i) = \{s \in [0,1]: \forall j = 1,..,m: \psi_i^j(s) \le 0\}, \tag{7}$$

если $I(D_i) \neq \emptyset$, и $R_k(D_i) = +\infty$ при $I(D_i) = \emptyset$. Обозначим такой метод как SimpleP-diag.

Второй метод при $f_0^*(k) \neq +\infty$ заменяет решение задачи (1) решением задачи с перестраиваемой функцией вида:

$$\min F_{\mathrm{k}}(x),\ x \in D = [0,1]^N \subset \mathrm{R}^N;\ F_k(x) = max\{f_0(x) - f_0^*(k); f_1(x);..; f_m(x)\}, \tag{8}$$

Исходя из структуры задачи (7) характеристику для активной диагонали гиперинтервала D_i в этом методе (обозначим его как TransformP-diag) определим как минимум на диагонали нижней оценки функции $F_k(x)$:

$$R_k(D_i) = \min_{s\in[0,1]} \max\{\psi_i^0(s) - f_0^*(k);\ \max_{j=1,..,m} \psi_i^j(s)\}. \tag{9}$$

При правильно определенных значениях оценок констант Липшица (для производных по направлениям) введенные для активной диагонали гиперинтервала D_i приоритеты–характеристики (6), (7) или (9) определяют нижние оценки значений целевых функций на оценках допустимых подмножеств для задач (2), (1) или (8) (в зависимости от метода или стадии его применения), но только вдоль активной диагонали. Аналогичные оценки для остальной части гиперинтервала D_i неизвестны в силу специфики рассматриваемого класса функций при отсутствии измерений градиентов при проведении испытаний. Тем не менее, в качестве характеристик–приоритетов самих гиперинтервалов примем построенные характеристики их активных диагоналей из (6), (7) или (9). На очередной итерации должен выбираться для деления гиперинтервал D_t с наименьшей характеристикой и делиться на три равные части с проведением новых испытаний, как было описано выше.

Введенные характеристики должны обеспечивать повышенную плотность размещения испытаний в допустимых подобластях с меньшими значениями целевой функции, однако сами по себе не могут (по указанной выше причине) гарантировать сходимости минимизирующей последовательности к глобальному минимуму. Поэтому для обеспечения сходимости необходимо встроить в последовательность итераций методов небольшую долю шагов, когда для деления выбирается гиперинтервал с наименьшей характеристикой, но только среди гиперинтервалов наибольшего диаметра.

2.4. Проблемы оценивания констант Липшица производных по направлениям при измерениях только значений функций в четырех характерных точках гиперинтервала, предлагаемые методы решения

Для реализации двух описанных в п. 2.3 диагональных методов нужно указать способы получения набора локальных оценок $\ell(D_t)$ констант Липшица из (3) для делимого гиперинтервала D_t по измерениям функций задачи f_j в четырех точках a^t, u, v и b^t, показанных на рис. 1. Заметим, что условия построения оценок являются нестандартными. Требуется предложить новые методы оценивания. Ниже приведены два возможных способа. Изложим их на примере оценивания константы ℓ для некоторой функции по ее измерениям в указанных точках.

Построим сечение S_t гиперинтервала D_t двумерным линейным многообразием, проходящим через четыре точки a^t, b^t, v и u (см. рис. 1). Двумерные образы этих точек в сечении, записанные в прямоугольной системе координат с нулевой точкой в центре сечения (см. рис. 1 справа), пронумеруем для удобства цифрами 1, 2, 3, 4 соответственно и обозначим как $x^i \in R^2$, для i от 1 до 4, а значения функции f в этих точках – как f^i для тех же i.

Точный метод оценивания. Он основан на том, что в четырех точках испытаний для функции $f \in \Phi'_{Lip}(D)$ (при известных значениях самой функции в этих точках) существуют не вычисляемые векторы градиентов, значения которых должны удовлетворять, в силу п.2.1, условиям (3) и (4), если только использованное в (3)-(4) значение константы L выбрано верно. Обозначим через $g^i \in R^2$ спроектированные на двумерное многообразие сечения S_t векторы градиентов в точках x^i для i от 1 до 4. Значения g^i неизвестны. Также учтем, что в (3) $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial v} = \langle f'(x), v\rangle$. Доказана следующая лемма.

Лемма 1. Нижняя локальная оценка константы Липшица функции f для производных по направлениям по гиперинтервалу D_t определяется минимальным значением ℓ из решения задачи линейного программирования (10)-(11) относительно переменных ℓ, g^i, $i = 1,..,4$.

$$\min_{(\ell,\, g^1,\, g^2,\, g^3,\, g^4)\in\mathfrak{D}} \ell, \tag{10}$$

$$\begin{aligned}
\mathfrak{D} = \{(\ell,\ g^1,\ g^2,\ g^3,\ g^4)&: \ell \geq 0;\ g^i \in R^2, i = 1,..,4;\\
&\left|f^i - f^j + \langle g^i, (x^j - x^i)\rangle\right| \leq 0.5\ell\left\|x^j - x^i\right\|^2,\ i = \overline{1,\ 4},\ j = \overline{1,\ 4}\,,\ i \neq j;\\
&\left|\langle g^j - g^i, x^j - x^i\rangle\right| \leq \ell\left\|x^j - x^i\right\|^2,\ i = \overline{1,\ 4},\ j = \overline{1,\ 4}\,,\ i \neq j\}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Поскольку точный метод оценивания константы является вычислительно трудоемким, можно предложить эвристический метод оценивания.

Эвристический метод оценивания. Он основан на вычислении ℓ как модуля значения константы L, найденного из условия согласования (равенства) значений квадратичных оценок функции f, построенных вдоль большой и малой диагоналей в сечении S_t (по измерениям f на концах этих диагоналей), в точке пересечения этих диагоналей (выделены жирным на рис. 1 справа).

Лемма 2. Эвристическая оценка константы, определенная из приведенных выше условий для диагоналей, связывающих точки x^1 и x^2, а также x^3 и x^4 определяется соотношением (12):

$$\ell = 2\left|\frac{f^1+f^2}{2} - \frac{f^3+f^4}{2}\right| / \left|\left(\frac{d_{1,2}}{2}\right)^2 - \left(\frac{d_{3,4}}{2}\right)^2\right|,\ d_{i,j} = \left\|x^j - x^i\right\| \tag{12}$$

На рис. 2 приведен иллюстративный пример размещения точек испытаний при использовании характеристик вида (7) в сочетании с эвристическим оцениванием констант по формуле (12).

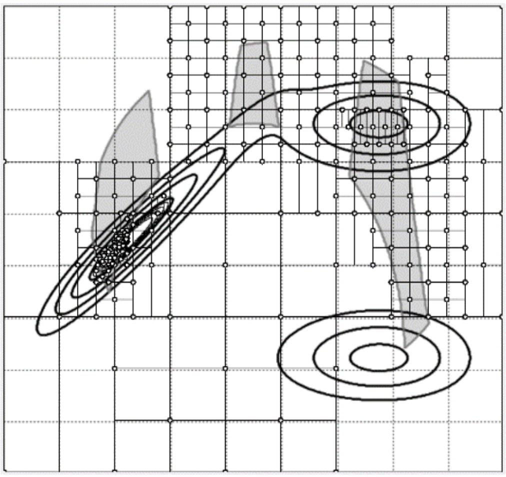


Рис. 2. Размещение точек испытаний методом SimpleP-diag в известном тестовом примере

Теперь приведем полное описание используемой техники вычисления локализованных оценок констант $L_j^k(D_i)$, применяемых в формуле (5) для определения видов нижних оценок функций задачи вдоль активных диагоналей. Используются следующие параметры: r – глубина очередей локальных оценок гиперинтервала; $\gamma_0 > 1, \gamma_C > 1$ – коэффициенты завышения глобальных оценок констант целевой функции и функций ограничений; $\gamma_0^{loc} \in (1,\ \gamma_0), \gamma_C^{loc} \in (1,\ \gamma_C)$ – коэффициенты завышения «осторожных» локальных оценок; $\beta \in (0,\ 1)$ – коэффициент, определяющий формирование смешанной оценки; $0 < \delta << 1$ – параметр безопасности. Каждый гиперинтервал включает набор очередей $q_j(D_i)$ глубины r для каждой из функций f_j задачи для хранения истории изменений локальных оценок констант. При проведении новых измерений в выбранном для деления гиперинтервале $D_{t(k)}$ вычисляется новый набор $\ell(D_{t(k)})$ локальных оценок, которые помещаются в очереди оценок, вытесняя из них наиболее старые значения. Обновленные очереди передаются трем новым гиперинтервалам D_t^1, D_t^2, D_t^3. Также обновляются глобальные оценки констант: для всех j от 0 до m полагаем $l_j^{*k+1} = \max\{l_j^{*k}; \ell_j(D_{t(k)})\}$, увеличиваем k.

При обновлении или вычислении характеристики гиперинтервала D_i вначале на основе очередей $q_j(D_i)$ определяются «осторожные» локальные оценки $\hat{\ell}_j(D_i)$ для каждой из функций f_j, а именно: $\hat{\ell}_j(D_i) = \max\{\max\{\ell_j\colon \ell_j \in q_j(D_i)\};\ \delta\}$. Также вычисляются их завышенные «осторожные» локальные оценки: $\hat{L}_0(D_i) = \gamma_0^{loc} \cdot \hat{\ell}_0(D_i)$; $\hat{L}_j(D_i) = \gamma_C^{loc} \cdot \hat{\ell}_j(D_i)$ для $j > 0$. Определяются завышенные глобальные оценки:

$$L_0^{*k} = \begin{cases} \gamma_0 \cdot l_0^{*k}, & l_0^{*k} > 0; \\ 1, & l_0^{*k} = 0, \end{cases} \quad L_j^{*k} = \begin{cases} \gamma_C \cdot l_j^{*k}, & l_j^{*k} > 0; \\ 1, & l_j^{*k} = 0 \end{cases} \text{для } j > 0.$$

В (5) используются локализованные смешанные оценки констант, вычисляемые в виде:

$L_j^k(D_i) = L_j^{*k}$ при $d_i \geq d^*$ и $L_j^k(D_i) = \hat{L}_j(D_i)\left(1 - \frac{d_i}{d^*}\right) + \frac{d_i}{d^*} L_j^{*k}$ при $d_i < d^*$, где $d_i = diam(D_i)$, а $d^* = \beta \cdot diam(D)$.

2.5. Предварительные численные эксперименты

Иллюстративный пример на рис. 2 демонстрирует работу метода SimpleP-diag с использованием (12) на известной тестовой задаче с тремя разномасштабными ограничениями. Множество поиска $D = [0,\ 4] \times [-1,\ 3\,]$. Задача решалась до достижения точности 0.002 по значению функции при параметрах $r = 3$, $\gamma_0 = 3$, $\gamma_C = 2.5$, $\gamma_0^{loc} = \gamma_C^{loc} = 1$, $\beta = 0.25$, $\delta = 10^{-8}$. Проведено 262 испытания, показанных на рисунке вместе с конфигурацией гиперинтервалов разбиения.

Литература

1. Strongin R.G., Sergeyev Ya.D. Global optimization with non-convex constraints: Sequential and parallel algorithms. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht, 2000. 728 pp.
2. Сергеев Я.Д., Квасов Д.Е. Диагональные методы глобальной оптимизации. М.: Физматлит, 2008. 352 с.
3. Sergeyev Ya. D., Kvasov D. E., Deterministic global optimization: An introduction to the diagonal approach, Springer, New York, 2017. 136 pp.
4. Sergeyev Ya. D., Strongin R. G., Lera D., Introduction to Global Optimization Exploiting Space-Filling Curves, Springer, New York, 2013. 135 pp.
5. Jones D.R. The DIRECT global optimization algorithm / Encyclopedia of optimization. 7 Vols. 2nd revised and expanded ed., ed. by C.A. Floudas, P.M. Pardalos. Springer, 2009. P. 725–735.
6. Городецкий С.Ю. О новой модели поведения целевой функции для диагональной реализации DIRECT-подобных методов // Научное периодическое издание CETERIS PARIBUS. М.: РИЦ ЭФИР, 2016. № 1. С. 4–16.
7. Городецкий С.Ю. Диагональное обобщение метода DIRECT на задачи с ограничения-ми // АиТ. 2020. № 8. С. 84–105.
8. Kvasov D.E., Sergeyev Ya.D. Lipschitz Gradients for Global Optimization in a One-Point-Based Partitioning Scheme // J. Comput. Appl. Math. 2012. Vol. 236. P. 4042–4054.
9. Городецкий С.Ю. Триангуляционные методы параболоидов в задачах многоэкстремальной оптимизации с ограничениями для класса функций с липшицевыми производными по направлениям // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевско-го. 2012. № 1(1). С. 144–155.
10. Городецкий С.Ю., Гришагин В.А. Нелинейное программирование и многоэкстремаль-ная оптимизация. Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2007. 489 с.
11. Городецкий С. Ю. Методы учета многоэкстремальных ограничений в задачах одно-мерной глобальной оптимизации и их численное исследование на представительных классах гладких тестовых задач. Научно-технический вестник Поволжья №9. ООО «Рашин Сайнс»– Казань. 2019. С. 76–84.

12. Стронгин Р.Г., Маркин Д.Л. Минимизация многоэкстремальных функций при невыпуклых ограничениях // Кибернетика, 1986. № 4. С. 64
13. Sergeyev Ya.D. An efficient strategy for adaptive partition of N-dimensional intervals in the framework of diagonal algorithms // Journal of Optimization Theory and Applications, 2000, Vol. 107. No.1. P. 145-168.

О СЛОЖНОСТИ ПОДСЧЕТА КОЛИЧЕСТВА ЦЕЛЫХ ТОЧЕК В Δ-МОДУЛЯРНЫХ ПОЛИЭДРАХ[1*]

Д.В. Грибанов[1,2] *, И.А. Шумилов*[1]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Высшая школа экономики*

Рассмотрим множество n-мерных политопов $P(A,b)$, которые могут быть заданы системами вида $Ax \leq b$, где A - есть целочисленная матрица и b - есть рациональный вектор. Пусть количество строк системы есть $n+m$, где n - есть число переменных системы. Также предположим, что все $n \times n$ миноры матрицы A ограничены величиной Δ по абсолютному значению. В данной заметке мы предлагаем три оценки арифметической сложности задачи вычисления величины $|P(A,b) \ \cap \ Z^n|$:

- Полиномиальная по n и Δ оценка $O(n/m)^{m+3} \cdot \Delta^4 \cdot log(\Delta)$. Случай, когда политоп является симплексом, соответствует равенству $m = 1$. Так как полиэдр неограниченной задачи о размене является симплексом, приведенная оценка дает алгоритм подсчета количества разменов заданной суммы с арифметической сложностью $O(n^4 \cdot \Delta^4 \cdot log(\Delta))$, где Δ - есть максимальная стоимость монеты;
- Полиномиальная по m и Δ оценка $O(m/n)^{n/2} \cdot n^4 \cdot \Delta^4 \cdot log(\Delta)$. Данная оценка может быть также применена для анализа сложности задачи проверки непустоты в целочисленном программировании. При $m = O(n)$ и $\Delta = O(1)^n$приведенная формула превращается в $O(1)^n$, что существенно лучше оценки $O(n)^n$, которая справедлива для полиэдров общего вида;
- Полиномиальная по Δоценка $O(n)^{4+n/2} \cdot \Delta^{n+4} \cdot log(\Delta)$. При фиксированном Δ данная оценка превращается в $O(n)^{n/2}$, что опять лучше оценки $O(n)^n$для задачи проверки непустоты в полиэдрах общего вида.

Ключевые слова: целочисленное линейное программирование, ограниченные миноры, подсчет количества решений, задача о размене, производящая функция.

1. Постановка задачи

Пусть A – есть целочисленная $(n+m) \times n$ матрица полного столбцового ранга n и b - есть рациональный вектор с $n+m$ компонентами. Обозначим за $P(A,b)$ полиэдр, порожденный системой неравенств $A\,x \ \leq b$. Символом Δ обозначим максимальную абсолютную величину $n \times n$ миноров матрицы A. Будем считать, что полиэдр $P(A,b)$ имеет размерность n и не содержит прямых.

В данной работе нас интересуют оценки арифметической сложности задачи вычисления величины $|P(A,b) \ \cap Z^n|$, зависящие от параметров n, m и Δ.

Отметим, что случай, когда $P(A,b)$ является симплексом или политопом неограниченной задачи о размене, соответствует равенству $m = 1$. Под задачей о размене мы понимаем следующую задачу: пусть заданы положительные целые числа $c_1, \ldots, c_n, C$. Необходимо найти такие целые неотрицательные числа $x_1, \ldots, x_n$, что $c_1 x_1 + \ldots + c_n x_n = C$. Данная задача является одной из классических NP-полных задач.

Отметим также, что более простая NP-полная задача определения непустоты множества $P(A,b) \cap Z^n$ очевидным образом сводится к рассматриваемой задаче вычисления $|P(A,b) \ \cap Z^n|$. Наиболее быстрый из известных алгоритмов для определения непустоты множества $P(A,b) \cap Z^n$принадлежит работе [1] (см. также [2]) и имеет трудоемкость $O(n)^n \cdot poly(size(A,b))$, где $size(A,b)$ обозначает битовую длину записи системы $A\,x \ \leq b$.

[1*] Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда (РНФ) № 21-11-00194.

2. Результаты работы

Основной результат работы [3] дает алгоритм построения сокращенной рациональной производящей функции сдвинутого простого конуса $P(B,h)$, где B - есть целочисленная $n \times n$матрица с определителем $\Delta > 0$ и h - есть рациональный вектор. Арифметическая сложность данного алгоритма может быть оценена как $O(n^3 \cdot \Delta^4 \cdot log(\Delta))$.

Известно, что за полиномиальное время можно выбрать такое $0 < \varepsilon < 1$ и вектор $t \in Q^{n+m}$,заданный равенством $t_i = \varepsilon^i$, что полиэдр $P(A, b + t)$ будет простым. Таким образом, будем считать, что $P(A,b)$ есть простой полиэдр. Известно (см., например, [4]), что вершины простого полиэдра $P(A,b)$ могут быть перечислены алгоритмом с арифметической сложностью $O((n+m) \cdot n \quad \cdot N_v)$, где N_v есть общее число вершин полиэдра $P(A,b)$. Обозначим за $N_v(n,m,\Delta)$ максимальное количество вершин, которое может иметь простой полиэдр, заданный системой $A\,x \ \leq b$.

Используя теорему Бриона (см. [5], стр. 49-56) и объединяя последнее наблюдение с результатом работы [3], мы получаем, что задача подсчета $|P(A,b) \cap Z^n|$ может быть решена алгоритмом с арифметической сложностью $O(N_v(n,m,\Delta) \cdot n^3 \cdot \Delta^4 \cdot log(\Delta))$.

Очевидно, величина $N_v(n,m,\Delta)$ может быть оценена как $\frac{n+m}{n} = \frac{n+m}{m} = O(n/m)^m$, что дает первую оценку сложности $O(\frac{n}{m})^{m+3} \cdot \Delta^4 \cdot log(\Delta))$ для задачи вычисления $|P(A,b) \cap Z^n|$. Ранее было отмечено, что неограниченная задача о размене соответствует случаю $m = 1$. Таким образом, задача подсчета количества решений в неограниченной задаче о размене может быть решена за время $O(n^4 \cdot c_{max}^4 \cdot log(c_{max}))$, где c_{max}- есть максимальная стоимость монеты.

Согласно основному результату работы [6], величина $N_v(n,m,\Delta)$ не превосходит $O(m/n)^{n/2} \cdot n$, что дает алгоритм с арифметической сложностью $O(m/n)^{n/2} \cdot n^4 \cdot \Delta^4 \cdot log(\Delta)$ для задачи вычисления $|P(A,b) \cap Z^n|$. Рассмотрим задачу определения непустоты множества $P(A,b) \cap Z^n$. Выбирая $m = O(n)$ и $\Delta = O(1)^n$ последняя оценка превращается в оценку $O(1)^n$, что существенно лучше оценки $O(n)^n \cdot poly(size(A,b))$ работы [1], которая справедлива для полиэдров общего вида.

Наконец, согласно работе [7], велична $n + m$ может быть оценена как $O(n^2 \cdot \Delta^2)$. Используя предыдущую оценку, получаем алгоритм с арифметической сложностью $O(n)^{4+n/2} \cdot \Delta^{4+n} \cdot log(\Delta)$ для задачи вычисления $|P(A,b) \cap Z^n|$. Выбирая $\Delta \ = O(1)$, последняя оценка превращается в $O(n)^{4+n/2}$, что опять лучше оценки $O(n)^n \cdot poly(size(A,b))$ для задачи проверки непустоты множества $P(A,b) \cap Z^n$.

Литература

1. Dadush D., Peikert C., Vempala S. Enumerative lattice algorithms in any norm via m-ellipsoid coverings // In: 2021 IEEE 52nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science. 2011. P. 580-589.
2. Dadush D. Integer Programming, Lattice Algorithms, and Deterministic Volume Estimation // ProQuest LLC, Ann Arbor, MI. Thesis (Ph.D.), Georgia Institute of Technology. 2012.
3. Gribanov D.V., Malyshev D.S. Faster algorithm for counting of the integer points in Δ- modular polyhedra // 2021. Preprint: https://arxiv.org/abs/2110.01732.
4. Avis D., Fukuda K. A pivoting algorithm for convex hulls and vertex enumeration of arrangements and polyhedra // Discrete & Computational Geometry. 1992. Vol. 8. P. 295-313.
5. Barvinok A. Integer Points in Polyhedra. European Mathematical Society. 2008.
6. McMullen P. The maximum numbers of faces of a convex polytope // Mathematica. 1970. Vol. 17. No 2. P. 179-184.
7. Lee J., Paat J., Stallknecht I., Xu L. Polynomial upper bounds on the number of differing columns of Δ-modular integer programs // 2021. Preprint: https://arxiv.org/abs/2105.08160.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОБЫТИЙ И ХАОТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ[1*]

Н.В. Громов, Т.А. Леванова

Нижегородский государственный университет им. Лобачевского

В данной работе рассматривается задача предсказания паттернов хаотической активности и экстремальных событий с использованием ансамбля глубоких нейросетей. Работоспособность подхода продемонстрирована на ряде систем, содержащих выбросы большой амплитуды и экстремальные события: системе Льенара, системе двух связанных элементов ФитцХью-Нагумо и системе двух пачечных нейронов Хиндмарш-Роуз со взаимными химическими связями.

Ключевые слова: экстремальные события, ансамбль глубоких нейросетей, нейронная сеть с прямой связью, резервуарные вычисления, сеть с долговременной и кратко-срочной памятью (LSTM), система Льенара, система ФитцХью-Нагумо, система Хиндмарш-Роуз.

1. Введение

Экстремальные события (ЭС) – редкие, повторяющиеся и сильные отклонения от регулярного поведения, наблюдающиеся в различных биологических и инженерных системах и сильно влияющие на их динамику [1]. ЭС часто происходят спонтанно, без видимых предпосылок. Они редки в том смысле, что частота, с которой они происходят, значительно меньше, чем типичная частота системы, и они экстремальны в том смысле, что их амплитуды в несколько раз превышают стандартное отклонение наблюдаемой величины от среднего.

Предсказание хаотической динамики и экстремальных событий на основе временных рядов до сих пор является сложной задачей. Несмотря на существенный прогресс, достигнутый при использовании глубоких нейросетей, качество предсказания может быть существенно улучшено.

Среди наиболее очевидных особенностей задачи, порождающей трудности предсказания, стоит указать следующие. Во-первых, данные сильно несбалансированные, т.е. временной ряд содержит мало примеров выбросов (ЭС) относительно прочих событий. Такой сильный дисбаланс в данных потенциально может привести любую модель машинного обучения к одной из двух проблемных ситуаций: либо она с трудом изучает какие-либо закономерности и просто распознает все образцы как принадлежащие к наиболее популярной нестандартной динамике, либо переобучается.

Во-вторых, распределение данных в случае ЭС имеет т.н. тяжелый хвост. Случайная величина подчиняется распределению с тяжелым хвостом, если она обычно имеет значительную вероятность принятия больших значений (больше порога), т.е. возможны крупные события (ЭС) лежащие на хвосте распределения. Большинство широко применяемых в задачах машинного обучения распределений, включая гауссовское и пуассоновское, не имеют тяжелого хвоста (т.н. легкий хвост). Лишь немногие параметрические распределения имеют тяжелые хвосты, например распределение Парето и логарифм-Коши. Поэтому моделирование с помощью параметрических распределений с легкими хвостами приведет к неизбежным потерям в хвостовой части данных.

В рамках данной работы для борьбы с указанными проблемами предложен следующий подход.. Во-первых, информация о прошлых встреченных сетью ЭС используется для предсказания следующих ЭС. Для этого реализован ансамбль, состоящий из трех глубоких нейросетей

[1*] Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России проект FSWR-2021-013 (решение Бюджетной комиссии Минобрнауки России от 14.09.2021 № БК-П/23).

[2]: (i) нейронная сеть с прямой связью (FNN), (ii) резервуарные вычисления (RC) и (iii) сеть долгосрочной-краткосрочной памяти (LSTM). Две из указанных сетей (RC и LSTM) являются вариантами рекуррентных нейронных сетей, которые хорошо работают с последовательностями и временными рядами. Полученный таким образом метод ансамблевого прогнозирования будет иметь лучшую точность, чем его компоненты, но в то же время не должен быть слишком сложным для понимания и объяснения. В-третьих, весовые коэффициенты, с которыми ответы каждой нейросети в отдельности учитываются в составе общего ответа ансамбля, дополнительно оптимизируются, что также помогает улучшить точность предсказания.

Работоспособность подхода продемонстрирована на искусственных данных, содержащих хаотическую динамику и ЭС, сгенерированных с использованием трех известных динамических систем: системе Льенара [3], системе двух связанных элементов ФитцХью-Нагумо [4] и системе двух пачечных нейронов Хиндмарш-Роуз со взаимными химическими связями [5].

2. Оптимизированная ансамблевая модель глубокого обучения

1. Каждую нейронную сеть обучаем на тренировочном временном ряду до сходимости графика функции потерь на тренировочном наборе и тестовом, для сети долгосрочной-краткосрочной памяти строились подпоследовательности длины k, по которым сеть училась предсказывать $k+1$-й шаг.
2. Собираем полученные ответы всех сетей и обучаем простейший персептрон, чтобы получить коэффициенты для каждой сети.

3. Модельные системы

Для создания тестовых и обучающих выборок были нагенерированы искусственные данные, содержащих хаотическую динамику и ЭС. Данные были получены путем генерирования длинных временных рядов для следующих систем: системы Льенара, системы двух связанных элементов ФитцХью-Нагумо и системы двух пачечных нейронов Хиндмарш-Роуз со взаимными химическими связями. Рассмотрим подробнее использованные модельные системы.

1. **Система Льенара** вида:

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -\alpha xy - \gamma x - \beta x^3 + F\sin(\omega t) \end{cases}$$

демонстрирует ЭС при двух фиксированных наборах значений управляющих параметров α = 0.45, β = 0.5, γ = -0.5, F = 0.2, $\boldsymbol{\omega}$=$\mathbf{0.6423}$ и $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{0.7385}$. С динамической точки зрения ЭС в этой системе были впервые изучены в работе [4].

2. **Система двух элементов ФитцХью-Нагумо** с электрическими синаптическими связями задается системой ОДУ вида:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_1(a - x_1)(x_1 - 1) - y_1 + k(x_2 - x_1) \\ \dot{y}_1 = b_1 x_1 - c y_1 \\ \dot{x}_2 = x_2(a - x_2)(x_2 - 1) - y_2 + k(x_1 - x_2) \\ \dot{y}_2 = b_2 x_2 - c y_2 \end{cases}$$

Параметры, при которых наблюдаются выбросы большой амплитуды: $a = -0.025794$, $c = 0.02$, $b1 = 0.0135$, $b2 = 0.0065$, $k = 0.129$. В работе [5] было показано, что эта система может использоваться для обучения сети предсказанию ЭС.

3. **Система двух пачечных нейронов Хиндмарш-Роуз** со взаимными химическими связями вида

$$\begin{cases} \dot{x}_i = y_1 + bx_i^2 - ax_i^3 - z_i + I - k_i(x_i - v_s)\Gamma(x_j) \\ \dot{y}_i = c - dx_i^2 - y_i \\ \dot{z}_i = r[s(x_i - x_R) - z_i] \\ i = 1,2 \end{cases}$$

была впервые рассмотрена в работе [6]. Значения параметров, при которых наблюдаются ЭС: r = 0.001, I = 4, a = 1, b = 3, c = 1, d = 5, x_R = -1.6, s = 5, k_1= k_2=-0.17.

4. Результаты

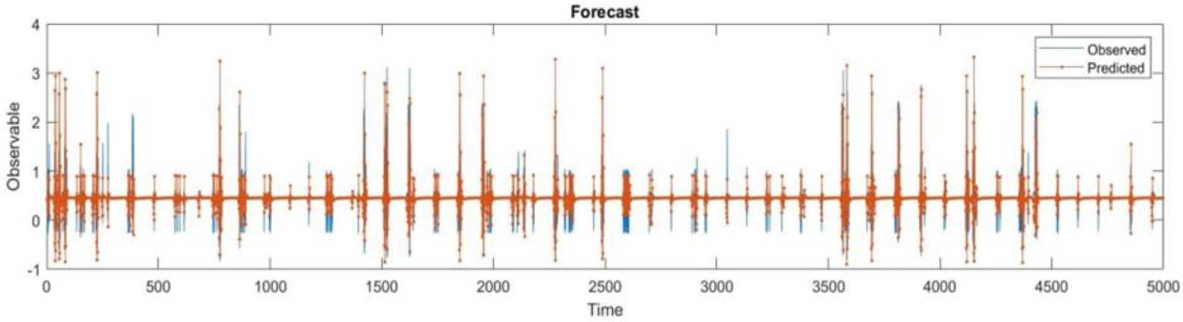


Рис. 1. Пример предсказания временного ряда системы Льенара, содержащего ЭС. Голубым цветом обозначена наблюдаемая величина, красным цветом – предсказание с помощью ансамбля глубоких нейросетей.

Для демонстрации работоспособности подхода были проведены следующие эксперименты. Все три сети обучались отдельно, после чего их результаты предсказания сравнивались с результатом, который показывал ансамбль нейросетей с оптимизированными весовыми коэффициентами. Результаты экспериментов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Показатели метрики качества RMSE

	Система Льенара	Система ФХН	Система Хиндмарш-Роуз
Полносвязная сеть	0.19621	0.02462	0.45232
Резервуарные вычисления	0.17141	0.00926	0.43953
Сеть долгосрочной-краткосрочной памяти	0.14101	0.00700	0.40329
Ансамбль	0.13866	0.00633	0.40207

Литература

1. Lehnertz K. Epilepsy: Extreme Events in the Human Brain // Extreme Events in Nature and Society. The Frontiers Collection. Springer, Berlin, Heidelberg. - 2006. - P. 123-143.
2. Ray A., Chakraborty T., Ghosh D. Optimized ensemble deep learning framework for scalable forecasting of dynamics containing extreme events // arXiv preprint arXiv:2106.08968.
3. Kingston S.L., Thamilmaran K., Pal P., Feudel U., Dana S.K. Extreme events in the forced Liénard system // Physical Review E. – 2017. – V. 96 (5). – P. 052204.
4. Pyragas V., Pyragas K. Using reservoir computer to predict and prevent extreme events // Physics Letters A. – 2020. – V. 384 (24). – P. 126591.
5. Mishra A., Saha S., Vignershwaran M., Pal. P., Kapitaniak T., Dana S.K. Dragon-king-like extreme events in coupled bursting neurons // Phys. Rev. E. – 2018. – V. 97(6). – P. 062311.

РАЗБИЕНИЯ ПОРОГОВЫХ ГРАФОВ НА ПУТИ ЗАДАННОГО РАЗМЕРА[1*]

О.И. Дугинов[1], Д.Б. Мокеев[2,3]

[1]Белорусский государственный университет
[2]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
[3]Высшая школа экономики

Задача об H-упаковке состоит в нахождении в заданном графе G максимального числа подграфов, изоморфных некоторому фиксированному графу H и попарно не содержащих общих вершин. Задача об H-разбиении – это версия задачи об H-упаковке, которая спрашивает, можно ли разбить множество вершин данного графа на подграфы, изоморфные графу H. Мы сосредоточимся на задаче об H-разбиении для случая, когда $H \simeq P_k$, где k – некоторое натуральное число, т.е. когда граф H изоморфен пути порядка k. В данной работе исследуется вычислительная сложность задачи в классе пороговых графов и доказывается её полиномиальная разрешимость для произвольного k в данном классе.

Ключевые слова: разбиение графа на пути, пороговые графы, алгоритмическая сложность.

1. Введение

В работе рассматриваются конечные *обыкновенные* графы, т.е. неориентированные графы $G = (V, E)$ с множеством вершин $V = V(G)$ и множеством рёбер $E = E(G)$, не содержащим петель и кратных рёбер.

Задача о разбиении вершин графа на k-пути (о P_k-разбиении) заключается в следующем. Дан граф G с числом вершин $|G|$ кратным k. Требуется в графе G найти $|G|/k$ путей размера k, попарно не содержащих общих вершин или показать, что такого разбиения не существует.

Задачи о разбиении возникают при проектировании электронных плат с помощью компьютера [1] и изучаются с точки зрения параметризованной сложности [2]. Известно, что задача является NP-полной для $k \geq 3$ для графов общего вида [3], для двудольных субкубических графов [4] и для плоских двудольных графов [5].

Граф называется *пороговым*, если может быть построен из одновершинного графа последовательным добавлением в граф одной изолированной вершины или доминирующей вершины, т.е. отдельной вершины, связанной со всеми остальными вершинами.

Мы рассматриваем задачу о P_k-разбиении для фиксированного k на пороговых графах. Рассмотрим отдельно случаи чётного и нечётного k.

2. Разбиение на чётные пути

Каждый пороговый граф является кографом, а также расщепляемым графом. *Расщепляемым* графом называется граф, в котором вершины можно разделить на клику C и независимое множество I. В случае, если граф G пороговый, множества I и C могут быть упорядочены $v_1, v_2, \dots, v_q$ и $u_1, u_2, \dots, u_p$, соответственно так, что $N(v_{i-1}) \subseteq N(v_i)$ для всех $i \in \{2, 3, \dots, q\}$ и $N(v_i)$ состоит из последовательных вершин $u_1, u_2, \dots, u_{p_i}$ для всех $i \in \{1, 2, \dots, p\}$. последовательности $v_1, v_2, \dots, v_q$ и $u_1, u_2, \dots, u_p$ называются *совершенным упорядочение* множества вершин.

Теорема 1. Пусть $s \in \mathbb{N}$, G – пороговый граф с независимым множеством I и кликой C такие, что число вершин $|G|$ графа G кратно $2s$ и $I = (v_1, v_2, \dots, v_q)$, $C = (u_1, u_2, \dots, u_p)$ – совершенное упорядочение множества вершин графа G. В графе G существует $|G|/(2s)$ путей разме-

[1*] Работа выполнена при поддержке РФФИ и БРФФИ, проект № 20-51-04001 (Ф21РМ-001).

ра $2s$, попарно не содержащих общих вершин, тогда и только тогда, когда $deg(v_i) \geq i$ для всех $i \in \{1, 2, \dots, q\}$.

Доказательство. Пусть $deg(v_i) \geq i$ для каждого $i \in \{1, 2, \dots, q\}$. В этом случае $\{v_i, u_i\} \in E(G)$ для каждого $i \in \{1, 2, \dots, q\}$ и $\{v_i, u_{i-1}\} \in E(G)$ для каждого $i \in \{2, 3, \dots, q\}$. Кроме того, можно отметить, что $p \geq q$. Нетрудно увидеть, что в графе G существует путь $v_1, u_1, v_2, u_2, \dots, v_q, u_q, u_{q+1}, \dots, u_p$, который является гамильтоновым в графе G. Этот путь можно разбить на $|G|/(2s)$ вершинно-непересекающихся путей порядка $2s$.

Наоборот, предположим, что в графе G есть $|G|/(2s)$ вершинно-непересекающихся путей порядка $2s$. Следовательно, существует паросочетание M , покрывающее все вершины независимого множества I . По теореме Холла $deg(v_i) \geq i$ для каждого $i \in \{1, 2, \dots, q\}$. ■

Таким образом, задача о P_{2s}-разбиении в пороговом графе сводится к задаче нахождения его совершенного упорядочения, то есть к задаче сортировки вершин множества I по их степеням, после чего нужно проверить, выполняется ли условие теоремы. Таким образом, справедливо следующее утверждение.

Следствие. Задача о P_{2s}-разбиении в пороговых графах может быть решена за время $O(|G| \log|G|)$.

3. Разбиение на нечётные пути

Теорема 2. Пусть $s \in \mathbb{N}$, $s \geq 2$, G – пороговый граф с независимым множеством I и кликой C такие, что число вершин $|G|$ графа G кратно $2s - 1$ и $I = (v_1, v_2, \dots, v_q)$, $C = (u_1, u_2, \dots, u_p)$ – совершенное упорядочение множества вершин графа G. В графе G существует $|G|/(2s - 1)$ путей размера $2s - 1$, попарно не содержащих общих вершин, тогда и только тогда, когда $deg(v_i) \geq i - \left\lceil \frac{i}{s} \right\rceil$ для всех $i \in \{1, 2, \dots, q\}$.

Доказательство. Пусть $deg(v_i) \geq i - \left\lceil \frac{i}{s} \right\rceil$ для каждого $i \in \{1, 2, \dots, q\}$. То есть для каждого $t \in \{0,1, \dots, \lfloor q/s \rfloor - 1\}$ в промежутке $ts + 1 \leq i \leq (t + 1)s - 1$ выполняется $deg(v_i) \geq i - t$, и для $t \in \{1,2, \dots, \lfloor q/s \rfloor\}$ $deg(v_{ts}) \geq i - t$. В этом случае $\{v_i, u_{i-t}\} \in E(G)$ для каждого $i \in \{ts + 1, ts + 2, \dots, (t + 1)s - 1\}$ и $\{v_i, u_{i-t-1}\} \in E(G)$ для каждого $i \in \{ts + 2, ts + 3, \dots, (t + 1)s\}$, где $t \in \{0,1, \dots, \lfloor q/s \rfloor - 1\}$.

Таким образом, для каждого $t \in \{0,1, \dots, \lfloor q/s \rfloor - 1\}$ существует путь $v_{ts+1}, u_{ts+1-t}, v_{ts+2}, u_{ts+2-t}, \dots, v_{(t+1)s-1}, u_{(t+1)s-1-t}, v_{(t+1)s}$. Если q не кратно s, рассмотрим $t = \lfloor q/s \rfloor$. Аналогично, $\{v_i, u_{i-t}\} \in E(G)$ для каждого $i \in \{ts + 1, ts + 2, \dots, q\}$ и $\{v_i, u_{i-t-1}\} \in E(G)$ для каждого $i \in \{ts + 2, ts + 3, \dots, q\}$, то есть в графе G существует путь $v_{ts+1}, u_{ts+1-t}, v_{ts+2}, u_{ts+2-t}, \dots, v_{q-1}, u_{q-1-t}, v_v, u_{q-t}, u_{q-t+1}, \dots, u_r$. Если q кратно s, положим $r = q - \frac{q}{s}$.

Итак, вершины множества $I \cup \{u_1, \dots, u_r\}$ могут быть разбиты $(2s - 1)$-пути, попарно не содержащих общих вершин. Оставшиеся вершины $u_{r+1}, \dots, u_p$ (при наличии) образуют клику размера кратного $2s - 1$, а значит могут быть разбиты на $(2s - 1)$-пути, попарно не содержащих общих вершин, то есть имеем разбиение всего графа G.

Пусть теперь условие теоремы не выполняется для графа G. То есть существуют такие $t \in \{0,1, \dots, \lfloor q/s \rfloor\}$ и $i \in \{ts, ts + 1, ts + 2, \dots, (t + 1)s - 1\}$, $i \neq 0$, что $deg(v_i) < i - t$. Рассмотрим множество вершин $\{v_1, \dots v_i\}$. Каждая из его вершин должна входить в какой-то $(2s - 1)$-путь разбиения. Но каждый такой путь содержит не менее $s - 1$ вершин множества C и не более s вершин множества I. То есть, поскольку $st + 1 \leq i \leq s(t + 1)$, должно быть не менее $i - t$ вершин, принадлежащих объединению окрестностей вершин $v_1, \dots v_i$. Но, поскольку $N(v_1) \subseteq N(v_2) \subseteq \dots \subseteq N(v_{i-1}) \subseteq N(v_i)$, это объединение равно $N(v_i)$ и содержит менее, чем $i - t$ вершин. Таким образом, граф G невозможно разбить на пути размера $2s - 1$. ■

Итак, задача о P_{2s-1}-разбиении в пороговом графе также сводится к задаче нахождения его совершенного упорядочения, Повторяя рассуждения предыдущего раздела, заключаем, что, справедливо следующее утверждение.

Следствие. Задача о P_{2s-1}-разбиении в пороговых графах может быть решена за время $O(|G| \log|G|)$.

Литература

1. Hope A. Component placement through graph partitioning in computer-aided printed-wiring-board design. // Electronics Letters. 1972. Vol. 8, No. 4. P. 87–88.
2. Knop D. Partitioning graphs into induced subgraphs. // Discrete Applied Mathematics. 2020. Vol. 272, P. 31–42.
3. Hell P., Kirkpatrick D.G. On the complexity of general graph factor problems // SIAM Journal on Computing. 1983 Vol. 12, P. 601–609.
4. Monnot J., Toulouse S. The path partition problem and related problems in bipartite graphs // Operations Research Letters. 2007. Vol. 35, No. 5. P. 677–684.
5. Dyer M.E. and Frieze A.M. On the complexity of partitioning graphs into connected subgraphs // Discrete Applied Mathematics. 1985 Vol. 10, P. 139–153.

ПРИМЕНЕНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ЛЯПУНОВА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МУЛЬТИСТАБИЛЬНОСТИ ВБЛИЗИ ГРАНИЦЫ ОБОБЩЕННОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ[1*]

Е.В. Евстифеев[1,2], О.И. Москаленко[1,2]

[1]ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского»,
[2]Региональный научно-образовательный математический центр «Математика технологий будущего»

При помощи метода расчета локальных ляпуновских показателей исследована возможность существования мультистабильных состояний на границе обобщенной синхронизации. Определены бассейны притяжения в случае однонаправленной и взаимной связи осцилляторов. Предложена количественная характеристика в качестве меры мультистабильности. Полученные в ходе работы результаты демонстрируют, что явление мультистабильности может наблюдаться в случае как однонаправленной связи, так и взаимной.

Ключевые слова: мультистабильность, обобщенная хаотическая синхронизация, локальные показатели Ляпунова

1. Введение

В настоящее время широкое внимание исследователей привлекает такое нелинейное явление как обобщенная хаотическая синхронизация [1–3]. Данный тип хаотической синхронизации широко распространен и может возникать между системами с различной размерностью фазового пространства. На данный момент обобщенная синхронизация имеет широкий потенциал применения: при скрытой передаче информации [4], при исследовании взаимодействия систем различной природы [5], в медицине [6] и т.д.

В настоящее время одним из наиболее интересных является вопрос о существовании мультистабильности вблизи границы обобщенной хаотической синхронизации в случае взаимосвязанных систем, когда при фиксированных значениях управляющих параметров синхронизация в определенный момент времени может возникнуть при различных начальных условиях. Хотя ранее и было обнаружено, что данное явление наблюдается в случае однонаправленной связи, вопрос о существовании аналогичной динамики в случае взаимной связи оставался открытым.

2. Методы и материалы

Обычно для анализа мультистабильности в случае однонаправленной связи используется метод вспомогательной системы [7], поскольку данный подход обладает хорошей точностью и достаточно прост в реализации. Однако, несмотря на все достоинства, данный метод неприменим в случае взаимной связи [8], в следствие чего возникает необходимость разработки других, более универсальных подходов.

В данной работе предложен метод, основанный на расчете локальных ляпуновких показателей [9, 10]. Он позволяет изучить временную динамику анализируемых систем как по дифференциальным уравнениям, так и по временным рядам, а также не требует введения дополнительной вспомогательной системы. Ранее при помощи данного метода была обнаружена перемежаемость на границе обобщенной синхронизации для обоих случаев связи [11], что позволяет сделать предположение о возможном существовании мультистабильности при взаимном характере связи.

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00037).

Для примера рассмотрено множество однонаправленно и взаимно связанных пар систем Ресслера [2, 4, 12], находящихся на границе обобщенной синхронизации. Данные системы описываются следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\dot{x}_{1,2}^{i} = -\omega_{1,2} y_{1,2}^{i} - z_{1,2}^{i} + \varepsilon_{1,2}\left(x_{2,1}^{i} - x_{1,2}^{i}\right),$$
$$\dot{y}_{1,2}^{i} = \omega_{1,2} x_{1,2}^{i} + a y_{1,2}^{i}, \qquad (1)$$
$$\dot{z}_{1,2}^{i} = b + z_{1,2}^{i}\left(x_{1,2}^{i} - c\right),$$

где i = 1, 2, …, N – индекс пары систем, a = 0.15, b = 0.2, c = 10.0, $\omega_1 = 0.93$, $\omega_2 = 0.95$ – управляющие параметры, $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ – первые производные по безразмерному времени. Нижние индексы соответствуют номеру системы относительно отдельно взятой пары. Параметры связи $\varepsilon_1 = 0$, $\varepsilon_2 = \varepsilon$ в случае однонаправленной связи, и $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$ – в случае взаимной.

В качестве меры мультистабильности рассматривалась вероятность детектирования асинхронного (в смысле режима обобщенной синхронизации) участка временной динамики по формуле:

$$P_a \approx 1 - \sum_{i=1}^{M} \frac{n(\Lambda_2^i)}{M(M-1)}, \qquad (2)$$

где M >> 1 – число осцилляторов, участвующих в рассмотрении, Λ_2^i – второй по старшинству ляпуновский показатель, $n\left(\Lambda_2^i\right)$ – количество систем, находящихся в синхронизме с i-м осциллятором. В данном случае, под синхронизмом подразумевается выполнение условия $\Lambda_2^i < \Delta$, где Δ = 0.005 – наперед заданная положительная константа [13]. Значение данной константы определяется непосредственно исследователем и в достаточно большом диапазоне малых значений не оказывает существенного влияния на определяемые характеристики.

3. Результаты и выводы

Сперва, при помощи метода локальных ляпуновских показателей были определены бассейны притяжения аттрактора второй системы (x_2, y_2, x_2) при фиксированном значении параметра связи (см. рис. 1).

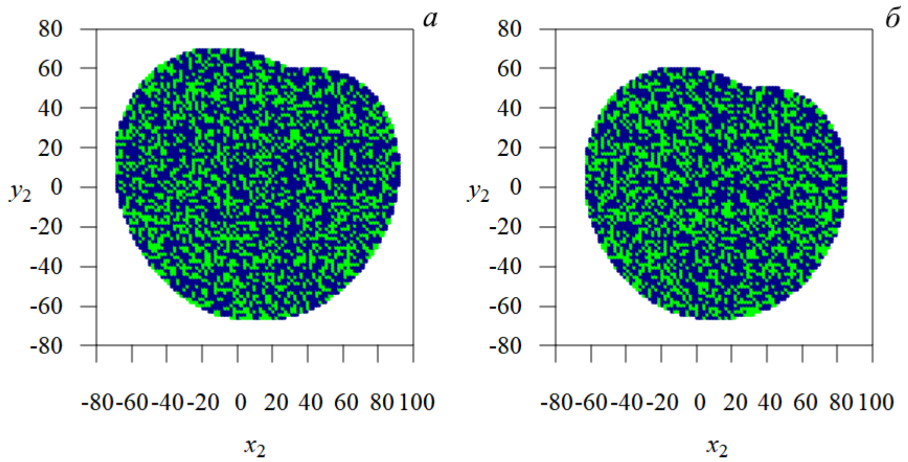


Рис. 1. Бассейны притяжения аттрактора второй системы Ресслера в случае однонаправленной (*а*) и взаимной (*б*) связи при параметре связи $\varepsilon = 0.17$ и $\varepsilon = 0.095$, соответственно. Темным цветом отмечены начальные условия, при которых наблюдается режим обобщенной синхронизации; светлым – асинхронный режим; белым – вылет траектории на бесконечность

Из рисунка 1 видно, что мультистабильность наблюдается не только в случае однонаправленной связи, но и в случае взаимной, поскольку при фиксированных значениях управляющих параметров в один и тот же момент времени обобщенная синхронизация может наблюдаться или отсутствовать в зависимости от начальных условий.

Расчет зависимости усредненной по времени меры мультистабильности от параметра связи подтверждает сделанные выводы (см рис. 2).

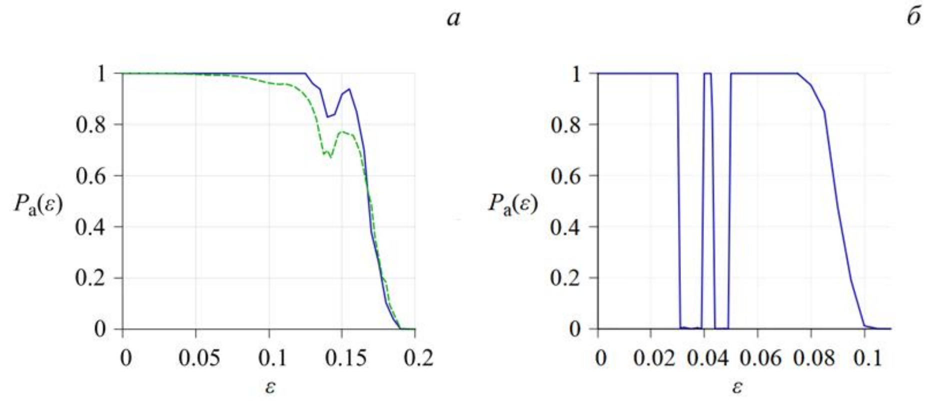


Рис. 2. Зависимость усредненной по времени вероятности наблюдения асинхронного поведения P_a от параметра связи ε в случае однонаправленной (*а*) и взаимной (*б*) связи, полученная при помощи расчета локальных ляпуновских показателей (сплошная линия) и метода вспомогательной системы (пунктирная линия)

Сопоставление результатов метода локальных ляпуновских показателей и метода вспомогательной системы в случае однонаправленной связи показало, что при небольшом отклонении от критического значения параметра связи полученные обоими методами зависимости отличаются количественно, но не качественно. В случае взаимной связи также наблюдаются окна периодичности при относительно малых значениях параметра связи.

Таким образом, при помощи метода локальных ляпуновских показателей исследована возможность существования мультистабильности вблизи границы обобщенной синхронизации. На примере систем Ресслера установлено, что явление мультистабильности может наблюдаться не только при однонаправленной связи, но и при взаимной. Наблюдается хорошее соответствие полученных результатов с результатами других работ и теоретическими закономерностями [8, 13]. Предложенный метод позволяет установить существования мультистабильности в связанных хаотических системах, находящихся вблизи границы обобщенной синхронизации, а также оценить меру мультистабильности с достаточно высокой точностью. Результаты данной работы могут быть использованы при исследовании взаимодействия различных нелинейных систем.

Литература

1. Boccaletti S., Kurths J., Osipov G. et al. The synchronization of chaotic systems // Physics Report. 2002. Vol. 366. Issue 1-2. P. 1–101. DOI: 10.1016/S0370-1573(02)00137-0.
2. Rulkov N. F., Sushchik M. M., Tsimring L. S. et al. Generalized synchronization of chaos in directionally coupled chaotic systems // Phys. Rev. E. 1995. Vol. 51 No. 2. P. 980–994. DOI: 10.1103/PhysRevE.51.980.
3. Koronovskii A. A., Moskalenko O. I., Hramov A. E. Nearest neighbors, phase tubes, and generalized synchronization // Phys. Rev. E. 2011. Vol. 84, № 3. Art. No. 037201. DOI: 10.1103/PhysRevE.84.037201.
4. Moskalenko O. I., Koronovskii A. A., Hramov A. E. Generalized synchronization of chaos for secure communication: Remarkable stability to noise // Phys. Lett. A. 374. 2010. P. 2925–2931. DOI: 10.1016/j.physleta.2010.05.024.
5. Rosenblum M.G., Pikovsky A.S., Kurts J.et al. Synchronization approach to analysis of biological systems // Fluct. Noise Lett. 2004. Vol. 4, No 1. P. L53–L62. DOI: 10.1142/S0219477504001653.
6. Hramov A. E., Koronovskii A. A., Ponomarenko V. I. et al. Detecting synchronization of self-sustained oscillators by external driving with varying frequency // Phys. Rev. E. 2006. Vol. 73. Art. No. 026208. DOI: 10.1103/PhysRevE.73.026208.
7. Abarbanel H. D. I., Rulkov N. F., Sushchik M. M. Generalized synchronization of chaos: The auxiliary system approach // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 53, N. 5. P. 4528. DOI: 10.1103/PhysRevE.53.4528.

8. O.I. Moskalenko, Koronovskii A. A., Hramov A. E. Inapplicability of an auxiliary-system approach to chaotic oscillators with mutual-type coupling and complex networks // Phys. Rev. E. 2013. Vol. 87. P. 064901. DOI: 10.1103/PhysRevE.87.064901.
9. Abarbanel H. D. I., Brown R., Kennel M. B. Variation of Lyapunov Exponents on a Strange Attractor // Journal of Nonlinear Science. 1991. Vol. 1. P. 175–199. DOI: 10.1007/BF01209065.
10. Hramov A. E., Koronovskii A. A., Kurovskaya M. K. Zero Lyapunov exponent in the vicinity of the saddle-node bifurcation point in the presence of noise // Phys. Rev. E. 2008. Vol. 78. Art. No. 036212. DOI: 10.1103/PhysRevE.78.036212.
11. Koronovskii A. A., Moskalenko O. I., Pivovarov A. A. et al. Intermittent route to generalized synchronization in bidirectionally coupled chaotic oscillators // CHAOS. 2020. Vol. 30. Art. No. 083133. DOI: 10.1063/5.0007156.
12. O. E. Rossler. An equation for continuous chaos // Phys. Lett. A. 1976. Vol. 57. P. 397–398. DOI: 10.1016/0375-9601(76)90101-8.
13. Koronovskii A. A., Moskalenko O. I., Pivovarov A. A. et al. Jump intermittency as a second type of transition to and from generalized synchronization // Phys. Rev. E. 2020. Vol. 102. Art. No. 012205. DOI: 10.1103/PhysRevE.102.012205.

РОЖДЕНИЕ ХАОСА В СИСТЕМЕ ДВУХ СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ ФАЗОВЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ С ПРОТИВОПОЛОЖНО НАПРАВЛЕННЫМИ ПРИТЯГИВАЮЩИМИ ГЕТЕРОКЛИНИЧЕСКИМИ ЦИКЛАМИ[1*]

А.Е. Емелин[1], Е.А. Гринес[1], Т.А. Леванова[1], А.С. Пиковский[1,2]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Department of Physics and Astronomy, Potsdam University*

В данной работе рассмотрен феномен возникновения хаотической активности при введении слабых связей между двумя кластерами фазовых осцилляторов, обладающих разнонаправленными гетероклиническими циклами в качестве аттракторов. Данное исследование вносит вклад в исследование сложных динамических паттернов и эффектов, возникающих при взаимодействии сложных сетей элементов.

Ключевые слова: хаос, гетероклинический цикл, фазовые осцилляторы.

1. Введение

Гетероклинический цикл представляет собой инвариантное множество в фазовом пространстве динамической системы, состоящее из седловых предельных множеств и соединяющих их гетероклинических траекторий. Впервые грубый вариант такой структуры был представлен в работе [1]. Динамика в окрестности асимптотически устойчивого гетероклинического цикла представляет собой последовательную активацию метастабильных состояний, причем данные состояния наблюдаются в течении экспоненциально увеличивающихся периодов времени. В качестве указанных седловых множеств могут выступать седловые состояния равновесия [2], седловые предельные циклы [3], седловые хаотические множества [4], а также химерные состояния, которые содержат в себе локализованные паттерны частотной синхронизации [5].

В данной работе рассмотрена система двух связанных кластеров, каждый из которых описывается некоторой редуцированной системой фазовых осцилляторов, обладающей устойчивым гетероклиническим циклом. Особенностью взаимодействия этих кластеров является рождение хаоса при малых параметрах силы связи между кластерами.

2. Модель

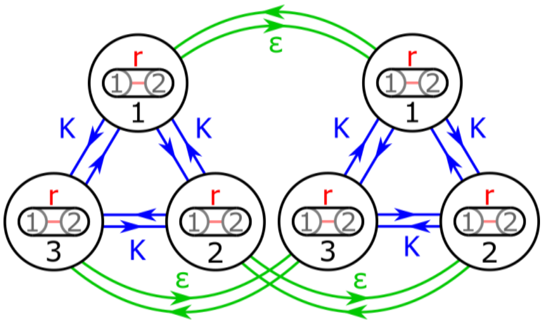


Рис. 1. Топология ансамбля

Опишем способ построения системы, демонстрирующей исследуемый нами эффект. За основу взята система фазовых осцилляторов [6], в которой наблюдается переключательная актив-

[1*] Исследование поддержано проект РНФ 17-12-01534 и РФФИ 19-52-12053.

ность между химерными состояниями в смысле Ashwin-Burylko [7]. Эта система описывает взаимодействие трёх популяций, где каждая популяция состоит из двух фазовых осцилляторов. Изначально описание динамики требует системы шести дифференциальных уравнений, однако введение разности фаз внутри каждой популяции позволяет снизить размерность до трёх. Получающаяся система записывается следующим образом:

$$\dot{\phi}_i = 2\hat{g}_2(\phi_i) - \frac{K}{2}\big(\hat{g}_4(\phi_i + \phi_{i-1}) + \hat{g}_4(\phi_i - \phi_{i-1})\big) + \frac{K}{2}\big(\hat{g}_4(\phi_i + \phi_{i+1}) + \hat{g}_4(\phi_i - \phi_{i+1})\big) \quad (1)$$

В ней параметр K отвечает за силу связи между популяциями, $i \in \{1,2,3\}$, а функции $\hat{g}_2(\varphi_i)$ и $\hat{g}_4(\varphi_i)$ отвечают за внутрипопуляционное и межпопуляционное взаимодействие соответственно. Эти функции заданы следующим образом:

$$\hat{g}_2(\phi) = sin(-\phi + \alpha_2) - sin(\phi + \alpha_2) - r\big(sin\big(2(-\phi + \alpha_2)\big) - sin(2(\phi + \alpha_2))\big) \quad (2)$$

$$\hat{g}_4(\phi) = sin(-\phi + \alpha_4) - sin(\phi + \alpha_4) \quad (3)$$

Параметры α_2 и r влияют на функцию связи между осцилляторами внутри популяции, в то время как α_4 отвечает за взаимодействие между популяциями.

Нетрудно видеть, что точки фазового пространства, у которых любая координата равна 0, либо π, являются состояниями равновесия редуцированной системы (1). Такие состояния равновесия имеют следующую интерпретацию: элементы i-ой популяции находятся в синхронизованном состоянии при значении фазы $\varphi_i = 0$ (будем обозначать это буквой S), и десинхронизованном состоянии при значении фазы $\varphi_i = \pi$ (обозначим это буквой D). Все такие комбинации (кроме SSS и DDD) отвечают седловому состоянию равновесия системы (1). В [6] было показано, что в системе (1) присутствует грубый устойчивый гетероклинический цикл, включающий в себя эти метастабильные состояния (Рис. 2). Примечательно, что изменение знака параметра K приводит к изменению порядка обхода гетероклинического цикла, но не влияет на его устойчивость.

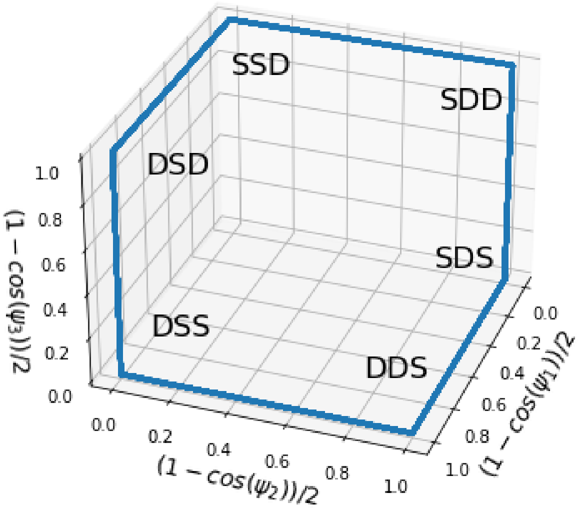


Рис. 2. Последовательность посещения метастабильных состояний в системе, описывающей динамику одного кластера

Теперь рассмотрим две копии системы (1), отличающиеся друг от друга только знаком параметра K. Назовём каждую из этих копий *кластером* и введём дополнительную функцию связи, отвечающую за взаимодействие между популяциями разных кластеров. Таким образом, получим следующую систему из шести дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{\phi}_i = 2\hat{g}_2(\phi_i) - \frac{K}{2}\big(\hat{g}_4(\phi_i + \phi_{i-1}) + \hat{g}_4(\phi_i - \phi_{i-1})\big) + \frac{K}{2}\big(\hat{g}_4(\phi_i + \phi_{i+1}) + \hat{g}_4(\phi_i - \phi_{i+1})\big) + \varepsilon I(\phi_i) - \psi_i \\ \dot{\psi}_i = 2\hat{g}_2(\psi_i) + \frac{K}{2}\big(\hat{g}_4(\psi_i + \psi_{i-1}) + \hat{g}_4(\psi_i - \psi_{i-1})\big) - \frac{K}{2}\big(\hat{g}_4(\psi_i + \psi_{i+1}) + \hat{g}_4(\psi_i - \psi_{i+1})\big) + \varepsilon I(\psi_i) - \phi_i \end{cases} \quad (4)$$

Здесь параметр ε задает силу межкластерного воздействия, а функция связи $I(\phi)$ есть

$$I(\phi) = 1 - cos(\phi) \quad (5)$$

В этом случае воздействие популяции одного кластера на соответствующую популяцию другого кластера осуществляется во время переключения из синхронизованного режима в десинхронизованный или наоборот.

3. Спектр ляпуновских показателей

При фиксированных параметрах $K = 0.4$, $r = 0.1$, $\alpha_2 = \frac{\pi}{2}$, $\alpha_4 = \pi$ была исследована динамика системы в зависимости от силы межкластерного взаимодействия ε. Для выявления хаотической динамики численно был построен график спектра ляпуновских показателей (Рис. 3). Параметр ε изменялся от значения 10^{-14} до 10^{-2}. Из полученного графика видно, что два наибольших ляпуновских показателя (отмечены оранжевым и синим цветом) в основном остаются положительными до значения $\varepsilon \approx 10^{-7}$. Это указывает на наличие хаотической динамики в фазовом пространстве системы.

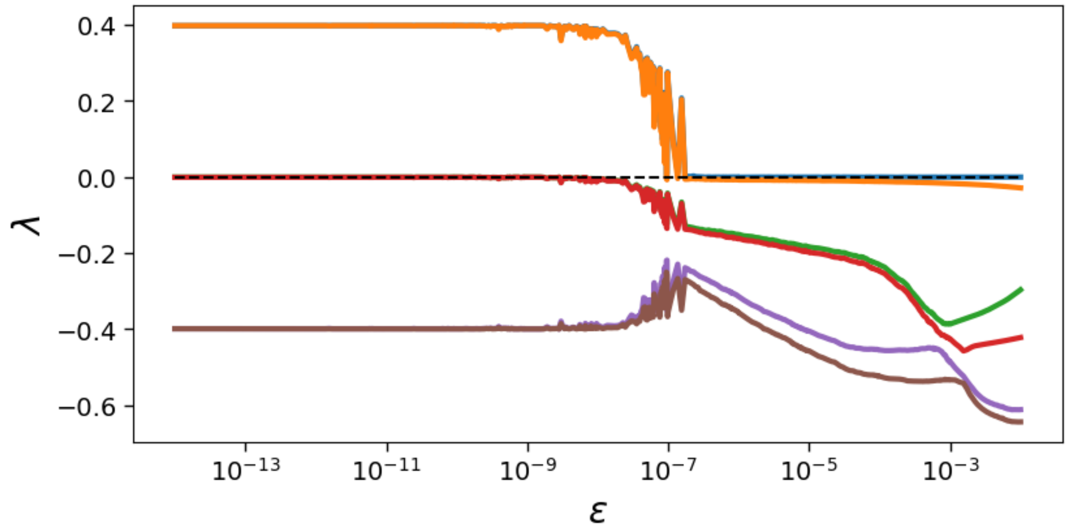


Рис. 3. Спектр Ляпуновских показателей в зависимости от силы межкластерного взаимодействия ε

Для значения параметра силы связи $\varepsilon = 10^{-10}$также была построена диаграмма активности популяций кластеров (Рис. 4). На диаграмме черные полосы соответствуют близости популяции к состоянию десинхронизации, белые участки соответствуют близости к состоянию синхронизации, тогда как серые полосы обозначают промежуточные значения.

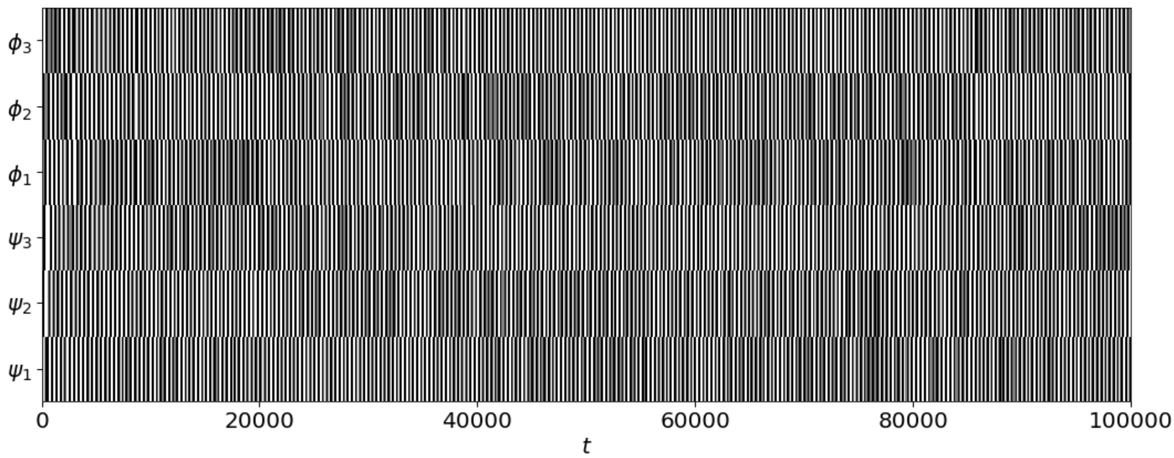


Рис.4. Диаграмма активности популяций кластеров системы (4)

Паттерны на подобной диаграмме позволяют визуально определить характер установившегося режима: например, повторяющиеся чередования полос характерны для предельных циклов, тогда как возрастание длин полос характерно для гетероклинических циклов. Как видно из рисунка, на диаграмме активности отсутствуют подобные паттерны, что вместе с положительным старшим ляпуновским показателем подтверждает наличие хаотической динамики в системе при заданных параметрах.

4. Выводы

Численно изучено рождение хаоса при введении слабых связей между двумя кластерами с разнонаправленными гетероклиническими циклами в качестве аттракторов. Исследуемая система представляет собой шестимерную систему фазовых ОДУ. Было продемонстрировано, что найденный хаотический режим разрушается при увеличении силы межкластерного взаимодействия больше некоторого найденного порога.

Литература

1. Guckenheimer J., Holmes P. Structurally stable heteroclinic cycles //Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. – Cambridge University Press, 1988. – Т. 103. – №. 1. – С. 189-192.
2. Afraimovich V. S., Zhigulin V. P., Rabinovich M. I. On the origin of reproducible sequential activity in neural circuits //Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. – 2004. – Т. 14. – №. 4. – С. 1123-1129.
3. Komarov M. A., Osipov G. V., Zhou C. S. Heteroclinic contours in oscillatory ensembles //Physical Review E. – 2013. – Т. 87. – №. 2. – С. 022909.
4. Dellnitz M. et al. Cycling chaos //IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Fundamental Theory and Applications. – 1995. – Т. 42. – №. 10. – С. 821-823.
5. Bick C. Heteroclinic switching between chimeras //Physical Review E. – 2018. – Т. 97. – №. 5. – С. 050201.
6. Bick C. Heteroclinic dynamics of localized frequency synchrony: heteroclinic cycles for small populations //Journal of Nonlinear Science. – 2019. – Т. 29. – №. 6. – С. 2547-2570.
7. Ashwin P.,Burylko O. Weak chimeras in minimal networks of coupled phase oscillators // Chaos. – 2015. – Т. 25. – №. 1. – С. 013106.

РЕЖИМЫ НЕЙРОНОПОДОБНОЙ АКТИВНОСТИ В АНСАМБЛЕ ФАЗОВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ТОРМОЗЯЩИМИ СВЯЗЯМИ[1*]

А.Е. Емелин, Т.А. Леванова, Г.В.Осипов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В данной работе предложена новая простая модель полуцентра, которая представляет собой два неидентичных фазовых элемента, связанных химическими тормозящими связями. Изучены различные режимы нейроноподобной активности, возникающие в такой системе.

Ключевые слова: центральный генератор ритма, полуцентр, фазовые осцилляторы.

1. Введение

Известно, что жизненно важные функции животных и человека, такие как сердцебиение, дыхание и двигательная активность, регулируются т.н. центральными генераторами ритмов (ЦГР) - замкнутыми контурами в нервной системе, которые могут генерировать основные ритмические паттерны без сенсорной обратной связи или внешнего стимула. Основной составляющей ЦГР являются полуцентры, которые представляют собой два взаимно связанных нейрона, которые могут генерировать базовые паттерны нейронной активности [1].

2. Модель

В данной работе предложена простая модель полуцентра на основе фазовых уравнений Адлера. Модель представляет собой систему ОДУ 2 порядка и описывает два нейроноподобных элемента, связанных взаимными химическими синаптическими тормозящими связями:

$$\begin{cases} \dot{\varphi}_1 = \gamma_1 - \sin\varphi_1 + dI(\varphi_2) \\ \dot{\varphi}_2 = \gamma_2 - \sin\varphi_2 + dI(\varphi_1) \end{cases}. \tag{1}$$

Здесь φ_i – переменная, соответствующая фазе i-ого элемента. Параметр γ_i определяет тип поведения изолированного нейрона: при $\gamma_i < 1$ элемент является возбудимым, при $\gamma_i > 1$ осцилляторным.

Гладкая функция $I(\varphi_i)$ моделирует передачу сигнала от пресинаптического элемента к постсинаптическому и задается следующим образом:

$$I(\varphi) = \frac{1}{1+e^{k(\cos(\sigma) - \sin(\varphi))}}. \tag{2}$$

Параметр σ определяет длительность тормозящего воздействия пресинаптического элемента на постсинаптический, а параметр k – время переключения воздействия. Таким образом, когда фаза активного пресинаптического элемента принимает значения из отрезка $\left[\frac{\pi}{2} - \sigma, \frac{\pi}{2} + \sigma\right]$, осуществляется тормозящее воздействие на постсинаптический элемент. Параметр d задает силу химической тормозящей связи. Функция такого вида была впервые введена в работе [2].

Для более биологически правдоподобного моделирования элементы ансамбля заданы неидентичными:

$$\begin{cases} \gamma_1 = \gamma \\ \gamma_2 = \gamma + \Delta \end{cases}$$

Здесь γ=1.01 (что соответствует режиму генерации тонических спайков одним элементом в отсутствии связей), а неидентичность между элементами описывается параметром Δ.

[1*] Исследование поддержано Министерством науки и высшего образования, проект № 0729-2020-0036.

3. Режимы нейроноподобной активности

Для исследования различных режимов нейроноподобной активности, возникающих в данной модели, был проведен двухпараметрический анализ. При различных фиксированных значениях параметра Δ численно на плоскости управляющих параметров d и σ были построены карты режимов синхронизации (рис. 4). Темно-красная область соответствует режиму отсутствия колебаний. Красная область соответствует режиму, когда второй элемент подавляет активность первого элемента (синхронизация 0:1). Широкие области, отмеченные другими цветами, соответствуют различным режимам синхронизации между элементами. Узкие области разных цветов соответствуют квазипериодическим режимам. Подробнее это можно видеть на рис. 5, где представлены числа вращения, которые вычислялись для каждой из трех карт при

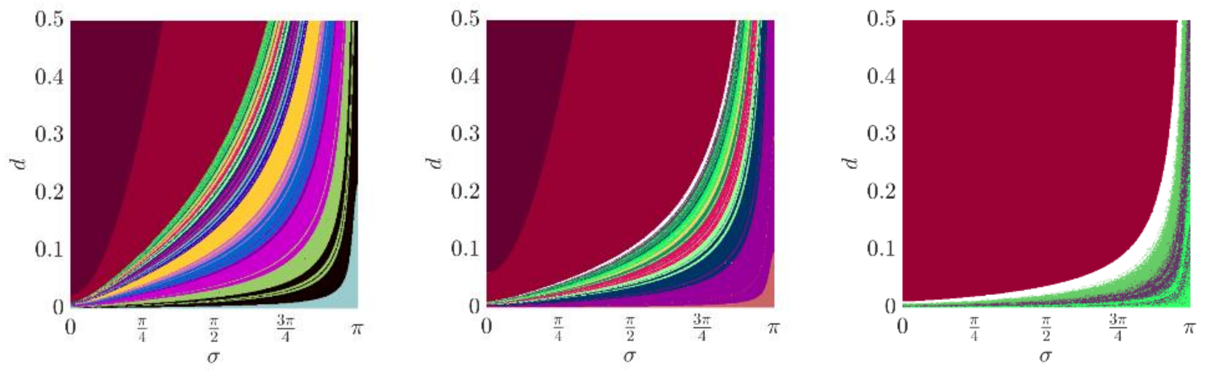


Рис. 4. Карты режимов нейроноподобной активности при различных значениях параметра неидентичности

фиксированном значении параметра $\sigma = \frac{\pi}{2}$, в зависимости от силы связи d.

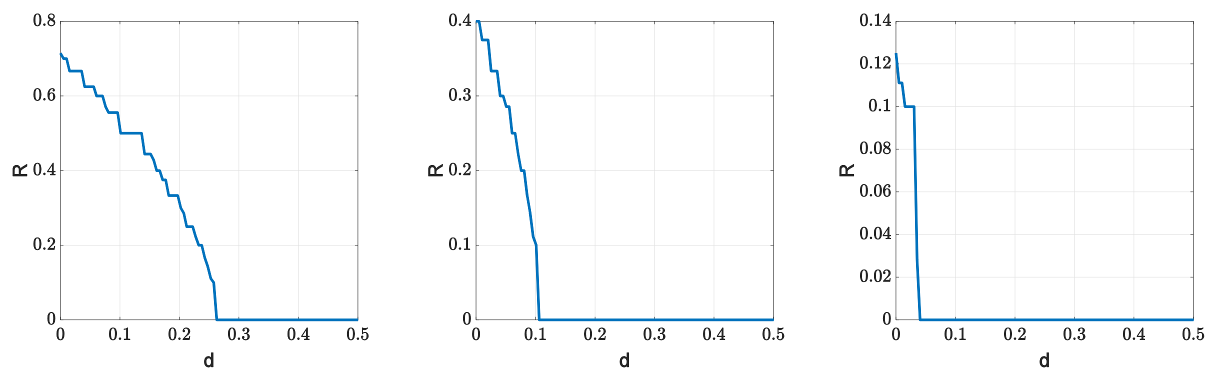


Рис.5. График зависимости числа вращения R от параметра силы связи d при различных значениях Δ.

Как видно на рис. 4, при малом значении параметра неидентичности $\Delta = 0.01$, большая часть карты покрыта областями различных синхронизаций. Оставшуюся часть делят между собой режим молчания и режим синхронизации 0:1. При увеличении параметра неидентичности до значения $\Delta = 0.05$, видно, что область синхронизации 0:1 начинает расширяться. Наконец, при достаточно большом значении параметра неидентичности $\Delta = 0.5$, в большом диапазоне значений параметров σ и d происходит подавление активности первого элемента вторым. Примеры временных реализаций различных синхронных режимов представлены на рис. 6.

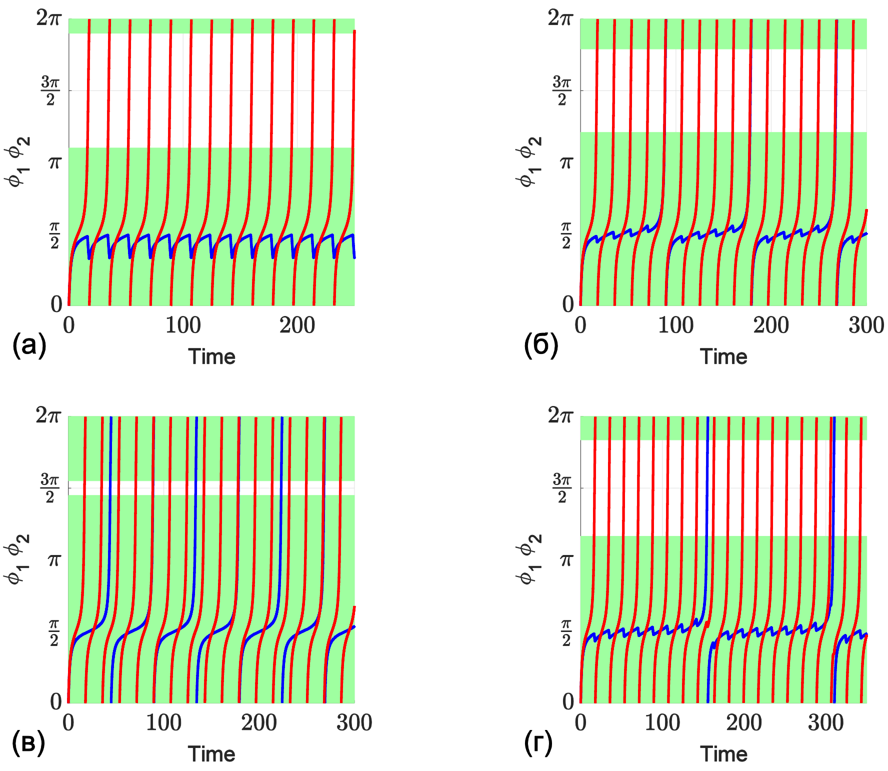


Рис. 6. Примеры временных реализаций различных синхронных режимов активности.

4. Выводы

Таким образом, в данной работе была предложена и исследована новая простая модель полуцентра, состоящего из двух неидентичных нейроноподобных элементов, связанных химическими синаптическими тормозящими связями. Изучены синхронные режимы, наблюдаемые в системе при различных значениях управляющих параметров.

Литература

1. Brown T. G. The intrinsic factors in the act of progression in the mammal //Proceedings of the Royal Society of London. Series B, containing papers of a biological character. – 1911. – Т. 84. – №. 572. – С. 308-319.
2. Korotkov A. G., Levanova T. A., Zaks M. A., Osipov G. V. Dynamics in a phase model of half-center oscillator: Two neurons with excitatory coupling // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2022. – V. 104. – P. 106045.

ШУМОИНДУЦИРОВАННАЯ ПАМЯТЬ В НЕЙРОН-АСТРОЦИТАРНОЙ СЕТИ[1*]

А.В. Ермолаева[1], С.Ю. Гордлеева[1], А.А. Заикин[1,2]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Россия*
[2]*University College London, United Kingdom*

В данной работе мы рассматриваем модель нейрон-астроцитарной сети под воздействием мультипликативного шума и показываем, что ассоциативная память, одна из парадигматических сигнатур интеллектуальных систем, может быть вызвана стохастическим воздействием. Более того, мы показываем, что астроциты, играющие важную роль в обработке информации мозгом млекопитающих, могут также способствовать формированию функций систем, обеспечивающих интеллект. Таким образом, можно сделать вывод, что внутренняя стохастичность, возможно, положительно используется мозгом не только для оптимизации реакции на сигнал, но и для стимулирования самого интеллекта, и одна из ролей, которую играют астроциты в обработке информации, может заключаться в работе с шумом.

Ключевые слова: нейронная сеть, астроцит, нейрон-астроцитарное взаимодействие, ассоциативная память.

1. Введение

Недавние исследования показали, что шум может играть конструктивную роль в динамике сложных систем. К таким явлениям, например, относится хорошо известный стохастический резонанс, когерентный резонанс, индуцированные шумом переходы. Мозг млекопитающих, проявляющий интеллект и сознание, эволюционирует в стохастических условиях. Шум возникает как из внутренних, так и из внешних источников и проявляется в виде колебаний мембранного потенциала [1]. Следовательно, возникает естественный вопрос, какова роль шума в функционировании нейрон-астроцитарных сетей, и может ли шум не только оптимизировать обработку сигналов, но и стимулировать сам интеллект. В качестве интеллекта мы рассмотрим общий пример распознавания образов. В данной работе мы рассматриваем модель нейрон-астроцитарной сети и показываем, что мультипликативный шум определенной формы может способствовать формированию кратковременной ассоциативной памяти. Более того, мы показываем, что астроциты, локальные интеграторы нейронной активности [2,3], играют в этом важную роль.

2. Модель нейрон-астроцитарной сети

Предложенная нейрон-астроцитарная сеть состоит из двух компонентов: первый – это сеть нейронов ФитцХью-Нагумо размерностью 130x130, второй – сеть астроцитов, имеющая размерность 43x43. Каждый астроцит взаимодействует с нейронным ансамблем размерностью 4x4 с перекрытием в один ряд, что обеспечивает связь между астроцитами.

Нейроны моделируются как набор осцилляторов ФитцХью-Нагумо [4], где каждый осциллятор связан со своим ближайшим соседом. Важно, что возбудимость в данной нейронной сети поддерживается мультипликативным шумом: без шума каждый нейрон будет осциллировать, но при наличии оптимальной интенсивности мультипликативного шума колебания нейронного слоя подавляются.

Астроцитарная активность определяется динамикой внутриклеточной концентрации кальция, которая контролируется внутриклеточной концентрацией инозитолтрифосфата и долей кальциевых каналов на мембране внутриклеточного хранилища кальция, эндоплазматического

[1*] Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90151.

ретикулума, которые находятся в открытом состоянии. Для описания динамики внутриклеточной концентрации кальция в каждом астроците используется модель Ли-Ринцеля [5].

В ответ на определенный уровень активности нейронного ансамбля в астроците, взаимодействующем с данным ансамблем, возникает повышение внутриклеточной концентрации кальция. Когда концентрация кальция в астроците превышает пороговое значение, он высвобождает глиапередатчик, который может влиять на возбудимость нейронов и синаптическую передачу. Таким образом формируется двунаправленная связь между слоем нейронов и слоем астроцитов [6].

В данной работе исследовался ответ нейрон-астроцитарной сети на входной сигнал. В качестве входного сигнала было двоичное изображение цифры 1 размером 130x130 пикселей (Рис. 1a). После обучения сети шаблоном с добавлением 10% шума соли и перца (Рис. 1b) подавалось тестовое изображение с добавлением 40% шума соли и перца (Рис. 1c). Было показано, что благодаря диффузионной связи нейронная сеть способна подавлять шум во входном изображении. Но нейроны реагируют на входной сигнал в течение очень короткого промежутка времени, и во время обучения нейронная сеть без астроцитов не может запомнить шаблон. Поэтому после тестирования активность нейронов отсутствует. Наличие астроцитов качественно меняет ситуацию, обеспечивая кратковременную ассоциативную память. Анализируя реакцию нейрон-астроцитарной сети со значительным вкладом шума во время и после тестирования, было обнаружено, что нейрон-астроцитарная сеть способна запоминать и с высокой степенью точности воспроизводить шаблон после тренировки в течение определенного периода времени, который определяется длительностью кальциевого импульса в астроцитах (Рис. 1(g-i)). Также показано, что без шума нейронный слой находится в колебательном состоянии, и нейрон-астроцитарная сеть не может запомнить шаблон (Рис. 1(d-f)).

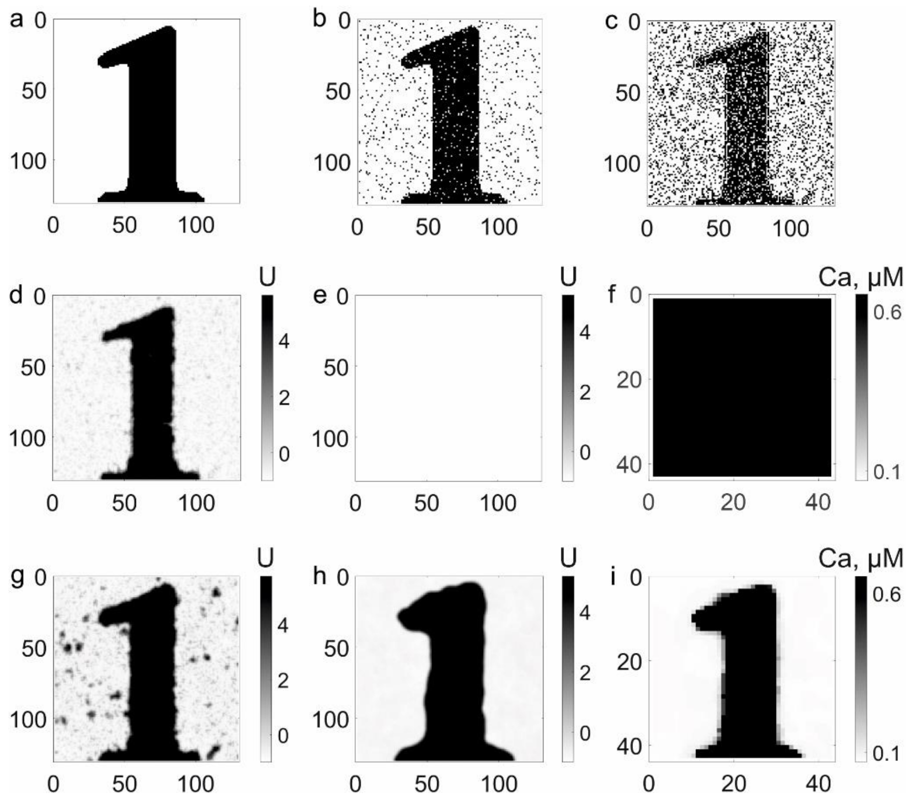


Рис. 1. Паттерны входного сигнала: (a) без шума, (b) тренировочный, (c) тестовый.
Без мультипликативного шума: (d,e) ответ нейронной сети во время и после тестирования, соответственно, (f) внутриклеточная концентрация кальция в астроцитах. С шумом: (g,h) ответ нейронной сети во время и после тестирования, (i) внутриклеточная концентрация кальция в астроцитах.

Литература

1. Gilad A. Jacobson, Kamran Diba, Anat Yaron-Jakoubovitch, Yasmin Oz, Christof Koch, Idan Segev, Yosef Yarom. Subthreshold voltage noise of rat neocortical pyramidal neurones // J. Physiol. 2005. Vol. 564, No. 1. P. 145-160. DOI: 10.1113/jphysiol.2004.080903.
2. Alexey Semyanov, Christian Henneberger, Amit Agarwal. Making sense of astrocytic calcium signals – from acquisition to interpretation // Springer. 2020. Vol. 21, No. 10. P. 551-564. DOI: 10.1038/s41583-020-0361-8.
3. Susan Yu. Gordleeva, Anastasia V. Ermolaeva, Innokentiy A. Kastalskiy, Victor B. Kazantsev. Astrocyte as spatiotemporal integrating detector of neuronal activity // Frontiers Media. 2019. Vol. 10. DOI: 10.3389/fphys.2019.00294.
4. E. Ullner, A. Zaikin, J. Garcia-Ojalvo, J. Kurths. Noise-induced excitability in oscillatory media // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91, No. 18. P. 180601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.180601.
5. Y.-X. Li, J. Rinzel. Equations for InsP3 receptor-mediated [Ca2+]i oscillations derived from a detailed kinetic model: a Hodgkin-Huxley like formalism // J. Theor. Biol. 1994. Vol. 166, No. 4. P. 461-473. DOI: 10.1006/jtbi.1994.1041.
6. O. Kanakov, S. Gordleeva, A. Ermolaeva, S. Jalan, A. Zaikin. Astrocyte-induced positive integrated information in neuron-astrocyte ensembles // Phys. Rev. E. 2019. Vol. 99. P. 012418. DOI: 10.1103/PhysRevE.99.012418.

НЕРАВЕНСТВО ВИРО-ЗВОНИЛОВА ДЛЯ ГИБКИХ КРИВЫХ НА ПОЧТИ КОМПЛЕКСНОМ ЧЕТЫРЁХМЕРНОМ МНОГООБРАЗИИ[1*]

В.И. Звонилов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В докладе ограничения на топологию неособых плоских проективных вещественных алгебраических кривых нечётной степени, полученные в [1], распространяются на гибкие кривые, лежащие в почти комплексном четырёхмерном многообразии.

Ключевые слова: гибкая кривая на почти комплексном многообразии, вещественные перепонки.

1. Определения

1.1. Гибкая кривая

Пусть X – гладкое связное замкнутое четырехмерное многообразие с $H_1(X)=0$ и A – его ориентированное замкнутое двумерное подмногообразие, реализующее ненулевой класс ξ в $H_2(X)$. Пусть на X существует гладкая инволюция $conj: X\to X$ с непустым множеством неподвижных точек X^{conj}, причём A инвариантно относительно неё. Кроме того, пусть B – объединение компонент множества X^{conj}, которые пересекают A, и многообразие X является почти комплексным вдоль B, а сужение инволюции на B антиголоморфным.

Следуя О.Я. Виро [2], определим на X *гибкую кривую* A рода g как гладкую ориентированную связную замкнутую поверхность, удовлетворяющую условиям

- её род равен g;
- она инвариантна относительно $conj$;
- поле её касательных плоскостей на $A^{conj}=A\cap X^{conj}$ можно продеформировать в классе плоскостей, касательных к X и инвариантных относительно $conj$, в поле комплексных прямых касательных к A^{conj}.

Пусть m – наибольшее нечётное число, делящее класс ξ, и h – наибольшая степень простого числа p, делящая m.

Ясно, что вещественная алгебраическая кривая на поверхности является гибкой.

Гибкая кривая A принадлежит *типу* I или II, если множество $A\backslash A^{conj}$ несвязно или, соответственно, связно. В первом случае A^{conj} разбивает поверхность A на две связные половины A^+, A^-. Ориентация поверхности A и индуцированные ориентации половин A^+, A^- определяют на $A^{conj}=\partial A^+=\partial A^-$ две противоположные *комплексные ориентации*.

1.2. Перепонки

Пусть $B_1,\dots,B_n$ – незамкнутые ориентируемые компоненты множества $X^{conj}\backslash A^{conj}$ с некоторыми ориентациями, $b_i\in H_2(X^{conj}, A^{conj}; Z_p)$ – класс, задаваемый компонентой B_i, и n^+, n^0, n^- – числа компонент B_i с положительной, нулевой и отрицательной эйлеровой характеристикой.

Пусть $Y_1,\dots,Y_r$ – ориентируемые компоненты связности множества B. Каждая компонента Y_i есть замыкание объединения некоторых B_j, поэтому она определяет класс $y_i=\Sigma\, b_j$.

[1*] Работа выполнена по теме государственного задания (№ 0729-2020-0055).

2. Основные результаты

Пусть $b_2(X)$ и $\sigma(X)$ – двумерное число Бетти и сигнатура многообразия X, ξ^2 – индекс самопересечения класса ξ, $k = dim\ ker(in_*: H_2(B; Z_p) \to H_2(X; Z_p))$, $\delta = 1$ или 0, если A имеет тип I или II. Тогда

$$n^- \leq \frac{b_2(X)+\sigma(X)}{2} + g - \frac{\xi^2(m^2-1)}{4m^2}, \tag{1}$$

а если фундаментальная группа дополнения A в X абелева, то

$$n-+n0 \leq \frac{b_2(X)+\sigma(X)}{2} + g - \frac{\xi^2(h^2-1)}{4h^2} + k + \delta. \tag{2}$$

2.1. Замечания

(i) если в неравенстве (2) с $\delta = 1$ достигается равенство, то существуют такие $x_1, \ldots, x_n \in Z_p$, что граничный гомоморфизм $H_2(B, A^{conj}; Z_p) \to H_1(A^{conj}; Z_p)$ переводит $x = \Sigma\, x_j b_j$ в фундаментальный класс $[A^{conj}]$ кривой A^{conj}, наделённой комплексной ориентацией, и $\chi(B_j) = 0$ для всех j с $x_j \neq 0$.

(ii) если в неравенстве (2) с $\delta = 0$ достигается равенство и $k > 0$, то существуют такие $x_1, \ldots, x_n \in Z_p$, что $\Sigma\, x_j y_j$ лежит в $ker\ in_*$ и $\chi(Y_j) = 0$ для всех j с $x_j \neq 0$.

Приводятся примеры вещественных алгебраических поверхностей и кривых на них, доказывающие точность полученных неравенств.

Литература

1. Виро О.Я, Звонилов В.И. Неравенство для числа непустых овалов кривой нечетной степени // Алгебра и анализ. 1992. Т. 4, № 3. С. 159-170.
2. Виро О.Я. Успехи в топологии вещественных алгебраических многообразий за последние шесть лет // УМН. 1986. Т. 41, № 3(249). С. 45–67.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ В ЗАДАЧЕ ОБ ИСПАРИТЕЛЬНОЙ САМОСБОРКЕ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ В ВЫСЫХАЮЩЕЙ НА ГИДРОФИЛЬНОЙ ПОДЛОЖКЕ КАПЛЕ[1*]

П.А. Золотарев[1], К.С. Колегов[1,2]

[1]Астраханский государственный университет,
[2]Каспийский институт морского и речного транспорта им. генерал-адмирала Ф.М. Апраксина – филиал ФГБОУ ВО «ВГУВТ»

Коллоидные капли используются во многих практических областях: нано- и биотехнологии, микро- и оптоэлектроника, диагностика в медицине и так далее. Моделирование высыхания таких капель позволяет понять процессы, протекающие в них. Понимание данных процессов дает возможность для создания простых и дешевых методов формирования требуемых осадков. В данной статье рассматривается использование параллельных вычислений в моделировании высыхающей на гидрофильной подложке капли. Для распараллеливания алгоритма использовалась библиотека OpenMP. Результаты замеров времени выполнения программы показали увеличение эффективности параллельной версии по сравнению с последовательной по мере увеличения количества частиц содержащихся в капле.

Ключевые слова: испарительная самосборка, коллоидные частицы, высыхающая капля, гидрофильная подложка, конвективный перенос, диффузия частиц, метод Монте-Карло, параллельный алгоритм.

1. Введение

Многие современные приложения основаны на использовании различных форм осадков микро- и наночастиц, как например, струйная печать для типографии, биосенсоры в медицине, прозрачные и электропроводные покрытия в микро- и оптоэлектронике, лаборатории на чипе для биохимических задач и так далее [1, 2]. Для возможности разработки эффективных и недорогих устройств, требуется создание простых и дешевых методов формирования различных структур частиц. Таким образом, исследование механизмов испарительной самосборки коллоидных частиц является сейчас актуальным направлением. Численное моделирование процессов самосборки частиц важно для выявления ключевых параметров системы, влияющих на этот процесс. Реализация эффективных численных алгоритмов позволит выполнять расчеты для относительно большого количества частиц за разумное время. Речь идет не только об оптимизации алгоритмов, но и об использовании параллельных вычислений в численном моделировании.

В предыдущей работе [3] описан алгоритм расчета формирования осадка в виде монослоя частиц в процессе испарения бидисперсной коллоидной капли, содержащей частицы двух размеров, на гидрофильной подложке. Цель текущей работы заключается в разработке параллельной модификации данного алгоритма и анализе ее эффективности.

2. Методы

В этом разделе описывается физическая постановка задачи, математическая модель и параллельный алгоритм. Значения физических параметров подробно представлены в [3]. Экспериментальные достижения по тематике работы описаны в [1–3].

[1*] Проект реализуется победителем Конкурса на предоставление грантов преподавателям магистратуры 2020/2021 благотворительной программы «Стипендиальная программа Владимира Потанина» Благотворительного фонда Владимира Потанина.

2.1. Физическая постановка задачи

Рассмотрим каплю коллоидного раствора на гидрофильной подложке с микросферами полистирола двух размеров (рис. 1). Обозначим радиус больших частиц как r_l и радиус маленьких частиц как r_s ($r_s < r_l$). Считаем, что трехфазная граница закреплена на протяжении всего процесса испарения, поэтому радиус контакта капли с подложкой R является постоянной величиной. Это условие выполняется в случае с шероховатой подложкой или при достаточной концентрации частиц. Стеклянная подложка является непромокаемой и расположена перпендикулярно направлению вектора силы тяжести. На гидрофильной поверхности краевой угол смачивания θ_0 принимает относительно малые значения. При таких углах θ_0 слой жидкости является тонким, что способствует формированию осадка в виде монослоя частиц. Капиллярный поток жидкости, возникающий в результате испарения, переносит частиц в сторону периферии капли. Кроме того, частицы подвержены диффузии. Считаем, что раствор разбавленный, поэтому коэффициент диффузии $D_{s,l}$ рассчитываем по формуле Эйнштейна.

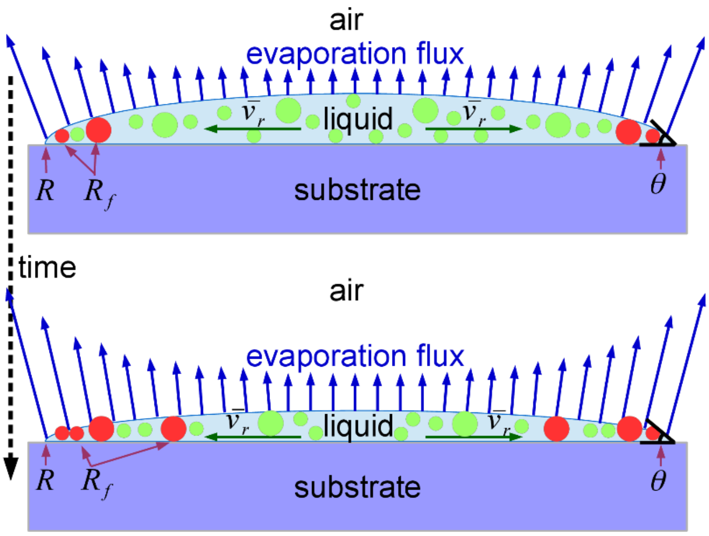


Рис. 1. Схематический рисунок к постановке задачи [3]

2.2. Математическая модель

Модель [3] является полудискретной, так как гидродинамика моделируется в рамках континуального подхода, но при этом рассматривается движение каждой коллоидной частицы явным образом. Геометрическая область рассматриваемой задачи изображается в форме круга с радиусом R (вид на каплю сверху). Реальная трехмерная область близка по форме сферическому сегменту в случае преобладания капиллярной силы над силой тяжести. Учитывая тонкий слой жидкости ($h_0 << R$, где h_0 – начальная высота капли в ее центральной области), мы переходим от 3D постановки задачи (сферический сегмент) к 2D постановке (круг). Таким образом, частицы движутся в горизонтальной плоскости, поэтому их положения задаются как (x, y), в декартовой системе координат, или (r, φ), в полярной системе координат. Точка ($x = 0$, $y = 0$) или ($r = 0$, $\varphi = -\pi..\pi$) соответствует центру круга. Мелкие и крупные частицы в 2D формулировке описываются в виде кружков меньшего диаметра внутри большого круга ($r_s < r_l << R$). Из аппроксимации формы капли $h(r, t) = \theta(t)\,(R^2 - r^2)/(2R)$ выразим радиус фиксации $R_{s,l}(t) = (R^2 - 4r_{s,l}\,R/\,\theta(t))^{0.5}$, где $\theta(t) = \theta_0\,(1 - t/\,t_{\max})$ и $t_{\max}$ – время процесса. Под радиусом фиксации понимается граница, где размер частиц и толщина жидкого слоя соизмеримы. Стоит отметить, что $R_l(t) < R_s(t) < R$. Считаем, что частица в процессе движения не может пересечь свой радиус фиксации, так как этому противодействуют капиллярная сила. С другой стороны, полагаем, что граница $R_{s,l}$ может пересечь частицу, не увлекая ее за собой.

Здесь диффузия частиц моделируется методом Монте-Карло. На каждом временном шаге τ генерируется случайный полярный угол $\alpha \in [-\pi..\pi)$ для каждой подвижной частицы. Новое положение частицы рассчитывается по формулам $x_{\tau+1}^{s,l} = x_{\tau}^{s,l} + \cos(\alpha)\sqrt{2D_{s,l}\delta t}$ и $y_{\tau+1}^{s,l} = y_{\tau}^{s,l} + \sin(\alpha)\sqrt{2D_{s,l}\delta t}$. Значение временного шага $\delta t = 0.1$ мс [3].

Теперь рассмотрим перенос частиц, вызванный капиллярным потоком жидкости. В рассматриваемом случае скорость движения частицы и скорость потока, несущего эту частицу, совпадают. Усредненная по толщине жидкого слоя радиальная скорость течения рассчитывается по формуле

$$\bar{v}_r(r,t) = \frac{R}{4\tilde{r}(t_{\max} - t)}\left[\frac{1}{\sqrt{1-\tilde{r}^2}} - (1-\tilde{r}^2)\right],$$

где $\tilde{r} = r/R$. Радиальная координата на следующем временном шаге

$$r_{\tau+1}^{s,l} = \begin{cases} r_{\tau}^{s,l} + \bar{v}_r\delta t, & r_{\tau}^{s,l} + \bar{v}_r\delta t \le R_{s,l} \\ R_{s,l}, & r_{\tau}^{s,l} + \bar{v}_r\delta t > R_{s,l}. \end{cases}$$

2.3. Параллельный алгоритм

Алгоритм программы для ЭВМ описан в листинге 1 с использованием псевдокода. Задано количество мелких N_s и крупных частиц N_l. Общее число частиц составляет $N_p = N_s + N_l$.

```
Задаем параметры задачи: rs,l, R, Ns,l, Ds,l, θ0, δt, tmax.
Генерируем случайные координаты частиц (xi, yi), i ∈ [1;Np].
По умолчанию все  частицы помечаем зеленым цветом.
for τ ← 1, tmax/δt do
  Вычисляем Rs,l.
  for i ← 1, Np do
    Изменяем статус частицы при необходимости.
  end for
  for i ← 1, Np do
    if (Частица зеленая) then
      Рассчитываем новые координаты частицы в результате диффузии.
      if (Нет коллизии) then
        Перемещаем частицу.
      end if
      Рассчитываем новые координаты частицы в результате конвекции.
      if (Нет коллизии) then
        Перемещаем частицу.
      end if
    end if
  end for
  Записываем координаты частиц и их статусы для текущего временного
  шага в файл.
end for
```

Рис. 1. Алгоритм расчета динамики частиц в высыхающей капле

Подвижные частицы помечаем зеленым цветом и неподвижные частицы красным цветом (рис. 1). Зеленые частицы подвержены конвективному и диффузионному переносу. В начальный момент времени t = 0 все частицы по умолчанию зеленые. Начальное распределение мелких и крупных частиц генерируется внутри круга с радиусом Rs или Rl, соответственно. Координаты x и y для каждой частицы генерируются случайным образом в цикле. Если возникает коллизия частиц (пересечение кругов), то для текущей частицы генерируются новые значения координат. Если зеленая частица оказалась на границе фиксации или за ее пределом ($r^{s,l} \ge R_{s,l}$), то она помечается красным цветом. Другими словами, красные частицы являются осадком. Структура данных о частице представляет собой информацию о координатах, радиусе, статусе и подобласти, в которой частица находится. Для хранения данных обо всех частицах используется одномерный массив на основе такой структуры. Расчетная область разбивается на множество квадратов со стороной соответствующей диаметру крупной частицы. В отдельном вспомогательном массиве хранится информация обо всех подобластях, какие частицы в них находятся (их уникальные идентификаторы). Это позволяет оптимизировать проверки на коллизию. Не нужно проверять пересечение текущей частицы со всеми другими, так как достаточно лишь перебрать соседние частицы. На каждом временном шаге поочередно выполняется попытка диффузионного и конвективного смещения каждой зеленой частицы. Все эти попытки сопровождаются проверкой на коллизию. Если коллизия возникла, то попытка отменяется и не повторяется. Программа написана на языке C++. Для визуализации расчета использовалась библиотека OpenGl. Распараллеливание алгоритма выполнено с применением библиотеки OpenMP. Цикл по временным шагам распараллелить нельзя, так как результаты следующей итерации зависят от предыдущей. Но на каждом временном шаге происходит перебор всех частиц с попыткой смещения зеленых частиц. Перед этим циклом использовалась конструкция #pragma omp parallel for. Таким образом, в такой модификации каждый поток перебирает свой набор частиц. При этом возникает проблема, связанная с проверкой на коллизии. Ведь несколько потоков могут передвинуть частицы в одну подобласть одновременно. Эта проблема была решена заключением участка кода, отвечающего за работу со вспомогательной матрицей (считывание и запись информации при перемещении частицы в другую подобласть), между omp_set_lock(&lck) и omp_unset_lock(&lck). Критическая секция не использовалась, так как это сильно замедляет расчет.

3. Результаты расчетов

Каждый вычислительный эксперимент повторялся пять раз и затем расчетное время усреднялось по этим испытаниям. Информация об используемом оборудовании указана в таблице 1. Результаты расчетов представлены на рис. 2.

Таблица 1. Оборудование и программное обеспечение

Наименование	**Характеристики**
Центральный процессор	Intel Core i7- 8700 3.2 GHz
Материнская плата	MSI B365M PRO-VDH
ОЗУ	DDR4 32 GB dual channel
Видеокарта	NVIDIA RTX 2060 super
Интегрированная среда разработки	VS Community C++ 2019
Операционная система	Windows 10 Pro
Жесткий диск	HDD Seagate Barracuda 2 Tb

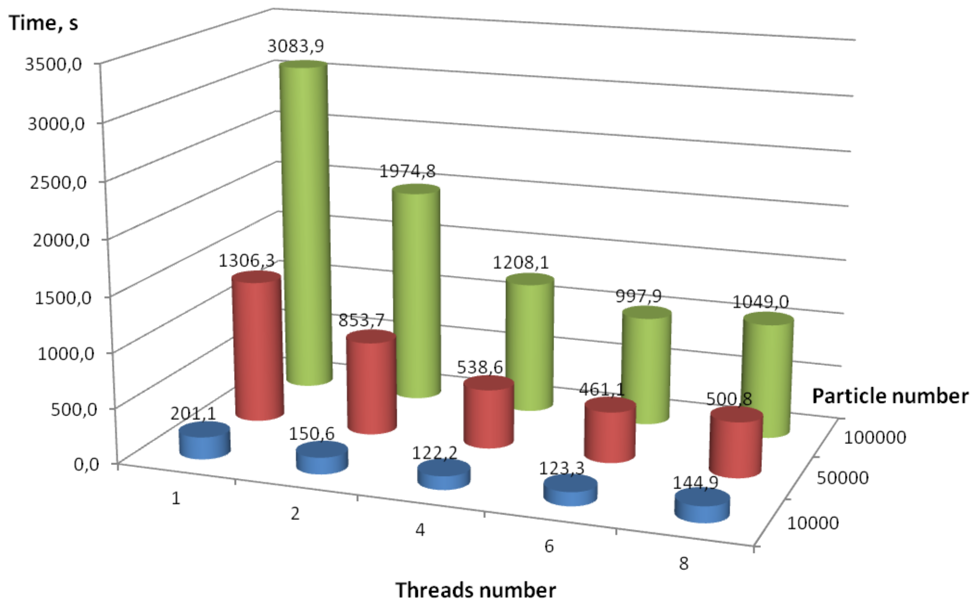


Рис. 2. Анализ эффективности алгоритма

Настройка режима Turbo Boost в UEFI использовалась по умолчанию. Также необходимо учесть, что использовался боксовый кулер. Полученные результаты показывают, что при относительно малом числе частиц (N_p = 10 000) наибольшее ускорение было получено при использовании 4 потоков и оно не значительно, примерно X1.65. При дальнейшем увеличении числа потоков накладные расходы на распараллеливание начинают возрастать. Для среднего числа частиц (N_p = 50 000) оптимальное количество используемых потоков для расчета составляет 6. При этом ускорение примерно X2.8. Для относительно большого числа частиц (N_p = 100 000) оптимальным также является использование шести потоков, что приводит к ускорению расчета по времени примерно X3.1.

Заключение

Для распараллеливания алгоритма расчета динамики коллоидных частиц в высыхающей на гидрофильной подложке капле в этой работе использовалась библиотека OpenMP. Эта технология распараллеливания подходит для работы с многоядерными / многопроцессорными системами с общей памятью. Распараллеливание цикла, в котором перебираются все частицы на каждом временном шаге для возможного дальнейшего их перемещения, с помощью #pragma omp parallel for может привести к коллизии частиц. Поэтому этот нюанс нужно дополнительно учитывать. На ста тысячах частиц получено ускорение по времени более чем в 3 раза при использовании шести потоков. Очевидно, что при расчете динамики еще большего количества частиц, алгоритм покажет более высокую эффективность.

Литература

1. Zang D., Tarafdar S., Tarasevich Yu.Yu., Dutta C.M., Dutta T. Evaporation of a Droplet: From physics to applications // Physics Reports. 2019. Vol. 804. P. 1–56. DOI 10.1016/j.physrep.2019.01.008.
2. Kolegov K.S., Barash L.Yu. Applying Droplets and Films in Evaporative Lithography // Advances in Colloid and Interface Science. 2020. Vol. 285. P. 102271. DOI 10.1016/j.cis.2020.102271.
3. Zolotarev P.A., Kolegov K.S. Monte Carlo simulation of particle size separation in evaporating bi-dispersed colloidal droplets on hydrophilic substrates. arXiv:2109.04759.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АРИФМЕТИКИ МНОГОКРАТНОЙ ТОЧНОСТИ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ СХОДИМОСТИ GPU-РЕАЛИЗАЦИИ МЕТОДА СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ[1*]

К.С. Исупов[1], В.С. Князьков[2]

[1]*Вятский государственный университет,*
[2]*Пензенский государственный университет*

Итерационные методы подпространства Крылова широко применяются для решения больших и разреженных линейных систем. Однако их сходимость может нарушаться из-за ошибок округления, возникающих при выполнении вычислительных операций в арифметике ограниченной разрядности. В статье рассматривается реализация метода сопряженных градиентов для графических процессоров видеокарт с использованием арифметики многократной точности. Представлены результаты экспериментов с разреженными матрицами из реальных приложений, показывающие, что повышенная точность арифметики позволяет в ряде случаев существенно сократить число итераций решателя, а также повысить его численную надежность.

Ключевые слова: метод сопряженных градиентов, разреженные матрицы, арифметика многократной точности, система остаточных классов, CUDA.

1. Введение

Для решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с разреженными матрицами коэффициентов, естественным образом возникающих из дискретизации дифференциальных уравнений в частных производных методами конечных элементов, конечных разностей или конечных объемов, широко используются нестационарные итерационные методы подпространства Крылова, в частности, метод сопряженных градиентов (CG), обобщенный метод минимальных невязок (GMRES), BiCG, BiCGSTAB, CGS и MINRES [1, 2]. Эти методы состоят в выполнении ряда матрично-векторных и векторных операций, таких как SpMV (разреженное матрично-векторное умножение), DOT (скалярное произведение), AXPY (масштабированное сложение векторов) и др., а их сходимость зависит от спектральных свойств матрицы коэффициентов системы A. Часто свойства матрицы A не обеспечивают приемлемую скорость сходимости, поэтому вместо исходной СЛАУ $Ax = b$ решают эквивалентную систему $M^{-1}Ax = M^{-1}b$, где M – предобуславливатель. Выбор эффективного предобуславливателя играет важнейшую роль в применении итерационных методов.

С другой стороны, даже при тщательном выборе предобуславливателя сходимость итерационных методов может быть довольно плохой из-за ошибок округления, возникающих при выполнении вычислительных операций в арифметике фиксированной разрядности [3, 4]. Снизить влияние ошибок округления позволяет использование арифметики расширенной (например, четверной) или многократной точности, обеспечивающей выполнение операций с числами повышенной разрядности. Одним из популярных вариантов реализации такой арифметики является формат double-double (DD), в котором каждое число представляется в виде невычисленной суммы двух стандартных чисел с плавающей точкой двойной точности (double) x_h и x_l, причем x_h является числом, ближайшим к истинному значению, а x_l – разница между истинным значением и x_h [5]. Формат DD обеспечивает приблизительно четверную точность (~106 бит мантиссы).

В [6] исследована сходимость BiCG метода четверной точности при решении плохо обусловленных СЛАУ с матрицами Тёплица на различных вычислительных системах. В [7] CG решатель четверной и смешанной (double + DD) точности использован при решении симметричных линейных систем, возникающих в анализе высокочастотных электромагнитных полей.

[1*] Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-71-00046).

Применение смешанной точности позволило сократить число итераций и время решения по сравнению со стандартной арифметикой. В [8] показано, что для ряда задач CUDA-реализации CG и BiCGSTAB методов в DD арифметике без предобуславливания оказываются быстрее и точнее, чем реализации в стандартной арифметике двойной точности с предобуславливанием. В работе [9] рассматриваются итерационные решатели многократной точности на базе различных вариантов метода сопряженных градиентов: BiCG, CGS, BiCGSTAB и GPBiCG. Установлено, что для обеспечения сходимости итерационных методов в ряде случаев требуется точность более 2000 бит.

В данной статье исследуется влияние точности компьютерной арифметики на сходимость итерационных методов на примере параллельной реализации CG решателя многократной точности для графических процессоров видеокарт (GPU), являющейся частью библиотеки подпрограмм линейной алгебры MPRES-BLAS [10].

2. Библиотека MPRES-BLAS

MPRES-BLAS – это библиотека операций линейной алгебры многократной точности для GPU с поддержкой CUDA. Для представления чисел с плавающей точкой произвольной длины библиотека использует систему остаточных классов (СОК) [11]. СОК обладает рядом преимуществ перед позиционными системами счисления, главным из которых является отсутствие переносов между цифрами числа, что позволяет заменить многоразрядные операции группами покомпонентных операций небольшой разрядности, которые выполняются независимо друг от друга. Библиотека реализует ряд плотных матричных, матрично-векторных и векторных операций линейной алгебры, подобных BLAS, а также поддерживает разреженное матрично-векторное умножение в форматах CSR, ELLPACK, JAD и DIA. Кроме этого, MPRES-BLAS может выступать в качестве универсальной арифметической библиотеки, так как предоставляет базовые арифметические операции многократной точности на CPU и GPU.

При использовании MPRES-BLAS точность вычислений определяется набором модулей $\{m_1, m_2, ..., m_n\}$. Модули должны быть попарно взаимно простыми целыми числами. Если M – произведение всех модулей, то точность арифметических операций в битах определяется значением $p = \lfloor \log_2 \sqrt{M} \rfloor - 1$. В библиотеке имеется несколько предопределенных наборов модулей, обеспечивающих различные уровни точности, но пользователь также может самостоятельно задать новый набор. Некоторые алгоритмы выполнения арифметических операций, реализованные в MPRES-BLAS, подробно рассмотрены в [12].

Для представления чисел с плавающей точкой в MPRES-BLAS определен тип данных `mp_float_t`. Переменные этого типа могут быть объявлены и определены как на стороне хоста, так и непосредственно из кода устройства. Обмен данными между хостом и устройством осуществляется путем вызова стандартных функций CUDA API. Помимо типа данных `mp_float_t`, в библиотеке также определены два векторных типа, `mp_array_t` и `mp_collection_t`, предназначенные для эффективных вычислений с массивами многоразрядных чисел на GPU. Тип `mp_array_t` хранит массив в разложенной форме, то есть как набор массивов, представляющих отдельные части чисел многократной точности. В свою очередь, `mp_collection_t` можно рассматривать как «облегченный» вариант `mp_array_t`. Векторные типы хорошо подходят для плотных ядер линейной алгебры с регулярным доступом к памяти, но не дают существенных преимуществ при реализации разреженных ядер с нерегулярным паттерном доступа. Поэтому в рассматриваемой далее реализации CG метода используется тип данных `mp_float_t`.

Важной особенностью библиотеки MPRES-BLAS является поддержка смешанной «double + multiple» арифметики (в настоящее время только для операции умножения), когда в качестве одного из операндов выступает стандартное число двойной точности, а второй операнд и результат являются многоразрядными числами. Смешанная арифметика используется в ядрах SpMV, принимающих матрицу двойной точности вместо многоразрядной матрицы.

3. Итерационный CG решатель многократной точности для GPU

Рассматривается метод сопряженных градиентов без предобуславливания для решения симметричных положительно определенных СЛАУ. Псевдокод реализации представлен на рис. 1, где в комментариях указаны используемые функции библиотеки MPRES-BLAS.

$k \leftarrow 1$
$r \leftarrow b - Ax_0$ ▷ mp_spmv_csr, mp_diff (GPU)
$\|r_0\| \leftarrow \|r\|$ ▷ mp_norm2 (CPU + GPU)
while $\|r\| > \epsilon\|r_0\|$ and $k \leq N_{\max}$ **do** ▷ mp_norm2 (CPU + GPU)
    $\rho_k \leftarrow r^T r$ ▷ mp_dot (GPU)
    if $k = 1$ **then**
        $p \leftarrow r$
    else
        $\beta = \rho_k / \rho_{k-1}$ ▷ mp_div (CPU)
        $p \leftarrow r + \beta p$ ▷ mp_axpy (GPU)
    end if
    $q \leftarrow Ap$ ▷ mp_spmv_csr (GPU)
    $\alpha \leftarrow \rho_k / p^T q$ ▷ mp_dot, mp_div (CPU + GPU)
    $x \leftarrow x + \alpha p$ ▷ mp_axpy (GPU)
    $r \leftarrow r - \alpha q$ ▷ mp_axpy (GPU)
end while

Рис. 1. Реализация метода сопряженных градиентов многократной точности

Описание используемых функций представлено в таблице 1. Поскольку ряд операций, таких как деление и извлечение квадратного корня, являются сложными для СОК, в настоящее время они реализованы в виде обертки над функциями библиотеки MPFR [13] и выполняются на CPU.

Таблица 1. Используемые функции многократной точности из библиотеки MPRES-BLAS

Функция	**Описание**	**Комментарий**
mp_spmv_csr	Разреженное матрично-векторное умножение	Для хранения матрицы используется формат CSR. Ненулевые элементы матрицы представлены в формате двойной точности, входной и выходной векторы – в формате многократной точности. Каждая строка матрицы обрабатывается одним потоком GPU.
mp_diff	Вычитание векторов	Каждый поток GPU выполняет вычисление одного элемента вектора-разности. Операция полностью параллельна.
mp_norm2	Евклидова норма вектора	Сумма квадратов элементов вектора вычисляется на GPU в арифметике многократной точности с использованием двухэтапного алгоритма суммирования. Вычисленная сумма далее копируется в RAM, и квадратный корень вычисляется на CPU с использованием высокоточной библиотеки MPFR. Результатная норма преобразуется в формат двойной точности.
mp_dot	Скалярное произведение векторов	Используется двухэтапный алгоритм на GPU. Первое ядро выполняет вычисления с множеством блоков потоков, сохраняя промежуточные результаты в глобальную память. Второе ядро использует один блок потоков для суммирования промежуточных результатов.
mp_axpy	Масштабированное сложение векторов	Каждый поток GPU выполняет вычисление одного элемента результатного вектора многократной точности. Операция полностью параллельна.

4. Численный эксперимент

Тесты проводились на системе, оснащенной NVIDIA RTX 2080 GPU (46 потоковых мультипроцессоров, 8 Гб памяти GDDR6, аппаратная совместимость 7.5), Intel Core i5 7500 (3.40 GHz), 32 Гб памяти DDR4. Программное обеспечение: Ubuntu 20.04.2 LTS, CUDA Toolkit 11.1 / NVIDIA Driver 455.32.00. Исходный код компилировался с помощью nvcc V11.1.105.

Скорость сходимости итерационного CG решателя при точности вычислений 106, 212, 318 и 424 бит сравнивалась со скоростью сходимости аналогичного CG решателя двойной точности (53 бит). Для экспериментов использовались симметричные положительно определенные тестовые матрицы из коллекции SuiteSparse (https://sparse.tamu.edu/). Описание матриц представлено в таблице 2, где *N*, *AVGNZR* и *NNZ* обозначают число строк, среднее число ненулевых элементов в строке и общее число ненулевых элементов, соответственно.

Таблица 2. Характеристики разреженных матриц

Матрица	N	AVGNZR	NNZ	Приложение
plat362	362	16	5786	Океанографическое моделирование
ex33	1733	13	22189	Моделирование радиационного теплообмена
plbuckle	1282	24	30644	Структурная механика
bcsstk27	1224	46	56126	Динамический анализ в проектировании конструкций
aft01	8205	15	125567	Моделирование акустического излучения

Решение СЛАУ выполнялось с использованием единичного вектора $b = (1,1,\ldots,1)^T$ в качестве столбца свободных членов, с нулевым начальным приближением $x_0 = (0,0,\ldots,0)^T$. Критерий останова определялся по относительной невязке на k-м шаге: $||r|| / ||r_0|| \le 1.00\text{E}{-6}$ с ограничением на максимальное число итераций 10000.

Таблица 3. Результаты экспериментов

Точность	plat362		ex33		plbuckle		bcsstk27		aft01	
	# итер.	*R*	# итер.	*R*	# итер.	*R*	# итер.	*R*	# итер.	*R*
53 бит (double)	6535	1.36E–06	10000	1.00E0	1966	9.95E–07	909	9.21E–07	8585	9.71E–07
106 бит	2800	9.36E–07	10000	1.00E0	1831	9.38E–07	822	9.00E–07	5629	9.32E–07
212 бит	1531	9.61E–07	6076	7.23E–07	1650	7.53E–07	735	9.90E–07	3954	9.51E–07
318 бит	1078	9.80E–07	4035	9.27E–07	1501	9.13E–07	679	9.29E–07	3313	7.88E–07
424 бит	910	9.05E–07	3074	8.61E–07	1400	8.43E–07	649	8.01E–07	2939	8.65E–07

В таблице 3 представлены результаты экспериментов. Для каждой матрицы приведено количество выполненных итераций (# итер.), а также фактическая относительная ошибка решения $R = ||b - Ax|| / ||b||$, где x – вычисленный вектор-столбец неизвестных. Значения $R > 1$ (решение не получено за 10000 итераций) заменены на 1.00E0.

Мы видим, что для всех рассмотренных матриц, в том числе для матриц крайне небольшого размера, использование арифметики многократной точности позволяет улучшить сходимость итерационного линейного CG решателя. Наибольший эффект достигнут при решении системы с матрицей plat362 (число обусловленности 2.178E+11), где увеличение точности в 8 раз привело к сокращению числа итераций в 7 раз. Более того, для этой матрицы фактическая погрешность решения, полученного с использованием стандартной арифметики (1.36E–06), оказалась выше заданного предела (1E–06). В свою очередь, фактическая погрешность решателя многократной точности находится в допустимых пределах для всех тестовых случаев. Таким образом, использование арифметики многократной точности не только улучшает сходимость итерационных методов, но также повышает их надежность.

С большой вероятностью подбор предобуславливателя позволит успешно решить рассмотренные тестовые СЛАУ в стандартной арифметике двойной точности. Однако многие широко используемые на практике предобуславливатели (например, неполное разложение Холецкого и неполное LU разложение), включают существенную часть последовательных вычислений, и поэтому их реализация на параллельных системах оказывается затруднительной. В этом отношении мы полагаем, что использование арифметики многократной точности совместно с «мягким» параллельным предобуславливателем (например, с предобуславливателем Якоби) может оказаться более эффективным подходом для некоторых классов задач.

Литература

1. Barrett R. et al. Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods. SIAM, 1994. 118 p. DOI:10.1137/1.9781611971538.
2. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Second edition. SIAM, 2003. 520 p. DOI: 10.1137/1.9780898718003.
3. Saito T., Ishiwata E., Hasegawa H. Analysis of the GCR method with mixed precision arithmetic using QuPAT // Journal of Computational Science. 2012. Vol. 3, No. 3. P. 87-91. DOI: 10.1016/j.jocs.2011.05.001.
4. Cools S., Yetkin E.F., Agullo E., Giraud L., Vanroose W. Analyzing the Effect of Local Rounding Error Propagation on the Maximal Attainable Accuracy of the Pipelined Conjugate Gradient Method // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. 2018. Vol. 39, No. 1. P. 426-450. DOI: 10.1137/17M1117872.
5. Shewchuk J.R. Adaptive Precision Floating-Point Arithmetic and Fast Robust Geometric Predicates // Discrete and Computational Geometry. 1997. Vol. 18, No. 3. P. 305-363. DOI: 10.1007/PL00009321.
6. Hasegawa H. Utilizing the quadruple-precision floating-point arithmetic operation for the Krylov subspace methods. 2003. URL: http://www.slis.tsukuba.ac.jp/~hasegawa.hidehiko.ga/GYOSEKI/hhasegaw.pdf (дата обращения: 24.10.2021).
7. Masui K. Ogino M. Research on the Convergence of Iterative Method Using Mixed Precision Calculation Solving Complex Symmetric Linear Equation // IEEE Transactions on Magnetics. 2020. Vol. 56, No. 1. Article no. 7503604. DOI: 10.1109/TMAG.2019.2951280.
8. Mukunoki D., Takahashi D. Using Quadruple Precision Arithmetic to Accelerate Krylov Subspace Methods on GPUs // Lecture Notes in Computer Science. 2014. Vol. 8384. P. 632-642. DOI: 10.1007/978-3-642-55224-3_59.
9. Kouya T. A highly efficient implementation of multiple precision sparse matrix-vector multiplication and its application to product-type Krylov subspace methods // International Journal of Numerical Methods and Applications. 2012. Vol. 7, No. 2. P. 107-119.
10. Isupov K., Knyazkov V. Multiple-Precision BLAS Library for Graphics Processing Units // Communications in Computer and Information Science. 2020. Vol. 1331. P. 37–49. DOI: 10.1007/978-3-030-64616-5_4.
11. Ananda Mohan P. V., Residue Number Systems: Theory and Applications. Springer, 2016. 351 p. DOI:10.1007/978-3-319-41385-3.
12. Isupov K., Knyazkov V., Kuvaev A. Design and Implementation of Multiple-Precision BLAS Level 1 Functions for Graphics Processing Units // Journal of Parallel and Distributed Computing. 2020. Vol. 140. P. 25-36. DOI: 10.1016/j.jpdc.2020.02.006.
13. Fousse L., Hanrot G., Lefèvre V., Pélissier P., Zimmermann P. MPFR: a multiple-precision binary floating-point library with correct rounding // ACM Transactions on Mathematical Software. 2007. Vol. 33, No. 2. Article No. 13.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИЗМЕРЕНИЙ СОСТОЯНИЙ КУБИТОВ В НЕЛИНЕЙНОМ БИФУРКАЦИОННЫМ УСИЛИТЕЛЕМ КВАНТОВЫМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

К.С. Кабаев

Нижегородский государственный университет им. Н. И Лобачевского

Проведено моделирования процесса неразрушающего измерения состояния сверхпроводникового кубита на основе квантового метода Монте-Карло с применением технологии распараллеливания OpenMP, при этом измерительным устройством выступал джозефсоновский бифуркационный усилитель. Показано, что по среднему числу фотонов в резонаторе можно детерминировать состояние кубита. Изучен эффект обратного действия (влияние измерительного прибора на кубит).

Ключевые слова: сверхпроводниковый кубит, квантовый осциллятор, метод Монте-Карло, матрица плотности, квантовая информатика, квантовый компьютер, параллельные вычисления, Fortran, OMP.

1. Введение

В настоящее время «искусственные атомы» (полупроводниковые квантовые точки, ямы, джозефсоновские контура) активно используются как перспективные логические элементы для квантового компьютера – кубиты. При этом важным требованием для масштабируемых квантовых вычислений и коррекции квантовых ошибок является проведение высокоточных проективных измерений состояний кубитов [1] на временах меньше, чем время потери когеренции. В связи с этим, важной научной задачей (на первом этапе исследований) является поиск оптимальных методик по управлению и считывания состояний кубитов.

В данной работе исследуются процессы измерения состояний в двухуровневой системе кубита (на примере сверхпроводникового кубита [2]) с помощью связи с нелинейным высокодобротным резонатором (бифуркационным нелинейным усилителем [2]). Кубит - является базовым элементом квантового компьютера, который в настоящее время активно разрабатывается во многих лабораториях мира [3]. Изучено влияние на процесс детектирования окружающей среды (марковского резервуара, обладающим большим числом степеней свободы). Для определенности был рассмотрен фононный резервуар, так как он может включать в себя возбуждения бозонного типа, такие как экситоны, фотоны и т.д. При этом были учтены процессы диссипации и случайные изменения фазы состояния кубита, а также процессы диссипации в измерительном резонаторе на основе подхода Линдблада. При численном моделировании нами использовался квантовый метод Монте-Карло [4] и показано, что можно моделировать не только отдельные реализации (акты измерений), а также накапливать статистические данные и проводить их сопоставление с поведением усредненных характеристик.

2. Модель и основные уравнения

Эффективный гамильтониан связанной системы «кубит+нелинейный осциллятор» в расширенном гильбертовом пространстве размерности $2N$ выглядит следующим образом:

$$H_{eff} = H_q \otimes E^{(N)} + E^{(2)} \otimes H_{osc} + H_{int}, \tag{1}$$

где единичные матрицы $E^{(2)}$ и $E^{(N)}$ (размерностями, соответственно, 2х2 и NхN), гамильтониан кубита, записан в стандартном виде:

$$H_q = \frac{\hbar}{2}\left(\omega_q \sigma_z + \varepsilon(t)\sigma_x\right). \tag{2}$$

Можно видеть, что расстояние между уровнями кубита ($\hbar\omega_q$) определяется частотой $\omega_q / 2\pi$ (~10 ГГц); а управляющая функция $\varepsilon(t)$ будет индуцировать переходы между состояниями кубита. Предполагается, что управление кубитом будет осуществляется Раби-импульсами переменного поля $\varepsilon(t) \sim V(t) = A\cos\omega t$ определенной длительности.

Измерение состояний кубита предполагается производить нелинейным осциллятором, где для простоты учтены только резонансные слагаемые:

$$H_{osc} = \hbar\omega_J a^+ a - \mu(a^+ a)^2 + f(t)(a + a^+) \tag{3}$$

где ω_J – собственная частота осциллятора, μ– параметр нелинейности, $f(t) = f_0 \cos \Omega t$ – возбуждающее поле осциллятора. Практически в процессе измерения джозефсоновский осциллятор может быть захвачен в нелинейный резонанс током «накачки».

Согласно (1) взаимодействие кубита с измерительным осциллятором описывается выражением:

$$H_{int} = \lambda(\hbar\omega_J a^+ a - \frac{1}{4}\mu(a^+ a)^2)\sigma_z \tag{4}$$

где λ – константа связи кубита и осциллятора. Отметим, если управляющее поле отсутствует, $\varepsilon(t) = 0$, то оператор взаимодействия (4) коммутирует с гамильтонианом кубита (2), поэтому осциллятор производит так называемое «неразрушающее измерение». В случае же действия поля ($\varepsilon(t) \neq 0$) состояния подсистем являются запутанными.

Для системы «кубит+осциллятор» уравнение для оператора плотности ρ в форме Линдблада, в борн-марковском приближении [5] записывается в виде:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H,\rho] + \gamma_\varphi(\sigma_z\rho\sigma_z - \rho) + \frac{\gamma_\varepsilon}{2}(2\sigma_-\rho\sigma_+ - \sigma_+\sigma_-\rho - \rho\sigma_+\sigma_-) \\ + \frac{\gamma}{2}(2a\rho a^+ - a^+ a\rho - \rho a^+ a),\end{aligned} \tag{5}$$

где $\sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$, а γ_φ и γ_ε – соответственно фазовая и энергетическая скорости релаксации кубита, γ - параметр релаксации осциллятора.

Уравнение для матрицы плотности (5) дает усредненную по ансамблю динамику системы. Чтобы проследить динамику кубита и осциллятора в каждом акте измерения, обратимся к эквивалентону языку описания динамики - методу квантовых траекторий или, как его ещё называют, квантовому методу Монте-Карло [4,6]. Согласно данному подходу эволюция системы, может быть переформулирована на эквивалентном языке динамики состояний - «квантовых траекторий».

Для рассматриваемой системы суть метода квантовых траекторий сводится к следующему. Применяя конечно-разностную аппроксимацию для производной по времени в уравнении (5) перепишем его в виде:

$$\rho(t + \Delta t) = U\rho(t)U^+ + \Delta t\big(\gamma_\varphi\sigma_z\rho\sigma_z + \gamma_\varepsilon\sigma_-\rho\sigma_+ + \gamma a\rho a^+\big), \tag{6}$$

где первое слагаемое в (12) определяется оператором эволюции $U = e^{-H_{dis}\Delta t/\hbar}$ и отвечает за диссипативную динамику системы с гамильтонианом Вигнера-Вайскопфа (см. детали в [5]).

$$H_{dis} = H_q - i\hbar\frac{\gamma_\varphi}{4}\sigma_z^+\sigma_z + i\hbar\frac{\gamma_e}{2}\sigma_+\sigma_- + i\hbar\frac{\gamma}{2}a^+ a. \tag{7}$$

Второе слагаемое в уравнении (6) можно связать со спонтанными переходами (скачками) в системе за счет взаимодействия с бозонным термостатом. Попытаемся придать последнему слагаемому вероятностный смысл, имея в виду, что с уравнением (6) можно связать некоторый случайный процесс, которые будет имитировать относительный вклад диссипативной динамики и спонтанных переходов.

Формальное решение уравнения (6) сводится к следующему. Рассмотрим некоторую реализацию чистого состояния $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$. Стохастическая волновая функция связанной системы $|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\sigma} C_{n,\sigma}(t)|n\sigma\rangle$ может быть разложена по базису $|n\sigma\rangle = |n\rangle \otimes |\sigma\rangle$. Следовательно, она имеет $2N$ компонент. Из уравнения (6) можно увидеть, что изменение матрицы плотности обусловлено двумя возможными вкладами, сопровождающимися изменением коэффициентов $C_{n,\sigma}(t)$ стохастической волновой функции:

а) либо с вероятностью 1-ΔP согласно

$$C_{n,\sigma}(t + \Delta t) = \frac{e^{-\frac{H_{dis}\Delta t}{\hbar}} C_{n,\sigma}(t)}{\sqrt{1 - \Delta P}},$$

происходит изменение волновой функции («траектории») за счет диссипативной динамики, здесь введены обозначения: $\Delta P = \Delta t\overline{\gamma}, \overline{\gamma} = \gamma_\varphi + \frac{\gamma_\varepsilon}{2}(1 + \sum_{n,\sigma} \sigma |C_{n,\sigma}(t)|^2) + \gamma \sum_{n,\sigma} n |C_{n,\sigma}(t)|^2$;

б) либо с вероятностью ΔP изменение "траектории" сопровождается одним из скачков:

– фазовый для кубита - $C^{\varphi}_{n,\sigma}(t+\Delta t) = \sigma_z C_{n,\sigma}(t)$,

– энергетический для кубита – $C^{e}_{n,\sigma}(t+\Delta t) = \frac{\sum_{\sigma'}(\sigma_-)_{\sigma\sigma'} C_{n,\sigma'}(t)}{\sqrt{\frac{1}{2}(1+\sum_{n,\sigma}\sigma|C_{n,\sigma}(t)|^2)}}$,

– спонтанный для осциллятора – $C^{\gamma}_{n,\sigma}(t+\Delta t) = \frac{\sqrt{n+1}C_{n+1,\sigma}(t)}{\sum_{n,\sigma}|C_{n,\sigma}(t)|^2}$

взятыми соответственно с весами

$$p_\varphi = \frac{\gamma_\varphi}{\overline{\gamma}}, \quad p_\varepsilon = \frac{\gamma_\varepsilon}{2\overline{\gamma}}(1 + \sum_{n,\sigma} \sigma |C_{n,\sigma}(t)|^2) \text{ и } p_\gamma = \frac{\gamma}{\overline{\gamma}} \sum_{n,\sigma} n |C_{n,\sigma}(t)|^2$$

Итак, за время наблюдения эволюции системы мы получаем квантовую траекторию, представляющую одну реализацию мысленного эксперимента – диссипативную динамику системы. Учитывая, что процесс релаксации является случайным, каждая траектория уникальна. Для нахождения усредненной динамики (аналог того, что получаем в результате решения уравнения (5)) следует получить набор единичных реализаций M ~ 1000-10000 и далее усреднить величину по ним

$$\rho = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} |\psi_i(t)\rangle \langle|\psi_i(t)| \tag{8}$$

Кроме того, можно вычислить ожидаемое значение любой наблюдаемой квантовой системы. Например, среднее число квантов осциллятора (средняя энергия) для двух состояний кубитов (основного "↓" и возбужденного "↑").

Метод квантовых траекторий в отличие от аналогичного метода для матрицы плотности имеет ряд преимуществ. Во-первых, это возможность исследовать релаксационные процессы квантовых систем в единичных реализациях, а не только усредненные по ансамблю квантовые траектории. Во-вторых, это эффективность распараллеливания метода. Уравнение для матрицы плотности приводит к системе линейных уравнений, включающих $2N^2$ комплексных переменных, где $2N$ – это размерность гильбертова пространства («кубит+осциллятор»). Квантовый же метод Монте-Карло требует лишь рассмотрения $2N$ комплексных переменных, характеризующих вектор состояний. Реализации статистически независимы, поэтому есть возможность генерировать каждую реализацию в отдельном потоке (на отдельном процессоре), собирая затем данные и усредняя.

3. Численный эксперимент

Для численного моделирования процесса проведения калибровки измерительного осциллятора будем концентрироваться на изучении населенностей уровней осциллятора при изменении параметров импульса считывания, в случае двух базисных состояний кубита "↓" и "↑". Соответствующее состояние кубита может быть получено соответствующим раби-импульсом, представляющим собой гармонический сигнал заданной длительности малой амплитуды с частотой близкой к расстоянию между уровнями кубита. Если кубит находился в основном состоянии, то 2π – импульс оставляет кубит в том же основном состоянии "↓", а за счет π – импульса происходит возбуждение на высший уровень "↑". Данный эксперимент нам позволяет выделить два подпространства, отвечающие за состояния кубита – основное "↓" и возбужденное "↑".

Описанный в предыдущем разделе алгоритм, который был реализован с помощью языка программирования Fortran с применением средств распараллеливания OpenMP [7]. Это позволяет рассчитать единичную реализацию квантовых траекторий кубита на отдельном потоке CPU.

Первый численный эксперимент заключался в том, чтобы исследовать поведение населенности осциллятора в зависимости от времени (где T – период осцилляций Раби), когда в начальный момент времени $t = 0$ полагаем, что кубит инициализирован в основном состоянии, а измерительный прибор на локализован на нижних фоковских состояниях. При этом кубит за счет π – импульса был переведен в возбужденное состояние "-". Далее на измерительный прибор подается возбуждающий (считывающий сигнал) и измерительный осциллятор в процессе возбуждения захватывается в нелинейных резонанс на группу уровней соответствующих состоянию "-" (см рис. 1).

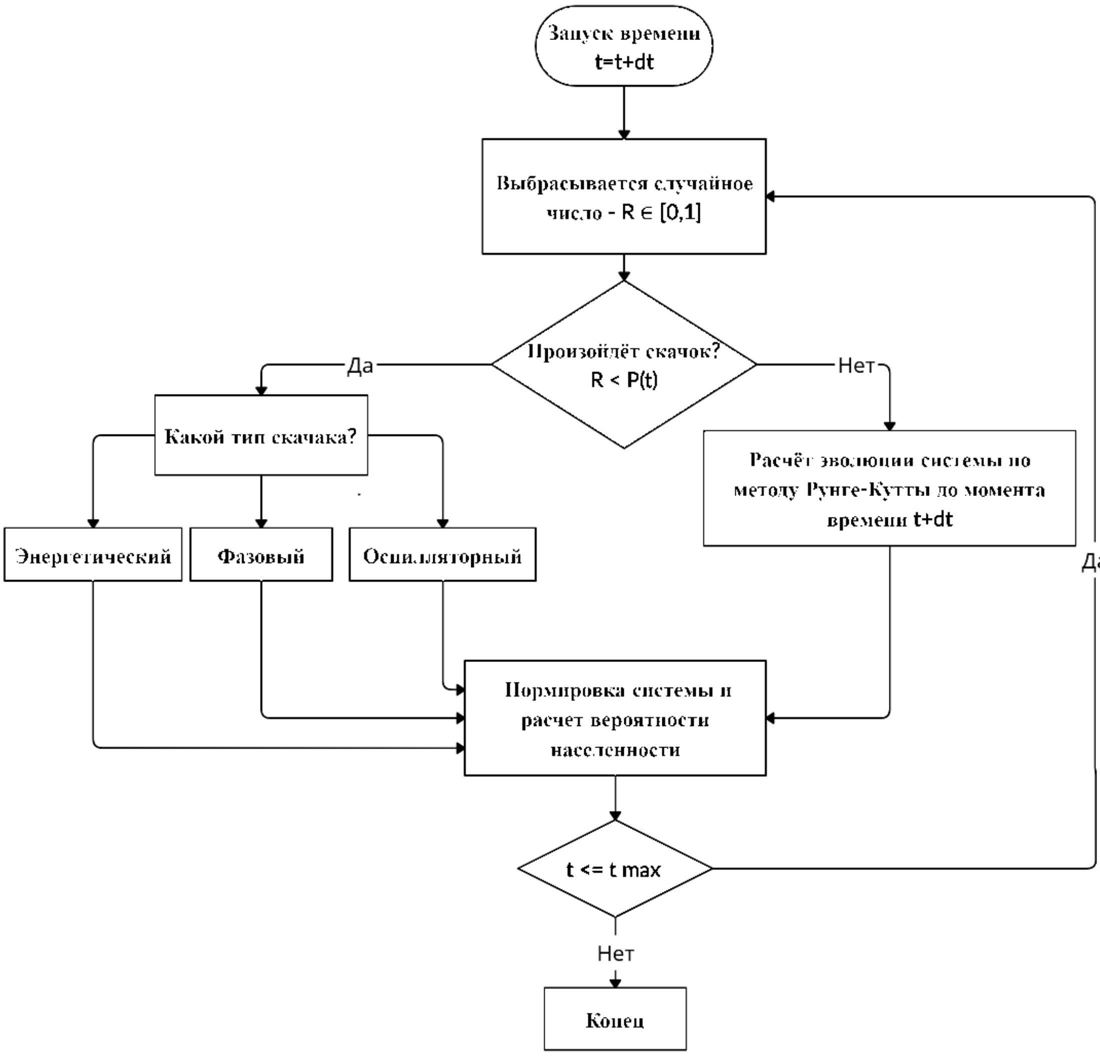


Рис. 1.Схема алгоритма для расчета единичной квантовой траектории кубита

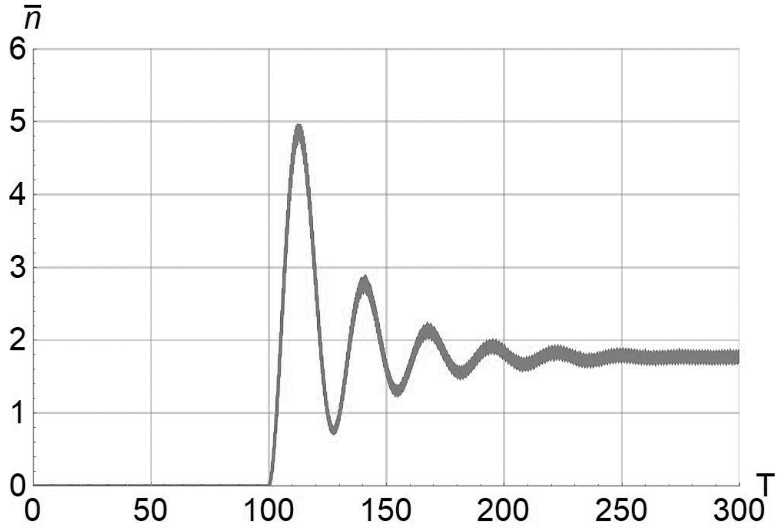


Рис. 2. Усредненная по M = 10000 реализациям временная динамика населенностей нелинейного осциллятора при нахождении кубита на верхнем уровне

Главное отличие второго численного эксперимент заключался в том, Раби импульс подаваемый на кубит отсутствует и кубит при этом остаётся в основном состоянии, при этом осциллятор заселяется после действия на него поля на другую группу уровней (более высокие фоковские состояния, см. рис. 2).

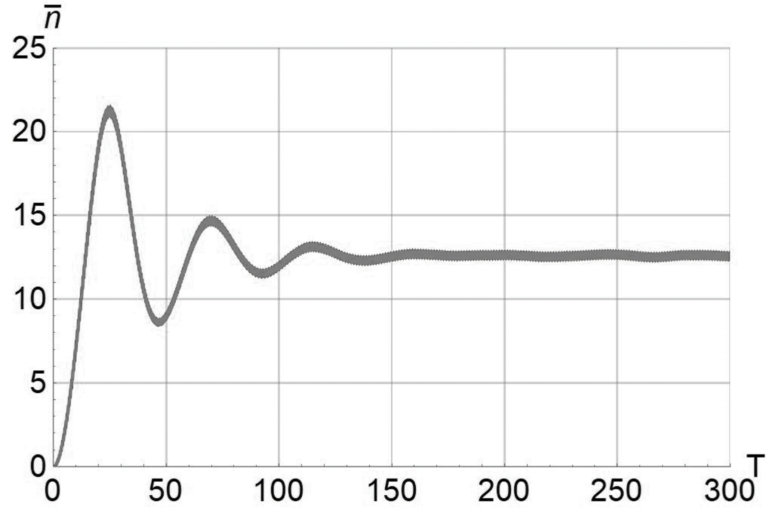


Рис. 3. Усредненная по M = 10000 реализациям временная динамика населенностей нелинейного осциллятора при нахождении кубита на нижнем уровне

При анализе информации, считываемой с измерительного осциллятора, можно изучить разброс населенностей по уровням осциллятора чтобы понять в каком состоянии и с какой вероятностью находится кубит в состояниях "↓" и "↑". Для этого с момента начала действия необходимо хранить информацию о состоянии осциллятора в конечный момент времени, то есть записывать значения населенностей осциллятора для каждой квантовой траектории в каждой реализации. После сбора необходимых статистических данных можно построить гистограммы распределения населенностей, проследить, как кубит переходит из возбужденного состояния в основное. Прямоугольные столбики на гистограммах (рис. 3 и рис. 4) отражают какое количество единичных "квантовых траекторий" попало в выделенный интервал населенностей. Распределения построены по статистическим данным для $M = 10000$ реализаций.

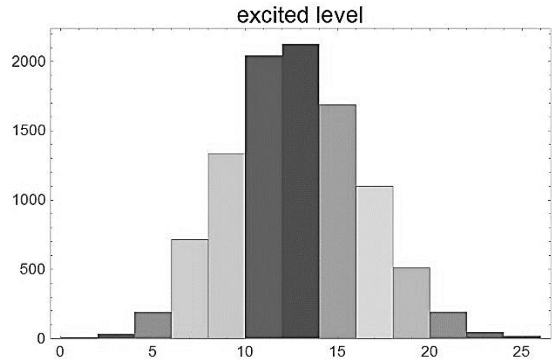


Рис. 4. Гистограмма распределения населенностей осциллятора в системе, для моментов времени t =1000T при нахождении кубита на верхнем уровне. Число реализаций M = 10000.

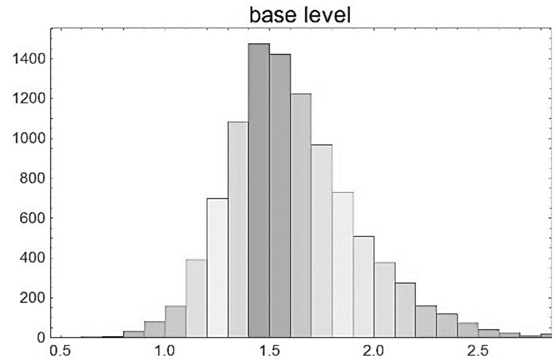


Рис. 5. Гистограмма распределения населенностей осциллятора в системе, для моментов времени t =1000T при нахождении кубита в основном состоянии. Число реализаций M = 10000.

Ширина распределения (основание гистограммы) определена: от 5 до 20 и все квантовые траектории попали именно в этот энергетический интервал, что говорит о нахождении кубита на верхнем уровне с вероятностью 100%. Естественно, что ширины функций распределений для основного и возбужденного состояний кубита различны, так как чем выше по энергии возбуждается осциллятор, тем на большую группу уровней он захватывается в нелинейный резонанс.

Ширина распределения для основного состояния кубита от 1 до 2.5. В момент энергетического скачка кубита населенность осциллятора изменится на значительную величину: $\Delta\overline{n} = n_{\downarrow} - n_{\uparrow} \sim 10\hbar\omega_J$ (интервал между центрами распределений базисных состояний), что и регистрируется на опыте.

4. Вывод

Выяснено, что по среднему числу фотонов в резонаторе можно детерминировать состояние кубита. Предложен протокол по проведению данного неразрушающего измерения и изучен эффект обратного действия (влияние измерительного прибора на кубит). Метод квантовых траекторий Монте-Карло позволяет осуществить эффективное распараллеливание алгоритма и реализацию на параллельных вычислительных потоках.

Литература

1. M. Kjaergaard et al. Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 11, 369 (2020)
2. G. Wendin, Rep. Prog. Phys. 80, 106001 (2017)
3. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. М.: Мир, 824 (2006).
4. M. B. Plenio and P. L. Knight. Rev. Mod. Phys. 70, 101 (1998)
5. Скалли М.О., Зубайри М.С. Квантовая оптика. М.: Физматлит, 512 (2003)
6. Molmer K., Castin Y., Dalibard J. Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics. Phys. Rev. Lett. 68, 580 (1992)
7. https://github.com/kirill-kabaev/conferences/blob/main/qmmkocscubnrealpar.f90.

ДИНАМИКА ДВУХ НЕЛИНЕЙНЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ С КУСОЧНО-ПОСТОЯННОЙ ФУНКЦИЕЙ СВЯЗИ

Е.Ю. Кадина, А.С. Самарина

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

В работе рассматривается динамика двух фазовых осцилляторов, связанных двунаправленной связью. Математическая модель представлена сшитой системой дифференциальных уравнений второго порядка с кусочно-постоянной функцией связи. В результате исследования найдены условия существования состояний равновесия и периодических движений, построены бифуркационные диаграммы и карты режимов для чисел вращения периодических движений по горизонтали и вертикали.

Ключевые слова: нелинейная динамика, осциллятор, сшитая система, бифуркационная диаграмма, периодическое движение

1. Введение

Задача о динамике связанных фазовых осцилляторов является одной из фундаментальных задач в теории синхронизации и нелинейной динамике. Такие динамические системы характеризуются немонотонным изменением переменных. Основные эффекты взаимодействия двух осцилляторов – это захват частоты, режим биений и различных синхронизаций, а также возникновение динамического хаоса при изменении частотной расстройки или величины связи [1-3]. Системы из связанных осцилляторов находят своё приложение в различных областях физики, биологии и социологии. Рассмотрение осцилляторов, оказывающих влияние друг на друга при определенных значениях частоты, может моделировать динамику нейронов головного мозга, и поэтому представляет интерес [4-6].

2. Постановка задачи

Рассматривается система дифференциальных уравнений второго порядка, описывающая динамику двух связанных нелинейных осцилляторов. Фазовым пространством системы является тор, представленный в виде квадрата фазовой плоскости $\phi_1, \phi_2 \in [0; 2\pi]$. Фазовая плоскость (рис. 1) разделена полосами D_1 и D_2 на области с разной динамикой, поэтому система считается "сшитой" [4]. Внутри полосы D_1 ширины $2\sigma_1$ первый осциллятор не оказывает влияния на второй, но второй активизирует первый с силой связи d_2. Внутри полосы D_2 ширины $2\sigma_2$ второй осциллятор не оказывает влияния на первый, но первый активизирует второй с силой связи d_1. На пересечении полос осцилляторы не оказывают влияние друг на друга.

$$\begin{cases} \dot{\varphi}_1 = \gamma_1 - sin\varphi_1 + d_2 F(\varphi_2) \\ \dot{\varphi}_2 = \gamma_2 - sin\varphi_2 + d_1 F(\varphi_1) \end{cases}$$

где φ_i – фаза i-го осциллятора, $i = 1,2$, γ_i – собственные частоты, чуть меньше 1, d_i – силы связи, с которой i-й осциллятор влияет на другой, $F(\varphi_i)$ – кусочно-постоянная функция связи

$$F(\varphi_i) = \begin{cases} 0, & \varphi_i \notin D_i \\ 1, & \varphi_i \in D_i \end{cases}, \quad D_i = \left[\frac{\pi}{2} - \sigma_i, \frac{\pi}{2} + \sigma_i\right]$$

D_i - полоса, в которой i-й осциллятор не оказывает влияние на другой, $\sigma_i \in [0; \pi]$ – половина ширины полосы.

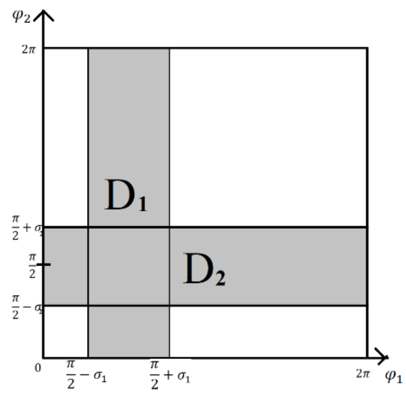


Рис. 1. Развертка тора

3. Симметричная система

В случае двух идентичных осцилляторов, связанных симметричной двунаправленной связью, система, описывающая их динамику, примет вид:

$$\begin{cases} \dot{\varphi}_1 = \gamma, -sin\varphi_1 + dF(\varphi_2) \\ \dot{\varphi}_2 = \gamma - sin\varphi_2 + dF(\varphi_1) \end{cases}$$

Рассматривались изменения динамики при фиксированных значениях γ, чуть меньших единицы и меняющихся силе связи $d \in [0, 6]$ и ширине полосы $2\sigma \in [0; 2\pi]$. Обнаружено, что в этой системе могут существовать обычные состояния равновесия (4 или 8) и сшитые состояния равновесия, возникающие на границе областей разной динамики, то есть на линии “сшивки” (0 или 4). Общее количество состояний равновесия может быть 4, 8 или 12. Случаев отсутствия состояний равновесия и существования периодических движений в данной системе не обнаружено.

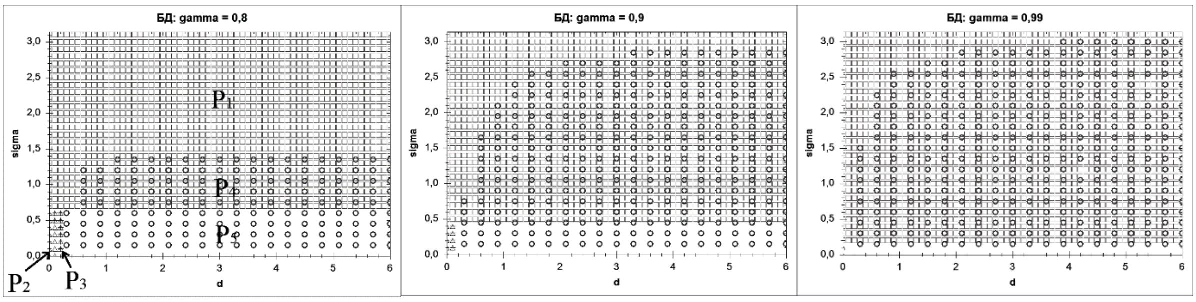


Рис. 2. Бифуркационные диаграммы изменения динамики в плоскости параметров: сила связи d, ширина полосы 2σ, при фиксированных γ

Опишем подробнее первую бифуркационную диаграмму рисунка 2 при $\gamma = 0{,}8$. Обнаружены несколько областей существования состояний равновесия:

- P_1 – область параметров, при которых в системе существуют 4 состояния равновесия (два седла, устойчивый и неустойчивый узлы), лежащие внутри пересечения полос D_1, D_2.
- P_2 – область параметров, при которых в системе существуют 4 состояния равновесия (два седла, устойчивый и неустойчивый узлы), лежащие вне полос D_1, D_2.
- P_3 – область параметров, при которых в системе существуют 12 состояний равновесия. 8 обычных состояний равновесия: 4 из них (два седла, устойчивый и неустойчивый узлы) лежат в полосе D_1, 4 - (два седла, устойчивый и неустойчивый узлы) лежат в полосе D_2; а также 4 состояния равновесия, лежащих на линиях “сшивки” (два седла, устойчивый и неустойчивый фокусы).
- P_4 – область параметров, при которых в системе существуют 8 состояний равновесия: 4 состояния равновесия (два седла, устойчивый и неустойчивый узлы), лежащие внутри пересечения полос D_1, D_2; а также 4 состояния равновесия, лежащих на линиях “сшивки” (два седла и 2 центра).

- P_5 – область параметров, при которых в системе существуют 4 состояния равновесия, лежащих на линиях “сшивки” (два седла и 2 центра).

При приближении параметра γ к единице (рис. 2) области P_1, P_2, P_3, P_5 уменьшаются, а область P_4 увеличивается.

4. Несимметричная система

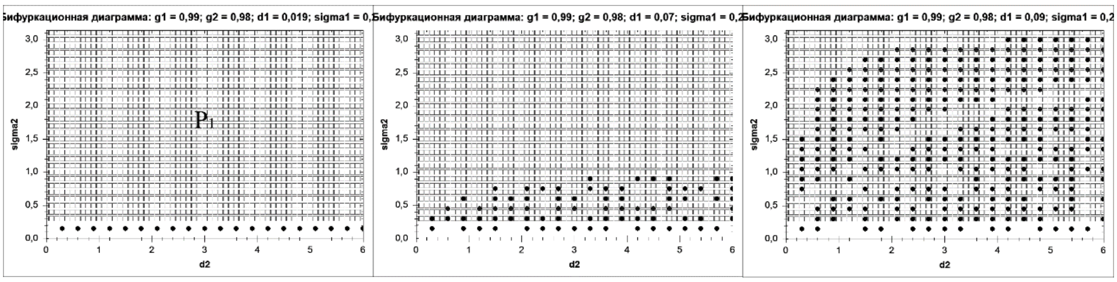
В случае рассмотрения исходной несимметричной системы

$$\begin{cases} \dot{\varphi}_1 = \gamma_1 - sin\varphi_1 + d_2F(\varphi_2) \\ \dot{\varphi}_2 = \gamma_2 - sin\varphi_2 + d_1F(\varphi_1) \end{cases}$$

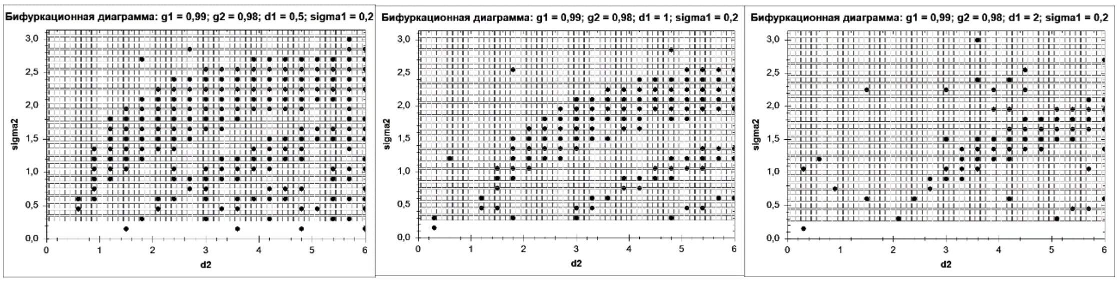
при значениях собственных частот, близких к единице, $\gamma_1 = 0{,}99$, $\gamma_2 = 0{,}98$ были обнаружены области параметров, при которых в системе возможны не только аналитические и сшитые состояния равновесия, но и периодические движения.

Периодические движения могут существовать только тогда, когда выполняется хотя бы одно из следующих условий: $\gamma_1 + d_2 > 1$ или $\gamma_2 + d_1 > 1$. Так как в системе 6 параметров, то даже при двух фиксированных γ_i, остается четыре изменяющихся параметра - d_1, d_2, σ_1, σ_2. Рассматривались различные бифуркационные зависимости параметров при фиксированных остальных, чтобы найти наиболее иллюстративную зависимость.

Например, рассмотрим изменение динамики системы в плоскости параметров σ_2, d_2 для увеличивающегося влияния d_1 первого осциллятора на второй при фиксированной полосе D_1, где $\sigma_1 = 0{,}2$ (рис. 3). Черными точками выделены значения параметров, при которых в системе обнаружены периодические движения, область из прямоугольников – область квазипериодических движений.



$d_1 = 0{,}019$ $d_1 = 0{,}07$ $d_1 = 0{,}09$



$d_1 = 0{,}5$ $d_1 = 1$ $d_1 = 2$

Рис. 3. Изменения бифуркационной диаграммы при увеличении влияния первого осциллятора и фиксированной ширине полосы D_1

Можно заметить, что при увеличении силы влияния d_1 первого осциллятора на второй, область существования периодических движений сначала увеличивается, а потом начинает уменьшаться при $d_1 > 0{,}09$.

При этом значении силы влияния первого осциллятора на второй была построена карта режимов числа вращений (рис. 4). Число оборотов периодического движения по горизонтали $p \geq 1$. Каждому числу оборотов соответствует своя область на бифуркационной диаграмме – “язык”. При увеличении силы влияния d_2 второго осциллятора на первый число вращений увеличивается, а при увеличении ширины σ_2 полосы D_2 – не влияния второго на первый – количество оборотов уменьшается.

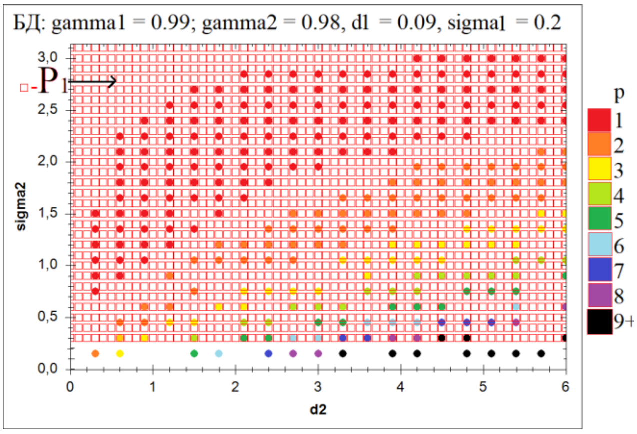


Рис. 4. Карта режимов для числа вращений по горизонтали

Заключение

В результате исследования несимметричной сшитой системы двух связанных осцилляторов в пространстве параметров были обнаружены области существования состояний равновесия внутри и вне полос D_1, D_2, а также на пересечении этих полос. Были найдены области существования периодических движений. Построены карты режимов изменения числа вращений. Исследования проводились аналитически и численно.

Литература

1. Пиковский А., Розенблюм М., Куртс Ю. Синхронизация: Фундаментальное нелинейное явление. Москва: Техносфера, 2003. 496 с.
2. Кузнецов А.П., Сатаев И.Р., Тюрюкина Л.В. Синхронизация и многочастотные колебания в цепочке фазовых осцилляторов // Нелинейная динамика. 2010. Т.6. № 4. С. 693-717
3. Крюков А.К., Осипов Г.В., Половинкин А.В. Мультистабильность синхронных режимовв ансамблях неидентичных осцилляторов: Цепочка и решетка связанных элементов // Прикладная нелинейная динамика. 2009. Т.17. № 2. С. 29-36.
4. Баутин Н.Н., Леонтович Е.А. Методы и приемы качественного исследования динамических систем на плоскости. Москва: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1976. 496 с.
5. Матурана У., Варела Ф. Древо познания. Москва: Прогресс-Традиция, 2001. 224 с.
6. Хакен Г. Принципы работы головного мозга: синергетический подход к активности мозга, поведению и когнитивной деятельности. Москва: ПЕР СЕ , 2001. 351 с.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ НА МАЛЫХ НАБОРАХ ДАННЫХ

Е.А. Каледина, О.Е. Каледин, Т.И. Кулягина

ФГБОУ ВО «Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева»

В работе описывается процесс использования методов машинного обучения для предсказания риска развития неблагоприятных сердечно-сосудистых со-бытий у пациентов с диагностированной артериальной гипертензией в ближайшие 12-36 месяцев на основе малого набора данных, собранного по отдельному региону.

Ключевые слова: алгоритмы машинного обучения, анализ данных, предсказание сердечно-сосудистых заболеваний.

1. Введение

Артериальная гипертензия (АГ) – наиболее распространенное хроническое заболевание в России и важнейший фактор риска основных сердечно-сосудистых заболеваний – инфаркта миокарда и мозгового инсульта. Основной задачей первичной профилактики сердечно-сосудистых заболеваний (ССЗ) является своевременное выявление у пациентов с неосложненной АГ высокого риска развития смертельных ССЗ [1].

Научной основой профилактики ССЗ является концепция факторов риска, которые были выявлены в эпидемиологических исследованиях [2В настоящий момент для оценки риска смертельных ССЗ в России и странах Европы применяется шкала SCORE [3], учитывающая такие факторы риска, как возраст, мужской пол, курение, повышенный уровень холестерина, нарушение обмена мочевой кислоты, и др. Однако, данная шкала имеет слишком общий характер и не подходит для оценки риска развития острого коронарного синдрома, инсульта, ишемической болезни сердца для пациентов с диагностированной АГ. Низкая точность предсказания сердечно-сосудистых событий имеет ряд причин [4]:

– оценка суммарного риска не адаптирована к региональным особенностям;

– в шкалах часто не учтены существенные для наступления сердечно-сосудистого события клинические состояния;

– данные, которые были использованы для составления шкал, были получены 30–50 лет назад и могут не соответствовать современным реалиям.

2. Подготовка данных

Одним из способов решения проблемы недостаточной точности результатов расчета сердечно-сосудистого риска может являться использование алгоритмов машинного обучения (МО). Кроме того, использование моделей МО, обученных на данных отдельных регионов, может получить более индивидуализированную, чем при использовании шкалы SCORE, оценку риска развития смертельных ССЗ, а следовательно, лучшую адаптацию управления рисками к отдельным пациентам.

Целью исследования является решение задачи предсказания риска развития неблагоприятных сердечно-сосудистых событий у пациентов с диагностированной артериальной гипертензией в ближайшие 12–36 месяцев с использованием алгоритмов машинного обучения на основе локальных данных Республики Мордовия. В качестве неблагоприятных сердечно-сосудистых событий представлены острый коронарный синдром, инсульт, ишемическая болезнь сердца, смерть.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Формирование дата-сета для исследования, представленного данными по пациентам с необходимыми и достаточными признаками для рас-четов риска ССЗ.

2. Проведение анализа имеющихся данных, формального описания и математической постановки задачи.
3. Исследование предсказательных алгоритмов машинного обучения и их готовых реализаций, создание модели расчета рисков ССЗ для полученного дата-сета и оценка ее эффективности.

Данные были предоставлены сотрудниками медицинского института НИ МГУ им. Н. П. Огарева (г. Саранск) и представляют собой сводную таблицу о наблюдении пациентов с АГ. Базовая выборка пациентов имеет средний возраст 57.8 ± 10.4 года, с 34 до 84 лет. Исходная дата наблюдения была установлена 1 января 2017 года, что позволило всем пациентам в когорте находиться под наблюдением в течение 3 лет, дата конца периода наблюдения была определена как 1 января 2020. Наблюдения представляют собой совокупность как стандартных показателей риска ССЗ (возраст, курение, холестерин, систолическое и диастолическое давление), так и специфических показателей таких как интерлейкин 6 (IL-6), неоптерин, омега-3, омега-6, концентрация малонового диальдегида (MDA) и др.

При формировании дата-сета отсутствующие значения были заменены на среднее по признаку. Так, например, отсутствующие значения длительности АГ были заменены на среднее значение в возрастной категории 50-60 лет. Категориальные переменные (пол, курение, результаты контрольного наблюдения) были переведены в бинарные. Далее, проведен корреляционный анализ рассматриваемых показателей и удалены зависимые признаки.

Следующий шаг в создании дата-сета – нормализация данных, то есть предобработка числовых признаков с целью приведения их к некоторой общей шкале без потери информации о различии диапазонов. Необходимость нормализации вызвана тем, что различные признаки представлены в разных масштабах и изменяются в разных диапазонах. В этом случае может возникнуть нарушение баланса между влиянием входных переменных, представленных в разных масштабах, на выходную переменную. В результате, обучаемая модель может выявить некорректные зависимости. В работе использована следующая формула нормализации:

$$x_{norm} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}},$$

где x_{min} и x_{max} – минимальное и максимальное значения признака соответственно. Данное масштабирование обеспечивает устойчивость к небольшим стандартным отклонениям функций и сохраняет нулевые записи в разреженных данных.

3. Обучение моделей

Главной особенностью дата-сета является его малый размер вследствие локального сбора данных по региону. Данное обстоятельство может существенно снизить способность модели к обобщению. Один из подходов к тому, чтобы сделать пространство ввода более гладким и легким для изучения – добавить шум во вводные данные. В рассматриваемой задаче точность решения существенно повысил такой способ аугментации данных, как добавление гауссовского шума с математическим ожиданием $\mu = 0$ и среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0{,}05$ к числовым признакам. Отметим, что к бинарным признакам зашумление не применялось.

Целевым признаком в задаче является бинарный вектор предсказания основных неблагоприятных сердечно-сосудистых событий в ближайшие 12, 24 и 36 месяцев. В связи с тем, что цензурирование, а также некоторые рассматриваемые ССЗ могут повторяться на протяжении всего или части периода наблюдения, исследование представляет собой решение задачи классификации с пересекающимися классами (мультиметочная классификация), где каждому объекту x соответствует вектор $y \in \{0, 1\}^K$, $K = 15$, показывающий, к каким классам данный объект относится.

Большинство алгоритмов МО созданы для задач бинарной классификации, поэтому для классификации с пересекающимися классами, используются ансамблевые подходы. Данные алгоритмы сводят исследуемую задачу к последовательности бинарных классификаторов, учитывающих возможную корреляцию между классами [5–6]. Кратко опишем используемые в работе методы.

Независимая классификация (бинарный классификатор – метод опорных векторов) предполагает, что все классы независимы, и определяет принадлежность объекта к каждому отдельным классификатором.

Классификация по нескольким меткам (бинарный классификатор – случайный лес) состоит из подбора одного классификатора для каждой метки.

LabelPowerset (бинарный классификатор – метод опорных векторов) преобразует задачу мультиметочной классификации в задачу классификации с несколькими классами, состоящими из всех уникальных комбинациях меток, обнаруженных в обучающих данных.

Мультиметочный подход ленивого обучения использует метод k ближайших соседей для поиска ближайших примеров к тестируемому классу и использует байесовский вывод для выбора назначенных меток

Стекинг (бинарный классификатор – метод опорных векторов) строит цепочку двоичных классификаторов $c_0, c_1, \dots, c_n$, где классификатор c_i использует предсказания всего классификатора c_j, где $j < i$

Для оценки результатов обучения были использованы следующие метрики [7–8]:

– Точный коэффициент соответствия (accuracy score) – самый строгий показатель, показывающий процент образцов, для которых все их ярлыки классифицированы правильно. Рассчитывается по формуле

$$accuracy\ score\ (a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|Y_i \cap Z_i|}{|Y_i \cup Z_i|},$$

где Y_i – множество классов, которым объект $x_i \in X$ принадлежит на самом деле, а через Z_i – множество классов, к которым объект был отнесён алгоритмом $a(x)$. Недостаток этой метрики состоит в том, что она не учитывает частичные совпадения классов.

– Хэммингово расстояние (hamming loss) – доля классов, факт принадлежности которым угадан неверно. Данную метрику необходимо минимизировать и ее расчет происходит по формуле

$$hamming\ loss(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|Y_i \backslash Z_i| + |Z_i \backslash Y_i|}{K}.$$

– F-мера – гармоническое среднее точности и полноты

$$F = \frac{2 * precision * recall}{precision + recall},$$

достигающее оптимального значения при 1 и худшего значения при 0. При микро-усреднении (Fbeta score micro) характеристики точности и полноты усредняются по всем классам, а затем вычисляется итоговая метрика. При макро-усреднении (Fbeta score macro) сначала вычисляется итоговая метрика точности и полноты для каждого класса, а затем результаты усредняются по всем классам.

Результаты обучения рассмотренных моделей представлены в таблице 1.

Таблица 1. Показатели метрик качества классификации с пересекающимися классами

Модель	**Метрика**			
	Accuracy score	**Hamming loss**	**Fbeta score macro**	**Fbeta score micro**
Независимая классификация	0.637	0.0487	0.3577	0.8913
Классификация по нескольким меткам	0.7188	0.0335	0.5536	0.9284
LabelPowerset	0.6875	0.0446	0.5339	0.8958
Мультиметочный подход ленивого обучения	0.5750	0.0603	0.2376	0.8646
Стекинг классификаторов	0.6063	0.0616	0.3149	0.8562

Сравнительная оценка результатов моделей показала, что наиболее близкие к оптимальным значениям метрик качества обучения имеет ансамблевый метод классификации по нескольким меткам, где в качестве бинарного классификатора используется алгоритм случайный лес. Таким образом, наиболее эффективным и точным способом расчета риска ССЗ на малом наборе региональных данных является математическая модель на основе алгоритма классификации по нескольким меткам.

Представленные результаты позволяют говорить о возможности использования моделей МО для повышения точности прогнозирования рисков ССЗ. При этом, использование данных, собранных в регионе, где предполагается использование обученной модели МО, является особенностью, также способствующей увеличению точности прогнозирования. Таким образом, подходы машинного обучения открывают перспективу достижения более индивидуализированной оценки риска ССЗ.

Литература

1. Баланова Ю.А., Шальнова С.А., Имаева А.Э., Капустина А.В., Муромцева Г.А., Евстифеева С.Е., Тарасов В.И., Редько А.Н., Викторова И.А., Прищепа Н.Н., Якушин С.С., Бойцов С.А., Драпкина О.М. Распространенность артериальной гипертонии, охват лечением и его эффективность в Российской // Рациональная Фармакотерапия в Кардиологии. 2019. №15(4). С. 450–466. DOI:10.20996/1819-6446-2019-15-4-450-466
2. Симерзин В.В., Гаглоева И.В., Гарькина С.В. Современная концепция профилактики сердечно-сосудистых заболеваний // Вестник СамГУ. Естественнонаучная серия. 2007. №9/1(59). С. 296–306.
3. Conroy R.M., Pyorala K., Fitzgerald A.P. et al. Estimation of ten-year risk of fatal cardiovascular disease in Europe: the SCORE project // European Heart Journal. 2003. № 24. P. 987–1003. DOI:10.1016/S0195-668X(03)00114-3
4. Гусев А.В., Гаврилов Д.В., Корсаков И.Н., Серова Л.М., Новицкий Р.Э., Кузнецова Т.Ю. Перспективы использования методов машинного обучения для предсказания сердечно-сосудистых заболеваний // Искусственный интеллект в здравоохранении. 2019. №3. С. 41–47.
5. Tai F., Lin H.-T. Multilabel Classification with Principal Label Space Transformation. // Neural Comput., 24–9, 2012. P. 2508-2542. DOI: 10.1162/NECO_a_00320
6. Gibaja E., Ventura S. A Tutorial on Multilabel Learning // ACM Computing Surveys. 2015. Vol. 47, №. 3. P. 1–38. DOI:http://dx.doi.org/10.1145/0000000.0000000
7. Tsoumakas G., Katakis I., Vlahavas I. Data Mining and Knowledge Discovery Handbook. Springer, 2010. P. 667–685.
8. Zhang M. –L. and Zhou Z.-H. A Review on MultiLabel Learning Algorithms // IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering. 2014. Vol. 26, Iss. 8. P. 1819–1837. DOI:10.1109/TKDE.2013.39.

ЧИСЛЕННОЕ СРАВНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ГЛОБАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЦЕПИ С РАЗЛИЧНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ[1*]

А.В. Калинин, И.Г. Милешин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В работе рассматривается численное сравнение моделей глобальной электрической цепи с различными граничными условиями: с постоянным ионосферным потенциалом и с граничными условиями в магнитосопряженных точках. Сопоставляются результаты численных исследований в зависимости от расположения генератора глобальной электрической цепи.

Ключевые слова: Система уравнений Максвелла, глобальная электрическая цепь, ионосферный потенциал

При моделировании квазистационарных электромагнитных процессов в атмосфере Земли часто используется система уравнений Максвелла в нерелятивистском электрическом приближении [1, 2, 3, 6]. В этом приближении предполагается, что электрическое поле потенциально, то есть

$$\vec{E}(x,t) = -\nabla\phi(\mathrm{x},\mathrm{t}). \qquad (1)$$

В этом случае из системы уравнений Максвелла следует, что

$$\frac{\partial\nabla\phi(x,t)}{\partial t} + 4\pi\sigma\nabla\phi(x,t) = 4\pi J^{ext}(x,t) - c\cdot rot\left(\vec{H}(x,t)\right) \qquad (2)$$

$x = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$, Ω – открытое ограниченное подмножество R3, гомеоморфное шаровому слою с границей $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$, где Γ_1 – поверхность Земли, Γ_2 – условная граница, разделяющая атмосферу и ионосферу. Уравнение (2) дополняется начальными и граничными условиями.

В стационарном случае уравнение имеет вид (3).

$$4\pi\sigma\nabla\phi(x,t) = 4\pi J^{ext}(x,t) - c\cdot rot\left(\vec{H}(x,t)\right) \qquad (3)$$

Уравнение (3) дополняется различными граничными условиями. Первый вариант граничных условий – с неизвестным, но постоянным ионосферным потенциалом.

$$\phi(x) = 0, x \in \Gamma_1,\ \ \phi(x) = c,\ \ x \in \Gamma_2 \qquad (4)$$

В (4) c – неизвестная константа (ионосферный потенциал).

Другой вид граничных условий – условия, связывающие потенциал в магнитосопряженных точках. Условия в магнитосопряженных точках формулируются в случае, когда область Ω симметрична относительно экваториальной плоскости. Они имеют следующий вид

$$\phi(x) = 0, x \in \Gamma_1, \phi(x) = \phi(x^*), \frac{\partial\phi(x)}{\partial n} = -\frac{\partial\phi(x^*)}{\partial n}\ x, x^* \in \Gamma_2. \qquad (5)$$

где x и x^* – магнитосопряженные точки [5].

Определим следующие функциональные пространства для задачи (3), (4).

$$H^1(\Omega) = \{\phi \in L_2(\Omega), \frac{\partial\phi}{\partial x_i}, i = 1,2,3\} \qquad (6)$$

$$V(\Omega) = \{\phi(\mathrm{x}) \in H^1\Omega, \phi(x) = 0, x \in \Gamma_1, \phi(x) = const, x \in \Gamma_2\} \qquad (7)$$

$$H(rot,\Omega) = \{u \in \mathrm{L}_2(\Omega)), \overrightarrow{rot(u)} \in \{L_2(\Omega)\}^3\}, \qquad (8)$$

где $\{L_2(\Omega)\}^3$ – пространство вектор-функций, суммируемых с квадратом.

Решение задачи понимается в обобщенном смысле и ищется в классе функций $\phi(x) \in V(\Omega), rot\left(\vec{H}(x)\right) \in L_2(\Omega), \vec{H} \in H(rot,\Omega)$. Исследование корректности задачи (3)-(4) выполнено в работах [2], [4], [5].

Определим следующие функциональные пространства для задачи (3), (5).

[1*] Работа поддержана научно-образовательным математическим центром "Математика технологий будущего" (Соглашение № 075-02-2020-1483/1**)**.

$$H^1(\Omega) = \{\phi \in L_2(\Omega), \frac{\partial\phi}{\partial x_i}, i = 1,2,3\} \quad (9)$$
$$V(\Omega) = \{\phi(\mathrm{x}) \in H^1\Omega,\ \phi(x) = 0, x \in \Gamma_1, \phi(x) = \phi(x^*),\ x, x^* \in \Gamma_2\ \} \quad (10)$$
$$H(rot, \Omega) = \{u \in L_2(\Omega), \overrightarrow{rot(u)} \in \{L_2(\Omega)\}^3\}, \quad (11)$$
где $\{L_2(\Omega)\}^3$ – пространство вектор-функций, суммируемых с квадратом.

Решение задачи понимается в обобщенном смысле и ищется в классе функций
$$\phi(x) \in V(\Omega), rot\left(\vec{H}(x)\right) \in L_2(\Omega), \vec{H} \in H(rot, \Omega).$$

Теоретическое исследование данной задачи было проведено в работах [5], [4]. Численное исследование данной задачи не проводилось.

В данной работе проведено численное исследование рассматриваемых постановок задач и проведено сравнение результатов, в частности использующее сопоставление ионосферного потенциала в первой модели (3) и усредненным значением ионосферного потенциала для задачи с магнитосопряженными точками. Полученные численные результаты согласуются с теоретическими исследованиями, проведенными для соответствующих модельных задач в работе [7]. Численное исследование проводилось в рамках метода конечных элементов. Разработанные численные алгоритмы позволяют решать соответствующие задачи в общих постановках с учетом неоднородности атмосферы.

Литература

1. Толмачев В.В., Головин А.М., Потапов В.С. Термодинамика и электродинамика сплошной среды, издательство МГУ 1988, 233 с.
2. Жидков А.А., Калинин А.В. Корректность одной математической задачи атмосферного электричества // Вестник ННГУ им. Н.И. Лобачевского. 2009. № 4. С. 123-129.
3. Мареев Е.А. Достижения и перспективы исследований глобальной электрической цепи // Успехи физ. наук. 2010. Т. 180. № 5. С. 527-534.
4. Калинин А.В., Слюняев Н.Н., Мареев Е.А., Жидков А.А. Стационарные и нестационарные модели глобальной электрической цепи: корректность, аналитические соотношения, численная реализация // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2014. Т. 50. № 3. С. 314-322.
5. Kalinin A.V., Slyunyaev N.N. Initial-boundary value problems for the equations of the global atmospheric electric circuit // J. Math. Anal. Appl. 2017. Vol. 450. No. 1. P. 112-136.
6. Boström R., Fahleson U. Vertical propagation of time-dependent electric fields in the atmosphere and ionosphere // in H.Dolezalek, R.Reiter (Eds.), Electrical Processes in Atmospheres, Steinkopff, 1977. P. 529-535.
7. Денисова Н.А., Калинин А.В. Влияние выбора граничных условий на распределение электрического поля в моделях глобальной электрической цепи// Изв. ВУЗов Радиофизика. 2018, Т.61. № 10, с.831 -842.

НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ[1*]

А.В. Калинин[1,2], А.А. Тюхтина[1]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Институт прикладной физики Российской академии наук*

Изучается постановка начально-краевых задач для квазистационарных приближений для системы уравнений Максвелла в неоднородных средах. Рассматриваются нерелятивистское магнитное приближение, нерелятивистское электрическое приближение и квазистационарное приближение, обобщающее приближение Дарвина. Приводятся результаты о корректности постановок задач. Предлагается метод построения приближенного решения начально-краевой задачи для системы уравнений Максвелла в приближении Дарвина.

Ключевые слова: система уравнений Максвелла, квазистационарные приближения, неоднородные среды.

При моделировании достаточно медленных электромагнитных процессов часто используются различные квазистационарные приближения для системы уравнений Максвелла [1-3]. Наиболее изученным является нерелятивистское магнитное приближение [1-7], которое формально заключается в пренебрежении током смещения и характерно для описания медленных процессов в средах с достаточно высокой проводимостью [2,4-6]. Система уравнений Максвелла с учетом материальных соотношений имеет в этом приближении вид

$$\mathrm{rot}\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\sigma\vec{E} + \frac{4\pi}{c}\vec{J}^{ext}, \tag{1}$$

$$\mathrm{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mu\vec{H}, \tag{2}$$

где $\vec{H}$ – напряженность магнитного поля, $\vec{E}$ – напряженность электрического поля, $\vec{J}^{ext}$ – объёмная плотность сторонних токов. Достаточно обширная литература, в частности, [4-11], посвящена вопросам обоснования этого приближения, изучению различных постановок задач для этого приближения, построению и анализу численных алгоритмов решения этих задач.

Другое классическое квазистационарное приближение, называемое нерелятивистским электрическим приближением [2], используется для описания достаточно медленных процессов в средах с низкой проводимостью. Формально оно заключается в условии потенциальности электрического поля. В [12-15] нерелятивисткое электрическое приближение используется для моделирования электромагнитных процессов в нижних слоях атмосферы. Система уравнений Максвелла в этом приближении записывается, с учетом материальных соотношений, в виде

$$\mathrm{rot}\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\sigma\vec{E} + \frac{4\pi}{c}\vec{J}^{ext} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\varepsilon\vec{E}, \tag{3}$$

$$\mathrm{rot}\vec{E} = 0, \qquad \mathrm{div}\mu\vec{H} = 0. \tag{4}$$

В [16] рассматривается квазистационарное приближение, обобщающее нерелятивистские магнитное и электрическое приближения и основанное на представлении электрического поля в виде суперпозиции потенциальной и соленоидальной компонент и сохранении в системе уравнений Максвелла потенциальной части тока смещения. Система уравнений Максвелла с учетом материальных соотношений в обобщенном квазистационарном приближении Дарвина принимает вид

$$\mathrm{rot}\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\sigma\vec{E} + \frac{4\pi}{c}\vec{J}^{ext} - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\varepsilon\mathrm{grad}\varphi, \tag{5}$$

[1*] Работа поддержана научно-образовательным математическим центром "Математика технологий будущего" (Соглашение № 075-02-2020-1483/1).

$$\mathrm{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mu\vec{H}, \tag{6}$$

где $\vec{E} = \vec{\mathcal{E}} - \mathrm{grad}\varphi$, $\mathrm{div}\varepsilon\vec{\mathcal{E}} = 0$.

Это приближение обобщает на случай неоднородных проводящих сред квазистационарного приближения Дарвина, задачи для которого рассматривались в [17-20] в предположении, что объёмная плотность тока и объёмная плотность зарядов – заданные функции. В этих работах получены результаты о корректности постановок рассматриваемых задач и исследована асимптотическая связь между задачами для нестационарной системы уравнений Максвелла и для системы уравнений Максвелла в приближении Дарвина при малом значении параметра $\beta = \Delta x/(c\Delta t)$, где Δx - характерный пространственный масштаб, Δt – характерный временной масштаб, c – скорость света. Иерархия квазистационарных приближений обсуждалась в [2,19-21]. Для квазистационарного приближения, рассматриваемого в [16], которое также будем называть приближением Дарвина, были доказаны существование и единственность решения начально-краевой задачи и получены оценки близости решений рассматриваемой квазистационарной задачи и соответствующей нестационарной задачи, зависящие от параметров β и $\gamma = 4\pi\sigma^*\Delta t$, где σ^* – характерное значение удельной проводимости, характеризующих скорость процессов.

Приведём результаты о корректности постановок начально-краевых задач для системы уравнений Максвелла в различных приближениях. Предполагается, что уравнения рассматриваются в области $Q = \Omega \times (0,T)$, $\Omega \subset R^3$, $T > 0$. Система (1), (2) будет изучаться при граничных и начальных условиях

$$\vec{E}(x,t) \times \vec{\nu}(x) = 0,\ (x,t) \in \partial\Omega \times (0,T),\ \vec{H}(x,0) = \vec{h}(x),\ x \in \Omega. \tag{7}$$

где $\vec{\nu}(x)$ – единичный вектор внешней нормали в точке $x \in \partial\Omega$.

Система (3), (4) для квазистационарного электрического приближения рассматривается при граничных и начальных условиях

$$\vec{E}(x,t) \times \vec{\nu}(x) = 0,\ (x,t) \in \partial\Omega \times (0,T),\ \vec{E}(x,0) = \vec{e}(x),\ x \in \Omega. \tag{8}$$

Система (5), (6) рассматривается при граничных и начальных условиях

$$\vec{E}(x,t) \times \vec{\nu}(x) = 0,\ (x,t) \in Q = \partial\Omega \times (0,T), \vec{H}(x,0) = \vec{h}(x),\ \mathrm{grad}\varphi(0) = \mathrm{grad}\varphi_0,\ x \in \Omega. \tag{9}$$

Предполагаем, что $\vec{J}^{ext}: Q \to R^3$, $\vec{h}: \Omega \to R^3$, $\vec{e}: \Omega \to R^3$, $\mathrm{grad}\varphi_0: \Omega \to R^3$ – интегрируемые с квадратом функции, ε, μ и σ – функции из $L_\infty(\Omega)$,

$$\varepsilon_1 \le \varepsilon(x) \le \varepsilon_2,\ \mu_1 \le \mu(x) \le \mu_2,\ \sigma_1 \le \sigma(x) \le \sigma_2,$$

где ε_i, μ_i, σ_i (i=1, 2) – заданные положительные постоянные.

Пусть $\Omega \subset R^3$ – открытая ограниченная односвязная область с липшицевой границей $\partial\Omega$ с компонентами связности Γ_0, …, Γ_k, гомеоморфными сферам в R^3. Предполагаем, что Γ_0 – «внешняя» граница Ω, так что Γ_i, $i = 1, \dots, k$, лежат в области, ограниченной Γ_0. Определим следующие гильбертовы пространства вектор-функций с соответствующими скалярными произведениями:

$$H(\mathrm{div};\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \mathrm{div}\vec{u} \in L_2(\Omega)\},\ K(\mathrm{div};\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \mathrm{div}\vec{u} = 0\},$$

$$(\vec{u},\vec{v})_{div} = (\vec{u},\vec{v})_{2,\Omega} + (\mathrm{div}\vec{u},\mathrm{div}\vec{v})_{2,\Omega},$$

$$H(\mathrm{rot};\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \mathrm{rot}\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3\},\ K(\mathrm{rot};\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \mathrm{rot}\vec{u} = 0\},$$

$$(\vec{u},\vec{v})_{rot} = (\vec{u},\vec{v})_{2,\Omega} + (\mathrm{rot}\vec{u},\mathrm{rot}\vec{v})_{2,\Omega},$$

где $(\cdot,\cdot)_{2,\Omega}$ обозначает скалярное произведение в $L_2(\Omega)$ или в $\{L_2(\Omega)\}^3$. Замыкания множества пробных вектор-функций $\{\mathcal{D}(\Omega)\}^3$ в $H(\mathrm{div};\Omega)$ и $H(\mathrm{rot};\Omega)$ обозначаются $H_0(\mathrm{div};\Omega)$ и $H_0(\mathrm{rot};\Omega)$ соответственно, $K_0(\mathrm{rot};\Omega) = K(\mathrm{rot};\Omega) \cap H_0(\mathrm{rot};\Omega)$, $K_0(\mathrm{div};\Omega) = K(\mathrm{div};\Omega) \cap H_0(\mathrm{div};\Omega)$.

Определен оператор следа $\gamma_\nu: H(\mathrm{div};\Omega) \to H^{-1/2}(\partial\Omega)$, $\gamma_\nu\vec{u}(x) = \vec{u}(x) \cdot \vec{\nu}(x)$, $x \in \partial\Omega$, для гладких функций $\vec{u}$,

$$K(\Omega) = \left\{\vec{u} \in K(\mathrm{div};\Omega) : \langle\gamma_\nu\vec{u},1\rangle_{\Gamma_i} = 0, i = 1,\dots,k\right\},$$

$$H(\Omega) = \{\psi \in H^1(\Omega) : \psi(x) = 0, x \in \Gamma_0, \psi(x) = c_i \in R, x \in \Gamma_i, i = 1,\dots,k\}.$$

Пусть $\eta \in L_\infty(\Omega)$ и найдутся положительные постоянные η_1, η_2 такие, что $\eta_1 \le \eta(x) \le \eta_2$ для почти всех $x \in \Omega$. Обозначим через $\{L_2(\eta;\Omega)\}^3$ пространство $\{L_2(\Omega)\}^3$, рассматриваемое со скалярным произведением $(\eta\vec{u},\vec{v})_{2,\Omega}$,

$$K(\eta;\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \eta\vec{u} \in K(\Omega)\},\ K_0(\mathrm{div}\eta;\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \eta\vec{u} \in K_0(\mathrm{div};\Omega)\},$$

$$U_1(\eta;\Omega) = K(\eta;\Omega) \cap H_0(\mathrm{rot};\Omega),\ U_2(\eta;\Omega) = K_0(\mathrm{div}\eta;\Omega) \cap H(\mathrm{rot};\Omega).$$

В пространстве $\{L_2(\eta;\Omega)\}^3$ ортогональное дополнение к $K(\eta;\Omega)$ совпадает с $K_0(\mathrm{rot};\Omega)$, а ортогональное дополнение к $K_0(\mathrm{div}\eta;\Omega)$ – с $K(\mathrm{rot};\Omega)$.

Пусть $\vec{J}^{ext} = \sigma\vec{E}^{ext}$. Задача (1), (2), (7) для системы уравнений Максвелла в квазистационарном магнитном приближении допускает следующую постановку: найти функцию $\vec{H} \in L_2(0,T,U_2(\mu;\Omega))$, удовлетворяющую условию $\vec{H}(0) = \vec{h}$ и такую, что для всех $\vec{v} \in U_2(\mu;\Omega)$

$$\frac{1}{c}\frac{d}{dt}\left(\mu\vec{H},\vec{v}\right)_{2,\Omega} + \frac{c}{4\pi}\left(\sigma^{-1}\mathrm{rot}\vec{H},\mathrm{rot}\vec{v}\right)_{2,\Omega} = \left(\vec{E}^{ext},\mathrm{rot}\vec{v}\right)_{2,\Omega}. \tag{10}$$

Теорема 1 [8, 21]. *Для всех $\vec{h} \in K_0(div\mu;\Omega)$, $\vec{E}^{ext} \in L_2(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$ существует единственное решение $\vec{H} \in L_2(0,T,U_2(\mu;\Omega))$ задачи (10). Если $\vec{h} \in U_2(\mu;\Omega)$ и $\vec{E}^{ext} \in L_2(0,T,H_0(rot;\Omega))$, то $\partial/\partial t\vec{H} \in L_2(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$. Если $\vec{E}^{ext} \in H^1(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$, $\vec{h} \in U_2(\mu;\Omega)$ и*

$$\frac{4\pi}{c}\vec{E}^{ext}(0) - \sigma^{-1}rot\vec{h} \in K_0(rot;\Omega) \tag{11}$$

то $\partial/\partial t\vec{H} \in L_\infty(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$.

Пусть $\vec{H} \in L_2(0,T,U_2(\mu,\Omega))$ – решение задачи (10). Можно определить функцию $\vec{E} \in L_2(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$ из (1). Уравнение (2) выполняется в смысле распределений на Q. Если выполнены условия на начальные данные, сформулированные в теореме, то $\vec{E} \in L_2(0,T,H_0(\mathrm{rot},\Omega))$, то есть справедливы граничные условия.

Для обобщенной формулировки начально-краевой задачи (3), (4), (8) для нерелятивистского электрического приближения введём скалярный электрический потенциал φ соотношением $\vec{E} = -\mathrm{grad}\varphi$. Пусть $\vec{e} = -\mathrm{grad}\varphi_0 \in K_0(\mathrm{rot},\Omega)$, $\varphi_0 \in H(\Omega)$. Задача (3), (4), (8) допускает следующую постановку: найти функцию $\varphi \in H^1(0,T,H(\Omega))$, удовлетворяющую условию $\varphi(0) = \varphi_0$ и такую, что для всех $\psi \in H(\Omega)$

$$\frac{d}{dt}(\varepsilon\mathrm{grad}\varphi,\mathrm{grad}\psi)_{2,\Omega} + 4\pi(\sigma\mathrm{grad}\varphi,\mathrm{grad}\psi)_{2,\Omega} = 4\pi\left(\vec{J}^{ext},\mathrm{grad}\psi\right)_{2,\Omega}. \tag{12}$$

Теорема 2 [15]. *Для всех $\varphi_0 \in H(\Omega)$, $\vec{J}^{ext} \in \{L_2(Q)\}^3$ существует единственное решение $\varphi \in H^1(0,T,H(\Omega))$ задачи* (12). *При этом найдётся единственная функция $\vec{F} = rot\vec{H} \in L_2(0,T,K(\Omega))$ такая, что справедливо равенство (3), где $\vec{E} = -grad\varphi$. Если $\vec{J}^{ext} \in H^1(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$, то $\partial^2\varphi/\partial t^2 \in L_2(0,T,H(\Omega))$, то есть $\varphi \in C^1(0,T,H(\Omega))$ и $\vec{F} \in \mathrm{C}(0,T,K(\Omega))$.*

Обозначим $L(\Omega) = \{L_2(\mu;\Omega)\}^3 \times \{L_2(\varepsilon;\Omega)\}^3$, $V_0(\Omega) = H(\mathrm{rot};\Omega) \times K_0(\mathrm{rot};\Omega)$. Задача (5), (6), (9) для обобщенного квазистационарного приближения Дарвина допускает следующую постановку: найти функции $\Psi = \{\vec{H},\mathrm{grad}\varphi\} \in L_2(0,T,V_0(\Omega))$ и $\vec{\mathcal{E}} \in L_2(0,T,U_1(\varepsilon,\Omega))$ такие, что $\Psi(0) = \Psi_0 = \{\vec{h},\mathrm{grad}\varphi_0\}$, и для всех $\Phi = \{\vec{u},\mathrm{grad}\psi\} \in V_0(\Omega)$, $\vec{v} \in U_1(\varepsilon,\Omega)$

$$\frac{1}{c}\frac{d}{dt}(\Psi,\Phi)_{L(\Omega)} + \left(\vec{\mathcal{E}},\mathrm{rot}\vec{u}\right)_{2,\Omega} - \frac{4\pi}{c}\left(\sigma\vec{\mathcal{E}},\mathrm{grad}\psi\right)_{2,\Omega} + \frac{4\pi}{c}(\sigma\mathrm{grad}\varphi,\mathrm{grad}\psi)_{2,\Omega} = $$
$$= \frac{4\pi}{c}\left(\vec{J}^{ext},\mathrm{grad}\psi\right)_{2,\Omega}, \tag{13}$$

$$\left(\vec{\mathcal{E}},\vec{v}\right)_{2,\Omega} - (\sigma\mathrm{grad}\varphi,\vec{v})_{2,\Omega} - \frac{c}{4\pi}\left(\vec{H},\mathrm{rot}\vec{v}\right)_{2,\Omega} = -\left(\vec{J}^{ext},\vec{v}\right)_{2,\Omega}. \tag{14}$$

Теорема 3 [16]. *Для всех $\Psi_0 \in V_0(\Omega)$, $\vec{J}^{ext} \in H^1(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$ задача* (13), (14) *имеет единственное решение Ψ, $\vec{\mathcal{E}}$. При этом $\Psi \in L_\infty(0,T,L(\Omega))$, $\partial/\partial t\Psi \in L_2(0,T,L(\Omega))$ и справедливы соотношения* (5), (6). *Если*

$$rot\vec{h} = -\frac{4\pi}{c}\sigma grad\varphi_0 + \frac{4\pi}{c}\vec{J}^{ext}(0) \tag{15}$$

то $\partial/\partial t\Psi \in L_\infty(0,T,L(\Omega))$, $\partial/\partial t\vec{\mathcal{E}} \in L_2(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$.

В случае однородных сред (μ, ε, σ – положительные постоянные) положим $\vec{J}^{ext} = \vec{\mathcal{J}}^{ext} + \sigma\mathrm{grad}\psi^{ext}$, где $\vec{\mathcal{J}}^{ext} \in L_2(0,T,K(\Omega))$, $\mathrm{grad}\psi^{ext} \in L_2(0,T,K_0(\mathrm{rot},\Omega))$.

Проектируя (5) на ортогональные подпространства, получаем, что начально-краевая задача (5), (6), (9) разбивается на задачу определения функции $\mathrm{grad}\varphi \in L_2(0, T, K_0(\mathrm{rot}, \Omega))$ такой, что

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\varphi + 4\pi\sigma\mathrm{grad}\varphi = 4\pi\sigma\mathrm{grad}\psi^{ext}, \ \ \mathrm{grad}\varphi(0) = \mathrm{grad}\varphi_0, \tag{16}$$

и задачу определения функций $\vec{H} \in L_2(0, T, H(\mathrm{rot}, \Omega))$, $\vec{\mathcal{E}} \in L_2(0, T, U_1(1, \Omega))$ таких что $\vec{H}(0) = \vec{h}$,

$$\mathrm{rot}\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\sigma\vec{\mathcal{E}} + \frac{4\pi}{c}\vec{\mathcal{J}}^{ext}, \ \ \mathrm{rot}\vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mu\vec{H}. \tag{17}$$

Задача (1), (2), (7) системы уравнений Максвелла в квазистационарном магнитном приближении разбивается в этом случае на задачу (17) и равенство

$$\mathrm{grad}\varphi = \mathrm{grad}\psi^{ext}.$$

Задача (3), (4), (8) сводится в однородной среде к задаче (16) и уравнению

$$\mathrm{rot}\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\vec{\mathcal{J}}^{ext}.$$

Таким образом, используя индексы d, m и e для решения начально-краевых задач для системы уравнений Максвелла в квазистационарном дарвиновском приближении, системы уравнений Максвелла в в нерелятивистском магнитном приближении и в нерелятивистском электрическом приближении соответственно, получаем в случае однородных проводящих сред

$$\mathrm{grad}\varphi^e = \mathrm{grad}\varphi^d, \vec{H}^d = \vec{H}^m, \vec{\mathcal{E}}^d = \vec{\mathcal{E}}^m.$$

Таким образом, можно сказать, что приближение Дарвина охватывает традиционные нерелятивистские магнитное и электрическое приближения.

В работе [21] получены оценки близости решений начально-краевых задач для системы уравнений Максвелла в нерелятивистском магнитном приближении и квазистационарном приближении Дарвина в зависимости от безразмерных параметров β и γ, характеризующих скорость процессов и параметра, характеризующего степень неоднородности среды.

Начально-краевые задачи для системы уравнений Максвелла в нерелятивистском магнитном и электрическом приближениях сводятся к задачам определения одной неизвестной функции, напряженности магнитного поля или напряженности электрического поля соответственно.

Квазистационарное приближение Дарвина приводит к связанной системе уравнений для определения магнитного и электрического полей, что может вызывать сложности при численном решении поставленной задачи. Рассмотрим метод конструирования приближенного решения начально-краевой задачи (5), (6), (9) для системы уравнений Максвелла в приближении Дарвина, который состоит в последовательном определении потенциальной компоненты электрического поля, магнитного поля и соленоидальной компоненты электрического поля.

Пусть $\vec{J}^{ext} = \sigma\vec{E}^{ext} \in L_2(0, T, \{L_2(\Omega)\}^3)$, $\vec{h} \in U_2(\mu, \Omega)$, $\varphi_0 \in H(\Omega)$. Рассмотрим начально-краевую задачу

$$\mathrm{rot}\vec{H}(x,t) = \frac{4\pi}{c}\sigma\vec{E}(x,t) + \frac{4\pi}{c}\vec{J}^{ext}(x,t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\varepsilon(x)\mathrm{grad}\varphi^e(x,t) \tag{18}$$

$$\mathrm{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mu\vec{H}, \tag{19}$$

$$\vec{E}(x,t) \times \vec{\nu}(x) = 0, (x,t) \in Q = \partial\Omega \times (0,T), \vec{H}(x,0) = \vec{h}(x), x \in \Omega. \tag{20}$$

где $\varphi^e \in H^1(0, T, H(\Omega))$ – решение задачи (12).

Задача (18)-(20) допускает следующую постановку: найти функцию $\vec{H} \in L_2(0, T, U_2(\mu, \Omega))$ такую, что $\vec{H}(0) = \vec{h}$ и при всех $\vec{v} \in U_2(\mu, \Omega)$

$$\frac{4\pi}{c}\frac{d}{dt}(\mu\vec{H}, \vec{v})_{2,\Omega} + c(\sigma^{-1}\mathrm{rot}\vec{H}, \mathrm{rot}\vec{v})_{2,\Omega} = \left(4\pi\vec{E}^{ext} - \sigma^{-1}\varepsilon\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\varphi^e, \mathrm{rot}\vec{v}\right)_{2,\Omega}.$$

Теорема 4. *Пусть выполнено хотя бы одно из следующих условий.*

1) $\vec{J}^{ext} \in H^1(0, T, \{L_2(\Omega)\}^3)$ *и справедливо условие* (15).

2) $\vec{E}^{ext} \in L_2(0, T, H_0(\mathrm{rot}, \Omega))$ *и* $\mathrm{grad}\sigma^{-1}\varepsilon \in \{L_\infty(\Omega)\}^3$.

Тогда существует единственное решение $\vec{H} \in L_2(0, T, U_2(\mu, \Omega))$, $\vec{E} \in L_2(0, T, H_0(rot, \Omega))$ *задачи* (18)-(20).

Для сравнения решений начально-краевых задач (18)-(20) и (5), (6), (9) перейдём к безразмерным переменным, заменяя *x* на $\Delta x \cdot x'$, *t* на $\Delta t \cdot t'$.

Теорема 5. *Пусть* $\vec{J}^{ext} \in H^1(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$ *и выполнено условие (15). Пусть* $\vec{H}$, $\vec{E}$ *– решение задачи (18)-(20),* $\vec{H}^d$, $\vec{E}^d$ *– решение задачи (5), (6), (9) для системы уравнений Максвелла в приближении Дарвина. Тогда справедливы следующие оценки.*

$$\|\vec{E} - \vec{E}^d\|_{2,Q} \le A_1 \gamma \beta^2 \|\partial / \partial t \vec{E}^{ext}\|_{2,Q},$$

$$\|\vec{H} - \vec{H}^d\|_{L_2(0,T,H(\mathrm{rot};\Omega))} \le A_2 \gamma^2 \beta^3 \|\partial / \partial t \vec{E}^{ext}\|_{2,Q},$$

где положительные постоянные A_1, A_2 *не зависят от* β *и* γ.

Параметры $\beta \to 0$ и $\gamma \to \infty$ для медленных процессов в высокопроводящих средах, $\beta \to 0$ и $\gamma \to 0$ для медленных процессов в средах с низкой проводимостью. Полученные оценки показывают, что для близости решений поставленных задач достаточно малости параметра β и ограниченности $\beta\gamma$.

В случае однородных сред задача (18)-(20) разбивается на задачу (17) и уравнение

$$\frac{4\pi}{c}\sigma \mathrm{grad}\varphi - \frac{4\pi}{c}\mathrm{grad}\psi^{ext} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\varepsilon \mathrm{grad}\varphi^e = 0,$$

где $\vec{E} = \vec{\mathcal{E}} - \mathrm{grad}\varphi$. Таким образом, справедливы равенства

$$\vec{H} = \vec{H}^m, \ \vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}^m, \ \mathrm{grad}\varphi = \mathrm{grad}\varphi^e.$$

Если среда неоднородная, можно оценить близость решений соответствующих начально-краевых задач через безразмерные параметры β, γ и параметр $\|\mathrm{grad}(\sigma_0 \varepsilon^{-1})\|_{\infty,\Omega}$, характеризующий степень неоднородности среды.

Теорема 6. *Пусть* $\vec{J}^{ext} \in H^1(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$ *и выполнено условие (15). Если* $grad(\sigma_0 \varepsilon^{-1}) \in \{L_\infty(\Omega)\}^3$, *то*

$$\|\mathrm{grad}\varphi - \mathrm{grad}\varphi^d\|_{2,Q} \le B_1 \gamma \beta^2 \|\mathrm{grad}(\sigma_0 \varepsilon^{-1})\|_{\infty,\Omega} f_\varphi(\gamma) \|\partial / \partial t \vec{E}^{ext}\|_{2,Q},$$

$$\|\vec{\mathcal{E}}^d - \vec{\mathcal{E}}\|_{2,Q} \le B_2 \gamma \beta^2 \|\mathrm{grad}(\sigma_0 \varepsilon^{-1})\|_{\infty,\Omega} f_\varepsilon(\gamma) \|\partial / \partial t \vec{E}^{ext}\|_{2,Q},$$

$$\|\vec{H} - \vec{H}^d\|_{L_2(0,T,H(\mathrm{rot};\Omega))} \le B_3 \gamma^2 \beta^3 \|\mathrm{grad}(\sigma_0 \varepsilon^{-1})\|_{\infty,\Omega} \|\partial / \partial t \vec{E}^{ext}\|_{2,Q},$$

$$\|\mathrm{grad}\varphi - \mathrm{grad}\varphi^e\|_{2,Q} \le B_4 \gamma \beta^2 \|\mathrm{grad}(\sigma_0 \varepsilon^{-1})\|_{\infty,\Omega} f_\varphi(\gamma) \|\partial / \partial t \vec{E}^{ext}\|_{2,Q},$$

$$\|\vec{\mathcal{E}}^m - \vec{\mathcal{E}}\|_{2,Q} \le B_5 \|\mathrm{grad}(\sigma_0 \varepsilon^{-1})\|_{\infty,\Omega} f_\varepsilon(\gamma) \|\partial / \partial t \vec{E}^{ext}\|_{2,Q},$$

$$\|\vec{H} - \vec{H}^m\|_{L_2(0,T,H(\mathrm{rot};\Omega))} \le B_6 \beta \big(1 - \exp(-\gamma a)\big) \|\mathrm{grad}(\sigma_0 \varepsilon^{-1})\|_{\infty,\Omega} \|\partial / \partial t \vec{E}^{ext}\|_{2,Q},$$

Положительные постоянные a, $B_1 - B_6$ *не зависят от* β, γ, $\sigma = \sigma^* \sigma_0$, $f_\varphi(\gamma) = (1 - e^{-a\gamma})^2/\gamma$, $f_\varepsilon(\gamma) = (1 - e^{-a\gamma})/\gamma$.

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 8.Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, Физматлит, 1982.
2. Толмачев В.В., Головин А.М., Потапов В.С. Термодинамика и электродинамика сплошной среды. М.: Изд-во МГУ, 1988.
3. Тамм И.Е. Основы теории электричества. М.: Наука, 1989.
4. Ammari, H., Buffa, A., Nedelec, J.-C.: A justification of eddy currents model for the Maxwell equations SIAM J. Appl. Math. 2000. Vol. 60. No. 5. P. 1805-023.
5. Alonso Rodriguez A., Valli A. Eddy current approximation of Maxwell equations. Theory, algorithms and applications. Milan: Spriner-Verlag Italia, 2010.
6. Галанин М.П., Попов Ю.П. Квазистационарные электромагнитные поля в неоднородных средах. М.: Физматлит, 1995.
7. Bossavit A. The computation of eddy-currents, in dimension 3, by using mixed finite elements and boundary elements in association // Math. Comput. Modelling. 1991. Vol. 15. No. 305. P. 33-42.

8. Калинин А.В., Калинкина А.А. Квазистационарные начально-краевые задачи для системы уравнений Максвелла // Вест. ННГУ. Математическое моделирование и оптимальное управление. 2003. № 1. С. 21-38.
9. Калинин А.В., Тюхтина А.А. Квазистационарные электромагнитные поля в неоднородных средах с непроводящими и слабопроводящими включениями // Журнал СВМО. 2016. Т. 18. № 4. С. 119-133.
10. Калинин А.В., Тюхтина А.А., Изосимова О.А. Модифицированные калибровочные соотношения для системы уравнений Максвелла в квазистационарном магнитном приближении // Журнал СВМО. 2017. Т. 19. № 4. С. 55-67.
11. Kalinin A.V., Tyukhtina A.A. Lp-estimates for scalar products of vector fields and their application to electromagnetic theory problems // Mathematical Methods in the Applied Sciences. 2018. Vol. 41. No. 18. P. 9283-9292.
12. Жидков А.А., Калинин А.В. Корректность одной математической задачи атмосферного электричества // Вестник ННГУ им. Н.И. Лобачевского. 2009. № 4. С. 123-129.
13. Мареев Е.А. Достижения и перспективы исследований глобальной электрической цепи // Успехи физ. наук. 2010. Т. 180. № 5. С. 527-534.
14. Калинин А.В., Слюняев Н.Н., Мареев Е.А., Жидков А.А. Стационарные и нестационарные модели глобальной электрической цепи: корректность, аналитические соотношения, численная реализация // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2014. Т. 50. № 3. С. 314-322.
15. Kalinin A.V., Slyunyaev N.N. Initial-boundary value problems for the equations of the global atmospheric electric circuit // J. Math. Anal. Appl. 2017. Vol. 450. No. 1. P. 112-136.
16. Калинин А.В., Тюхтина А.А. Приближение Дарвина для системы уравнений Максвелла в неоднородных проводящих средах// ЖВМ и МФ. 2020. Т.60, № 8. С. 121-134.
17. Degond P., Raviart P.-A. An analysis of the Darwin model of approximation to Maxwell's equations // Forum Math. 1992. Vol. 4. P. 13-44.
18. Raviart P.-A., Sonnendrücker E. Approximate models for the Maxwell equations // J. Comput. Appl. Math. 1994. Vol. 63. P. 69-81.
19. Raviart P.-A., Sonnendrücker E. A hierarchy of approximate models for the Maxwell equations // Numer. Math. 1996. Vol. 73. P. 329-372.
20. Larsson J. Electromagnetics from a quasistatic perspective // Am. J. Phys. 2007. Vol. 75. No 3. P. 230-239.
21. Kalinin A.V., Tyukhtina A.A. Hierarchy of Models of Quasi-stationary Electromagnetic Fields // Mathematical Modeling and Supercomputer Technologies. 20th International Conference, MMST 2020, Nizhny Novgorod, Russia, November 23 – 27, 2020, Revised Selected Papers. Communications in Computer and Information Science, v.1413. Springer, 2021. P. 77-92.

КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕОРИИ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ[1*]

А.В. Калинин[1,2], А.А. Тюхтина[1], А.А. Бусалов[1], О.А. Изосимова[1]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Институт прикладной физики Российской академии наук*

Рассматривается краевая задача для стационарной нелинейной системы переноса излучения и статистического равновесия для модели двухуровневого атома в диффузионном приближении. Приводятся результаты предварительного теоретического исследования поставленной задачи

Ключевые слова: перенос излучения, диффузионное приближение, нелинейная краевая задача.

Исследование нелинейных процессов переноса излучения приводит к необходимости изучения краевых и начально-краевых задач для нелинейных интегро-дифференциальных уравнений с частными производными. Вопросы физического, математического и численного моделирования процессов переноса излучения рассматриваются, в частности, в [1-6]. Одним из наиболее эффективных математических приближений для описания процессов переноса излучения является диффузионное приближение [1]. Условия его применимости обсуждаются в [1,2,6,7].

В [8] рассматривается следующая нелинейная стационарная система, включающая кинетическое уравнение переноса излучения и уравнения статистического равновесия, возникающие при исследовании модели двухуровневого атома в предположении полного перераспределения излучения по частоте:

$$(\omega,\nabla)\psi(x,\nu,\omega)+h\nu_{12}\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}\big(B_{12}C_1(x)-B_{21}C_2(x)\big)\psi(x,\nu,\omega)=h\nu_{12}\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}A_{21}C_2(x), \tag{1}$$

$$C_1(x)\left(C_{12}n_e(x)+B_{12}\int_I\int_\Omega\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}\psi(x,\nu,\omega)d\omega d\nu\right)=$$
$$=C_2(x)\left(A_{21}+C_{21}n_e(x)+B_{21}\int_I\int_\Omega\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}\psi(x,\nu,\omega)d\omega d\nu\right), \tag{2}$$

$$C_1(x)+C_2(x)=f(x). \tag{3}$$

Здесь $x\in G\subset R^3$, G – выпуклое открытое множество с гладкой границей ∂G и диаметром $d>0$, $\omega\in\Omega=\{\omega\in R^3:|\omega|=1\}$, $\nu\in \mathrm{I}=(0,\nu_0]$, $t\in[0,\infty)$. Функция ψ – удельная интенсивность излучения, C_1 и C_2 – пространственная плотность атомов среды, находящихся в основном и в возбужденном состоянии соответственно. Система (1)-(3) рассматривается при граничном условии

$$\psi(x,\nu,\omega)=0,\ x\in\partial G,\ \big(\omega,\vec{n}(x)\big)<0, \tag{4}$$

где $\vec{n}(x)$ – единичный вектор внешней нормали к ∂G в точке $x\in\partial G$, соответствующем отсутствию внешнего потока частиц, падающего на границу области.

Более подробная информация о физическом смысле функций и коэффициентов приводится в работах [2,3]. Предполагается, что h, ν_{12}, B_{12}, B_{21}, C_{12}, C_{21}, A_{21}, ν_0 – заданные положительные числа, удовлетворяющие условию

$$B_{12}C_{21}-B_{21}C_{12}>0,$$

которое вытекает из соотношения

$$(B_{12}/B_{21})(C_{21}/C_{12})=\exp\big(h\nu_{12}/(kT)\big)>1.$$

Функции $n_e(x)$, $f(x)$, $x\in G$ и $\kappa(\nu)$, $\nu\in I$ – заданные, измеримые и почти всюду неотрицательные в своих областях определения. Предполагается, они удовлетворяют условиям

$$\mathrm{esssup}\,n_e(x)=n_e<\infty,\ \mathrm{esssup}\,f(x)=f^*<\infty,\ \mathrm{esssup}\,\kappa(\nu)=\kappa^*<\infty,\ \int_I\kappa(\nu)d\nu=1.$$

[1*] Работа поддержана научно-образовательным математическим центром "Математика технологий будущего" (Соглашение № 075-02-2020-1483/1**)**.

В [8] были получены строгие результаты о существовании и единственности решения краевой задачи (1)-(4), предложен и обоснован линеаризирующий итерационный алгоритм её решения.

Для построения диффузионного приближения для двухуровневой модели атома, представим интенсивность излучения ψ рядом по сферическим функциям, ограничиваясь двумя членами разложения:

$$\psi(x,\nu,\omega) \approx \psi_0(x,\nu) + 3\left(\vec{\omega}\cdot\vec{J}(x,\nu)\right).$$

Подставляя в (1) и находя нулевой и первый момент для полученного уравнения, получаем систему

$$\operatorname{div}\vec{J}(x,\nu) + h\nu_{12}\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}\big(B_{12}C_1(x) - B_{21}C_2(x)\big)\psi_0(x,\nu) = h\nu_{12}\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}A_{21}C_2(x), \quad (5)$$

$$\frac{1}{3}\operatorname{grad}\psi_0(x,\nu) + h\nu_{12}\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}\big(B_{12}C_1(x) - B_{21}C_2(x)\big)\vec{J} = 0. \quad (6)$$

Одно из возможных граничных условий, соответствующих (4), имеет вид

$$\left(\vec{J}(x,\nu)\cdot\vec{n}(x)\right) = \frac{2}{3}\psi_0(x,\nu), x \in \partial G, \nu \in I. \quad (7)$$

Из (5) – (6) получаем

$$-\frac{1}{3}\operatorname{div}\frac{4\pi\operatorname{grad}\psi_0(x,\nu)}{h\nu_{12}\kappa(\nu)\big(B_{12}C_1(x) - B_{21}C_2(x)\big)} + h\nu_{12}\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}\big(B_{12}C_1(x) - B_{21}C_2(x)\big)\psi_0(x,\nu) =$$

$$= h\nu_{12}\frac{\kappa(\nu)}{4\pi}A_{21}C_2(x),$$

$$2\psi_0(x,\nu) + \frac{4\pi}{h\nu_{12}\kappa(\nu)\big(B_{12}C_1(x) - B_{21}C_2(x)\big)}\frac{\partial\psi_0}{\partial n}(x,\nu) = 0, x \in \partial G, \nu \in I.$$

Диффузионное приближение для C_1, C_2 имеет, ввиду (2), (3), вид

$$C_1(x) = \frac{\left(A_{21} + C_{21}n_e(x) + B_{21}\int_I \kappa(\nu)\psi_0(x,\nu)d\nu\right)f(x)}{A_{21} + (C_{12} + C_{21})n_e(x) + (B_{12} + B_{21})\int_I \kappa(\nu)\psi_0(x,\nu)d\nu},$$

$$C_2(x) = \frac{\left(C_{12}n_e(x) + B_{12}\int_I \kappa(\nu)\psi_0(x,\nu)d\nu\right)f(x)}{A_{21} + (C_{12} + C_{21})n_e(x) + (B_{12} + B_{21})\int_I \kappa(\nu)\psi_0(x,\nu)d\nu}.$$

Следовательно,

$$B_{12}C_1(x) - B_{21}C_2(x) = \frac{\big(B_{12}A_{21} + (B_{12}C_{21} - B_{21}C_{12})n_e(x)\big)f(x)}{A_{21} + (C_{12} + C_{21})n_e(x) + (B_{12} + B_{21})\int_I \kappa(\nu)\psi_0(x,\nu)d\nu}.$$

Обозначим

$$P[\psi_0](x) = \frac{h\nu_{12}}{4\pi}\big(B_{12}C_1(x) - B_{21}C_2(x)\big) =$$

$$= \frac{h\nu_{12}}{4\pi}\frac{\big(B_{12}A_{21} + (B_{12}C_{21} - B_{21}C_{12})n_e(x)\big)f(x)}{A_{21} + (C_{12} + C_{21})n_e(x) + (B_{12} + B_{21})\int_I \kappa(\nu)\psi_0(x,\nu)d\nu},$$

$$F[\psi_0](x) = \frac{h\nu_{12}}{4\pi}A_{21}C_2(x) = \frac{h\nu_{12}}{4\pi}\frac{A_{21}\left(C_{12}n_e(x) + B_{12}\int_I \kappa(\nu)\psi_0(x,\nu)d\nu\right)f(x)}{A_{21} + (C_{12} + C_{21})n_e(x) + (B_{12} + B_{21})\int_I \kappa(\nu)\psi_0(x,\nu)d\nu}.$$

Таким образом, получаем следующую нелинейную краевую задачу для функции ψ_0:

$$-\frac{1}{3\kappa(\nu)}\operatorname{div}\frac{1}{P[\psi_0](x)}\operatorname{grad}\psi_0(x,\nu) + \kappa(\nu)P[\psi_0](x)\psi_0(x,\nu) = \kappa(\nu)F[\psi_0](x), \quad (8)$$

$$2\kappa(\nu)P[\psi_0](x)\psi_0(x,\nu) + \frac{\partial\psi_0}{\partial n}(x,\nu) = 0, x \in \partial G, \nu \in I. \quad (9)$$

Если $\psi_0(x,\nu) \geq 0$ при почти всех $x \in G$, $\nu \in I$, то

$$P[\psi_0](x) \leq P^*, F[\psi_0](x) \leq F^*,$$

где положительные постоянные P^*, F^* не зависят от ψ_0.

В основе исследования вопросов корректности поставленной задачи (8), (9) лежит изучение вспомогательной линейной задачи

$$-\mathrm{div}\frac{1}{P(x)}\mathrm{grad}\varphi(x) + 3\kappa^2 P(x)\varphi(x) = 3\kappa^2 F(x), \qquad (10)$$

$$2\kappa P(x)\varphi(x) + \frac{\partial\varphi}{\partial n}(x) = 0, x \in \partial G. \qquad (11)$$

Здесь P, F – заданные измеримые на G функции, $0 < P_* \leq P(x) \leq P^*$, $0 \leq F(x) \leq F^*$ для почти всех $x \in G$, $0 < \kappa \leq \kappa^*$.

Задача (10), (11) допускает следующую постановку: найти функцию $\varphi \in H^1(G)$, при всех $\xi \in H^1(G)$ удовлетворяющую равенству

$$\int_G \frac{1}{P}(\mathrm{grad}\varphi \cdot \mathrm{grad}\xi)dx + 2\kappa\int_{\partial G}\varphi\xi d\gamma + 3\kappa^2\int_G P\varphi\xi dx = 3\kappa^2\int_G F\xi dx.$$

Справедливо следующее утверждение.

Теорема. *Существует единственное решение $\varphi \in H^1(G)$ задачи* (10), (11). *При этом*

$$0 \leq \varphi(x) \leq M_1 \text{ для почти всех } x \in G,$$

$$\|\varphi\|_{H^1(G)} \leq M_2\kappa,$$

где положительные постоянные M_1 и M_2 зависят только от P^*, F^*, κ^* и области G.

Литература

1. Соболев В.В. Перенос лучистой энергии в атмосферах звезд и планет. М.: Гостехтеоритздат, 1956.
2. Михалас Д. Звездные атмосферы. М.: Мир, 1982.
3. Иванов В.В. Перенос излучения и спектры небесных тел. М.: Наука, 1969
4. Гермогенова Т.А. Локальные свойства решений уравнения переноса. М.: Наука, 1986.
5. Владимиров В.С. Математические задачи односкоростной теории переноса частиц // Тр. Мат. Ин-та им. В.А. Стеклова АН СССР. 1961. Вып. 61. С. 2-158.
6. Сушкевич Т.А. Математические модели переноса излучения. М.: БИНОМ, 2006.
7. Белл Д., Глесстон С.Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат,1974.
8. Калинин А.В.,Морозов С.Ф. Об одной нелинейной краевой задаче теории переноса излучения // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1990. Т. 30. С. 1071-1080.

КЛАССИФИКАЦИЯ ФУНКЦИЙ СРЕДСТВАМИ РЕКУРРЕНТНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ[1*]

Д.А. Карчков, Е.А. Козинов, К.А. Баркалов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

При решении задач оптимизации вида «черный ящик» неизвестные свойства целевой функции не позволяют заранее выбрать эффективный метод решения задачи. В ситуации априорного незнания поведения задачи, необходимо на основе малого числа значений целевой функции выявить ее основные свойства. В работе рассматривается применение рекуррентных нейронных сетей для определения принадлежности функции к одному из классов: унимодальных и многоэкстремальных.

Ключевые слова: нейронные сети, алгоритм глобального поиска, классификация функций, рекуррентные нейронные сети, LSTM.

1. Введение

Сложность задачи поиска глобального оптимума для функций, представляющих собой «чёрный ящик», состоит в априорном отсутствии информации о свойствах исходной задачи. Сбор информации в описанных условиях, базирующийся на расчёте значений функции, может быть вычислительно дорогим, что заставляет исследователя выбирать более экономную стратегию в определении её особенностей.

Для решения большинства задач глобальной оптимизации важную роль играет число локальных оптимумов. Такая характеристика функции определяет выбор конкретного метода решения, так как порой нецелесообразно использовать глобальный поиск для решения унимодальных задач. Более того, адаптированные под многоэкстремальные задачи методы сильно уступают в производительности локальным при работе с функциями, имеющими единственный локальный оптимум, совпадающий с глобальным. Таким образом, эффективность решения задачи зависит от определения принадлежности функции к одному из классов: унимодальная или многоэкстремальная.

Для организации сбора поисковой информации о функции был выбран алгоритм глобального поиска (АГП), разработанный в нижегородском государственном университете имени Николая Ивановича Лобачевского, изначально предложенный Стронгиным Р.Г. для решения задач многоэкстремальной оптимизации [1]. Метод позволяет быстро локализировать области локальных минимумов и гарантирует сходимость в абсолютный минимум на заданной области определения целевой функции, при соблюдения обобщённого условия Липшица. На выходе метод формирует массив точек, между которыми наиболее вероятно нахождение абсолютного минимума. Основываясь на расположении данных точек, можно рассуждать о характере функции в целом.

Существует большое количество функций, запуск алгоритма глобального поиска на которых позволит определить их принадлежность к одному из представленных классов. Не используя сложных алгоритмов, мы можем определить по точкам АГП, сформированных на параболе, её принадлежность к классу унимодальных функций. Но существует и много других унимодальных функций, с более сложным поведением, что сильно усложняет разработку универсального классифицирующего алгоритма. Оптимальным выходом из сложившейся ситуации является использование методов машинного обучения, которые хорошо показали себя в задачах классификации. В рамках работы исследована возможность применения рекуррентных нейронных сетей с архитектурой «Long short-term memory» (долгой краткосрочной памяти) [2] для задач классификации функции по набору точек, сформированных алгоритмом глобального поиска.

[1*] Исследование выполнено при поддержке МинОбрНауки РФ, соглашение № 075-15-2020-808.

2. Разработка классификатора

Разработка метода для классификации функций на унимодальные и многоэкстремальные включает в себя три основных этапа:

1. Определения механизма подготовки данных;
2. Формирование обучающей выборки;
3. Настройка и обучение нейронной сети.

2.1. Подготовка данных

Основой обучающей выборки для классификатора служат точки, полученные в результате работы алгоритма глобального поиска. Алгоритм позволяет находить абсолютный минимум функции на отрезке и основан на вероятностном подходе.

На основе набора известных значений функции в точках отрезка ищется интервал между соседними точками, на котором нахождение абсолютного минимума наиболее вероятно. На этом интервале берется точка, соответствующая математическому ожиданию положения минимума, а затем вычисляется значение функции в ней. Точка добавляется в список известных значений, и происходит переход к следующей итерации. У алгоритма существует два критерия остановки:

- количество итераций;
- расстояние между точками итераций меньше заданного.

Существует единственное требование к целевой функции $g(x)$ – это выполнение обобщённого условия Липшица на всём интервале поиска:

$$|g(x_1) - g(x_2)| \leq K\,\rho(x_1, x_2),$$

где x_1 и x_2 – любые числа из интервала поиска, K – константа, а ρ – метрика расстояния между точек x_1 и x_2.

В качестве критерия остановки АГП используем выход по достижению определённого количества итераций. Для организации обучающей выборки, будем использовать точки, полученные после первых 20 итераций алгоритма. Число итераций выбрано экспериментально, и может быть изменена. В случае, если процент верных предсказаний будет высоким, то есть возможность уменьшить количество рассматриваемых точек.

2.2. Организация обучающей выборки

В качестве обучающей выборки будем использовать точки алгоритма глобального поиска, полученные при исследовании четырёх видов функций: парабол, унимодальных кубических сплайнов, функций Хилла, функций Шекеля.

2.2.1 Генерация парабол

Для генерации парабол воспользуемся уравнением квадратичной функции, представленной формулой:

$$f(x) = K(x - A)^2$$

Параметр K отвечает за степень отклонения каждой точки, лежащей на ветке параболы от её директрисы, и варьируется от 0.1 до 100. Параметр A отвечает за сдвиг параболы вдоль оси абсцисс, и принадлежит отрезку $[-1; 2]$. Область определения функции ограничим отрезком $[0; 1]$. После генерации параболы согласно описанным значениям параметров, запускаем АГП и сохраняем в обучающую выборку полученные после работы алгоритма точки. На рис. 1 проиллюстрированы параболы и сформированные алгоритмом точки. Таким образом, сгенерируем для обучающей выборки шестьдесят тысяч примеров точек АГП, полученных на параболах.

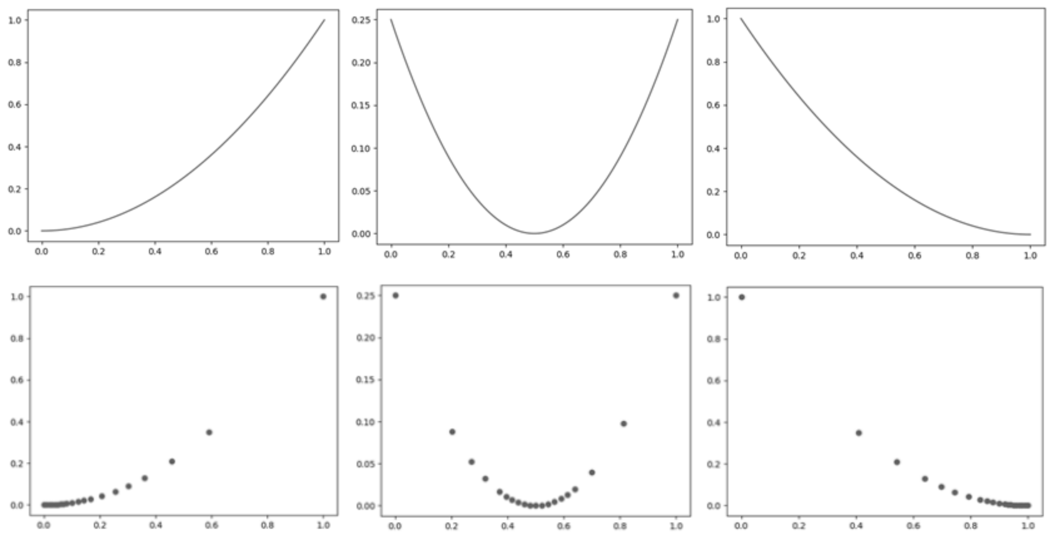


Рис. 1. Графики парабол и соответствующих им точек алгоритма глобального поиска

2.2.2 Генерация унимодальных функций кубическим сплайном

Для повышения представительства унимодальных функций в обучающей выборки воспользуемся кубическими сплайнами. В таком случае, сгенерированные функции (рис.2) будут иметь отличительные особенности, достижение которых на квадратичных функциях являются проблематичным.

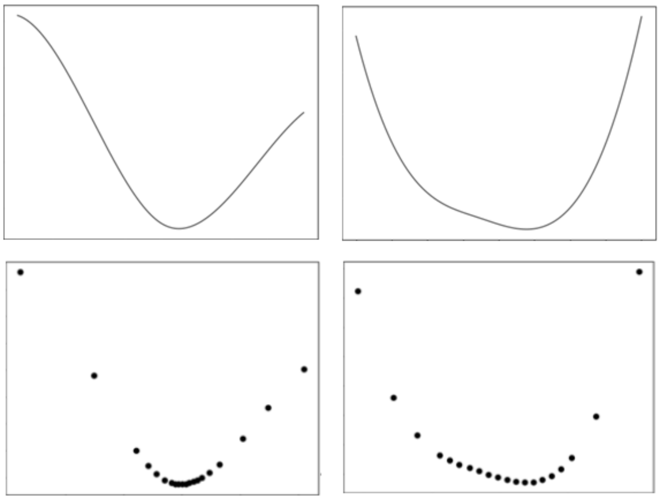


Рис. 2. Графики унимодальных функций, сконструированных с помощью кубических сплайнов и соответствующие им точки АГП

Генерация унимодальных на базе кубических сплайнов описывается следующим алгоритмом:

1. Область определения функции, представляемой кубическим сплайном, ограничена отрезком $[-10; 10]$. Область значений функции ограничим отрезком $[0; 10]$;
2. Для построения сплайна сгенерируем 5 точек;
3. Центральная точка (Centre) выбирается случайным образом из диапазона $[-4; 4]$;
4. Следующие точки генерируются случайным образом слева и справа от центральной точки. Левая точка (MidLeft) выбирается случайно из области $[-7..\mathrm{Centre.X}; \mathrm{Centre.Y}..5]$, а правая (MidRight) из области $[\mathrm{Centre.X}..7; \mathrm{Centre.Y}..5]$;
5. Последние две точки располагаем на границе области $[-10..10; 0..10]$. Левую точку располагаем случайным образом в области $[-10; \mathrm{MidLeft.Y}..10]$, а правую точку в области $[10; \mathrm{MidRight.Y}..10]$;
6. На основе полученных точек, строим кубический сплайн;

7. Проверка полученного кубического сплайна на сохранения свойства унимодальности; В случае отсутствия свойств унимодальности у сформированного сплайна повторяем процедуру построения сплайна;
8. В случае сохранения свойств унимодальности, на полученном сплайне запускаем алгоритм глобального поиска;
9. Полученные точки добавляем к обучающей выборке.

Таким образом, было сформировано 20 тысяч обучающих примеров, представляющих класс унимодальных функций.

2.2.3 Генерация многоэкстремальных функций

Для генерации обучающих примеров класса многоэкстремальных функций воспользуемся популярными тестовыми задачами. Функции Хилла представляются уравнением

$$f(x) = A_0 + \sum_{i=1}^{14}(A_i \sin(2i\pi x) + B_i \cos(2i\pi x)),$$

где A_i и B_i выбираются случайно из отрезка $[-1; 1]$. Область определения функции ограничена отрезком $[0; 1]$. Варьируя предел суммирования, появляется возможность контроля числа локальных оптимумов: чем он меньше, тем меньше локальных оптимумов наблюдается в функции.

Функции Шекеля описываются уравнением

$$f(x) = -\sum_{i=1}^{10}\frac{1}{K_i(x - A_i)^2 + C_i},$$

где K_i, A_i и C_i выбираются случайно, при чём K_i находится в отрезке $[5; 25]$, $A_i \in [0; 10]$, $C_i \in [1; 1.2]$. Область определения ограничена отрезком $[0; 10]$. Аналогично функциям Хилла, варьируя предел суммирования, можно влиять на количество локальных оптимумов. В обучающую выборку было добавлено 60 тысяч примеров каждого вида функций.

Таким образом, обучающая выборка состоит из двухсот тысяч примеров унимодальных и многоэкстремальных функций.

2.3. Обучение модели

Перед этапом обучения модели необходимо провести нормализацию обучающей выборки. Для этого необходимо пересчитать все значения в выборке по формулам

$$X_i = \frac{X_i - X_{mean}}{X_{std}},\ Y_i = \frac{Y_i - Y_{mean}}{Y_{std}},$$

где X_{mean} и Y_{mean} – среднее арифметическое значение координат X и Y в выборке, а X_{std} и Y_{std} – среднеквадратичное отклонение значение координаты X и Y соответственно.

Для создания классификатора используется такой вид нейронных сетей, как рекуррентные. В таких сетях связи между внутренними элементами структуры образуют направленную последовательность, благодаря чему возможно обрабатывать последовательности данных. Среди рекуррентных сетей выделяют архитектуру LSTM (Long short-term memory), как хорошо адаптированную для задач классификации временных рядов, события в которых разделены временными лагами с неопределённой продолжительностью и границами.

Для организации эффективного обучения тренировочный dataset был загружен в объект типа DataLoader, для контроля размера подающейся в модель части данных (batch_size = 1024) и перемешивания данных по всем частям после каждой итерации обучения (shuffle = True). В качестве оптимизатора для нейронной сети выбран алгоритм Adam (adaptive moment estimation), являющийся наиболее эффективным для задач классификации [3]. Функция потерь для данной модели выбрана BCEWithLogitsLoss, являющаяся более стабильной в числовом отношении чем применение простой сигмоиды [4].

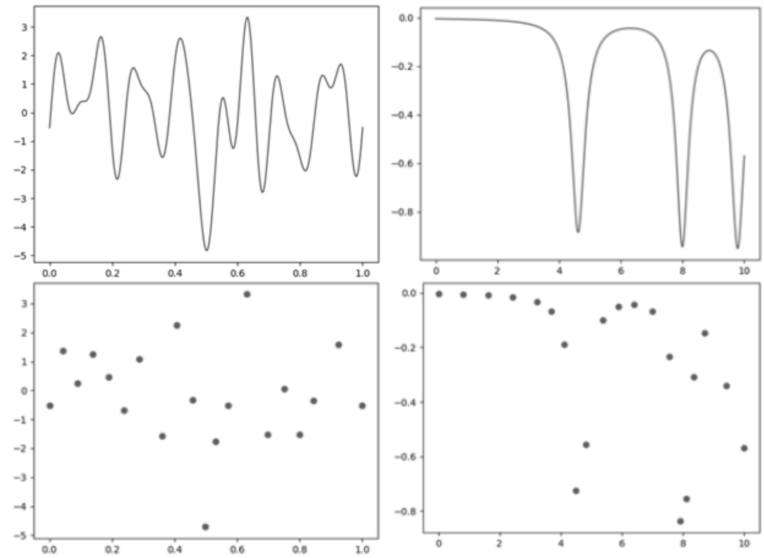


Рис 3. График функция Хилла (справа) и функция Шекеля (слева) с точками, найденные с помощью АГП

В ходе проведения обучения модели на языке Python стандартными средствами библиотеки PyTorch [5], при описанных выше параметрах, наблюдалась остановка уменьшения значения функции потерь, и, как следствие, модель прекращала обучаться. Решение проблемы состоит в доработке архитектуры нейронной сети, путём создания трёх дополнительных LSTM слоёв с контролем выхода нейронной сети. Схематически архитектура представлена на рис. 4.

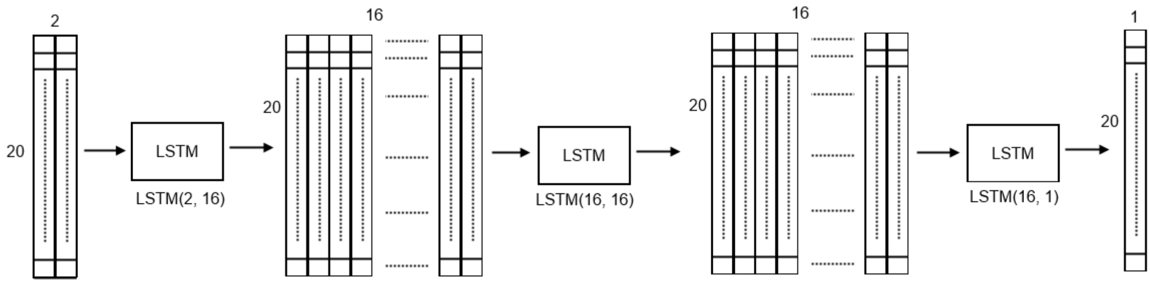


Рис 4. Архитектура классифицирующей нейронной сети с использованием LSTM слоёв

Для проверки качества предсказаний модели, исходная обучающая выборка была разделена на обучающую и тестовую выборку в соотношении 80% на 20%. После обучения, точность предсказаний модели на тестовой выборке достигло 99,95%.

2.4. Тестирование модели

Тестирование модели проводилось на подготовленных наборах из 10, 15 и 20 точках, полученных после работы алгоритма глобального поиска на выборке из ста функций Шекеля и Хилла. Таким же образом для тестирования модели были подготовлены двадцать функций Хансена [6]. Результаты по классификации функций разработанной моделью представлены в таблице 1. При классификации сгенерированных парабол, модель показала стопроцентные результат, определив параболы без ошибок.

3. Заключение

Таким образом, в статье описывается рабочая методика позволяющая отнести функцию к одному из классов: унимодальных или многоэкстремальных – в условиях нехватки поисковой информации о задаче. Предположение о принадлежности функции к конкретному классу позволит выбирать метод поиска глобального оптимума, что положительно скажется на производительности вычислений.

Таблица 1. Результат классификации моделью многоэкстремальных функций

Класс тестовых функций	**Количество точек АГП**	**Процент верных предсказаний**
Хилл	10	98,29
Хилл	15	100
Хилл	20	100
Шекель	10	99,1
Шекель	15	100
Шекель	20	100
Хансен	10	95
Хансен	15	95
Хансен	20	100

Литература

1. Стронгин Р.Г. Численные методы в многоэкстремальных задачах (информационно-статистические алгоритмы) // Р.Г. Стронгин. – М.: Наука, 1978
2. Graves, M. Liwicki, S. Fernandez, R. Bertolami, H. Bunke, J. Schmidhuber. A Novel Connectionist System for Improved Unconstrained Handwriting Recognition. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol. 31, no. 5, 2009.
3. Zhang Z. Improved adam optimizer for deep neural networks //2018 IEEE/ACM 26th International Symposium on Quality of Service (IWQoS). – IEEE, 2018. – С. 1-2.
4. Sapora S., Lazarescu B., Lolov C. Absit invidia verbo: Comparing deep learning methods for offensive language //arXiv preprint arXiv:1903.05929. – 2019.
5. Paszke A. et al. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library //Advances in neural information processing systems. – 2019. – Т. 32. – С. 8026-8037.
6. Hansen P., Jaumard B., Lu S. H. Global optimization of univariate Lipschitz functions: II. New algorithms and computational comparison //Mathematical programming. – 1992. – Т. 55. – №. 1. – С. 273-292.

РЕАЛИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО АЛГОРИТМА ГЛОБАЛЬНОГО ПОИСКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАБОРА ИНСТРУМЕНТОВ INTEL ONEAPI[1*]

Я.В. Кольтюшкина, И.Г. Лебедев

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В данной статье будут рассмотрены параллельные алгоритмы решения задач многоэкстремальной оптимизации. Целевая функция является липшицевой с заранее неизвестной константой. Для реализации многомерного случая используется подход, основанный на идее редукции размерности с помощью кривой Пеано, непрерывно и однозначно отображающей отрезок вещественной оси на n-мерный куб. В качестве инструментов для распараллеливания был выбран Intel OneApi, позволяющий писать один код для разных устройств.

Ключевые слова: глобальная оптимизация, многоэкстремальные функции, редукция размерности, характеристические алгоритмы, параллельные алгоритмы.

1. Постановка задачи

В работе рассматривается задача поиска глобального минимума N-мерной функции $\varphi(y)$ в гиперинтервале $D = \{y \in R^N: a_i \leq y_i \leq b_i, 1 \leq i \leq N\}$. Предполагается, что функция удовлетворяет условию Липшица с априори неизвестной константой L.

$$\varphi(y^*) = min\{\varphi(y): y \in D\}, \tag{1}$$

$$|\varphi(y_1) - \varphi(y_2)| \leq L||y_1 - y_2||, y_1, y_2 \in D, \tag{2}$$

$$L \geq \frac{|\varphi(y_1) - \varphi(y_2)|}{\left||y_1 - y_2|\right|}, \;\; 0 < L < \infty. \tag{3}$$

Для сведения многомерной задачи (1) к одномерной, используем редукцию размерности с помощью кривой Пеано [1, 2] $y(x)$, непрерывно и однозначно отображающей отрезок вещественной оси [0,1] на n-мерный куб:

$$\{y \in R^N: -2^{-1} \leq y_i \leq 2^{-1}, \;\; 1 \leq i \leq N\} = \{y(x): 0 \leq x \leq 1\}. \tag{4}$$

$$\varphi(y^*) = \varphi(y(x^*)) = \min\{\varphi\big(y(x)\big): x \in [0,1]\}. \tag{5}$$

Важным свойством является сохранение ограниченности относительных разностей функции: если функция $\varphi(y)$ в области D удовлетворяла условию Липшица, то функция $\varphi(y(x))$ на интервале [0,1] будет удовлетворять равномерному условию Гельдера

$$|\varphi(y(x_1)) - \varphi(y(x_2))| \leq H\, |x_1 - x_2|^{\frac{1}{N}}, x_1, x \in [0, 1], \tag{6}$$

$$H = 4Ld\sqrt{N}, d = max\{\, b_i - a_i: 1 \leq i \leq N\}. \tag{7}$$

Поэтому, не ограничивая общности, можно рассматривать минимизацию одномерной функции $f(x) = \varphi\big(y(x)\big), \; x \in [0, 1]$, удовлетворяющей условию Гельдера.

В ходе работы алгоритма строится последовательность точек x^k, где в каждой вычисляется значение минимизируемой функции $z^k = f(x^k)$. Тогда процесс вычисления значения этой функции, которые включает в себя и построение образа $y^k = y(x^k)$, называется испытание, а (x^k, z^k) – результат испытания. Для обеспечения параллельности, в ходе одной итерации рабо-

[1*] Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 19-07-00242.

ты метода проводится P испытаний одновременно, где $P \geq 1$. Введём обозначение $k(n)$ - общее число испытаний, выполненных после n параллельных итераций.

0 этап. Сначала проводим испытание в произвольной внутренней точке $x^1 \in [0,1]$. После выполнения $n \geq 1$ итераций, и соответствующего им числа $k = k(n)$ испытаний в точках $x^i, 1 \leq i \leq k$, точки $x^{k+1}, \dots, x^{k+p}$ испытаний следующей ($n+1$) итерации определяются следующим образом:

1 этап. Упорядочить граничные точки и точки уже проведенных испытаний по координате:

$$0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_{k+1} = 1 \tag{8}$$

2 этап. Вычислить оценку M для неизвестной константы Липшица L:

$$\mu = max\left\{\frac{|z_i - z_{i-1}|}{\Delta_i}, i = 1, \dots, k\right\}, M = \begin{cases} r\mu, \mu > 0, \\ 1, \mu = 0, \end{cases} \tag{9}$$

где $r > 1$ заданный параметр метода, $\Delta_i = (x_i - x_{i-1})^{1/N}$.

3 этап. Для каждого интервала (x_{i-1}, x_i), $0 < i < k+2$, вычислить характеристику $R(i)$,

$$R(1) = 2\Delta_1 - 4\frac{z_1}{M} \tag{10}$$

$$R(k+1) = 2\Delta_{k+1} - 4\frac{z_k}{M} \tag{11}$$

$$R(i) = \Delta_i + \frac{(z_i - z_{i-1})^2}{M^2\Delta_i} - 2\frac{z_i + z_{i-1}}{M}, 1 < i < k+1 \tag{12}$$

4 этап. Упорядочить характеристики $R(i), 1 \leq i \leq k+1$ в порядке убывания

$$R(t_1) \geq R(t_2) \geq \ldots \geq R(t_k) \geq R(t_{k+1}) \tag{13}$$

и выбрать P наибольших из них с номерами интервалов $t_j, 1 \leq j \leq P$.

5 этап. В точках $x^{k+j}, 1 \leq j \leq P$ провести новые испытания:

$$x^{k+j} = \frac{x_{t_j} + x_{t_{j-1}}}{2}, t_j = 1, t_j = k+1 \tag{14}$$

$$x^{k+1} = \frac{x_{t_j} + x_{t_{j-1}}}{2} - sign\left(z_{t_j} - z_{t_{j-1}}\right)\frac{1}{2r}\left[\frac{\left|z_{t_j} - z_{t_{j-1}}\right|}{\mu}\right]^N, \quad 1 < t_j < k+1 \tag{15}$$

Критерии остановки: по длине интервала, когда выполняется условие $\Delta_{t_j} \leq \varepsilon$ для какого-то номера $t_j, 1 \leq j \leq P$, или $\left|x_{t_j} - x^*\right| < \varepsilon$, $t_j, 1 \leq j \leq P$, где x^* – точка глобального минимума, если она известна нам заранее. В качестве оценки глобально-оптимального решения задачи (1) выбираются значения

$$f_k^* = \min_{1 \leq i \leq k} f(x^i), \; x_k^* = \arg\min_{1 \leq i \leq k} f(x^i), \tag{16}$$

2. Реализация с использованием Intel OneApi

Для задач многоэкстремальной оптимизации свойственна высокая трудоёмкость численного решения, связанная с экспоненциальным ростом вычислительных затрат при увеличении размерности. Однако быстрое развитие вычислительных средств, в частности, распараллеливание, предоставляет новые возможности для решения оптимизационных проблем. Вместе с этим появляется задача эффективного распараллеливания и разнообразие типов современных ускорителей, а также средств разработки для работы с ними открывает нам немалый выбор. Но если есть необходимость запуска одного и того же проекта на различных ускорителях, то при его создании можно столкнуться с проблемами несовместимости разных средств разработки и разными особенностями архитектуры. В большинстве случаев, если мы остановимся на какой-то одной вычислительной архитектуре, то для запуска на абсолютно другой сначала потребуется адаптировать код, а, возможно, и написать его с нуля, используя иные инструменты. В итоге, появится еще один проект, и поддерживать необходимо будет сразу несколько программ, использующих разные технологии.

Одним из вариантов решения этой проблемы является использование инструментов Intel OneApi. Это позволяет нам написав код один раз, в дальнейшем запускать его на различных устройствах.

Для распараллеливания поставленной выше задачи глобальной оптимизации актуальна реализация с применением OneApi одновременного вычисления сразу нескольких значений целевой функции. Соответственно, процедура вычисления значения функции реализована с этой технологией. При этом имеется возможность выбора, где будет проходить этот процесс. Остальные части алгоритма должны выполняться последовательно, к тому же они требуют работы с большим объемом уже имеющейся поисковой информации, поэтому имеет место реализация этих частей на CPU.

Таким образом, этапы 1-4 алгоритма, представленного в постановке задачи, выполняются на CPU. Координаты P новых точек испытания передаются через промежуточный буфер на выбранное для исполнения параллельной части кода устройство (CPU, GPU, FPGA ...). После выполнения вычислений в новых точках, соответствующие им значения функций через промежуточный буфер передаются на CPU.

3. Результаты численных экспериментов

Эксперименты проводились на ПК со следующими параметрами:

- Операционная система: Windows 10
- Процессор: Intel(R) Core™ i5-10600 CPU @ 3.30 GHz
- Версия Visual Studio: 2019

В качестве целевой функции выбрана функция Гришагина:

$$\varphi(y) = \left\{ \left(\sum_{i=1}^{7} \sum_{j=1}^{7} A_{ij} a_{ij}(x) + B_{ij} b_{ij}(x) \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{7} \sum_{j=1}^{7} C_{ij} a_{ij}(x) + D_{ij} b_{ij}(x) \right)^2 \right\}^{1/2} \quad (17)$$

где $a_{ij}(x) = \sin(i\pi x_1)\sin(j\pi x_2)$, $b_{ij}(x) = \cos(i\pi x_1)\cos(j\pi x_2)$, коэффициенты A_{ij}, B_{ij}, C_{ij}, D_{ij} – равномерно распределенные величины на отрезке [-1, 1]. Эксперименты были проведены на 100 тестовых задачах с параметрами r=3, $\varepsilon = 10^{-2}$ и $\varepsilon = 10^{-3}$, параметр построения развертки m=10. Число параллельно выполняемых испытаний P=2, P=4, P=8. На рис. 2 представлены линии уровня функции и отмечены точки проводимых испытаний при P=4.

Эксперименты проводились с использованием Intel(R) FPGA Emulation Device.

Таблица 2. Среднее число итераций при различном числе выполняемых испытаний, $\varepsilon = 0.01$

	P=1	P=2	P=4	P=8
Среднее число итераций	165,07	91,23	48,63	40

Таблица 3. Среднее число итераций при различном числе выполняемых испытаний, ε=0.001

	P=1	P=2	P=4	P=8
Среднее число итераций	552,19	297,23	161,84	79,4

В таблицах 1, 2 представлено среднее число итераций при различном числе выполняемых испытаний и при различной точности ε. Из них мы можем отметить, что при увеличении числа P среднее число итераций уменьшается пропорционально ему.

Заключение

Исходя из вышеизложенного, отметим, что написание одной программы, которую можно запустить под различные устройства, сильно упрощает разработку. Используя специальные инструменты, в рамках данной работы это Intel OneApi, удается избежать портирования и проблем, связанных с ним. Это достаточно актуально в настоящее время, поскольку изменение архитектуры устройств, их усовершенствование, появление новых технологий с каждым годом набирает всё больший темп, что только усложняет процесс переноса программ.

В данной работе рассмотрен параллельный алгоритм решения задач многомерной многоэкстремальной оптимизации и его реализация с использованием инструментов OneApi. Данный алгоритм разработан в рамках информационно-статистического подхода. Эксперименты подтвердили целесообразность использования распараллеливания, поскольку наблюдается линейное ускорение.

Литература

1. Sergeyev, Ya.D. Introduction to global optimization exploiting space-filling curves / Ya.D. Sergeyev, R.G. Strongin, D. Lera – Springer, 2013. – 125 p.
2. Strongin, R.G. Global Optimization with Non-convex Constraints. Sequential and Parallel Algorithms / R.G. Strongin, Ya.D. Sergeyev – Kluwer Academic Publishers, 2000. – 704 p.
3. Pinter (Ed.), J.D. Global Optimization: Scientific and Engineering Case Studies / J.D. Pinter – Springer, 2006. – 546 p.
4. Paulavicius, R. Parallel branch and bound for global optimization with combination of Lipschitz bounds / R. Paulavicius, J. Zilinskas and A. Grothey // Optimization Methods & Software. – 2011. – Vol. 26, No. 3. – P. 487–498.
5. Стронгин, Р.Г. Параллельные вычисления в задачах глобальной оптимизации / Р.Г. Стронгин, В.П. Гергель, В.А. Гришагин, К.А. Баркалов – М.: Издательство Московского университета, 2013. – 280 с.
6. Barkalov, K.A. A global optimization technique with an adaptive order of checking for constraints / K.A. Barkalov, R.G. Strongin // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2002. – Vol. 42, No. 9. – P. 1289-1300.
7. Gergel, V.P. A method of using derivatives in the minimization of multiextremum functions / V.P. Gergel // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 1996. – Vol. 36, No. 6. – P. 729 – 742.
8. Gergel, V.P. A global optimization algorithm for multivariate functions with lipschitzian first derivatives / V.P. Gergel // Journal of Global Optimization. – 1997. – Vol. 10, No. 3. – P. 257-281.
9. Сергеев, Я.Д. Диагональные методы глобальной оптимизации / Я.Д. Сергеев, Д.Е. Квасов – М.: Физматлит, 2008. – 352 с.

ИНВАРИАНТЫ НЕАЛЬТЕРНИРУЮЩИХ БИЛИНЕЙНЫХ ФОРМ НАД ПОЛЕМ ХАРАКТЕРИСТИКИ 2[1*]

А.В. Кондратьева, М.И. Кузнецов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Пусть V – векторное пространство над совершенным полем K характеристики 2, $F: 0 = V_0 \subseteq V_1 \subseteq \cdots \subseteq V_s = V$ – флаг пространства V, b – неальтернирующая билинейная форма на V. Напомним, что билинейная симметрическая форма b на V называется неальтернирующей, если $b(v,v) \neq 0$ для некоторого $v \in V$. Для подпространства $U \subset V$ через $U^{\perp}$ обозначается ортогональное дополнение к U относительно b. Две тройки (V,F,b) и (V',F',b') называются эквивалентными, если существует изоморфизм $\varphi: V \to V'$, переводящий флаг F в F', а форму b в форму b'.

Авторы построили полную систему инвариантов тройки (V,F,b), т.е. такую систему чисел, по которым тройка восстанавливается однозначно с точностью до эквивалентности. Для случая кососимметрических форм над полем характеристики $p > 0$ такая система инвариантов построена в работе [1] (см. инварианты n_{qr} ниже), однако аналогичные инварианты, построенные для тройки с неальтернирующей формой b, полной системы не образуют. Чтобы получить полную систему инвариантов тройки (V,F,b) с неальтернирующей формой b, мы дополним инварианты n_{qr} инвариантами n_{qr}^1.

В дальнейшем полагаем, что b – невырожденная форма. Инварианты строятся следующим образом. Рассмотрим бифильтрацию $\{V_{ij}\}, V_{ij} = V_i \cap V_{j-1}^{\perp}$. Очевидно, подпространство V_{qr} содержит подпространства $V_{q,r+1}$ и $V_{q-1,r}$. Положим

$$\Phi_{rq} = V_{qr}/\left(V_{q,r+1} + V_{q-1,r}\right),$$
$$n_{qr} = dim\Phi_{qr},, q, r \geq 1.$$

Согласно [1] форма b индуцирует невырожденное спаривание $\bar{b}$:

$$\bar{b}: \Phi_{qr} \times \Phi_{rq} \to K$$

Пусть V^0 – гиперплоскость изотропных векторов в V. Положим

$$V_{qr}^o = V_{qr} \cap V^0, \Phi_{qr}^0 = \pi\left(V_{qr}^o\right),$$

где $\pi: V_{qr} \to \Phi_{qr}$ – каноническая проекция. По определению

$$n_{qr}^1 = dim\Phi_{qr} - dim\Phi_{qr}^0$$

Очевидно, $n_{qr}^1 = 0$ или 1 и $n_{qr}^1 = 0$, при $q < r$. Авторы доказали, что числа $n_{qr}, n_{qr}^1, q, r \geq 1$ образуют полную систему инвариантов тройки (V,F,b). Построен алгоритм нахождения базиса $\{e_1, \dots, e_n\}$ пространства V, согласованного с флагом, относительно которого матрица формы b имеет вид $diag(M_0, \dots, M_0, M_1, \dots, M_1, 1_s)$, где $M_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, 1_s$ – единичная матрица порядка s. Здесь количество блоков M_1 равно $\sum_{q<r} n_{rq}^1$ и $s = \sum_q n_{qq} n_{qq}^1$.

Отметим, что нормальный вид неальтернирующей формы над полем характеристики $p \neq 2$ можно получить с помощью треугольных преобразований, как это сделано в [2]. Более подробную информацию об инвариантах n_{qr}, n_{qr}^1, а также алгоритм нахождения базиса, согласованного с флагом, относительно которого, форма имеет нормальный вид, можно найти в [3].

Литература

1. Скрябин С.М. Классификация гамильтоновых форм над алгебрами разделенных степеней // Матем. Сборник. 1990. № 181(1). С. 114–133.
2. Ходж В., Пидо Д. Методы алгебраической геометрии. Т.1. Москва: Изд-во иностранной литературы, 1954. 461 с.

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект 0729-2020-0055).

3. Kuznetsov M.I., Kondrateva A.V., Chebochko N.G. Non-alternating Hamiltonian Lie algebras in characteristic 2. I. URL: http://arxiv.org/abs/1812.11213 (дата обращения: 2018).

АНСАМБЛЬ ВОЗБУЖДАЮЩЕ СВЯЗАННЫХ НЕИДЕНТИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ АДЛЕРА[1*]

А.Г. Коротков, Т.А. Леванова, Г.В. Осипов

Нижегородский государственный университет им. Лобачевского

В данной работе предложена простая модель нейроноподобного ансамбля, состоящего из двух возбудимых неидентичных элементов, моделируемых фазовым уравнением Адлера. В исследуемой модели обнаружены и исследованы различные режимы нейроноподобной активности.

Ключевые слова: уравнение Адлера, предельный цикл, бифуркация, нейронный ансамбль.

1. Введение

Синхронизация в мозге и периферической нервной системе играет важную роль в реализации многих физиологических механизмах и функций. На уровне нейронных структур такой контроль обеспечивается небольшими нейронными контурами, называемыми центральными генераторами ритмов. Они, в свою очередь, состоят из т.н. полуцентров – простых ансамблей из двух нейронов, связанных химическими синапсами [1].

Математически полуцентр может быть описан с помощью широкого диапазона моделей, как биофизически точных [2], так и феноменологических [3]. В первом случае необходимо максимально подробно учитывать различные биологические данные и биофизические принципы. Модели второго класса воспроизводят конкретное, экспериментально наблюдаемое биологическое явление без учета специфических биологических особенностей. Ранее в работе [4] была представлена простую модель полуцентра, состоящего из двух идентичных связанных идентичных фазовых элементов, и показано, что, несмотря на свою простоту, она может генерировать все основные временные паттерны, типичные для полуцентра.

В данной работе рассмотрено, как неидентичность элементов влияет на режимы нейроноподобной активности, генерируемые полуцентром, состоящим из двух возбуждающе связанных неидентичных фазовых осцилляторов.

2. Модель

Модель одного элемента имеет вид $\dot{\varphi} = \gamma - \sin\varphi$. Фазовым пространством системы является окружность. При $\gamma < 1$ в фазовом пространстве системы существуют два состояния равновесия: $\varphi_{01} = \arcsin\gamma$ (устойчивое) и $\varphi_{02} = \pi - \arcsin\gamma$ (неустойчивое). При $\gamma > 1$ состояний равновесия нет. При $\gamma = 1$ происходит касательная бифуркация.

Математической моделью ансамбля двух элементов будет следующая система дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{\varphi_1} = \gamma - \sin\varphi_1 + d\cdot I(\varphi_2) \\ \dot{\varphi_2} = \gamma + \Delta - \sin\varphi_2 + d\cdot I(\varphi_1) \end{cases} \qquad (1)$$

где $I(\varphi) = \frac{1}{1+\exp(k(\cos\frac{\delta}{2} - \cos(\varphi - \alpha - \frac{\delta}{2}))}$ – функция, задающая связь между элементами.

Функция $I(\varphi)$ является гладкой функцией, хорошо аппроксимирующей кусочно-постоянную функцию $\tilde{I}(\varphi) = \begin{cases} 1, \text{если } \alpha < \varphi < \alpha + \delta \\ 0, \text{если } \varphi \le \alpha \text{ или } \varphi \ge \alpha + \delta \end{cases}$. Погрешность аппроксимации уменьшается при увеличении коэффициента k. График зависимости этой функции от фазы φ приведён на рисунке 1. Такая функция связи использовалась в работах [5-7].

Фазовым пространством системы (1) является тор.

[1*] Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 19-12-00367.

Примем $\gamma = 0.95$, $k = 50$, $\alpha = \sin^{-1}\gamma - \frac{\delta}{2}$. Будем исследовать влияние параметров Δ, δ $(0 \le \delta < 2\pi)$ и d $(d > 0$; этот параметр характеризует силу связи между элементами; так как он положителен и $\gamma < 1$, то связь возбуждающая) на динамику ансамбля.

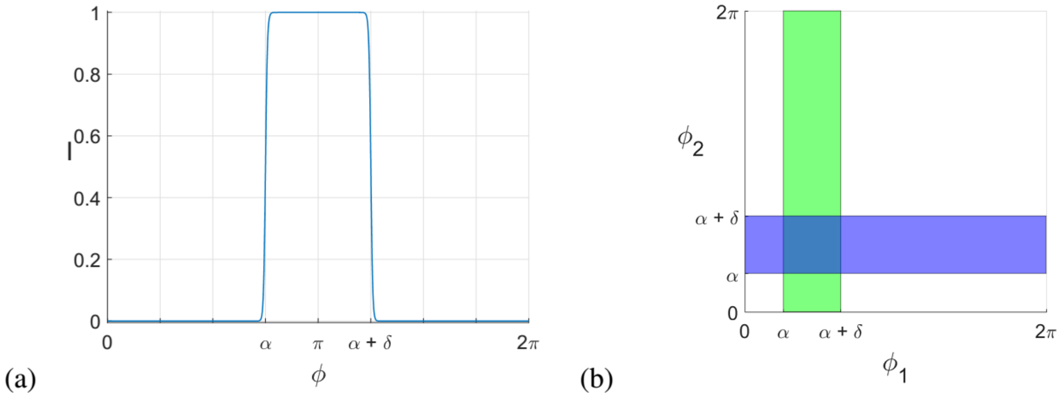
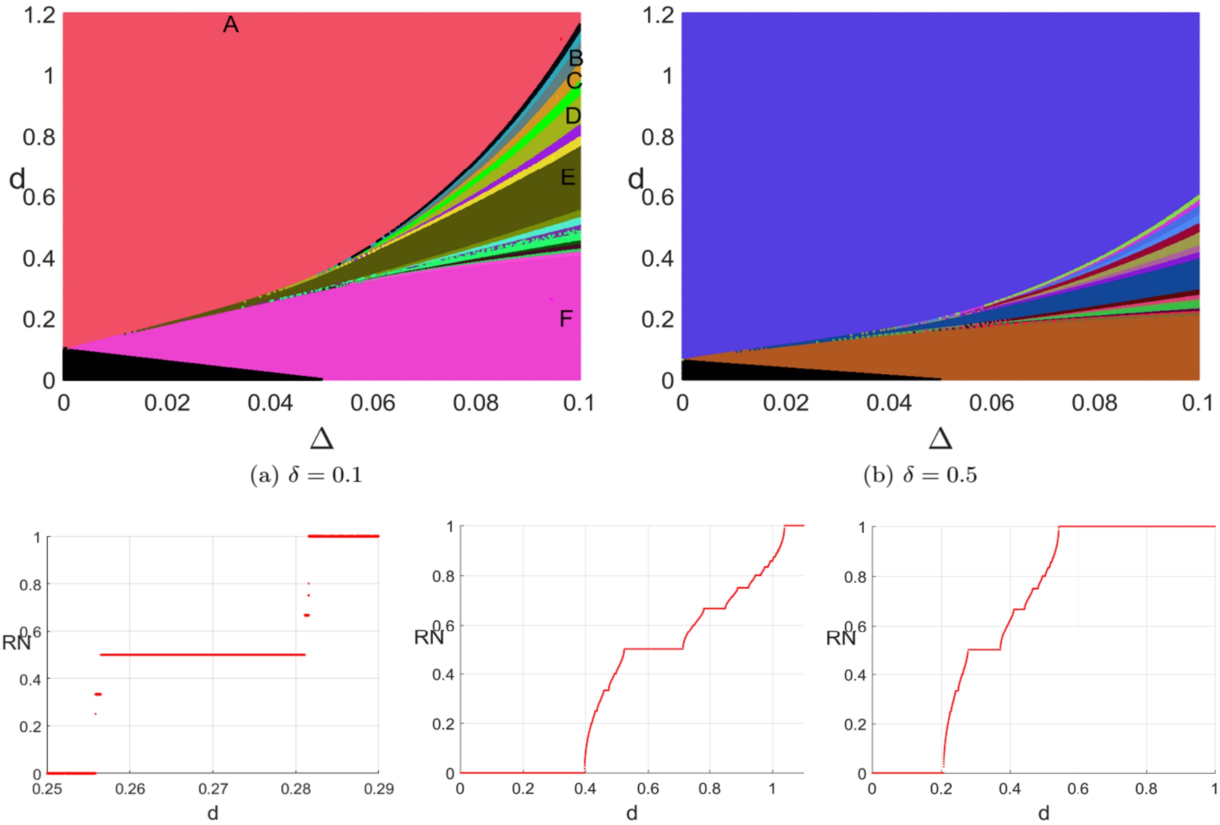


Рис. 1. (a) Функция связи. (b) Области активирования элементов на фазовом торе. Когда состояние системы (1) лежит в горизонтальной полосе, то активируется первый элемент, когда в вертикальной – второй.

3. Режимы синхронной нейроноподобной активности

В исследуемой системе были обнаружены различные режимы синхронной нейроноподобной активности: возбудимый режим, а также режимы последовательной активности. На рисунке 2 приведены карты режимов и зависимости числа вращения от силы связи.

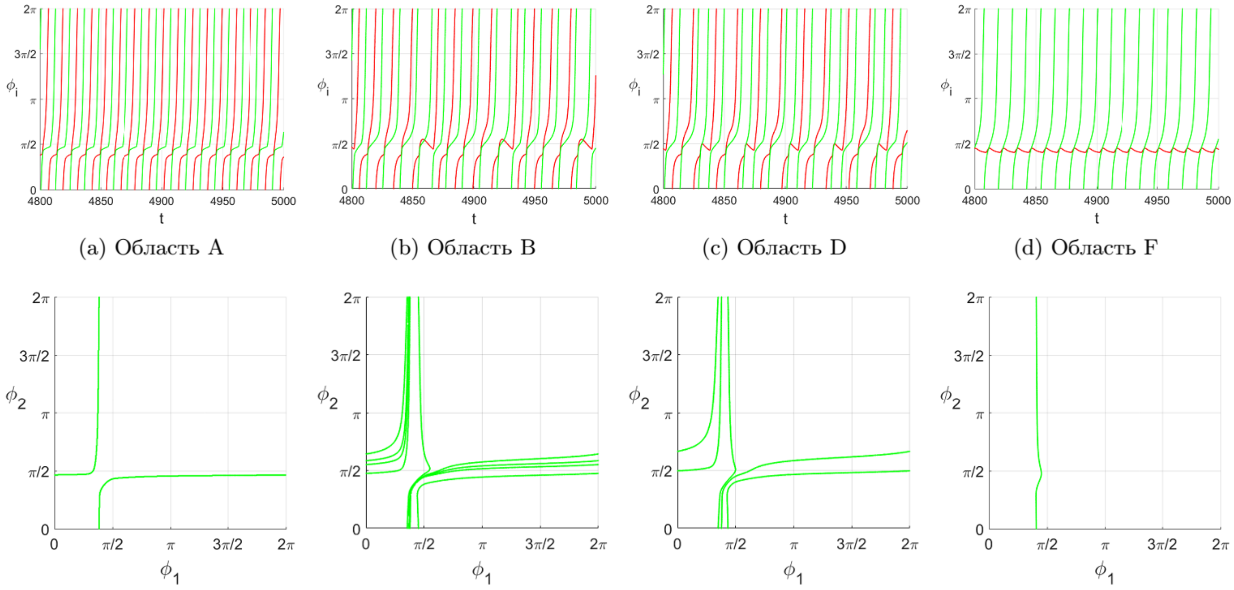


(a) $\delta = 0.1$ (b) $\delta = 0.5$

(c) $\delta = 0.1$, $\Delta = 0.04$ (d) $\delta = 0.1$, $\Delta = 0.095$ (e) $\delta = 0.5$, $\Delta = 0.095$

Рис. 2. **Верхняя панель:** Карты синхронных режимов, (a) $\delta = 0.1$, (b) $\delta = 0.5$. Области A соответствует режим синхронизации 1:1, области B – 4:5, области C – 3:4, D – 2:3, E – 1:2, F – 0:1. В области чёрного цвета аттрактором является устойчивое состояние равновесия. **Нижняя панель:** Число вращения в зависимости от силы связи d. (c) $\delta = 0.1, \Delta = 0.04$, (d) $\delta = 0.1, \Delta = 0.095$, (e) $\delta = 0.5, \Delta = 0.095$.

На рисунке 3 приведены фазовые портреты и временные реализации возможных синхронных режимов.



(a) Область A (b) Область B (c) Область D (d) Область F

(e) Область A (f) Область B (g) Область D (h) Область F

Рис. 3. Временные реализации (**верхняя панель**) и фазовые портреты (**нижняя панель**) некоторых синхронных режимов системы (1). Область A - режим синхронизации 1:1, область B – 4:5, область D – 2:3, область F – 0:1.

Отметим, что при $\Delta = 0.1$ элементы становятся осцилляторными, однако не наблюдается никаких бифуркаций синхронных режимов.

Литература

1. Calabrese R.L. The handbook of brain theory and neural networks // MIT Press, Cambridge, MA. – 1995.
2. Parker J., Bondy B., Prilutsky B., Cymbalyuk G. Control of transitions between locomotor-like and paw shake-like rhythms in a model of a multistable central pattern generator // Journal of neurophysiology. – 2018. – V. 120 (3). – P. 1074-1089.
3. Pusuluri K., Basodi S., Shilnikov A. Computational exposition of multistable rhythms in 4-cell neural circuits // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2020. – V. 83. – P. 105139.
4. Korotkov A. G., Levanova T. A., Zaks M.A., Maksimov A.G., Osipov G. V. Dynamics in a phase model of half-center oscillator: Two neurons with excitatory coupling // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2022. – V. 104. – P. 106045.
5. Korotkov A. G., Kazakov A. O, Levanova T. A., Osipov G. V. The dynamics of ensemble of neuron-like elements with excitatory couplings // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2019. – V. 71. – P. 38–49.
6. Korotkov A. G., Kazakov A. O, Levanova T. A., Osipov G. V. Chaotic regimes in the ensemble of FitzhHugh-Nagumo elements with weak couplings // IFAC-PapersOnLine. – 2018. – V. 51 (33). – P. 241–245.
7. Korotkov A. G., Kazakov A. O, Levanova T. A. Effects of memristor-based coupling in the ensemble of FitzHugh-Nagumo elements // The European Physical Journal Special Topics. – 2019. – V. 228 (10). – P. 2325–2337.

ОБ ОДНОЙ СТРАТЕГИИ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГИРОВАНИЯ, ОСНОВАННОЙ НА ИСПОЛЬЗОВАНИИ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОЙ ФОРМУЛЫ

А.Г. Коротченко, В.М. Сморякова

Нижегородский университет им. Н.И. Лобачевского

В статье рассматривается алгоритм численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений, построенный на основе использования конечно-разностных формулы в рамках формальной модели вычислений, учитывающей требования о минимальном числе узлов интегрирования при выполнении ограничений, определяемых точностью вычислений.

Ключевые слова: конечно-разностная формула, алгоритм, стратегия численного интегрирования.

1. Введение

Построение алгоритмов с заданными свойствами является важной и сложной проблемой как с теоретической, так и с практической точек зрения. Ей посвящены многие работы, укажем здесь только некоторые работы авторов, посвященных данной проблеме [1-8]. Как правило, алгоритм с заданными свойствами конструируется на основе некоторой формальной модели вычислений. В то же время использование формальной модели не позволяет учесть все требования, предъявляемые к конструируемому алгоритму. Поэтому при реализации построенного таким образом алгоритма целесообразно дополнить его процедурами, учитывающими особенности рассматриваемого класса задач.

В данной работе в рамках, описанного подхода рассматривается алгоритм численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений, ориентированный на итегрирование систем, решение которых носит существенно нелинейный характер, состоящий в том, что получаемые решения являются многоэкстремальными функциями.

2. Постановка задачи

Пусть требуется найти решение $Y = Y(x)$ (предполагается, что решение $Y(x)$ – единственно и четырежды непрерывно дифференцируемо на отрезке $[x_0, t]$) задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$Y' = F(x, Y), Y(x_0) = Y_0,$$
$$Y = Y(x) = \big(y^1(x), \dots, y^n(x)\big), x_0 \le x < t, \tag{1}$$

где значение параметра t не известно априори, а определяется в процессе интегрирования системы. В случае, когда система (1) линейна, $F(x, Y) = B(x)Y + b(x)$, где $B(x) - (n \times n)$- матрица, $b(x) - n$ -мерный вектор.

Для определения численных значений $Y_i = \big(y_1^i, \dots, y_n^i\big)$, $i = 1{,}2$ ..., решения системы (1) будем использовать метод, основанный на применении конечно-разностной формулы четвертого порядка:

$$Y_i = a_{i-3}Y_{i-3} + a_{i-2}Y_{i-2} + a_{i-1}Y_{i-1} + h_i a_i q_i, \tag{2}$$

здесь

$$q_i F = (x_i, Y_i),$$
$$Y_i = \big(y_i^1, y_i^2, \dots, y_i^n\big),$$
$$a_{i-3} = 1 - a_{i-2} - a_{i-1},$$
$$a_{i-2} = \frac{-h_i^2 \psi_i^2}{h_{i-2}h_{i-1}\big(h_{i-1}^2 + h_{i-1}h_{i-2} + 2h_i h_{i-2} + 3h_i^2 + 4h_{i-1}h_i\big)},$$
$$a_{i-1} = \frac{(h_i + h_{i-1})^2 \psi_i^2}{h_{i-1}(h_{i-2} + h_{i-1})\big(h_{i-1}^2 + h_{i-1}h_{i-2} + 2h_i h_{i-2} + 3h_i^2 + 4h_{i-1}h_i\big)},$$

$$a_i = \frac{(h_i^2+h_{i-1}h_i)\psi_i}{h_i(h_{i-1}^2+h_{i-1}h_{i-2}+2h_ih_{i-2}+3h_i^2+4h_{i-1}h_i)},$$

при этом $\psi_i = h_{i-2} + h_{i-1} + h_i$, $h_i = x_i - x_{i-1}$ - шаг интегрирования.

Будем считать, что система (1) удовлетворяет условиям, при выполнении которых вектор $Y_i = (y_1^i, \dots, y_n^i)$ может быть определён из решения системы уравнений

$$Y_i = a_{i-3}Y_{i-3} + a_{i-2}Y_{i-2} + a_{i-1}Y_{i-1} + h_ia_iF(x_i, Y_i). \qquad (3)$$

Если система (1) линейна, то (3) принимает вид

$$C_iY_i = c_i, \qquad (4)$$

где $C_i = E - h_ia_iB(x_i)$, $c_i = a_{i-3}Y_{i-3} + a_{i-2}Y_{i-2} + a_{i-1}Y_{i-1} + h_ia_ib(x_i)$, E - единичная матрица.

Будем считать, что система (3) может быть решена методом Ньютона, а система (4) - методом Гаусса.

В качестве основной характеристики формулы (2) будем рассматривать локальную ошибку, получаемую на i-ом шаге для каждой j-ой компоненты решения $Y_i = (y_i^1, \dots, y_i^n)$:

$$R_i^j = \frac{h_i^6+2(h_{i-2}+2h_{i-1})h_i^5+2h_{i-1}(h_{i-2}+2h_{i-1})h_i^4}{3h_i^2+2(h_{i-2}+2h_{i-1})h_i+(h_{i-1}^2+h_{i-1}h_{i-2})} + \qquad (5)$$
$$+\frac{2h_{i-1}(h_{i-2}+h_{i-1})(h_{i-2}+2h_{i-1})h_i^3+h_{i-1}^2(h_{i-2}+h_{i-1})^2h_i^2}{3h_i^2+2(h_{i-2}+2h_{i-1})h_i+(h_{i-1}^2+h_{i-1}h_{i-2})}\left(y^{IV}(\Theta_i)\right)^j,$$

где $x_{i-2} - h_i \le \Theta_i \le x_{i-1} + h_i$ и $\left(y^{IV}(\Theta_i)\right)^j$ - значение четвёртой производной от j-ой компоненты вектора решения $Y(x)$ в точке Θ_i. Локальная ошибка (5) возникает вследствие конечно-разностной аппроксимации производных системы дифференциальных уравнений.

Потребуем, чтобы в процессе интегрирования системы выполнялись условия:

$$\max_{1\le j\le n}\left|R_i^j\right| \le \varepsilon_i,$$

где ε_i - заданная точность на i-ом шаге интегрирования.

Пусть четвёртая производная от компонент вектора решения $Y(x)$ удовлетворяет на отрезке $[x_0, x_0 + z]$ условию:

$$\max_{1\le j\le n}\left|y^{IV}(x)^j\right| \le K,$$

где $z > 0$, $K > 0$ - вещественные константы.

Тогда получаем, что ограничение на формулу (2), обусловленное точностью вычислений на i-ом шаге интегрирования, сводится к выполнению неравенства:

$$\varphi_i(h_{i-2}, h_{i-1}, h_i) = h_i^6 + 2(h_{i-2} + 2h_{i-1})h_i^5 + 2h_{i-1}(h_{i-2} + 2h_{i-1})h_i^4 + \qquad (6)$$
$$+ 2h_{i-1}(h_{i-2} + h_{i-1})(h_{i-2} + 2h_{i-1})h_i^3 + h_{i-1}^2(h_{i-2} + h_{i-1})^2h_i^2 - 3\Delta_ih_i^2 -$$
$$-2(h_{i-2} + 2h_{i-1})\Delta_ih_i - (h_{i-1}^2 + h_{i-1}h_{i-2})\Delta_i \le 0,$$

здесь $\Delta_i = 2\varepsilon_iK^{-1}$, $i = 1,2, \dots$.

Обозначим через $h_{2i-2} = \tau_{i-1}$, $h_{2i-1} = \tau_i$, $h_{2i} = \tau_i$ в функциях $\varphi_{2i}(h_{2i-2}, h_{2i-1}, h_{2i})$, определяемых в (6), и введём в рассмотрение следующие функции:

$$f_i(\tau_{i-1}, \tau_i) = 14\tau_i^5 + 12\tau_{i-1}\tau_i^4 + 3\tau_{i-1}^2\tau_i^3 - 8\Delta_i\tau_i - 3\Delta_i\tau_{i-1}, \qquad (7)$$

при этом $\varphi_{2i}(h_{2i-2}, h_{2i-1}, h_{2i}) = \tau_if_i(\tau_{i-1}, \tau_i)$, $i = 1,2, \dots$.

Тогда из выполнения неравенства $f_i(\tau_{i-1}, \tau_i) \le 0$ при $\tau_i > 0$ и сделанных предположений относительно шагов интегрирования будет следовать выполнение соотношения (6).

Пусть $h_0 = \tau_0$, где τ_0 - заданное положительное число. Найдём решение системы (1) Y_{-1}, Y_{-2}, Y_{-3} в узлах интегрирования $x_{-1} = x_0 - h_0$, $x_{-2} = x_{-1} - h_0$, $x_{-3} = x_{-2} - h_0$, используя какой-либо одношаговый метод, например, метод Эйлера.

Определим процедуру выбора шагов интегрирования конечно-разностной формулы (2) на отрезке $[x_0, x_0 + z]$ при условии, что число узлов интегрирования априори не задано, а определяется в процессе интегрирования системы (1).

В случае, когда процесс интегрирования с использованием формулы (2) начинается с узла x_{2p}, $p \ge 1$, то при известном значении τ_{p+j-1} значение τ_{p+j} находим таким образом, чтобы выполнялось неравенство (7) при $i = p + j$, и полагаем $h_{2p+2j-1} = \tau_{p+j}$, $h_{2p+2j} = \tau_{p+j}$, где $h_{2p+2j-2} = \tau_{p+j-1}$, а $x_{2p+2j-1} = x_{2p} + h_{2p+2j-1}$, $x_{2p+2j} = x_{2p+2j-1} + h_{2p+2j}$, $j = 1,2, \dots$.

Если процесс интегрирования на отрезке $[x_{2p}, x_{2p} + z]$ заканчивается в узле x_{2m}, $m \ge 1$, то вектор $X(p,m) = (h_{2p+1}, h_{2p+2}, \dots, h_{2p+2m-1}, h_{2p+2m})$, получаемый с помощью описанной процедуры будем называть стратегией интегрирования или просто стратегией. Множество всех таких стратегий обозначим $\Omega_1(p, m)$.

Описанная процедура выбора шагов интегрирования основана на том, что номер завершающего узла интегрирования на каждом отрезке длины z является чётным. Данное обстоятельство не является существенным, т.е. указанный узел может быть и нечётным. В дальнейшем будем рассматривать случай, когда $p = 0$, что также не является существенным.

Будем считать, что процесс интегрирования с использованием формулы (2) заканчивается в узле x_{2m}. Таким образом, задание стратегии $X(0, m)$ определяет процедуру выбора шагов и узлов интегрирования на отрезке $[x_0, x_0 + z]$.

При этом будем считать, что процесс интегрирования на отрезке $[x_0, x_0 + z]$ заканчивается либо выполнением некоторого условия в узле x_{2m}, накладываемого на получаемое по формуле (2) решение системы (1), либо когда выполняется неравенство $x_{2m+2} > x_0 + z$.

Заметим, что если $x_2 > x_0 + z$, то в ограничении (6) следует уменьшить значение ε_1.

3. Оптимальная стратегия

Рассмотрим одну из схем выбора τ_i, определяющих задание стратегии из множества $\Omega_1(0, m)$.

Определим стратегию $\bar{X}(0, m) = \left(\overline{h_1}, \overline{h_2}, \dots, \overline{h_{2m-1}}, \overline{h_{2m}}\right) \in \Omega_1(0, m)$ таким образом, что $\overline{h_{2i-1}} = \overline{\tau_i}$, $\overline{h_{2i}} = \overline{\tau_i}$, $i = 1, \dots, m$, где при заданном значении $\overline{\tau_0}$ величина $\overline{\tau_i}$ является решением задачи

$$\tau_i \Rightarrow max,$$
$$f_i(\overline{\tau}_{i-1}, \tau_i) \le 0,\ i = 1, \dots, m.$$

Здесь функции $f_i(\tau_{i-1}, \tau_i)$ заданы в (7) соответственно.

Стратегию $\bar{X}(0, m)$ будем называть оптимальной стратегией на множестве $\Omega_1(0, m)$, если для любого $m = 1,2, \dots$ последовательность $(\overline{\tau}_1, \dots, \overline{\tau}_m)$ является решением задачи

$$\sum_{i=1}^{m} \tau_i \Rightarrow max,$$
$$f_i(\tau_{i-1}, \tau_i) \le 0,\ i = 1, \dots, m,$$

где $\tau_0 = \overline{\tau_0} > 0$.

Такой выбор τ_i, $i = 1, \dots, m$, соответствует минимальному числу узлов интегрирования.

Алгоритм α_1, основанный на применении оптимальной стратегии, описан в [6]. На основе данного алгоритма можно построить несколько реализаций для различных классов задач [7, 8]. Построенные процедуры на рассматриваемом в статье классе задач не дают приемлемого результата, поэтому была разработана процедура, учитывающая специфику этого класса.

4. Реализация оптимальной стратегии

1. Пусть $K = K_0$, значение K_0 будем определять следующим образом. Методом Рунге-Кутты второго порядка с шагом $h = -\tau_0$ найдем решения Y_{-4}, Y_{-3}, Y_{-2}, Y_{-1} в узлах x_{-4}, x_{-3}, x_{-2}, x_{-1}. Используя узлы x_{-4}, x_{-3}, x_{-2}, x_{-1}, x_0 построим полином Лагранжа четвёртого порядка для каждой компоненты решения. Здесь Y_0 - начальное условие в узле x_0. В качестве начальной оценки K_0 будем использовать максимальное значение четвёртой производной по всем компонентам решения от построенного полинома Лагранжа четвёртого порядка.
2. Вычислим потенциальный узел интегрирования $\widetilde{x_i} = x_{i-1} + h_i$, $i = 1,2, \dots$, используя алгоритм α_1.
3. Проведем уточняющую оценку для значения K_i в узлах x_{i-4}, x_{i-3}, x_{i-2}, x_{i-1}, $\widetilde{x_i}$ так же, как на шаге 1.
4. В случае, если $K_i \le K$, то $x_i = \widetilde{x_i}$. Если выполнено условие останова, алгоритм заканчивает свою работу, в противном случае переходим к шагу 2. Если условие $K_i \le K$ выполняется p раз, будем производить корректировку константы K по правилу
$$K = \frac{K_i + K}{2}.$$
5. В случае, если $K_i > K$, примем $K = K_i * l$, где $l > 1$. Перейдём к шагу 2.

5. Вычислительный эксперимент

Рассмотрим математическую модель Ходжкина-Хаксли, описывающую возникновение и распространение потенциалов действия в нейронах [5]. Данная модель в нейродинамике играет роль базовой теоретической модели при построении детальных нейронных моделей, создаваемых для описания разных типов синаптических связей и изучения влияния пространственной геометрии нейрона на его динамику. А. Ходжкин и Э. Хаксли в ряде экспериментов над гигантским аксоном кальмара смогли описать возникновение потенциала действия при применении внешнего тока. С биофизической точки зрения, потенциалы действия – это события, которые могут быть зарегистрированы посредством измерения напряжения между содержимым клетки нейрона и его окружением. Потенциалы действия – это результат прохождения токов через ионные каналы в мембране клетки нейрона.

Для изучения экспериментаторы вводят электрод в мембрану клетки, контролируя ток, поступающий в нейрон, и измеряют его состояние в каждый конкретный момент времени. Состояние нейрона описывается напряжением мембраны и состоянием ионных каналов. При регистрации потенциала действия наблюдается резкий многократный рост напряжения клетки, сопровождаемый спадом до значения ниже исходного и относительно долгим периодом, в течение которого напряжение постепенно возвращается к исходному значению.

Оригинальная модель Ходжкина-Хаксли описывает три типа ионных каналов. Она представляет собой нелинейную систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$I(t) = \frac{dV_m}{dt} + 35n^4(V_m + 77) + 40m^3h(V_m - 55) + 0.3(V_m + 65),$$
$$\frac{dn}{dt} = \alpha_n(V_m)(1 - n) - \beta_n(V_m)n,$$
$$\frac{dm}{dt} = \alpha_m(V_m)(1 - m) - \beta_m(V_m)m,$$
$$\frac{dh}{dt} = \alpha_h(V_m)(1 - h) - \beta_h(V_m)h,$$

здесь

$$\alpha_n(V_m) = 0.02(V_m - 25)/\left[1 - e^{-(V_m-25)/9}\right],$$
$$\alpha_m(V_m) = 0.182(V_m + 35)/\left[1 - e^{-(V_m+35)/9}\right],$$
$$\alpha_h(V_m) = 0.25e^{-(V_m+90)/12},$$
$$\beta_n(V_m) = -0.002(V_m - 25)/\left[1 - e^{(V_m-25)/9}\right],$$
$$\beta_m(V_m) = -0.124(V_m + 35)/\left[1 - e^{(V_m+35)/9}\right],$$
$$\beta_h(V_m) = 0.25e^{(V_m+62)/6}e^{-(V_m+90)/12},$$

$I(t)$ – сила тока, приложенная к мембране нейрона, выбирается экспериментатором.

Система, описанная выше, не имеет аналитического решения.

Особенность данной системы заключается в том, что общий вид решения определяется преимущественно видом функции $I(t)$, соответствующей току, который подаётся экспериментатором на мембрану клетки через электрод.

В случае, если в качестве функции $I(t)$ используется функция вида:

$$I(t) = I_1 + (I_2 - I_1)H(t),$$

где

$$H(t) = \begin{cases} 0, t \le t^*, \\ 1, t > t^*, \end{cases}$$

то решение будет принадлежать одному из трёх типов и определяться значениями параметров I_1, I_2 и t^*. Решения первого типа соответствуют отсутствию потенциала действия. Второй тип решения соответствует постоянному потенциалу действия. Третий тип решения системы соответствует периодически возникающему потенциалу действий и принадлежит рассматриваемого в статье классу задач.

В вычислительном эксперименте мы будем использовать систему третьего типа, в которой $I_1 = 0$, $I_2 = 1$, $t^* = 0$. Начальные условия в задаче Коши $\mathrm{V}(0) = -65$, $\mathrm{n}(0) = 0$, $\mathrm{m}(0) = 0.02$, $\mathrm{h}(0) = 0.61$.

На рисунке 1 и 2 представлены результаты запуска разработанной реализации алгоритма α_1 с параметрами $\tau_0 = 0.001$, $\varepsilon_\mathrm{i} = \varepsilon_0 = 0.01$, $\mathrm{l} = 2$, $\mathrm{p} = 3$. Количество узлов интегрирования равно 779, число вычислений правых частей системы – 2859. Минимальный шаг интегрирования равен 0.008, максимальный – 1.82. Решение системы (3) на каждом шаге интегрирования получено методом Ньютона.

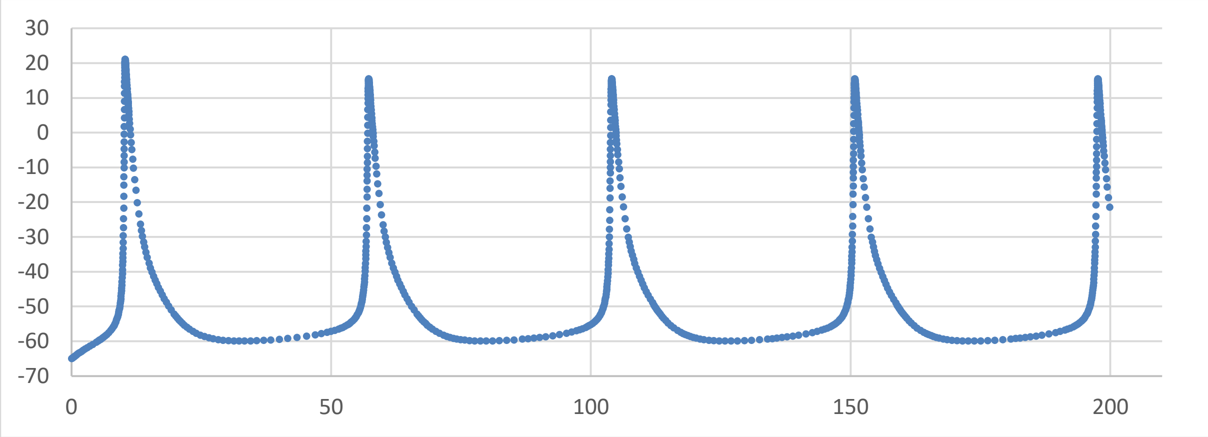


Рис. 1. Компонента решения $V(t)$

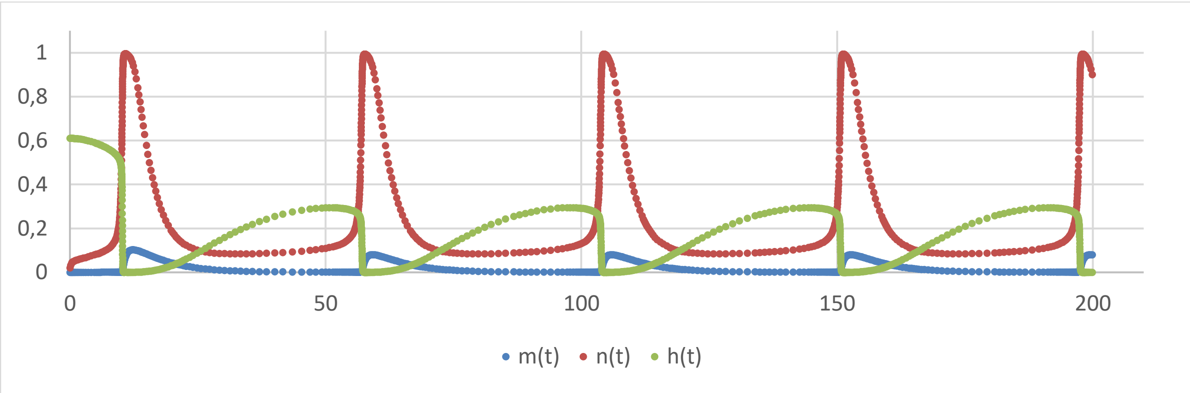


Рис. 2. Компоненты решения $m(t)$, $n(t)$, $h(t)$

На рисунке 3 и 4 представлены результаты работы метода Рунге-Кутты четвёртого порядка с шагом равным 0.12 (при использовании шага 0.13 и более метод Рунге-Кутты четвёртого порядка расходится). Количество узлов интегрирования равно 1668, число вычислений правых частей системы – 6668.

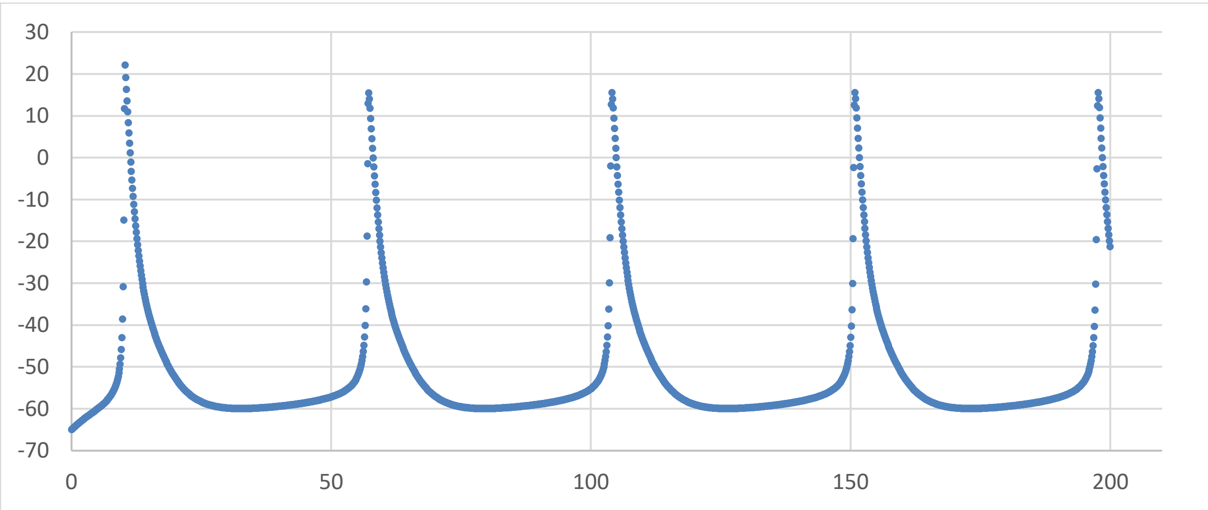


Рис. 3. Компонента решения $V(t)$

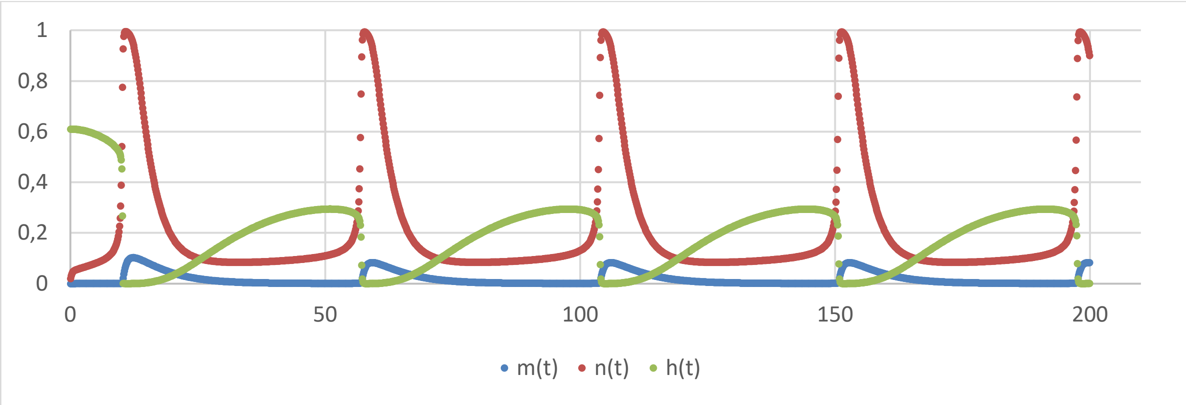


Рис. 4. Компоненты решения $m(t)$, $n(t)$, $h(t)$

Литература

1. Коротченко А.Г. О задачах математического программирования, имеющих многоэтапный характер // Вестник нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского. 2011. Т. 1. С. 183-187.
2. Коротченко А.Г. О приближенно-оптимальных алгоритмах поиска экстремума в одном классе функций // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1990. Т. 30 № 3. С. 355-365.
3. Коротченко А.Г. Приближенно-оптимальный алгоритм поиска экстремума для одного класса функций //Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1996. Т. 36 №5. С. 30-39.
4. Коротченко А.Г., Сморякова В.М. Об оценке погрешности алгоритмов поиска экстремума в классах функций, определяемых кусочно-линейной мажорантой // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Математическое моделирование. Оптимальное управление, 2013, №3(1), С. 188-194.
5. Коротченко А.Г., Сморякова В.М. Об одном алгоритме поиска максимума в классе функций, определяемом кусочно-линейной мажорантой // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Математическое моделирование. Оптимальное управление. 2014. №4(1). С. 409-415.
6. Korotchenko A.G., Smoryakova V.M. On a method of construction of numerical integration formulas // AIP Conference Proceedings. 2016. V. 1776 №9780735414389. P.090012-1 - 090012-4.
7. Korotchenko A.G., Smoryakova V.M. On a Comparison of Several Numerical Integration Methods for Ordinary Systems of Differential Equations // Lecture Notes in Computer Science. 2020. V. 2. № 11974. P. 406-412.
8. А. Г. Коротченко, В. М. Сморякова О стратегиях численного интегрирования, основанных на использовании одной конечно-разностной формулы // Интеллектуальные информационные системы: труды Международной научно-практической конференции: в 2 ч. Воронеж: Изд-во ВГТУ. 2021. Ч.1. С. 91-96.
9. Wulfram Gerstner, Werner M. Kistler, Richard Naud, Liam Paninski Neuronal Dynamics. From single neurons to networks and models of cognition // https://neuronaldynamics.epfl.ch/online/index.html.

СУБОПТИМАЛЬНЫЕ ПО ПАРЕТО ОБОБЩЕННЫЕ H_∞-УПРАВЛЕНИЯ ПЕРЕВЕРНУТЫМ МАЯТНИКОМ

Л.Н. Кривдина

Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет

Рассматривается задача многокритериального управления перевернутым маятником, в которой синтезируются субоптимальные по Парето управления с критериями вида обобщенной H_∞-нормы. Синтез таких управлений основан на подходе, в котором минимизация линейной свертки таких критериев заменена на минимизацию максимума линейной свертки соответствующих им функционалов. Приводятся результаты численного моделирования управления перевернутым маятником.

Ключевые слова: многокритериальное управление, дискретный объект, множество Парето, перевернутый маятник, обобщенная H_∞-норма, линейные матричные неравенства.

1. Введение

Существуют различные законы управления и, в действительности, эти законы управления оказываются, как правило, многокритериальными, так как на практике приходится учитывать различные факторы, влияющие на объект управления и, соответственно, различные критерии, которые нужно оптимизировать по тому или иному параметру. Нахождение множества Парето, и, значит, оптимальных по Парето решений является сложной задачей, поскольку приходится находить решения, неулучшаемые для всех критериев одновременно. Ранее были решены некоторые задачи, в которых удалось найти оптимальные по Парето решения, например, в [1, 2].

В работе [3] был предложен подход к решению многокритериальных минимаксных задач, позволяющий дать оценку границ области критериального пространства, в котором расположены точки, принадлежащие множеству Парето. Этот подход позволяет находить субоптимальные по Парето решения многокритериальной задачи на основе замены минимизации линейной свертки критериев на минимизацию максимума некоторой субоптимальной целевой функции. В данной статье рассматривается нахождение субоптимальных по Парето решений в задачах управления однозвенным перевернутым маятником. В качестве критериев берутся критерии вида обобщенной H_∞-нормы. Приводятся результаты численного моделирования в указанной задаче на конечном и бесконечном интервалах времени.

2. Предварительные сведения

В этом разделе приведем некоторые предварительные сведения, необходимые для дальнейшего изложения материала. Сначала рассмотрим различные показатели системы, отражающие степень влияния начального состояния и/или внешнего возмущения на целевой выход объекта, которые в дальнейшем будут выбираться в качестве отдельных критериев в задачах многокритериального управления. Пусть линейный нестационарный дискретный объект задан уравнениями

$$\begin{aligned} x(t+1) &= A(t)x(t) + B(t)v(t), \quad x(0) = x_0, \\ z(t) &= C(t)x(t) + D(t)v(t), \qquad t \in [0;\, N], \end{aligned} \tag{1}$$

в которых $x(t) \in \mathbb{R}^{n_x}$ – состояние объекта, $v(t) \in \mathbb{R}^{n_v}$ – возмущение, $z(t) \in \mathbb{R}^{n_z}$ – целевой выход, $A(t)$, $B(t)$, $C(t)$, $D(t)$ – заданные матричные функции соответствующих размерностей. Предполагается, что в общем случае начальное состояние x_0 неизвестно и его влияние на динамику объекта интерпретируется как начальное возмущение.

Обобщенная H_∞-норма дискретного объекта на конечном интервале $[0;\, N]$ от входа v к выходу z определяется как квадратный корень из максимального значения отношения показателя выхода с учетом конечного состояния системы к сумме квадратичной формы начального состояния и квадрата l_2 - нормы возмущения

$$\gamma_{\infty,0} = \sup_{x_0,v} \left(\frac{\|z\|^2_{[0;N]} + x^T(N)Sx(N)}{\|v\|^2_{[0;N]} + x_0^T R^{-1} x_0} \right)^{1/2},$$

где супремум берется по всем начальным состояниям $x(0) = x_0$ и всем $v \in l_2$, одновременно не обращающимся в ноль, $S = S^T \geq 0$ – заданная весовая матрица конечного состояния, предназначенная для задания приоритета между качеством переходного процесса и конечным состоянием объекта, $R = R^T > 0$ – заданная весовая матрица начального состояния, $\|\xi\|^2_{[0;\,N]} = \sum_{t=0}^{N-1} |\xi(t)|^2$.

Приведем теорему из [3], сформулированную для дискретного объекта, в которой показано, что обобщенная H_∞-норма на конечном интервале может быть найдена как решение задачи оптимизации линейной функции при ограничениях, заданных разностными линейными матричными неравенствами.

Теорема 1. Пусть выполняется неравенство

$$\gamma^2 I - D^T(t)D(t) > 0 \;\; \forall t \in [0;\; N].$$

Обобщенная H_∞-норма дискретной системы (1) удовлетворяет неравенству $\gamma_{\infty,0} < \gamma$ тогда и только тогда, когда линейные матричные неравенства

$$\begin{pmatrix} -Y(t+1) & * & * & * \\ Y(t)A^T(t) & -Y(t) & * & * \\ B^T & 0 & -I & * \\ 0 & C(t)Y(t) & D(t) & -\gamma^2 I \end{pmatrix} \leq 0, \;\; t = 0, \dots, N-1, \tag{2}$$

$$\begin{pmatrix} Y(N) & * \\ S^{1/2}Y(N) & \gamma^2 I \end{pmatrix} > 0 \tag{3}$$

и равенство

$$Y(0) = R \tag{4}$$

разрешимы относительно $Y(t) > 0$ и $\gamma^2 > 0$.

Для устойчивого стационарного объекта вида (1), в котором $A(t) \equiv A$, $B(t) \equiv B$, $C(t) \equiv C$, $D(t) \equiv D$ – заданные стационарные матрицы, причем все собственные значения матрицы A располагаются строго внутри единичного круга комплексной плоскости, обобщенная H_∞-норма на бесконечном интервале определяется следующим образом

$$\gamma^s_{\infty,0} = \sup_{x_0,v} \frac{\|z\|_{[0;\infty)}}{\left(\|v\|^2_{[0;\infty)} + x_0^T R^{-1} x_0\right)^{1/2}},$$

где индекс s означает стационарность системы. В следующей теореме показано, что обобщенная H_∞-норма на бесконечном интервале может быть найдена как решение задачи оптимизации линейной функции при ограничениях, заданных линейными матричными неравенствами.

Теорема 2 [4]. Обобщенная H_∞-норма устойчивой стационарной дискретной системы (1) на бесконечном интервале времени удовлетворяет неравенству $\gamma^s_{\infty,0} < \gamma$ тогда и только тогда, когда линейные матричные неравенства

$$\begin{pmatrix} -Y & * & * & * \\ YA^T & -Y & * & * \\ B^T & 0 & -I & * \\ 0 & CY & D & -\gamma^2 I \end{pmatrix} < 0, \;\; Y > R \tag{5}$$

разрешимы относительно $Y > 0$ и $\gamma^2 > 0$.

3. Синтез субоптимальных по Парето управлений перевернутым маятником

В данном разделе рассматривается задача двукритериального управления однозвенным перевернутым маятником с критериями вида обобщенной H_∞-нормы и приведены результаты численного моделирования такого управления.

Пусть линейный дискретный нестационарный объект управления определяется уравнениями

$$x(t+1) = A(t)x(t) + B_1(t)v(t) + B_2(t)u(t),\ \ x(0) = x_0,$$
$$z_i(t) = C_i(t)x(t) + D_{iv}(t)v(t) + D_{iu}(t)u(t),\ \ \ i = 1,\dots,K, \tag{6}$$

в которых $x(t) \in \mathbb{R}^{n_x}$ – состояние объекта, $v(t) \in \mathbb{R}^{n_v}$ – возмущение, $u(t) \in \mathbb{R}^{n_u}$ – управление, $z_i(t) \in \mathbb{R}^{n_z}$ – целевые выходы. Закон управления имеет вид нестационарной линейной обратной связи $u(t) = \Theta(t)x(t)$, $t \in [0;\ N]$. Задача многокритериального управления объектом (6) с K целевыми выходами состоит в том, чтобы минимизировать все критерии $J_i(\Theta)$, являющиеся квадратами обобщенных H_∞-норм целевых выходов $z_i(t)$, в смысле Парето, где

$$J_i(\Theta) = \sup_{x_0, v} \frac{\|z_i\|^2_{[0;N]} + x^T(N)S_i x(N)}{\|v\|^2_{[0;\,N]} + x_0^T R^{-1} x_0},\ \ i = 1,\dots,K.$$

Напомним, что оптимальными по Парето решениями многокритериальной задачи являются параметры Θ_α, для которых выполняются равенства

$$\min_{\Theta} J_\alpha(\Theta) = J_\alpha(\Theta_\alpha),$$

где $J_\alpha(\Theta)$ представляет собой линейную свертку критериев $J_i(\Theta)$, т.е.

$$J_\alpha(\Theta) = \sum_{i=1}^{K} \alpha_i J_i(\Theta) \quad \forall \alpha \in \mathcal{S}, \mathcal{S} = \left\{(\alpha_1,\dots,\alpha_K)\colon \alpha_i \geq 0, \sum_{i=1}^{K} \alpha_i = 1\right\}.$$

Нахождение оптимальных по Парето решений представляет собой сложную и трудную задачу, так как сводится к однокритериальной оптимизации линейной свертки максимумов разных выбранных критериев. В связи с этим в [3] был предложен подход, основанный на получении так называемых субоптимальных по Парето решений, а именно: было показано, что задача нахождения субоптимальных по Парето решений основана на минимизации некоторой субоптимальной целевой функции, которая сама является обобщенной H_∞-нормой комбинированного выхода $z_\alpha(t)$ системы (6)

$$\hat{J}_\alpha(\Theta) = \sup_{x_0, v} \frac{\|z_\alpha\|^2_{[0;N\,]} + x^T(N)S_\alpha x(N)}{\|v\|^2_{[0;N]} + x_0^T R^{-1} x_0},$$

где

$$z_\alpha(t) = [C_\alpha(t) + D_{\alpha u}(t)\Theta(t)]x(t) + D_{\alpha v}(t)v(t),\ \ S_\alpha = \sum_{i=1}^{K} \alpha_i S_i,$$

$$C_\alpha(t) = \begin{pmatrix} \alpha_1^{1/2} C_1(t) \\ \dots \\ \alpha_K^{1/2} C_K(t) \end{pmatrix},\ \ D_{\alpha u}(t) = \begin{pmatrix} \alpha_1^{1/2} D_{1u}(t) \\ \dots \\ \alpha_K^{1/2} D_{Ku}(t) \end{pmatrix},\ \ D_{\alpha v}(t) = \begin{pmatrix} \alpha_1^{1/2} D_{1v}(t) \\ \dots \\ \alpha_K^{1/2} D_{Kv}(t) \end{pmatrix},$$

S_α – заданная весовая матрица конечного состояния. Законы управления для системы на конечном интервале находятся как $\widehat{\Theta}_\alpha(t) = Z(t)Y^{-1}(t)$ при решении линейных матричных неравенств, полученных из неравенств (2) и (3) Теоремы 1 с начальным условием (4) и с заданной матрицей конечного состояния S_α при замене в них соответствующих матриц на матрицы $A(t) + B_u(t)\Theta(t)$, $B_v(t)$, $C_\alpha(t) + D_{\alpha u}(t)\Theta(t)$, $D_{\alpha v}(t)$ и при введении вспомогательных переменных $Z(t) = \Theta(t)Y(t)$. Для дискретной системы на бесконечном интервале времени законы управления вычисляются как $\widehat{\Theta}_\alpha = ZY^{-1}$ при решении линейных матричных неравенств (5), полученных из неравенств Теоремы 2 для стационарной дискретной системы вида (6) с заданной весовой матрицей R при замене в них соответствующих матриц на матрицы $A + B_u\Theta$, B_v, $C_\alpha + D_{\alpha u}\Theta$, $D_{\alpha v}$ и при введении переменных $Z = \Theta Y$.

Применим изложенный выше подход для синтеза субоптимальных по Парето обобщенных H_∞-управлений однозвенным перевернутым маятником вида

$$\ddot{\varphi} - \varphi = u + v,$$

с целевыми выходами

$$z_1 = (\varphi \quad 0.1u)^T, z_2 = (\varphi \quad 0.9u)^T$$

на конечном и бесконечном интервалах времени. Запишем данную систему в следующем виде

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2, \\ \dot{x}_2 = x_1 + u + v, \end{cases} \tag{7}$$

$$z_1 = (x_1 \quad 0.1u)^T,\ z_2 = (x_1 \quad 0.9u)^T.$$

Дискретизируем систему (7) с шагом 0.1 сек. Функционалы имеют следующий вид

$$J_1(\Theta) = \sup_{x_0, v} \frac{\|z_1\|^2_{[0;\,N]} + x^T(N)Sx(N)}{\|v\|^2_{[0;N]} + x_0^T R^{-1} x_0}, \quad J_2(\Theta) = \sup_{x_0, v} \frac{\|z_2\|^2_{[0;N]} + x^T(N)Sx(N)}{\|v\|^2_{[0;N]} + x_0^T R^{-1} x_0},$$

$$J_1(\Theta) = \sup_{x_0, v} \frac{\|z_1\|^2_{[0;\infty)}}{\|v\|^2_{[0;\infty)} + x_0^T R^{-1} x_0}, \quad J_2(\Theta) = \sup_{x_0, v} \frac{\|z_1\|^2_{[0;\infty)}}{\|v\|^2_{[0;\infty)} + x_0^T R^{-1} x_0}$$

на конечном и бесконечном интервалах времени соответственно, где $R = I$, $S = I$, $N = 9$. Будем выбирать управление объектом (7) в виде нестационарной линейной обратной связи по состоянию $u(t) = \Theta(t)x(t)$, $t \in [0;\ N]$ на конечном интервале времени, на бесконечном интервале – матрица параметров регулятора стационарна $\Theta(\mathrm{t}) \equiv \Theta^s$.

На рисунке 1 изображена кривая в критериальном пространстве, точки которой соответствуют значениям критериев, найденных при субоптимальных по Парето решениях $\widehat{\Theta}^s_\alpha$, на бесконечном интервале времени, где $\alpha \in [0; 1]$ с шагом 0.01 сек. Также, в частности, при $\alpha = 0.5$ были найдены параметры обратной связи $\widehat{\Theta}^s_{0.5}$=$(-2.6777 \quad -2.2845)$ и для них вычислены значения функционалов $J_1\big(\widehat{\Theta}^s_{0.5}\big) = 10.2108$, $J_2\big(\widehat{\Theta}^s_{0.5}\big) = 44.8769$.

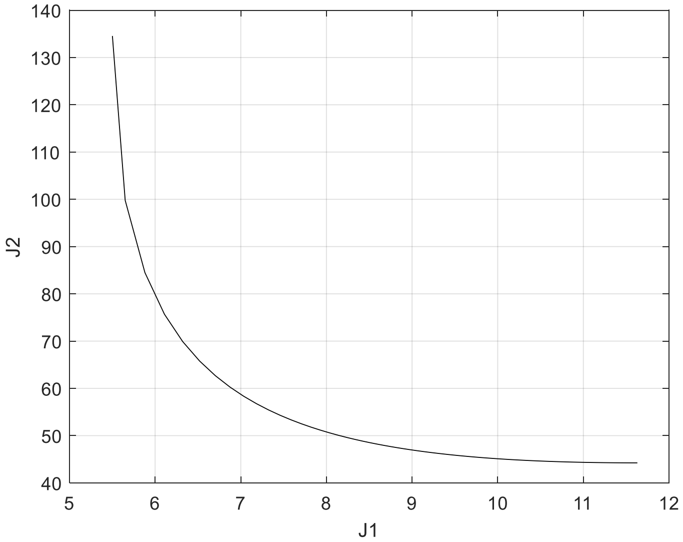


Рис. 1. Кривая в критериальном пространстве, соответствующая субоптимальным по Парето решениям на бесконечном интервале

На рисунке 2 изображена кривая в критериальном пространстве, точки которой соответствуют значениям критериев, найденных при субоптимальных по Парето решениях $\widehat{\Theta}_\alpha$, на конечном интервале времени $t \in [0;\ N]$. Точка A с координатами $(8.3557; 41.6258)$ соответствует значениям функционалов $J_1\big(\widehat{\Theta}\big)$ и $J_2\big(\widehat{\Theta}\big)$, полученных при подстановке стационарного регулятора $\widehat{\Theta}^s_{0.5}$ для $\alpha = 0.5$ вместо нестационарного субоптимального регулятора на конечном интервале времени. Из рисунка видно, что отличия в значениях критериев при использовании такого стационарного регулятора вместо нестационарного незначительны, что позволяет нестационарный субоптимальный регулятор заменять на стационарный.

На рисунке 3 представлены графики зависимости от времени субоптимальных по Парето коэффициентов обратной связи $\widehat{\Theta}_\alpha(t) = (\hat{\theta}_1(t) \quad \hat{\theta}_2(t))$, соответствующих точке A (сплошная линия – для $\hat{\theta}_1(t)$, а пунктирная – для $\hat{\theta}_2(t)$).

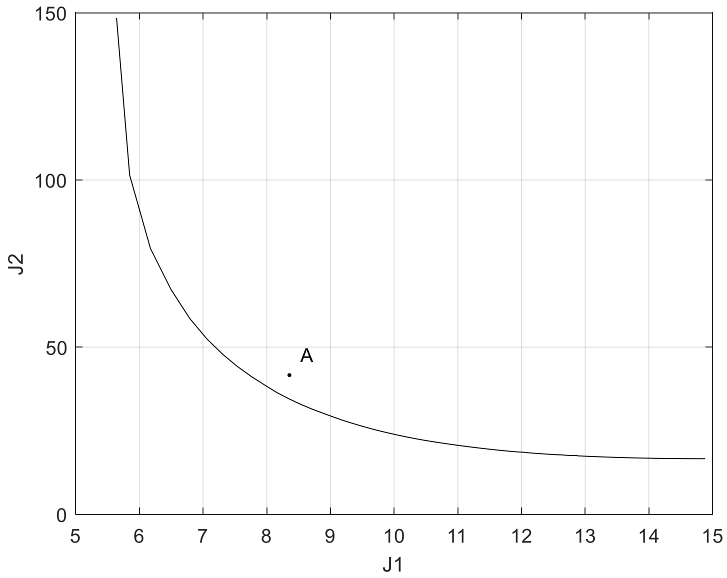


Рис. 2. Кривая в критериальном пространстве, соответствующая субоптимальным по Парето решениям на конечном интервале

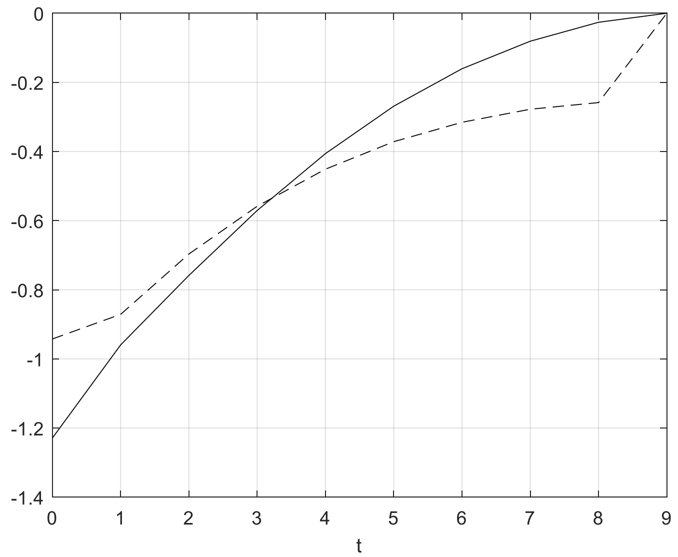


Рис. 3. Графики зависимости от времени субоптимальных по Парето коэффициентов обратной связи

4. Заключение

В данной статье рассмотрена задача синтеза субоптимальных по Парето обобщенных H_∞-управлений перевернутым маятником. Найдены субоптимальные по Парето регуляторы по состоянию для однозвенного перевернутого маятника на конечном и бесконечном интервалах времени. Результаты проведенного эксперимента показали, что применяемый подход позволяет без особого ущерба заменить субоптимальный по Парето нестационарный регулятор стационарным регулятором, взятым при соответствующем значении параметра α.

Литература

1. Khargonekar P.P., Rotea M.A. Multiple Objective Optimal Control of Linear Systems: the Quadratic Norm Case // IEEE Trans. Autom. Control. 1991. V. 36. No. 1. P. 14-24.

2. Баландин Д.В., Бирюков Р.С., Коган М.М. Оптимальное управление максимальными уклонениями выходов линейной нестационарной системы на конечном интервале времени // АиТ. 2019. № 10. С. 37–61.
3. Баландин Д.В., Бирюков Р.С., Коган М.М. Многокритериальные минимаксные задачи: локализация множества Парето и синтез субоптимальных управлений // АиТ. 2021. № 8. С. 39–59.
4. Баландин Д.В., Коган М.М., Кривдина Л.Н., Федюков А.А. Синтез обобщенного H_∞-оптимального управления в дискретном времени на конечном и бесконечном интервалах // АиТ. 2014. № 1. С. 3–22.

ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ ДИВЕРСИФИКАЦИИ ВКЛАДА[1*]

К.Н. Кудрявцев[1,2], П.К. Симаков[1], И.С. Стабулит[1]

[1]*Южно-Уральский государственный университет (НИУ), г. Челябинск,*
[2]*Челябинский государственный университет, г. Челябинск*

Рассматривается задача диверсификации вклада по нескольким рублевым и валютным депозитам. При этом, курс валют на момент закрытия депозита лицу, принимающему решение не известен. Имеются только нечеткая экспертная оценка возможного курса валют. Такая задача формализуется как многокритериальная задача принятия решения при нечеткой информации. Для поиска решения предлагается модификация метода EDAS.

Ключевые слова: нечеткая информация, неопределенность, многокритериальная задача.

1. Введение

Задачи принятия решений, возникающие в реальных приложениях, как правило, требуют одновременного учета большого числа факторов. Они достаточно сложны и не могут рассматриваться как однокритериальные. Другими словами, использование только одного критерия в процессе принятия решений может привести к нереалистичному решению [1-4]. Чтобы получить адекватное действительности решение, приходится переходить к классу многокритериальных задач [5]. В последние годы, для многокритериальных задач принятия решений (MCDM) разработан ряд эффективных методов [6-8].

Стоит отметить, что лицо, принимающее решение, как правило не имеет полной информации о системе, либо обладает некоторой неточной информацией. Эта неопределенность делает процесс принятия решений сложным и трудным. Для работы с такой субъективной и неточной информацией Лотфи Заде [9] была разработана теория нечетких множеств. Эта теория представляет собой очень эффективный инструмент моделирования многокритериальных задач принятия решений в неопределенной среде. Для представления неопределенной информации в процессе принятия нечетких решений [10] часто используются лингвистические переменные, значения которых задаются нечетким образом.

2. Метод EDAS

Одним из методов принятия решений в многокритериальных задачах является метод оценки, основанный на расстоянии от среднего решения (EDAS), предложенный в [11]. Приведем алгоритм этого метода:

Шаг 1: Выбрать наиболее важные критерии, описывающие альтернативы.

Шаг 2: Построить матрицу принятия решений

$$X = \left[x_{ij} \right]_{n \times m} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix},$$

где x_{ij} обозначает значение, *j*-го критерия при выборе альтернативы *i*.

Шаг 3: Определить среднее решение по всем критериям, используя формулу:

[1*] Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Челябинской области в рамках научного проекта № 20-41-740027.

$$AV = \left[AV_j \right]_{1\times m},$$

где

$$AV_j = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_{ij}}{n}.$$

Шаг 4: Рассчитать положительное (PDA) и отрицательное (NDA) расстояние от среднего, как показано ниже:

$$PDA = \left[PDA_{ij} \right]_{n\times m}, \quad NDA = \left[NDA_{ij} \right]_{n\times m},$$

где

$$PDA_{ij} = \frac{max\left(0, x_{ij} - AV_j\right)}{AV_j},$$

$$NDA_{ij} = \frac{max\left(0, AV_j - x_{ij}\right)}{AV_j}.$$

Шаг 5: Определить взвешенную сумму PDA и NDA для всех альтернатив по формулам:

$$SP_i = \sum_{j=1}^{m} w_j PDA_{ij}, \quad SN_i = \sum_{j=1}^{m} w_j NDA_{ij},$$

где положительный коэффициент w_j это вес *j*-го критерия.

Шаг 6: Нормализовать значения SP и SN для всех альтернатив, как показано ниже:

$$NSP_i = \frac{SP_i}{\max_i\left(SP_i\right)}, \quad NSN_i = 1 - \frac{SN_i}{\max_i\left(SN_i\right)}.$$

Шаг 7: Рассчитать оценку (AS) для всех альтернатив:

$$AS_i = \frac{1}{2}\left(NSP_i + NSN_i\right),$$

где, в силу нормировки, $0 \le AS_i \le 1$.

Шаг 8: Ранжируйте альтернативы в соответствии с убывающими значениями оценочного балла (AS).

Альтернатива с наивысшим AS - лучший выбор среди возможных альтернатив.

В рассматриваемом ниже примере будем предполагать, что информация о значениях критериев имеет нечеткий характер. Дефазификация нечеткой информации будет проводиться с помощью операторов из [12, 13].

3. Задача диверсификации вклада

Задача о диверсификации вклада по рублевому и валютным депозитам с точки зрения различных критериев оптимальности рассматривалась в работах [14, 15]. В отличии от этих работ, будем рассматривать задачу диверсификации вклада как многокритериальную задачу принятия решений при нечеткой информации.

Итак, пусть имеется некоторая сумма (в примере ниже, это 1 млн. рублей), которую надо разделить на несколько депозитов. Рублевые депозиты приносят фиксированную доходность. Чтобы открыть валютный депозит, надо поменять рубли на валюту по фиксированному, известному заранее курсу. По окончании срока вклада, валютный депозит вместе с полученными процентами, должен быть обменен на рубли. Курс обратного обмена, лицу, принимающему решение, заранее не известен. Однако, имеются нечеткие оценки этого курса, определенные экспертами и заданные в виде треугольных нечетких чисел [12]. Кроме этого, размещая вклады в разных банках, лицо, принимающее решение, учитывает в качестве одного из критериев рейтинг надежности банка. При этом значения рейтинга, задаваемые лингвистической переменной, представляют собой треугольные нечеткие числа, определенные в таблице 1.

Таблица 1. Рейтинги банков

Рейтинг	**Нечеткое значение**
AAA	(0,9; 1; 1)
AA	(0,8; 0,9; 1)
A	(0,7; 0,8; 0,9)
BB+	(0,5; 0,6; 0,7)
C	(0; 0,4; 0,6)

Предполагается, что экспертные оценки курса доллара, ожидаемого на момент закрытия депозита, заданы треугольными нечеткими числами и имеют вид, указанный в таблице 2.

Таблица 2. Ожидаемый курс доллара

Номер эксперта	**Нечеткое значение**
1	(69; 75; 77)
2	(65; 74; 76)
3	(40; 50; 110)
4	(76; 80; 130)
5	(68; 72; 100)

Условия депозитных вкладов сроком на 1 год, рассматриваемых лицом, принимающим решение, приведены в таблице 3.

Таблица 3. Условия депозитных вкладов

Номер альтернативы	**Банк**	**Рейтинг**	**Валюта вклада**	**Процентная ставка**
1	ПАО РОСБАНК	AAA	руб.	7,25
2	ПАО РОСБАНК	AAA	$	0,01
3	ПАО "ФК ОТКРЫТИЕ"	AA	руб.	6,8
4	ПАО "ФК ОТКРЫТИЕ"	AA	$	0,5
5	ПАО "ЧЕЛИНДБАНК"	A	руб.	6
6	ПАО "ЧЕЛИНДБАНК"	A	$	0,5
7	АО Банк «ПСКБ»	BB+	руб.	5,5
8	АО Банк «ПСКБ»	BB+	$	0,1
9	Балтинвестбанк	C	руб.	3,75
10	Балтинвестбанк	C	$	0,05

Используемые операторы дефазификации пронумерованы, согласно таблице 4.

Таблица 4. Ожидаемый курс доллара

Номер оператора	**Метод дефазификации**
1	Центр масс
2	Метод Адамо
3	Центр максимумов
4	Медиана
5	Индекс Чанга
6	Возможное среднее
7	Индекс Ягера
8	Метод Ухоботова-Стабулит

Таким образом, рассматривается задача ранжирования 10 депозитов по шести критериям, первые пять из которых представляют экспертные оценки будущего курса доллара, а шестой критерий – это рейтинг банка. При применении процедуры ADAS были использованы равные весовые коэффициенты. Процедура применялась совместно с указанными выше методами дефазификации. Результаты вычислений приведены в таблице 5, где номер столбца соответствует выбранному оператору дефазификации, а альтернативы в столбце расставлены по убыванию паремтра AS.

Таблица 5. Оценка вкладов методом EDAS

1		**2**		**3**		**4**		**5**		**6**		**7**		**8**	
№	**AS**	**№**	**AS**	**№**	**AS**	**№**	**AS**	**№**	**AS**	**№**	**AS**	**№**	**AS**	**№**	**AS**
2	0,93	**2**	1	**1**	0,99	**1**	0,94	**2**	1	**1**	0,96	**1**	0,94	**1**	0,95
1	0,92	**4**	0,97	**3**	0,87	**3**	0,86	**4**	0,99	**3**	0,85	**3**	0,86	**3**	0,86
4	0,9	6	0,87	5	0,73	2	0,85	6	0,98	2	0,76	2	0,85	2	0,77
3	0,86	8	0,69	2	0,61	4	0,8	8	0,95	4	0,78	4	0,8	4	0,71
6	0,75	1	0,6	4	0,53	5	0,89	10	0,92	5	0,8	5	0,69	5	0,7
5	0,68	3	0,55	7	0,52	6	0,66	1	0,09	6	0,6	6	0,66	6	0,59
8	0,5	10	0,48	6	0,42	7	0,43	3	0,08	7	0,46	7	0,44	7	0,46
7	0,43	5	0,43	9	0,27	8	0,42	5	0,06	8	0,34	8	0,42	8	0,35
10	0,19	7	0,24	8	0,21	10	0,12	7	0,03	9	0,12	10	0,12	9	0,11
9	0,05	9	0	10	0,02	9	0,07	9	0	10	0,07	9	0,07	10	0,07
2	0,93	2	1	1	0,99	1	0,94	2	1	1	0,96	1	0,94	1	0,95

Как видно из таблицы, наиболее предпочтительными, в зависимости от выбранного оператора дефазификации, являются альтернативы 1 и 2, следующие за ними по рейтингу – это альтернативы 3 и 4. Таким образом, принимаю решение о распределении депозита, при указанных оценках экспертов, следует разделить его, в соответствии с рейтингом, среди указанных четырех видов вкладов.

Литература

1. Chakraborty S. et al. Applications of WASPAS method as a multi-criteria decision-making tool // Economic Computation and Economic Cybernetics Studies and Research. 2015. Vol. 49, No. 1. P. 1-17.
2. Dadelo S. et al. Algorithm of maximizing the set of common solutions for several MCDM problems and it’s application for security personnel scheduling // International Journal of Computers Communications and Control. 2015. Vol. 9, No. 2. P. 151-159.
3. Elsayed A. et al. Fuzzy linear physical programming for multiple criteria decision-making under uncertainty International // Journal of Computers Communications and Control. 2015. Vol. 11, No. 1. P. 26-38.
4. Zavadskas E.K. et al. Multi-criteria assessment model of technologies // Studies in Informatics and Control. 2013. Vol. 22, No. 4. P. 249-258.
5. Подиновский В.В., Ногин В.Д. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач. М.: Физматлит, 2007.
6. Bogdanovic D., Miletic S. Personnel evaluation and selection by multi-criteria decision making method // Economic Computation and Economic Cybernetics Studies and Research. 2014. Vol. 48, No. 3. P. 179-196.
7. Kosareva N. et al. Personnel ranking and selection problem solution by application of KEMIRA method // International Journal of Computers Communications and Control. 2015. Vol. 11, No. 1. P. 51-66.
8. Stanujkic D., Zavadskas E.K. A modified weighted sum method based on the decision-maker’s preferred levels of performances // Studies in Informatics and Control. 2015. Vol. 24, No. 4. P. 461-470.
9. Zadeh L.A. Fuzzy sets // Information and Control. 1965. Vol. 8, No. 3. P. 338-353.
10. Ukhobotov V.I., Stabulit I.S., Kudryavtsev K.N. On decision making under fuzzy information about an uncontrolled factor // Procedia Computer Science. 2019. Vol. 150. P. 524-531.
11. Zavadskas E.K. et al. Multi-criteria assessment model of technologies // Studies in Informatics and Control. 2013. Vol. 22, No. 4. P. 249-258.
12. Zimmermann H.J. Fuzzy set theory and its applications. N.Y.: Springer, 2011.

13. Ухоботов В.И., Стабулит И.С., Кудрявцев К.Н. Сравнение нечетких чисел треугольного вида // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2019. Т. 29, №. 2. С. 197-210.
14. Жуковский В.И., Солдатова Н.Г. К задаче диверсификации вклада по трем депозитам // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2013. № 4. С. 55–61.
15. Петров Н.Н., Петрова Н.В. К задаче о диверсификации рубля // Известия Института математики и информатики Удмуртского государственного университета2018. Т.51. С. 123–135.

ЗАДАЧА О ДВИЖЕНИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА С НЕПОДВИЖНОЙ ТОЧКОЙ В ПОТОКЕ ЧАСТИЦ[1*]

А.С. Кулешов, М.М. Гаджиев

Механико-математический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Рассматривается задача о движении твердого тела с неподвижной точкой в свободном молекулярном потоке частиц. Показано, что уравнения движения тела обобщают классические уравнения Эйлера – Пуассона движения тяжелого твердого тела с неподвижной точкой и представляются в форме классических уравнений Эйлера – Пуассона в случае, когда поверхность тела, обтекаемого потоком частиц, представляет собой сферу. Обсуждаются вопросы существования первых интегралов в рассматриваемой задаче.

Ключевые слова: твердое тело с неподвижной точкой, свободный молекулярный поток, первые интегралы.

1. Постановка задачи. Вычисление момента, действующего на тело

Рассмотрим задачу о движении твердого тела в потоке частиц вокруг неподвижной точки. Будем предполагать, что поток частиц представляет собой свободный молекулярный поток постоянной плотности ρ, частицы которого движутся поступательно с постоянной абсолютной скоростью

$$-\mathbf{v} = v_0 \boldsymbol{\gamma},$$

где $\boldsymbol{\gamma}$ – единичный вектор, направленный вдоль набегающего потока. Тепловым движением молекул в потоке пренебрегаем.

Будем рассматривать следующий механизм взаимодействия молекул набегающего потока с поверхностью тела. Частица при соударении отдает практически всю свою энергию и приходит в температурное равновесие с местом удара (несколько теперь нагретым). Когда это нагревание пройдет, частица выходит в пространство с тепловой скоростью, равной тепловой скорости молекул поверхности тела. Так как эта тепловая скорость существенно меньше тепловой скорости наружних частиц, то можно идеализировать эту картину гипотезой абсолютно неупругого удара, когда частицы полностью теряют свою энергию при столкновении с телом (и не отражаются).

Получим выражения для силы и момента, действующего на тело с неподвижной точкой со стороны потока частиц. Воспользуемся подходом, приведенным в монографии В.В. Белецкого [1]. Обозначим через O неподвижную точку твердого тела. Распределение скоростей в твердом теле определяется формулой Эйлера

$$\mathbf{u}_M = \left[\boldsymbol{\omega} \times \overrightarrow{OM}\right],$$

где M – произвольная точка твердого тела. Если обозначить угол между векторами $\boldsymbol{\omega}$ и $\overrightarrow{OM}$ через α, то

$$\left|\mathbf{u}_M\right| = \left|\boldsymbol{\omega}\right|\left|\overrightarrow{OM}\right|\sin\alpha \le \left|\boldsymbol{\omega}\right|\left|\overrightarrow{OM}\right|.$$

Предположим, что величина скорости набегающего потока v_0 существенно превосходит произведение характерного значения угловой скорости твердого тела и характерного расстояния от неподвижной точки до любой из точек твердого тела, то есть

$$\frac{\left|\boldsymbol{\omega}\right|\left|\overrightarrow{OM}\right|}{v_0} \ll 1 \tag{1}$$

[1*] Работа выполнена по теме государственного задания (№ 0729-2020-0055).

Тогда будем считать, что в абсолютном пространстве скорости всех точек твердого тела отличаются друг от друга на малую величину. Определим, каким будет воздействие потока на тело, если тело неподвижно, а поток имеет постоянную скорость. Перейдем в систему координат, движущуюся поступательно вместе с потоком. Будем в этой системе координат следить за неподвижной точкой O твердого тела (или за любой другой его точкой в силу предположения (1)). Абсолютная скорость $\mathbf{v}_O^{абс}$ точки O равна нулю, так как O – неподвижная точка твердого тела. Переносная скорость $\mathbf{v}_O^{пер}$ точки O – это абсолютная скорость той точки подвижного пространства (то есть пространства, поступательно движущегося вместе с выбранной системой координат), в которой в данный момент времени оказалась точка O. Эта скорость равна

$$\mathbf{v}_O^{абс} = -\mathbf{v} = v_0 \boldsymbol{\gamma} .$$

Относительная скорость $\mathbf{v}_O^{отн}$ точки O – это скорость точки O относительно потока. По формуле сложения скоростей имеем:

$$0 = \mathbf{v}_O^{абс} = \mathbf{v}_O^{пер} + \mathbf{v}_O^{отн} ,$$

откуда находим, что точка O (а следовательно, в силу предположения (1) и все тело) движется относительно потока со скоростью

$$\mathbf{v}_O^{отн} = \mathbf{v} = -v_0 \boldsymbol{\gamma} .$$

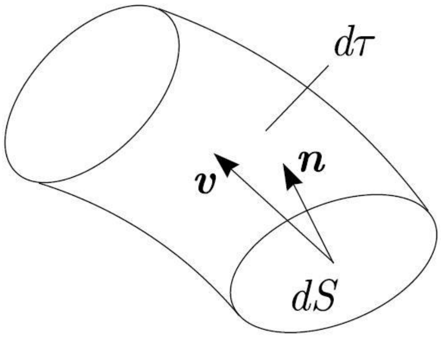


Рис. 1. Элементарная площадка dS

Выделим на поверхности тела элементарную площадку dS и вычислим элементарный импульс, получаемый площадкой dS, движущейся поступательно относительно потока со скоростью $\mathbf{v}$, за время dt (см. Рис. 1). Во время такого движения площадка заметает объем

$$d\tau = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS dt ,$$

где $\mathbf{n}$ – единичный вектор нормали к площадке, причем $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) > 0$. Внутри объема $d\tau$ содержится масса $dm = \rho d\tau$, где ρ – плотность потока. Элементарный импульс, получаемый площадкой, и действующая на нее сила имеют вид:

$$d\mathbf{Q} = -\mathbf{v} dm = -\mathbf{v} \rho d\tau = -\rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS dt ,$$

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{Q}}{dt} = -\rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS .$$

Рассмотрим выпуклое тело с неподвижной точкой, ограниченное гладкой замкнутой поверхностью и движущееся поступательно со скоростью $\mathbf{v} = -v_0 \boldsymbol{\gamma}$ относительно потока. Главный вектор сил взаимодействия тела с молекулами задается формулой

$$\mathbf{F} = -\int_{S_*} \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS \tag{2}$$

В формуле (2) через S_* обозначена часть поверхности тела, «омываемая» потоком молекул: на её границе $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) = 0$, поскольку на границе направление потока является касательным к S_*, а во внутренних точках поверхности S_* внешняя нормаль $\mathbf{n}$ удовлетворяет неравенству $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) > 0$. Границу этой поверхности обозначим ∂S_* (см. Рис. 2).

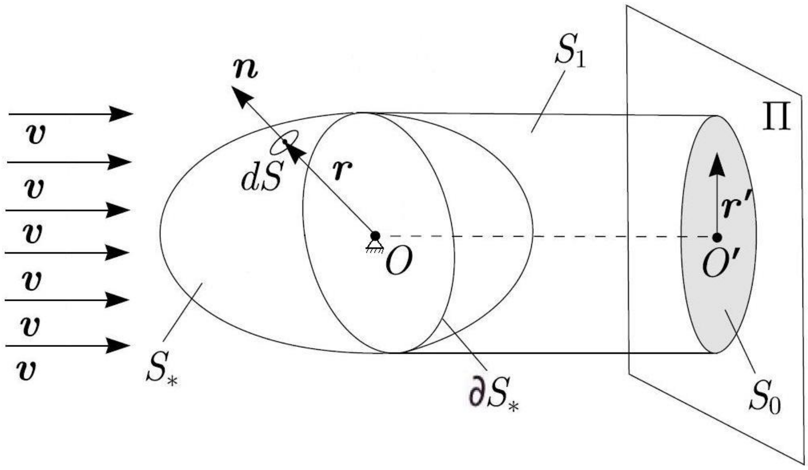


Рис. 2. Построение тела T

Поскольку направление вектора скорости потока $\mathbf{v}$ не зависит от выбора элементарной площадки dS на поверхности тела, следовательно, интеграл в правой части равенства (2) может быть переписан в виде

$$\mathbf{F} = -\rho\mathbf{v}\int\limits_{S_*}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS \tag{3}$$

Вычислим теперь главный момент сил взаимодействия молекул с телом относительно неподвижной точки O. Этот момент вычисляется по формуле

$$\mathbf{M}_O = -\rho\int\limits_{S_*}[\mathbf{r}\times\mathbf{v}](\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS = \rho\left[\mathbf{v}\times\int\limits_{S_*}\mathbf{r}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS\right] \tag{4}$$

где $\mathbf{r}$ – радиус – вектор точки поверхности тела относительно неподвижной точки O.

Для вычисления интегралов, входящих в формулы (3) и (4), введем новое тело T, которое построим следующим образом. Перпендикулярно вектору $\mathbf{v}$ расположим плоскость Π. Удобно поместить эту плоскость на некотором расстоянии от точки O позади (по отношению к вектору $\mathbf{v}$) тела. Проекция тела на плоскость Π вдоль вектора $\mathbf{v}$ (ортогональная проекция) является некоторой плоской фигурой S_0. Введем ещё цилиндрическую поверхность S_1 с образующей $\mathbf{v}$ и направляющей – границей ∂S_*. Поверхность S_1 с одной стороны ограничена этой направляющей, а с другой – линией пересечения с плоскостью Π. Поверхность $\Sigma = S_* \cup S_1 \cup S_0$ ограничивает тело T, объем которого обозначим через τ (см. Рис. 2). Согласно теореме Остроградского – Гаусса, справедливо соотношение

$$\int\limits_{\Sigma}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS = \int\limits_{T}\operatorname{div}(\mathbf{v})d\tau = 0,$$

поскольку $\operatorname{div}(\mathbf{v}) = 0$. Кроме того, справедливы соотношения

$$(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\big|_{S_1} = 0, \quad (\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\big|_{S_0} = -v_0(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\gamma}) = -v_0. \tag{5}$$

Таким образом, имеем:

$$\int\limits_{\Sigma}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS = \int\limits_{S_*}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS + \int\limits_{S_1}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS + \int\limits_{S_0}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS = 0\,,$$

откуда

$$\int\limits_{S_*}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS = -\int\limits_{S_0}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})dS = v_0\int\limits_{S_0}dS = v_0 S\,,$$

где S – площадь фигуры S_0. Таким образом,

$$\mathbf{F} = -\rho\mathbf{v}v_0 S = \rho v_0^2 S\boldsymbol{\gamma} \tag{6}$$

Введем теперь систему координат $Oxyz$ с началом в неподвижной точке O и осями, направленными вдоль главных осей инерции для точки O. Пусть в этой системе координат $\mathbf{r}=(x,y,z)$, $\mathbf{v}=-v_0(\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)$. По теореме Гаусса – Остроградского имеем:

$$\int\limits_{\Sigma} x(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS=\int\limits_{\Sigma}(x\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS=\int\limits_{T}\mathrm{div}(x\mathbf{v})\,d\tau=-v_0\gamma_1\tau\,,$$

и аналогично

$$\int\limits_{\Sigma} y(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS=-v_0\gamma_2\tau\,,\qquad \int\limits_{\Sigma} z(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS=-v_0\gamma_3\tau\,.$$

Следовательно,

$$\int\limits_{\Sigma}\mathbf{r}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS=\tau\mathbf{v}\,.$$

С другой стороны, с учетом формул (5) можно написать, что

$$\int\limits_{\Sigma}\mathbf{r}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS=\int\limits_{S_*}\mathbf{r}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS-v_0\int\limits_{S_0}\mathbf{r}\,dS\,.$$

На S_0 вектор $\mathbf{r}$ представляет собой вектор, соединяющий неподвижную точку с различными точками фигуры S_0. Поэтому на S_0 представим вектор $\mathbf{r}$ в виде:

$$\mathbf{r}=-\frac{l\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|}+\mathbf{r}'=l\boldsymbol{\gamma}+\mathbf{r}'\,,$$

где l – длина перпендикуляра, опущенного на плоскость Π из неподвижной точки. Для вектора $\mathbf{r}'$ справедливо условие $(\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}')=0$, так как вектор $\mathbf{r}'$ лежит в плоскости Π (см. Рис. 2). Тогда

$$v_0\int\limits_{S_0}\mathbf{r}\,dS=v_0l\boldsymbol{\gamma}\int\limits_{S_0}dS+v_0\int\limits_{S_0}\mathbf{r}'dS=-lS\mathbf{v}+v_0\int\limits_{S_0}\mathbf{r}'dS=-lS\mathbf{v}+v_0\mathbf{P}_{O'}\,.$$

Интеграл

$$\mathbf{P}_{O'}=\int\limits_{S_0}\mathbf{r}'dS \tag{7}$$

представляет собой первый момент фигуры S_0 относительно точки O' – проекции неподвижной точки O на плоскость Π. Итак,

$$\tau\mathbf{v}=\int\limits_{S_*}\mathbf{r}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS+lS\mathbf{v}-v_0\mathbf{P}_{O'}\,.$$

Отсюда

$$\int\limits_{S_*}\mathbf{r}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\,dS=(\tau-lS)\mathbf{v}+v_0\mathbf{P}_{O'}\,,$$

и в соответствии с формулой (4)

$$\mathbf{M}_O=\rho v_0\left[\mathbf{v}\times\mathbf{P}_{O'}\right]=-\rho v_0^2\left[\boldsymbol{\gamma}\times\mathbf{P}_{O'}\right] \tag{8}$$

Теперь вычислим интеграл (7). В этом интеграле вектор $\mathbf{r}'$ представляет собой вектор, проведенный из точки O' в различные точки фигуры S_0. Представим теперь, что фигура S_0 – это наклеенная на плоскость Π бесконечно тонкая однородная пластинка плотностью $\rho_1=\mathrm{const}$. Тогда

$$\int\limits_{S_0}\mathbf{r}'dS=\frac{1}{\rho_1}\int\limits_{S_0}\rho_1\mathbf{r}'dS=\frac{\rho_1S}{\rho_1}\overrightarrow{O'G}=S\overrightarrow{O'G}\,.$$

Здесь $S=S(\boldsymbol{\gamma})$ – площадь фигуры S_0, а $\overrightarrow{O'G}$ – вектор, соединяющий точку O' – проекцию неподвижной точки O на плоскость Π с центром масс G однородной пластинки, имеющей форму фигуры S_0. В общем случае,

$$S=S(\boldsymbol{\gamma}),\ \ \overrightarrow{O'G}=\mathbf{c}=\mathbf{c}(\boldsymbol{\gamma})\,.$$

Введем также обозначение

$$\rho v_0^2=f\,.$$

В результате формула (8) примет окончательный вид:

$$\mathbf{M}_O = -f\, S(\boldsymbol{\gamma})\left[\boldsymbol{\gamma}\times\mathbf{c}(\boldsymbol{\gamma})\right] \tag{9}$$

Таким образом, мы получили выражение для момента, действующего на твердое тело с неподвижной точкой, находящееся в потоке частиц. Несложно видеть, что этот момент зависит от направления потока, «омывающего» тело. Заметим, что при выводе этой формулы мы использовали предположение (1). Поэтому формулой (9) следует пользоваться лишь при изучении медленных вращательных движений тела с неподвижной точкой.

Таким образом, уравнения движения твердого тела с неподвижной точкой в потоке частиц имеют вид

$$\mathbf{J}\dot{\boldsymbol{\omega}} + \left[\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{J}\boldsymbol{\omega}\right] = -f\, S(\boldsymbol{\gamma})\left[\boldsymbol{\gamma}\times\mathbf{c}(\boldsymbol{\gamma})\right],\quad \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \left[\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{\gamma}\right] = 0 \tag{10}$$

где $\mathbf{J} = \mathrm{diag}(A_1, A_2, A_3)$ – это тензор инерции тела относительно неподвижной точки O.

Для того, чтобы более четко осознать, что представляют собой уравнения (10), рассмотрим случай тела с неподвижной точкой, ограниченного поверхностью сферы и обтекаемого потоком частиц.

2. Пример

Вычислим момент $\mathbf{M}_O$, определяемый формулой (9), в случае, когда тело с неподвижной точкой ограничено поверхностью сферы радиуса R, а неподвижной точкой является центр сферы. Тогда фигура S_0 представляет собой круг, радиус которого равен радиусу R сферы. Площадь этого круга постоянна и равна

$$S(\boldsymbol{\gamma}) = \pi R^2 = \mathrm{const}\,.$$

Очевидно, что центр масс однородной пластины, имеющей форму фигуры S_0, будет располагаться в центре круга. Поэтому вектор $\mathbf{c}(\boldsymbol{\gamma})$, соединяющий проекцию неподвижной точки на плоскость, перпендикулярную потоку, и центр масс пластины, имеющей форму фигуры S_0, в данном случае равен нулю. Следовательно,

$$\mathbf{M}_O = 0\,.$$

Вычислим теперь момент $\mathbf{M}_O$ в случае, когда в качестве неподвижной точки выбрана произвольная точка O_1 сферы. Введем систему координат O_1xyz, оси которой направлены по главным осям инерции тела для точки O_1. Координаты центра сферы – точки в системе координат O_1xyz обозначим $\overrightarrow{O_1O} = (a_1, a_2, a_3)$. Согласно известной формуле теоретической механики

$$\mathbf{M}_{O_1} = \mathbf{M}_O - \left[\overrightarrow{OO_1}\times\mathbf{F}\right] = \left[\overrightarrow{O_1O}\times\mathbf{F}\right] = \left[\overrightarrow{O_1O}\times f\, S(\boldsymbol{\gamma})\boldsymbol{\gamma}\right] = f\pi R^2\left[\overrightarrow{O_1O}\times\boldsymbol{\gamma}\right].$$

Пусть $\mathbf{M}_{O_1} = (M_1, M_2, M_3)$ в системе координат O_1xyz. Тогда

$$M_1 = f\pi R^2(a_2\gamma_3 - a_3\gamma_2),\; M_2 = f\pi R^2(a_3\gamma_1 - a_1\gamma_3),\; M_3 = f\pi R^2(a_1\gamma_2 - a_2\gamma_1)\,.$$

Видно, что в этом случае уравнения (10) принимают вид классических уравнений Эйлера – Пуассона, описывающих движение тяжелого твердого тела вокруг неподвижной точки. Поэтому можно рассматривать систему уравнений (10) как возможное обобщение классических уравнений Эйлера – Пуассона.

Уравнения (10) обладают интегральным инвариантом плотности единица, а также первыми интегралами

$$J_1 = (\mathbf{J}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\gamma}) \text{ и } J_2 = \boldsymbol{\gamma}^2 = 1\,.$$

Однако в общем случае эти уравнения не обладают первым интегралом типа энергии. Справедливо следующее утверждение

Утверждение 1. Если для любых $i,\ j,\ i\neq j$ выполнены соотношения

$$c_i\frac{\partial S}{\partial\gamma_j} + \frac{\partial c_i}{\partial\gamma_j}S(\boldsymbol{\gamma}) = c_j\frac{\partial S}{\partial\gamma_i} + \frac{\partial c_j}{\partial\gamma_i}S(\boldsymbol{\gamma}) \tag{11}$$

то уравнения движения тела с неподвижной точкой в потоке частиц (10) обладают интегралом типа энергии

$$J_0 = \frac{1}{2}(\mathbf{J}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\omega}) - f\,U(\boldsymbol{\gamma}) = h = \mathrm{const}$$

<u>Доказательство.</u> Пусть

$$S(\boldsymbol{\gamma})\mathbf{c}(\boldsymbol{\gamma}) = \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \tag{12}$$

для некоторой функции $U(\boldsymbol{\gamma})$. Тогда если функция $U(\boldsymbol{\gamma})$ достаточно гладкая, то для выполнения соотношений (12) необходимо и достаточно, чтобы были выполнены условия (11). При этом уравнения движения (10) допускают первый интеграл J_0.

Литература

1. Белецкий В.В. Движение искусственного спутника относительно центра масс. М: Наука, 1965. 416 с.

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ ВХОДНЫХ ПОТОКОВ НА ПРОЦЕСС УПРАВЛЕНИЯ В СИСТЕМЕ С ВЫДЕЛЕННЫМ ПЕШЕХОДНЫМ РЕЖИМОМ

С.А. Лембриков, Е.В. Кувыкина

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

В работе рассмотрен специальный класс алгоритмов с обратной связью для управления потоками транспорта и пешеходов на перекрёстке. Специфической особенностью систем управления дорожным движением является изменение вероятностной структуры входных потоков под влиянием случайных факторов. Решена задача определения оптимального управления для потоков различной вероятностной структуры с применением метода имитационного моделирования. Исследована зависимость оптимального управления и поведения системы от параметров входных потоков.

Ключевые слова: управление движением, конфликтные потоки, поток Бартлетта, поток Пуассона, транспортные потоки, пешеходные потоки, интенсивность входных потоков, средняя длина пачки, оптимальные параметры управления.

Задача управления транспортными и пешеходными потоками на перекрёстке представляет значительный интерес [1–3]. Применение различных алгоритмов управления транспортной системой позволяет снизить нагрузку на дорожную сеть. В свою очередь это положительно влияет на безопасность и экологическую ситуацию на дороге. В данном исследовании изучено влияние вероятностной структуры и параметров входных потоков на работу системы.

В работе рассматривается система массового обслуживания (СМО) с ожиданием. Она представляет собой «Т-образный» перекрёсток, который схематично изображён на рис. 1.

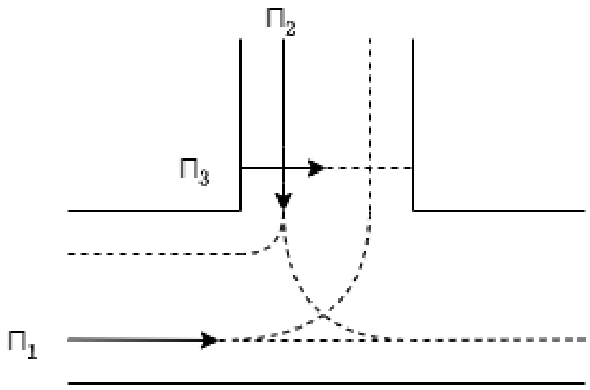


Рис. 1. Схема перекрёстка

В систему поступает 3 независимых конфликтных потока Π_1, Π_2, и Π_3, где Π_1 и Π_2 являются потоками машин, а Π_3 – потоком пешеходов. Движение происходит в пересекающихся направлениях, поэтому одновременное обслуживание потоков невозможно. Таким образом, потоки являются попарно конфликтными [4].

Обслуживающее устройство (ОУ) представляет собой автомат-светофор, у которого имеется восемь режимов работы $\Gamma^{(1)}, \Gamma^{(2)}, \dots, \Gamma^{(8)}$. В режимах $\Gamma^{(1)}$ и $\Gamma^{(3)}$ разрешён переезд через перекрёсток машинам потоков Π_1 и Π_2 соответственно. В $\Gamma^{(5)}$ и $\Gamma^{(7)}$ обслуживается поток пешеходов Π_3. Режимы $\Gamma^{(2)}, \Gamma^{(4)}, \Gamma^{(6)}$ и $\Gamma^{(8)}$ – это режимы ориентации-переналадок. Они соответствуют жёлтому свету и служат для безаварийной работы системы. В каждом из режимов ОУ находится некоторое фиксированное время. То есть, в режиме $\Gamma^{(r)}$ ОУ находится T_r единиц времени, где $T_r = const, r = \overline{1,8}$. Длительности режимов жёлтого света выбираются из условий безопасности движения на данном перекрёстке. Длительности T_1, T_3, T_5 и T_7 являются управляющими параметрами алгоритма.

Граф смены режимов работы ОУ представлен на рис. 2. Переходы $\Gamma^{(1)} \rightarrow \Gamma^{(2)}$, $\Gamma^{(3)} \rightarrow \Gamma^{(4)}$, $\Gamma^{(5)} \rightarrow \Gamma^{(6)}$, $\Gamma^{(6)} \rightarrow \Gamma^{(3)}$, $\Gamma^{(7)} \rightarrow \Gamma^{(8)}$, $\Gamma^{(8)} \rightarrow \Gamma^{(1)}$ определяются однозначно. Рассмотрим правила переключения режимов в точках ветвления. Из режима $\Gamma^{(2)}$ ОУ переключается в режим $\Gamma^{(3)}$, если в момент окончания $\Gamma^{(2)}$ на перекрёстке скопилось не более, чем N_1 пешеходов. В противном случае, включается режим $\Gamma^{(5)}$. Аналогично, после режима $\Gamma^{(4)}$, включается режим $\Gamma^{(1)}$, если в момент окончания $\Gamma^{(4)}$ на перекрёстке скопилось не более, чем N_2 пешеходов. В противном случае, ОУ переходит в режим $\Gamma^{(7)}$.

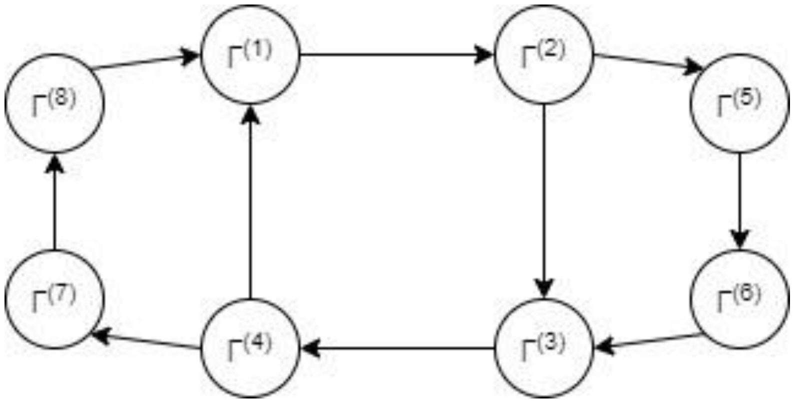


Рис. 2. Граф смены режимов работы ОУ

Работа данного перекрёстка рассматривается для случая входных потоков Пуассона и Бартлетта. Поток Пуассона математически описывает поток с независимым движением заявок и определяется своей интенсивностью λ. В дальнейшем будем предполагать, что пешеходный поток Π_3 является пуассоновским. Потоки Бартлетта являются математической моделью потоков транспортных пачек и описываются нелокально с помощью векторной случайной последовательности $\{(\tau_i, \eta_{1,i}, \eta_{2,i}), i \geq 0\}$ [5, 6]. В качестве моментов наблюдения $\tau_i, i \geq 0$ выбираются моменты поступления первых требований в пачках. Случайные величины $\eta_{j,i}$ описывают длину i-ой пачки потока Π_j и имеют следующее распределение:

$$\begin{cases} P(\eta_{j,i} = 1) = 1 - r_j \\ P(\eta_{j,i} = k) = r_j(1 - g_j){g_j}^{k-2} \text{ для } k \geq 2, \ r_j, g_j \in (0;\ 1), j = \overline{1,2} \end{cases} \tag{1}$$

Под длиной в данном случае понимается количество заявок в пачке. Нетрудно видеть, что среднее число требований в -ой пачке потока Π_j рассчитывается по следующей формуле:

$$M_{\eta_{j,i}} = 1 + {r_j}/{(1 - g_j)}, r_j, g_j \in (0; 1), j = \overline{1,2} \tag{2}$$

Рассмотрим физический смысл параметров распределения (1). Параметр r_j – это вероятность того, что в систему поступает пачка из двух и более заявок. Параметр g_j связан со средней длиной пачки (2), $j = \overline{1,2}$.

Для систем с ожиданием основным критерием качества работы являются средние задержки γ произвольного требования на перекрёстке, которые вычисляются по формуле

$$\gamma = (\lambda_1 * \gamma_1 + \lambda_2 * \gamma_2 + \lambda_3 * \gamma_3)/(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3), \tag{3}$$

где λ_j – интенсивность Π_j, а γ_j – средние задержки произвольной заявки в системе в потоке Π_j, $j = \overline{1,3}$. Оптимальными считаются параметры управляющего алгоритма, при которых достигаются минимальные средние задержки γ. В данной работе задача определения квази-оптимальных параметров решается численно. Для вычисления оценки средних задержек γ произвольной заявки в системе используется метод имитационного моделирования.

Численно исследовано влияние вероятностной структуры входных потоков и средней длины пачки на работу системы. Установлено, что с увеличением математического ожидания количества заявок в пачке значения квази-оптимальных параметров управления увеличиваются. Также возрастает минимальное значение оценки средних задержек γ. Помимо этого выяснено, что изменение вероятностной структуры входных потоков также влияет на значения квази-оптимальных параметров управления и минимальное значение оценки средних задержек γ. Для иллюстрации данного вывода рассмотрим следующий пример. Пусть интенсивности потоков $П_1, П_2$ и $П_3$ совпадают: $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0{,}1$ (заявок в секунду). Критические значения для очередей по потоку пешеходов $П_3$ примем равными нулю: $N_1 = N_2 = 0$ (заявок). Длительности режимов обслуживания пешеходов $T_5 = T_7 = 30$ (сек). Режимы жёлтого света будут длиться по три секунды: $T_2 = T_4 = T_6 = T_8 = 3$ (сек). Для случая пуассоновских входных потоков $П_1, П_2$ и $П_3$ удалось получить следующие квази-оптимальные параметры управления: $T_1 = 16$ (сек), $T_3 = 15$ (сек). Минимальное значение оценки средних задержек γ произвольного требования составило 33,72 (сек). Теперь рассмотрим два случая, когда потоки машин $П_1$ и $П_2$ являются потоками Бартлетта. При средней длине пачки $M\eta_{j,i} = 2$ (заявок в пачке) получены следующие квази-оптимальные параметры: $T_1 = 41$ (сек), $T_3 = 42$ (сек). Минимальное значение оценки средних задержек γ произвольной заявки в системе составило 52,51 (сек). При значении $M\eta_{j,i} = 11$ (заявок в пачке) удалось получить следующие квази-оптимальные параметры управления: $T_1 = 49$ (сек), $T_3 = 51$ (сек). Минимальное значение оценки средних задержек γ произвольного требования составило 60,62 (сек). Для сравнение полученных результатов рассмотрим таблицу 1.

Таблица 4. Влияние значения $M_{\eta_{j,i}}, j = \overline{1,2}$ на работу системы

$M\eta_{j,i} = 1$ (заявок в пачке) (Все входные потоки являются пуассоновскими)	$M\eta_{j,i} = 2$ (заявок в пачке) $g_j = 0{,}91$ $r_j = 0{,}09, j = \overline{1,2}$	$M\eta_{j,i} = 11$ (заявок в пачке) $g_j = 0{,}91$ $r_j = 0{,}9, j = \overline{1,2}$
$T_1 = 16$ (сек) $T_3 = 15$ (сек) $\gamma = 33{,}72$ (сек)	$T_1 = 41$ (сек) $T_3 = 42$ (сек) $\gamma = 52{,}51$ (сек)	$T_1 = 49$ (сек) $T_3 = 51$ (сек) $\gamma = 60{,}62$ (сек)

В таблице 1 верхняя строка отвечает за параметры входных потоков. Причём, в первом столбце представлен случай, когда все три входных потока являются пуассоновскими. Во втором и третьем столбце представлены случаи, когда транспортные потоки $П_1$ и $П_2$ являются потоками Бартлетта. В нижней строке приведены полученные результаты. Из таблицы 1 видно, что в случае входных потоков Пуассона система гораздо лучше справляется с обслуживанием заявок. Сравнивая результаты первых двух столбцов, можно заметить, что разница в минимальных значениях оценки средних задержек γ составила 18,79 (сек). Квази-оптимальные параметры управления увеличились более, чем в два раза. Сравнение второго и третьего столбца подтверждает, что увеличение средней длины пачки для потоков машин действительно влияет на работу системы. Минимальное значение оценки средних задержек γ увеличилось – разница составила 8,11 (сек). При этом значения квази-оптимальных параметров управления также увеличились. Данные выводы о зависимости работы системы от вероятностной структуры входных потоков и средней длины пачки согласуются с результатами, полученными в статье [7] для другого управляющего алгоритма.

Кроме этого, изучено влияние параметра r_j на работу системы при неизменной средней длине пачки. Установлено, что при увеличении параметра r_j минимальное значение оценки средних задержек γ уменьшается, $j = \overline{1,2}$. Рассмотрим конкретный пример. Пусть интенсивности потоков $П_1, П_2$ и $П_3$ совпадают: $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0{,}1$ (заявок в секунду). Критические значения для очередей по потоку пешеходов $П_3$ примем равными нулю: $N_1 = N_2 = 0$ (заявок). Длительности режимов обслуживания пешеходов $T_5 = T_7 = 30$ (сек). Для режимов $\Gamma^{(2)}, \Gamma^{(4)}, \Gamma^{(6)}, \Gamma^{(8)}$ ориентации и переналадок $T_2 = T_4 = T_6 = T_8 = 3$ (сек). Проведены вычисления для различных значений средней длины пачки: $M\eta_{j,i} = 2, M\eta_{j,i} = 3, M\eta_{j,i} = 5$ и $M\eta_{j,i} = 11$ (заявок), $j = \overline{1,2}$. Для каждого из вышеперечисленных значений, будем варьировать параметр r_j в пределах от 0,5 до 0,9 с шагом в 0,1, $j = \overline{1,2}$.

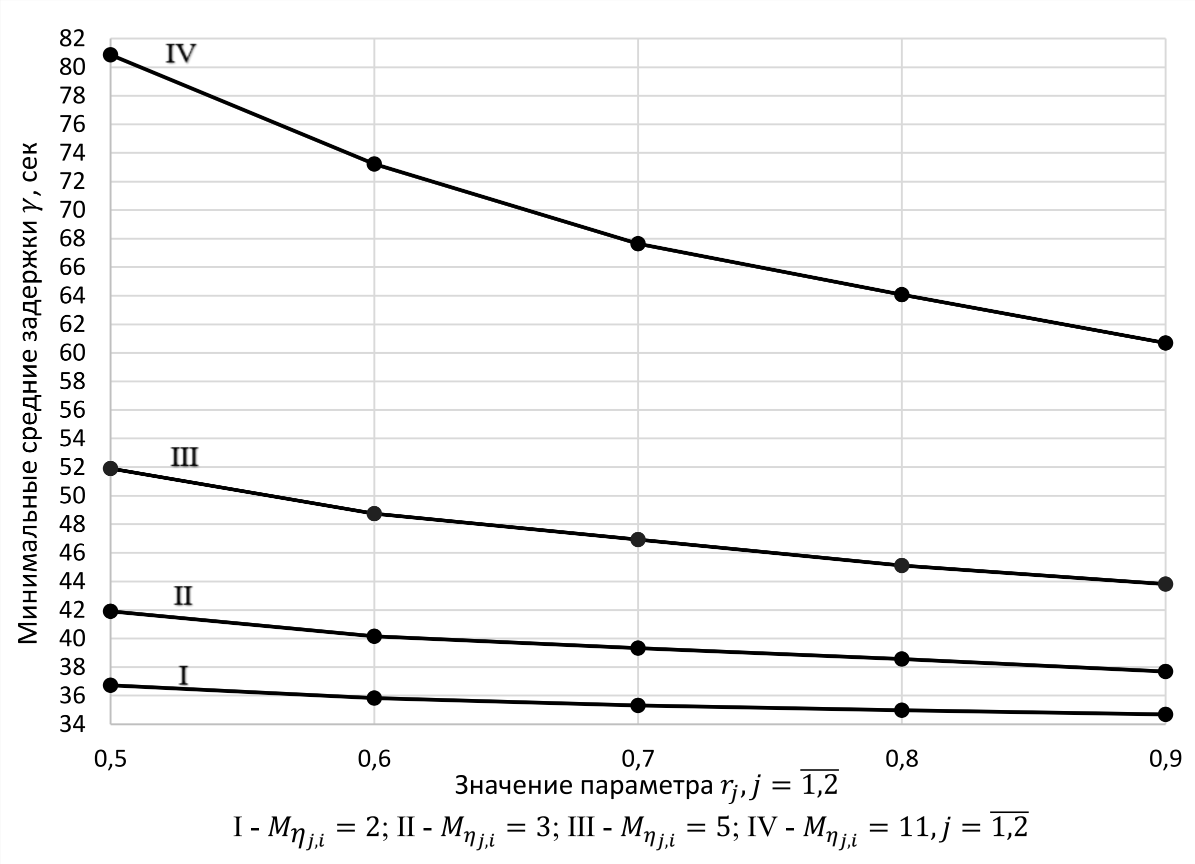


Рис. 2. Зависимость средних задержек γ от параметра r_j при разных значениях $M\eta_{j,i}$, $j = \overline{1,2}$

Графики на рис. 2 подтверждают, что при увеличении параметра r_j минимальное значение оценки средних задержек γ уменьшается, $j = \overline{1,2}$. Заметим, что эта тенденция проявляется тем сильнее, чем больше средняя длина пачки. Например, на графике I, при $M\eta_{j,i} = 2$ (заявок в пачке), разница между значениями γ при $r_j = 0{,}5$ и $r_j = 0{,}9$, $j = \overline{1,2}$ составила $36{,}73 - 34{,}69 = 2{,}04$ (сек). На графике IV, при $M\eta_{j,i} = 11$ (заявок в пачке), разница между значениями γ при $r_j = 0{,}5$ и $r_j = 0{,}9$, $j = \overline{1,2}$ составила $80{,}86 - 60{,}69 = 20{,}17$ (сек). С увеличением параметра r_j, количество единичных требований, которые поступают в систему по потоку Π_j, уменьшается, так как r_j – это вероятность того, что поступит пачка из двух и более заявок, $j = \overline{1,2}$. То есть, чем больше пачек с длиной, отличной от единицы, поступает в систему, тем лучше она справляется с их обслуживанием.

Проведённые исследования показали, что изменение вероятностной структуры входных потоков, а также рост средней длины пачки влияет на значения квази-оптимальных параметров управления и минимальное значение оценки средних задержек γ. Установлено, что при неизменной средней длине пачки, с ростом r_j, происходит уменьшение минимального значения оценки средних задержек γ произвольного требования в системе, $j = \overline{1,2}$.

Литература

1. Кудрявцев Е. В. Анализ дискретной модели системы адаптивного управления конфликтными неоднородными потоками // Вестник Московского университета. 2019. №1. С. 19–26.
2. Загутин Д. С., А. А. Скудина., О. А. Бахтеев., С. А. Миронов. Исследование параметров установки транспортных и пешеходных светофоров // Инженерный вестник Дона. 2019. №1.
3. Бабичева Т. С. Методы теории массового обслуживания при исследование и оптимизации движения на управляемых перекрёстках // Труды МФТИ. 2015. №2. С. 119–130.

4. Зорин А. В. Оптимизация параметров управления конфликтными потоками в классе циклических алгоритмов // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. 2011. №3. С. 70–77.
5. Федоткин М. А. Неполное описание потоков неоднородных требований. Теория массового обслуживания. Москва: Изд-во МГУ, ВНИИСИ, 1981. 118 с.
6. Кувыкина Е. В. Общая постановка задачи об алгоритмическом управлении конфликтными потоками заявок при их нелокальном описании // Моделирование динамических систем. Сборник научных трудов Нижегородского филиала института машиноведения РАН. 2007. С. 65–71.
7. Кувыкина Е. В. Изучение системы управления конфликтными транспортными потоками в классе алгоритмов с дообслуживанием // Научные проблемы водного транспорта. 2016. №48 С. 56–61.

ПРОГНОЗ БОЛЬШИХ УКЛОНЕНИЙ В МОДЕЛИ ВАКЦИНАЦИИ

И.Ю. Липко

Севастопольский государственный университет

Настоящая статья посвящена прогнозу редких событий больших значений инфицированных особей в модели вакцинации с помощью методов теории больших уклонений. Прогноз строится на основе оценок, которые получаются путём проецирования текущего состояния на А-профиль. Оценка осуществляется путём расчёта квазипотенциалов из аттрактора до порогового значения состояния. Приводится сопоставление полученных оценок с наблюдаемыми в будущем величинами.

Ключевые слова: редкие события, квазипотенциал, инстантон, А-профиль, большие уклонения, вакцинация.

1. Введение

В последние годы вопрос изучения моделей болезней, вакцинации стал довольно актуальным ввиду обострения ситуации с эпидемией Covid-19. Одной из важнейших задач является прогнозирование числа инфицированных. Очевидно, что в статье будут рассмотрены математические методы прогноза, а не социальные, но тем не менее, как показывает практика такие методы бывают весьма эффективными.

В рамках представленной статьи я хочу продемонстрировать возможность применения процедуры проецирования на А-профиль к модели вакцинации с целью прогнозировать опасные и редкие значения инфицированных особей.

2. Теоретическая часть

Содержит описание модели вакцинации и методов получения оценок вероятностей больших уклонений.

2.1. Модель вакцинации

В настоящей статье исследуется модель вакцинации SE(R)IRS [1,2]. Считается, что в популяции есть группы риска (подвергаемых) особей (S), инфицированных и имеющих симптомы особей (I), инфицированных, но не имеющих симптомы особей (E), группа восстановленных после болезни (R). Данная модель отличается от других тем, что у группы инфицированных без симптомов есть возможность выздороветь (рис. 1).

$$\begin{tikzcd} S \arrow[r, "\beta(I+\alpha E)/n"] & E \arrow[r, "\sigma"] \arrow[rr, bend left, "\delta"] & I \arrow[r, "\gamma"] & R \arrow[lll, bend left, "\omega"] \end{tikzcd}$$

Рис. 1. Схема динамики перехода из разных групп.

Описанной схеме соответствует дифференциальное уравнение

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -\beta S(I + \alpha E)/n + \omega R \\ \frac{dE}{dt} = \beta S(I + \alpha E)/n - (\sigma + \delta)E \\ \frac{dI}{dt} = \sigma E - \gamma I \\ \frac{dR}{dt} = \delta E + \gamma I - \omega R \end{cases}$$

В дальнейшем мы рассматриваем линеаризованную версию уравнения с внешним возмущением. Возмущение может быть вызвано ошибками подсчётов групп популяции, сезонными заболеваниями, изменениями в иммунитете и т.п., что моделируется белым шумом

$$\dot{x} = Ax + \varepsilon\xi, \tag{1}$$

где $x = (S, E, I)^T$ – вектор состояния, A – матрица объекта, ε – интенсивность внешнего воздействия, ξ – белый шум. Численные значения для матрицы взяты из статьи [1]

$$A = \begin{pmatrix} -\epsilon\,\omega(\delta + \sigma) - \omega & -\alpha R\beta/R_0 - & -\beta/R_0 - \omega \\ \epsilon\,\omega(\delta + \sigma) & -\beta\sigma/\gamma R_0 & \beta/R_0 \\ 0 & \sigma & -\gamma \end{pmatrix}.$$

Если количество n особей известно, то $R = n - S - I - E$.

2.3. Постановка задачи

Требуется предсказывать наперёд возможность превышения заданного (порогового) уровня количества инфицированных I_Π: найти оценку вероятности достижения порога $\hat{P}_t$, $t \in [t_c; t_c + T_p]$ по известным текущему состоянию φ_c и семейству А-профилей $\bar{\varphi}_{n_\varphi}$. Сформулированная задача носит характер оценки риска, поскольку не требуется предсказывать саму величину наперёд, как, например, в задачах машинного обучения. Но при этом качество предсказания можно оценить по некоторой интерпретации оценки риска. В данном случае эта оценка связана с вероятностью движения по наиболее вероятной траектории достижения порогового значения. На практике мы будем сверять качество прогноза с тем, а какое же действительно значение было достигнуто при той оценке, которая была показана ранее.

2.2. Наиболее вероятная траектория движения к критической ситуации

Рассмотрим общую задачу отыскания наиболее вероятной траектории. Пусть рассматривается динамическая система, возмущаемая белым шумом

$$\dot{x} = f(x,t) + \sqrt{\varepsilon}\sigma(x,t)\xi(t), x(0) = 0.$$

где $x = x(t)$ – вектор состояния, $f(x,t)$ – вектор-функция, описывающая динамику системы; $\sigma(x,t)$ – коэффициент диффузии, $\xi(t)$ – белый шум, $\sqrt{\varepsilon}$ – амплитуда шума.

Вентцель и Фрейдлин [3] показали, что вероятность наблюдения любой выборочной траектории близкой к заданной траектории $q = q(t)$ оценивается как $P\left\{\sup\limits_{t\in[0,T]} \|q - x\| < \delta\right\} \asymp \exp(-\varepsilon^{-1}S_T(q))$, для достаточно малых $\delta > 0$, где знак $\asymp$ обозначает логарифмическую эквивалентность. Функционал $S_T(x) = \frac{1}{2}\int_0^T (\dot{x} - f(x,t))^T \sigma\sigma^T (\dot{x} - f(x,t))dt$ называется функционалом действия (или функцией роста).

Вероятность $P(x(T) \in A)$ того, что стохастический процесс закончится в нефиксированный момент времени T в множестве $\mathrm{A} \subset \mathrm{R}^\mathrm{n}$, состоит из вкладов всех траекторий, близких ко всем возможным траекториям, заканчивающимся в A. Вклад, каждой из этих траекторий экспоненциально убывает. Наибольший вклад в эту вероятность делает траектория с наименьшим значением функционала действия, другими словами, наиболее вероятная траектория (инстантон) из φ_0 в A:

$$x^* = \arg\min_{x(t)\in\Theta} S_T(x),$$

где $\Theta = \{\varphi(t) \in C([0,T_S], \mathbb{R}^n) : \varphi(0) = \varphi_0, \ \varphi(T) \in A\}$, T_S – время симулирования.

Здесь и далее будет говориться о вероятности в смысле не одной реализации, а о семействе реализаций, удовлетворяющих множеству Θ для достаточно малых $\delta > 0$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} P\left\{\sup_{t\in[0,T]} \|x - x^*\| < \delta \mid x(T) \in A\right\} = 1.$$

Такую вероятность можно записать как $P\{x(t) \in A\} = \exp\{-\varepsilon^{-1} S_T(x)\}$. Параметр ε можно использовать как параметр нашей «рискованности» оценки.

Для случая линейной стационарной системы

$$\dot{\varphi}_t = A\varphi_t + p(t),\ \varphi(0) = \varphi_0,\ \varphi(T) = \varphi_f, \tag{2}$$

и уточнения задачи

$$\varphi^* = \arg \min_{\varphi:\varphi(-\infty)=\varphi_0, x(0)=\varphi_f} S_T(\varphi)$$

решение можно получить аналитически [4,5]:

$$\varphi^* = De^{A^T(T-t)} D^{-1} \varphi_f,$$
$$p^* = \sigma^T e^{-A^T t} \psi_f,$$

где $\varphi_t = \varphi(t)$ – n-вектор состояния, $A = \left.\frac{\partial f(x,t)}{\partial x}\right|_{x_{lin}}$ – матрица частных производных в точке линеаризации x_{lin}, φ_0 – аттрактор, $p^*(t)$ – «оптимальное» внешнее возмущение, ψ_f – значение сопряжённой системы, D – соответствует уравнению Ляпунова $\sigma\sigma^T = A^T D + DA$. Очевидно, что строить инстантон для бесконечного времени бессмысленно, поэтому при его построении ограничиваемся некоторым отрезком времени.

Подставляя элементы уравнения (1) в (2), будет решаться задача определения наиболее вероятной траектории к порогу.

2.3. Проецирование на А-профиль

Пусть задана норма $\|a\|_\mu = \sqrt{\sum_i \mu_i a_i^2}$ с весовыми коэффициентами $\mu_i \in [0,1]$, позволяющими учитывать состояния системы в разной степени. Пробегая на $t \in [0, T]$ по всему профилю φ_t^*, получаем расстояния $H_{\varphi_t^*}(\varphi(t_j), t) = \|\varphi(t_j) - \varphi_t^*\|_\mu$ между текущим состоянием $\varphi(t_j)$ и значениями на профиле [6]. Состоянию $\varphi(t_j)$ лучше всего будет соответствовать такое состояние на профиле, для которого выполняется

$$H_{\varphi_t^*}^* = H_{\varphi_t^*}^*(\varphi(t_j)) = \min_{t\in[0,T]} H_{\varphi_t^*}(\varphi(t_j), t).$$

Следовательно, все характеристики, связанные с этой точкой на профиле будут соответствовать с доверительным интервалом $H_{\varphi_t^*}^*$: оценка времени до достижения КС $T_{H^*} = T - argH_{\varphi_t^*}^*(\varphi(t_j))$, оценка значения функционала действия $\hat{S}(T_{H^*})$, оценка вероятности $\hat{P}(T_{H^*}, \varepsilon) = e^{-\varepsilon^{-1}\cdot\hat{S}(T_{H^*})}$ движения объекта вдоль профиля φ_t^* к состоянию φ_T при заданной интенсивности внешнего воздействия $\sqrt{\varepsilon}$. Эти характеристики для дальнейшего использования удобно объединить в кортеж $z(y) = \left\{H_{\varphi_t^*}^*(y),\ T_{H^*},\ \hat{S}(T_{H^*}),\ \hat{P}(T_{H^*}, \varepsilon)\right\}$. Описанная процедура для одной компоненты вектора состояния показана на рис. 2.

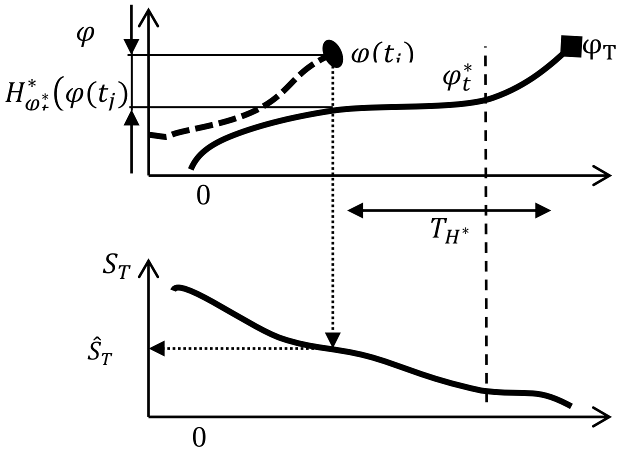
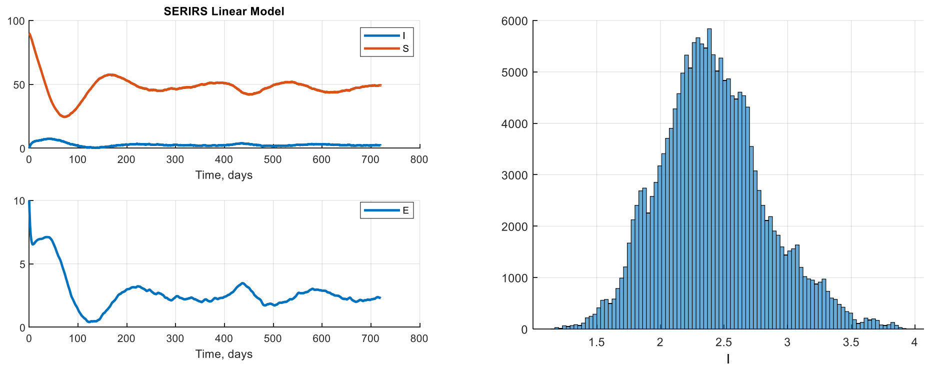


Рис. 2. Проецирование на А-профиль

3. Результаты

2.3. Моделирование системы

Система (1) моделируется с внешними возмущениями. Результаты моделирования представлены на рисунке 3а. По всему интервалу моделирования видно (рис. 3б), что, например, величина инфицированных больше чем $I_{\Pi} = 3.8$ является редким событием. Выбираем такое значение в качестве редкого события и будем пробовать его прогнозировать.



а) б)

Рис. 3. Моделирование при воздействии случайных возмущений, а) инфицированные, подвергаемые и безсимптомные больные; б) распределение количества инфцированных за 3 года

3.1 Результаты прогнозирования

Было проведено сопоставление оценок вероятностей значений количества инфицированных в несколько последующих дней. Для прогноза можно использовать несколько направлений выбора пороговых значений вероятности $P_{п}$,.

Очевидно, что можно провести моделирование и по апостериорным данным (рис. 4) выбрать пороговое значение вероятности и делать прогнозы на этой основе. Например, видно, что для прогноза на 1 день вперёд следует выбрать $P_{п} = 0.5$, на 3 дня выбрать $P_{п} = 0.4$ и т.д.

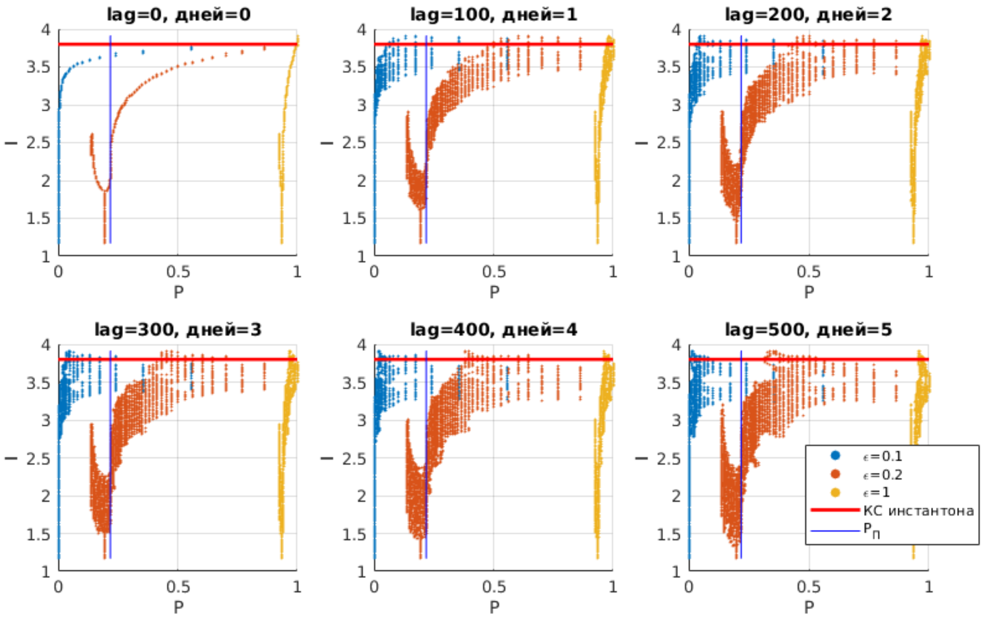


Рис. 4. А-профиль и выбор пороговой вероятности $P_п$

С другой стороны, без выполнения симулирования с применением метода Монте-Карло, можно использовать А-профили (рис. 5) и делать оценки по ним. Для начала строим А-профиль к пороговому значению $I_П = 3.8$ при нескольких значениях вероятностей P_ε, $\varepsilon = \{0.1, 0.2, 1\}$. Это позволит выбрать стратегию назначения пороговой оценки вероятности $P_п$, при которой следует оповещать о том, что последует пересечение порога.

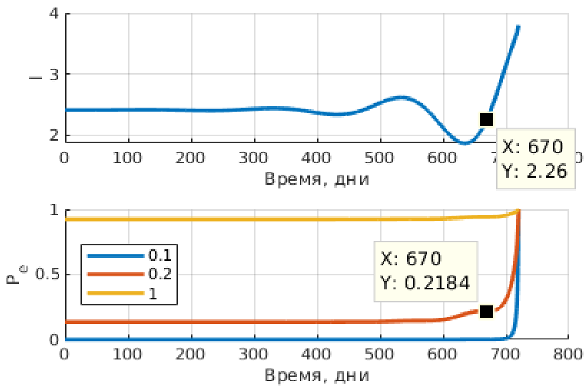


Рис. 5. А-профиль и выбор пороговой вероятности $P_п$ для разных интенсивностей возмущений

Если состоится прогноз, при котором мы будем оповещать о том, что порог превышен $P_п = 0.2184$, то из рис. видно, что для прогноза на 1 день вперёд довольно много случаев, когда прогноз слишком пессимистичный и количество инфицированных не достигает порогового уровня.

Литература

1. Balisacan, Jonas & Chyba, Monique & Shanbrom, Corey. (2021). Two new compartmental epidemiological models and their equilibria. 10.1101/2021.09.03.21263050.
2. Nwafor, Emmanuel & Okoro, C & Inyama, Simeon & Omame, Andrew & Ifeyinwa, Mbachu. (2019). Analysis of a Mathematical Vaccination Model of an Infectious Measles Disease. 5. 168-188.
3. Вентцель А.Д., Фрейдлин М.И. Флуктуации в динамических системах под действием малых случайных возмущений. – М.: Наука, 1979. 424 с.

4. T. Grafke, E.V. Eijnden. Numeric computation of rare events via large deviation theory [Текст]. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science: сб. науч. тр. 2019. DOI: 29. 063118. 10.1063/1.5084025.
5. Дубовик С.А. Функционально устойчивые системы управления [Текст]: асимптотические методы синтеза: монография / С. А. Дубовик, А. А. Кабанов; Севастопольский государственный университет. – М.: ИНФРА-М, 2019. 248 с.: ил.
6. Липко, И. Ю. К вопросу о прогнозировании с использованием принципа больших уклонений. Интеллектуальные системы, управление и мехатроника - 2017: Материалы III Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых, аспирантов и студентов, Севастополь. – Севастополь: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Севастопольский государственный университет", 2017. – С. 46-50.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СДВИГОВЫХ ВОЛН В МЕТОДЕ ЭЛАСТОГРАФИИ SUPERSONIC IMAGING [1*]

А.А. Лисин, А.Е. Спивак, И.Ю. Демин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В данной работе проведено численное моделирование метода эластографии SSI с помощью математической модели, основанной на уравнении Вестервельта. Реализовано решение в програмной среде MatLab, с применением пакета скриптов kWave, визуализация решения выполнена в 3D.

Ключевые слова: численное моделтрование, ультразвук, эластография, SSI, MatLab, kWave.

1. Введение

Проведение физического моделирования требует значительной подготовки, связанной с подготовкой объекта моделирования, и любая допущенная ошибка серьезно влияет на результат, поэтому численный эксперимент позволяет предсказать результат физического измерения, оценить результат, и при наличии ошибки заметить ее и внести поправки. Основой численного моделирования является математическая модель, описывающая поведение системы в зависимости от физических параметров. Распространение волн в упругих средах удобно моделировать в пакете MATLAB, оптимизированном для работы с матрицами большого размера, а для удобства работы с пространством toolbox k-Wave, созданный для расчета распространения волн в упругих средах.

2. Уравнение Вестервельта

Для описания распространения акустических волн в упругих средах существует несколько базовых уравнений, таких как уравнение Хохлова-Заболоцкой-Кузнецова и уравнение Вестервельта. В данной работе метод моделирование основывается на уравнений Вестервельта, так как оно дает более высокую скорость вычислений, при том что качественно обе модели демонстрируют схожее поведение волны в среде.

Численное решение сводится к решению уравнения Вестервельта в частных производных [1]

$$\frac{\partial^2 p}{\partial\tau\partial z} = \frac{c_0}{2}\Delta p + \frac{\beta}{2\rho_0 c_0^3}\frac{\partial^2 p^2}{\partial\tau^2}, \tau = t - \frac{z}{c_0} \qquad (1)$$

z – направление вдоль оси пучка β – коэффициент нелинейности.

Уравнение решается с использованием псевдоспектрального метода k-пространства, где пространственные градиенты вычисляются с использованием схемы БПФ, а временные градиенты вычисляются с использованием скорректированной k-пространственной разностной схемы. Каждая из этих схем реализуется посредством метода конечных элементов.

Область, в которой ищется решение дифференциальных уравнений, разбивается на конечное количество подобластей (элементов). В каждом из элементов произвольно выбирается вид аппроксимирующей функции. В простейшем случае это полином первой степени. Вне своего элемента аппроксимирующая функция равна нулю. Значения функций на границах элементов (в узлах) являются решением задачи и заранее неизвестны. Коэффициенты аппроксимирующих функций обычно ищутся из условия равенства значения соседних функций на границах между элементами (в узлах). Затем эти коэффициенты выражаются через значения функций в узлах элементов. Составляется система линейных алгебраических уравнений. Количество уравнений равно количеству неизвестных значений в узлах, на которых ищется решение исходной систе-

[1*] Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (государственное задание No. 0729-2020-0040).

мы, прямо пропорционально количеству элементов и ограничивается только возможностями ЭВМ. Так как каждый из элементов связан с ограниченным количеством соседних, система линейных алгебраических уравнений имеет разрежённый вид, что существенно упрощает её решение [2].

Для того, чтобы решать уравнение Вестервельта, его необходимо привести к слабой формулировке, для чего введем начальные и граничные условия:

$$\begin{cases} p(0,t) = f(t) \\ p(x,0) = 0, \\ p(L,t) = 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t}(t=0) = 0 \end{cases} \tag{2}$$

f(t) – функция источника при x=0, v(t)- тестовая функция.

$$\int_0^L \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} V(x)dx - \frac{1}{C^2}\int_0^L \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} V(x)dx = -\frac{\beta}{\rho_0 c_0^4}\int_0^L \frac{\partial^2 p^2}{\partial x^2} V(x)dx \tag{3}$$

Это является первой слабой формулировкой. Потребуем, чтобы v было достаточно гладким и удовлетворяющим v (0) = v (L) = 0, так как p имеет существенное значение. Решаем интегрированием по частям:

$$\int_0^L \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} V(x)dx = \left[\frac{\partial p}{\partial x} V(x)\right]_0^L - \int_0^L \frac{\partial p}{\partial x}\frac{dV}{dx}dx = -\int_0^L \frac{\partial p}{\partial x}\frac{dV}{dx}dx \tag{4}$$

где V обращается в 0 при x=0 и x=L.

$$\int_0^L \frac{\partial p}{\partial x}\frac{dV}{dx}dx + \frac{1}{C^2}\int_0^L \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} V(x)dx = \frac{\beta}{\rho_0 c_0^4}\int_0^L \frac{\partial^2 p^2}{\partial x^2} V(x)dx \tag{5}$$

что теперь справедливо только для гладких v, удовлетворяющих v(0) =v(L)= 0

Для реализации численной модели на первом этапе необходимо рассчитать матрицу сигналов во временном пространстве. Каждый источник излучает сигнал как набор точечных источников,

$$S = \begin{cases} A_s, & t < t_s \\ 0, & t > t_s \end{cases}$$

где t – время симуляции, – время, за которое излучает источник, и в каждой точке системы результирующий сигнал равен сумме сигналов из всех источников.

Следующим этапом является переход в частотную область с помощью алгоритма БПФ.

3. Моделирование метода SSI

Метод SSI(SuperSonic Imaging) является дальнейшим развитием метода SWEI. В его основе лежит последовательное возбуждение сдвиговой волны в нескольких точках различной глубины с целью получить профиль волны в форме конуса [2].

В случае с линейным датчиком излучателем является фазированная антенная решетка, состоящая из 128 элементов. В рамках заданной численной модели это 128 точечных источников. Для получения сдвиговой волны необходимо сфокусировать излучатели в точку. Это достигается с помощью квадратичного фазового набега на каждом излучателе, за ноль считаем центр датчика. Для моделирования сдвиговой волны источник расположен в области пятна фокусировки и состоит из 8 элементов, расположенных в форме ромба [3].

Для достижения такого эффекта в каждую последующую точку должна быть сфокусирована ультразвуковая волна до того, как сдвиговая волна, излученная из предыдущей точки, рассеется. Кроме того, расстояние между точками фокусировки не должно превышать расстояние, но которое распространится сдвиговая волна. Среда в данной модели принята однородной, с такими характерными параметрами, как плотность ρ = 1030 кг/м3 и скорость звука C = 1540 м/с.

На рис.1 показана последовательная фокусировка ультразвуковой волны в 3 точки на расстоянии 12 мм друг от друга. На основании этого рассчета получена карта распространения сдвигового волнового фронта (рис.1ё). Расчет радиационной силы и генерация сдвиговой волны проводится на основании результатов моделирования фокусировки ультразвуковой волны. Здесь источники излучения помещаются в центр таким образом, чтобы излучать в области пятна фокусировки суммарной мощностью, эквивалентной давлению, полученному в пятне на этапе фокусировки.

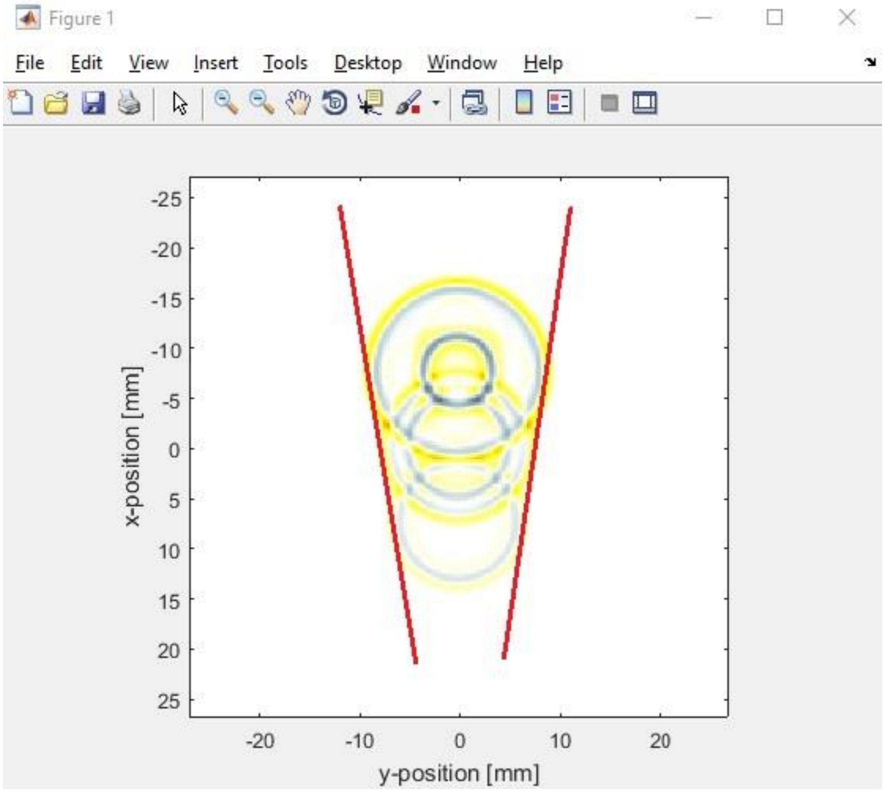


Рис.1. Карта распространия сдвигового волнового фронта

Средствами графического редактора AUTODESK MAYA были получены трехмерные карты распространения сдвиговой волны для конуса (рис.2). Для наглядности в пространство добавлено графическое решение из k-Wave, что позволило визуализировать ультразвуковой пучок и максимальные значения давления.

Для того, чтобы более наглядно визуализировать полученные результаты, использовано программное обеспечение Autodesk Maya – пакет для работы с 3d графикой и анимацией.

Он обладает своим скриптовым языком программирования, что позволило использовать численные значения, полученные в k-Wave, для визуализации генерации ультразвукового пучка и распространения сдвиговой волны с помощью геометрических примитивов. Специфика численного моделирования, а именно хранение состояния среды в виде массива чисел, позволяет использовать результаты, полученные в одной программе, в другой, для последующей обработки.

Распределение давления в среде в момент времени через MatLab было записано в файл в виде массива размерности среды (сетки k-grid). Данные по давлению хранятся в виде максимального значения, и множителя для каждой точки от 0 до 1.

Для получения трехмерного распространения использовалась цилиндрическая симметрия относительно оси фокусировки ультразвукового пучка, поскольку полученное распространение сдвиговой волны справедливо для любого направления, перпендикулярного к оси фокусировки пучка.

Чтобы определить границу волнового фронта, алгоритм проходит по высоте точки фокусировки все значения от края к центру, до первого множителя, значение которого >0.6, а размер зоны фокусировки >0.9 от максимального значения. Высота зоны определяется путем смещения координаты перебора вверх, порог работы алгоритма 0.6 и 0.9 соответственно. Для корректной работы при поиске границы волнового фронта алгоритм не учитывает область, ограниченную координатой встречи множителя 0.9 на первом шаге. Визуализированы области относительного давления с пороговым значением 0.15 MPa, что позволяет избежать наложения большого количества моделей друг на друга.

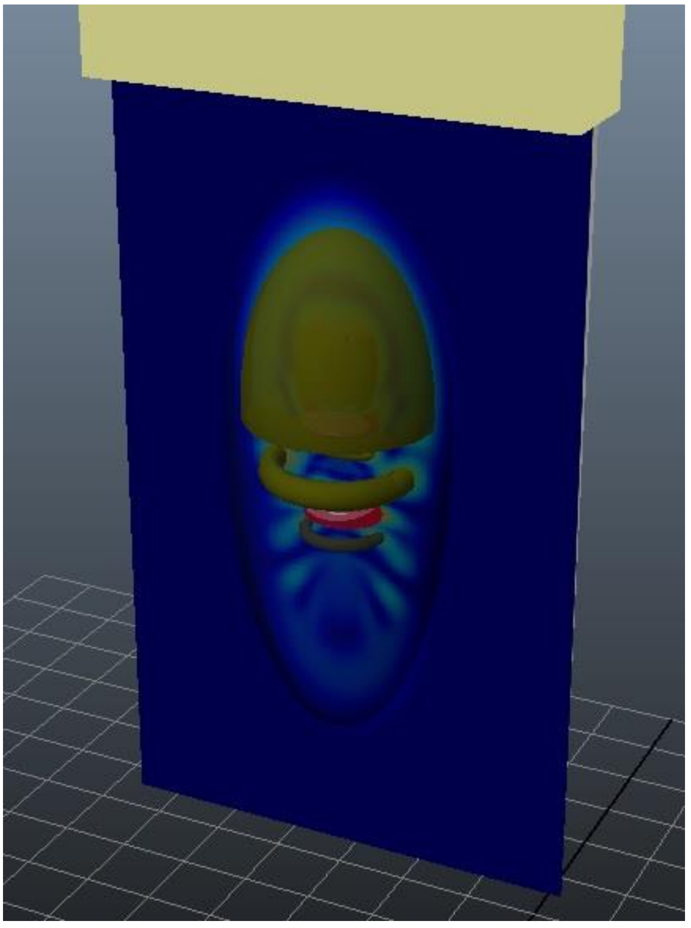


Рис.2. Визуализация численного решения k-wave в трехмерном редакторе.

Литература

1. Лисин А.А., Гурбатов С.Н., Демин И.Ю., Спивак А.Е. Численное моделирование, визуализация, и подсчет скорости сдвиговых волн в мягких биологических тканях // Ученые записки физического факультета Московского университета. 2019. № 5. С. 1950101.
2. Spivak, A.E., Demin, I.Y. Description and implementation of the Supersonic Shear Imaging method on the Verasonics research system // Journal of Physics: Conference Series, 2020, 1694(1), 012018.
3. Lisin A., Demin I. Numerical Simulation of Focused Ultrasonic Waves in Soft Biological Tissues With Subsequent Generation of Shear Waves // Journal of Physics: Conference Series. 7. Сер. "Information Technology, Telecommunications and Control Systems, ITTCS 2020" 2020. С. 012033.

О ЦЕНТРАЛЬНО СУЩЕСТВЕННЫХ ПОЛУКОЛЬЦАХ[1*]

***О.В. Любимцев*[1]*, А.А. Туганбаев*[2]**

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Национальный исследовательский университет «МЭИ»*

Полукольцо есть алгебраическая система, которая отличается от ассоциативного кольца с 1 только возможной необратимостью аддитивной операции. Мы изучаем класс центрально существенных полуколец, определяемых как полукольца, в которых любой нецентральный элемент после умножения на центральный элемент превращается в ненулевой центральный элемент. В работе приведены примеры некоммутативных центрально существенных полуколец и описаны свойства аддитивно вычислимых центрально существенных полуколец.

Ключевые слова: полукольцо, центр полукольца, центрально существенное полукольцо.

1. Введение

Общая теория полуколец возникла в 50-е годы XX столетия и в настоящее время является активно развивающимся разделом современной алгебры. Это связано отчасти с успешным применением ее в дискретной математике, компьютерной алгебре, идемпотентном анализе, теории оптимального управления и других разделах математики, см., например, [1].

Полукольцо есть алгебраическая система, состоящая их множества S вместе с двумя бинарными операциями, называемых сложением и умножением и удовлетворяющих следующим условиям:

(1) $(S, +, 0)$ – коммутативный моноид;

(2) $(S, \cdot, 1)$ – моноид;

(3) умножение дистрибутивно относительно сложения с обеих сторон;

(4) $0 \cdot s = 0 = s \cdot 0$ для всех $s \in S$.

Чтобы исключить тривиальный случай нулевого полукольца потребуем также, что $1 \neq 0$. *Центр* полукольца S есть множество $C(S) = \{s' \in S \mid ss' = s's$ для всех $s \in S\}$. Это множество непусто, так как содержит 0 и 1, и является подполукольцом в S. Полукольцо называется *центрально существенным*, если для каждого ненулевого элемента x существуют такие ненулевые центральные элементы y, z, что $xy = z$.

Центрально существенные кольца с ненулевой единицей изучались, например, в работах [2], [3], [4], [5], [6]. Каждое центрально существенное полупервичное кольцо с $1 \neq 0$ коммутативно; см. [2]. Если F – поле из двух элементов и Q_8 – группа кватернионов порядка 8, то групповая алгебра FQ_8 является конечным некоммутативным центрально существенным кольцом; см. [2]. В работе [6] построено такое центрально существенное кольцо R, что факторкольцо $R/J(R)$ по радикалу Джекобсона не является PI кольцом (в частности, кольцо $R/J(R)$ не коммутативно). Матричные центрально существенные алгебры изучались в [7]. Абелевы группы с центрально существенными кольцами эндоморфизмов рассматривались в работах [8] и [9].

Полукольцо S называется *аддитивно вычислимым*, если $x + z = y + z \Rightarrow x = y$ для любых $x, y, z \in S$. Кольцо $D(S)$ называется *кольцом разностей* полукольца S, если S есть подполукольцо в $D(S)$ и каждый элемент $a \in D(S)$ является разностью некоторых элементов $x, y \in S$: $a = x - y$. Класс аддитивно вычислимых полуколец содержит все кольца. Кольцо разностей единственно с точностью до изоморфизма над S; подробнее см. [10].

[1*] Работа О.В. Любимцева выполнена по теме государственного задания (№ 0729-2020-0055). Исследование А.А. Туганбаева выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект 16-11-10013П).

2. Центрально существенные полукольца некоторых классов полуколец

Элемент x полукольца S называется *мультипликативно вычислимым слева* (*справа*), если импликация $xy = xz$ ($yx = zx$) $\Rightarrow y = z$ выполнена для всех $y, z\in S$. Полукольцо S называется *мультипликативно вычислимым слева* (*справа*), если каждый $x\in S\setminus\{0\}$ мультипликативно вычислим слева (справа). Мультипликативно вычислимое слева и справа полукольцо называется *мультипликативно вычислимым*. Элемент a полукольца R называется *левым делителем нуля*, если выполнено $ab = 0$ для некоторого $0 \neq b\in S$. Также как в работе [5, Лемма 2.2] можно доказать, что в центрально существенном полукольце односторонние делители нуля являются двусторонними.

Предложение 1. Мультипликативно вычислимое слева (справа) центрально существенное полукольцо коммутативно.

Доказательство. Пусть a и b – ненулевые элементы полукольца S. Так как S – центрально существенное полукольцо, то существует такой $c\in C(S)$, что $ac\in C(S)$ и $ac \neq 0$. Мультипликативно вычислимое слева полукольцо не содержит левых делителей нуля; см. [10, Глава I, Теорема 4.4]. Поэтому $acb \neq 0$. Тогда $(ac)b = c(ab) = (ca)b = b(ca)= c(ba)$, откуда $ab = ba$. Аналогичные рассуждения проходят в случае мультипликативно вычислимых справа полуколец.

Полукольцо с делением, не являющееся кольцом, называется *полутелом*. Коммутативное полутело называется *полуполем*.

Следствие 2. Центрально существенное полутело является полуполем.

Доказательство. Из [10, Глава I, Теорема 5.5] следует, что полутело, содержащее не менее двух элементов, мультипликативно вычислимо.

Полукольцо называется *полупервичным*, если оно не имеет нильпотентных идеалов. Полукольцо S называется *полувычитаемым*, если для любых $a, b\in S$, $a \neq b$, найдется $x\in S$, такой что $a + x = b$ или $b + x = a$.

Предложение 3. Пусть S – аддитивно вычислимое полувычитаемое центрально существенное полукольцо с центром C. Следующие утверждения эквивалентны:

1) S – полупервичное полукольцо;
2) C – полупервичное полукольцо;
3) S не имеет ненулевых нильпотентных элементов;
4) S – коммутативное полукольцо без ненулевых нильпотентных элементов.

Доказательство. Хорошо известно, что полукольцо S вложимо в кольцо разностей D(S) тогда и только тогда, когда S является аддитивно вычислимым. Кроме этого, равенство $D(S) = -S \cup S$ выполнено в точности тогда, когда S – полувычитаемое полукольцо; см. [10, Глава II, Замечание 5.12]. Тогда утверждение следует из [4, Предложение 2.8].

Следующий пример показывает, что предложение 2.3 перестает быть верным без предположения аддитивной вычислимости и полувычитаемости.

Пример 4. Рассмотрим полугруппу $(M, \cdot)$, заданную таблицей умножения:

Таблица 1.

·	1	a	b	c
1	1	a	b	c
a	a	a	a	c
b	b	b	b	b
c	c	c	c	c

Для быстрой проверки ассоциативности удобно использовать тест ассоциативности по Лайту; см. [11]. Множество $S = Sub(M)$ всех подмножеств в M с операциями $A + B = A \cup B$ и $AB = \{ab \mid a \in A, b \in B\}$, где $A, B \in S$ образует полукольцо с нулем $\emptyset$ и единицей $1 = 1_M$; см. [12, Пример 1.10]. Имеем $|S| = 2^5 = 32$. Заметим, что S свободно от нулевых сумм, т.е. из $A + B = \emptyset$ следует, что $A = B = \emptyset$. Кроме этого, S аддитивно и мультипликативно идемпотентно. Запишем центр C(S): $C(S) = \{\emptyset, \{1\}, \{c\}, \{1, c\}\}$. Если $A \in S \setminus C(S)$, то $A \cdot \{c\} \in C(S) \setminus \emptyset$. Следовательно, S – некоммутативное центрально существенное полукольцо без делителей нуля, которое аддитивно вычислимо, но не является полувычитаемым.

3. Аддитивно вычисляемые центрально существенные полукольца

Известно, что всякий идемпотент центрально существенного кольца является центральным; см. [2, Лемма 2.3]. Как показывает пример 4, для полуколец это уже не так. Идемпотент e полукольца S называется *дополняемым*, если существует идемпотент $f \in S$, такой, что $e + f = 1$.

Предложение 5. В аддитивно вычислимом центрально существенном полукольце S любой дополняемый идемпотент является центральным.

Доказательство. Пусть $e^2 = e$ и $e + f = 1$ для некоторого $f \in S$. Так как S – аддитивно вычислимое полукольцо, то из $e = e + fe$ следует $fe = 0$. Аналогично, находим $ef = 0$. Пусть $x \in S$. Тогда $x = ex + fx$ и $xe = exe + fxe$.

Предположим сначала, что $fxe = 0$, т.е. $xe = exe$. Так как $x = xe + xf$, то $ex = exe + exf$. Если $exf \neq 0$, то существуют такие $c, d \in C(S)$, что $(exf)c = d \neq 0$. Тогда

$0 \neq d = ed = de = ((exfc)e = (exc)fe = 0$,

что приводит к противоречию. Следовательно, $exf = 0$ и $ex = xe = exe$.

Пусть теперь $fxe \neq 0$\$. Тогда $0 \neq (fxe)c = d$ для некоторых ненулевых $c, d \in C(S)$. В этом случае $0 \neq d = de = ed = ef(xec) = 0$. Вновь получено противоречие.

Следствие 6. Если S – аддитивно вычислимое полукольцо, то полукольцо $M_n(S)$ всех матриц и полукольцо $T_n(S)$ верхнетреугольных матриц над S при $n \geq 2$ не являются центрально существенными.

Доказательство. Для единичной матрицы указанных полуколец имеем: $E = E_{11} + \ldots + E_{nn}$, где $E_{11}, \ldots, E_{nn}$ – матричные единицы. Из [12, Пример 4.19] следует, что $M_n(S)$ является аддитивно вычислимым полукольцом. Идемпотенты $E_{11}, \ldots, E_{nn}$ дополняемы и не центральны. Следовательно, полукольца $M_n(S)$ и $T_n(S)$ не являются центрально существенными.

Как было отмечено выше, аддитивно вычислимое полукольцо S, и только оно, вкладывается в кольцо разностей D(S), элементы которого имеют вид $x – y$, где $x, y \in S$.

Пример 7. Рассмотрим полукольцо S, порожденное матрицами

$$\begin{pmatrix} \alpha & a & b \\ 0 & \alpha & c \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix},$$

где $\alpha, a, b, c \in Z^+$. Пусть $A = (a_{ij})$, $B = (b_{ij})$ таковы, что $a_{12} = b_{23} = a$, $b_{12} = a_{23} = c$, $a \neq c$, а остальные компоненты совпадают. Тогда $AB \neq BA$, т.е. S – некоммутативное полукольцо. Непосредственно проверяется, что центр C(S) состоит из матриц вида

$$\begin{pmatrix} \alpha & 0 & b \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix},$$

где $\alpha, b \in Z^+ \cup \{0\}$. Так как $0 \neq AD \in C(S)$, где $0 \neq A \in S$, $0 \neq D \in C(S)$ с $\alpha = 0$, то S – некоммутативное центрально существенное полукольцо. Однако, кольцо разностей $D(S) = M_3(Z)$ не является центрально существенным кольцом, так как имеет нецентральные идемпотенты. Более того, в

[7] доказано, что любая центрально существенная подалгебра в локальной треугольной матричной алгебре 3×3 коммутативна.

Приведем пример центрально существенного кольца, которое служит кольцом разностей для двух своих собственных полуколец S_1 и S_2, одно из которых является центрально существенным полукольцом, а другое – нет.

Пример 8. Пусть кольцо R состоит из матриц вида

$$\begin{pmatrix} \alpha & a & b & c & d & e & f \\ 0 & \alpha & 0 & b & 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & \alpha & 0 & 0 & 0 & e \\ 0 & 0 & 0 & \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & 0 & a \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & b \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix} \tag{1}$$

над кольцом Z целых чисел. В работе [7] доказано, что R – центрально существенное кольцо.

Пусть S_1 – полукольцо, порожденное матрицами вида (1) над Z^+, скалярными матрицами с $\alpha \in Z^+ \cup \{0\}$ и нулями на остальных местах. Так как $C(S_1)$ состоит из скалярных матриц, то S_1 не является центрально существенным полукольцом. Заметим, что S_1 – полукольцо без делителей нуля. В тоже время, полукольцо S_2 матриц вида (1) над полукольцом $Z^+ \cup \{0\}$ является центрально существенным полукольцом.

Лемма 9. [10, Глава 2, Теорема 5.13] Центральный элемент полукольца S принадлежит центру C(D(S)) его кольца разностей.

Теорема 10. Пусть S – центрально существенное полукольцо без делителей нуля. Если кольцо D(S) не содержит делителей нуля, то полукольцо S коммутативно.

Доказательство. Пусть $0 \neq a = x - y \in D(S)$. По условию $0 \neq xc = d$, $0 \neq yf = g$ для некоторых $c, d, f, g \in C(S)$. Тогда $a(cf) = (x - y)cf = (xc)f - (yf)c = df - gc$. Из леммы 9 следует, что $c, d, f, g \in C(D(S))$ и $ac' \in C(D(S))$, где $c' = cf$. Кроме того, $ac' \neq 0$, поскольку D(S) не содержит делителей нуля. Тогда D(S) – коммутативное кольцо; см. [2, Предложение 3.3].

Литература

1. Golan J. S. The theory of semirings with applications in mathematics and theoretical computer science. Longman scientific and technical. Harlow, 1992.
2. Markov V.T., Tuganbaev A.A. Centrally essential group algebras // J. Algebra. 2018. Vol. 512, No. 15. P. 109-118.
3. Markov V.T., Tuganbaev A.A. Centrally essential rings // Discrete Math. Appl. 2019. Vol. 29, No. 3. P. 189-194.
4. Markov V.T., Tuganbaev A.A. Rings essential over their centers // Comm. Algebra. 2019. Vol. 47, No. 4. P. 1642-1649.
5. Markov V.T., Tuganbaev A.A. Uniserial Noetherian Centrally Essential Rings // Comm. Algebra. 2020. Vol. 48, No. 1. P. 149-153.
6. Markov V.T., Tuganbaev A.A. Constructions of Centrally Essential Rings // Comm. Algebra. 2020. Vol. 48, No. 1. P. 198-203.
7. Lyubimtsev O.V., Tuganbaev A.A. Local centrally essential subalgebras of triangular algebras // Linear and Multilinear Algebra, published on-line, https://doi.org/10.1080/03081087.2020.1802402.
8. Lyubimtsev O.V., Tuganbaev A.A. Centrally essential endomorphism rings of abelian groups // Comm. Algebra. 2020. Vol. 48, No. 3. P. 1249-1256.

9. Lyubimtsev O.V., Tuganbaev A.A. Centrally Essential Torsion-Free Rings of Finite Rank // Beitrage zur Algebra und Geometrie, Contributions to Algebra and Geometry. 2021. Vol. 62, No.3. P. 615-622.
10. Hebisch U., Weinert H. J. Semirings. Algebraic theory and applications in computer science. World Scientific Publishing. Singapore, 1998.
11. Clifford A.H., Prieston G.B. The Algebraic Theory of Semigroups, Vol. 1. AMS Survey No. 7, Providence, 1961.
12. Golan J.S. Semirings and their applications. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht; Boston; London, 1999.

РАБОТА С ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫМИ ЧИСЛАМИ В БИБЛИОТЕКЕ C-CORN

Е.М. Макаров

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В статье описывается участие автора в разработке библиотеки конструктивной алгебры и математического анализа C-CoRN, написанной в системе интерактивных доказательств Coq. Описана работа по формализации конструктивного доказательства теоремы Пикара о решении обыкновенных дифференциальных уравнений, которое в теории позволяет вычислить решение уравнения с требуемой точностью, а также текущая работа по повышению эффективности вычислений с действительными числами и другим направлениям развития библиотеки.

Ключевые слова: Coq, C-CoRN, конструктивный математический анализ, вычисления с произвольной точностью.

1. Введение

Данная статья посвящена одному применению формальных методов – основанных на математике языков, технологий и инструментов для спецификации, разработки и верификации программных и аппаратных систем [1]. Эти средства становятся незаменимы с ростом сложности разрабатываемых систем и с ростом цены ошибки. Поэтому формальные методы широко применяются в таких областях, как аэрокосмическая промышленность, разработка процессоров [2] и сетевых протоколов [3]. Многие задачи, такие как доказательство правильности программ, уже сейчас реализуемы хотя бы в теории, хотя на практике разработка полностью верифицированной программы часто нецелесообразна из-за высокой стоимости.

Одними из наиболее полезных инструментов, основанных на математической логике и используемых в формальных методах, являются системы для автоматизированного или полностью автоматического доказательства теорем (theorem provers, или proof assistants) [4]. Эти программы могут применяться как для формализации результатов в чистой математике, так и для доказательства корректности алгоритмов или аппаратных систем. Первые программы для доказательства теорем появились в 1950-х годах, а в 1980-х годах начали разрабатываться такие системы, как Coq, HOL Light и ACL2, которые широко используются до сих пор.

В статье описывает участие автора в разработке библиотеки конструктивной алгебры и математического анализа C-CoRN [5], написанной в системе интерактивных доказательств Coq [6–7]. Эта программа разрабатывается во французском научно-исследовательском институте INRIA с середины 1980-х годов. В настоящее время разработка программы активно продолжаются, и новые версии выходят примерно каждые пять месяцев. Coq является одной из наиболее передовых и широко используемых систем компьютерных доказательств как в научной сфере, так и в индустрии.

Библиотека конструктивной математики C-CoRN (Constructive Coq Repository at Nijmegen) разрабатывается преимущественно в университете Radboud в Нидерландах с начала 2000-х годов. Глобальной целью разработки является создание математического помощника: компьютерной системы, в которой математик может разрабатывать теории, производить вычисления и доказывать утверждения.

Оставшаяся часть статьи организована следующим образом. Следующий раздел более подробно описывает Coq и C-CoRN. Раздел 3 описывает работу автора над конструктивным доказательством теоремы о решении обыкновенных дифференциальных уравнений и направления дальнейшей работы. Наконец, раздел 4 подводит итоги.

2. Система Coq и библиотека C-CoRN

2.1 Система интерактивных доказательств Coq

Coq основан на теории типов, называемой исчислением индуктивных конструкций. Оно является выразительным вариантом типового лямбда-исчисления, которое, благодаря соответствию Карри-Говарда, служит одновременно и языком функционального программирования, и логическим исчислением. В теории типов основным суждением является $\Gamma \vdash t: A$, которое говорит, что в контексте Г, который содержит типы свободных переменных, терм, или выражение, t имеет тип A. Одновременно это суждение может читаться как то, что t является доказательством утверждения A.

В отсутствии пользовательских аксиом Coq использует конструктивную логику, хотя добавление закона исключённого третьего для получения классической логики не приводит к противоречию. Тем не менее среди пользователей Coq существует традиция использования именно конструктивной логики. В этом случае соответствия Карри-Говарда делает возможным рассматривать доказательства утверждений как программы. Coq позволяет исполнять доказательства утверждений о существовании и получать объекты, существование которых утверждается. Также Coq предоставляет возможность экспортировать такие доказательства в программы на языках Ocaml, Haskell и Scheme для более эффективного исполнения.

Одним из замечательных применений конструктивной логики явилось доказательство основной теоремы алгебры [8], позволяющей вычислить комплексные корни полиномов, не являющихся константами. Теоретически доказательство служило алгоритмом для вычисления этих корней с произвольной точностью, но на практике представление действительных чисел и реализация арифметических операций с ними были для этого недостаточно эффективными.

2.2. Реализация действительных чисел и конструктивный анализ

Важной частью C-CoRN является библиотека для работы с действительными числами. Она предоставляет большой запас доказанных фактов из алгебры и математического анализа, а также возможность вычислений с произвольной точностью. Наличие доказательств корректности алгоритмов, проверенных компьютером, отличает C-CoRN от многочисленных систем компьютерной алгебры и библиотек, таких как iRRAM, Arb и GMP. Конструктивный характер же отличает её от стандартной библиотеки Coq, в которой действительные числа введены аксиоматически и в которой, соответственно, возможность вычислений отсутствует за исключением ограниченного числа случаев. Аналогичная библиотека есть в системе интерактивных доказательств Isabelle.

Реализация действительных чисел и доказательства их свойств в C-CoRN в целом следуют работам Э. Бишопа [9–10] по конструктивному анализу. Теоретической основой представления действительных чисел в C-CoRN является диссертация Рассела O'Коннора [11], который переработал результаты Бишопа и сделал их готовыми к реализации в Coq.

Пусть $\mathbb{Q}$ обозначает множество рациональных чисел. Для любого метрического пространства X с метрикой d определяется его пополнение CX как множество регулярных функций. Функция $f: \mathbb{Q} \to X$ называется регулярной, если

$$\forall \varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 > 0 \; d(f(\varepsilon_1), f(\varepsilon_2)) \leqslant \varepsilon_1 + \varepsilon_2.$$

Действительные числа определяются как $C\mathbb{Q}$. Говоря неформально, $f(\varepsilon)$ возвращает рациональное ε-приближение к действительному числу, которое представляет функция f. Таким образом, регулярные функции являются обобщением последовательностей Коши, для которых зависимость n от ε известна и вычислима.

Э. Бишоп показал, что многие результаты классического математического анализа могут быть столь же элегантно доказаны конструктивно, хотя некоторые утверждения требуют переформулировки. Вместо определения непрерывности и других понятий в конкретной точке, Э. Бишоп рассматривает равномерную непрерывность на замкнутом отрезке. Функция $f(x)$ называется равномерно непрерывной, если существует такая вычислимая функция $\mu: \mathbb{Q} \to \mathbb{Q}$, называемая модулем непрерывности f, такая что

$$\forall \varepsilon > 0 \; \forall x_1, x_2 \in X \; d(x_1, x_2) \leqslant \mu(\varepsilon) \Rightarrow d(f(x_1), f(x_2)) \leqslant \varepsilon.$$

Функция называется локально равномерно непрерывной, если она равномерно непрерывна на каждом отрезке из своей области определения. Важной особенность C-CoRN является наличие конструктивных доказательств локальной равномерной непрерывности основных арифметических и трансцендентных функций, а также композиции локально равномерно непрерывных функций. Таким образом, библиотека автоматически вычисляет модуль непрерывности требуемой функции. Если функция f: $C\mathbb{Q} \to C\mathbb{Q}$ является равномерно непрерывной с модулем μ, то для вычисления $f(x)(\varepsilon)$ требуется вычислить $x(\mu(\varepsilon))$.

Поскольку действительные числа определены как пополнение рациональных, эффективность работы с действительным числами существенно зависит от представления и алгоритмов работы с рациональными числами. В разное время в C-CoRN использовалось два представления рациональных чисел: обычное представление в виде m/n, где $m \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{N}$, и двоично-рациональные числа вида $n2^e$, где $n, e \in \mathbb{Z}$. Замена первого представления на второе позволило увеличить эффективность примерно в 15 раз. Кроме того, использовалось представление рациональных чисел, основанное на машинных целых числах вместо типов данных, определённых целиком в Coq, что позволило увеличить скорость вычислений порядка в 100 раз. Однако наличие разных представлений создаёт проблему с необходимостью доказывать одни и те же свойства чисел несколько раз. Чтобы этого избежать, была разработана иерархия алгебраических структур под названием MathClasses [12], в которой все свойства доказывались из аксиом. Таким образом, для замены представления рациональных чисел достаточно только доказать, что новое представление является моделью аксиом. Этот подход также позволил сократить время на доказательство свойств действительных чисел.

Следует отметить, что правильная организация библиотеки алгебраических структур в Coq является нетривиальной задачей, которая практически незнакома математикам, не занимающимся формализацией математики. Среди экспертов по теории типов в настоящее время нет консенсуса относительно её решения.

В настоящее время в C-CoRN входят следующие компоненты:

1. алгебраическая иерархия;
2. реализация действительных чисел с верифицированными операциями, удовлетворяющая аксиомам алгебраических структур;
3. основная теорема алгебры;
4. теоремы математического анализа.

3. Решение дифференциальных уравнений и дальнейшие направления работы

Автор этой статьи участвовал в формализации доказательства теоремы Пикара о существовании и единственности решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Пусть дано уравнение $f'(x) = v(x, f(x))$ с начальным условием $f(0) = 0$, где v: $[-a, a] \times [-b, b] \to \mathbb{R}$ – непрерывная функция, удовлетворяющая условию Липшица по y: $|v(x, y) - v(x, y')| \leqslant L|y - y'|$ для всех $x \in [-a, a]$ и всех $y, y' \in [-b, b]$, причём $aL < 1$. Тогда у этой задачи существует единственное решение на отрезке $[-a, a]$.

Это дифференциальное уравнение переводится в интегральное с помощью интегрирование обеих частей от 0 до t. Правую часть полученного уравнения можно рассматривать как интегральный оператор от функции f. Можно показать, что при данных предположениях этот оператор является сжимающим, откуда следует существование и единственность его неподвижной точки. Это решение получается последовательным применяем интегрального оператора к начальной функции $f(0) = 0$.

Ко времени начала этой работы в Coq была добавлена замечательный механизм классов типов, который изначально появился в языке Haskell и позже был реализован в системе интерактивных доказательств Isabelle. В связи с этим было принято решение часть результатов про метрические пространства переписать с использованием этой новой технологии. Итоги работы, связанной с теоремой Пикара, представлены в [13].

В настоящее время работа над модулем для решения дифференциальных уравнений и C-CoRN в целом продолжается по следующим направлениям.

Основная проблема с действительными числами заключается в очень низкой эффективности вычислений. Как показано в таблице 1, стандартные функции работают сравнительно эффективно [14].

Таблица 1. Время вычисления некоторых констант в Coq

Выражение	Количество десятичных цифр	Время (сек.)
sin(sin(sin(1)))	500	3,8
$\sqrt{\pi}$	500	6,8
sin(e)	500	1,9
$\exp(\pi\sqrt{163})$	500	3,7
exp(exp(e))	500	3,2
exp(1000)	2000	4,9
$\cos(10^{50})$	2000	12

Однако время выполнения более сложных программ с арифметическими операциями и циклами растёт неприемлемо быстро. Так, описанное доказательство теоремы Пикара в случае уравнения $f'(x) = e^x$ позволяет за обозримое время вычислить решение в точке $x = 1/2$ только с двумя верными знаками после запятой.

Исследование в этой области были проведены в дипломной работе студента ИИТММ ННГУ Н.А. Кузьмичёва [15]. Он написал простую реализацию действительных чисел с произвольной точностью на языке Haskell, следуя образцу О'Коннора. Вероятно, что за счёт более эффективной реализации рациональных чисел и других оптимизаций скорость вычислений можно повысить на два или, может быть, три порядка, данный прототип показывает качественную картину временной сложности вычислений. В качестве эксперимента Н.А. Кузьмичёв реализовал приближенное вычисление интеграла от 0 до x функции e^x (точное значение которого равно e^x - 1) с помощью сумм Римана. В таблице 2 приведено время вычисления этого интеграла для $x = 1$ в зависимости от количества интервалов, на которые разбивается отрезок [0, 1] и от точности окончательного результата. Как видно, требуемая точность (аргумент действительного числа как регулярной функции) незначительно влияет на время вычисления, однако время растёт быстрее экспоненциально с ростом размера разбиения. При этом даже для разбиения размером 2000 в результате получается только 3 верных знака после запятой. Ясно, что даже с использованием обычных чисел с плавающей точкой легко написать программу, имеющую большую точность и работающую гораздо быстрее.

Таблица 2. Время вычисления интеграла в Haskell

Количество интервалов	Точность	Время (сек.)
500	10^{-2}	1,42
	10^{-4}	1,43
750	10^{-2}	3,90
	10^{-4}	3,90
1000	10^{-2}	8,15
	10^{-4}	8,60
1500	10^{-2}	24,98
	10^{-4}	25,18
2000	10^{-2}	58,07
	10^{-4}	58,46

По-видимому, неудовлетворительная эффективность связана с методом автоматического вычисления модуля равномерно непрерывной функции, который делает завышенные требования к точности её аргумента. Поэтому одним из главных направлений работы заключается в проведении экспериментов, чтобы понять, какие величины в ходе работы программы вычисляются с большей точностью, чем нужно.

Второе направление связано с переработка кода. Как было отмечено, библиотека C-CoRN развивается уже больше 20 лет, и в её создании участвовало несколько десятков человек. Общий объем исходных файлов составляет примерно 6,7 мегабайт. За время её существования в систему Coq были внесены существенные изменения: изменился синтаксис, была добавлена возможность вычислений с машинными числами, появились классы типов аналогично языку Haskell. Из-за этого появилась потребность в рефакториге кода: удалении ненужных частей, добавлении комментариев, оптимизации доказательств, адаптации кода к новым возможностям Coq. Целью этой работы является представление соответствующей части C-CoRN в качестве стандартной библиотеки Coq для работы с действительными числами.

Третье направление состоит в доказательстве новых теорем конструктивного математического и комплексного анализа. Так, в дополнение к методу Пикара решения дифференциальных уравнений было бы интересно реализовать методы Эйлера и Рунге-Кутты.

4. Заключение

В этой статье мы описали историю и структуру библиотеки C-CoRN для системы интерактивных доказательств Coq. Также был представлен проект по формализации конструктивного доказательства теоремы Пикара о существовании и единственности решения дифференциального уравнения первого порядка. Наконец, были намечены направления текущей работы по модернизации и дополнению библиотеки.

Литература

1. Clarke E. M., Wing J. M. Formal Methods: State of the Art and Future Directions // ACM Comput. Surv. New York, NY, USA, 1996. Vol. 28, no. 4. P. 626–643. URL: http://doi.acm.org/10.1145/242223.242257.
2. Industrial Hardware and Software Verification with ACL2 / W. A. Hunt Jr. [et al.] // Philos Trans A Math Phys Eng Sci. 2017. Vol. 375, no. 2104. URL: https://doi.org/10.1098/rsta.2015.0399.
3. How Amazon Web Services Uses Formal Methods / C. Newcombe [et al.] // Commun. ACM. New York, NY, USA, 2015. Vol. 58, no. 4. P. 66–73. URL: http://doi.acm.org/10.1145/2699417.
4. Wiedijk F. The Seventeen Provers of the World. Vol. 3600. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2006. (Lecture Notes in Artificial Intelligence). URL: https://www.springer.com/gp/book/9783540307044.
5. Cruz-Filipe L., Geuvers H., Wiedijk F. C-CoRN, the Constructive Coq Repository at Nijmegen // Proceedings of the Mathematical Knowledge Management, 2004. P88–103.
6. Bertot Y., Castéran P. Interactive Theorem Proving and Program Development. Coq’Art: The Calculus of Inductive Constructions. Springer, 2004. (Texts in Theoretical Computer Science. An EATCS Series). URL: https://doi.org/10.1007/978-3-662-07964-5.
7. The Coq Development Team. The Coq Reference Manual. INRIA, 2019. URL: https://coq.inria.fr/distrib/current/refman/.
8. Geuvers H., Wiedijk F., Zwanenburg J. A Constructive Proof of the Fundamental Theorem of Algebra without Using the Rationals // Types for Proofs and Programs. TYPES 2000. Vol. 2277 / ed. by P. Callaghan [et al.]. Springer, 2002. P. 96–111. (Lecture Notes in Computer Science). URL: https://link.springer.com/chapter/10.1007/3-540-45842-5_7.
9. Bishop E. Foundations of Constructive Analysis, McGraw-Hill Book Company, 1967.
10. Bishop E., Bridges D. Constructive Analysis. Springer-Verlag, 1985.
11. O'Connor, R. Incompleteness and Completeness: Formalizing Logic and Analysis in Type Theory. PhD thesis. Radboud University Nijmegen, 2009.

12. Spitters B., van der Weegen E. Type classes for mathematics in type theory // Interactive theorem proving and the formalization of mathematics, Special Issue of Mathemati-cal Structures in Computer Science, 2011. Vol. 21. P. 1-31. DOI: 10.1017/S0960129511000119.
13. Makarov E. and Spitters B. The Picard Algorithm for Ordinary Differential Equations in Coq // Proceedings of the Interactive Theorem Proving, 2013. P. 463-468.
14. Krebbers R., Spitters B. Type classes for efficient exact real arithmetic in Coq // Logical Methods in Computer Science. 2013. Vol. 9, No. 1:1. P. 1-27. DOI: 10.2168/LMCS-9(1:01)2013.
15. Кузьмичёв Н.А. Реализация библиотеки для работы с действительными числами произвольной точности. Выпускная квалификационная работа бакалавра. Нижний Новгород: ННГУ, 2021.

СИНХРОНИЗАЦИЯ В ТОПОЛОГИЯХ В НЕЙРОННО-АСТРОЦИТАРНОЙ СЕТИ[1*]

С.Ю. Маковкин[1], Е.А. Козинов[1], С.Ю. Гордлеева[1,2], М.В. Иванченко[1]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Университет Иннополис*

Целью работы является изучение влияния астроцитов на процессы передачи сигналов в нейронной сети. Рассмотрена архитектура нейронно-астроцитарной сети в виде топологически взаимодействующих колец, соответствующая экспериментальным данным организации сетей в головном мозге. Первое кольцо системы представляет собой ансамбль возбуждаю-щих нейронов, каждый из которых стимулируется некоррелированным процессом Пуассона, имитирующим действие внешней нейронной сети. Второе кольцо системы представляет собой сеть тормозящих нейронов, которые получают сигналы от возбуждающих нейронов, и которые находятся под влиянием астроцитов, образующих третье кольцо рассматриваемой сети. Генерация импульсов кальция в астроцитах индуцируется активностью первого кольца системы. Действие астроцитов заключается в изменении амплитуд действия возбуждающих нейронов на тормозящие, а также в изменении сил связей во втором кольце. В статье рассматривается коллективная динамика передачи сигналов тормозящих нейронов. В данной работе показано, что астроцитарная регуляция передачи сигнала между нейронами влияет на установление синхронизации активности нейронного ансамбля в моменты динамики кальция в астроцитах. Было установлено, что влияние астроцитов может привести как к расширению области синхронизации, так и к смещению ее границ.

Ключевые слова: нейроны, астроциты, синхронизация, нейрон-астроцитарная сеть, модель Уллаха-Юнга, модель Ходжкина-Хаксли

Исследование эффектов синхронизации в динамике систем, состоящих из взаимодействующих биологических осцилляторов, является одним из наиболее передовых направлений современной радиофизики. Ярким примером таких систем являются сети, состоящие из взаимодействующих клеток мозга: нейронов и астроцитов. Нейроны, способные генерировать электрические импульсы, считаются основными сигнальными клетками мозга. Недавно было обнаружено, что астроциты способны генерировать импульсы кальция в ответ на прохождение импульсных сигналов через нейронную сеть [1]. Считается, что импульсы кальция в астроцитах участвуют в биофизических механизмах двунаправленного взаимодействия между нейронами и астроцитами. [2]. Обладая собственной нетривиальной динамикой, нейронные и кальциевые осцилляторы образуют сети со сложными межклеточными взаимодействиями [3,4,5]. Данная работа посвящена изучению нелинейных эффектов коллективной динамики нейронно-астроцитарных сетей, таких как синхронизация [6], формирование структур активности, регуляризация и хаотические колебания. Считается, что эти явления лежат в основе процессов обработки информации в мозге [7,8], например, обучение и память [9], понимание механизмов которых является одной из приоритетных и актуальных задач современной радиофизики. Понимание механизмов астроцитарной регуляции нервной активности открывает ряд потенциальных возможностей для косвенного терапевтического воздействия на нейронные сети мозга [10], [11].

Целью работы является изучение влияния астроцитов на процессы передачи сигналов в нейронной сети. Рассмотрена архитектура нейронно-астроцитарной сети в виде взаимодействующих трех колец, соответствующая экспериментальным данным по организации сетей в головном мозге. Первое кольцо системы представляет собой ансамбль возбуждающих нейронов, каждый из которых стимулируется некоррелированным процессом Пуассона, имитирующим действие внешней нейронной сети. Второе кольцо системы представляет собой сеть тор-

[1*] Работа поддержана грантом РНФ № 21-72-10129.

мозящих нейронов, которые получают сигналы от возбуждающих нейронов, и которые находятся под влиянием астроцитов, образующих третье кольцо рассматриваемой сети. Генерация импульсов кальция в астроцитах индуцируется активностью первого кольца системы. Действие астроцитов заключается в изменении амплитуд действия возбуждающих нейронов на тормозящие, а также в изменении сил связей во втором кольце. В статье рассматривается коллективная динамика передачи сигналов тормозящих нейронов. Динамика взаимодействия нейрона и астроцита в элементарной ячейке рассматриваемой сети, состоящей из двух нейронов и двух астроцитов, была изучена ранее [1].

В качестве описания динамики мембранного потенциала нейрона была выбрана модель Ходжкина-Хаксли [12] с модификацией Майнена [13]. Однонаправленная импульсная связь между нейронами имитирует динамику химического синапса [1]. Динамика внутриклеточ-ной концентрации кальция в астроцитах описывается моделью Уллаха-Юнга [14]. Влияние астроцитов на нейроны было смоделировано с использованием ранее предложенного подхо-да [1]. Когда концентрация кальция достигает порогового значения, активируется астроци-тарная регуляция синаптической передачи в сети тормозных нейронов. Были рассмотрены экспериментально подтвержденные эффекты опосредованного астроцитами усиления и по-давления силы синаптической связи в нейронной сети.

Для изучения влияния астроцитарной регуляции передачи сигналов на корреляцию нейросетевой сигнализации были рассчитаны коэффициент синхронизации и средняя частота генерации для временных рядов мембранных потенциалов тормозящих нейронов. Коэффициент синхронизации в масштабах сети был рассчитан как среднее значение коэффициентов синхронизации для каждой пары нейронов в сети во временном окне 500 мс. Были рассчитаны области параметров модели, соответствующие синхронизации в нейронной сети.

В данной работе показано, что астроцитарная регуляция передачи сигнала между нейронами влияет на установление синхронизации активности нейронного ансамбля в моменты динамики кальция в астроцитах. Было установлено, что влияние астроцитов может привести как к расширению области синхронизации, так и к смещению ее границ.

Литература

1. Makovkin, S. Y., Shkerin, I. V., Gordleeva, S. Y., & Ivanchenko, M. V. (2020). Astrocyte-induced intermittent synchronization of neurons in a minimal network. Chaos, Solitons & Fractals, 138, 109951.
2. V.V. Matrosov, S.Y. Gordleeva, N.A. Boldyreva, E. Ben-Jacob, V.B. Kazantsev, M. De Pittà Emergence of regular and complex calcium oscillations by inositol 1, 4, 5-trisphosphate signaling in astrocytes // Computational Glioscience, Springer. 2019. 151-176.
3. Andreev, A., & Maksimenko, V. (2019). Synchronization in coupled neural network with inhibitory coupling. Cybernetics and Physics, 8(4), 199-204.
4. Andreev, A. V., Maksimenko, V. A., Pisarchik, A. N., & Hramov, A. E. (2021). Synchroni-zation of interacted spiking neuronal networks with inhibitory coupling. Chaos, Solitons & Fractals, 146, 110812.
5. Ponomarenko, V. I., Kulminskiy, D. D., Andreev, A. V., & Prokhorov, M. D. (2021). Assessment of an External Periodic Force Amplitude Using a Small Spike Neuron Network in a Radiophysical Experiment. Technical Physics Letters, 47(2), 162-165.
6. E.V. Pankratova, A.I. Kalyakulina, S.V. Stasenko, S.Y. Gordleeva, I.A. Lazarevich, V.B. Kazantsev. Neuronal synchronization enhanced by neuron–astrocyte interaction // Nonlinear Dynamics. 2019. 97 (1), 647-662.
7. L. Abrego, S. Gordleeva, O. Kanakov, M. Krivonosov, A. Zaikin. Estimating integrated information in bidirectional neuron-astrocyte communication // Physical Review E. 2021. 103 (2), 022410
8. O.I. Kanakov, S.Y. Gordleeva, A. Zaikin. Integrated Information in the Spiking-Bursting Stochastic Model // Entropy. 2020. 22 (12), 1334.
9. S.Y. Gordleeva, Y.A. Tsybina, M.I. Krivonosov, A.A. Zaikin, M.V. Ivanchenko, V.B. Kazantsev, A.N. Gorban. Modelling working memory in spiking neuron network accompanied by astrocytes // Frontiers in Cellular Neuroscience. 2021. 15, 86.

10. S.Y. Gordleeva, O.I. Kanakov, A. Zaikin, M.V. Ivanchenko, C. Franceschi. Brain aging and garbage cleaning. Modelling the role of sleep, glymphatic system and microglia senescence in the propagation of inflammaging // Seminars in Immunopathology. 2020. 42(5), 647-665.
11. H.J. Whitwell, M.G. Bacalini, O. Blyuss, S. Chen, P. Garagnani, S.Y. Gordleeva, S. Jalan, M.V. Ivanchenko, O.I. Kanakov, V. Kustikova, I.P. Mariño, I.B. Meyerov, E. Ullner, C. Franceschi, A. Zaikin. The Human Body as a Super Network: Digital Methods to Analyze the Propagation of Aging // Frontiers in Aging Neuroscience. 2020. 12, 136.
12. Hodgkin, A. L., & Huxley, A. F. (1952). A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. The Journal of physiology, 117(4), 500-544.
13. Mainen, Z. F., Joerges, J., Huguenard, J. R., & Sejnowski, T. J. (1995). A model of spike initiation in neocortical pyramidal neurons. Neuron, 15(6), 1427-1439.
14. Ullah, G., Jung, P., & Cornell-Bell, A. H. (2006). Anti-phase calcium oscillations in astro-cytes via inositol (1, 4, 5)-trisphosphate regeneration. Cell calcium, 39(3), 197-208.

ПОЛНАЯ СЛОЖНОСТНАЯ ДИХОТОМИЯ ДЛЯ ЗАДАЧИ О РЕБЕРНОЙ РАСКРАСКЕ И ВСЕХ МОНОТОННЫХ КЛАССОВ ГРАФОВ, ОПРЕДЕЛЯЕМЫХ ЗАПРЕТАМИ С НЕ БОЛЕЕ ЧЕМ 8 РЕБРАМИ КАЖДЫЙ

***Д.С. Малышев*[1,2]*, О.И. Дугинов*[3]**

[1]Высшая школа экономики,
[2]Нижегородский государственный университет имени Н.И. Лобачевского
[3]Белорусский государственный университет

Задача о реберной раскраске состоит в том, чтобы определить минимальное количество подмножеств, состоящих из попарно несмежных ребер, на которые можно разбить множество ребер заданного графа. Монотонный класс графов – множество обыкновенных графов, замкнутое относительно изоморфизма, удаления вершин и ребер. Каждый такой класс может быть задан множеством своих запрещенных подграфов. Ранее была получена полная классификация сложности задачи о реберной раскраске для всех монотонных классов, определяемых 7-реберными запретами каждый. В этой работе данный результат улучшается до запретов с 8 ребрами.

Ключевые слова: реберная раскраска графов, монотонный класс графов, алгоритмическая сложность

В работе рассматриваются только *обыкновенные* графы, т.е. неориентированные графы без петель и кратных ребер. *Монотонный* класс графов – множество обыкновенных графов, замкнутое относительно изоморфизма, а также относительно удаления вершин и ребер. Любой монотонный класс X может быть задан множеством своих запрещенных подграфов Y, при этом пишем $X=Free_s(Y)$.

Задача о реберной раскраске (далее, задача РР) состоит в том, чтобы определить минимальное количество подмножеств, состоящих из попарно несмежных ребер, на которые можно разбить множество ребер заданного графа.

В работе [1] рассматривались задача РР и семейство монотонных классов, задаваемых запрещением подграфов, каждый из которых имеет не более чем 6 ребер или не более чем 7 вершин. В ней была получена полная классификация сложности задачи РР для классов графов из данного семейства. В работе [2] была получена полная классификация сложности задачи РР для монотонных классов, задаваемых запрещением подграфов, каждый из которых имеет не более чем 7 ребер. В настоящей работе улучшается результат из [2]. Чтобы его сформулировать, нам понадобятся несколько определений.

Определим два преобразования графов. Первое из них, называемое *заменой вершины треугольником*, применяется к вершине x графа, окрестность которой состоит в точности из вершин x_1,x_2,x_3, и определяется следующим образом. Удаляется вершина x, добавляются вершины x'_1,x'_2,x'_3 и ребра $x'_1x_1,x'_2x_2,x'_3x_3,x'_1x'_2,x'_2x'_3,x'_1x'_3$. Операция *замены вершины* (2, 3)-*бикликой* применяется к вершине x графа, окрестность которой состоит в точности из вершин x_1,x_2,x_3, и определяется следующим образом. Удаляется вершина x, добавляются вершины y_1,y_2 и ребра $x_1y_1,x_2y_1,x_3y_1,x_1y_2,x_2y_2,x_3y_2$.

Граф называется *кубическим*, если степени всех его вершин равны 3. Граф называется *субкубическим*, если степени всех его вершин не более чем 3.

Через Z_k обозначим множество кубических графов, не содержащих циклов длины до k включительно. Обозначим через Z^*_k множество графов, которые получаются из графов класса Z_k последовательной заменой их вершин треугольниками. Через Z^{**}_k обозначим множество графов, которые получаются из графов класса Z_k последовательной заменой их вершин (2,3)-бикликами.

Монотонное замыкание класса графов Z – множество графов, являющихся подграфами графов из Z. Оно обозначается через $[Z]_s$.

Как обычно, через O_n и P_n обозначаются пустой граф и простой путь на n вершинах. Через G_1+G_2 обозначается дизъюнктное объединение графов G_1 и G_2 с непересекающимися множествами вершин. Через T_1 обозначается дерево с множествами вершин и ребер

$$\{x_1,x_2,x_3,z_1,z_2,y_1,y_2,y_3\},\{x_1x_2,x_2x_3,y_1y_2,y_2y_3,z_1z_2,x_2z_2,z_2y_2\},$$

соответственно. Через T_2,T_3,T_4 обозначаются деревья на множестве вершин $\{x_1,x_2,x_3,z_1,z_2,z_3,y_1,y_2,y_3\}$ с множествами ребер

$$\{x_1x_2,x_2x_3,y_1y_2,y_2y_3,x_2y_2,x_1z_1,y_1z_2,y_1z_3\},$$
$$\{x_1x_2,x_2x_3,y_1y_2,y_2y_3,x_2y_2,y_3z_1,y_1z_2,y_1z_3\},$$
$$\{x_1x_2,x_2x_3,y_1y_2,y_2y_3,x_2z_1,z_1z_2,z_1z_3,z_3y_2\},$$

соответственно. Справедливо следующее утверждение.

Теорема. Пусть Y – множество графов, каждый из которых имеет не более чем 8 ребер. Тогда задача РР является полиномиально разрешимой для графов из X=Free_s(Y), если

1. либо Y содержит субкубический лес, не принадлежащий множеству $A\cup B$, где $A=\{T_1+P_2+O_n: n\geq 0\}\cup\{T_2+O_n: n\geq 0\}\cup\{T_4+O_n: n\geq 0\}$, $B=\{T_3+O_n: n\geq 0\}$.
2. либо Y одновременно содержит граф из A и граф из $[Z^*_4]_s$,
3. либо Y одновременно содержит граф из B и графы из $[Z^*_4]_s$ и $[Z^{**}_4]_s$.

Во всех остальных случаях она является NP-полной для графов из X.

Литература

1. Малышев Д.С. Классификация сложности задачи о рёберной раскраске для некоторого семейства классов графов // Дискретная математика. 2016. Т. 28. № 2. С. 44-50.
2. Малышев Д.С. Полная сложностная дихотомия для запрещенных подграфов с 7 ребрами в задаче о хроматическом индексе // Дискретный анализ и исследование операций. 2020. Т. 27. № 4. С. 104-130.

ВКЛАД ГЛЮКОНЕОГЕНЕЗА В РАЗВИТИЕ ПАТОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ГЕПАТОЦИТА: МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

А.В. Мартышина[1], О.М. Тилинова[1], М.В. Ямашев[2], С.И. Кисиль[2], И.В. Докукина[1], Е.А. Грачев[2]

[1]Саровский физико-технический институт НИЯУ МИФИ
[2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Печень играет важную роль в системе гликемического контроля организма человека. Клетки печени гепатоциты способны запасать в гликоген излишек глюкозы, возникающий в период приема пищи, и выделять глюкозу в кровь при необходимости в период голодания. Одним из механизмов, обеспечивающих выделение глюкозы гепатоцитом, является глюконеогенез. Важным субстратом глюконеогенеза является глицерин, как образующийся в результате гликолиза, так и поступающий извне клетки. Скорость протекания глюконеогенеза зависит от ряда факторов, включающих цитозольный кальций и инсулин. В данной работе с помощью математического моделирования исследовалось влияние отклонений в регуляции глюконеогенеза на уровень глюкозы, выделяемой гепатоцитом, и липидный обмен.

Ключевые слова: гепатоцит, глюконеогенез, диабет II типа, ионы кальция.

1. Введение

Одной из важных компонент системы гликемического контроля является печень. В зависимости от состояния организма – голодания или приема пищи – печень может как способствовать снижению уровня глюкозы в крови, запасая ее в виде гликогена, так и выделять глюкозу, поддерживая ее стабильный уровень в крови. Метаболизм глюкозы и жировой обмен в клетках печени (гепатоцитах) зависят от ряда факторов, включающих стимуляцию клетки гормонами-регуляторами инсулином и глюкагоном [1]. Часть стимула передается внутренним системам гепатоцита посредством кальциевой сигнализации [2]. На часть процессов действует непосредственно инсулин.

2. Содержание работы

В период голодания глюкоза выделяется гепатоцитом за счет внутренних запасов гликогена и вследствие глюконеогенеза. Одним из основных субстратов глюконеогенеза при этом является глицерин, который образуется в клетке как побочный продукт гликолиза и может также поступать в клетку извне. Интенсивность протекания глюконеогенеза усиливается при повышенной концентрации ионов кальция в цитозоле, что происходит в состоянии голодания. В состоянии, следующим за приемом пищи, инсулин, напротив, подавляет глюконеогенез, тем самым останавливая выработку глюкозы [3].

2.1. Отклонения в сигнализации Ca^{2+}

В работе [4] с помощью математического моделирования нами были показано, что некорректная модуляция работы IP_3-рецепторов и неспособность митохондрий образовывать близкие контакты с эндоплазматическим ретикулумом приводят к существенному повышению концентрации ионов кальция в цитозоле. Однако, в модели [4] уровень глюкозы в крови и компоненты липидного обмена не учитывались в явном виде.

В данной работе в модель [4] добавлены процессы липидного обмена, что позволило рассматривать изменение концентраций внутриклеточного глицерина, триглицеридов и гликогена, а также уровень глюкозы в крови в зависимости от наличия дисфункции в сигнализации Ca^{2+} (см. таблицу 1). Результаты моделирования показывают, что нарушение Ca^{2+} сигнализации при нормальном течении глюконеогенеза (строки «норма» в таблице 1) приводит к повышению концентраций глицерина и триглицеридов в клетке, снижению гликогена в клетке и повышению уровня глюкозы в крови.

Таблица 1. Влияние различных видов инсулиновой дисфункции («норма», «наклон», «амплитуда») скорости глюконеогенеза (k_{12}) на уровни веществ при нормальной и нарушенной кальциевой сигнализации

	k_{12}	Ca^{2+} в норме	Ca^{2+} с отклонениями (осцилляции)
Глицерин, ммоль/л	норма	0.43±0.02	0.47±0.13
	наклон	0.42±0.02	0.45±0.11
	амплитуда	0.41±0.02	0.43±0.09
Глюкоза, мг/дл	норма	99.75±0.18	103.51±10.40
	наклон	101.65±0.25	106.85±10.85
	амплитуда	103.50±0.40	109.85±12.85
ТАГ, 10^{-12} моль	норма	0.36±0.02	0.40±0.11
	наклон	0.37±0.02	0.40±0.10
	амплитуда	0.38±0.02	0.40±0.09
Гликоген, 10^{-9} г	норма	82.42±1.40	47.52±32.04
	наклон	86.08±1.53	50.19±33.33
	амплитуда	89.36±1.99	52.25±34.05

2.2. Зависимость скорости глюконеогенеза от инсулина

Процессы липидного обмена, учитываемые в данной модели, регулируются помимо цитозольного Ca^{2+} также инсулином [5]. В частности, скорость глюконеогенеза в модели зависит от трех факторов: концентрации цитозольного Ca^{2+}, концентрации ацетил-коэнзима А в цитозоле и уровня инсулина в клетке (см. рисунок 1). Первые два – стимулируют глюконеогенез, а наличие инсулина в клетке подавляет его.

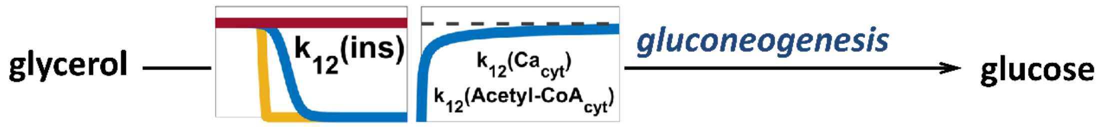


Рис. 1. Схема зависимости скорости глюконеогенеза от различных факторов

В работе исследовалось влияние амплитуды и скорости развития (строки «амплитуда» и «наклон» в таблице 1) подавляющего эффекта инсулина на скорость глюконеогенеза. Результаты моделирования показывают, что оба фактора влияют на концентрации веществ, причем изменение амплитуды подавляющего эффекта имеет наиболее выраженные последствия. В частности, снижается внутриклеточная концентрация глицерина, повышаются внутриклеточные концентрации триглицеридов и гликогена, а также повышается уровень глюкозы в крови (см. таблицу 1). Данный эффект наблюдается как при нормальной, так и при нарушенной кальциевой сигнализации.

3. Выводы

В данной работе предложена математическая модель, описывающая процессы липидного обмена и кальциевой сигнализации в гепатоците в состояниях голодания и приема пищи. В модели учитывается сложная динамическая регуляция процессов цитозольным кальцием, инсулином и другими факторами. В частности, подробно описывается регуляция процесса глюконеогенеза.

Результаты моделирования позволяют проанализировать вклад различных факторов регуляции в развитие патологий системы гликемического контроля, диабета II типа и ожирения и тем самым оценить степень последствий каждого из них. В работе показано, что как нарушения в кальциевой сигнализации, так и устойчивость глюконеогенеза к инсулину могут привести к повышению уровня глюкозы в крови и отклонениям в концентрациях глицерина, гликогена и триглицеридов внутри клетки.

Литература

1. Theurey, P., Tubbs, E., Vial, G., Jacquemetton, J., Bendridi, N., Chauvin, M.A., Alam, M.R., Le Romancer, M., Vidal, H., Rieusset, J., 2016. Mitochondria-associated endoplasmic reticu-lum membranes allow adaptation of mitochondrial metabolism to glucose availability in the liver. J. Mol. Cell Biol. 8 (2), 129–143. https://doi.org/10.1093/jmcb/mjw004.
2. Wang, J., He, W., Tsai, P.J., Chen, P.H., Ye, M., Guo, J., Su, Z., 2020. Mutual interaction between endoplasmic reticulum and mitochondria in nonalcoholic fatty liver disease. Lipids in Health and Disease. 19:72 https://doi.org/10.1186/s12944-020-01210-0.
3. Hatting M, Tavares CDJ, Sharabi K, Rines AK, Puigserver P. Insulin regulation of gluconeogenesis. Ann N Y Acad Sci. 2018 Jan;1411(1):21-35. doi: https://10.1111/nyas.13435.
4. Dokukina, I.V., Yamashev, M.V., Samarina, E.A., Tilinova, O.M., Grachev, E.A., 2021. Calcium-dependent insulin resistance in hepatocytes: mathematical model. J. Theor. Biol. 522, 110684 https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2021.110684.
5. Samuel, V., Shulman, G., 2016. The pathogenesis of insulin resistance: integrating signaling pathways and substrate flux. J. Clin. Invest. 126 (1), 12–22. https://doi.org/10.1172/JCI77812.

СИНХРОНИЗАЦИЯ КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ В УРАВНЕНИИ ТИПА ДУФФИНГА-ВАН ДЕР ПОЛЯ: ВЫРОЖДЕННЫЙ СЛУЧАЙ

К.Е. Морозов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Исследуется асимметричное уравнение типа Дуффинга-Ван дер Поля при малом квазипериодическим по времени возмущении. Получена усредненная система, описывающая топологию близкой к вырожденной резонансной зоны. На основании ее анализа решается задача о синхронизации колебаний в резонансной зоне.

Ключевые слова: вырожденные резонансы, асимметричное уравнение Дуффинга, метод усреднения, квазипериодическое возмущение

1. Введение

Резонансы играют важную роль при изучении малых квазипериодических возмущений двумерных гамильтоновых систем [1-8]. Предположим, что невозмущенная система имеет ячейку, заполненную замкнутыми фазовыми траекториями и отделенную от состояний равновесия и сеператрис. Резонансы возникают, если собственная частота колебаний в указанной области становится соизмеримой с частотами возмущения. Динамика в резонансной зоне (т.е. в малой окрестности резонансной фазовой кривой) определяется автономной системой маятникового типа, которая получается в результате применения процедуры усреднения. Согласно теоремам Боголюбова [2], простые предельные циклы и состояния равновесия такой системы соответствуют инвариантным торам и квазипериодическим решениям в исходной системе. Если собственная частота исходной системы является немонотонной функцией энергии, то в системе могут возникать вырожденные резонансы. Будем говорить, что замкнутая фазовая кривая $H(x,y)=h_0$ невозмущенной гамильтоновой системы является вырожденной, если $\omega'(h_0)=0$, где $\omega(h)$ – собственная частота колебаний. При этом если $\omega^{(j)}(h_0)=0$, но $\omega^{(j+1)}(h_0)\neq 0$, то будем говорить, что порядок вырождения равен j.

Рассмотрим уравнение типа Дуффинга-Ван дер Поля при воздействии малого двухчастотного возмущения

$$\ddot{x}+x+\alpha x^2+x^3=\varepsilon(\beta\sin\omega_1 t\sin\omega_2 t+\delta(b-x^2)\dot{x})$$

где $|\alpha|\in(0;2), \beta, b, \delta>0$– параметры, $0<\varepsilon\ll 1$. Будем предполагать, что ω_1/ω_2 – иррационально. Тогда возмущение представляется квазипериодической функцией времени. При $A=0$ (автономный случай) и $b>0$ уравнение имеет единственный устойчивый предельный цикл в фазовом пространстве. Этот факт следует из анализа порождающей функции Пуанкаре-Понтрягина, простые нули которой определяют уровни энергии, от которых при малых ε родятся грубые предельные циклы. В нерезонансном случае указанному предельному циклу отвечает устойчивое инвариантное многообразие (тор в расширенном фазовом пространстве). При изменении b порождающая невозмущенная траектория может проходить через резонансную зону, в том числе вырожденную. Представляет интерес изучение происходящих при этом бифуркаций квазипериодических решений. В особенности, нас интересует процесс синхронизации колебаний на частотах внешнего воздействия.

2. Невозмущенное уравнение

Невозмущенное уравнение имеет на плоскости $(x,\dot{x})$ единственное состояние равновесия $O(0;0)$ типа центр, окруженное замкнутыми фазовыми кривыми $H(x,\dot{x})=\frac{\dot{x}}{2}+\frac{x^4}{4}+\frac{\alpha x^3}{3}+\frac{x^2}{2}=h$.

Справедливо утверждение [1]

Лемма 1. *При* $|\alpha| \in (0;2)$*собственная частота* $\omega(h)$ *невозмущенного уравнения имеет простую экстремальную точку (минимум)* $h = h_0$*, т.е.* $\omega'(h_0) = 0,\ \omega''(h_0) > 0$.

Например, при $\alpha = 1.5$ экстремальная точка функции $\omega(h)$ суть $h = h_0 \approx 0.235$. Хорошо известно, что в симметричном случае ($\alpha = 0$) решение невозмущенного уравнения явно выражается через эллиптический косинус Якоби [1]. В случае $\alpha \neq 0$ имеет место следующее утверждение.

Лемма 2. *Обозначим через* x_1, x_2 *действительные, а через* $x_{3,4} = m \pm in$ *– комплексно-сопряженные корни уравнения* $12h - 3x^4 - 4ax^3 - 6x^2 = 0$*. Решение невозмущенного уравнения имеет вид*

$$x(h,\ \theta) = \frac{px_1 + qx_2 + (px_1 - qx_2)cn\left(\frac{2K}{\pi}\theta\right)}{p + q + (p - q)cn\left(\frac{2K}{\pi}\theta\right)}, \tag{1}$$

где $\theta = \omega(t - t_0)$, $\omega(h) = \frac{\pi\sqrt{pq}}{\sqrt{2}K(k)}, p = \sqrt{(m - x_2)^2 + n^2}$, $q = \sqrt{(m - x_1)^2 + n^2}$, $K(k)$- полный эллиптический интеграл первого рода, $k = k(h)$ – его модуль.

3. Окрестность вырожденного резонанса

Выберем некоторую замкнутую область D, гомеоморфную кольцу и ограниченную фазовыми траекториями. Пусть также вырожденная траектория $H(x, y) = h_0$ принадлежит D. В указанной области перейдем от исходных переменных $(x, \dot{x}) \in D$ к каноническим переменным действие - угол θ и рассмотрим систему в расширенном 4-мерном фазовом пространстве, вводя дополнительные угловые переменные: $\dot{\theta}_1 = \omega_1, \dot{\theta}_2 = \omega_2$:

$$\begin{cases} \dot{I} = \varepsilon x'_\theta(\cdot)\left[\delta\omega\left(b - x^2(\cdot)\right)x'_\theta(\cdot) + A\sin\theta_1\sin\theta_2\right]; \\ \dot{\theta} = \omega(I) - \varepsilon x'_I(\cdot)[\delta\omega\left(b - x^2(\cdot)\right)x'_\theta(\cdot) + A\sin\theta_1\sin\theta_2]; \\ \dot{\theta}_1 = \omega_1; \\ \dot{\theta}_2 = \omega_2; \end{cases} \tag{2}$$

где $(\cdot) \equiv (I, \theta)$. Данная система определена на прямом произведении отрезка и 3-мерного тора. При $\varepsilon = 0$ фазовое пространство расслаивается на инвариантные трехмерные торы, движение на которых условно-периодическое. При $\varepsilon \neq 0$, указанные торы разрушаются вследствие неконсервативности возмущения и наличия резонансов.

Определение. *Замкнутую фазовую кривую невозмущенного уравнения* $H(x, y) = h\left(I_{nk_1k_2}\right)$ *будем называть резонансной, если выполнено соотношение* $n\omega\left(I_{nk_1k_2}\right) = k_1\omega_1 + k_2\omega_2$ *для некоторых целых* n,k_1, k_2*, не имеющих общего делителя, отличного от единицы.*

Ясно, что в случае немонотонной функции $\omega(I)$ резонансному значению частоты $\frac{1}{n}(k_1\omega_1 + k_2\omega_2)$ может соответствовать несколько различных фазовых траекторий. В то же время, для каждого резонанса набор чисел n, k_1, k_2 определяются однозначно.

3.1. Усредненная система и ее анализ

Пусть $I_{nk_1k_2} = I_0$, то есть пусть вырожденный уровень энергии совпадает с резонансным. В случае вырождения первого порядка резонансная зона имеет ширину порядка $O(\varepsilon^{1/3})$. Двумерная усредненная система маятникового типа, описывающая топологию резонансной зоны, имеет вид [8,9]

$$\begin{cases} \dot{u} = \varepsilon^{\frac{2}{3}}A\left(v, I_{nk_1k_2}\right) + \varepsilon P\left(v, I_{nk_1k_2}\right)u \\ \dot{v} = \varepsilon^{\frac{2}{3}}b_2u^2 + \varepsilon(b_3u^3 + Q(v, I_{nk_1k_2})) \end{cases}, \tag{3}$$

где A, P, Q суть $\frac{2\pi}{n}$-периодические функции переменной v, $b_j = \frac{1}{j!}\omega^{(j)}\left(I_{nk_1k_2}\right)$. Используя выражение для решений невозмущенного уравнения (1), вычислим функции

$A\left(v, I_{nk_1k_2}\right), P\left(v, I_{nk_1k_2}\right), Q\left(v, I_{nk_1k_2}\right)$ в явном виде. Переходя к медленному времени $\tau = \mu t$, получим систему

$$\begin{cases} \frac{du}{d\tau} = B_0\left(I_{nk_1k_2}\right) + a\sin v + \varepsilon^{\frac{1}{3}}(\sigma + c\sin v)u; \\ \frac{dv}{d\tau} = u^2 + \varepsilon^{\frac{1}{3}} c\cos v. \end{cases} \tag{4}$$

Числа a, σ, c зависят от амплитуды возмущения β и резонансного значения действия $I_{nk_1k_2}$. Можно показать, что $B_0\left(I_{nk_1k_2}\right)$ – значение порождающей функции Пуанкаре – Понтрягина для исходной системы при $\beta = 0$ (автономный случай) в точке $I = I_{nk_1k_2}$. Согласно теореме Пуанкаре-Понтрягина [1], если $I = I_*$ является простым нулем функции $B_0(I)$, то в окрестности невозмущенной (порождающей) кривой $H(x, \dot{x}) = h(I_*)$ при малых значениях ε рождается грубый предельный цикл. Предположим, что порождающая траектория близка к резонансной и положим $B_0\left(I_{nk_1k_2}\right) = \varepsilon^{\frac{1}{3}}\gamma$, где $\gamma = \gamma(b)$ – параметр расстройки.

Усредненная система может иметь лишь сложные состояния равновесия, что не позволяет применить теоремы Боголюбова [2]. Рассмотрим деформации данной системы, вводя параметр деформации p_1 следующим образом.

$$\begin{cases} \dot{u} = a\sin v + \varepsilon^{\frac{1}{3}}(\gamma + (\sigma + c\sin v)u); \\ \dot{v} = p_1 u + u^2 + \varepsilon^{\frac{1}{3}} c\cos v\,. \end{cases} \tag{5}$$

Параметр p_1 определяет отклонение резонансного уровня энергии от вырожденного. Согласно критерию Бендиксона, данная система не может иметь стягиваемых (т.е. не охватывающих фазовый цилиндр) предельных циклов. Для определения взаимного расположения сепаратрис седла мы применяем аналитический метод Мельникова. Из анализа усредненной системы следует следующее утверждение [9].

Теорема 1. *При достаточно малом $\varepsilon > 0$ и положительных значениях $p_1 \neq p_1^*\left(I_{nk_1k_2}\right) = (12B_1(I_{nk_1k_2}))^{1/3}$ существуют такие значения $\gamma_1^+(p_1) > \gamma_1^-(p_1) > \gamma_2^+(p_1) > \gamma_2^-(p_1)$, что усредненная система не имеет предельных циклов при $\gamma \in (\gamma_1^+(p_1); \gamma_1^-(p_1)) \cup (\gamma_2^+(p_1); \gamma_2^-(p_1))$; почти все траектории стремятся к устойчивым состояним равновесия при $t \to +\infty$.*

Указанные в Теореме 1 интервалы будем называть интервалами синхронизации. Простым устойчивым состояниям равновесия усредненной системы в исходной системе соответствуют грубые устойчивые квазипериодические решения (с частотами $\frac{\omega_1}{n}, \frac{\omega_2}{n}$). Для указанных в теореме значений параметров колебания синхронизируются на этих частотах. Фазовые портреты усредненной системы при различных значениях параметров расстройки, иллюстрирующие Теорему 1, приведены на рис. 1 и 2 [9].

Заметим, что в случае $p_1 < p_1^*$, для петли сепаратрис, от которой родится/исчезает предельный цикл, изображенный на 5-м фазовом портрете на Рис.2, нет «порождающей» петли в невозмущенной системе. При бифуркационных значениях γ и малых ε обе «невозмущенные» гомоклинические петли разомкнуты, но из их расщепленных усов образуется петля (4-й и 6-й фазовый портрет на Рис.2). Соответственно, аналитический метод Мельникова определения расщепления невозмущенных сепаратрис не применим для нахождения бифуркационных значений параметра γ, соответствующих рождению/исчезновению указанного предельного цикла. Однако, их можно найти, анализируя поведение порождающей функции Пуанкаре-Понтрягина в указанной области вращательных движений.

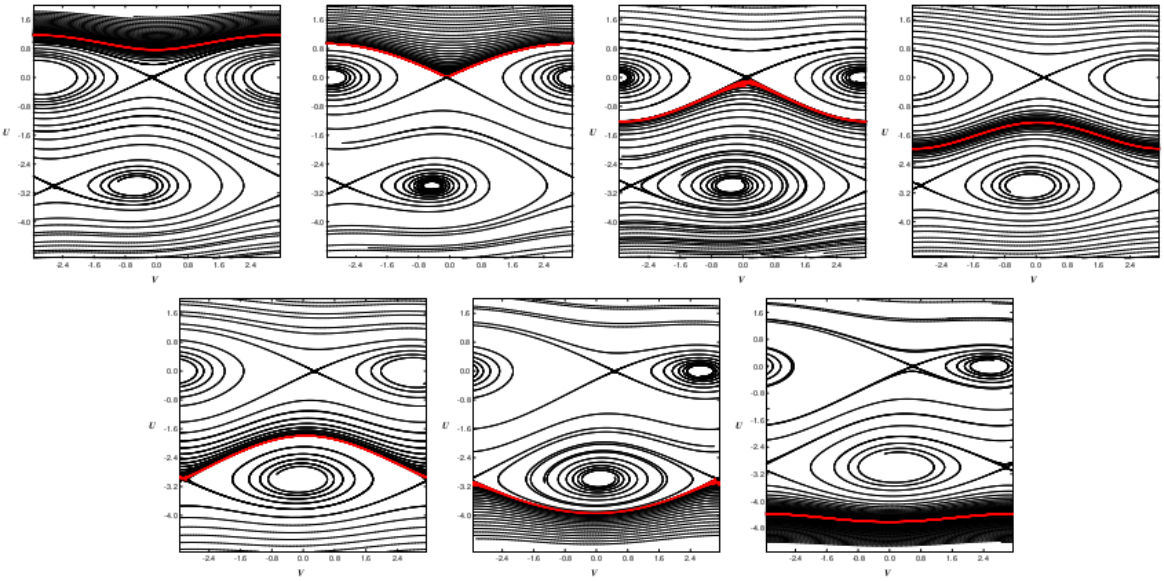


Рис.1. Фазовые портреты усредненной системы при изменении расстройки γ и фиксированных значениях $a = 0.8, c = 0.2, \varepsilon = 0.1, \sigma = -1, p_1 = 3 > p_1^*$

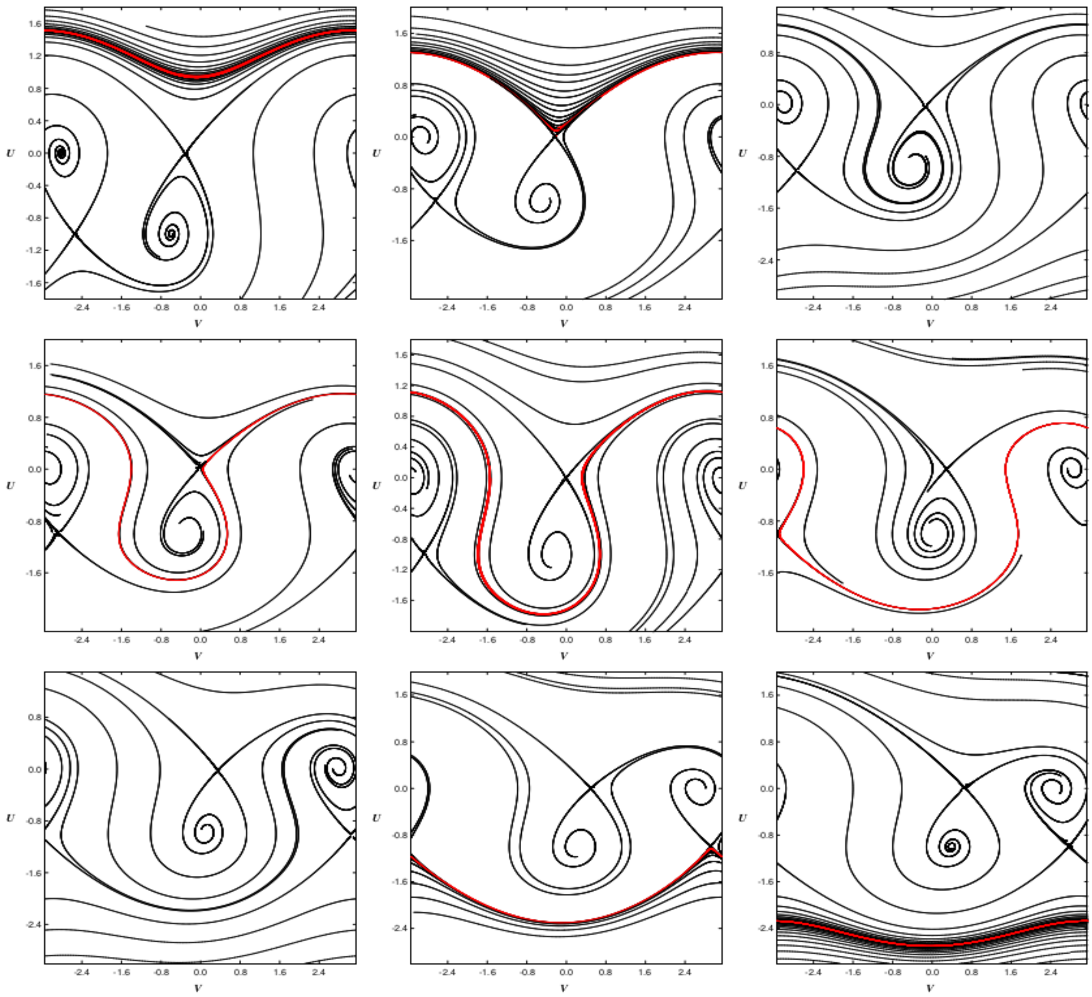


Рис.2. Фазовые портреты усредненной системы при изменении расстройки γ и фиксированных значениях $a = 0.8, c = 0.2, \varepsilon = 0.1, \sigma = -1, p_1 = 1 < p_1^*$

4. Вывод

В данной работе изучаются квазипериодические неконсервативные возмущения уравнения типа Дуффинга с асимметричным потенциалом. Невозмущенное уравнение имеет вырожденную фазовую траекторию, которая по предположению близка к резонансной. Если $b > 0$, то автономное возмущенное уравнение ($\beta = 0$) имеет при всех достаточно малых $\varepsilon > 0$ грубый предельный цикл. Предполагается, что значение b подобрано таким образом, что предельный цикл родится в окрестности резонансной фазовой кривой. Исследование топологии резонансной зоны приводит к исследованию двухпараметрического семейства автономных усредненных систем маятникового типа. В работе построены фазовые портреты усредненной системы при различных значениях параметров расстройки. Установлено существование интервалов синхронизации, для которых колебания в резонансной зоне синхронизируются на частотах, кратных частотам возмущения.

Литература

1. Морозов А.Д. Резонансы, циклы и хаос в квазиконсервативных системах. Москва-Ижевск: РХД, 2005. 424 с.
2. Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. Москва: Гос. издательство физико-матем. литературы, 1958. 410 с.
3. Berger M.S., Chen Y.Y. Forced quasiperiodic and almost periodic oscillations of nonlinear Duffing equation // Nonlinear Analysis, Theory, Methods and Applicalions. 1992. Vol. 19, No. 3. P. 249-257. DOI: 10.1016/0362-546X(92)90143-3.
4. Zhujun J., Jicai H., Jin D. Complex dynamics in three-well duffing system with two external forcings // Chaos, Solitons and Fractals. 2007. Vol.33, No.3. P. 795-812. DOI:10.1016/j.chaos.2006.03.071.
5. Morozov A.D., Morozov K.E. Quasiperiodic Perturbations of Two-Dimensional Hamiltonian Systems // Differential Equations. 2017. Vol. 53, No. 12, P. 1607-1615. DOI: 10.1134/S0012266117120047.
6. Morozov A.D., Morozov K.E. On Synchronization of Quasiperiodic Oscillations // Russian Journal of Nonlinear Dynamics. 2018. Vol. 14, No. 3. P. 367-376. DOI: 10.20537/nd180307.
7. Morozov A.D., Morozov K.E. Global Dynamics of Systems Close to Hamiltonian Ones Under Nonconservative Quasi-periodic Perturbations // Russian Journal of Nonlinear Dynamics. 2019. Vol. 15, No. 2. P. 187-198. DOI: 10.20537/nd190208.
8. Morozov K.E. , Morozov A.D Quasiperiodic Perturbations of Twodimensional Hamilto-nian Systems with Nonmonotone Rotation // J. Math. Sci. 2021. Vol.255, No.6. P. 741-752. DOI: 10.1007/s10958-021-05411-5.
9. Morozov A.D., Morozov K.E. Synchronization of quasiperiodic oscillations in nearly Hamiltonian systems: the degenerate case // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Non-linear Science. 2021. Vol. 31, No. 083109. P.1-10. DOI: 10.1063/5.0055262.

ОБ ОДНОМ СЛУЧАЕ СИНТЕЗА СТАТИЧЕСКИХ РЕГУЛЯТОРОВ ПО ВЫХОДУ

А.В. Мухин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Рассмотрена задача синтеза статических регуляторов по выходу для линейного непрерывного управляемого и наблюдаемого объекта в том случае, когда в управлении и измерении задействованы разные переменные состояния. Показана, что такая задача может быть сведена к задаче выпуклой оптимизации. Представлены необходимые и достаточные условия существования статического регулятора, выраженные в форме линейных матричных неравенств.

Ключевые слова: линейные матричные неравенства, статический регулятор по выходу, выпуклая задача, лемма Шура.

1. Введение

Статическая обратная связь по измеряемому выходу представляет собой наиболее востребованный способ стабилизации неустойчивых объектов на практике. Безусловным преимуществом такого подхода к управлению по сравнению с управлением по состоянию является то, что для его реализации не требуется измерять все переменные состояния. Не менее существенное преимущество перед управлением в форме линейного динамического регулятора состоит в том, что размерности замкнутого и исходного объектов равны. Решение задачи синтеза статических регуляторов в общем случае сводится к решению билинейного матричного неравенства, относительно двух матричных переменных [1, 2]. Вследствие отсутствия эффективных и надежных алгоритмов решения билинейных матричных неравенств, поиск таких регуляторов может оказаться затруднительным, в силу того, что существующие алгоритмы не гарантируют решение, даже если оно существует. Наиболее широко применяемые эвристические алгоритмы решения билинейных матричных неравенств приведены в [3-5]. Отметим, что если задачу можно выразить с помощью линейных матричных неравенств, то ее можно считать решенной, т.к. получаем задачу выпуклой оптимизации. Для решения таких оптимизационных задач существуют различные математические пакеты программ, например [6]. Поэтому, что сведение невыпуклой задачи к выпуклой имеет принципиальное значение в силу существенно более простой численной реализации и гарантированного решения.

Решению задачи синтеза статических регуляторов посвящено довольно большое количество работ, что свидетельствует об ее актуальности и значимости на протяжении длительного времени. Перечислять все работы не представляется возможным, поэтому перечислим лишь некоторые из них, в частности [7-12]. В работе [11] приведен обзор основных частных случаев синтеза стабилизирующих статических регуляторов, в которых задача является выпуклой, а также представлены основные алгоритмы решения. В первую очередь это случаи, когда $B = I$ и $C = I$, а также некоторые другие, подразумевающие те или иные ограничения, либо совокупности ограничений. В работе [12] рассмотрен еще один частный случай, в котором задача синтеза статического регулятора может быть сведена к решению линейных матричных неравенств. Условие реализации такого случая выражается в том, что размерность пространства измерений должна быть на единицу меньше размерности пространства состояния. Таким образом, в некоторых частных случаях, при введении дополнительных условий, синтез статических регуляторов может сводиться к решению линейных матричных неравенств, для решения которых существуют эффективные алгоритмы решения [3]. Тем не менее, в общем случае, такая задача остается не решенной в смысле существования необходимых и достаточных условий, выражаемых в форме линейных матричных неравенств.

В статье рассмотрена задача синтеза статических регуляторов по выходу для линейного непрерывного управляемого и наблюдаемого объекта в том случае, когда в управлении и измерении задействованы разные переменные состояния. Показана, что такая задача может быть сведена к задаче выпуклой оптимизации. Представлены необходимые и достаточные условия существования статического регулятора, выраженные в форме линейных матричных неравенств.

2. Формулировка задачи управления

Рассмотрим линейный непрерывный управляемый и наблюдаемый объект вида

$$\dot{x} = Ax + Bu,\ x(0) = x_0 \qquad (1)$$
$$y = Cx$$

где $x \in R^{n_x}$ – вектор состояния системы;
$y \in R^{n_y}$ – измеряемый выход;
$u \in R^{n_y}$ – управление;
A, B, C – заданные матрицы соответствующих порядков.

Закон управления в форме статического регулятора записывается как

$$u = Ky \qquad (2)$$

где $K \in R^{n_u \times n_y}$ – матрица регулятора.

Уравнение замкнутой системы с учетом (2) принимает вид

$$\dot{x} = (A + BKC)x \qquad (3)$$

Задача заключается в вычислении матрицы K, обеспечивающей асимптотическую устойчивость замкнутого объекта (3).

3. Синтез статических регуляторов по выходу на основе теоремы Ляпунова

Применяя теорему Ляпунова об устойчивости к объекту (3), получим билинейное матричное неравенство

$$XA + A^TX + XBKC + C^TK^TB^TX < 0 \qquad (4)$$

где $X = X^T > 0$.

Умножив обе части неравенства (4) на матрицу $Y = X^{-1}$ запишем двойственное неравенство:

$$AY + YA^T + BKCY + YC^TK^TB^T < 0 \qquad (5)$$

Таким образом, задача синтеза статического регулятора сводится к решению билинейного матричного неравенств (5) относительно переменных K и Y. Соответствующие множества являются невыпуклыми, поэтому методы выпуклой оптимизации неприменимы.

4. Необходимые и достаточные условия существования статического регулятора по выходу

Рассмотрим сначала необходимые условия разрешимости неравенства (5). Для вывода необходимых условий потребуем, чтобы матрицы B и C имели блочно-однородный вид, а именно

$$B = \begin{pmatrix} 0_{(n_x-n_u)\times n_u} \\ I_{n_u} \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} I_{n_y} & 0_{n_y\times(n_x-n_y)} \end{pmatrix} \qquad (6)$$

$$B = \begin{pmatrix} I_{n_u} \\ 0_{(n_x-n_u)\times n_u} \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 0_{n_y\times(n_x-n_y)} & I_{n_y} \end{pmatrix} \qquad (7)$$

Если матрицы B и C имеют неоднородный вид, т.е. отличны от (6), (7), то это всегда исправить путем переопределения переменных состояния и соответствующего изменения матрицы A. В результате, вместо тройки матриц (A, B, C) посредством линейных преобразований получим (A^*, B^*, C^*). Таким образом, введенное требование не является принципиальным ограничением, накладываемым на матрицы B и C.

В соответствии с (6) и (7), возможно два различных варианта произведения матрицы BKC в неравенстве (5). В обоих случаях результирующая матрица может быть представлена в блочном виде, один из которых будет равен K, а остальные – нулевые. Кроме того, матрица регулятора будет находиться вне главной диагонали. Например, если B и C соответствуют (6), то получим BKC вида

$$BKC = \begin{pmatrix} 0_{(n_x-n_u)\times n_y} & 0_{(n_x-n_u)\times(n_x-n_y)} \\ K_{n_u\times n_y} & 0_{n_u\times(n_x-n_y)} \end{pmatrix} \tag{8}$$

Прежде чем переходить непосредственно к выводу необходимых и достаточных условий, сделаем некоторые пояснения. Поскольку, для управления и измерения используются разные переменные состояния, то $R^{n_u} \cap R^{n_y} = \emptyset$. Это условие может быть выражено как $CB = 0_{n_y\times n_u}$. Пространство R^{n_x} в таком случае раскладывается в прямую сумму следующим образом

$$R^{n_x} = R^{n_u} \bigoplus R^{n_y} \bigoplus D \tag{9}$$

Из условия $R^{n_u} \cap R^{n_y} = \emptyset$, следует соотношение относительно размерностей входа и выхода

$$n_u + n_y \leq n_x \tag{10}$$

Случай $n_u + n_y > n_x$ не представляет практического интереса, т.к. подразумевает некоторую избыточность относительно входной и выходной информации и поэтому не рассматривается. Условие (10) можно переписать в виде равенства

$$n_x = n_u + n_y + r \tag{11}$$

Руководствуясь практическими соображениями, будем считать что $n_y \geq n_u$.

Без потери общности рассмотрим случай, когда матрицы B и C имеют вид (6) и соответственно, произведение BKC вида (8). Для второго случая выкладки будут аналогичными. Перепишем исходное неравенство (5) с учетом (8)

$$AY + YA^T + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ K & 0 \end{pmatrix} Y + Y \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ K & 0 \end{pmatrix}^T < 0 \tag{12}$$

где $Y = \begin{pmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{12}^T & Y_{22} \end{pmatrix} > 0$.

Приведем сумму матриц в неравенстве (12) к единой блочной симметрической матрице. Отметим, что диагональные блоки $0_{(n_x-n_u)\times n_y}$ и $0_{n_u\times(n_x-n_y)}$ матрицы BKC будут квадратными только в случае, когда $r = 0$. В общем случае это не так. С учетом того, что $n_x - n_u = n_y + r$ перегруппируем блоки в матрице BKC таким образом, чтобы на главной диагонали располагались квадратные матрицы. Исходя из размерностей блоков матрицы (8) с учетом (11), сделать это можно двумя способами. Перегруппируем BKC первым способом

$$BKC = \begin{pmatrix} 0_{n_y\times n_y} & 0_{n_y\times(n_u+r)} \\ \begin{pmatrix} 0_{r\times n_y} \\ K_{n_u\times n_y} \end{pmatrix} & 0_{(n_u+r)\times(n_u+r)} \end{pmatrix} \tag{13}$$

Теперь перегруппируем матрицу BKC вторым способом

$$BKC = \begin{pmatrix} 0_{(n_y+r)\times(n_y+r)} & 0_{(n_y+r)\times n_u} \\ \begin{pmatrix} K_{n_u\times n_y} & 0_{n_u\times r} \end{pmatrix} & 0_{n_u\times n_u} \end{pmatrix} \tag{14}$$

Тогда исходное билинейное неравенство (12) для первого случая перегруппировки примет вид

$$\begin{pmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} + \begin{pmatrix} 0_{r\times n_y} \\ KY_{11} \end{pmatrix}^T \\ \Psi_{12}^T + \begin{pmatrix} 0_{r\times n_y} \\ KY_{11} \end{pmatrix} & \Psi_{22} + \begin{pmatrix} 0_{r\times n_y} \\ KY_{12} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0_{r\times n_y} \\ KY_{12} \end{pmatrix}^T \end{pmatrix} < 0 \tag{15}$$

Аналогично, для второго случая получаем

$$\begin{pmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} + (KY_{11}^1)^T \\ \Psi_{12}^T + KY_{11}^1 & \Psi_{22} + KY_{12}^1 + (KY_{12}^1)^T \end{pmatrix} < 0 \tag{16}$$

где $\Psi = AY + YA^T = \begin{pmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \\ \Psi_{12}^T & \Psi_{22} \end{pmatrix}$.

Блоки введенной матрицы Ψ определяются по формулам:

$$\Psi_{11} = A_{11}Y_{11} + Y_{11}A_{11}^T + A_{12}Y_{12}^T + Y_{12}A_{12}^T \tag{17}$$

$$\Psi_{12} = A_{11}Y_{12} + A_{12}Y_{22} + Y_{11}A_{21}^T + Y_{12}A_{22}^T \tag{18}$$

$$\Psi_{22} = A_{21}Y_{12} + Y_{12}^T A_{21}^T + A_{22}Y_{22} + Y_{22}A_{22}^T \quad (19)$$

Для разрешимости (15) и (16) необходимо потребовать, чтобы левый верхний блок $\Psi_{11} = \Psi_{11}^T$ был отрицательно определенным

$$A_{11}Y_{11} + Y_{11}A_{11}^T + A_{12}Y_{12}^T + Y_{12}A_{12}^T < 0 \quad (20)$$

где A_{ij} – блоки матрицы A соответствующих размерностей.

Неравенство (20) необходимо дополнить условием положительной определенности симметрической матрицы Y. Получаем систему

$$A_{11}Y_{11} + Y_{11}A_{11}^T + A_{12}Y_{12}^T + Y_{12}A_{12}^T < 0 \quad (21)$$
$$\begin{pmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{12}^T & Y_{22} \end{pmatrix} > 0$$

В свою очередь, для разрешимости (21) достаточно потребовать разрешимость системы

$$A_{11}Y_{11} + Y_{11}A_{11}^T + A_{12}Y_{12}^T + Y_{12}A_{12}^T < 0 \quad (22)$$
$$Y_{11} > 0$$

Действительно, если система (22) разрешима, то путем выбора матрицы $Y_{22} = Y_{22}^T$ всегда можно обеспечить условие $Y > 0$, т.к. в силу леммы Шура имеем

$$Y_{22} - Y_{12}^T Y_{11}^{-1} Y_{12} < 0 \quad (23)$$

Сформулируем необходимые условия существования разрешимости неравенства (5):

Утверждение 1. *Необходимыми условиями разрешимости билинейного неравенства (5) является разрешимость системы линейных матричных неравенств (22) относительно матриц* $Y_{11} \in R^{n_y \times n_y}$ *и* $Y_{12} \in R^{n_y \times (n_u + r)}$ *и относительно матриц* $Y_{11} \in R^{(n_y + r) \times (n_y + r)}$ *и* $Y_{12} \in R^{(n_y + r) \times n_u}$ *с заданными матрицами* A_{ij} *соответствующих размерностей.*

Разбиение на блоки заданной матрицы A выполняется двумя способами в соответствии с размерностями матриц Y_{ij}.

Рассмотрим второе необходимое условие относительно нижнего диагонального блока матрицы (16). Это условие можно представить в виде системы линейных матричных неравенств

$$A_{21}Y_{12} + Y_{12}^T A_{21}^T + A_{22}Y_{22} + Y_{22}A_{22}^T + Z_{12} + Z_{12}^T < 0 \quad (24)$$
$$Y_{22} > 0$$

где $Z_{12} = KY_{12}^1$.

Если (24) разрешимо, то уравнение $Z_{12} = KY_{12}^1$ будет также разрешимо относительно K. Сравнивая системы (22) и (24) видим, что диагональные блоки матрицы Y входят в разные системы, в то время как блок Y_{12} входит в обе системы. Матрица регулятора входит только в систему (24).

Теперь перейдем к необходимым и достаточным условиям разрешимости, применительно к неравенству (16). Эти условия являются также необходимыми и достаточными условиями существования статического регулятора по выходу. Если необходимые условия выполнены, то в соответствии с леммой Шура для разрешимости неравенства (16) необходимо и достаточно, чтобы была разрешима система

$$A_{11}Y_{11} + Y_{11}A_{11}^T + A_{12}Y_{12}^T + Y_{12}A_{12}^T < \Psi_{12}{}^*(\Psi_{22}{}^*)^{-1}(\Psi_{12}{}^*)^T \quad (25)$$
$$\begin{pmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{12}^T & Y_{22} \end{pmatrix} > 0$$

Матрицы $\Psi_{ij}{}^*$ в (25) определяются по формулам:

$$\Psi_{12}{}^* = A_{11}Y_{12} + A_{12}Y_{22} + Y_{11}A_{21}^T + Y_{12}A_{22}^T + (KY_{11}^1)^T \quad (26)$$
$$\Psi_{22}{}^* = A_{21}Y_{12} + Y_{12}^T A_{21}^T + A_{22}Y_{22} + Y_{22}A_{22}^T + KY_{12}^1 + (KY_{12}^1)^T \quad (27)$$

Разрешимость первого неравенства системы (25) при заданных матрицах Y_{11} и Y_{12}, зависит только от матриц Y_{22} и K, расположенных в правой части этого неравенства. Следовательно, выбором этих матриц можно обеспечить разрешимость этой системы, а значит и исходного неравенства (16). Таким образом, если задать блоки Y_{11} и Y_{12} из необходимых условий, то задача синтеза статического регулятора может быть сведена к решению исходного неравенства (16) относительно двух переменных Y_{22} и K. В результате приходим к необходимым и достаточным условиям существования статического регулятора по выходу, которые сводятся к разрешимости системы линейных матричных неравенств

$$
\begin{pmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} + (KY_{11}^1)^T \\ \Psi_{12}^T + KY_{11}^1 & \Psi_{22} + KY_{12}^1 + (KY_{12}^1)^T \end{pmatrix} < 0 \qquad (28)
$$
$$
\begin{pmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{12}^T & Y_{22} \end{pmatrix} > 0
$$

На основании полученных результатов сформулируем утверждение:

Утверждение 2. *Необходимыми и достаточными условиями стабилизации линейного непрерывного управляемого и наблюдаемого объекта с помощью статического регулятора по выходу, обеспечивающего асимптотическую устойчивость замкнутого объекта, является разрешимость системы (28) относительно матриц Y_{22} и K.*

Разрешимость системы (28) с заданными блоками Y_{11}, Y_{12} означает существование нижнего диагонального блока Y_{22}, а значит и самой матрицы квадратичной формы $Y = \begin{pmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{12}^T & Y_{22} \end{pmatrix} > 0$, и поэтому, гарантирует существование статического регулятора по выходу. Если эта система разрешима, то параметры регулятора K определяются из решения системы (28). В противном случае задача не разрешима и статический регулятор не существует.

Если введенное условие (10) не выполняется, то выполняя аналогичные преобразования можно также привести (5) к симметрической блочной матрице. При этом, как отмечалось ранее, такой случай менее предпочтителен, т.к. подразумевает избыточность относительно входной и выходной информации.

5. Заключение

В статье показано, что задача синтеза статического регулятора для линейного непрерывного управляемого и наблюдаемого объекта в случае, когда в измерении и управлении участвуют разные переменные состояния, может быть сведена к разрешимости системы линейных матричных неравенств. С помощью приведения исходного билинейного неравенства к единой блочной симметрической матрице удалось сформулировать необходимые и достаточные условия существования статического регулятора по выходу. Используя приведенные в статье выкладки можно рассмотреть и другие случаи синтеза статических регуляторов.

Автор благодарит профессора кафедры дифференциальных уравнений, математического и численного анализа Д. В. Баландина за консультацию и обсуждение результатов, а также за ценные и полезные замечания.

Литература

1. Boyd S., El Ghaoui L., Feron E., Balakrishnan V. Linear Matrix Inequalities in System and Control Theory. Philadelphia: SIAM, 1994. 205 p.
2. Баландин Д.В., Коган М.М. Синтез законов управления на основе линейных матричных неравенств. М.: Физматлит, 2007. 280 с.
3. Goh K.C. Robust control synthesis via bilinear matrix inequalities: Ph.D. thesis, University of Southern California, Los Angeles, CA, 1995.
4. Hassibi A., How J., Boyd S. A path following method for solving BMI problems in control // Proceedings of American Control Conference, 1999. Vol. 2. P. 1385-1389.
5. Henrion D., Loefberg J., Kocvara M., Stingl M. Solving polynomial static output feedback problems with PENBMI // 44th IEEE Conference and Europ. Control Conf., Sevilla, Spain, 2005. P. 7581-7586.
6. Gahinet P., Nemirovski A., Laub A. J., Chilali M. The LMI Control Toolbox. For Use with Matlab. User’s Guide. Natick, MA: The MathWorks, Inc., 1995. 357 p.
7. Astolfi A., Colaneri P. Static output feedback stabilization of linear and nonlinear systems // 39th Conference on Decision and Control, Sydney, AU, 2000.
8. Astolfi A., Colaneri P. An algebraic characterization for the static output feedback stabilization problem // American Control Conference, Arlington, VA 2001. P. 1408-1413.
9. Cao Y.-Y., Lam J., Sun Y.-X. Static output feedback stabilization: an ILMI approach // Automatica, 1998. Vol. 34. P. 1641-1645.

10. El Ghaoui L., Oustry F., Aitrami M. A cone complementarity linearization algorithm for static output-feedback and related problems // IEEE Transactions on Automatic Control, 1997. Vol. 42. P. 1171-1176.
11. Sadabadi M. S., Peaucelle D. From static output feedback to structured robust static output feedback: A survey // Annual Reviews in Control, 2016. Vol. 42. P. 11-26.
12. Мухин А.В. Синтез статических регуляторов на основе решения линейных матричных неравенств // Управление большими системами. Выпуск 92. М.: ИПУ РАН, 2021. С. 28-42.

УЧЕТ НЕОДНОРОДНОЙ ВМЕСТИМОСТИ ПОДОБЛАСТЕЙ В СИЛОВЫХ СХЕМАХ РАЗМЕЩЕНИЯ ГРАФА

С.В. Небайкин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Статья посвящена рассмотрению задачи укладки графа на плоскости с учетом наличия подобластей ограниченной вместимости. Производится формальная постановка задачи с учетом данных ограничений. Поиск решения задачи предлагается построить по гибридной схеме, основанной на применении известного подхода силовой укладки графа в сочетании с переразмещением вершин при помощи итерационной трансформации пространства размещения. Рассмотренная методика решения задачи реализована программно, приведены результаты вычислительных экспериментов.

Ключевые слова: силовая укладка графа, учет вместимости подобластей, многоуровневая схема.

1. Введение

В различных областях науки и прикладных задачах возникает проблематика, связанная с размещением (укладкой) графов на плоскости. В частности, подобные задачи возникают на этапах физического проектирования интегральных схем [1,2]. Так, например, в задаче глобального размещения требуется указать размещение компонент интегральной схемы с точностью до областей монтажного пространства кристалла, где каждая область представлена компактной группой посадочных мест. В данной задаче важно не только минимизировать общую оценку длины трасс, но и обеспечить потенциальную возможность последующего бесконфликтного назначения компонентов на посадочные места. Приведем формальную постановку данной задачи.

2. Постановка задачи

В качестве исходных данных выступает взвешенный граф $G(V, E, u, w)$ схемы, где V – множество компонент схемы, $V = \{v_1, \dots, v_n\}$; E – множество связей схемы (ребро между парой вершин означает наличие цепи, связывающей контакты соответствующих компонент), $E \subseteq V^{(2)}$, $|E| = m$; $u = (u_1, \dots, u_n)$, где u_i – число занимаемых посадочных мест i-м компонентом, $u_i \in N, i = \overline{1,n}$; $w = (w_1, \dots, w_m)$, где w_{ij} – число общих цепей, которые связывают i-ю и j-ю компоненты, $w_{ij} \in N, i, j = \overline{1,m}$.

Размещение вершин графа выполняется на плоскости, область размещения задается набором непересекающихся прямоугольных областей $(\mathrm{R}_l,\ \rho_l)$, $l = \overline{1,k}$. Здесь R_l соответствует некоторой прямоугольной области $\mathrm{A}_l = [X_l^-, X_l^+] \times [Y_l^-, Y_l^+] \subset R^2$, а значения ρ_l указывают на число доступных посадочных мест в данной области, $\rho_l \in N$.

В задаче требуется для каждого компонента $v_1, \dots, v_n$ указать размещение $(p_1, \dots, p_n)$ в рамках монтажного пространства кристалла, где $p_i = (x_i, y_i) \in R^2, i = \overline{1,n}$.

Потребуем, чтобы вершины могли размещаться строго в рамках заданных прямоугольных областей

$$p_i \in A\,, i = \overline{1,n}, \text{ где } A = \textstyle\bigcup_{l=1}^{k} A_l. \quad (1)$$

Учтем потенциальную возможность последующего бесконфликтного назначения компонентов на посадочные места, для чего ограничим суммарное число посадочных мест, которые занимают компоненты, размещенные в прямоугольные области

$$\textstyle\sum_{v_i\,:\,p_i \in A_l} u(v_i) \leq\ \rho_j, l = \overline{1,k}. \quad (2)$$

Для оценки качества размещений p выберем следующие обобщённые функции цели.

Во-первых, важно в результате размещения получить компактные трассы цепей, для чего будем использовать правило «чем сильнее связаны компоненты, тем ближе они должны располагаться друг к другу», реализованное в виде функционала

$$F_a(p) = \sum_{(i,j)\in E} w_{ij} \left\| p_i - p_j \right\|^a \underset{p}{\rightarrow} min, \text{где } a \geq 0. \tag{3}$$

Во-вторых, учтём возможность последующего бесконфликтного размещения компонентов, для чего воспользуемся следующим правилом - «чем больше требуется посадочных мест компонентам, тем на большем расстоянии друг от друга они должны находиться», реализованное в виде функционала

$$F_r(p) = \sum_{(i,j)\,:\, i\neq j} u_i u_j \left\| p_i - p_j \right\|^b \underset{p}{\rightarrow} min, \text{где } b \leq 0. \tag{4}$$

В общем случае функции целей (3) и (4) противоречивы. В случае многокритериальной постановки решением является не единственное размещение, а множество решений, оптимальных по Парето. Предлагается рассмотреть данную задачу в однокритериальной постановке, полученной классической линейной сверткой:

$$\lambda F_a(p) + (1-\lambda) F_r(p) \underset{p}{\rightarrow} min\,, \quad \text{где } \lambda \in [0,1]. \tag{5}$$

Задачу (1) – (5) будем называть обобщенной задачей размещения графовых структур на плоскости. В представленных функциях цели (3), (4) параметры a и b позволяют управлять «значимостью» правил. В данной работе были использованы следующие значения параметров: $a = 1, b = -2$.

3. Метод решения

Выбрав определенные значения параметров в постановке (1)-(5) можно сформулировать в терминах обобщенной задачи размещения ряд классических NP-трудных задач. Например, положив:

$\lambda = 1$ – отказ от критерия (5),

$k = 2$ – рассмотрим две области размещения вершин,

$w \equiv 1, u \equiv 1$ – веса вершин и ребер графа примем единичными,

$p \equiv \frac{n}{2}$ – в каждой из областей можно разместить половину вершин графа

$X_1^- = X_1^+ = Y_1^- = Y_1^+ = 0$; $X_2^- = X_2^+ = 0, Y_2^- = Y_2^+ = 1$ – в качестве областей размещения будем рассматривать две точки на плоскости с координатами (0,0) и (0,1),

получаем эквивалент задаче *равномерного 2-разбиения графа* (рис. 1), в которой требуется сбалансированно распределить вершины графа по двум подмножествам так, чтобы количество связей между вершинами из этих подмножеств было минимально [3].

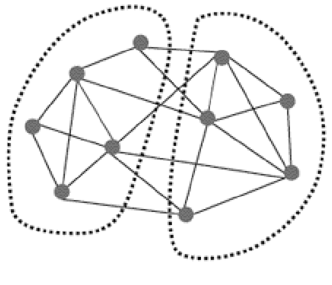


Рис. 1. Равномерное 2-разбиение графа

Исходя из этого получение точного решения (5) за полиномиальное время в общем случае не представляется возможным.

Разобьем решение задачи на два этапа:

1. Получение размещения вершин графа без учета ограничений (1) - (2) с помощью алгоритмов, основанных на силовой укладке графа [4, 5].

2. Учет ограничений (1) - (2) при помощи итерационной трансформации пространства размещения.

На первом этапе для поиска решения задачи используется многоуровневая схема [6, 7, 8] в сочетании с алгоритмом силовой укладки графа [4,5]. Центральной идеей многоуровневого метода является последовательное редуцирование размерности задачи путем обобщения информации о задаче и включения в редуцированный вариант наиболее существенных данных, решение редуцированной задачи с помощью алгоритма силовой укладки и последовательное восстановление полученного решения до размерности исходной задачи. В основу алгоритма редукции графа положена популярная техника отождествления связных ребром вершин [6]. Для редуцированных графов используются схемы быстрой силовой укладки графов [4], эксплуатирующие идею приближенного вычисления сил отталкивания по сравнению с классическим алгоритмом. На этапах восстановления размещения применяется улучшение решения также с помощью схемы быстрой силовой укладки графов.

Результатом первого этапа решения задачи является размещение вершин графа на плоскости, удовлетворяющее функционалу (5), при этом ограничения (1) и (2) не учитываются. Применительно к задаче (1)-(5) полученное решение может оказаться недопустимым, поскольку будет нарушать ограничения, которые на этом этапе исключены из рассмотрения. Учет данных ограничений выполняется на следующем этапе решения задачи.

На втором этапе для учета ограничений (1) - (2) используется алгоритм, в основу которого положена концепция последовательного перемещения вершин из областей, в которых наблюдается их избыточная концентрация, в другие области.

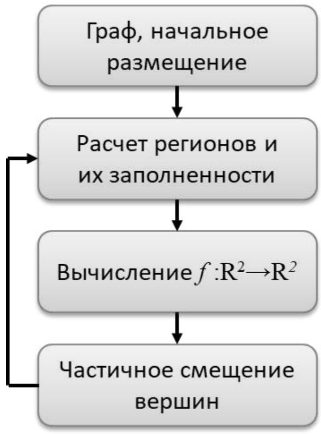


Рис. 2. Схема алгоритма перемещения вершин

Непосредственно алгоритм перемещения вершин построен по итерационной схеме и состоит из нескольких шагов (рис. 2). Сначала область размещения графа разбивается равномерной решеткой размера $r \times r$ на r^2 регионов $R_{s,t} \subset R^2$, $s,t = \overline{1,r}$, здесь r – параметр алгоритма. Далее для каждого региона вычисляется оценка его вместимости, которая определяется через относительную вместимость областей A_l, пересекающихся с регионом

$$\rho(R_{s,t}) = \sum_{l=1}^{k} \rho_l \frac{SQUARE(R_{s,t} \cap A_l)}{SQUARE(A_l)}, \ \ s,t = \overline{1,r}, \tag{6}$$

где $SQUARE(.)$ – функция, возвращающая площадь от области размещения.

На каждой итерации алгоритма для каждого региона будем вычислять заполненность региона – суммарный вес вершин, попавших в результате размещения в данный регион.

$$\sigma(R_{s,t}) = \sum_{\substack{p_i \in R_{s,t} \\ i=\overline{1,n}}} u_i\,, \ \ s,t = \overline{1,r}. \tag{7}$$

Введем новую характеристику – вес региона, которая показывает отношение наполненности к оценке вместимости региона

$$\tau(R_{s,t}) = \frac{\sigma(R_{s,t})}{\rho(R_{s,t})}, \ \ s,t = \overline{1,r}. \tag{8}$$

Значение характеристики $\tau > 1$ для некоторого региона указывает на избыточное количество вершин. Значение $\tau < 1$ сигнализирует о наличии резерва для размещения в области дополнительных вершин. Возникает задача построения такой трансформации исходной равномерной решетки, при которой регионы с избытком вершин будут увеличены за счет регионов с резервами по вместимости. Построение трансформированной сетки состоит в расчете такого положения узлов решетки, при которой веса регионов и их геометрические размеры приведены в соответствие – регионам с большим весом соответствуют большие ячейки решетки по отношению к остальным регионам. Последовательно процесс изображен на рисунке 3.

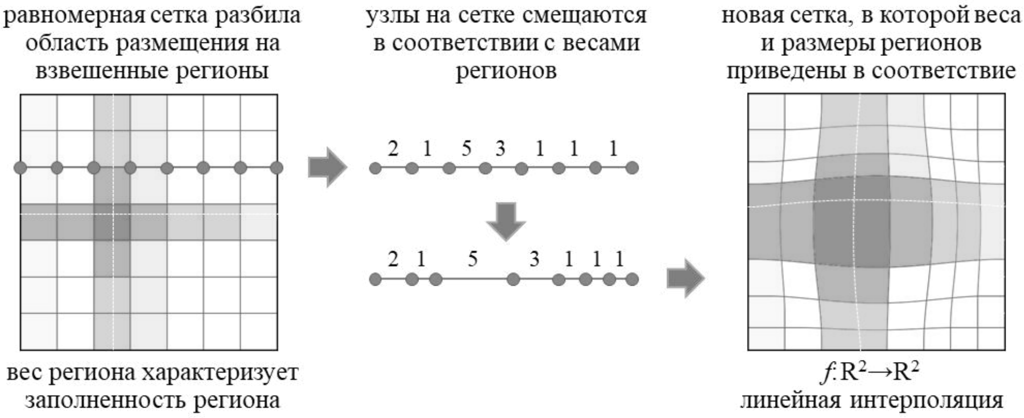


Рис. 3. Процесс построения трансформированной сетки

Рассмотрим более подробно процедуру построения трансформированной решетки, которая которая выполняется в два этапа. Независимо друг от друга формируются горизонтальная и вертикальная составляющие решетки. Опишем формирование горизонтальной компоненты. Рассмотрим первый горизонтальный ряд регионов исходной равномерной решетки – он определяется набором отрезков одинаковой длины. Введем понятие веса отрезка, под которым будем понимать средний вес двух регионов, разделенных данным отрезком. В рамках горизонтального ряда нормируем веса отрезков так, чтобы сумма весов соответствовала суммарной длине всех отрезков ряда. Пересчитаем координаты расположения концов отрезков так, чтобы новые длины отрезков соответствовали величинам нормированных весов. Фактически эта процедура приводит в соответствие длины отрезков и заполненности граничащих с ними регионов. Выполним эту процедуру для всех горизонтальных рядов решётки. Аналогичным образом выполняется вычисление и вертикальной составляющей решетки, в результате чего будет построена новая трансформированная решетка, в которой размеры полученных регионов будут приведены в соответствие с их заполненностью – бо́льшие ее регионы соответствуют подобластям с высокой концентрацией вершин, которые желательно распределить в другие регионы.

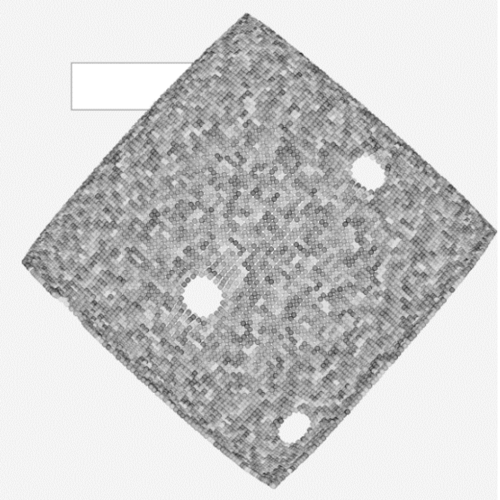
Далее выполняется смещение вершин в соответствии с полученной решёткой, для чего для каждой вершины вычисляется относительная позиция в её регионе исходной решётки и линейной интерполяцией определяется новая позиция вершины в соответствующем регионе трансформированной решетки. В результате для каждой вершины получаем вектор смещения, который берет свое начало в позиции вершины исходной решетки и заканчивается позицией вершины в трансформированной решетке. Будем смещать каждую вершины строго вдоль вектора её смещения.

Если перемещать вершины сразу в конечное положение векторов смещений, то возникают проблемы, которые наблюдаются в классических схемах силовой укладки, связанные со сходимостью алгоритма [6]. Для предотвращения данной ситуации предлагается ввести параметр - коэффициент смещения, который управляет величиной смещения вершин вдоль векторов смещений. Коэффициент смещения принимает значения от 0 до1. Значение 0 означает, что вершины не перемещаются. Значению 1 соответствует перемещение вершин в конечные точки векторов смещений. Значение между 0 и 1 определяет перемещение положения вершин в соответствующие позиции вдоль вектора смещений. Фактически коэффициент смещения влияет на скорость сходимости, предлагается выбирать его как параметр алгоритма.

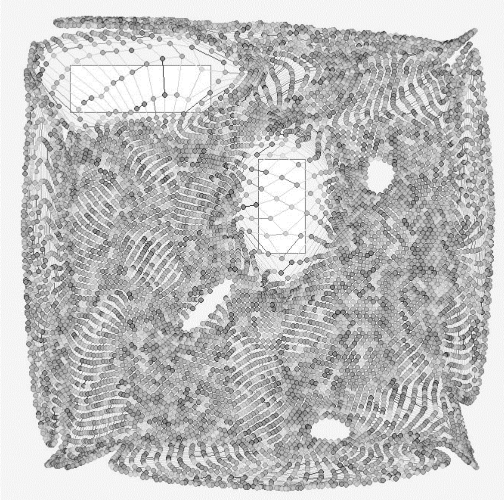
Данный процесс реализован в итерационной схеме – трансформация происходит не единожды, а многократно до тех пор, пока не будут выполнены ограничения (1), (2). Предложенную итерационную схему можно рассматривать в качестве генератора размещений, выбор лучшего решения осуществляется на основании функции цели (5). Такой подход, варьируя параметр $\lambda \in [0,1]$, позволяет фактически построить решения из области Парето, удовлетворяющих, с одной стороны, критериям по взаимному расположению вершин в зависимости от их весов и связей между ними, с другой стороны – ограничениям на вместимость подобластей в пространстве размещения.

Описанная концепция решения задачи была реализована программно с использованием платформы Microsoft .NET (C#) в виде автоматизированной системы, позволяющей пользователю контролировать процесс генерации решения в части последовательности выполнения этапов, прерывания процесса расчета и досрочного перехода к следующему или возврату к выполнению предыдущего этапа, а также повторного запуска любого из них.

В качестве тестовой базы использованы регулярные графы размером от 10000 до 40000 вершин. На рисунке 4 приведены результаты работы программной системы при построении укладки сеточного графа (9947 вершин, 39336 ребер), при этом в пространстве размещения задана область запрета с нулевой вместимостью вершин (изображена в виде белого прямоугольника). На рисунке слева показан результат размещения графа без учета ограничений на вместимость подобластей. На рисунке справа - результат переразмещения вершин графа, в котором произведен учет неравномерной вместимости подобластей.



Без учета ограничений (1), (2)



С учетом ограничений (1), (2)

Рис. 4. Результаты размещения графа

4. Заключение

В рамках данной работы была исследована проблема поиска решений для класса задач размещения взвешенных графовых структур на областях с неравномерной вместимостью. Была предложена эвристическая двухэтапная итерационная схема решения задачи, основанная на классических алгоритмах силовой укладки графа и технологии переразмещения вершин. Экспериментально подтверждено, что данный подход позволяет эффективно генерировать размещения большеразмерных графов и может быть рекомендован в качестве метода решения задач глобального размещения компонент интегральных схем.

Литература

1. Старостин Н.В., Филимонов А.В., Балашов В.В. Решение задачи размещения элементов специализированных больших интегральных схем на основе базовых матричных кристаллов. Системы управления и информационные технологии. 2009. № 2-1 (36). С. 189-194.
2. Батищев Д.И., Старостин Н.В., Филимонов А.В. Многоуровневый алгоритм решения задачи компоновки интегральных схем. Системы управления и информационные технологии. 2007. Т. 29. № 3. С. 48-52.
3. Старостин Н.В., Панкратова М.А. Архитектурно-зависимая декомпозиция в методиках суперкомпьютерного моделирования. Механика, управление и информатика. 2014. Т. 6. № 6 (51). С. 146-153.

4. Старостин Н.В., Небайкин С.В., Волков В.О., Басалин П.Д. Быстрые реализации алгоритма силовой укладки графа. В сборнике: Информационные системы и технологии ИСТ-2017. Материалы докладов XXIII Международной научно-технической конференции, посвященной 100-летию НГТУ - Нижегородского политехнического института. 2017. С. 758-761.
5. Старостин Н.В., Небайкин С.В. Аспекты использования алгоритма силовой укладки графа в промышленной технологии укладки кабелей в судостроении. Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева. 2019. № 2 (125). С. 70-78.
6. Старостин Н.В., Небайкин С.В., Волков В.О. Концепция многоуровневости как инструмент ускорения классического алгоритма силовой укладки графа. Информационные технологии моделирования и управления. 2018. Т. 109. № 1. С. 40-46.
7. Starostin N.V., Bykova M.A., Nebaikin S.V. Multilevel procedure for decomposition and mapping graphs. В сборнике: Journal of Physics: Conference Series. Krasnoyarsk Science and Technology City Hall of the Russian Union of Scientific and Engineering Associations. Krasnoyarsk, Russian Federation, 2020. С. 32017.
8. Батищев Д.И., Старостин Н.В., Филимонов А.В. Многоуровневый генетический алгоритм решения задачи декомпозиции гиперграфа. Известия СПбГЭТУ ЛЭТИ. 2007. № 1. С. 3-13.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАФИЧЕСКОГО УСКОРИТЕЛЯ ARM ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ВЫВОДА НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В INTEL OPENVINO TOOLKIT[1*]

А.Ю. Нестеров, И.Б. Мееров

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Область глубоких сверточных нейронных сетей активно развивается, что приводит к потребности быстрой работы вывода (прямой проход алгоритма обратного распространения ошибки) нейронных сетей на различных устройствах. Одна из востребованных областей применения нейронных сетей - мобильные технологии. Мобильные устройства часто являются маломощными, что требует рационального использования памяти и процессорных ресурсов. Для того, чтобы вывод нейронных сетей работал в режиме реального времени, чаще всего используют графический ускоритель в ARM-архитектурах. В данной работе будут описаны идеи работы по интеграции вывода нейронных сетей в Intel OpenVINO Toolkit на графических ускорителях ARM.

Ключевые слова: advanced risk machine, opencl, графический ускоритель, гетерогенное программирование.

1. Введение

Область искусственного интеллекта (ИИ) с каждым днем становится все более востребованной. Методы ИИ используются на практике при решении широкого спектра задач от проверки качества производства на заводах до анализа данных в программном обеспечении медицинского оборудования. Программная реализация методов ИИ, ориентированная на современную вычислительную технику, требует не только глубокого понимания теоретических основ данной предметной области, но и разработки соответствующих подходов, технологий, и инструментария.

В рамках данной работы этот вопрос изучается в контексте использования мобильных устройств (планшетов, смартфонов и другой аналогичной техники). В сравнении с мощным серверным оборудованием мобильные устройства обладают ограниченными ресурсами, однако спектр задач, в которых они могут и должны с успехом применяться, очень широк. К числу востребованных приложений методов и программных средств ИИ на мобильных устройствах относится, например, телемедицина. Потребители подобных приложений могут с использованием методов ИИ провести первичную диагностику и, при необходимости, вовремя связаться с врачом для дальнейшего обследования.

Вопросы экономии ресурсов времени и памяти при работе методов ИИ на мобильных устройствах являются достаточно важными и нередко определяют саму возможность использования таких программно-аппаратных конфигураций для решения задач. Одним из программных пакетов, решающих обширное число задач ИИ, является открытая разработка компании Intel - OpenVINO Toolkit [1]. Эта разработка рассматривается нами в качестве базовой. Главным ее недостатком в контексте целей работы является отсутствие поддержки графических процессоров, позволяющих значительно ускорить вычисления в современных смартфонах. Наше исследование направлено на то, чтобы ускорить обработку задач ИИ, используя графический ускоритель смартфона. Для этого требуется разработать специальный программный модуль.

[1*] Исследование поддержано НЦМУ «Центр фотоники» (соглашение № 075-15-2020-927).

2. Краткий обзор Intel OpenVINO Toolkit

2.1 Этапы работы с выводом в Intel OpenVINO Toolkit

Работа с выводом в Intel OpenVINO Toolkit разбивается на несколько основных стадий:

1. **Конвертация претренированной модели** нейронной сети в промежуточное представление (Intermediate Representation) с помощью кроссплатформенного инструмента Model Optimizer [2]. Model Optimizer не только преобразует модель в промежуточное представление, но и выполняет ряд оптимизаций. К примеру, ряд операций могут объединяться или переопределяться для упрощения графа сети.
2. **Вывод промежуточного представления** в C++ библиотеке Inference Engine [3]. Inference Engine – это набор библиотек C++, предоставляющих общий API для создания решений вывода для любой представленной платформеы. Для ARM=архитектур сейчас поддерживается только ARM CPU [4].
3. **Оптимизация производительности вывода** нейронной сети с помощью POT (Post-training Optimization Tool). POT предназначен для оптимизации вывода моделей глубокого обучения путем применения специальных методов без переобучения или тонкой настройки модели.

2.2 Способы интеграции вывода для собственной архитектуры вычислительных систем в библиотеке Inference Engine

Для интеграции нужного нам вывода на требуемом устройстве требуется знать, какие есть способы интеграции в библиотеке Inference Engine.

Существуют следующие способы интеграции:

1. *Механизм расширения вывода*. Данный подход уместен тогда, когда часть операций сверточной нейронной сети уже реализована на стороне библиотеки Inference Engine, а остальные части интегрируются с помощью данного механизма.
2. *Создание нового плагинного модуля для собственной вычислительной архитектуры*. Данный подход является оптимальным для случая, когда нет реализации вывода в библиотеке Inference Engine.

Для нашей работы подходит второй вариант интеграции вывода. В связи с отсутствием поддержки графического ускорителя ARM данный подход более подробно мы и рассмотрим далее. Назовем будущий плагин ARM GPU.

Архитектура плагинов библиотеки Inference Engine позволяет разрабатывать и подключать независимые решения, предназначенные для различных устройств. Плагин представлен в виде динамической библиотеки, использующей функцию **CreatePluginEngine**, которая позволяет создать новый экземпляр плагина.

Библиотека Inference Engine состоит из нескольких основных классов, которые надо реализовать, чтобы получить полнофункциональный вывод:

1. Класс Plugin:
   a. Предоставляет информацию об устройстве, которое плагин поддерживает.
   b. Класс создает исполняемый экземпляр сети, который представляет собой графовую структуру, специфичную для бэкенда нейронной сети для конкретного устройства (бэкенд ARM GPU плагина будет описан позднее).
2. Класс Executable Network:
   a. Представляет собой реализацию исполнения вывода, учитывая специфику устройства.
   b. Может создавать несколько экземпляров Inference Request.
3. Класс Inference Request:
   a. Запускает последовательно конвейер вывода.
   b. В данном классе можно делать замеры производительности вывода.
4. Класс Asynchronous Inference Request :
   a. Является оберткой класса Inference Request и параллельно запускает этапы конвейера вывода.
   b. Можно использовать несколько устройств в связке.

3. Бэкенд графического ускорителя ARM

Существование Intel OpenVINO ARM CPU плагина и возможность потенциальных гетерогенных вычислений центрального процессора ARM и графического ускорителя ARM определило выбор бэкенда ARM GPU плагина для библиотеки Inference Engine – это библиотека ARM Compute Library [5]. Данная библиотека предоставляет оптимизированные примитивы операций для вывода нейронных сетей на векторных инструкциях NEON и SVE (Scalable Vector Extension) для центрального процессора и оптимизированные ядра, написанные на стандарте OpenCL для графического ускорителя ARM. Последний факт определил будущий ARM GPU плагин в Inference Engine как OpenCL-подобный плагин [6].

Заключение

В данной работе были описаны идеи создания ARM GPU плагина в Intel OpenVINO Toolkit библиотеке Inference Engine для вывода нейронных сетей на графических ускорителях ARM-архитектур, а также общие подходы работы с Intel OpenVINO Toolkit.

На данный момент времени происходит создание архитектуры ARM GPU плагина. Далее планируется перейти к реализации плагина в библиотеке Inference Engine с использованием библиотеки ARM Compute Library в качестве бэкенда.

Литература

1. Репозиторий Intel OpenVINO Toolkit. URL: https://github.com/openvinotoolkit/openvino.
2. Документация Model Optimizer. URL: https://docs.openvino.ai/latest/openvino_docs_MO_DG_Deep_Learning_Model_Optimizer_DevGuide.html .
3. Документация Inference Engine: URL: https://docs.openvino.ai/latest/openvino_docs_IE_DG_Deep_Learning_Inference_Engine_DevGuide.html.
4. Github репозиторий Intel OpenVINO ARM CPU плагина. URL: https://github.com/openvinotoolkit/openvino_contrib/tree/master/modules/arm_plugin.
5. Sun D., Liu S., Gaudiot J. L. Enabling embedded inference engine with ARM compute li-brary: A case study //arXiv preprint arXiv:1704.03751. – 2017.
6. Документация о типах плагинов в Inference Engine. URL: https://docs.openvino.ai/latest/openvino_docs_ie_plugin_dg_plugin.html.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОИСХОЖДЕНИЯ ЛЮДЕЙ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ МУТАЦИИ В ИХ ДНК[1*]

А.А. Оболенский, В.О. Девликамов, А.И. Калякулина, А.Ю. Нестеров И.Б. Мееров, М.В. Иванченко

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Ставится задача определения происхождения людей по результатам мутации в их ДНК. Используются классические методы машинного обучения, решающие задачи бинарной классификации. Предлагается способ генерации искусственных данных для повышения точности классификации в условиях недостаточного количества данных для тренировки моделей. Работоспособность подхода демонстрируется с использованием данных проекта «1000 геномов». Показано, что в большинстве случаев удается достигнуть точности классификации, превышающей 90%.

Ключевые слова: Машинное обучение, Анализ графовых данных, Генерация искусственных графов, Генеративно-состязательные сети, Огрубление графов

1. Введение

Исследования последних лет продемонстрировали большой интерес научного сообщества к разработке и применению методов, позволяющих строить классификаторы на основе данных, представленных в виде размеченного набора графов. Это поднимает сразу несколько вопросов, которые необходимо решить: как хранить и эффективно обрабатывать графы, какие специфические для графа особенности можно использовать для классификации данных, какие методы позволяют строить эффективные классификаторы для приложений.

При решении задач классификации методами машинного и глубокого обучения нередко возникает ситуация, когда доступных для использования данных слишком мало, чтобы построить достаточно точный классификатор. При этом расширение имеющегося набора данных чаще всего является проблематичным в силу особенностей предметной области и происходящих в ней процессов. Одним из известных подходов для решения этой проблемы является генерация искусственных данных. Несмотря на то, что эти данные генерируются алгоритмически из имеющихся, и, как может показаться, не несут новой информации, практика показывает, что точность классификации может увеличиться.

При использовании методов генерации искусственных данных, представленных в виде графов, необходимо учитывать, что соответствующие методы быть требовательными к вычислительным ресурсам, поэтому вопросы производительности кода и объемов используемой памяти требуют особого внимания. Один из подходов к решению этих проблем при работе с графами основан на огрублении графов. Процедура огрубления позволяет по возможности сохранить топологическую структуру графа, но при этом уменьшить количество ребер и вершин в графе.

В данной работе эти вопросы исследуются в контексте одной из задач биоинформатики. Данная область подразумевает сбор, хранение, поиск, обработку и моделирование данных для анализа, визуализации или прогнозирования посредством разработки алгоритмов и программного обеспечения [1]. Мы рассматриваем задачу о диагностике принадлежности человека к определенной популяции по данным, полученным из проекта “1000 геномов” [2]. Несмотря на то, что существуют точные методы решения этой задачи, изучение вопроса о возможности применения методов машинного обучения может представлять как академический интерес (Каковы возможности применения данного аппарата в условиях недостаточного количества дан-

[1*] Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № 075-15-2019-871.

ных для обучения?), так и практический интерес (Можно ли связать результаты работы классификатора с генетической информацией, представленной в виде графов?). В данной работе мы ограничиваемся изучением первого вопроса.

2. Постановка задачи

Исходные данные представлены в виде таблицы, в которой строки соответствуют позициям ДНК, столбцы – людям. В ячейке содержится 1, если присутствуют мутации в данной позиции в геноме, и 0, если отсутствуют мутации. По данной таблице для 2503 людей, проживающих в разных местностях на разных континентах и принадлежащих разным популяциям, построены графы, вершины которых соответствуют митохондриальным или ядерным генам, а ребра соединяют вершины (гены), для которых существует хотя бы одна мутация в митохондриальном гене и хотя бы одна мутация в ядерном гене. Каждому графу приписана метка – принадлежность человека к определенной популяции. Ставится задача разработки классификатора, который получает на вход граф и возвращает признак принадлежности соответствующему классу (популяции). Для упрощения в настоящий момент рассматривается задача бинарной классификации. Учитывая, что данные людей, проживающих на разных континентах и принадлежащих разным "суперпопуляциям", существенно отличаются, мы решаем более сложные задачи классификации внутри каждой суперпопуляции, по очереди перебирая все допустимые пары популяций.

3. Методы решения задачи

3.1 Представление исходных данных и выбор метрик

Будем представлять графы матрицами смежности. Для того чтобы построить и обучить классификаторы, представим исходные данные таблицей с числовыми значениями и метками для каждого графа. Для этого необходимо выбрать графовые метрики, которые будут рассматриваться в качестве признаков. После ряда предварительных экспериментов мы выбрали следующие метрики: степень вершины (рассматриваются максимальная, средняя, медианная степени, разница между максимальной и минимальной степенью), является ли граф мультиграфом, является ли граф псевдографом, количество клик в графе, средняя длина кратчайшего пути [3], s-метрика [4], индекс Винера [5], максимальная вершина в максимальном паросочетании, является ли граф Эйлеровым.

3.2 Построение классификаторов

После предобработки исходных данных и занесения вычисленных метрик в таблицу необходимо выбрать методы и построить классификаторы. Мы использовали дерево решений (Decision Tree) [6], метод k-ближайших соседей (Knn) [7], случайный лес (Random Forest) [8], градиентный метод (Gradient Boosting) [9], рандомизированные деревья (Extra Trees) [10], адаптивный бустинг (Adaboost) [11].

3.3 Критерии оценивания модели

В связи с хорошей балансировкой классов для оценивания модели была выбрана метрика точность (accuracy). Для обеспечения воспроизводимости результатов использовалась следующая схема оценки точности решения задачи: для перебора гиперпараметров классификаторов использовался метод поиска по сетке (GridSearch). Для проведения поиска использовался алгоритм кросс-валидации (случайные разбиения). Точность классификатора определялась как среднее значение точности после 4 запусков программы. Каждый запуск программы – 20 запусков поиска по сетке и взятие медианы среди значений точности.

3.4 Идеи для улучшения. Генерация искусственных данных с использованием генеративно-состязательной сети

После построения классификаторов и выбора критерия оценивания модели, были получены первые результаты, которые показывали 60-80% точности бинарной классификации в зависимости от пары популяций. Рассматривались следующие идеи для улучшения: исследовать влияние посчитанных метрик на результат классификации, после чего оставить только наиболее метрики, произвести настройку гиперпараметров методов. В результате точность несколько выросла, но все еще оставались ресурсы для улучшения результатов. Мы исследовали, в каких случаях классификаторы ошибаются, и выяснили, что во многих ситуациях это было связано с малым объемом данных в выборке. В связи с этим было принято решение использовать известный подход – генерацию исходных данных, в данном случае – графов, с использованием генеративных состязательных сетей. В качестве такой сети мы использовали реализацию NetGAN [12], изначально разработанную авторами для генерации топологически похожих графов.

Сеть NetGAN принимает для тренировки граф, изучает его структуру при помощи случайных блужданий второго порядка и позволяет создавать графы с тем же числом вершин, топологически похожие на исходный граф. Утверждается [13], что данный метод сохраняет важные топологические свойства без какой-либо их явной спецификации для каждого конкретного случая. Исходный код этой библиотеки открыт и доступен на github [14]. Сеть состоит из генератора и дискриминатора, построенных на базе архитектуры LSTM [15].

3.5 Огрубление графов

При работе с графами, построенными на базе данных проекта “1000 геномов”, мы столкнулись с трудностями, связанными с существенными требованиями по памяти и времени вычислений. Одним из широко распространенных способов, который позволяет преодолеть эти трудности, является огрубление графа (graph coarsening) – процедура, в результате которой по графу строится граф меньшего размера, имеющий структуру, похожую на структуру исходного графа. Огрубление может быть многоуровневым: в этом случае исходному графу ставится в соответствие серия графов, каждый из которых является огрубленной версией предыдущего. Далее задача может быть решена на графе с малым числом вершин и ребер, полученное решение спроектировано на граф верхнего уровня с последующим уточнением решения, и так далее до получения решения исходной задачи. В данной работе мы использовали более простую схему: пробовали выполнять огрубление до размеров, приемлемых для доступного нам оборудования, строили классификаторы и использовали результат их работы для диагностики в исходной задаче.

Для этого мы реализовали [16] алгоритм огрубления и использующиеся в нем алгоритмы генерации паросочетаний: метод случайных паросочетаний (random matching), паросочетание тяжелых ребер (hard matching), алгоритм Эдмондса нахождения наибольшего паросочетания, алгоритм PGA (Path Growing Algorithm), алгоритм GPA (Global Paths Algorithm) и алгоритм LAM.

4. Эксперименты

Суть экспериментов заключалась в следующем: для каждого графа из набора для каждой популяции производилась генерация топологически похожих графов. Для этого производилась тренировка генеративно-состязательной сети NetGAN на конкретном графе, а затем с помощью натренированной модели для каждого графа из выборки генерировались пяти похожих графов, им приписывались метки, соответствующие исходным графам. После этого проводились запуски классификатора, основанного на алгоритме decision tree (выяснилось, что он работает лучше, чем другие алгоритмы), на оригинальных и искусственных данных. Полученные данные анализировались и сравнивалась точность бинарной классификации между двумя парами популяций.

Выборка графов делилась на обучающую и валидационную. Для экспериментов выбирались соотношения 80%/20% и 90%/10% для обучающей и валидационной выборки, соответственно. На графах, которые попали в обучающую выборку, обучался алгоритм decision tree, а на валидационной выборке проводился сам тест, результаты которого подвергались дальнейшему анализу.

5. Результаты

В начале (**эксперимент 1**) приведем результаты бинарной классификации для супер-популяции Африка, состоящей из следующих популяций: YRI, MSL, LWK, GWD, ESN, ASW и ACB. Использовались графы, построенные по данным проекта “1000 геномов” без огрубления и генерации искусственных данных. Приведены лучшие достигнутые результаты для трех методов машинного обучения. Более темные клетки соответствуют лучшим результатам. В левом столбце указана максимальная проекция – лучший достигнутый результат.

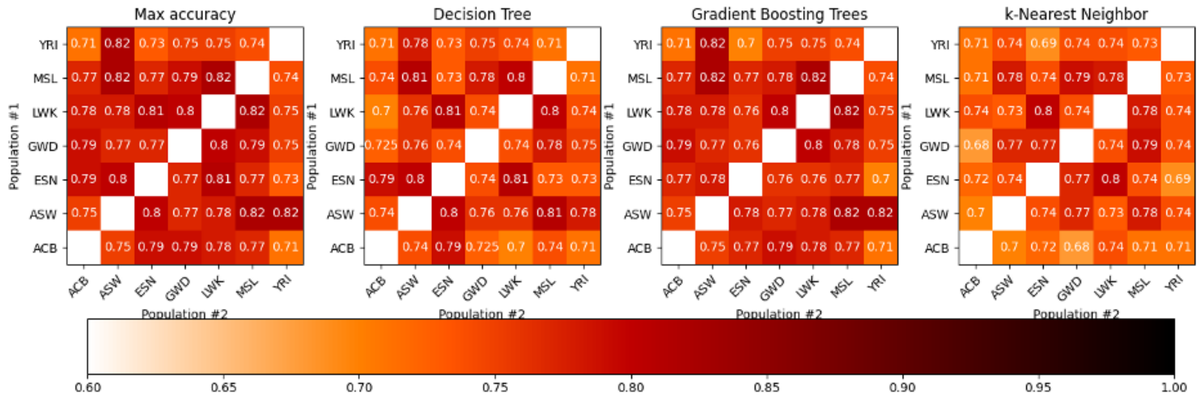


Рис. 1. Точность бинарной классификации супер-популяции Африка. Разбиение на обучающую и валидационную выборку 90%-10%

Из результатов (рис. 1) можно сделать следующие выводы:

1. Точность для континента Африка варьируется в пределах 71% - 82%.
2. В большинстве случаев градиентный метод показывает лучшую точность.
3. Для Африки самая низкая точность наблюдается у пары YRI – популяция на юго-западе Нигерии Западной Африки и ACB – популяция в Вест-Индии.
4. Самая высокая точность наблюдается у представителей территориально удаленных друг от друга популяций:
   - ASW – популяция на юго-западе США и MSL – популяция в Западной Африке.
   - ASW – популяция на юго-западе США и YRI – популяция на юго-западе Нигерии в Западной Африке.
   - YRI – популяция на юго-западе Нигерии в Западной Африке и MSL – популяция в Западной Африке.
5. По цветовой карте можно сделать вывод о том, что популяция ASW определяется классификатором лучше остальных, а популяция YRI определяется хуже остальных.
6. У представителей располагающихся территориально близко друг к другу популяций наблюдается сравнительно небольшая точность классификации – 73%: YRI и ESN – популяции из одной страны – Нигерия.

Далее мы провели эксперименты с использованием графов, которые были сгенерированы из оригинальных графов. При этом мы действовали следующим образом. **Во втором эксперименте** мы сгенерировали по одному графу из каждого исходного и приписали к нему ту же метку. Далее мы разделили полученные «искусственные» данные на тренировочную и валидационную выборку, после чего работали обычным образом (обучение на тренировочной выборке и проверка на валидационной выборке). Отметим, что проверка на искусственных данных никак не искажает результат, поскольку по каждому исходному графу можно генерировать искусственный, и подавать его на вход классификатора. **В третьем эксперименте** мы действовали аналогично, только для каждого из исходных графов генерировалось 5 искусственных. **В четвертом эксперименте** мы огрубили исходные графы, чтобы ускорить вычисления, после чего провели обучение и тестирование классификаторов. **В пятом и шестом экспериментах** мы сгенерировали искусственные графы из огрубленных, после чего действовали по описанному выше сценарию.

Выяснилось, что при использовании генеративно-состязательной сети на искусственных графах удалось при том же объеме исходных данных (*второй эксперимент*) улучшить качество в абсолютных значениях на 6,8% (на 80%/20%), 7,8% на (90%/10%) относительно оригинальных данных, а при увеличении выборки в 5 раз (*третий эксперимент*) – на 20,7% (80%/20%), 18,9% (90%/10%).

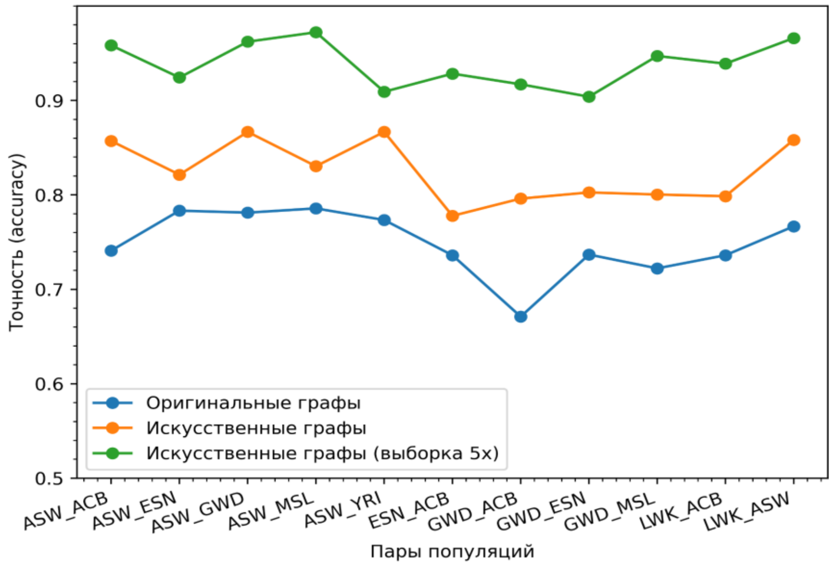


Рис. 2. Сравнение точности классификации с помощью алгоритма decision tree с использованием оригинальных (эксперимент 1), а также искусственных графов на выборке, по размеру совпадающей с выборкой оригинальных графов (эксперимент 2), и на выборке в 5 раз больше исходной (эксперимент 3).

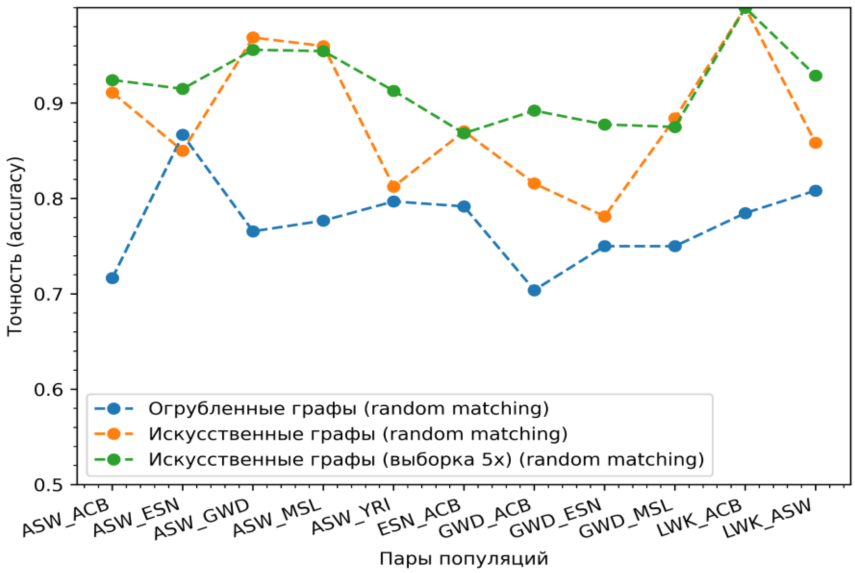


Рис. 3. Сравнение точности классификации с помощью алгоритма decision tree при использовании огрубленных до 600 вершин графов (эксперимент 4) и искусственных графов, сгенерированных из огрубленных при помощи алгоритма, основанного на Random Matching (эксперимент 5, эксперимент 6).

Далее оригинальные графы подвергались огрублению. Исходно в графах было ~1200 вершин, огрубление производилось до момента, пока вершин становилось не более 600. Эксперименты показали, что при использовании огрубленных графов и уменьшении размера графов более, чем в два раза, в данной задаче с самым удачным (лучше всего по данным экспериментов показал себя алгоритм, использующий случайное паросочетание) огрублением точность уменьшается всего на 2% (93,8% против 91,8%) относительно оригинальных графов (рис. 3).

При этом огрубление графов позволило добиться прироста в производительности и помогло сократить время работы на 24,5%. При этом удалось сократить затраты памяти на представление графов, но это не привело к значимой экономии памяти, так как основное потребление памяти в NetGAN связано с сэмплированием случайных путей в графе.

В целом использование нейросетевой генерации графов в совокупности с огрублением графов помогло добиться точности бинарной классификации в ~90% (рис. 3) и выше без использования дополнительных данных и изменений в классификаторе.

Литература

1. Bioinformatics. [Электронный ресурс]. URL: https://bioinformatics.ucsf.edu/degree-program/research-areas.
2. 1000 Genomes Project. [Электронный ресурс]. URL: https://internationalgenome.org.
3. Average shortest path length. [Электронный ресурс]. URL: https://networkx.org/documentation/networkx-1.10/reference/generated/networkx.algorithms.shortest_paths.generic.average_shortest_path_length.html.
4. S-metric. [Электронный ресурс]. URL: https://networkx.github.io/documentation/stable/reference/algorithms/generated/networkx.algorithms.smetric.s_metric.html.
5. Индекс Винера. [Электронный ресурс]. URL: https://ru.wikipedia.org/wiki/Индекс_Винера.
6. Breiman L., Friedman J., Olshen R., and Stone C., “Classification and Regression Trees”, Wadsworth, Belmont, CA, 1984.
7. Goldberger J., Roweis S., Hinton G., Salakhutdinov R., “Neighbourhood Components Analy-sis”, Advances in Neural Information Processing Systems, Vol. 17, May 2005, pp. 513-520.
8. Breiman, “Random Forests”, Machine Learning, 45(1), 5-32, 2001.
9. Friedman J., Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine, The Annals of Statistics, Vol. 29, No. 5, 2001.
10. Geurts P., Ernst D., and Wehenkel L., “Extremely randomized trees”, Machine Learning, 63(1), 3-42, 2006.
11. Freund Y., Schapire R., “A Decision-Theoretic Generalization of on-Line Learning and an Application to Boosting”, 1995.
12. Bojchevski A. et al. Netgan: Generating graphs via random walks //International Conference on Machine Learning. – PMLR, 2018. – С. 610-619.
13. Grover A., Leskovec J. node2vec: Scalable feature learning for networks //Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining. – 2016. – С. 855-864.
14. Implementation of the paper "NetGAN: Generating Graphs via Random Walks". Дата обновления: 7 декабря 2020 [Электронный ресурс]. URL: https://github.com/danielzuegner/netgan.
15. Olah C.: Understanding LSTM Networks. Дата обновления: 27 августа 2015 [Электрон-ный ресурс]. URL: http://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs/.
16. Open Source Graph Coarsening Library. Дата обновления: 24 июня 2020 [Электронный ресурс]. URL: https://github.com/graphprocessing/graph_coarsening.

РАЗРАБОТКА ГЕНЕРАТОРА МНОГОПУЧКОВЫХ КОНФИГУРАЦИЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ[1*]

Е.А. Панова[1], А.А. Гоносков[1,3], И.Б. Мееров[1], Е.С. Ефименко[2]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского*
[2]*Институт прикладной физики РАН*
[3]*Университет Гетеборга*

В ряде задач, связанных с взаимодействием сверхсильных лазерных полей с веществом, требуется возможность проводить PIC-моделирование для конфигураций из нескольких электромагнитных пучков, распространяющихся в произвольном направлении и фокусирующихся в заданной пользователем области. В данной работе представлена реализация генератора нескольких независимых пучков на границе расчетной области с использованием вспомогательных вычислений на дополнительной сетке, сделанная в рамках программного комплекса PICADOR.

Ключевые слова: фокусировка лазерного импульса, гауссовы пучки, многопучковые конфигурации, PIC-моделирование, высокопроизводительные вычисления.

1. Введение

При исследовании взаимодействия сверхсильных лазерных полей с веществом в связи со сложностью решаемых задач большую роль играет численное моделирование. Для описания задачи о взаимодействии лазерного излучения с плазмой, как правило, используется метод частиц в ячейках (Particle-In-Cell, PIC) [1, 2]. На текущий момент существуют различные программные реализации данного метода [3-7], включающие в себя учет различных физических эффектов. В последнее время в связи со значительным прогрессом в развитии лазерных систем всё большее внимание привлекает область моделирования квантово-электродинамических (КЭД) каскадов [8]. Данное направление подразумевает учет квантовых процессов излучения фотонов и генерации электрон-позитронных пар в сверхсильных полях петаваттного уровня мощности. В рамках проводимых исследований нашей группой были разработаны программные комплексы PICADOR [7] и Hi-Chi [9, 10], с помощью которых была рассмотрена задача о взаимодействии идеальной дипольной волны с плазменной мишенью в условиях развития КЭД каскада [11, 12].

Получение сверхмощных лазерных полей на перспективных лазерных системах подразумевает использование многопучковых лазерных систем. Так, в проекте XCELS [13] для достижения рекордной мощности 200 ПВт предлагается использовать 12 лазерных пучков, сильно сфокусированных в одну точку. В связи с этим задача моделирования развития КЭД каскадов в полях многопучковой конфигурации представляется критически важной для развития данного проекта. Для задания многопучковых конфигураций в PICADOR ранее использовался метод наложения амплитудной маски на сферическую волну. Такая маска позволяет задавать один или несколько лазерных пучков с общим сферическим волновым фронтом, сходящимся в центр вычислительной области. Такой метод, однако, обладает рядом ограничений, связанных с невозможностью контролировать положение фокуса каждого отдельного пучка. Это, в частности, приводит к тому, что фокусы индивидуальных пучков не совпадают, что проявляется особенно сильно при малом количестве пучков и ведет к сильному завышению порога пробоя. Для решения этой проблемы в рамках программного комплекса PICADOR был разработан модуль, позволяющий независимо задавать фокусируемые пучки, распространяющиеся под произвольными углами и с произвольным расположением фокуса каждого пучка. Корректность модуля была проверена на ряде конфигураций; на текущий момент ведется разработка параллельной версии с использованием технологии MPI. В будущем планируется получение практически значи-

[1*] Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта №20-21-00095.

мых результатов с применением данного модуля, связанных с образованием электрон-позитронной плазмы и сопутствующих динамических процессов в условиях сверхсильного светового излучения.

2. Модель генератора поля

В работе рассматриваются сходящиеся в некоторой заданной точке пространства пучки с поперечным гауссовым профилем. Такой пучок может быть создан с помощью задания на некоторой плоскости $x = x_0 = const$ электрических и магнитных токов так, чтобы в области $x > x_0$ с течением времени формировалось требуемое электромагнитное поле. Данный метод генерации полей основан на теореме эквивалентности [14]: для генерации внутри некоторой замкнутой области электрического поля $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}(x, y, z, t)$ и магнитного поля $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}(x, y, z, t)$, необходимо задать на границе данной области электрические токи $\boldsymbol{j_e} = \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{B}$ и магнитные токи $\boldsymbol{j_b} = -\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{E}$ ($\boldsymbol{n}$ – нормаль к поверхности генератора). В дальнейшем будем называть данную замкнутую поверхность границей генератора поля. Данный подход к генерации поля может быть без особых сложностей реализован в рамках метода FDTD [15], однако требуется аккуратно учесть сдвиги на полшага по времени и пространству, связанные с использованием метода leap-frog в схеме FDTD.

Для задания гауссова пучка мы определяем на границе генератора $x = x_0 = R\cos\alpha$ поле следующей формы:

$$u(y, z, t) = u_{ts}\left(\sqrt{y^2 + z^2}\right) \cdot u_l\big(t - t_d(y, z)\big) \cdot \sin\Big(\omega\big(t - t_d(y, z)\big)\Big),$$

где $u_l(t)$ – продольная форма импульса как функция времени, $u_{ts}(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{R^2 \sin^2\alpha}\right)$ – поперечная гауссова форма импульса, R – радиус сферического волнового фронта в дальней зоне, α – угол фокусировки, ω – частота излучения, $t_d(y, z) = \left(R_{td} - \sqrt{x_0^2 + y^2 + z^2}\right)/c$ – функция временной задержки, имитирующая фазовую коррекцию после прохождения излучения через линзу, c – скорость света; $R_{td} = R\sqrt{1 + \left(\frac{3}{\sqrt{2}}\right)^2 \tan^2\alpha}$ определяется согласно правилу трех сигм для гауссова распределения. Функции электрического и магнитного поля на границе задаются с помощью маски $u(y, z, t)$ и вектора поляризации $\boldsymbol{p}$ ($\boldsymbol{r}$ – нормированный радиус-вектор):

$$\boldsymbol{E}(x, y, z, t) = u(y, z, t) \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} \times \boldsymbol{r})$$

$$\boldsymbol{B}(x, y, z, t) = u(y, z, t) \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p})$$

Для гауссова пучка фокусное расстояние l_f (λ – длина волны) можно определить по формуле:

$$l_f = \frac{R}{1 + \frac{\lambda^2}{\pi^2 R^2 \tan^4\alpha}}$$

Описанное выше задание пучков на границе генератора возможно только в случае, если импульс распространяется вдоль одной из осей, например, оси x. В этом случае в численном моделировании для генерации сфокусированного излучения, необходимо задать токи только на соответствующей плоской границе $x = x_0 = const$ в сечении перпендикулярном направлению распространения. Однако ситуация усложняется при задании импульса, распространяющегося под произвольным углом, т.к. требуется знание аналитических полей (токов) не в перпендикулярной плоскости, а в произвольном сечении, образованном пересечением границы и конуса сфокусированного пучка. В случае резкой фокусировки лазерного излучения не существует удобного аналитического решения, описывающего структуру полей в произвольной области пространства, кроме того, в случае произвольного угла может потребоваться задание полей на нескольких плоскостях x, y и/или z. В разделе 3 описывается метод, который предоставляет возможность генерировать гауссовы пучки, распространяющиеся под произвольным углом с произвольной ориентацией вектора поляризации и фокусом в заданной точке.

3. Описание предлагаемого метода

Идея метода заключается в том, чтобы выполнить предварительное моделирование распространяющегося вдоль оси x импульса с фиксированной поляризацией $\boldsymbol{p} = (0, 1, 0)$ на отдельной вычислительной сетке с помощью метода FDTD, а затем полученное электромагнитное поле взять за основу при генерации одного или нескольких пучков на основной сетке. Генерация импульса на вспомогательной сетке выполняется с помощью процедуры, представленной в разделе 2; отображение полученного электрического поля $\widetilde{\boldsymbol{E}}$ на основную сетку выполняется следующим образом (для магнитного поля $\boldsymbol{B}$ – аналогично):

$$\boldsymbol{E}(x, y, z) = S^T \widetilde{\boldsymbol{E}}(S(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r_0})),$$

где S – матрица поворота, задающая направление распространения пучка и поляризацию на основной сетке, а $\boldsymbol{r_0}$ – сдвиг, обеспечивающий фокусировку импульса в определенной точке.

При определении параметров генерируемого пучка и представленного выше отображения нужно обеспечить расположение границы генерации пучка во вспомогательной области за пределами границ генерации основной области (рис. 1). Так начальное положение пучка относительно геометрического центра R определяется следующим выражением:

$$(1 - \cos\alpha)R - l_f(R) + d_{max} = 0,$$

где d_{max} – максимальное расстояние от задаваемой точки фокуса до границы генерации основной области.

Размеры вспомогательной сетки тесно связаны с характеристиками генерируемого пучка. Так, например, размеры вдоль поперечных координат y и z должны быть минимум $2R_{td}$. Чтобы оптимизировать количество вычислений, требуется определить минимальный размер вспомогательной сетки вдоль оси распространения x. Для этого выполняется поиск точек пересечений конической поверхности, ограничивающей импульс, и параллелепипеда, заданного границей генерации основной области (рис. 1). Коническая поверхность (на рис. 1 обозначена зеленой линией) сдвинута относительно фокуса на некоторое расстояние с учетом ненулевого диаметра фокального пятна для того, чтобы была возможность задавать положение фокуса в близкой к границе генератора зоне.

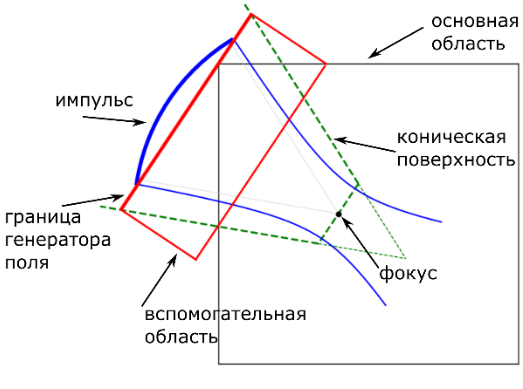


Рис. 1. Иллюстрация метода, описанного в разделе 3

4. Программная реализация

Представленный в разделе 3 метод реализован в виде отдельного модуля в рамках программного комплекса PICADOR [7]. Пользовательский интерфейс позволяет создавать один или несколько пучков с различным физическими параметрами, направлением распространения и точкой фокуса. При этом в случае, когда в расчете два или более импульсов имеют схожие физические характеристики и отличаются, например, лишь направлением распространения или точкой фокуса (что часто встречается на практике), предусмотрена возможность повторного использования полученного на вспомогательной сетке поля в целях экономии памяти и вычислительных затрат.

На рис. 2 представлен расчет для конфигурации из двух одинаковых импульсов с углом фокусировки $\alpha = 0.4$ рад, сходящихся в одной точке с координатами $x = -2\lambda$, $y = 0$, $z = -2\lambda$. Один из импульсов распространяется вдоль оси x и генерируется только левой границей; другой импульс распространяется под углом $-3\pi/4$ по отношению к оси z и генерируется верхней и правой границами. Направления поляризации двух импульсов составляют между собой угол $\pi/2$. Разрешение сетки 8 точек на длину волны, отношение пространственного и временного шага $0.4/c$.

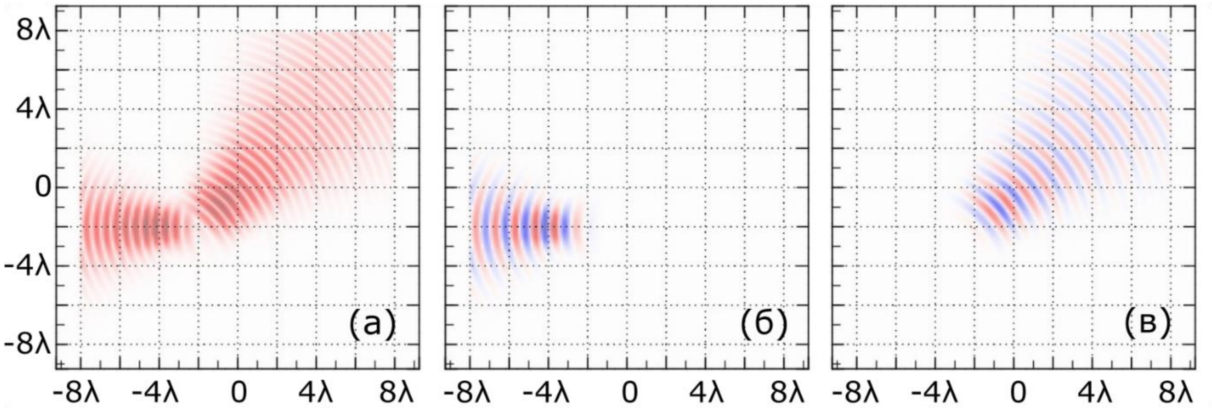


Рис. 2. Пример работы генератора импульсов: электромагнитное поле в сечении $y = 0$ за 32 итерации по времени до момента фокусировки. (а) Энергия электромагнитного поля. (б) Поле E_y. (в) Поле E_z.

При проведении вычислительных экспериментов выяснилось, что размеры вспомогательной области часто сопоставимы с размером основной области, в связи с чем появляется потребность в реализации данного модуля с использованием технологии MPI. Это является дальнейшим направлением работы.

5. Заключение

В работе была представлена разработанная реализация модуля генерации многопучковых конфигураций в рамках программного комплекса PICADOR. Данный модуль основан на использовании вспомогательной вычислительной сетки для вычисления базовой конфигурации из одного пучка, распространяющегося вдоль оси x, и последующего отображения вычисленного поля на границу генерации основной области с учетом задаваемых пользователем направления распространения, поляризации, точки фокуса. В дальнейшем планируется усовершенствование и разработка параллельной версии модуля для расчетов на суперкомпьютере.

Численное моделирование проводилось на суперкомпьютере ННГУ «Лобачевский», а также на вычислительных ресурсах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

Литература

1. Dawson J. M. Particle simulation of plasmas //Reviews of modern physics. – 1983. – Т. 55. – №. 2. – С. 403.
2. Birdsall C. K., Langdon A. B. Plasma Physics via Computer Simulation, The Adam Hilger Series on Plasma Physics, edited by C //Birdsall and A. Langdon. Adam Hilger, Bristol, England. – 1991.
3. Pukhov A. Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VLPL (Virtual Laser Plasma Lab) //Journal of plasma physics. – 1999. – Т. 61. – №. 3. – С. 425-433.
4. Fonseca R. A. et al. OSIRIS: A three-dimensional, fully relativistic particle in cell code for modeling plasma based accelerators //International Conference on Computational Science. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2002. – С. 342-351.
5. Arber T. D. et al. Contemporary particle-in-cell approach to laser-plasma modelling //Plasma Physics and Controlled Fusion. – 2015. – Т. 57. – №. 11. – С. 113001.

6. Vay J. L. et al. Warp-X: A new exascale computing platform for beam–plasma simulations //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2018. – Т. 909. – С. 476-479.
7. Bastrakov S. et al. Particle-in-cell plasma simulation on heterogeneous cluster systems //Journal of Computational Science. – 2012. – Т. 3. – №. 6. – С. 474-479.
8. Volokitin V. et al. Optimized routines for event generators in QED-PIC codes //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2020. – Т. 1640. – №. 1. – С. 012015.
9. Rodimkov Y. et al. ML-Based Analysis of Particle Distributions in High-Intensity Laser Experiments: Role of Binning Strategy //Entropy. – 2021. – Т. 23. – №. 1. – С. 21.
10. Hi-Chi project. URL: https://github.com/hi-chi (2021).
11. Efimenko E. S. et al. Laser-driven plasma pinching in e− e+ cascade //Physical Review E. – 2019. – Т. 99. – №. 3. – С. 031201.
12. Efimenko E. S. et al. Extreme plasma states in laser-governed vacuum breakdown //Scientific reports. – 2018. – Т. 8. – №. 1. – С. 1-11.
13. XCELS: www.xcels.iapras.ru.
14. Марков Г.Т., Чаплин А.Ф. Возбуждение электромагнитных волн. М.–Л., издательство «Энергия», 1967 г. – 376 с.
15. Taflove A., Hagness S. C. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method. – Artech house, 2005.

НОВЫЙ ПОДХОД К ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ ЗАДАЧИ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

В.В. Пекунов

ОАО «Информатика»

Предлагается новый подход к распараллеливанию циклов с зависимыми витками и внутренними зависимостями в теле. Вводится понятие сверхоптимистичных вычислений – опережающих расчетов на базе предикции в специальных каналах с пересчетом/принятием результатов с помощью частично транзакционной памяти. Технология может применяться для распараллеливания метода обратного распространения ошибки (нейронные сети), метода частиц в ячейках и иных алгоритмов, типичных для математического моделирования. Получены хорошие результаты по ускорению расчета до 46% при удвоении числа задействованных ядер. Разработан демонстрационный транслятор, автоматически распараллеливающий C-программы на базе данной технологии.

Ключевые слова: распараллеливание циклов, обучение нейронных сетей, транзакционная память, предикция, сверхоптимистичные вычисления, автоматическое распараллеливание.

1. Введение

Известно, что метод обратного распространения ошибки для сетей прямого распространения [1] представляет собой цикл эпох обучения, на каждой итерации которого выполняется подстройка весов и смещений путем последовательного или параллельного прохода по всем обучающим парам. При параллельном проходе сначала для каждой пары вычисляются локальные поправки ко всем весам и смещениям, в конце эпохи данные поправки усредняются, и только в таком виде применяются к весам и смещениям. В таком случае можно использовать не более P ядер, где P – количество обучающих пар, с максимальным теоретическим ускорением в P раз. Однако можно добиться еще большего ускорения, если дополнительно распараллелить процесс вычисления локальных поправок к весам и смещениям для произвольной обучающей пары. Этот процесс является двухстадийным: на первой стадии вычисляется отклик сети, на второй вычисляются собственно поправки. Таким образом, по отношению к каждой отдельно взятой обучающей паре имеем цикл по эпохам, причем тело цикла содержит две последовательные части, а витки цикла являются зависимыми. Схематично такой цикл можно записать в следующей форме (рис. 1)

```
for (int i = 0; i < Число_эпох; i++) {
  Y = вычисление_отклика(X, веса, смещения);
  веса, смещения = вычисление_поправок(Y);
}
```

Рис. 1. Схема цикла обучения нейронной сети

или в общем виде (рис. 2).

```
for (int i = 0; i < N; i++)
{
  Y = f(X);
  X = g(Y);
}
```

Рис. 2. Общий вид рассматриваемых в работе циклов

Такой цикл характерен не только для задачи обучения нейронной сети, но и для других математических алгоритмов, например, для метода частиц в ячейках [2], где на первой стадии тела цикла вычисляем перемещение частиц и определяемую ими сеточную функцию, а на второй стадии решаем уравнение в частных производных, правая часть которого содержит эту сеточную функцию. Заметим, что интерес также представляют циклы, тела которых могут быть разбиты на более чем две стадии.

Цель данной работы – повысить эффективность счета циклов такого рода для некоторых математических алгоритмов. Для достижения данной цели поставим следующие задачи:

а) предложить схему распараллеливания такого рода циклов;

б) сформулировать возможные стратегии оптимизации распараллеливания;

в) провести апробацию предложенной общей схемы на задаче обучения нейронной сети;

г) предложить возможные схемы автоматического распараллеливания программ, содержащих циклы указанного вида.

2. Теоретическая часть

Напрямую распараллелить цикл указанного выше вида нельзя, но можно применить некоторые вспомогательные приемы, основанные на замене внутренних для цикла зависимостей по данным локальным предсказанием таких данных. Запустим первую и вторую стадию цикла параллельно и организуем между ними специальный предсказывающий канал передачи данных [3], отличающийся от обычного канала наличием предиктора, который при отсутствии в канале данных генерирует прогнозные значения таких данных, основываясь на анализе ряда ранее поступивших в канал значений. В таком случае целесообразно воспользоваться достаточно простыми методами, такими как линейная нецелочисленная предикция, чтобы не вносить больших дополнительных накладных расходов (следует заметить, что в схожих работах достаточно популярна малозатратная целочисленная предикция (по последнему значению [4], с шагом [5], контекстная [6], или гибридная [5]), однако в нашем случае она неприменима). Данный канал будет генерировать прогнозные значения Y* в начале второй стадии и позволит вычислять вторую стадию параллельно с первой (обозначим такую схему расчета как «сверхоптимистичные вычисления» [7]).

Прогнозное значение Y*[k] будет вычисляться как

$$Y^*[k] = a_0 + \sum_{m=1}^{P} a_m Y[k-m],$$

где k – номер итерации цикла, a – вектор коэффициентов предикции, Y[p] – история реально полученных значений Y с p-й предыдущей итерации. Коэффициенты предикции определяются по истории данных с помощью метода наименьших квадратов. Данные коэффициенты периодически пересчитываются (в случае неоднократного стойкого расхождения прогнозных и реально полученных значений). Обычно такой пересчет происходит один раз в 50÷60 итераций. Чем меньше пересчетов, тем более эффективно работает предлагаемая схема.

В заключение тела цикла полученное в первой стадии значение Y будет сверяться с прогнозным значением Y*: если относительная погрешность невелика (менее некоторой заданной величины ε, обычно $\varepsilon = 0{,}01...0{,}1$), то вычисление второй стадии можно принять (Y = Y*, стадии выполнятся параллельно), если же погрешность велика, то результаты второй стадии отменяются и вторая стадия пересчитывается (при этом из канала будет читаться уже не прогнозное, а реальное принятое значение Y) на основе вычисленного в первой стадии значения Y, при этом стадии фактически выполнятся последовательно. Такие согласования и отмены удобно реализовать с применением формализма транзакционной памяти [8] в частичной форме. Введем понятие частично транзакционной памяти – это память, в которой присутствуют как согласуемые, так и обычные переменные и особым образом обрабатываются специальные переменные – предсказывающие каналы: в конце транзакции для каналов осуществляется контроль расхождения прогнозных значений (возможно, использовавшихся в расчете) и значений, реально полученных каналом. Такое расхождение (если оно больше ε), становится основанием для пересогласования транзакции, в которой присутствовал «приемный» конец канала. В таком случае тело цикла приобретет вид (рис. 3).

При таком подходе теоретически возможно получить дополнительное ускорение в два раза. Однако на практике ускорение будет значительно меньше, поскольку часть времени расходуется на работу каналов (на предикцию и на вычисление коэффициентов предикторов) и частично транзакционной памяти, часть итераций не пройдет контроль по погрешности предикции и сведется к последовательному выполнению стадий, и, наконец, трудоемкости выполнения стадий должны быть приблизительно равны.

```
for (int i = 0; i < N; i++) {
  Включаем частично транзакционную память {
    Транзакция_1: {
      Y = f(X); // Например, вычисляем отклик сети
      Предсказывающий канал.put(Y);
    }
    Транзакция_2: {
      Предсказывающий канал.get(Y);
      X = g(Y); // Например, пересчитываем веса и смещения сети
    }
  }
}
```

Рис. 3. Предлагаемая схема организации распараллеливания

Первое обстоятельство является весьма существенным и может быть снято путем привлечения дополнительных вычислительных ресурсов, например, потоковых процессоров графических видеоускорителей. Второе обстоятельство является неизбежным и, наконец, последнее обстоятельство может быть устранено или адекватным выбором точки разбиения цикла на две части или, в какой-то степени, с помощью дополнительного внутреннего распараллеливания этих частей (если оно возможно) с адекватным распределением ядер вычислительной системы между частями с целью балансировки загрузки и, как следствие, минимизации общего времени счета (этот вопрос будет рассмотрен далее).

Была разработана библиотека, реализующая работу предсказывающих каналов на основе линейной предикции, дополнительно была разработана еще одна библиотека, реализующая частично транзакционную память на базе упомянутых выше каналов с минимизацией общего времени счета. Библиотеки и примеры использующих их программ доступны на странице личного сайта автора: http://pekunov.byethost31.com/Progs.htm#FunnelsTransact.

Минимизация общего времени счета производится путем автоматического выбора распределения ядер по K стадиям цикла на базе аналитических моделей времени счета (без предикции $T_k(N_k)$ и с предикцией $\tilde{T}_k(N_k)$) с эмпирическими коэффициентами, которые подбираются методом наименьших квадратов по динамически собираемой статистике времени счета (при различных количествах ядер N_k на k-й стадии, автоматически варьируемых библиотекой) из условия максимального правдоподобия. Данные модели, помимо обычных линейных членов, содержат член c_kN_k, выражающий наличие накладных расходов на организацию параллельной работы. Модели являются трехпараметрическими и имеют общий вид

$$T_k(N_k) = a_k + \frac{b_k}{N_k} + c_k N_k;$$

$$\tilde{T}_k(N_k) = \mu_k + \frac{\gamma_k}{N_k} + \rho_k N_k,$$

где a_k, b_k, c_k, μ_k, γ_k, ρ_k – эмпирические коэффициенты, N_k – число задействованных ядер.

Полная задача целочисленной минимизации времени F (для общего случая, когда тело цикла может быть разделено на произвольное число стадий $K \geq 2$) имеет вид

$$F(N_1,\ldots N_K) = \sum_{p=1}^{K} \beta_p \max\left[T_p(N_p), \tilde{T}_{p+1}(N_{p+1}),\ldots,\tilde{T}_K(N_K)\right];$$

$$F(N_1,\ldots N_K) \to \min;$$

$$N_k \in N;\ k = \overline{1,K};$$

$$\sum_k N_k \leq M,$$

где β_p – эмпирические коэффициенты, причем $\beta_1 = 1$, а коэффициенты с $p > 1$ отражают статистически определенную вероятность пересчета транзакции (при «промахе» предиктора) на p-й стадии, N – множество натуральных чисел, M – общее число ядер. Функция времени учитывает возможность работы транзакционного блока как с пересчетом транзакции, так и без него. Вероятности пересчета транзакции определяются динамически, путем сбора соответствующей статистики (выполняется библиотекой автоматически) в процессе исполнения цикла.

Поиск минимума при $K = 2$ может осуществляться методом полного перебора, при $K > 2$ возможно использование варианта градиентного алгоритма:

1. Пусть N_k – число ядер на k-ю стадию. Изначально $\forall k$: $N_k = 1$.
2. Пока сумма N_k меньше общего числа ядер M:

2.1. Рассчитать $\forall k$: $Q(k) = F(N_1,\ldots,N_k+1,\ldots N_K)$.

2.2. Найти $p = \arg\min Q(k)$.

2.3. Увеличить N_p на единицу.

3. Экспериментальная часть

Разработанные библиотеки были успешно применены к задачам обучения нейронной сети прямого распространения, численного моделирования электростатической линзы и численного моделирования распространения тепла в тонком стержне с применением неявной разностной схемы. В данной работе рассматривается исключительно задача обуче-ния нейронной сети. Эксперименты проводились на стандартной многоядерной (8 физических ядер процессора Xeon, 16 логических ядер) машине проекта Google's Compute Engine. Во всех экспериментах велся контроль дополнительной погрешности, вносимой режимом сверхоптимистичных вычислений, погрешность не превысила 3,5%.

Решение задачи обучения нейронной сети в общих чертах уже было описано выше: на первой стадии вычислялось значение отклика сети, которое через предсказывающий канал передавалось на вторую стадию – стадию коррекции весов и смещений сети. Обучалась пятислойная сеть прямого распространения из 79 (15, 20, 28, 15, 1 в различных слоях) нейронов (с нелинейными передаточными функциями «экспоненциальная сигмоида», за исключением линейного выходного слоя) на выборке из 217 обучающих пар, описывающих зависимость турбулентной вязкости от четырех параметров течения газа в различных точках расчетной области (аэродинамическая задача). Сеть имела 4 входа и один выход. Использовался стандартный метод обратного распространения, распараллеленный тремя различными способами (см. таблицу 1), включающими изложенный в данной работе. В первом режиме реализовывался описанный в данной работе подход без динамического решения вышеописанной задачи оптимального распределения ядер. Второй режим реализует тот же подход, но с решением задачи оптимального распределения ядер. Третий режим соответствовал классическому варианту распараллеливания по обучающим парам без прогнозирования, без использования подхода, изложенного в данной работе. Для вычисления показателей ускорения дополнительно был произведен расчет той же задачи в непараллельном варианте (определялось время непараллельного решения t(1)). Ускорение S(M) на M ядрах рассчитывалось по стандартной формуле

$$S(M) = t(1)/t(M),$$

где t(M) – соответствующее время решения на M ядрах.

В таблице 1 приведены рассчитанные значения ускорения для различных режимов и числа ядер.

Из таблицы 1 очевидно, что наибольшее значение ускорения было получено именно в режиме сверхоптимистичных вычислений (с автоматическим распределением ядер) на 6 ядрах. Более того, почти во всех случаях такой режим работы при одинаковом M позволял получать ускорение, большее, чем при использовании обычного параллельного счета (до 46% преимущества) или режима сверхоптимистичных вычислений без подстройки числа ядер (до 72% преимущества).

Таблица 1. Полученные данные по обучению нейронной сети

Режим	Ускорение для различного количества ядер M								
	16	14	12	10	8	6	4	2	1
Сверхоптимистичные вычисления, с автоматическим распределением ядер по стадиям	2,98	2,83	2,55	2,83	2,93	3,57	2,96	1,42	1
Сверхоптимистичные вычисления, с равномерным распределением ядер по стадиям	2,35	2,36	2,43	2,53	3,27	2,08	2,63	1,44	1
Обычный параллельный расчет без сверхоптимистичных вычислений	-	-	-	-	2,01	2,51	2,28	1,7	1

4. Применение автоматического распараллеливания

Изложенная в данной работе схема распараллеливания тел циклов достаточно легко автоматизируется. В самом деле, достаточно:

а) обнаружить в С-программе все циклы;

б) в каждом цикле проанализировать граф зависимостей и построить набор вариантов разбиения его тела на четыре основные части – декларационную, финализирующую (либо наоборот, подготовительную), исполняемую исключительно на одном ядре, и две содержательные, к которым применяется идея сверхоптимистичных вычислений. Для обеих содержательных частей находятся множества входных IN и выходных OUT переменных. Если $\mathrm{OUT}_2 \cap \mathrm{IN}_1 \neq \varnothing$, то в таком случае сверхоптимистичные вычисления невозможны[1]. Иначе находится множество потенциальных каналов $C = \mathrm{OUT}_1 \cap \mathrm{IN}_2$. Если C не пусто, то для входящих в него переменных должны быть организованы каналы. Возможен и частный случай – если C пусто, то имеют место две независимые содержательные части, тогда может включаться классическое распараллеливание без каналов и транзакций;

в) из обнаруженных вариантов разбиения каждого цикла выбрать дающий потенциально наименьшее условное время счета (это можно сделать приближенно, с помощью частичного спекулятивного исполнения цикла, используя понятие среднего времени исполнения простого оператора и вычисляя приближенное условное время исполнения каждой входящей в программу функции) и сравнить его с приближенным условным временем исполнения цикла без распараллеливания. Если распараллеливание цикла оправдано, то достаточно вставить в него несколько директив OpenMP для организации параллельного запуска двух содержательных частей цикла, вставить декларации, инициализации, вызовы и финализацию необходимых объектов – предсказывающих каналов, а также макросы и функции, поддерживающие работу с частично транзакционной памятью. В результате получаем выходную С++-программу, к которой присоединяем необходимые заголовочные файлы и компилируем стандартным компилятором.

Соответствующая схема автоматизированного распараллеливания была реализована в демонстрационной версии транслятора, разработанной на базе системы порождения, идентификации и трансформации программ АМАЛЬГАМА (ранее имевшая название PGEN++). В частности, с применением данного транслятора была распараллелена С-программа моделирования собирающей электростатической линзы методом частиц в ячейках. Полученная параллельная версия продемонстрировала ускорение на 33% на четырехъядерной машине (с процессором Intel Atom) при переходе от одного к четырем ядрам.

[1] В таком случае можно пытаться выделить непараллельную подготовительную или финализирующую часть, в которой реализуются соответствующие зависимости, и, тем самым, снять проблему.

5. Заключение

Итак, в данной работе предложена новая общая схема вспомогательного распараллеливания циклов с зависимыми витками и внутренними зависимостями в теле, которая может быть применена при реализации упомянутых в работе и иных математических алгоритмов, допускающих расчет с определенными погрешностями (в отличие от иных известных работ). Кроме того, в данной работе допускается применение данной схемы с разбиением линейного фрагмента программы (тела цикла) более чем на две стадии, что также отсутствует в иных известных работах.

Предложенная схема основана на совместном применении предсказывающих каналов и частично транзакционной памяти (такое решение является новым), опробована на задаче обучения нейронной сети методом обратного распространения ошибки. Дополнительная погрешность составила не более 3,5%. Показано дополнительное увеличение ускорения до 46%. Также реализована схема автоматического выбора разделения ядер системы по блокам, обрабатывающим различные стадии цикла, позволившая существенно увеличить ускорение (до 1,7 раз) по сравнению с механическим разделением множества ядер на равные части. Сформулирована общая схема автоматического распараллеливания C-программ с применением предложенного подхода, разработана демонстрационная версия соответствующего транслятора, позволившая ускорить программу моделирования электростатической линзы на 33% (на четырехъядерной машине).

Литература

1. Рассел С., Норвиг П. Искусственный интеллект: современный подход. М.: «Вильямс», 2007. 1408 с.
2. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.
3. Пекунов В.В. Предицирующие каналы в параллельном программировании: возможное применение в математическом моделировании процессов в сплошных средах // Программные системы и вычислительные методы. 2019. № 3. С. 37-48. DOI: 10.7256/2454-0714.2019.3.30393 URL: https://nbpublish.com/library_read_article.php?id=30393 (дата обращения: 31.08.2020).
4. M.H. Lipasti and J.P. Shen. Exploiting Value Locality to Exceed the Dataflow Limit, in 29th International Symposium on Microarchitecture, December 1996
5. B. Calder, G. Reinman, and D.M. Tullsen. Selective Value Prediction, in 26th International Symposium of Computer Architecture, May 1999.
6. Y. Sazeides and J.E. Smith. The Predictability of Data Values, in 30th International Sympo-sium on Microarchitecture, December 1997.
7. Пекунов В.В. Сверхоптимистичные вычисления: концепция и апробация в задаче о моделировании электростатической линзы // Программные системы и вычислительные методы. 2020. № 2. С. 37 - 44. DOI: 10.7256/2454-0714.2020.2.32232 URL: https://nbpublish.com/library_read_article.php?id=32232 (дата обращения: 31.08.2020).
8. Черняк Л. Транзакционная память - первые шаги / Л. Черняк // Открытые системы. СУБД. 2007. №4. С.12-15.

ГИБРИДНЫЙ MPI + OPENMP АЛГОРИТМ ПЕРЕУПОРЯДОЧЕНИЯ СИММЕТРИЧНЫХ РАЗРЕЖЕННЫХ МАТРИЦ ДЛЯ СИСТЕМ С РАСПРЕДЕЛЕННОЙ ПАМЯТЬЮ

А.Ю. Пирова

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В работе рассматривается задача переупорядочения строк и столбцов разреженной матрицы с целью уменьшения заполнения фактора при прямом решении СЛАУ. Предлагается схема распараллеливания многоуровневого метода вложенных сечений для систем с распределенной памятью, в которой сочетается использование процессов и потоков в рамках одного вычислительного узла. Приводятся результаты вычислительных экспериментов, показывающие сопоставимость реализации с аналогами по времени работы и заполнению фактора.

Ключевые слова: метод вложенных сечений, переупорядочение разреженных матриц, параллельный алгоритм.

1. Введение

В ходе прямого решения СЛАУ с разреженной матрицей выполняется ее разложение на произведение двух треугольных матриц, называемых *факторами*, при этом число ненулевых элементов фактора в разы больше, чем в исходной матрице. Для уменьшения заполнения перед численной факторизацией выполняется ее *переупорядочение*, то есть симметричная перестановка строк и столбцов исходной матрицы. Подходящая перестановка позволяет сократить затраты памяти для хранения фактора и время, необходимое для численной факторизации. Поскольку задача нахождения оптимальной перестановки NP-трудная (Яннакакис, 1981), на практике для ее решения применяются эвристические методы, позволяющие за относительно небольшое время работы найти перестановку, приемлемую по размеру фактора. В большинстве реализаций для матриц больших порядков применяется многоуровневый метод вложенных сечений.

В настоящее время опубликовано несколько открытых библиотек, предназначенных для переупорядочения разреженных матриц. Широкое применение в научном сообществе получили библиотеки ParMETIS [3] и PT-Scotch [1], предназначенные для систем с распределенной памятью. Библиотека ParMETIS также имеет версию для систем с общей памятью, mt-metis [2]. Однако не опубликовано открытого алгоритма переупорядочения, эффективно сочетающего параллелизм на общей и распределенной памяти для получения перестановки.

Ранее автором были представлены библиотеки для переупорядочения, в которых реализован параллельный многоуровневый метод вложенных сечений для систем с общей памятью PMORSy [4] и систем с распределенной памятью DMORSy [6]. В данной работе предлагается гибридная схема распараллеливания метода вложенных сечений, объединяющая ранее описанные подходы. Применение данной схемы позволяет выбирать число используемых процессов и потоков исходя из архитектуры вычислительной системы.

2. Параллельный алгоритм

Алгоритм переупорядочения, рассматриваемый в данной работе, основан на многоуровневом методе вложенных сечений. Для выполнения переупорядочения по исходной матрице строится граф, в котором каждая вершина соответствует строке матрицы, а каждое ребро – ненулевому элементу. Работа метода основана на принципе «разделяй и властвуй», и заключается в многократном нахождении вершинных разделителей. В начале работы вычисляется вершинный разделитель исходного графа, множество вершин, его составляющих, нумеруются и удаляются из графа. Далее переупорядочение продолжается независимо на графах, образовавшихся после удаления разделителя. Подходящим считается разделитель, имеющий наименьшее число вершин при том, что после его удаления образуются два близких по размеру подграфа. Перестановка найдена, когда все вершины графа занумерованы. Перед началом работы метода вложенных сечений можно выполнить предобработку графа – процедуру точного сжатия его структуры, которая заключается в объединении вершин графа с одинаковым множеством смежных вершин. Этот прием позволяет сократить число вершин в несколько раз, а значит, сократить время переупорядочения, при этом заполнение фактора получаемых перестановок не увеличивается.

Гибридный параллельный алгоритм переупорядочения, предлагаемый в работе, основан на комбинации реализованных ранее параллельных схем [4,6]. Пусть исходный граф хранится распределенно на P процессах. Тогда разделитель для него вычисляется параллельно всеми P процессами по многоуровневому алгоритму, описанному в [6]. После того, как разделитель найден, новые подграфы перераспределяются на P / 2 процессов каждый. Вычисления продолжаются распределенным алгоритмом до тех пор, пока на каждом из P процессов не окажется один подграф целиком. Далее переупорядочение выполняется на каждом процессе независимо с использованием параллельной очереди задач. Одной задачей считается нахождение разделителя в графе. Само вычисление разделителей выполняется последовательно, а новые подграфы попадают в очередь задач, из которой захватываются на выполнение свободными потоками.

Реализация алгоритма выполнена с использованием технологий MPI и OpenMP. Комбинирование схем распараллеливания позволило объединить их преимущества: масштабируемость распределенного алгоритма и меньшее заполнение фактора, получаемое алгоритмом на общей памяти.

3. Результаты вычислительных экспериментов

3.1 Методика проведения экспериментов

Целью проведения вычислительных экспериментов было сравнение результатов работы гибридной реализации DMORSy (DMORSy_hybrid) с результатами базовой распределенной версии DMORSy и сторонними библиотеками ParMETIS v.4.0.3 (для распределенной памяти) и mt-metis v. 7.0.2 (для общей памяти). Результаты переупорядочения сравнивались по времени получения перестановок и заполнению факторов матриц. Все указанные пакеты запускались с настройками переупорядочения по умолчанию. Вычислительные эксперименты проводили на узлах кластера МСЦ РАН со следующими характеристиками: процессор Intel Xeon Gold 6154 (Skylake), 3.0 GHz, 2 x 18 ядер, память 192 GB, компилятор Intel Parallel Studio XE 2017 Cluster Edition. Всего рассматривалось 25 матриц из коллекции SuiteSparse [5] порядком от $2 \cdot 10^6$ до $1.5 \cdot 10^6$ и 8 матриц, сгенерированных пакетом «ЛОГОС» в ходе расчетов задач прочности. В работе приведены результаты для матриц порядка более 1 млн. строк, их характеристики указаны ниже (таблица 1).

Таблица 1. Параметры тестовых матриц

название	**N**	**nz**	**nz / n²**	**коллекция**
ecology2	999 999	2 997 995	3,00E-06	SuiteSparse
ecology1	1 000 000	2 998 000	3,00E-06	SuiteSparse
CurlCurl_3	1 219 574	7 382 096	4,96E-06	SuiteSparse
thermal2	1 228 045	4 904 179	3,25E-06	SuiteSparse
Kamaz_gusev	1 429 158	50 191 148	2,46E-05	ЛОГОС
Geo_1438	1 437 960	32 297 325	1,56E-05	SuiteSparse
StocF-1465	1 465 137	11 235 263	5,23E-06	SuiteSparse
Hook_1498	1 498 023	31 207 734	1,39E-05	SuiteSparse
af_shell10	1 508 065	27 090 195	1,19E-05	SuiteSparse
Flan_1565	1 564 794	59 485 419	2,43E-05	SuiteSparse
G3_circuit	1 585 478	4 623 152	1,84E-06	SuiteSparse
lopatka2	2 545 314	88 273 521	1,36E-05	ЛОГОС
49_750	2 615 169	97 081 773	1,42E-05	ЛОГОС
p4_6	4 216 212	144 714 294	8,14E-06	ЛОГОС

3.2 Анализ производительности и качества переупорядочения

Для анализа результатов работы переупорядочения в рамках одного вычислительного узла были проведены запуски пакетов для общей памяти PMORSy, mt-metis и пакетов для распределенной памяти DMORSy, DMORSy_hybrid и ParMETIS. Запуски производились на 32 вычислительных ядрах. Для гибридной версии было выбрано соотношение 16 процессов по 2 потока для всех тестовых матриц.

Сравнение времени работы (рис. 1) показывает, что DMORSy и DMORSy_hybrid работают быстрее PMORSy за счет параллельного выполнения этапов многоуровневого метода. В сравнении с версией для общей памяти, сокращение времени работы в среднем составляет 2.4 раза. Использование гибридной схемы распараллеливания на одном вычислительном узле не дает дополнительного выигрыша по времени. В сравнении с mt-metis и ParMETIS, DMORSy_hybrid работает быстрее на половине тестовых матриц (в среднем, в 1.5 раза относительно mt-metis, в 1.9 раз относительно ParMETIS).

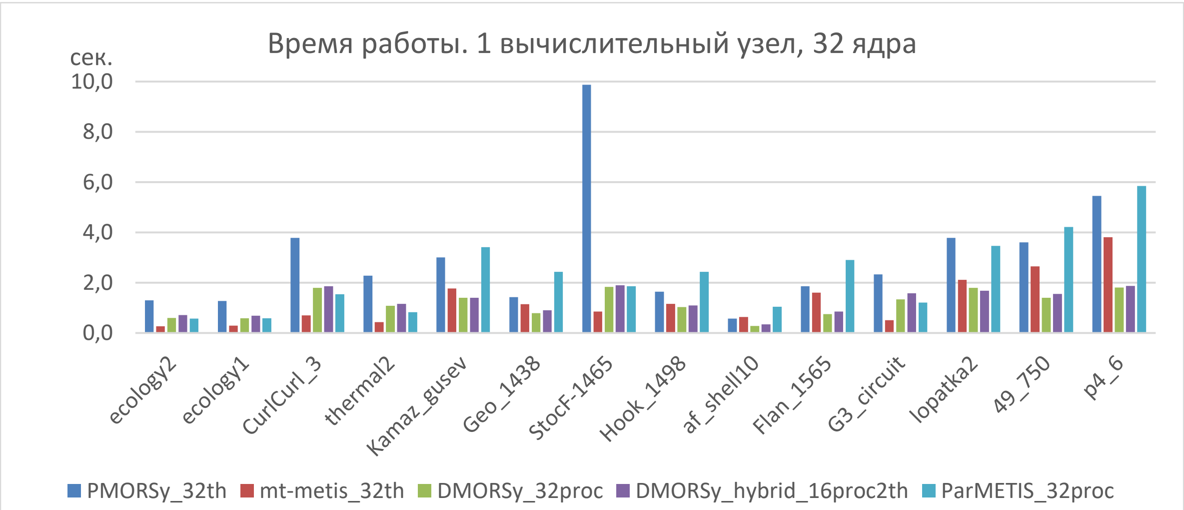


Рис. 1. Сравнение времени работы переупорядочивателей
на одном вычислительном узле

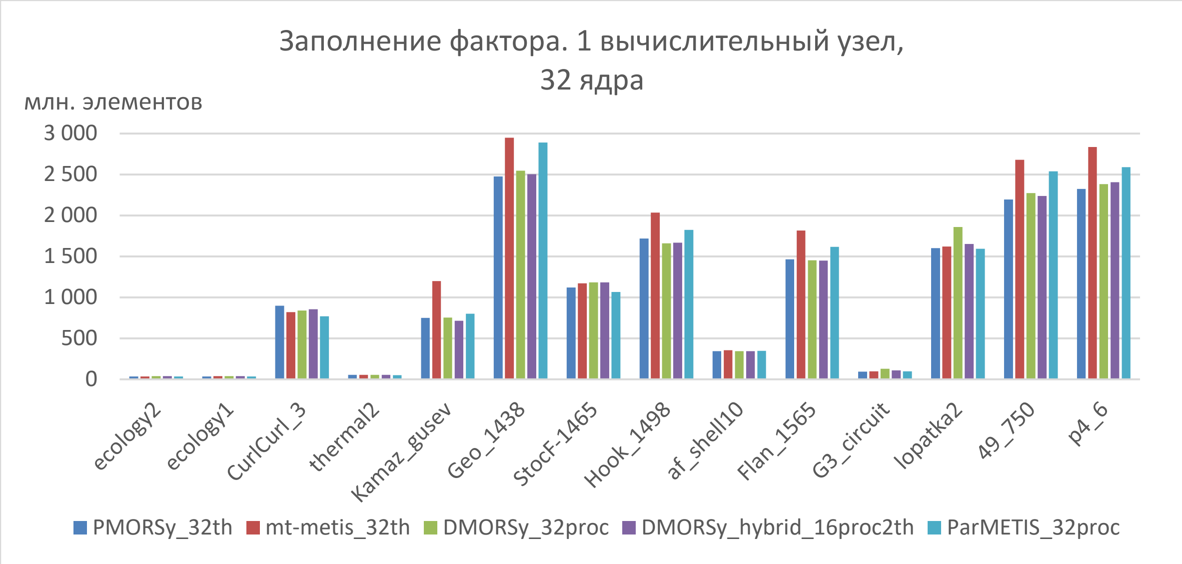


Рис. 2. Сравнение заполнения фактора, полученного переупорядочивателями на одном вычислительном узле

Сравнение заполнения факторов матриц (рис. 2) показывает, что результаты, полученные PMORSy, DMORSy и DMORSy_hybrid близки. Для 10 из 14 матриц наименьшее заполнение фактора было получено пакетами PMORSy или DMORSy_hybrid, для оставшихся 4 матриц – пакетом ParMETIS. В сравнении со сторонними пакетами, DMORSy_hybrid позволяет получить лучшее заполнение фактора на половине тестовых матриц, получая до 20% меньше, чем mt-metis, и до 12% меньше, чем ParMETIS.

Далее сравним результаты работы DMORSy, DMORSy_hybrid и ParMETIS при работе на 32 ядрах двух вычислительных узлов. Для DMORSy_hybrid для каждой матрицы соотношение числа процессов и потоков выбиралось таким образом, чтобы время работы было наименьшим. Для большинства матриц была выбрана конфигурация 16 процессов по 2 потока, для остальных – 8 процессов по 4 потока или 32 процесса по 1 потоку.

Сравнение времени работы (рис. 3) показывает, что использование гибридной схемы распараллеливания позволило сократить время работы DMORSy для большинства матриц (в среднем, на 5%, наибольший выигрыш – 12%). В сравнении с ParMETIS, DMORSy_hybrid работает быстрее на 11 матрицах из 14, в среднем опережая в 2.2 раза (наибольший выигрыш – 3.8 раз).

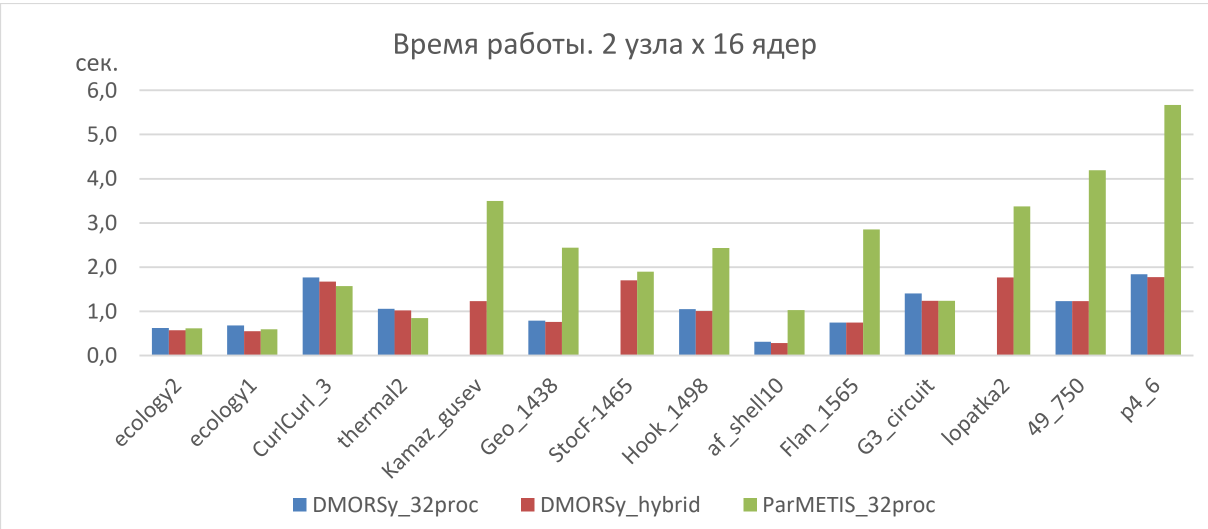


Рис. 3. Сравнение времени работы переупорядочивателей на двух вычислительных узлах

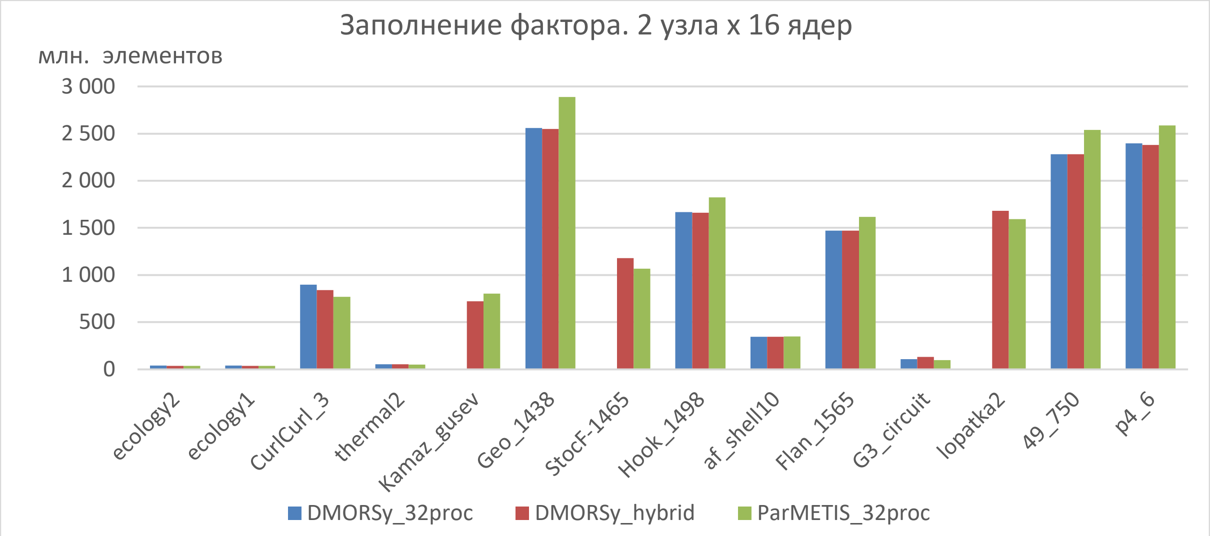


Рис. 4. Заполнение фактора матриц, полученного переупорядочивателями на двух вычислительных узлах

Сравним заполнение факторов матриц, полученное при работе на двух вычислительных узлах (рис. 4). Также, как и при работе на одном вычислительном узле, заполнение факторов, полученное DMORSy и DMORSy_hybrid, отличается незначительно (разница в пределах 2%). При этом DMORSy_hybrid было получено меньшее заполнение фактора, чем ParMETIS, для половины тестовых матриц (среднее опережение 8%, наибольший выигрыш – 12%).

4. Заключение

В работе рассматривается задача разработки параллельных алгоритмов для переупорядочения симметричных разреженных матриц. На основе программных реализаций переупорядочения для систем с распределенной памятью [6] и систем с общей памятью [4], предложен гибридный параллельный алгоритм, в котором комбинируется параллелизм с использованием процессов и потоков.

Результаты вычислительных экспериментов показали, что использование гибридной схемы распараллеливания в сравнении с предыдущими реализациями позволило сократить время переупорядочения и заполнение фактора матриц при работе на двух вычислительных узлах. В сравнении с пакетом ParMETIS [3], широко применяемым в приложениях, в частности, при расчетах в системах с распределенной памятью, для половины тестовых матриц были получены лучшие результаты как по времени работы, так и по заполнению фактора.

Литература

1. Chevalier C., Pellegrini F. PT-Scotch: A tool for efficient parallel graph ordering // Parallel Computing. 2008. Vol. 34, No. 6. P. 318–331. DOI:10.1016/j.parco.2007.12.001.
2. LaSalle D. and Karypis G. Efficient Nested Dissection for Multicore Architectures // Euro-Par 2015: Parallel Processing. 2015, Springer Berlin Heidelberg. P. 467–478. DOI:10.1007/978-3-662-48096-0_36.
3. Karypis G. and Kumar V. ParMetis: Parallel graph partitioning and sparse matrix ordering library. Tech. Rep. TR 97-060, University of Minnesota, Department of Computer Science. 1997.
4. Pirova A., Meyerov I., Kozinov E., Lebedev S. PMORSy: parallel sparse matrix ordering software for fill-in minimization // Optimization Methods and Software. 2017. Vol. 32. No. 2. P. 274–289. DOI: 10.1080/10556788.2016.1193177
5. Suite Sparse Matrix Collection. URL: https://sparse.tamu.edu/ (дата обращения: 10.10.2021).
6. Пирова А.Ю., Мееров И.Б., Козинов Е.А. Программный комплекс DMORSy для переупорядочения разреженных матриц на кластерных системах // Международная конференция

«Суперкомпьютерные дни в России»: Труды конференции (Москва, 24-25 сентября 2018). М: изд-во МГУ. 2018. С. 749-757.

СИНХРОНИЗАЦИЯ В СЕТИ ИМПУЛЬСНО-СВЯЗАННЫХ НЕИДЕНТИЧНЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ ФАЗОВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ[1*]

Е.Н. Плохов, М.И. Болотов, Г.В. Осипов

Научно-образовательный математический центр «Математика технологий будущего», Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В данной работе рассматриваются сценарии нарушения частотной синхронизации в сети импульсно-связанных неидентичных нелинейных фазовых элементов. Показано, что однокластерный синхронный режим может разрушаться либо через постепенное разделение на кластеры большого размера, либо через появление одиночных уединенных элементов.

Ключевые слова: синхронизация, кластеры, глобальная связь, активный ротатор, импульсная связь, среднее поле.

1. Введение

Многие системы в нейробиологии функционируют на разных уровнях посредством взаимодействующих периодических процессов. Сети связанных осцилляторов предоставляют модели для таких систем. Каждый узел в сети представляет собой отдельный осциллятор, при этом структура сети кодирует, какие осцилляторы взаимодействуют друг с другом [1]. В нейробиологии индивидуальные осцилляторы могут представлять либо отдельные нейроны либо целые популяции нейронов на макроскопическом уровне [2]. Правильное функционирование или дисфункция этих сетей зависит от коллективной динамики взаимодействующих колебательных элементов. Следовательно, одна из основных проблем — понять, как лежащая в основе сеть формирует эту коллективную динамику. Отсюда вытекает задача исследования формирования сложных синхронных режимов в ансамблях нелинейных глобально или нелокально связанных осцилляторов с импульсными связями.

Один из наиболее заметных коллективных эффектов в осцилляторных сетях происходит, когда узлы синхронизируются и колеблются в едином ритме [3]. Синхронизация может иметь множество типов, включая фазовую синхронизацию, когда состояния разных осцилляторов когерентны, или частотную синхронизацию, когда частоты осцилляторов совпадают. В данной работе рассмотрены ансамбли осцилляторов, глобально связанных через среднее поле. В качестве модели отдельного элемента будет использован активный ротатор, который может воспроизводить релаксационные колебания [4]. Будут продемонстрированы сценарии разрушения режима полной частотной синхронизации.

2. Модель

Рассмотрим ансамбль связанных через среднее импульсное поле N неидентичных активных ротаторов, описываемых фазой φ_n. Динамика каждого ротатора задается уравнением:

$$\dot{\varphi}_n = \gamma_n - \sin\varphi_n + gE(t), \qquad (1)$$

где параметр γ_n определяет собственную частоту ротатора и представляет собой случайную величину, удовлетворяющую равномерному распределению на некотором отрезке $[k_1, k_2]$, а параметр g задает силу взаимодействия между элементами.

Уравнения (1) определяют состояния ротаторов на отрезке [0;2π]. Как только φ_n достигает значения 2π, с n-го осциллятора в уравнение для общего поля подается импульсное воздействие. Эволюция поля ансамбля при этом задается уравнением

[1*] Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 19-12-00367 (анализ устойчивости), и Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-29-10068 мк (анализ кластерных режимов).

$$\ddot{E} + 2\alpha\dot{E} + \alpha^2 E = \beta \sum_{n|t_m<t} \delta(t - t_n), \qquad (2)$$

где $\alpha > 0$ – параметр эволюции, характеризующий затухание поля на межимпульсном интервале, $\beta > 0$ – параметр, задающий величину импульсного воздействия, t_m – момент времени поступления m-го импульса. Таким образом, рассматривается система ротаторов, на каждый из которых подается внешнее воздействие, которое определяется состоянием ротаторов.

3. Нарушение частотной синхронизации

В качестве характеристики синхронного поведения элементов системы (1), (2) будем рассматривать средние частоты вращения фазовых осцилляторов Ω_n. Будем называть несколько осцилляторов, которые имеют одинаковую среднюю частоту, кластером. Если все элементы ансамбля имеют равную среднюю частоту, то в системе реализуется однокластерный полностью синхронный по частоте режим. Данный режим существует в системе при больших значениях параметра g, когда сила связи между элементами достаточно высока. В результате численного анализа системы (1), (2) было показано, что такой однокластерный режим может разрушаться в результате реализации двух сценариев.

1. В случае постепенного уменьшения силы связи между осцилляторами полностью синхронный кластер распадается на два кластера, после чего данный процесс происходит с образовавшимися кластерами и т.д. (рис. 1а).

2. В случае увеличения степени беспорядка собственных частот полностью синхронный кластер начинают покидать отдельные уединенные осцилляторы (рис. 1б).

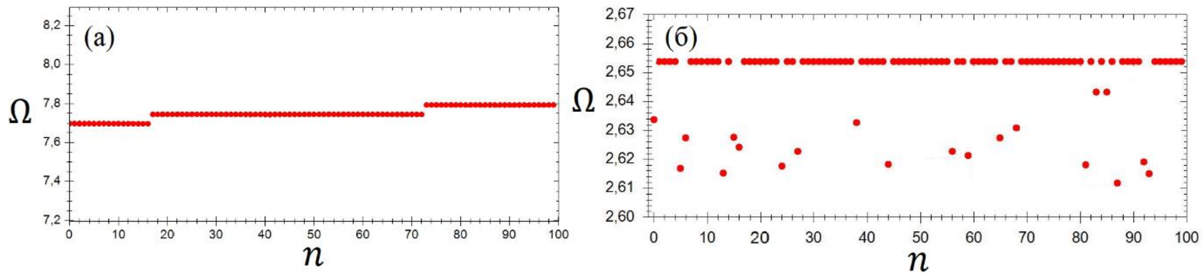


Рис. 1. Средние частоты осцилляторов Ω_n при $N = 100$. (а) $g = 5.5$, $\alpha = 0.6$, $k_1 = 1.01$, $k_2 = 1.1$. (б) $g = 1.0$, $\alpha = 1.5$, $k_1 = 0.99$, $k_2 = 1.07$.

Литература

1. Strogatz S. Exploring complex networks // Nature. 2001. V. 74, P. 268.
2. Breakspear M. Dynamic models of large-scale brain activity // Nature neuroscience. 2017. V. 20, P. 340.
3. Osipov G. V., Kurths J., Zhou C. Synchronization in Oscillatory Networks. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2007.
4. Kanamaru T., Sekine M. Analysis of globally connected active rotators with excitatory and inhibitory connections using the Fokker-Planck equation // Phys. Rev. E. 2003. V. 67, P. 031916.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ СЕТИ МЕДИЦИНСКИХ УЧРЕЖДЕНИЙ РЕГИОНА

Е.В. Пройдакова, З.М. Гитлина, А.Е. Котова

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Потребность в оказании медицинской помощи пожилым людям постоянно увеличивается в связи со старением населения, повышением пенсионного возраста и пандемией коронавирусной инфекции. Возникает необходимость в новых методах, позволяющих рационально расходовать ограниченные ресурсы системы здравоохранения без ущерба эффективности медицинского обслуживания. Данная работа посвящена оптимизации математической модели работы сети медицинских учреждений региона.

Ключевые слова: медицинское учреждение, математическая модель, кибернетический подход, точность измерений, выборочное значение, нормальный закон распределения, оптимизационная задача распределения ресурсов.

Введение

Данная работа является продолжением статьи [1], в которой была построена математическая модель типового медицинского учреждения в виде управляющей кибернетической системы.

Напомним основные обозначения, введенные ранее [1]:

- $M_j,\ j \in J = \{1, 2, \dots, n\}$ – типовое медицинское учреждение (больница) с номером j, в нашем случае $n = 5$;
- $t \in T = \{1, 2, \dots, k\}$ – номер отчетного года работы лечебного учреждения M_j, в нашем случае $k = 9$;
- $r(t) \in R$ – управление, то есть некое воздействие на показатели функционирования лечебного учреждения;
- $0 < \varepsilon = \varepsilon(t) < 1$ – точность измерений всех показателей работы больницы M_j в течение отчётного года t;
- $x_j^{(r)}(t)$ - число используемых коек медицинским учреждением M_j в отчетном году t при управлении r;
- $A_{i,j}{}^{(r)}(t), Q_j{}^{(r)}(t), G_j{}^{(r)}(t), L_j{}^{(r)}(t)$ – стоимость затрат статьи с номером $i \in I = \{1, 2, \dots, m\}$, число пролеченных больных, число умерших больных и количество койко-дней соответственно для медицинского учреждения M_j в отчетном году t при управлении r;
- Множество номеров $i \in I = \{1, 2, \dots, m\}$ всех статей затрат включает в себя подмножество $I_0 = \{i_1, i_2, \dots, i_s\}, i_1 < i_2 < \dots < i_s = m$ номеров укрупненных (основных) статей затрат, подмножество $I_1 = \{a_1, a_2, \dots, a_l\}, a_1 < a_2 < \dots < a_l$, $l \ll s \ll m$ номеров вспомогательных (зависимых) статей затрат и подмножество $(I \backslash I_0) \backslash I_1$ номеров независимых статей затрат ($m - s - l$ штук), в нашем случае $m = 25$, $s = 5$, $l = 3$, $m - s - l = 17$;
- $u = u(t) \in R$ – нормативное управление $u = u(t) \in R$, заданное Министерством здравоохранения региона, которое однозначно определяет число используемых коек больницей M_j в отчетном году t;
- $A_{i,j}{}^{(u)}(t), Q_j{}^{(u)}(t), G_j{}^{(u)}(t), L_j{}^{(u)}(t)$ – фактические значения статей затрат, число пролеченных больных, число умерших больных и количество койко-дней соответственно для медицинского учреждения M_j в отчетном году t при использовании $x_j^{(u)}(t)$ коек;

- $A_{i,j}^{(u,\varepsilon)}(t), Q_j^{(u,\varepsilon)}(t), G_j^{(u,\varepsilon)}(t), L_j^{(u,\varepsilon)}(t)$ – значения стоимостей статей затрат, числа пролеченных больных и умерших больных, количества койко-дней соответственно при нормативном управлении $u = u(t)$ точности $\varepsilon = \varepsilon(t)$ для больницы M_j в отчетном году t;
- $a_{i,j}^{(\varepsilon)}(t), q_j^{(\varepsilon)}(t), g_j^{(\varepsilon)}(t), l_j^{(\varepsilon)}(t)$ – плотности стоимости фактических затрат статьи с номером i, плотности фактически пролеченных больных, умерших больных, плотности по факту койко-дней для больницы M_j в отчетном году t при нормативном управлении $u = u(t)$, точности $\varepsilon = \varepsilon(t)$;
- $A_{i,j}^{(r,\varepsilon)}(t), Q_j^{(r,\varepsilon)}(t), G_j^{(r,\varepsilon)}(t), L_j^{(r,\varepsilon)}(t)$ – выборочные значения величин для больницы M_j при управлении $r = r(t)$ и точности $\varepsilon = \varepsilon(t)$ в отчетном году t.

Полученную в [1] на основе кибернетического подхода функциональную схему типового медицинского учреждения можно представить в виде блочной структуры (Рис. 1).

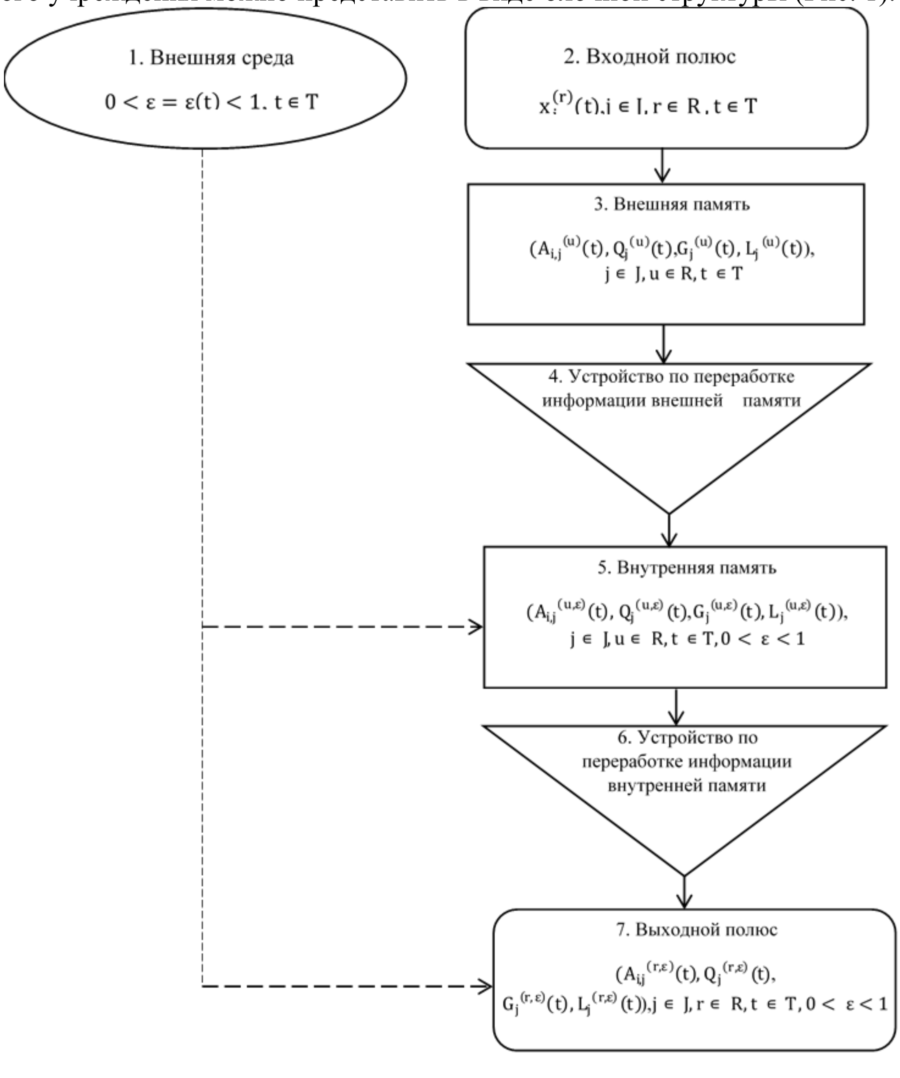


Рис. 1. Функциональная схема типового медицинского учреждения

Имея готовую математическую модель функционирования типового медицинского учреждения в виде управляющей системы и возможность получать статистику любого объема для показателей больницы, перейдем к исследованию функционирования сети медицинских учреждений региона в рамках одного отчетного периода. Далее будет поставлена и решена задачи оптимизации функционирования сети медицинских учреждений в одном отчетном году, на основе выбранного критерия эффективности с учетом ошибок результатов измерений.

Оптимизация функционирования сети медицинских учреждений

Перейдем к постановке и решению задачи оптимального распределения коек между больницами. Для этого примем количество коек $x_1(t), \dots, x_n(t)$, для каждого из медицинских учреждений M_j, $j \in J = \{1,2, \dots, n\}$ в отчетном году $t \in T = \{1,2, \dots, k\}$ в качестве управляющих переменных и запишем систему ограничений на эти переменные [1], [2]:

- Ограничения на количество $x_j(t)$ коек по медицинскому учреждению M_j:

$$x_{j,min}(t) \le x_j(t) \le x_{j,max}(t), \ j = 1,2, \dots, n \tag{1}$$

- Ограничение на общее количество коек по всем медицинским учреждениям:

$$\sum_{j=1}^{n} x_j(t) \le \left(\sum_{j=1}^{n} x_j(t)\right)_{max} \tag{2}$$

- Ограничения на общее количество $Q^{(\varepsilon)}(\omega, t) = \sum_{j=1}^{n}\left[q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega, t)x_j(t)\right]$ пролеченных больных по всем медицинским учреждениям

$$\sum_{j=1}^{n} Q_j(\omega, t) \le \sum_{j=1}^{n} q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega, t)x_j(t) \le \left(\sum_{j=1}^{n}\left[q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega, t)x_j(t)\right]\right)_{max} \tag{3}$$

- Ограничение на общее количество $G^{(\varepsilon)}(\omega, t) = \sum_{j=1}^{n}\left[g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega, t)x_j(t)\right]$ умерших больных по всем медицинским учреждениям:

$$\sum_{j=1}^{n} g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega, t)x_j(t) \le \sum_{j=1}^{n} G_j(\omega, t) \tag{4}$$

- Ограничение на общее количество $L^{(\varepsilon)}(\omega, t) = \sum_{j=1}^{n}\left[l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega, t)x_j(t)\right]$ койко-дней по всем медицинским учреждениям в отчетном году t

$$\sum_{j=1}^{n} l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega, t)x_j(t) \le (\sum_{j=1}^{n} x_j(t))_{max} * 365 \tag{5}$$

- Если число m определяет общее количество статей затрат каждого медицинского учреждения, то ограничения по стоимости каждой статьи затрат с номером i в каждом отчетном году всеми медицинскими учреждениями можно записать в виде

$$\sum_{j=1}^{n} a_j^{(u,\varepsilon)}(\omega, t)x_j(t) \le A_{i,план}(t), \ i = 1,2, \dots, m \tag{6}$$

С учетом введенных ограничений можно ставить различные оптимизационные задачи [1], [2]. В нашем случае будем считать распределение коек $x_1^*(t), x_2^*(t), \dots, x_n^*(t)$ оптимальным, если выполняются ограничения (1) – (6) и условие оптимальности (7):

$$a^{(\varepsilon)}\left(\omega; x_1^*(t),\ x_2^*(t), \dots,\ x_n^*(t)\right) =$$
$$= \min\left\{a^{(\varepsilon)}\left(\omega; x_1(t), x_2(t) \dots,\ x_n(t)\right) : \left(x_1(t), x_2(t) \dots,\ x_n(t)\right) \epsilon X^{(n)}(t)\right\}. \tag{7}$$

Численный эксперимент

Расчет оптимальных значений $x_1^*(t), x_2^*(t), \dots, x_n^*(t)$ проводился с помощью Microsoft Excel 2016 с использованием надстройки «Поиск решения» на основе фактических данных методом общего понижающего градиента (ОПГ). При проведении эксперимента были рассмотрены данные по пяти медицинским учреждениям № 34, № 24, № 14, № 11, № 37 региона за 9 лет, с 2007 по 2015 годы, $t \in \{1,2, \dots, 9\}$. Фактическое распределение коек для больниц определялось набором: $x_1^{(u)}(t) = 50$, $x_2^{(u)}(t) = 50$, $x_3^{(u)} = 50$, $x_4^{(u)}(t) = 50$, $x_5^{(u)}(t) = 25$ [2]. Эксперимент проводился при трех значениях точности измерений: $\varepsilon \in \{0.01, 0.05, 0.1\}$ и при пяти различных реализациях нормальной случайной величины: $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5$.

Ниже, в таблицах 1-7, в качестве примера приведены результаты за 2015 год ($t = 9$). В таблицах 1–2 приведены результаты для случая $x_{j,min}(t) = 0,\ j = 1,2,3,4,5$.

Таблица 1. Результат оптимизации при $\varepsilon = 0.01$ $\omega = \omega_1 = 0.06988817$

Больница	№34 (j =1)	№24 (j =2)	№14 (j = 3)	№11 (j =4)	№37 (j = 5)
$x_j^*(t)$	149	4	55	0	0
$a_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	222498.9	295514.1	374404	295895.5	392073.8
$q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	10.80655	8.537769	14.50824	8.657178	12.17975
$l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	301.429	307.5388	316.6736	331.4804	298.6428
$g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	0.159212	0.059705	0.139311	0.995078	0.398031

Оптимальное число коек: $x_1^*(t) = 149, x_2^*(t) = 4, x_3^*(t) = 55, x_4^*(t) = 0, x_5^*(t) = 0$.

Таблица 2. Результат оптимизации при $\varepsilon = 0.05$ $\omega = \omega_1 = 0.06988817$

Больница	№34 (j =1)	№24 (j =2)	№14 (j = 3)	№11 (j =4)	№37 (j = 5)
$x_j^*(t)$	153	3	56	0	0
$a_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	218096.6	289667.2	366996.2	290041	384316.3
$q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	10.59273	8.368843	14.22118	8.485889	11.93877
$l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	295.465	301.4539	310.408	324.9218	292.7339
$g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	0.156062	0.058523	0.136555	0.97539	0.390156

Оптимальное число коек: $x_1^*(t) = 153, x_2^*(t) = 3, x_3^*(t) = 56, x_4^*(t) = 0, x_5^*(t) = 0$

В таблицах 3–5 ограничение снизу на число коек равное пяти: $x_{j,min}(t) = 5,\ j = 1,2,3,4,5$.

Таблица 3. Результат оптимизации при $\varepsilon = 0.01$ $\omega = \omega_2 = 0.267438742$

Больница	№34 (j =1)	№24 (j =2)	№14 (j = 3)	№11 (j =4)	№37 (j = 5)
$x_j^*(t)$	146	6	48	6	5
$a_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	223136.9	296361.5	375477.7	296744	393198.1
$q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	10.83754	8.562251	14.54984	8.682003	12.21468
$l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	302.2934	308.4207	317.5817	332.4309	299.4992
$g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	0.159669	0.059876	0.13971	0.997931	0.399173

Оптимальное число коек: $x_1^*(t) = 146, x_2^*(t) = 6, x_3^*(t) = 48, x_4^*(t) = 6, x_5^*(t) = 5$.

Таблица 4. Результат оптимизации при $\varepsilon = 0.05$ $\omega = \omega_1 = 0.06988817$

Больница	№34 (j =1)	№24 (j =2)	№14 (j = 3)	№11 (j =4)	№37 (j = 5)
$x_j^*(t)$	151	5	48	7	5
$a_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	218096.6	289667.2	366996.2	290041	384316.3
$q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	10.59273	8.368843	14.22118	8.485889	11.93877
$l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	295.465	301.4539	310.408	324.9218	292.7339
$g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	0.156062	0.058523	0.136555	0.97539	0.390156

Оптимальное число коек: $x_1^*(t) = 151, x_2^*(t) = 5, x_3^*(t) = 48, x_4^*(t) = 7, x_5^*(t) = 5.$

Таблица 5. Результат оптимизации при $\varepsilon = 0.1$ $\omega = \omega_5 = 0.973686616$

Больница	№34 (j =1)	№24 (j =2)	№14 (j = 3)	№11 (j =4)	№37 (j = 5)
$x_j^*(t)$	135	8	45	5	5
$a_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	238043.7	316160.2	400561.8	316568.2	419466
$q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	11.56155	9.13426	15.52185	9.262012	13.03069
$l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	322.4883	329.025	338.798	354.6392	319.5075
$g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	0.170336	0.063876	0.149044	1.064599	0.42584

Оптимальное число коек: $x_1^*(t) = 135, x_2^*(t) = 8, x_3^*(t) = 45, x_4^*(t) = 5, x_5^*(t) = 5.$
В таблицах 6 и 7 приведены расчеты для $x_{j,min}(t) = 10, j = 1,2,3,4,5.$

Таблица 6. Результат оптимизации при $\varepsilon = 0.01$ $\omega = \omega_3 = 0.511809377$

Больница	№34 (j =1)	№24 (j =2)	№14 (j = 3)	№11 (j =4)	№37 (j = 5)
$x_j^*(t)$	140	12	42	10	10
$a_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	223621.5	297005.2	376293.1	297388.5	394052
$q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	10.86107	8.580847	14.58144	8.700859	12.24121
$l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	302.9499	309.0905	318.2714	333.1529	300.1496
$g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	0.160016	0.060006	0.140014	1.000099	0.400039

Оптимальное число коек: $x_1^*(t) = 140, x_2^*(t) = 12, x_3^*(t) = 42, x_4^*(t) = 10, x_5^*(t) = 10.$

Таблица 7. Результат оптимизации при $\varepsilon = 0.05$ $\omega = \omega_2 = 0.267438742$

Больница	№34 (j =1)	№24 (j =2)	№14 (j = 3)	№11 (j =4)	№37 (j = 5)
$x_j^*(t)$	142	11	43	10	10
$a_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	221286.7	293904.2	372364.4	294283.5	389937.9
$q_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	10.74768	8.491257	14.4292	8.610016	12.1134
$l_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	299.7869	305.8634	314.9485	329.6746	297.0159
$g_j^{(u,\varepsilon)}(\omega;\ t)$	0.158345	0.059379	0.138552	0.989657	0.395863

Оптимальное число коек: $x_1^*(t) = 142, x_2^*(t) = 11, x_3^*(t) = 43, x_4^*(t) = 10, x_5^*(t) = 10$.

Выводы

По результатам вычислений, представленных в таблицах 1-7, можно сделать следующие выводы. При $x_{j,min}(t) = 0,\ j = 1,2,3,4,5$ максимальное значение $x_1^*(t)$ равно 159, а минимальное равно 141. Величина $x_2^*(t)$ близка к нижнему ограничению и принадлежит множеству $\{0, 1, \dots, 4\}$. Максимальное значение $x_3^*(t)$ равно 58, а минимальное равно 52. Значение $x_4^*(t)$ принадлежит множеству $\{0, 1, \dots, 4\}$. Величина $x_5^*(t) = 0$ совпадает со значением нижнего ограничения во всех случаях. При $x_{j,min}(t) = 5,\ j = 1,2,3,4,5$ максимальное значение $x_1^*(t)$ равно 153, а минимальное равно 135. Величина $x_2^*(t)$ близка к нижнему ограничению и принадлежит множеству $\{5, \dots, 8\}$. Максимальное значение $x_3^*(t)$ равно 51, а минимальное равно 45. Значение $x_4^*(t)$ принадлежит множеству $\{5, \dots, 8\}$. Величина $x_5^*(t) = 5$ совпадает со значением нижнего ограничения во всех случаях. При $x_{j,min}(t) = 10,\ j = 1,2,3,4,5$ максимальное значение $x_1^*(t)$ равно 149, а минимальное равно 133. Величина $x_2^*(t)$ близка к нижнему ограничению и принадлежит множеству $\{10, 11, 12\}$. Максимальное значение $x_3^*(t)$ равно 45, а минимальное равно 37. Значение $x_4^*(t)$ принадлежит множеству $\{10, 11, 12\}$. Величина $x_5^*(t) = 10$ совпадает со значением нижнего ограничения во всех случаях.

Окончательно можно сделать вывод, что точность измерений ε в значительной степени влияет на получаемые оптимальные значения числа коек по медицинским учреждениям сети, причем зависимость оптимального распределения от точности нелинейная. Также видно, что оптимальное количество коек для каждой из больниц различно для разных реализаций нормального закона ω.

В дальнейшем планируется решать оптимизационные задачи с другими критериями оптимальности, такими, как число пролеченных или умерших больных, число койко-дней. Помимо этого, будет введен функционал, позволяющий попарно сравнивать решения оптимизационных задач с разными критериями и определять наиболее эффективный.

Литература

1. Федоткин М.А., Пройдакова Е.В. Оптимизация динамики функционирования сети больниц с учетом ошибок результатов наблюдений // Математическое моделирование и суперкомпьютерные технологии. 2020. С. 380-385.
2. Федоткин М.А. Нетрадиционные проблемы математического моделирования экспериментов. – М.: Физматгиз, 2018. – С. 107.

ДИНАМИКА СЕТИ СПАЙКОВЫХ НЕЙРОНОВ В ЗАДАЧЕ ДВУХАЛЬТЕРНАТИВНОГО ВЫБОРА[1*]

М.М. Пугавко[1,2], О.В. Масленников[1,2], В.И. Некоркин[1,2]

[1]Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики РАН
[2]Научно-образовательный математический центр «Математика технологий будущего»

В работе разрабатывается искусственная нейронная сеть на основе спайковых моделей нейронов, которая обучается выполнять когнитивную задачу двухальтернативного выбора. Выявлен динамический механизм решения рассматриваемой когнитивной задачи. Проведен анализ характеристик сети после обучения при различных размерах сети, характеристик входных стимулов и параметров обучения, таких как скорость обучения, время обучения.

Ключевые слова: машинное обучение, нелинейная динамика, резервуарные вычисления, спайковые нейроны, нейродинамика, когнитивные задачи

1. Введение

В настоящий момент системы искусственного интеллекта (ИИ) получили широкое применение во многих областях науки и техники. Одним из наиболее перспективных на данный момент является построение систем машинного обучения (МО) на основе многослойных систем с автоматизированной настройкой большого числа весовых коэффициентов [1, 2]. Более того, в области исследования нейронных сетей (НС) наблюдается тенденция сближения нейронауки и когнитивистики с системами МО [3, 4]. Такой синтез направлений предполагает реализацию всё более реалистичных принципов работы нейронов и связей между ними. Подход, с помощью которого можно описать ключевые механизмы обработки информации, основан на методах нелинейной динамики [5]. В последнее время все большее внимание специалистов в области МО привлекает такой класс НС, как спайковые сети [5–11]. С одной стороны, спайковые НС обладают большей энергоэффективностью по сравнению с традиционными НС при их использовании на специализированных нейроморфных чипах [12]. С другой стороны, спайковые сети по своей динамике обладают большим сходством с биологическими НС, и поэтому могут использоваться для моделирования различных функций нервной системы [13].

В настоящей работе строится спайковая НС для моделирования когнитивной функции двухальтернативного выбора. Для этого формулируется соответствующая целевая задача и *методами* машинного обучения спайковая сеть настраивается на её выполнение. Обученная сеть анализируется методами нелинейной динамики, что позволяет выявить механизмы решения задачи двухальтернативного выбора.

2. Модель

2.1. Архитектура сети

На рис. 1 представлена схематически архитектура спайковой НС, рассматриваемой в данной работе. Сеть состоит из N спайковых моделей нейронов, которые связанных друг с другом матрицей $\mathbf{W}_{rec} \in \mathbb{R}^{N\times N}$. Входные стимулы поступают в сеть через три скалярных входа. Первые два входа x_1 и x_2 – это содержательные стимулы, а третий x_3 – сигнал фиксации. Вектор входов $\boldsymbol{x}(\boldsymbol{t}) = \left(x_1(t), x_2(t), x_3(t)\right)^T$ поступает на нейроны сети посредством связей, которые задаются матрицей $\mathbf{W}_{in} \in \mathbb{R}^{N\times 3}$. Три выходных элемента генерируют отклики $y_i, i = 1, 2, 3$, считывая активность всей сети через выходные связи, которые описывается матрицей

[1*] Работа выполнена в рамках Программы развития регионального научно-образовательного математического центра «Математика технологий будущего», проект 075-02-2020-1483/1

$\mathbf{W}_{out} \in \mathbb{R}^{N\times 3}$ и вектором смещений $\boldsymbol{b}_{out} = (b_1, b_2, b_3)^T$. Выход можно представить в векторном виде следующим образом $\boldsymbol{y}(t) = \left(y_1(t), y_2(t), y_3(t)\right)^T$

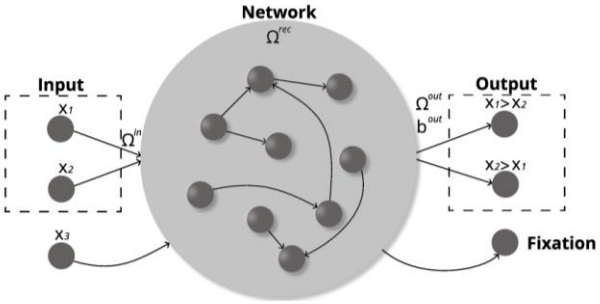


Рис. 1. Архитектура рекуррентной спайковой сети, состоящая из N спайковых моделей нейронов накопление-сброс, имеет три входа и три выхода. Через входы x_1 и x_2 поступают зашумлённые сигналы, средние значения которых необходимо сравнивать друг с другом, а через x_3 поступает сигнал фиксации. Два первых выхода отображают решение НС задачи, а третий выход отражает состояние сети (фиксация или выполнение задачи)

2.2. Модель нейронов сети

В работе рассматриваются спайковая модель нейронов, собственная динамика которой описывается LIF моделью нейронов, которая была представлена в работе Л. Лапика [14]. Для компьютерных симуляций мы рассматриваем дискретизированную версию такой модели по времени с шагом $\delta t = 1$мс. В векторной форме активность нейронов записывается в следующем виде

$$\boldsymbol{v}(n+1) = \alpha \boldsymbol{v}(n) + (1-\alpha)\left(\boldsymbol{W}_{rec}\boldsymbol{z}(n) + \boldsymbol{W}_{in}\boldsymbol{x}(n+1)\right), \qquad (1)$$

где $\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^{N\times 1}$ – вектор мембранных потенциалов нейронной сети, $n = 0, 1, 2, \dots$ – дискретное время, параметр $\alpha = \exp(-\delta t/\tau_m)$, где τ_m – постоянная времени мембранного потенциала. Каждая переменная вектора $\boldsymbol{z} = (z_1, \dots, z_N)^T \in \mathbb{R}^{N\times 1}$ записывается следующим образом

$$z_j(n) = H\left(v_j(n) - v_{th}\right),$$

где $H(v)$ – функция Хэвисайда, которая определяется стандартным образом: $H(v) = 1$ при $v \geq 0, H(v) = 0$ при $v < 0$. Когда переменная нейрона $v_j(n)$ достигает порога v_{th}, переменная сбрасывается в нулевое значение и в течение времени рефрактерности τ_{ref} нейрон не восприимчив к любым воздействиям. Выход сети задается фильтром и описывается следующим образом

$$\boldsymbol{y}(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{1}) = \boldsymbol{\kappa y}(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{W_{out} z}(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{1}) + \boldsymbol{b_{out}}, \qquad (2)$$

где $\kappa = \exp(-\delta t/\tau_{out})$. Значения параметров модели приведены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры модели

τ_m, мс	τ_{ref}, мс	τ_{out}, мс	v_{th}, мв	N
25	2	5	0.65	400

2. Целевая задача и обучение

Прототипом для моделирования является эксперимент [15]. Мы рассмотрели упрощенный вариант задачи для простоты моделирования. В ходе испытания на первые два входа x_1 и x_2 в течение времени τ_{learn}^{task}, которое выбирается случайно для каждого испытания из интервала $[50, 60]$мс, подается два сигнала, каждый из которых представляет собой белый гауссовский шум со средним значением $\bar{x}$, которое выбирается от 0 до 1 случайным образом для каждого из входов и с одинаковым стандартным отклонением $\sigma = 0.5$. Третий вход x_3 – сигнал фиксации, который принимает постоянное единичное значение в течение данного времени. Затем значение фиксации обнуляется. В этот момент сеть должна сгенерировать на выходе отклик, который является решением рассматриваемой задачи. Всего возможно два варианта решения. В первом варианте $y_1 > y_2$ – решение $\bar{x}_1 > \bar{x}_2$, а во втором варианте $y_2 > y_1$ – решение $\bar{x}_1 < \bar{x}_2$. В течение τ_{learn}^{hold}, которое выбирается случайно для каждого испытания из интервала $[7, 15]$мс, входные стимулы не поступают в сеть, т. е. входы равны нулю.

Обучение проводилось с помощью метода e-prop [11] с параметром метода $\gamma_{pd} = 0.3$ и скоростью обучения $\eta = 0.008$. Каждую тысячу обновлений весов скорость обучения умножается на значение 0.65. До обучения сеть инициализируется с нулевыми выходными весами и нулевым вектором смещений. Элементы матрицы $\mathbf{W}_{\text{rec}}$ задаются случайно по нормальному распределению с нулевым средним и стандартным отклонением, которое равняется $\frac{1}{\sqrt{(N)}}$. Элементы матрицы $\mathbf{W}_{\text{in}}$ задаются случайно и равномерно от -1 до 1. В процессе обучения происходит обновление весов $\mathbf{W}_{\text{rec}}$, $\boldsymbol{b}_{out}$, $\mathbf{W}_{out}$ с целью минимизации ошибки между реальным выходом $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{t}) = \left(y_1(t), y_2(t), y_3(t)\right)^T$ и целевым вектором выходов $\boldsymbol{y}^*(\boldsymbol{t}) = \left(y_1^*(t), y_2^*(t), y_3^*(t)\right)^T$. Значения $y_1^*(t) = 1, y_2^*(t) = 0$ для случая $\bar{x}_1 > \bar{x}_2$ и $y_1^*(t) = 0, y_2^*(t) = 1$ для случая $\bar{x}_1 < \bar{x}_2$. Данные значения сохраняются во время каждого испытания и вовремя, когда входы равны нулю. Целевой сигнал фиксации $y_3^* = 1$ во время испытания и равен нулю между испытаниями. Обучение НС проходило в течение $T_{learn} = 3.5 \times 10^3$ секунд нейронного времени.

3. Характеристики обученной сети

В процессе обучения происходит перестройка сети, что приводит к активности после обучения, которая отображена на рис. 2(а). Мы также проанализировали соответствующий усредненный по 40 реализациям выход, который отображен на рис. 2(б) для двух значений средних входов: $\bar{x}_1 = 0.5$, $\bar{x}_2 = 0$ и $\bar{x}_1 = 0.5, \bar{x}_2 = 0.7$.

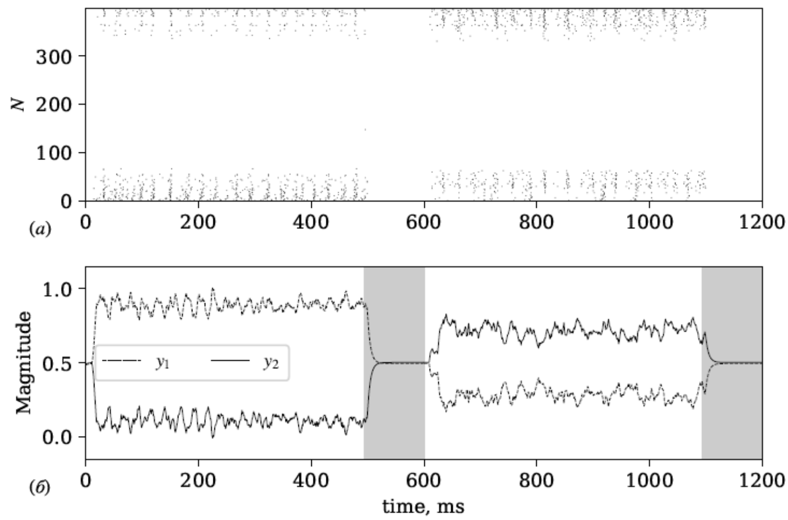


Рис. 2. Растрограмма спайковой активности сети после обучения при двух последовательных испытаниях: в первом $\bar{x}_1 = 0.5$, $\bar{x}_2 = 0$, во втором $\bar{x}_1 = 0.5, \bar{x}_2 = 0.7$. Черными точками отмечены моменты генерации спайков нейронами. (б) Соответствующие усреднённые по 40 реализациям выходные отклики y_1 и y_2. Серым цветом отмечены интервалы с нулевыми входами между испытаниями

Мы также исследовали точность работы сети в зависимости от размера сети, времени обучения и скорости обучения. Под точностью понимается отношение правильно решенных испытай ко всем испытаниям, которое выражено в процентах. Для всех графиков, для которых не указано значение стандартного отклонения шума на осях графика, стандартное отклонение равно $\sigma = 0.5$. Рис. 3(а) показывает, что точность возрастает с уменьшением шума, причем при $\Delta x = 1$ точность остается всегда практически равной 100% при любом значении шума. Шум брался в достаточно большом диапазоне для анализа возможности обобщения нашей модели. Рис. 3(б) показывает зависимость точности от Δx при трех значениях шума. Из него следует, что даже при нулевом шуме при близких средних значениях входных стимулов мы получаем точность в пределах 70%. Такой эффект обусловлен спайковой природой рассматриваемой сети. На рис. 3(в) отображена зависимость точности от скорости при различных временах суммарного обучения. Вертикальной пунктирной линией отображено значение скорости $\eta = 0.008$, которое использовалось в работе. На рис. 3(г) построена зависимость точности от размера сети для четырех различных значений суммарного времени обучения. Из данного графика следует, что точность оптимальна для выбранных нами значений размера и времени обучения. Также очевидно, что нет смысла брать большее количество нейронов, т. к. это не приводит к достаточно большому увеличению точности. Аналогично и для времени обучения.

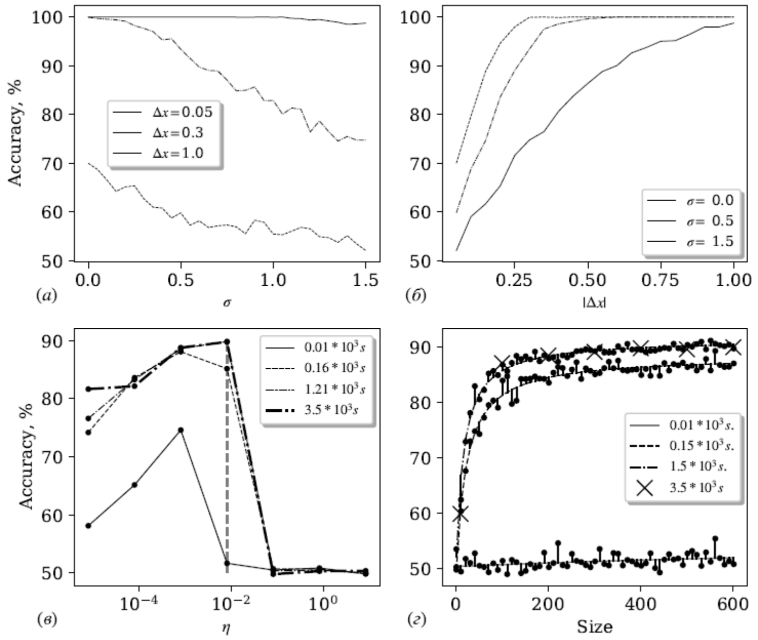


Рис. 3. (а) Зависимость точности работы обученной спайковой НС в зависимости от стандартного отклонения шума входа σ при различных Δx. (б) Точность обучения в зависимости от абсолютной разности между средними значениями входных сигналов Δx при различных σ. (в) Зависимость точности работы от скорости обучения η при различных значениях суммарного времени обучения. (г) Точность обучения в зависимости от размера сети при различных значениях суммарного времени обучения

4. Динамика обученной сети

Здесь мы рассматриваем динамику системы (1) после обучения. Для анализа траекторий мы использовали метод главных компонент (ГП), который позволяет снизить размерность фазового пространства. Траектории на плоскости первых двух ГП представлены на рис. 4. Траектории с началом испытания начинают расходиться от состояния S, которое соответствует режиму спонтанной активности сети. С течением времени каждая траектория приближается к окрестностям устойчивых неподвижных точек. Множество таких точек образуют линию L_0. Вход $\Delta x = 0$ соответствует неподвижной точки O_0, которая делит траектории на две части. В одной части находят точки, которые соответствуют $\Delta x < 0$, а в другой $\Delta x > 0$. После обнуления входных стимулов траектории возвращаются в состояние S.

Индивидуальный вклад каждого нейрона определяется интенсивностью его спайковой активности и весовым коэффициентом связи с соответствующим выходом. Частота генерации спайков варьируется в зависимости от входных стимулов. На рис. 5 (а) отображена степень участия нейронов в величине выхода y_1 при $\bar{x}_1 > \bar{x}_2$. Все остальные графики на данном рисунке отсортированы в соответствии с ним. Также на рис. 5(ж) отображена матрица весов, которая была отсортирована в соответствии с рис. 5(а). Анализ данных графиков и средних связей между нейронами позволил выявить структуру сети после обучения, которая отображена на рис. 5(з). Сеть разделилась на три подгруппы. Две подгруппы A_1и A_2 отвечают за решение задачи. Каждая из двух подгрупп отвечает за соответствующий выход y_1и y_2.

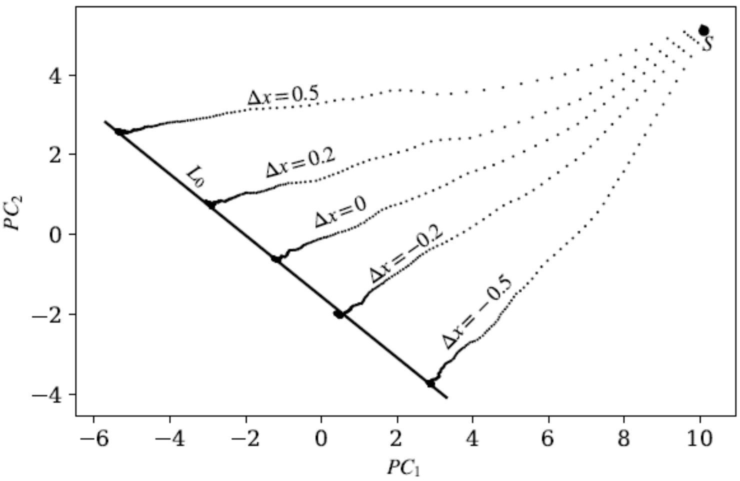


Рис. 4. Проекция траекторий системы (1) на первые две главные компоненты. Каждая траектория в данной плоскости описывает динамику средних по реализациям частот генерации спайков всеми нейронами сети при соответствующих значениях Δx

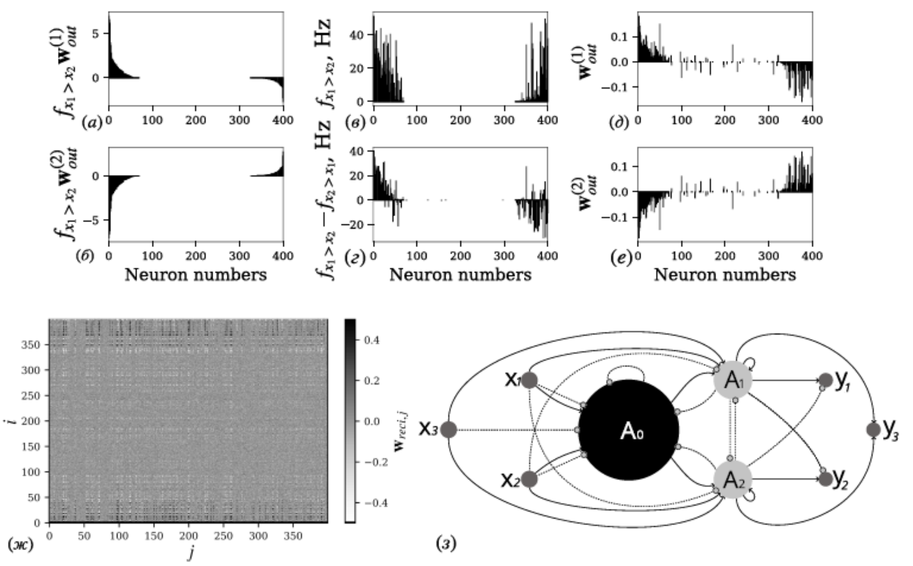


Рис. 5. (а) Гистограмма распределения величины $f_i w_{out,i}^{(1)}$, характеризующей степень участия нейронов в величине выхода y_1 при $\bar{x}_1 > \bar{x}_2$. (б) Аналогичная гистограмма для $f_i w_{out,i}^{(2)}$ для выхода y_2. (в) Распределение средних частот нейронов при соотношении входов $\bar{x}_1 > \bar{x}_2$. (г) Разница между частотами нейронов в случае $\bar{x}_1 > \bar{x}_2$ и $\bar{x}_1 < \bar{x}_2$. (д) Выходные веса $w_{out,i}^{(1)}$. (е) Выходные веса $w_{out,i}^{(2)}$. (ж) Матрица рекуррентных весов $\mathbf{W}_{\text{rec}}$ после обучения. (з) Схема групп нейронов, которые возникают после обучения, и их связей между собой, со входами и выходами. Стрелками отображены возбуждающие (положительные) связи. Линиями с серыми точками отображены подавляющие (отрицательные) связи.

5. Заключение

В работе реализована модель на основе LIF-нейронов, которая обучается выполнять когнитивную задачу двухальтернативного выбора, которая основана на реальном биологическом эксперименте. Исследована точность такой модели в зависимости от размера сети, времени обучения, скорости обучения и характеристик входных стимулов, таких как входной шум и разность между средними значениями стимулов. Показано, что в процессе обучения происходит выделение трех групп нейронов. Две группы отвечают за два входа и входные стимулы различным образом воздействуют на данные группы, что приводит к определенному ответу (решению). Установлен механизм принятия решения с помощью анализа траекторий модельной системы в плоскости первых двух главных компонент.

Литература

1. Ju¨rgen Schmidhuber. Deep learning in neural networks: An overview. Neural networks, 61:85–117, 2015.
2. Yann LeCun, Yoshua Bengio, and Geoffrey Hinton. Deep learning. nature (2015). May; 521 (7553): 436 10.1038/nature14539, 2015.
3. Richards B. A., Lillicrap T. P., Beaudoin P., Bengio Y., Bogacz R., Christensen A., Clopath C., Costa R. P., de Berker A., Ganguli S. and others A deep learning framework for neuroscience. Nature neuroscience, 22(11):1761–1770, 2019.
4. Marblestone A. H., Wayne G., Kording K. P. Toward an integration of deep learning and neuroscience. Frontiers in computational neuroscience, 10:94, 2016.
5. Sander M Bohte, Joost N Kok, and Johannes A La Poutr´e. Spikeprop: backpropagation for networks of spiking neurons. In ESANN, pages 419–424, 2000.
6. D. Sussillo, L. F. Abbott. Generating coherent patterns of activity from chaotic neural networks. Neuron, 63(4):544–557, 2009.
7. W. Nicola, C. Clopath. Supervised learning in spiking neural networks with force training. Nature communications, 8(1):1–15, 2017.
8. H. F. Song, G. R. Yang, X.-J.Wang. Reward-based training of recurrent neural networks for cognitive and value-based tasks. Elife, 6: e21492, 2017.
9. Pugavko M. M., Maslennikov O. V., Nekorkin V. I. Dynamics of spiking map-based neural networks in problems of supervised learning. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 90:105399, 2020.
10. Pugavko M. M., Maslennikov O. V., Nekorkin V. I. Dynamics of a network of map-based model neurons for supervised learning of a reservoir computing system. Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика, 28(1):77-89, 2020.
11. G. Bellec, F. Scherr, A. Subramoney, E. Hajek, D. Salaj, R. Legenstein, W. Maass. A solution to the learning dilemma for recurrent networks of spiking neurons. Nature communications, 11(1):1–15, 2020.
12. M. Davies, N. Srinivasa, T.-H. Lin, G. Chinya, Y. Cao, S. H. Choday, G. Dimou, P. Joshi, N. Imam, S. Jain, et al. Loihi: A neuromorphic manycore processor with on-chip learning. Ieee Micro, 38(1):82–99, 2018.
13. Масленников О.В., Пугавко М.М., Щапин Д.С., Некоркин В.И. Нелинейная динамика и машинное обучение рекуррентных спайковых нейронных сетей. Успехи физических найк, принята к публикации.
14. Lapicque. Recherches quantitatives sur l?excitation electrique des nerfs traitee commeune polarization. J. Physiol. Pathol. Generale.
15. K. H. Britten, M. N. Shadlen, W. T. Newsome, J. A. Movshon. The analysis of visual motion: a comparison of neuronal and psychophysical performance. Journal of Neuroscience, 12(12):4745–4765, 1992.

ДИАГНОСТИКА СИНУСОВОГО РИТМА И МЕРЦАТЕЛЬНОЙ АРИТМИИ СРЕДСТВАМИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА[1*]

Д.М. Родионов, Д.А. Карчков, В.А. Москаленко, А.В. Никольский, Г.В. Осипов, Н.Ю. Золотых

Нижегородский государственный университет имени Н. И. Лобачевского

В статье описывается методика применения нейронных сетей для анализа сигнала электрокардиограммы. В частности, рассматривается детектирование в сигнале ЭКГ большой длительности, комплексов, классифицируемых специалистами как сигнал с превалированием синусового ритма и фибрилляции предсердий (мерцательной аритмии).

Ключевые слова: анализ сигнала электрокардиограммы, искусственный интеллект в медицине, синусовый ритм, фибрилляция предсердий, мерцательная аритмия.

1. Введение

Согласно официальному докладу Всемирной организации здравоохранения, по состоянию на 2016 год, от сердечно сосудистых заболеваний умерло 17,9 миллионов человек, что составляет 31 процент всех случаев смерти в мире [6]. 85 процентов этих смертей произошло в результате сердечного приступа и инсульта. В России тенденция, связанная с заболеванием сердечно-сосудистой системы не утешительная, и ежегодно число заболевших неуклонно растёт, как и число смертей. Чаще всего смертельный исход наступает у людей с запущенными случаями заболеваний.

На сегодняшний день, электрокардиограмма – это единственный биологический сигнал, который наиболее полно отображает состояние сердечной мышцы. Базируясь на нём, врач способен определить наличие или отсутствие патологий в работе сердца. Однако, даже опытным врачам, порой, не удаётся правильно интерпретировать сигнал, упуская из виду мелкие, но важные маркеры заболеваний.

Важным моментом в анализе сигнала ЭКГ является детектирование и локализация синусового ритма и фибрилляции предсердий [5]. Наличие синусового ритма у исследуемого пациента говорит о корректной последовательности кардиологических циклов и отсутствии патологических возбуждений в сердечной мышце. Отсутствие синусового ритма на ЭКГ свидетельствует о возможном наличие таких патологий, как аритмия, тахикардия, брадикардия, ригидный синусовый ритм. Фибрилляция предсердий характеризуется хаотическим возникновением электрических импульсов в предсердиях, а бесконтрольное протекание этого заболевания чаще всего приводит к развитию хронической сердечной недостаточности и острому нарушению мозгового кровообращения.

Разработанная нами система [1, 8] поддержки принятия решений для врачей кардиологического профиля нацелена на предоставления полной, персонализированной информации по исследованию пациента, что позволит не упустить из вида даже редко встречаемые патологии. Один из модулей разработанной системы, описанный в рамках данного исследования, специализируется на детекции синусового ритма и мерцательной аритмии.

[1*] Исследование выполнено при поддержке Минобрнауки России (от 14.09.2021 № БК-П/23), проект FSWR-2021-013

2. Разработка модели

2.1 Описание данных

В качестве обучающей выборки использовались данные из открытых источников. За основу были взяты следующие наборы данных, вся информация о которых содержится в таблице 1.

Таблица 1. Используемые данные для обучения нейронной сети

№	База данных	Кол-во записей	Отведений	Частота	Продолжительность
1	European ST-T Database	79	2	250 Гц	6 дней 12 часов
2	Long Term AF Database	84	2-3	250 Гц	78 дней 40 минут
3	MIT-BIH Arrhythmia Database	48	2	360 Гц	1 день
4	MIT-BIH Atrial Fibrillation Database	25	2	250 Гц	9 дней 7 часов
5	MIT-BIH Noise Stress Test Database	15	2	360 Гц	7 дней 30 минут
Сумма		**251**	**2-3**		**94 дня 21 час**

Исходная выборка имеет разнородный характер. В частности, сигналы имеют различные частота и разное число отведений. Основная сложность в предобработке данных заключается в уравнивании частот рассматриваемых сигналов, так как в наборах встречаются сигналы с разным семплированием: 250 Гц и 360 Гц. Целевая диагностическая система адаптирована под диагностику сигналов с частотой 500 герц, поэтому необходимо достроить сигналы обучающей выборки до корректной частоты. Для решения этой задачи использовался кубический сплайн.

Для определения принадлежности сигнала к определённому ритму, была построена маска экземпляра выборки. В данной маске каждой единице сигнала был поставлен в соответствие ритм, которому она принадлежит: синусовый ритм, фибрилляция предсердий и иной ритм.

В таблице 2 содержится информацию о доли каждого класса в обучающей выборке. Из таблицы видно, что интересующие нас классы хорошо сбалансированы.

Таблица 2. Информация о классах предсказания

№	Класс	Продолжительность	Процент
1	Синусовый ритм	42 дня 9 часов	44.6%
2	Фибрилляция предсердий	43 дня	45.4%
3	Другой ритм	9 дней 12 часов	10%

Сигналы ЭКГ различных отведений рассматривались независимо, однако разделение на обучающую и тестовую выборки было осуществлено таким образом, чтобы все отведения одной ЭКГ принадлежали одной и той же выборки: либо тестовой, либо обучающей. До разбиения данные были перемешаны, чтобы избежать ситуации чрезмерного превалирования в обучающей и тестовой выборки одного класса над другим, и обеспечить корректные результаты на этапе тестирования модели. Разбиение на выборки было сделано в следующем процентном соотношении: 70% обучающих данных и 30% тестовых.

2.2 Описание архитектуры

Для решения поставленной задачи использовалась архитектура, подобная U-Net для сегментации [4]. Размер входного сигнала не имеет значения, поэтому условно обозначим длину электрокардиограммы как N.

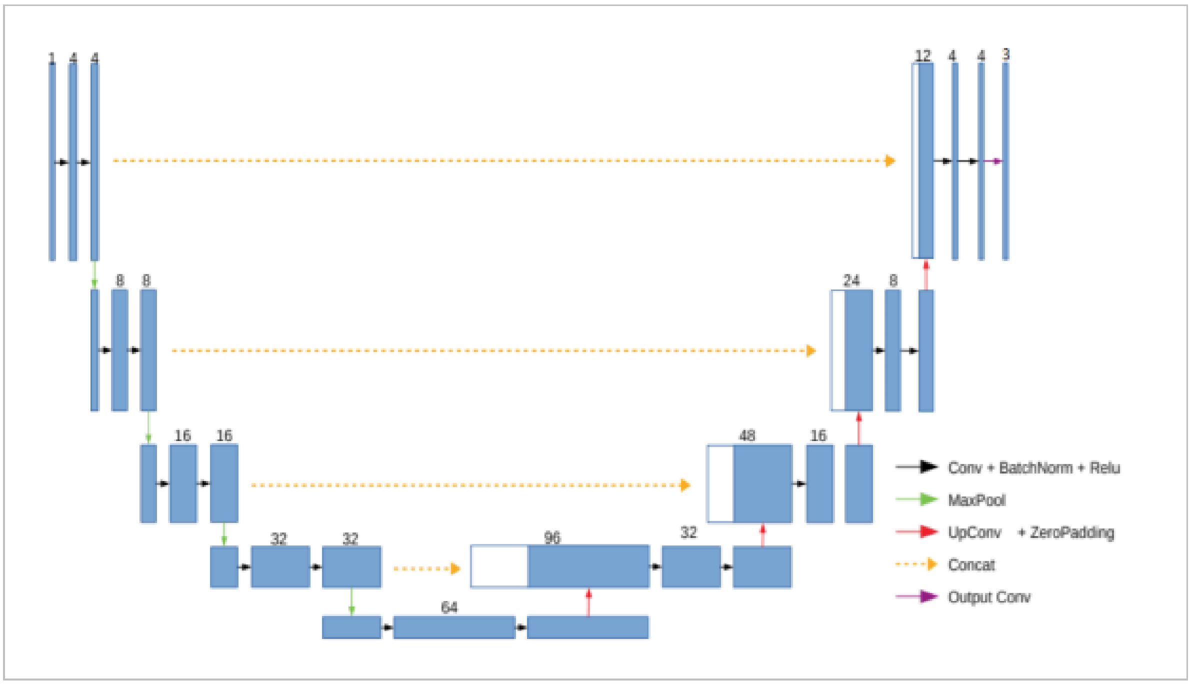


Рис. 1. Архитектура нейронной сети

При определении ритма на обрабатываемом участке ЭКГ необходимо ориентироваться на большую окрестность этого участка. Поэтому в архитектуре нейронной сети для определения типа ритма важно, чтобы размер рецептивного поля был достаточно большим. Рецептивное поле – минимальный размер окрестности одной точки, которой достаточно для предсказания нейронной сети класса для текущей точки. Рецептивное поле определяется размером ядра свертки, параметром stride, а также размером операции MaxPooling.

Опишем подробно, какие слои содержит предлагаемая нейронная сеть. Нейронная сеть состоит из трех основополагающих частей:

1. **Encode**. Представляет из себя 4 слоя, каждый из которых включает две одномерные свертки с нормализацией и функцией активации ReLU. Эти слои соединены операциями MaxPooling.
2. **Decode**. Представляет из себя 4 слоя, каждый из которых включает две одномерные свертки с нормализацией и функцией активации ReLU. Эти слои соединены операциями deconvolution. Такая операция, в отличии от прямой свертки, осуществляет сначала расширение карты признаков, а затем стандартное применение прямой свертки. Для соответствия размерностей выполняется операция padding.
3. **Skip – Connection**. Представляет из себя добавление соединений между непоследовательными слоями нейронной сети и используется, как слияние двух карт признаков между этими слоями. Одна из целей использования таких слоев заключается в устранении проблемы затухания градиентов, увеличивая тем самым скорость обучения.

2.3 Матрица рассогласования

После обучения нейронной сети одним из критериев качества является матрица рассогласования (confusion matrix). Порядок такой матрицы определяется количеством классов, которые использовались для обучения. Данная матрица показывает все типы ошибок при классификации нейронной сети. По строкам матрицы записаны истинные значения классов, по столбцам –

предсказанные. Так, например, элемент a_{12} показывает количество точек, разметка которых принадлежит первому классу (синусовый ритм), а нейронная сеть выдала результат, что данная точка принадлежит второму классу (фибрилляция предсердий). Соответственно, идеальная ситуация имеет место, когда матрица близка к диагональной.

Матрица рассогласования для всей тестовой выборки в процентном соотношении представлена в таблице 3.

Таблица 3. Матрица рассогласования на тестовой выборке

		Предсказанный класс (%)		
Истинный класс(%)		Синусовый ритм	Фибрилляция предсердий	Другой ритм
	Синусовый ритм	43.71295	0.444277	0.689477
	Фибрилляция предсердий	3.380451	44.398046	1.011522
	Другой ритм	2.88124	0.205336	3.276701

Видим, что общая доля ошибок – 8.3%, основная часть из которых приходится на синусовый ритм (5%). Что касается фибрилляции предсердий, то суммарная ошибка меньше 1%.

3. Заключение

Благодаря правильно подобранной архитектуре нейронной сети и внушительному размеру сбалансированной обучающей выборки, обученная модель имеет высокую точность при классификации сигнала электрокардиограммы с синусовым ритмом и фибрилляцией предсердий. Девяносто один процент верных предсказаний позволяет использовать данную модель на практике, для анализа холтеровских мониторов, длительность сигнала которых превышает одни сутки. Для использования модели в анализе коротких сигналов ЭКГ (10 секунд – 10 минут) необходимо расширить обучающую выборку.

Для дальнейшего повышения качества модели необходимо проверить ошибочно классифицированные электрокардиограммы на предмет правильности установленного медицинского диагноза, проверить качество используемого сигнала, и, при необходимости, исправить проблемные экземпляры выборки.

На сегодняшний день модель подготавливается к интеграции в общую систему диагностики [8] для обработки длительных сигналов ЭКГ с последующей локализацией ритмов. Интеграция производится под контролем медицинских специалистов.

Литература

1. Moskalenko, V., Zolotykh, N., & Osipov, G. (2019, October). Deep learning for ECG segmentation. In international conference on Neuroinformatics (pp. 246-254). Springer, Cham.
2. Kalyakulina A. I. et al. Finding morphology points of electrocardiographic-signal waves using wavelet analysis //Radiophysics and Quantum Electronics. – 2019. – Т. 61. – №. 8. – С. 689-703.
3. Sereda I. et al. ECG segmentation by neural networks: Errors and correction //2019 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN). – IEEE, 2019. – С. 1-7.
4. Barkau R. L. UNET: One-dimensional unsteady flow through a full network of open channels. User's manual. – Hydrologic Engineering Center Davis CA, 1996.
5. Holmqvist F. et al. Atrial fibrillatory rate and sinus rhythm maintenance in patients undergoing cardioversion of persistent atrial fibrillation //European heart journal. – 2006. – Т. 27. – №. 18. – С. 2201-2207.
6. World Health Organization et al. WHO global disability action plan 2014-2021: Better health for all people with disability. – World Health Organization, 2015.

7. Никольский А. В. и др. Эффективность диагностики сердечно-сосудистых заболеваний в формате специализированной службы автоматического теле-мониторинга с применением программно-аппаратного комплекса «Киберсердце» //Уральский медицинский журнал. – 2020. – №. 7. – С. 64-69.
8. Москаленко В. А. и др. Программный комплекс" Киберсердце-Диагностика" для автоматического анализа электрокардиограмм с применением методов машинного обучения //Современные технологии в медицине. – 2019. – Т. 11. – №. 2.

ОГРАНИЧЕНИЯ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ОБНАРУЖЕНИЯ КОМПЬЮТЕРНЫХ АТАК, ОБУЧЕННЫХ НА ПУБЛИЧНЫХ НАБОРАХ ДАННЫХ

Д.А. Рыболовлев, В.Е. Салимоненко

Академия ФСО России, г. Орел

В работе обсуждаются вопросы построения систем обнаружения компьютерных атак на основе применения методов машинного обучения. Подчеркивается важность этапа выбора исходных данных для обучения. На примере одного из наиболее цитируемых в мире общедоступных наборов данных – CICIDS 2017 – рассматриваются ошибки сбора и разметки данных, снижающие качество и ограничивающие практическое применение моделей, обученных на публичных наборах данных. Отмечается необходимость проведения обязательной верификации данных для обучения и предъявления требования возможности верификации к публикуемым общедоступным наборам данных.

Ключевые слова: информационная безопасность, система обнаружения атак, машинное обучение, набор данных, перенос обучения, сетевой трафик, компьютерная атака.

1. Введение

Одним из перспективных подходов к обнаружению модифицированных и/или ранее неизвестных компьютерных атак является использование несигнатурных (эвристических) анализаторов [1]. Эвристические методы обнаружения атак позволяют при корректной формализации задачи на основе некоторого набора признаков отнести наблюдаемую последовательность событий безопасности (состояний объекта защиты, пакетов сетевого трафика и т.п.) к классу нормальных или вредоносных (аномальных) [2].

При построении эвристических анализаторов систем обнаружения сетевых атак широкое применение находят современные методы машинного обучения, позволяющие выявлять ранее неизвестные закономерности в анализируемых данных. Обобщенная схема реализации технологии машинного обучения с учителем включает этапы сбора и предобработки исходных данных для обучения (размеченного сетевого трафика), отбора признаков и оценки их значимости, обучения модели и подбора гиперпараметров, апробации и оценки качества классификации [3]. Последующее практическое применение полученного решения подразумевает использование предобученной модели машинного обучения для обнаружения сетевых компьютерных атак в защищаемой сети.

Достаточная интерпретируемость широко распространенных моделей машинного обучения позволяет применить к их практическим реализациям известный в информатике принцип «мусор на входе, мусор на выходе» и подчеркнуть при этом важность использования при обучении адекватных, аккуратно размеченных данных. Ввиду объективной сложности самостоятельного сбора обучающих данных одним из возможных вариантов является использование общедоступных, публичных наборов данных. Кроме того, обучение и тестирование качества модели на публичном наборе данных позволяет сравнить полученные результаты с результатами других исследователей в одинаковых условиях, а обучение на нескольких различных наборах данных позволяет избежать проблемы переобучения модели [4].

Однако при практическом использовании моделей обнаружения компьютерных атак, обученных на публичных наборах данных, необходимо принимать во внимание факт отсутствия гарантий достоверности общедоступных данных и наличия в них возможных скрытых ошибок.

В настоящем исследовании на примере общедоступного набора данных CICIDS 2017 [5] – одного из наиболее цитируемых в работах, посвященных построению моделей обнаружения сетевых компьютерных атак [4, 6–8] – рассматриваются ошибки сбора и разметки данных, снижающие качество и ограничивающие практическое применение моделей, обученных на публичных наборах данных.

2. Исходные данные для эксперимента

Набор данных CICIDS 2017 подготовлен Канадским институтом кибербезопасности (Canadian Institute for Cybersecurity) по результатам анализа сетевого трафика в изолированной среде, в которой моделировались действия 25 легальных пользователей, а также вредоносные действия нарушителей. Набор объединяет более 50 Гб «сырых» данных в формате PCAP и включает 8 файлов данных в формате CSV, содержащих размеченные сетевые сессии с выделенными признаками в разные дни наблюдения. Краткое описание файлов и количественный состав набора данных представлены в таблицах 1, 2.

Таблица 1. Описание файлов набора данных CICIDS 2017

№	Название файла	Содержащиеся атаки
1	Monday-WorkingHours.pcap_ISCX.csv	Benign («чистый», «нормальный» трафик)
2	Tuesday-WorkingHours.pcap_ISCX.csv	Benign, FTP-Patator, SSH-Patator
3	Wednesday-workingHours.pcap_ISCX.csv	Benign, DoS GoldenEye, DoS Hulk, DoS Slowhttptest, DoS slowloris, Heartbleed
4	Thursday-WorkingHours-Morning-WebAttacks.pcap_ ISCX.csv	Benign, Web Attack – Brute Force, Web Attack – Sql Injection, Web Attack – XSS
5	Thursday-WorkingHours-Afternoon-Infilteration.pcap_ ISCX.csv	Benign, Infiltration
6	Friday-WorkingHours-Morning.pcap_ISCX.csv	Benign, Bot
7	Friday-WorkingHours-Afternoon-PortScan.pcap_ISCX.csv	Benign, PortScan
8	Friday-WorkingHours-Afternoon-DDos.pcap_ISCX.csv	Benign, DDoS

Таблица 2. Количественный состав набора данных CICIDS 2017

№	Тип записи	Количество записей
1	BENIGN	2359087
2	DoS Hulk	231072
3	PortScan	158930
4	DDoS	41835
5	DoS GoldenEye	10293
6	FTP-Patator	7938
7	SSH-Patator	5897
8	DoS slowloris	5796
9	DoS Slowhttptest	5499
10	Bot	1966
11	Infiltration	36
12	Heartbleed	11
13	Web Attack – Brute Force	1507
14	Web Attack – XSS	652
15	Web Attack – SQL Injection	21

Далее при проведении экспериментов подробно рассматривался файл Thursday-WorkingHours-Morning-WebAttacks.pcap_ISCX.csv, содержащий чистый трафик и размеченные сетевые сессии с признаками веб-атак («Web Attack – Brute Force», «Web Attack – Sql Injection», «Web Attack – XSS»). Указанная подвыборка данных включает 458968 записей, из которых 2180 относятся к веб-атакам, остальные – к нормальному трафику. Каждая запись в наборе данных представляет собой сетевую сессию и характеризуется 84 признаками.

3. Проверка корректности сбора и разметки публичного набора данных

Для проверки корректности сбора и разметки набора данных CICIDS 2017 были воспроизведены эксперименты [6, 8]. По результатам обработки исходных PCAP-файлов с захваченными пакетами набора данных CICIDS 2017 собственным программным средством выделения признаков сетевых сессий были обнаружены расхождения полученных данных и данных набора CICIDS 2017. Дальнейшие исследования показали наличие следующих ошибок и неточностей в исходном коде инструмента CICFlowMeter [9], который использовался для выделения сетевых сессий из наблюдаемого трафика и расчета значений признаков при формировании набора данных CICIDS 2017:

1. Дублирование признака «Fwd Header Length» (суммарная длина заголовков пакетов в прямом направлении): признаки «Fwd Header Length» и «Fwd Header Length.1» являются идентичными. На этапе предобработки данных необходимо исключить признак «Fwd Header Length.1» из обучающей выборки.
2. Некорректное завершение сессий – при первом появлении в сессии пакета с флагом FIN. При этом возможные два следующих пакета с флагами FIN ACK и ACK, фактически относящиеся к первой незавершенной сессии, попадают во вторую сессию.
3. В исходном коде инструмента CICFlowMeter установлено значение таймаута для сессии «flowTimeout», равное 120 секундам. Однако в описании набора данных CICIDS 2017 и в документации инструмента указывается другое значение таймаута – 600 секунд.
4. Ошибка при расчете длины TCP пакета – длина дополнения (padding) фрейма Ethernet прибавляется к длине TCP пакета.
5. Ошибки при расчетах значений признаков «Packet Length Mean» (средняя длина полезной нагрузки в пакетах всего потока), «Packet Length Std» (среднеквадратическое отклонение значения длины пакета), «Packet Length Variance» (дисперсия длины пакета) и «Average Packet Size» (средний размер пакета, совпадает по определению с признаком «Packet Length Mean»). Ошибка связана с двойным учетом первого пакета в структуре данных со статистикой длин пакетов сетевой сессии.
6. Признаки «Packet Length Mean» и «Average Packet Size» должны иметь одинаковое значение, однако по причине логической ошибки имеют различные значения. Ошибка состоит в том, что при завершении сессии по таймауту граничный пакет попадает в статистику длин пакетов, а счетчик количества пакетов (знаменатель в выражении для расчета значения признаков «Packet Length Mean» и «Average Packet Size») увеличивается только для одного из признаков.
7. Неочевидная логика анализа subflows, вероятно содержащая ошибки в расчетах.

Отчет об ошибках направлен авторам набора данных в марте 2021 года, в том числе в виде issue в репозиторий с исходным кодом инструмента CICFlowMeter (https://github.com/ahlashkari/CICFlowMeter/issues/111), однако на момент публикации настоящего исследования (октябрь 2021 года) ошибки не исправлены.

При проверке разметки сессий, содержащих признаки атак, обнаружены следующие особенности:

1. Генерируемые веб-атаки имеют короткую длительность: не более 40 минут на каждую группу. Это свидетельствует о том, что при использовании генераторов атак не изменялся параметр задержки (не реализован класс «медленных» веб-атак).
2. При генерации XSS-атак в наборе данных отмечены адреса только двух участвующих сторон: источника атаки и атакуемого веб-приложения. Реализация XSS-атаки без учета третьей стороны носит ограниченный характер.
3. В описании набора данных CICIDS 2017 не указано, по какому протоколу осуществлялся доступ к атакуемому веб-приложению. Анализ исходного PCAP-файла позволяет установить, что использовался протокол HTTP. Отсутствуют размеченные сессии для протокола HTTPS, доля трафика которого в реальных сетях существенно превышает долю трафика протокола HTTP.

4. В описании набора данных CICIDS 2017 отсутствует информация о типе и настройках используемого веб-сервера. Вместе с тем различные веб-серверы имеют различные настройки по умолчанию, что приводит к существенным различиям в профилях сетевого трафика при взаимодействии с этими серверами и, соответственно, к различиям в составе формируемых сетевых сессий и значениях рассчитанных признаков сессий [10].

4. Ограничения практического применения моделей, обученных на публичных данных

Невыполнение требований разнородности конфигурации моделируемой сети, используемого программного обеспечения, генерируемого пользовательского трафика и трафика атак, настроек сетевого оборудования и др. при сборе обучающих наборов данных неизбежно приводит к снижению обобщающей способности моделей, обученных на таких данных.

При генерации трафика веб-атак использование соответствующих инструментов с настройками по умолчанию обеспечивает наличие в наборе данных лишь сетевых сессий с малыми значениями межпакетных интервалов и большими значениями скорости потока, что не соответствует реализациям «медленных» веб-атак. Таким образом, на этапе обучения модель не сможет получить знаний о целом подклассе веб-атак, и потенциально будет обнаруживать такие атаки с неудовлетворительным качеством.

Ограниченная реализация отдельных классов атак (например, исключение третьей стороны из схемы атаки XSS) и включение соответствующих сетевых сессий в обучающие наборы данных приводит к построению моделей, неадекватных реальным условиям применения: таким моделям на этапе обучения не предъявлялись ключевые действия нарушителей и соответствующий размеченный сетевой трафик.

Отсутствие в наборе данных размеченного трафика для наиболее распространенных сетевых протоколов (например, HTTPS) делает модели, обученные на таких данных, ограниченно применимыми.

Ошибки в используемых инструментах выделения сетевых сессий и расчета значений признаков приводят к искажениям исходных данных и статистик для обучения моделей. Встраивание моделей, обученных на таких данных, в действующие системы и тракты обработки сетевого трафика с собственными инструментами выделения сетевых сессий, реализующими отличные алгоритмы расчета значений признаков, приведет к деградации качества классификации.

Отдельного внимания требуют вопросы соответствия физической структуры защищаемой сети и сети, в которой производился сбор сетевого трафика, а также настроек сетевого оборудования. В работе [11] отмечается невозможность практического применения в таких условиях модели, обученной на подвыборке веб-атак набора данных CICIDS 2017.

5. Заключение

Наличие ошибок в общедоступных инструментах выделения признаков является причиной возможных скрытых ошибок в создаваемых с их помощью наборах данных для обучения моделей обнаружения компьютерных атак. Обучение моделей на искаженных и/или ошибочных данных неизбежно приводит к снижению их обобщающей способности и качества обнаружения атак, существенно ограничивая возможности практического применения таких моделей.

При работе с конкретным набором данных обнаружение ошибок и других неточностей сбора и разметки возможно лишь при воспроизведении сопоставимых по сложности и трудоемкости исходных экспериментов, которые проводились авторами наборов данных. Такая задача подразумевает наличие у разработчика соответствующих экспертных знаний в области построения распределенных тестовых стендов, современных сетевых технологий, моделирования компьютерных атак и др.

Указанные в настоящем исследовании обстоятельства в отношении одного из наиболее цитируемых в мире общедоступных наборов данных подтверждают необходимость проведения обязательной верификации используемых данных для обучения моделей обнаружения компьютерных атак. Кроме того, рациональным представляется расширение перечня существующих требований к публикуемым наборам [4, 12] дополнительным требованием: предоставлять возможность верификации данных. Для выполнения верификации данных необходимо указывать в описании подробный порядок настройки тестовых стендов, последовательность сбора и разметки пользовательского трафика и трафика генерируемых атак.

В условиях отсутствия гарантий достоверности публичных наборов данных оправданными являются разработка своих собственных инструментов выделения сетевых сессий и расчета значений признаков с последующим сравнением результатов их работы на публичных наборах данных с результатами общедоступных инструментов.

Литература

1. Talabis M., McPherson R., et al. Information Security Analytics. Waltham: Elsevier, 2015. 166 p.
2. Рыболовлев Д. А., Горюнов М.Н., Рыболовлев А.А. Оценка применимости методов машинного обучения для обнаружения компьютерных атак // Информационные системы и технологии. 2020. № 6. С. 103–111.
3. Magan-Carrion R., Urda D., Diaz-Cano I., Dorronsoro B. Towards a Reliable Comparison and Evaluation of Network Intrusion Detection Systems Based on Machine Learning Approaches // Applied Sciences, 2020. 10(5). DOI: 10.3390/app10051775.
4. Ring M., Wunderlich S., Scheuring D. A Survey of Network-based Intrusion Detection Data Sets. URL: https://arxiv.org/pdf/1903.02460.pdf (дата обращения: 16.10.2021).
5. Intrusion Detection Evaluation Dataset (CICIDS2017). URL: https://www.unb.ca/cic/datasets/ids-2017.html (дата обращения: 16.10.2021).
6. Sharafaldin I., Lashkari A.H., Ghorbani Ali A. Toward Generating a New Intrusion Detection Dataset and Intrusion Traffic Characterization // Proceedings of the 4th International Conference on Information Systems Security and Privacy (ICISSP), 2018. P. 108-116.
7. Ghurab M., Al-gaphari G., Alshami F. A Detailed Analysis of Benchmark Datasets for Network Intrusion Detection System // Asian Journal of Research in Computer Science, 2021, 7(4). P. 14-33. DOI: 10.9734/AJRCOS/2021/v7i430185.
8. Kostas K. Anomaly Detection in Networks Using Machine Learning. URL: https://www.researchgate.net/publication/328512658 (дата обращения: 16.10.2021).
9. CICFlowmeter: a network traffic Bi-flow generator and analyzer for anomaly detection. URL: https://github.com/CanadianInstituteForCybersecurity/CICFlowMeter (дата обращения: 16.10.2021).
10. Clausen H., Flood R., Aspinall D. Traffic Generation using Containerization for Machine Learning. URL: https://arxiv.org/pdf/2011.06350.pdf (дата обращения: 16.10.2021).
11. Горюнов М.Н., Мацкевич А.Г., Рыболовлев Д.А. Синтез модели машинного обучения для обнаружения компьютерных атак на основе набора данных CICIDS2017 // Труды Института системного программирования РАН, 2020. Том 32, вып. 5, стр. 81-94. DOI: 10.15514/ISPRAS-2020-32(5)-6.
12. Gharib A., Sharafaldin I., Lashkari A.H., Ghorbani A.A. An Evaluation Framework for Intrusion Detection Dataset // International Conference on Information Science and Security (ICISS), 2016. DOI: 10.1109/ICISSEC.2016.7885840.

МОДЕЛЬ РЕГИОНАЛЬНОГО БИЗНЕСА В УСЛОВИЯХ КОНКУРЕНЦИИ

В.П. Савельев, Н.И. Сутягина

Нижегородский государственный инженерно-экономический университет

В работе исследуется модель функционирования предприятий малого бизнеса по предоставлению товаров и услуг населению региона при наличии в регионе крупных предприятий, продукция и услуги которых реализуются, в основном, за пределами данного региона. Модель предполагает наличие конкуренции между предприятиями малого бизнеса Получено условие существования и устойчивого функционирования предприятий малого бизнеса.

Ключевые слова: регион, предприятия малого бизнеса, динамическая система, состояние равновесия, линеаризация, фазовый портрет

Составим систему дифференциальных уравнений, позволяющую анализировать сферу услуг региона, трудоспособное население которого состоит из двух частей: первая часть работает в сфере услуг для населения региона (малый бизнес), множество предприятий такого типа обозначим X, вторая часть трудоспособного населения работает на внешний сервис, совокупность этих предприятий и организаций обозначим Y.

Пусть $x(t)$ – объем предоставляемых услуг (в денежном выражении) населению региона предприятиями X, $y(t)$ – объем произведенных товаров, и оказанных услуг предприятиями Y. Динамика изменения финансовых потоков задается с помощью системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dot{x} = -ax + \frac{bxy}{1+\varepsilon x}, \\ \dot{y} = R + dx - cy - \frac{bxy}{1+\varepsilon x}, \end{cases} \tag{1}$$

где (в единицу времени):

$ax -$ оплата труда работников регионального сервиса за вычетом их затрат на свой продукт;

$\frac{bxy}{1+\varepsilon x} -$ доход предприятий типа X от работников предприятий типа Y;

R – доход предприятий типа Y от реализации товаров и услуг вне данного региона;

$dx -$ доход предприятий типа Y от работников предприятий типа X;

$cy -$ оплата труда работников предприятий типа Y за вычетом их затрат на свой продукт и затрат на региональный сервис.

Фазовым пространством динамической системы (1) является квадрант

$$K = \{((x,y) \in R^2 : x \geq 0, y \geq 0\}.$$

При естественном предположении, что $a > d$, суммы денег $(a-d)x$ и cy тратятся на покупку товаров и услуг вне данного региона.

Заметим, что система (1) при $\varepsilon = 0$ исследована в работах [1, 2]. В данной работе предполагается, что при расширении сферы услуг регионального бизнеса происходит насыщение, то есть при увеличении x скорость прироста числа предприятий регионального бизнеса уменьшается вследствие усиливающейся конкуренции.

Динамическая система (1) имеет два состояния равновесия:

1) $(0, \frac{R}{c})$, 2) $\left(\frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac}, \frac{a}{b}(1+\varepsilon\frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac})\right)$.

$$\begin{cases} \dot{x} = \left(R\frac{b}{c} - a\right)x + 0\left(y - \frac{R}{c}\right), \\ \dot{y} = (d - R\frac{b}{c})x - c\left(y - \frac{R}{c}\right). \end{cases} \tag{2}$$

Собственные числа матрицы легко находятся: $\lambda_1 = R\frac{b}{c} - a, \lambda_2 = -c < 0$.

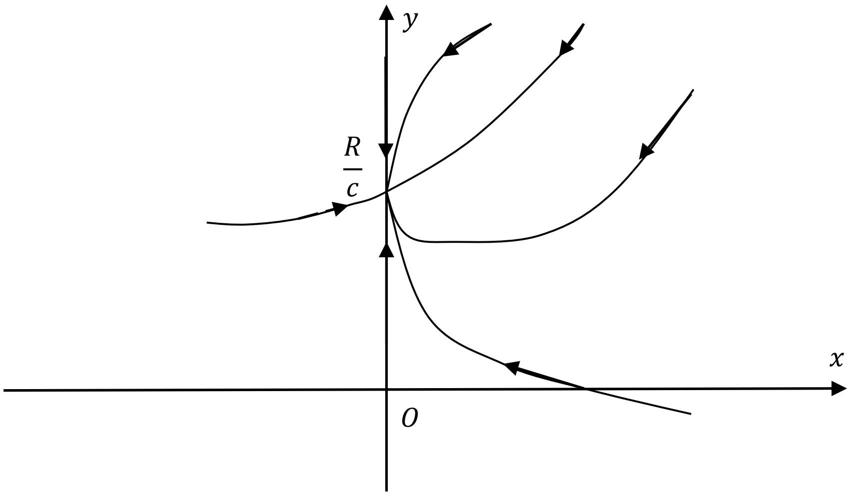


Рис. 1. Фазовый портрет системы (1) при условии $Rb - ac < 0$

Если предположить, что $Rb - ac < 0$, то состояние равновесия $(0, \frac{P}{c})$ будет устойчивым узлом**,** а второе состояние равновесия $\left(\frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac}, \frac{a}{b}(1 + \varepsilon\frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac})\right)$ будет расположено вне фазового пространства. Соответствующий фазовый портрет представлен на рисунке 1.

Предположим далее, что $Rb - ac > 0$, то есть внешние финансовые поступления R достаточно значительные. В этом случае оба состояния находятся в фазовом пространстве. Состояние равновесия $(0, \frac{R}{c})$ становится седлом. В окрестности второго состояния равновесия линеаризованная система имеет вид:

$$\begin{cases} \dot{x} = -\frac{\varepsilon a(Rb-ac)}{b(a-d)+\varepsilon Rb}(x - x^*) + \frac{(Rb-ac)}{(a-d)+\varepsilon R}(y - y^*), \\ \dot{y} = -\frac{b(a-d)^2-\varepsilon(Rbd-a^2c)}{b(a-d)+\varepsilon Rb}(x - x^*) - \frac{Rb-cd+\varepsilon Rc}{(a-d)+\varepsilon R}(y - y^*), \end{cases} \tag{3}$$

где введены обозначения $x^* = \frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac}, y^* = \frac{a}{b}(1 + \varepsilon x^*)$.

Уравнение для собственных значений матрицы линеаризованной системы имеет вид:

$$\lambda^2 + A\lambda + B = 0, \tag{4}$$

где $A = \frac{b(Rb-cd)+\varepsilon\left(Rbc+a(Rb-ac)\right)}{b(a-d)+\varepsilon Rb}, B = \frac{(Rb-ac)[b(a-d)^2+\varepsilon(Rb+ac)(a-d)+\varepsilon^2 Rac)]}{b[(a-d)+\varepsilon R]^2}$.

Поскольку $Rb - ac > 0, a > d$, то и $Rb - cd > 0$. Таким образом, коэффициенты A и B положительные, то есть, собственные значения либо оба действительные и отрицательные, либо комплексно – сопряженные с отрицательной действительной частью. Это значит, что состояние равновесия $\left(\frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac}, \frac{a}{b}(1 + \varepsilon\frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac})\right)$ является устойчивым узлом или фокусом. Соответствующий устойчивому фокусу фазовый портрет системы (1) представлен на рисунке 2.

Вывод: условие существования и устойчивости малого бизнеса $Rb - ac > 0$ не зависит от того, есть конкуренция ($\varepsilon > 0$) или нет ($\varepsilon = 0$), но уровень финансов малого бизнеса при наличии конкуренции в устойчивом состоянии равновесия $x^* = \frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac}$ будет меньше, чем при ее отсутствии. Соответственно, уровень финансов предприятий типа Y в устойчивом состоянии равновесия $y^* = \frac{a}{b}(1 + \varepsilon\frac{Rb-ac}{b(a-d)+\varepsilon ac})$ будет больше.

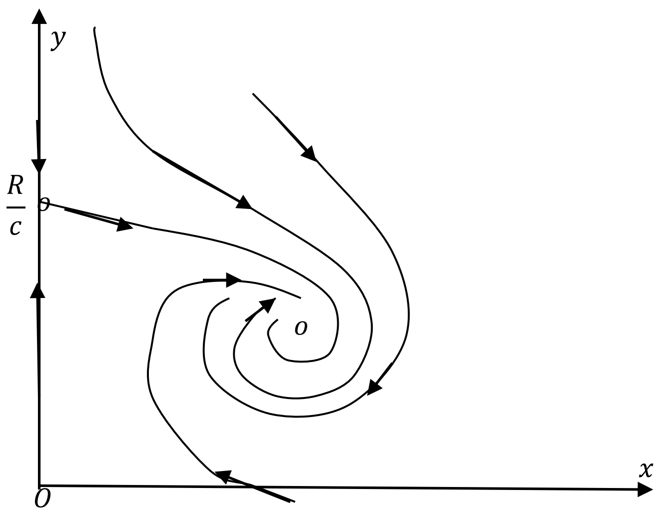


Рис. 2. Фазовый портрет с точкой устойчивости – фокусом

Литература

1. Савельев В.П., Сутягина Н.И., «Простые модели динамики малого бизнеса», Труды XX Международной конференции «Математическое моделирование и суперкомпьютерные технологии», г. Н. Новгород, ноябрь 2020 г., стр.329 – 332.

2. Савельев В.П., Сутягина Н.И., «Математические модели динамики регионального бизнеса», журнал «Проблемы информатики», №2, 2021, с. 49 – 58.

ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ДИФФУЗИИ ТРИГЛИЦЕРИДОВ В ЛИПИДНЫХ КАПЛЯХ

К.Н. Савина[1], Е.А. Самарина[1], А.А. Орешкин[2], О.С. Князева[2], С.И. Кисиль[2], И.В. Докукина[1], Е.А. Грачев[2]

[1]Саровский физико-технический институт НИЯУ МИФИ,
[2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

В данной работе представлено исследование характеристик процесса диффузии триглицеридов в однокомпонентной и двухкомпонентной средах методом молекулярного моделирования. В однокомпонентной среде были рассчитаны плотности и коэффициенты диффузии некоторых молекул триглицеридов, а также были построены радиальные функции распределения для определения агрегатного состояния вещества. В двухкомпонентной среде была исследована динамика переходного слоя между двумя типами триглицеридов, была построена зависимость ширины переходного слоя от времени и рассчитан коэффициент взаимной диффузии.

Ключевые слова: триглицериды, липидные капли, молекулярная динамика

1. Введение

Липидные капли - клеточные органеллы, отвечающие за хранение и гидролиз триглицеридов. В белых адипоцитах липидные капли могут достигать больших размеров и заполнять собой практически все пространство клетки. В зависимости от диеты липидный состав содержимого жировой капли может меняться. Можно предположить, что если при определенной диете в липидной капле преобладали триглицериды с короткоцепочечными жирными кислотами, то при резкой смене диеты будет возрастать концентрация триглицеридов с более длинными хвостами. Такие капли можно приближенно рассматривать как двухкомпонентные системы. Большие размеры липидных капель в адипоцитах позволяют рассматривать содержимое капли без учета ее мембраны – фосфолипидного монослоя. Таким образом, можно считать содержимое жировой капли одно- либо двухкомпонентной средой, в которой возможно перемешивание вследствие процессов диффузии [1].

2. Содержание

В данной работе предлагается исследование структуры, физических свойств и динамики переходного слоя между двумя типами триглицеридов с использованием полноатомного молекулярно-динамического моделирования [2].

2.1. Расчет плотности и коэффициента самодиффузии

При проведении исследования структуры и физических свойств глицеридов (в основном различных триглицеридов) и эфиров холестерола, использовался пакет LAMMPS[3]. Для обработки и визуализации расчётов использовались программы VMD и OVITO. Молекулы глицеридов конструировались с использованием программы AVOGADRO [4].

Для вычисления межатомных взаимодействий в исследуемой системе задавались соответствующие потенциалы. Силовые поля для молекул триглицеридов конструировались с использованием молекулярного силового поля Merck molecular force field [5] с помощью алгоритма автоматической параметризации малых молекул SwissParam [6].

Расчетный куб конструировался из молекул одного типа. Система приводилась в равновесие при постоянном объеме и температуре (NVT ансамбль). Для расчета плотности проводилось молекулярное моделирование уже сбалансированной системы при постоянном давлении и температуре (NPT ансамбль).

Коэффициент самодиффузии вычислялся из закона Эйнштейна-Смолуховского о связи среднеквадратичного смещения центральных атомов молекул (MSD) и коэффициента диффузии $\Delta r^2 = 6Dt$, где Δr – отклонение от начального положения молекулы.

В таблице 1 представлены рассчитанные коэффициенты диффузии для молекул триглицеридов.

Таблица 1. Рассчитанные коэффициенты диффузии для молекул триглицеридов

Триглицерид		Рассчитанная плотность [г/л]	Плотность из лит-ры [г/л]	Объем [нм^3]	Кол-во молекул (N)	Рассчитанный коэфф. диффузии (D)[м^2/с]	Т-ра плавления (T)	
Tributyrin	C4:0	1,01(37°C)	1,03(20°C)		4290	5,5e-11 (37°C)	-75°C	
Trilaurin	C12:0	0,898(70°C)	0,9	1124	1000	2.9e-11 (70°C)	46,29°C	[7]
Trimyristin	C14:0	0,88(70°C)	0,8848(70°C)	1367	1000	2.3e-11 (70°C)	57,35°C	[7]
Tripalmitin	C16:0	0,87(70°C)	0,87(70°C)	1477	1000	3.8e-11 (70°C)	65,45°C	[7]
Tristearin	C18:0	0,84(90°C)	0,85(90°C)	1675	1000	3.4e-11 (90°C)	72,67°C	[7]
Triolein	C18:1	0,912(37°C)	0,915(15°C)	1605	1000	7.5e-12 (37°C)	3,98°C	[7]
Trilinolenin	C18:3	0,914(37°C)	0,946	1585	1000	7.9e-12 (37°C)	-12,3°C	[8]
Trierucin	C22:1	0,905(37°C)	0,909	1921	1000	8.9e-12 (37°C)	29,78°C	[7]

2.2. Построение радиальной функции распределения

Радиальная функция распределения позволяет исследовать ближний порядок во взаимном расположении атомов или молекул в веществе. По ее форме можно судить о том, в каком агрегатном состоянии находится вещество.

Для исследования структуры систем, рассчитывались их радиальные функции распределения.

Для расчета радиальной функции распределения одна из молекул выделялась в качестве центра расширяющихся колец, а функция вычислялась по следующей формуле: $g(r) = \frac{N(r\pm\frac{\Delta r}{2})}{\Omega(r\pm\frac{\Delta r}{2})\rho}$. Затем находилось среднее по всем молекулам.

Результаты вычислений показали, что триглицериды при заданных температурах находятся в жидкой фазе.

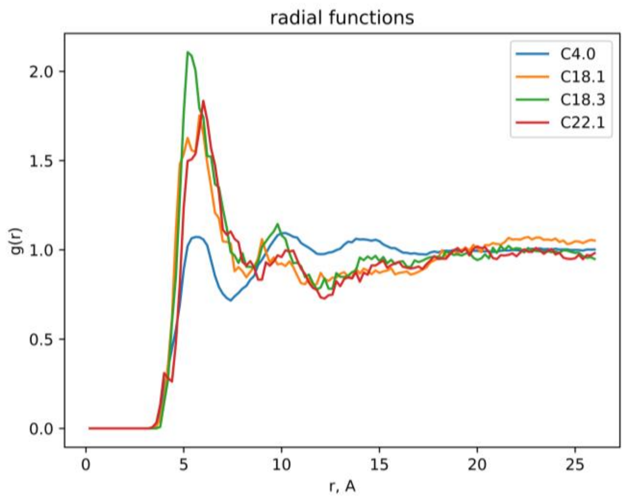


Рис. 1. Радиальная функция распределения для молекул триглицеридов

2.3. Исследование динамики переходного слоя в двухкомпонентной смеси триглицеридов

Мы исследовали взаимную диффузию двухкомпонентной системы на примере системы, состоящей из 1000 молекул триолеата (Tri-C18.1) и 4259 молекул трибутирата (Tri-C4.0). В начальный момент триглицериды не перемешаны, молекулы триолеата располагались в объеме при $z<0$, а трибутирата при $z>0$.

Мы наблюдали за эволюцией бинарной системы методом молекулярной динамики при постоянном объеме и температуре (310 K). Размер бокса составлял (130.8x123.1x242.3 [A]). Вычислялась зависимость концентрации веществ в процентном соотношении вдоль оси OZ. Это позволило вычислить коэффициент взаимной диффузии двух триглицеридов относительно друг друга. Также была рассчитана зависимость ширины переходного слоя от времени.

Результаты расчетов в пределах 65 нс показали полиноминальную зависимость ширины переходного слоя от времени, что говорит о взаимном перемешивании обоих типов молекул в рассматриваемой системе.

Результаты расчетов дают величину коэффициента взаимной диффузии триолеата и трибутирата, равную $(0.7-1)\cdot 10^{-11} \quad м^2/с$.

Таким образом,

– методом молекулярной динамики исследованы свойства однокомпонентных систем, состоящих из молекул триглицеридов;

– получены плотности и коэффициенты диффузии различных молекул триглицеридов;

– показано, что плотность различных молекул триглицеридов различна в зависимости их строения;

– для исследования структурных свойств среды, состоящей из молекул триглицеридов построены радиальные функции распределения, из которых видно, что триглицериды при заданных температурах находятся в жидкой фазе;

– методом молекулярной динамики исследована двухкомпонентная система, состоящая из двух типов молекул триглицеридов – трибутирата и триолеата;

– исследование графика зависимости ширины переходного слоя между двумя типами молекул указывает на полное взаимное перемешивание компонент.

Литература

1. Olzmann, J.A., Carvalho, P. Dynamics and functions of lipid droplets. Nat. Rev. Mol. Cell Biol. 20, 137–155 (2019).
2. Izrailev S. et al. Steered Molecular Dynamics. In: Deuflhard P., Hermans J., Leimkuhler B., Mark A.E., Reich S., Skeel R.D. (eds) Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, vol 4. Springer, Berlin, Heidelberg (1999).
3. Plimpton S., Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, J Comp Phys, 117, 1-19 (1995).
4. Marcus D Hanwell, Donald E Curtis, David C Lonie, Tim Vandermeersch, Eva Zurek and Geoffrey R Hutchison; “Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform” Journal of Cheminformatics 2012, 4:17.
5. Halgren, T. Merck molecular force field. I. Basis, form, scope, parameterization, and performance of MMFF94. Journal of Computational Chemistry, 1996, v17, p. 490-519.
6. Grosdidier, O. Michielin, SwissParam, a Fast Force Field Generation Tool For Small Organic Molecules, J. Comput. Chem, 2011, 32(11), 2359-68.
7. Knothe, G., Dunn, R.O. A Comprehensive Evaluation of the Melting Points of Fatty Acids and Esters Determined by Differential Scanning Calorimetry. J Am Oil Chem Soc 86, 843–856 (2009). https://doi.org/10.1007/s11746-009-1423-2.
8. Berry, S. (2009). Triacylglycerol structure and interesterification of palmitic and stearic acid-rich fats: An overview and implications for cardiovascular disease. Nutrition Research Re-views, 22(1), 3-17. doi:10.1017/S0954422409369267.

МЕТОД ПОПЕРЕЧНЫХ СЕЧЕНИЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ТРАНСФОРМАЦИИ МОД В СВЕРХРАЗМЕРНЫХ НЕРЕГУЛЯРНЫХ ВОЛНОВОДАХ[1*2*]

Е.С. Семенов, А.С. Зуев

ФИЦ Институт прикладной физики РАН

В работе рассматривается алгоритм расчёта трансформации мод на нерегулярностях круглого волновода. Алгоритм основан на модификации метода поперечных сечений, в котором учитываются соседние радиальные моды *TE* и *TM* типов СВЧ полей.

Ключевые слова: метод поперечных сечений, трансформация поперечных мод, нерегулярный волновод, гиротрон.

1. Введение

Для анализа неоднородных многомодовых волноводов (резонаторов) в ряде случаев недостаточно использовать лишь одномодовую модель [1]. В таких случаях необходимо учитывать трансформацию рабочей моды с поперечными индексами (m, p) в *TE* и *TM* моды с несколькими соседними радиальными индексами. В частности, это актуально при разработке мощных гиротронов. Средняя мощность выходного излучения таких приборов может превышать 1 МВт. Нерегулярные участки электродинамической системы гиротрона неизбежно приводят к трансформации мод. В этом случае актуальной становится задача минимизации коэффициентов переизлучения рабочей в соседние моды. Даже незначительный уровень переизлучения (доли процента от мощности рабочей моды) может привести к сильному нагреву систем преобразования и транспортировки выходного волнового пучка. Кроме того, точный расчёт структуры ВЧ-колебаний в резонаторе гиротрона при оптимизации систем выхода даёт возможность улучшить параметры волнового пучка. Учёт трансформации мод также позволяет определить уровень мощности, направленный в сторону системы катод-анод.

Поскольку в большинстве случаев регулярная часть резонатора гиротрона имеет вид цилиндра с круглым сечением, далее рассматриваются азимутально-симметричные волноводы. В этом случае достаточно учесть трансформацию мод с одним и тем же азимутальным индексом m. В данной работе рассматривается метод поперечных сечений, предложенный в [2,3] в модификации, изложенной в [4,5].

2. Постановка задачи

Поперечные электрические и магнитные поля раскладываются по системе мод:

$$\vec{E}_{\perp}(\vec{r},z) = \frac{1}{\kappa}\sum_{j=1}^{\infty}\mathcal{E}_j^H(z)\vec{E}_{\perp,j}^H(\vec{r},z) - i\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{\kappa_{\parallel,j}^E(z)}\mathcal{E}_k^E(z)\vec{E}_{\perp,k}^E(\vec{r},z),$$

$$\vec{H}_{\perp}(\vec{r},z) = \frac{1}{\kappa}\sum_{k=1}^{\infty}\mathcal{H}_k^E(z)\vec{H}_{\perp,k}^E(\vec{r},z) - i\sum_{j=1}^{\infty}\frac{1}{\kappa_{\parallel,j}^H(z)}\mathcal{H}_j^H(z)\vec{H}_{\perp,j}^H(\vec{r},z),$$

где $\vec{E}_{\perp,j}^H, \vec{E}_{\perp,j}^E, \vec{H}_{\perp,j}^H, \vec{H}_{\perp,j}^E$ - поперечные структуры электрических и магнитных полей для *TE* и *TM* мод в регулярных волноводах сравнения, т.е. в регулярных волноводах, сечения которых совпадают с мгновенными сечениями исследуемого нерегулярного волновода.

[1*] Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской федерации, соглашение №075-02-2020-1632.

[2*] Авторы выражают благодарность С.Е. Фильченкову за предоставленные отлаженные библиотечные процедуры нахождения определителя и собственного вектора, а также А.С. Сергееву за ценные советы и внимание к работе.

Как правило, достаточно принимать во внимание лишь небольшое количество из всего ряда мод. Ограничимся далее рассмотрением N_H мод TE типа и N_E мод TM типа с радиальными индексами p_j и p_k соответственно. Таким образом, всего учитываются $N = N_H + N_E$ мод.

Продольные структуры полей определяются системой $2N$ уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathcal{E}_j^H}{dz} = \kappa\mathcal{H}_j^H - \displaystyle\sum_{a=1}^{N_H} \mathrm{A}_{ja}\mathcal{E}_a^H, \\ \dfrac{d\mathcal{H}_j^H}{dz} = -\dfrac{\left(\kappa_{\parallel,j}^H\right)^2}{\kappa}\mathcal{E}_j^H + \displaystyle\sum_{a=1}^{N_H} \mathrm{A}_{aj}\mathcal{H}_a^H - i\sum_{b=1}^{N_E} \mathrm{C}_{jb}\mathcal{H}_b^E, \end{cases} \quad j = \overline{1, N_H}$$
$$\begin{cases} \dfrac{d\mathcal{H}_k^E}{dz} = \kappa\mathcal{E}_k^E + \displaystyle\sum_{b=1}^{N_E} \mathrm{B}_{bk}\mathcal{H}_b^E, \\ \dfrac{d\mathcal{E}_k^E}{dz} = -\dfrac{\left(\kappa_{\parallel,k}^E\right)^2}{\kappa}\mathcal{H}_k^E - \displaystyle\sum_{b=1}^{N_E} \mathrm{B}_{kb}\mathcal{E}_b^E + i\sum_{a=1}^{N_H} \mathrm{C}_{ak}\mathcal{E}_a^H. \end{cases} \quad j = \overline{1, N_E} \tag{1}$$

с граничными условиями излучения на концах интервала интегрирования

$$\begin{cases} \kappa\mathcal{H}_j^H(z_{in}) - i\kappa_{\parallel,j}^H(z_{in})\mathcal{E}_j^H(z_{in}) = 0, \\ \kappa\mathcal{E}_k^E(z_{in}) - i\kappa_{\parallel,k}^E(z_{in})\mathcal{H}_k^E(z_{in}) = 0, \end{cases} \tag{2}$$

$$\begin{cases} \kappa\mathcal{H}_j^H(z_{out}) + i\kappa_{\parallel,j}^H(z_{out})\mathcal{E}_j^H(z_{out}) = 0, \\ \kappa\mathcal{E}_k^E(z_{out}) + i\kappa_{\parallel,k}^E(z_{out})\mathcal{H}_k^E(z_{out}) = 0. \end{cases} \tag{3}$$

Начальные амплитуды полей задаются N числами:

$$\begin{cases} \mathcal{E}_j^H(z_{in}) = \mathcal{E}_{j,in}^H, \\ \mathcal{H}_k^E(z_{in}) = \mathcal{H}_{k,in}^E, \end{cases} \tag{4}$$

Коэффициенты связи A_{ja}, B_{bk} - для магнитных и электрических волн соответственно; C_{jb} - коэффициент связи j-ой магнитной и k-ой электрической волн. В частном случае - для волноводов круглого поперечного сечения (выражения для произвольной формы поперечного сечения приведены в работе [4]) - эти коэффициенты задаются соотношениями:

$$\begin{cases} \mathrm{A}_{ja}(z) = \mathcal{P}(z)\dfrac{2\nu_a^2\sqrt{\nu_j^2 - m^2}}{\left(\nu_j^2 - \nu_a^2\right)\sqrt{\nu_j^2 - m^2}}, \quad a \neq j, \\ \mathrm{A}_{jj}(z) = \mathcal{P}(z)\dfrac{m^2}{\nu_j^2 - m^2}, \\ \mathrm{B}_{kb}(z) = \mathcal{P}(z)\dfrac{2\mu_k^2}{\mu_k^2 - \mu_b^2}, \quad b \neq k \\ \mathrm{B}_{kk}(z) = \mathcal{P}(z), \\ \mathrm{C}_{jb} = \mathcal{P}(z)\dfrac{2m}{\sqrt{\nu_j^2 - m^2}}, \quad \forall b. \end{cases}$$

Параметр профиля волновода $\mathcal{P}(z)$ определяется тангенсом $\tau(z)$ угла наклона образующей боковой поверхности волновода к оси симметрии z и радиусом его поперечного сечения $R(z)$:

$$\mathcal{P}(z) = \frac{\tau(z)}{R(z)} = \frac{d\ln R(z)}{dz}.$$

Здесь $\kappa_{\parallel,j}^H, \kappa_{\parallel,k}^E$ - постоянные распространения j-ой и k-ой волн (TE и TM типов соответственно):

$$\left(\kappa_{\parallel,j}^H\right)^2 = \kappa^2 - \left(\kappa_{\perp,j}^H\right)^2, \qquad \left(\kappa_{\parallel,k}^E\right)^2 = \kappa^2 - \left(\kappa_{\perp,k}^E\right)^2;$$
$$\kappa_{\perp,j}^H = \frac{\nu_i}{R(z)}, \qquad \kappa_{\perp,j}^E = \frac{\mu_k}{R(z)}$$

– критические волновые числа H- и E-волн волноводов сравнения. Здесь

$$\mu_k = \mu_{m,p_k}, \qquad \nu_j = \nu_{m,p_j}$$

– p-ые по счёту корни функции Бесселя J_m и её производной соответственно.

Полный волновой вектор $\kappa = \omega/c$, соответствующий неизвестной комплексной частоте $\omega = \omega' + i\omega''$, - общий для всех уравнений параметр - находится как решение задачи на собственные значения (1)-(3). Из найденного спектра $\mathcal{K} = \{\kappa_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$, $Im\{\kappa_i\} < Im\{\kappa_{i+1}\}$ наибольший интерес представляет решение, соответствующее наименьшей мнимой части $Im\{\kappa_1\}$ (высокодобротное нормальное колебание).

3. Метод решения

Для удобства дальнейшего изложения введём следующие обозначения. Начальные амплитуды (4) соберём в вектор $\mathcal{N}$ с элементами

$$\mathcal{N}_s = \begin{cases} \mathcal{E}^H_{s,in}, & s = \overline{1, N_H}; \\ \mathcal{H}^E_{s-N_H,in}, & s = \overline{N_H + 1, N}. \end{cases}$$

Результат интегрирования системы уравнений (1) при z_{out}, соответствующий левой части условий (3), также соберём в вектор $\mathcal{F}$ с элементами

$$\mathcal{F}_s = \begin{cases} \kappa\mathcal{H}^H_s(z_{out}) + i\kappa^H_{\parallel,s}(z_{out})\mathcal{E}^H_s(z_{out}), & s = \overline{1, N_H}; \\ \kappa\mathcal{E}^E_{s-N_H}(z_{out}) + i\kappa^E_{\parallel,s-N_H}(z_{out})\mathcal{H}^E_{s-N_H}(z_{out}), & s = \overline{N_H + 1, N}. \end{cases}$$

Зададим N линейно независимых векторов начальных амплитуд (4)

$$\mathcal{I}^l_s = \delta_{s,l} \equiv \begin{cases} 1, & s = l, \\ 0, & s \neq l, \end{cases} \qquad l = \overline{1, N}.$$

Векторы $\mathcal{F}$, соответствующие начальным данным $\mathcal{I}^l$, обозначим $\mathcal{F}^l = \mathcal{F}(\mathcal{I}^l)$; из этих векторов составим матрицу

$$\mathbb{F} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_1(\mathcal{I}^1) & \cdots & \mathcal{F}_1(\mathcal{I}^N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{F}_N(\mathcal{I}^1) & \cdots & \mathcal{F}_N(\mathcal{I}^N) \end{pmatrix} = \{\mathcal{F}^l_s\}.$$

Решением задачи Штурма-Лиувилля (1)-(3) является спектр собственных чисел $\mathcal{K}$. При этом каждому собственному числу κ_i соответствует такой набор начальных амплитуд $\mathcal{N}^i$, что удовлетворяются граничные условия (3): $\mathcal{F}(\mathcal{N}^i) = 0$. Соответствующие собственные функции $\{\mathcal{E}^H_j, \mathcal{H}^H_j, \mathcal{H}^E_k, \mathcal{E}^E_k\}^i(z)$ получаются в результате интегрирования системы уравнений (1).

Для нахождения $\mathcal{K}$ требуется решить задачу

$$det\mathbb{F}(\kappa) = 0. \tag{5}$$

Поиск корней уравнения (5) можно организовать описанными в [1] методами: полный перебор, принцип аргумента, метод Ньютона. В качестве начального приближения при нахождении κ_1 можно взять холодную частоту и добротность рабочей моды $TE_{m,p}$.

Начальные амплитуды для получения собственных функций, соответствующих κ_i, можно получить, найдя решение системы линейных алгебраических уравнений

$$\mathbb{F}(\kappa_i) \cdot \mathcal{N}^i = 0 \tag{6}$$

с вырожденной матрицей $\mathbb{F}$. Вектор $\mathcal{N}^i$ находится как собственный вектор матрицы $\mathbb{F}(\kappa_i)$, соответствующий собственному числу $\lambda_N(\mathbb{F}) = 0$.

Рассчитав функции $\{\mathcal{E}^H_j, \mathcal{H}^H_j, \mathcal{H}^E_k, \mathcal{E}^E_k\}^i(z)$ с начальными значениями - элементами вектора $\mathcal{N}^i_s$, получаем относительные доли мощности каждой моды:

$$P_s = \frac{\tilde{P}_s}{P}, \quad P = \sum_{s=1}^{N} \tilde{P}_s, \quad s = \overline{1, N},$$

где ненормированные мощности $\tilde{P}_s$ приближённо оцениваются

$$\tilde{P}_s = \begin{cases} Re\{\kappa^H_{\parallel,j}\} \cdot \left|\mathcal{E}^H_j\right|^2, & j = s, \; s = \overline{1, N_H}, \\ Re\{\kappa^E_{\parallel,k}\} \cdot \left|\mathcal{H}^E_k\right|^2, & k = s - N_H, \; s = \overline{N_H + 1, N}. \end{cases}$$

Пользователю относительные доли мощности удобно выдавать либо в процентах: $P_s \cdot 100\%$, либо в децибелах: $10 \cdot \log_{10} P_s[dB]$.

4. Результаты численных экспериментов

Интегрирование системы уравнений (1) производится в интервале $[z_{in},\ z_{out}]$ методом Рунге-Кутты 4-го порядка; граничные и начальные условия (2)-(4) ставятся на концах этого интервала. В случае, когда для некоторых мод радиус значительной части волновода (или даже на всём интервале) является закритическим, возникают экспоненциально растущие решения, которые вызывают численные неустойчивости при нахождении определителя $det\mathbb{F}$. Для ухода от этих неустойчивостей интегрирование уравнений для s-й моды начинается с координаты $z_{in,s} \geq z_{in}$:

$$z_{in,s} = z_s^* - \delta z,\ \ \delta z = 2..6\lambda,\ \ \ \lambda = 2\pi/Re\{\kappa\},$$
$$z_s^* = \min z:\ \kappa_{\perp,s}(z) \leq Re\{\kappa\}.$$

Параметр δz подбирается таким образом, чтобы поле в точке $z_{in,s}$ в результате экспоненциального затухания составляло менее 0.01% от максимального значения, но при этом не развивались численные неустойчивости.

Описанные в работе алгоритмы реализованы в пакете программ ANGEL (ANalyzer of a Gyrating ELectrons) [6], который используется в ИПФ РАН и НПП «Гиком» для анализа электронно-волнового взаимодействия в резонаторах гиротронов. Расчётная модель была протестирована на примере классических резонаторов гиротронов (см. рис. 1), многоступенчатых резонаторов с трансформацией мод [7] (см. рис. 2), а также эшелеттных резонаторов (см. рис. 3).

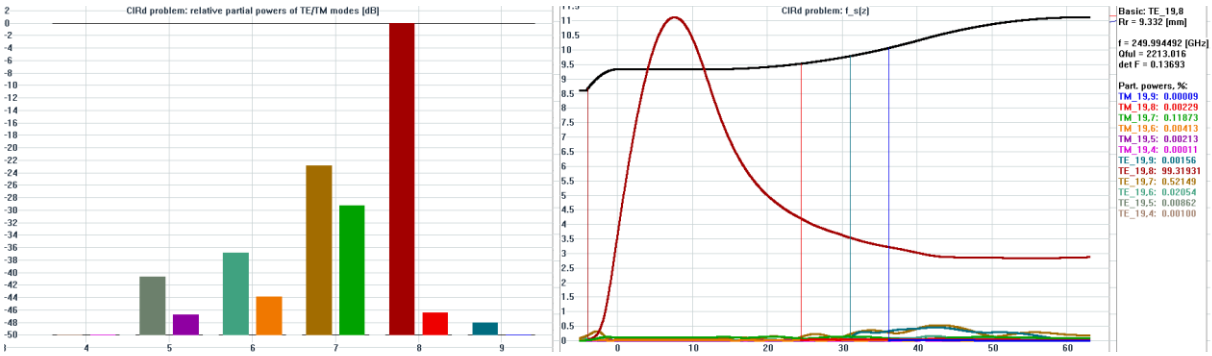


Рис. 1. Классический резонатор гиротрона 250 ГГц, $TE_{19,8}$ с плавным раскрывом рупора дифракционного вывода излучения. Выходная мощность в двенадцатимодовом (индекс p = 4..9) приближении на 99,3% состоит из основной рабочей моды $TE_{19,8}$

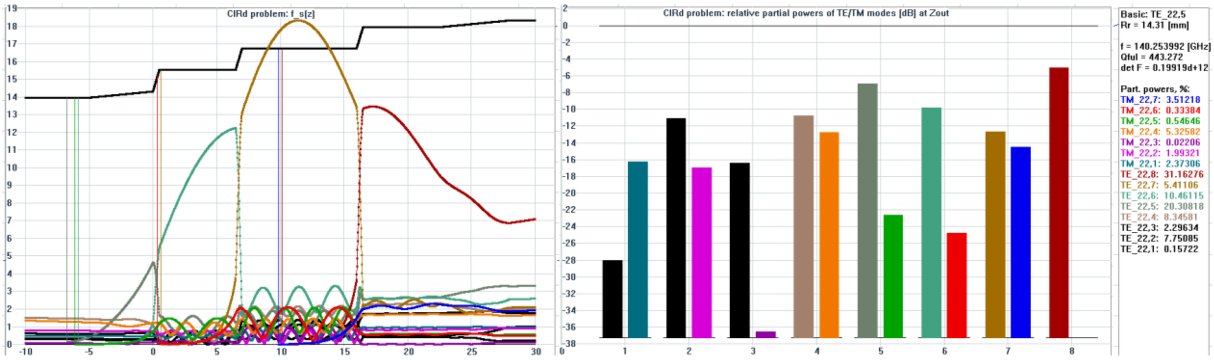


Рис. 2. Трехступенчатый резонатор 140 ГГц, $TE_{22,5}$...$TE_{22,8}$. Приведено решение с максимальной добротностью

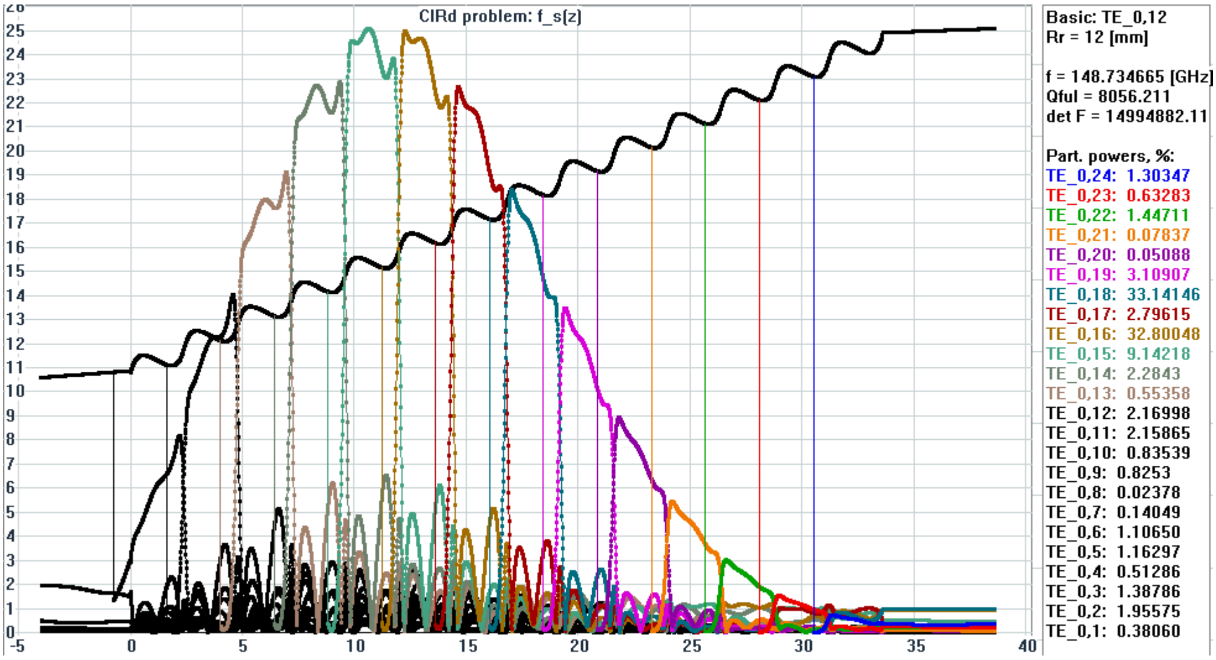


Рис. 3. Эшелеттный резонатор. Трансформация мод происходит на каждом витке гофрировки

Литература

1. Семенов Е. С. Расчёт собственных мод, возбуждаемых в резонаторе гиротрона. Сборник материалов международной конференции «XXIX Крымская Осенняя Математическая Школа-симпозиум по спектральным и эволюционным задачам» (КРОМШ-2018) (Крым, Ласпи, 17 – 29 сентября 2018 г.). Симферополь: «Полипринт», 2018. С. 118-121.
2. Кисунько Г. В. Электродинамика полых систем. Ленинград: ВКАС, 1949. 422 с.
3. Каценеленбаум В. З. Теория нерегулярных волноводов с медленно меняющимися параметрами. Москва: Изд-во АН СССР, 1961. 216 с.
4. Цимринг Ш. Е., Павельев В. Г. К теории неоднородных электромагнитных волноводов, содержащих критические сечения // Радиотехника и электроника. 1982. Т. 27. № 6. С. 1099 1102.
5. Павельев В. Г. Исследование СВЧ колебательных систем на основе связанных резонаторов. Диссертация на степень к.ф.-м.н. Горький: ИПФ РАН, 1982. 183 с.
6. Semenov E., Zapevalov V., Zuev A. Methods for Simulation the Nonlinear Dynamics of Gyrotrons // Communications in Computer and Information Science. 2021. Vol. 1413. P. 49–62. DOI 10.1007/978-3-030-78759-2_4.
7. Власов С. Н., Завольский Н. А., Запевалов В. Е., Копосова Е. В., Моисеев М. А. Аксиально-симметричные ступенчатые резонаторы // Известия ВУЗов. Радиофизика. 2009. Т. 52. № 9. С. 716–729.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ НА ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ СОБЫТИЯ В АНСАМБЛЕ ДВУХ НЕЙРОНОВ ХИНДМАРШ-РОУЗ С ХИМИЧЕСКИМИ СВЯЗЯМИ[1*]

Е.Ю. Семенюта, Т.А. Леванова

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Изучено влияние дополнительных электрических связей на экстремальные события (ЭС) и хаотическую динамику, наблюдаемые в минимальном ансамбле двух пачечных нейронов Хиндмарш-Роуз с взаимными химическими синаптическими связями. Исследована связь ЭС с феноменом гиперхаоса.

Ключевые слова: ансамбль нейронов, пачечный нейрон, система Хиндмарш-Роуз, химическая синаптическая связь, электрическая синаптическая связь, гиперхаос.

1. Введение

Экстремальные события (ЭС) – редкие и непредсказуемые события, которые сильно отклоняются от нормы. Одним из ярких примеров ЭС в нейронауке и медицине являются эпилептические припадки [1]. Математически ЭС могут быть описаны как нерегулярные, достаточно сильные отклонения некоторой наблюдаемой величины (например, суммарного мембранного потенциала нейронов) от характерного диапазона принимаемых ею значений при изменении управляющего параметра.

В работе [2] был введён статистический критерий ЭС: отклонение (всплеск) является ЭС, если его амплитуда превышает критический уровень H_s, который задаётся как

$$H_s = \mu + 6\sigma \tag{1}$$

где $\mu -$ выборочное среднее, $\sigma -$ среднеквадратическое отклонение.

2. Модель

В данной работе изучено влияние электрических связей на ЭС и хаотическую динамику, наблюдаемую в минимальном ансамбле двух пачечных нейронов Хиндмарш-Роуз с химическими связями. Математическая модель такого ансамбля описывается ОДУ вида:

$$\begin{cases} \dot{x}_i = y_i + bx_i^2 - ax_i^3 - z_i + I - k_i(x_i - v_s)\Gamma(x_j) + k(x_j - x_i) \\ \dot{y}_i = c - dx_i^2 - y_i \\ \dot{z}_i = r[s(x_i - x_R) - z\_i] \\ i, j = 1, 2 (i \neq j) \end{cases} \tag{2}$$

где $x_i -$ мембранный потенциал $i -$ го нейрона, y_i и $z_i -$ быстрые и медленные ионные токи, текущие через мембрану $i -$ го нейрона. Параметр $r \ll 1$ определяет соотношение временных масштабов этих токов, в исследовании $r = 0.001$. Параметр I описывает внешний ток, приложенный к нейрону, $I = 4$. Остальные параметры описывают нелинейность проводимости мембраны. В данной работе были использованы типичные значения, при которых изолированный нейрон генерирует пачечную активность: $a = 1,\ b = 3,\ c = 1,\ d = 5,\ x_R = -1.6,\ s = 5$.

Химические синаптические связи описываются слагаемым $k_i(x_i - v_s)\Gamma(x_j)$, где функция

$$\Gamma(x) = \frac{1}{1 + exp(-\lambda(x - \Theta))} \tag{3}$$

[1*] Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 19-72-10128

является сигмоидной функцией с параметрами $\lambda = 10$, $\Theta = -1.5$, $v_s = 2$. Параметры $k_{1,2}$ являются управляющими параметрами и отвечают за силу химических связей. Изменяя их значения, мы можем моделировать различные типы химических синаптических взаимодействий: взаимные тормозящие связи ($k_{1,2} < 0$), взаимные возбуждающие связи ($k_{1,2} > 0$), а также случаи, когда одна из связей является возбуждающей, а другая тормозящей ($k_1 > 0$, $k_2 < 0$ или наоборот). Электрическая синаптическая связь между элементами описывается в соответствии с принципом диффузии с помощью слагаемого $k(x_j - x_i)$, где параметр k отвечает за силу электрической связи.

3. Влияние электрической связи

Ранее в работе [3] для аналогичного ансамбля с чисто химическим взаимодействием между элементами в широком диапазоне параметров $k_{1,2}$ было показано существование ЭС, которые представляют собой спайки, наблюдающиеся в ходе временной эволюции переменной $x_{||} = x_1 + x_2$, амплитуды больше уровня H_s.

Для изучения влияния электрической связи были численно построены карты ЭС в плоскости параметров $k_{1,2}$ при различных значениях параметра k: $k = 0$ (Рис. 1а) и $k = 0.1$ (Рис. 1б). Здесь белый цвет соответствует областям, в которых экстремальные события не наблюдаются. Остальные области помечены разными цветами в зависимости от того, сколько ЭС наблюдается при выбранных значениях параметров (карты построены в логарифмическом масштабе). Из Рис. 1а,б видно, что при добавлении в систему слабой электрической связи области устойчивости ЭС существенно уменьшаются, и ЭС в них наблюдаются реже.

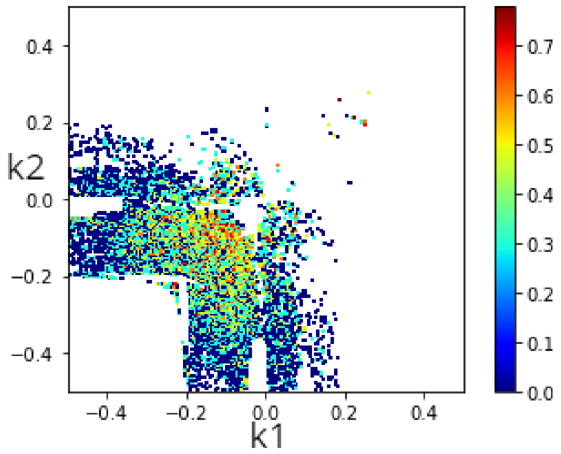


Рис. 1а

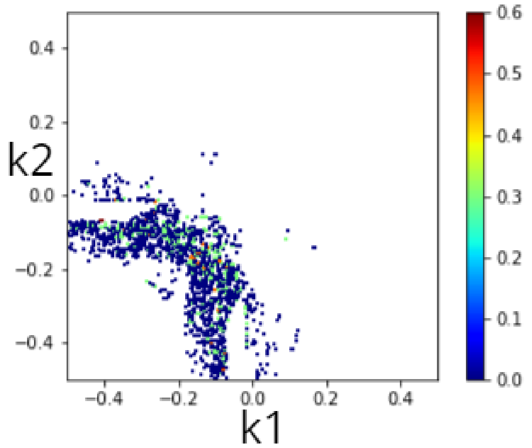


Рис. 1б

Далее с помощью одно- и двухпараметрического анализа наблюдаемой динамики с помощью расчета Ляпуновских показателей были найдены области пространства параметров, в которых наблюдается феномен гиперхаоса, когда два старших Ляпуновских показателя принимают значение больше нуля ($\Lambda_1 > \Lambda_2 > 0$). Проведено сравнение этих областей с областями существования ЭС.

Для исследования сценариев разрушения ЭС были выбраны два случая: (1) тормозящие связи $k_{1,2} = -0.17$ и (2) возбуждающие связи $k_{1,2} = 0.07$. Для этих значений параметров химических связей были построены графики зависимости трех старших ляпуновских показателей от силы электрической связи k (см. Рис. 2 а,б). При увеличении силы электрической связи до некоторого порогового значения (различного в обоих случаях) происходит эволюция соответствующего хаотического аттрактора. Сначала разрушается гиперхаотический режим, затем практически сразу хаотический режим становится регулярным. Из Рис. 2а,б видно, что при дальнейшем увеличении параметра электрической связи k снова могут возникать хаотические режимы, однако гиперхаос уже не наблюдается, и ЭС не возникают. При достаточно сильной электрической связи элементы демонстрируют синфазную пачечную активность.

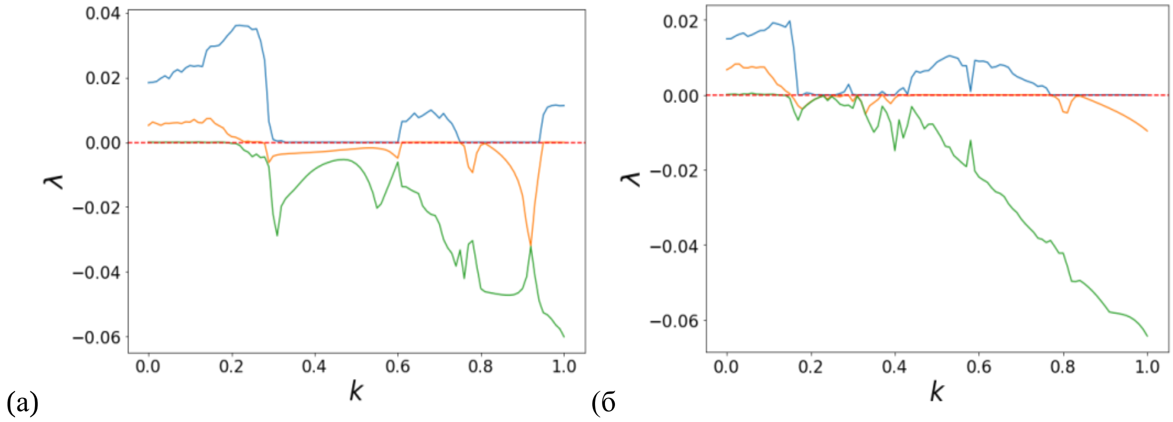


Рис. 2. Ляпуновские показатели в зависимости от силы электрической связи k. Значения параметров химических связей: (а) $k_{1,2} = -0.17$. (б) $k_{1,2} = 0.07$.

Пример временной реализации ЭС и соответствующая функция плотности вероятности (PDF) представлены на Рис.3 для значений синаптических связей $k_{1,2} = -0.17, k = 0$. Красным пунктиром обозначен уровень H_s. Из графика функции плотности вероятности видно, что наблюдаемое распределение ЭС соответствует одному из т.н. распределений с тяжелыми хвостами, а именно, распределению типа король-дракон [3].

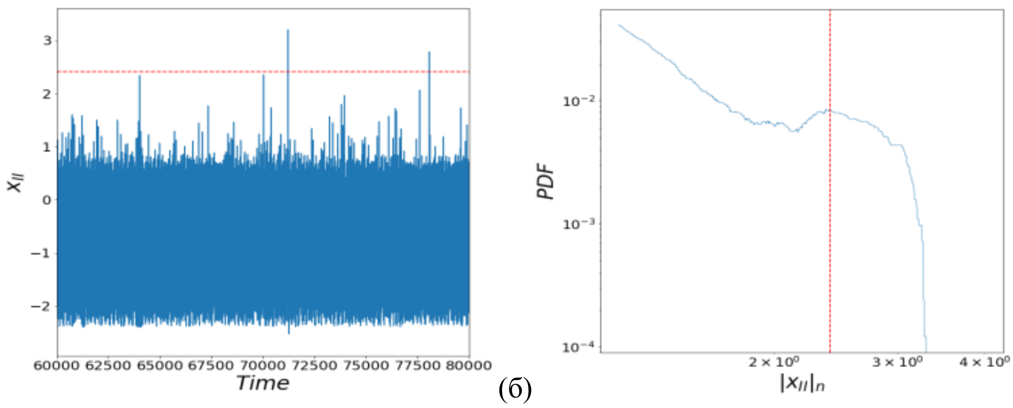


Рис. 3. (а) Временная диаграмма и (б) функция плотности вероятности для ЭС в системе (2), $k_{1,2} = -0.17, k = 0$.

4. Выводы

Таким образом, в ходе проведенного исследования было изучено возникновение ЭС в системе двух элементов Хиндмарш-Роуз, связанных химическими и электрическими синаптическими связями. С помощью расчета Ляпуновских показателей изучен вопрос связи ЭС с феноменом гиперхаоса. Показано, как меняется динамика системы при увеличении силы электрической связи.

Литература

1. Lehnertz K., Epilepsy: Extreme events in the human brain // Extreme Events in Nature and Society, Springer. – 2006.
2. Dysthe K., Krogstad H.E., Muller P. Oceanic rogue waves // Annu. Rev. Fluid Mech. – 2008. – V. 40. – P. 287-310.
3. Mishra A., Saha S., Vignershwaran M., Pal. P., Kapitaniak T., Dana S.K. Dragon-king-like extreme events in coupled bursting neurons // Phys. Rev. E. – 2018. – V. 97(6). – P. 062311.

К ВОПРОСУ О РАСТУЩИХ ГЛУБОКИХ НЕЙРОСЕТЯХ[1*]

Я.А. Середа, Е.А. Смирнова, И.Д. Никоноров

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Предлагается подход к обучению глубоких искусственных нейросетей, основанный на целенаправленном поиске статистических закономерностей в данных. Приводятся некоторые экспериментальные примеры в поддержку предлагаемого подхода.

Ключевые слова: растущие нейросети, интерпретируемые нейросети, искусственный интеллект, обучение по прецедентам

1. Введение

Современные сети глубокого обучения обычно требуют задания морфологии вычислительного графа перед обучением. Это приводит к некоторым негативным последствиям. Во-первых, к неуниверсальности глубоких сетей: для каждого типа данных вручную разрабатывается своя архитектура. Во-вторых, для конкретной задачи архитектура оказывается избыточна, т.к. необходимо избежать недообучения. Избыточность даже "удачных" архитектур демонстрируют эксперименты по сжатию сетей [2]. Избыточное количество настраиваемых параметров приводит к понижению интерпретируемости для человека репрезентации данных в этой сети, что, в свою очередь, ведет к тому, что сеть становится похожа на "черный ящик", и уже это ведет, например, к сложностям с применением таких технологий в медицине, где цена ошибки высока [3].

Попытки разработать алгоритмы обучения, основанные на росте сети, предпринимались [4,5], однако в данный момент задача не решена достаточно эффективно – ведущее место в прикладных задачах все еще занимают сети с предварительно заданной архитектурой.

В этой статье мы приводим анализ экспериментальных данных, позволяющий сделать обоснованные предположения о принципах построения таких искусственных нейросетей, которые не требовали бы предварительного задания морфологии соединений.

2. Целенаправленный поиск статистических закономерностей

При изучении новой ситуации/предмета животное производит активные действия. В науках о естественном интеллекте существует мнение, что эти действия являются оптимальными экспериментами [1]. Т.е. эти эксперименты целенаправленны, и их цель – за наименьшее количество действий узнать как можно больше информации о ситуации. Распознавание в этой формулировке не отделимо от обучения и, таким образом, представляет собой также серию оптимальных экспериментов, состоящую из активных действий и замеров эффекта от этих действий. Применительно к распознаванию статического изображения *действия* – это сдвиги взгляда (в биологии – саккады), а *замер эффекта* сводится к замерам активации на визуальных сенсорах (замерам яркости пикселей). Мы далее предлагаем формализацию этой концепции обучения/распознавания, взятой из когнитивных наук, для дальнейшего переложения этой концепции на программную модель. Для простоты будем опираться на задачу распознавания черно-белых изображений рукописных цифр.

[1*] Проект FSWR-2021-013, выполняемый в рамках Государственного задания на выполнение научно-исследовательских работ лабораториями, прошедшими конкурсный отбор в рамках национального проекта «Наука и университеты», в отношении которых принято решение Бюджетной комиссии Минобрнауки России (от 14.09.2021 № БК-П/23) о предоставлении из федерального бюджета субсидии на финансовое обеспечение государственного задания на выполнение научно-исследовательских работ.

2.1. Элементарный случайный эксперимент

Эксперимент это – (совершение действия + замер эффекта). Самый простой эксперимент при распознавании черно-белых изображений это сдвиг взгляда (задаваемый двумя числами) + измерение яркости пикселя в полученных после сдвига координатах (число). В случае распознавания одномерного временного ряда элементарный эксперимент – это сдвиг вдоль оси времени + замер значения измеряемой величины в этом моменте. В случае распознавания объекта на ощупь элементарный эксперимент – это минимальное движение руки + замер значения на тактильных сенсорах в момент завершения этого движения.

Суть элементарного эксперимента определяется физической природой данных. В разных исходных ситуациях результат одного и того же элементарного эксперимента будет разным, поэтому он является случайной величиной.

Для рассматриваемого примера с изображениями обозначим элементарный случайный эксперимент $A = (u, a)$, где u – это сдвиг взгляда $dx, dy, a(x, y, X)$ – это функция замера яркости в пикселе x, y изображения X. Элементарных экспериментов в данной задаче, очевидно, много – их множество индексируется возможными значениями параметра u.

2.2. Информационный выигрыш для элементарного эксперимента

Поставим эксперимент A некоторое количество раз для разных картинок и разных точек на них, получим выборку элементарных исходов, обозначим ее s[A].

Рассмотрим теперь произвольную функцию $R(X, x,\ y)$, принимающую одно из двух значений (0 или 1). Пробегая различные изображения и различные точки на них, можно получить выборку таких троек $(X_i,\ x_i,\ y_i)$, что в них во всех выполнено $R(X_i, x_i, y_i) = 1$. Для каждой из этих троек поставим элементарный эксперимент A и запишем его исход. Т.е. соберем выборку $\{A(X_i, x_i,\ y_i) = a(x_i + dx,\ y_i + dy,\ X_i) \mid R(X_i,\ x_i,\ y_i) = 1\}$, обозначим кратко ее: $s[A|\mathrm{R} = 1]$.

Чем достовернее и выраженнее отличия между безусловной и условной выборками (т.е. между s[A] и s[A|R=1], тем больше условие R = 1 несет информации об исходе эксперимента A.

Зафиксируем любой адекватный способ Info измерения степени выраженности отличий между выборками (эта задача хорошо исследована: например, достоверность различия можно доказать, используя аппарат непараметрических гипотез, а степень отличия выборок можно померить дивергенцией Кульбака-Лейблера).

Назовем $Info(s[A],\ s[A|R = 1]) \to [0, \infty)$ информационным выигрышем, который функция R предсказывает для эксперимента A. Более кратко обозначим его $Info\ (\mathrm{R} \to A)$.

В общем случае функция R может предсказывать ненулевой выигрыш для многих экспериментов $A_1 \dots A_n$, поэтому введем понятие выигрыша от функции R в целом: $Info\,(R) = Info\,(R \to A_1) + \ \dots + Info(R \to A_n)$.

2.3. Событие на основе элементарного эксперимента

Событие здесь понимается в том же смысле, как в аксиоматике Колмогорова. На основе функции $A(\ x,\ y,\ X)$, задающей элементарный эксперимент, можно разными способами создать бинарную функцию EA. Например, выберем число e, и если $A(\ x,\ y,\ X) > e$, то $EA(\ x,\ y,\ X)$ установим равной единице, иначе – нулю. Заданная таким способом функция играет роль детектора события: отмечает, произошло в ходе эксперимента A событие E или нет.

Если для данного задания EA удается экспериментально доказать, что $Info\ (EA) > 0$, то значит событие E несет в себе предсказательную ценность. В самом деле, факт неотрицательности $Info\ (EA)$ говорит о том, что (по определению) существует как минимум один эксперимент $B(\ x, y, X)$, такой, что его результат лучше предсказывать, зная о факте $EA(\ x, y, X) = 1$, чем не зная о нем. Пример показан на рис.1.

Проведенные численные эксперименты показали, что наибольшими значениями $Info\ (EA)$ обладают такие E, которые выделяют темные пиксели, что совпадает с интуитивным ожиданием – пиксель фона менее ценен в предсказательном смысле.

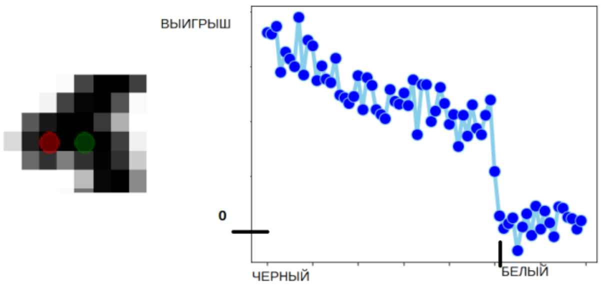


Рис. 1. На графике показана зависимость информационного выигрыша $Info\ (EA\ \to B)$ от разных способов задать событие E на основе элементарного эксперимента $A = ((0{,}0),\ a)$. Точка оси X здесь – порог е яркости, использующийся для создания EA. В качестве B берется эксперимент, состоящий в измерении яркости в точке, на $u = (2, 0)$, отстоящей от точки срабатывания A (точка срабатывания EA показана красным кружком, а зеленым – точка срабатывания B). Из графика видно, что уже даже простое разделение клеток на белые и не белые оказывается информативным для предсказания исхода B. Этот результат интуитивно понятен – цифры узнаваемы, если бинаризовать картинку по такому порогу.

2.4. Растущая сеть – узлы и ребра, начало роста

Поскольку данный фреймворк строится через понятие эксперимента, то распознавание вынуждено быть серией экспериментов, оптимальной в смысле информационного выигрыша. Значит, долговременная память агента должна хранить программы распознавания, представляющие собой оптимальные последовательности экспериментов.

Вначале имеется лишь один эксперимент $A = ((0{,}0),\ a)$. Это все, что содержится в долговременной памяти агента. Правило роста структуры зададим на основе максимизации информационного выигрыша. Создание события EA на основе эксперимента A оправдано информационным выигрышем для некоторого эксперимента $A = ((dx, dy),\ a)$. Это обнаруженная статистическая закономерность в данных, и она должна быть запомнена в долговременную память обучающегося агента. Поэтому память такого растущего агента будет представлять собой граф, содержащий определения событий/экспериментов в качестве узлов, а ребра при таком подходе нужны двух типов.

Первый тип ребер (отношение следования) нужен, чтобы кодировать отношения следования экспериментов друг за другом в оптимальной распознающей программе. Т.е. если событие EA соединено с событием EC таким ребром в сети, то при EA = 1 дальше оптимальным шагом в распознавании является проведение эксперимента C и проверка, наступило ли событие EC = 1.

Второй тип ребер нужен для того, чтобы хранить информацию об отношении предсказательности между событием и экспериментами, для которых это событие предоставляет информационный выигрыш. В приведенном примере из рис.1. событие EA будет соединено таким ребром с экспериментом B, потому что доказано, что $Info\ (EA \to B) > 0$. Само ребро такого типа будет хранить распределение вероятностей, полученное на основе выборки $s(B|EA = 1)$.

2.5. Растущая сеть – эскиз правила роста

Каждое добавление отношения следования происходит одновременно с, как минимум, одним отношением предсказания, которое его оправдывает в смысле информационного выигрыша. Пусть к данному моменту имеется один узел EA, соединенный отношением предсказательности с экспериментом B. Первый шаг распознающей программы, таким образом, есть: EA = 1. Каков следующий оптимальный шаг программы распознавания, при условии, что ее первый шаг это EA = 1?

Предположим, что у нас имеется некий эксперимент C и событие EC. Шаг распознавания EC после шага EA будет иметь смысл лишь тогда, когда он будет оправдан информационным выигрышем получившейся двухшаговой программы $[EA,\ EC]$, по сравнению с одношаговыми $[EA]$ и $[EC]$ и по сравнению с отсутствующей историей распознавания. То есть, должен найтись такой эксперимент D, что $Info\,([EA,\ EC] \to D) > \max\{Info([EA] \to \mathrm{D}),\ Info([EC] \to \mathrm{D}),\ Info\,([\,] \to \mathrm{D})\}$.

Как только найдена пара EC и D, можно утверждать, что найдена новая статистическая закономерность. Из узла EA можно вырастить направленное ребро (отношение следования) к узлу EC, а из узла EC вырастить ребро (отношение предсказательности) к эксперименту D, таким образом, отобразив, что наличие в памяти программы [EA, EC] оправдано ее предсказательными свойствами по отношению к результатам именно этого эксперимента.

Обобщая: каждая итерация роста сводится к трем шагам:

1) выбрать узел ER, из которого будем искать статистическую закономерность,
2) найти пару: EQ и оправдывающий следование [ER, EQ] эксперимент W,
3) добавить EQ и W в сеть в соответствующем месте.

Основное достоинство этой итеративной схемы в том, что она приводит к переиспользованию программ распознавания: в качестве EQ и W можно использовать любые из уже имеющихся в графе узлы (напомним, узел соответствует программе действий, которая легко восстанавливается проходом по графу от данного узла к стартовому узлу ((0, 0), a)). Например, если ER работает как 5-шаговая программа-детектор колечка на рисунке, а сеть изучает восьмерки (8 состоит из двух колечек), то мы можем построить программу распознавания $[ER, [(dx, dy), ER]]$, т.е. Q не обязано быть элементарным экспериментом, в качестве него можно взять любую из уже хранящихся в графе программ распознавания. Ровно так же W не обязано быть элементарным экспериментом – в качестве него можно тоже взять целую программу.

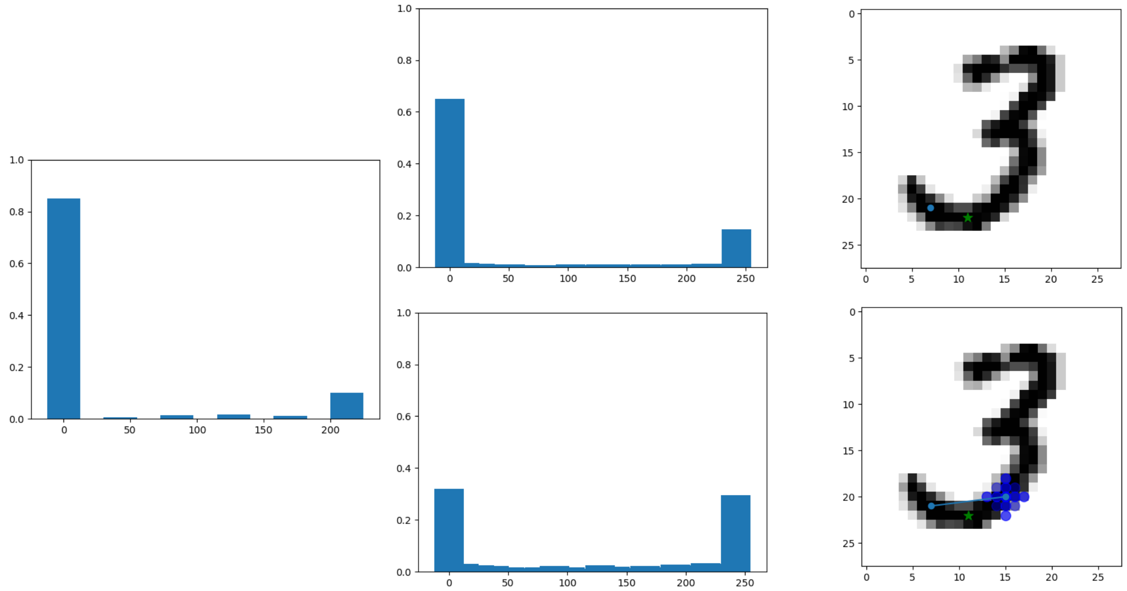


Рис.2. Слева – гистограмма исходов элементарного случайного эксперимента. Правее показаны две гистограммы для него же, но выполненного условно. Сверху: при условии успешного завершения одношаговой программы (одиночный кружок). Снизу: когда успешно завершен еще и второй шаг программы (содержащий неопределенность по управлению, показанную облаком кружков). Видно, что безусловная гистограмма отличается от условных, причем отличие более выражено для двухшаговой программы экспериментов.

На рис.2 в качестве эксперимента W при наращивании второго шага распознающей программы выбран тот же самый эксперимент, который ранее оправдал создание первого шага (показан звездочкой). Его оказалось достаточно – видно, что все три эмпирических распределения существенно различны.

2.6. Объединение экспериментов

Сеть, формирующаяся по вышеописанной процедуре, не может не переобучаться, потому что, в качестве действия u, пока что, берутся конкретные dx, dy, что делает любую программу распознавания, восстанавливающуюся из графа, очень узко специализированной. Численные эксперименты показывают, что для работоспособности модели необходим еще один ингредиент: *оправданное объединение экспериментов*. Рис.[1-4] все получены при использовании объединения экспериментов.

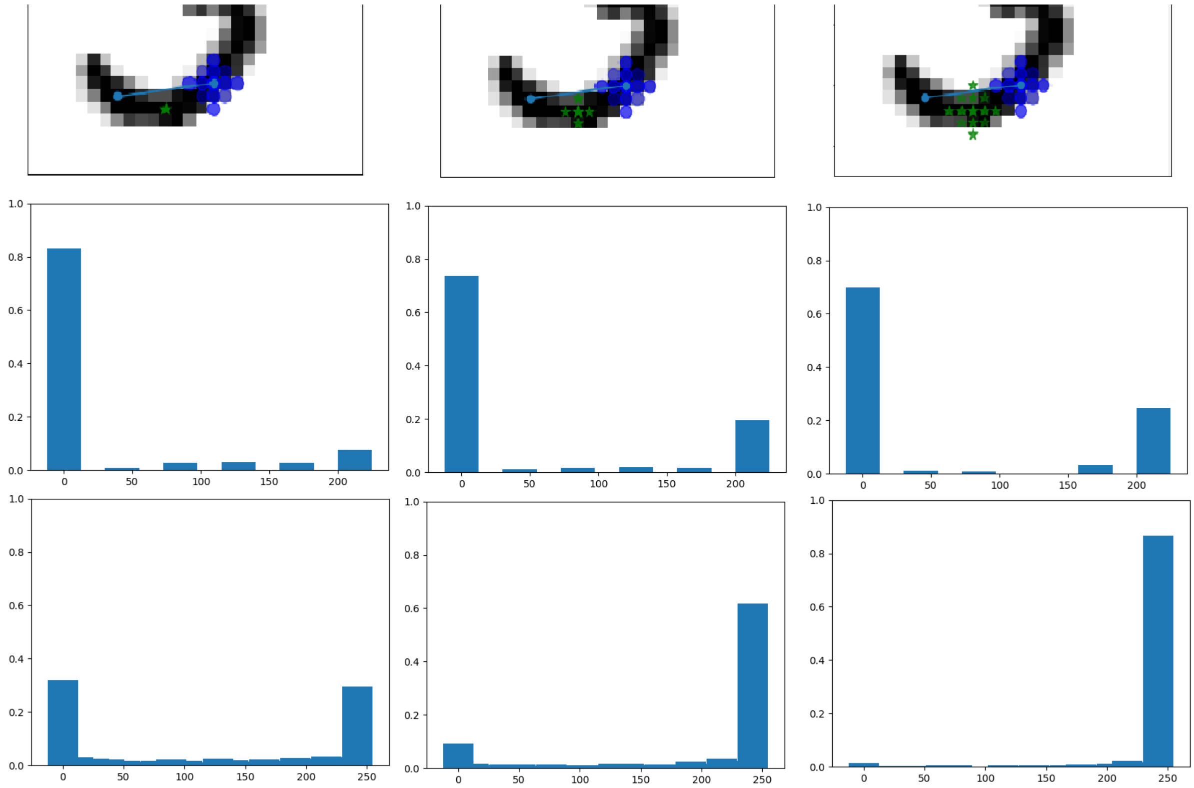


Рис.3. Нижний ряд гистограмм: гистограммы исходов трех экспериментов, совершаемых при условии успешного завершения одной и той же двухшаговой программы (отмечена синими кружками на всех трех картинках). Эти три эксперимента идентичны по управлению, отличаются лишь количеством объединенных в один экспериментов: слева направо оно растет (показано увеличением количества звездочек). Средний ряд гистограмм показывает безусловное распределение исходов таких объединенных событий. Видно, что гистограммы третьего ряда (самая большое количество объединенных экспериментов) сильнее отличаются друг от друга, чем, например, гистограммы первого (где объединения не производилось).

Интуитивно это можно пояснить на примере распознавания глаза на цветном фото. Глаз может быть карий, серый, голубой, но человек все частные случаи глаза объединяет в абстрактное понятие глаза. “Детектор глаза” можно считать состоящим из “детектора голубого глаза”, “детектора карего глаза” и т.д. Детектор глаза вернет единицу, если сработал один из входящих в его состав детекторов частных случаев. Так выглядит конструкция объединения экспериментов со взаимоисключающими исходами.

Оправданием для введения объединения экспериментов является информационный выигрыш, рассчитываемый так же, как и раньше. Наши численные эксперименты показывают, что объединение экспериментов с невзаимоисключающими исходами тоже приносит информационный выигрыш. Это демонстрируется на рис.3. Там объединились в один эксперимент несколько элементарных. Причем это было так и для эксперимента, на основе которого создается новое события в программе распознавания, и для того эксперимента, который оправдывает добавление нового события в программу распознавания.

Главный вывод, полученный нами из численных экспериментов, заключается в том, что наибольший информационный выигрыш получается тогда, когда на каждом шаге обучения при выборе претендентов на роль следующего события/оправдывающего эксперимента берутся *редкие* события. Их редкость оценивается из эмпирических распределений, хранящихся, как было описано, на ребрах предсказательных отношений.

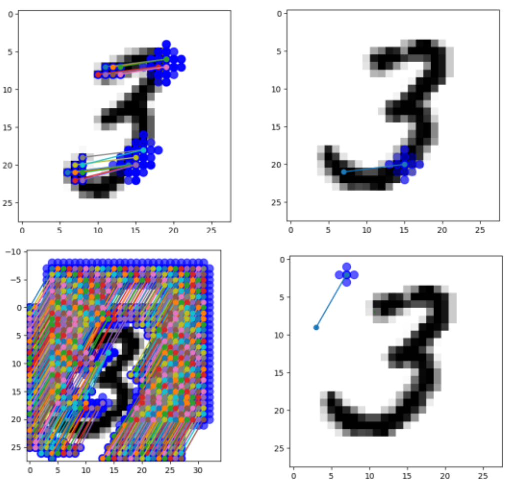


Рис. 4. Справа показаны две двухшаговые программы, слева показано, в каких точках на произвольной картинке с тройкой они будут срабатывать. Несмотря на то, что у верхней программы больше объединенных событий на втором шаге (показаны кружками), она срабатывает крайне редко (всего в 15 точках в этом примере), в то время как другая (с меньшим количеством объединенных событий на втором шаге) срабатывает в большинстве точек картинки и является неинформативной.

3. Заключение

Предложенный алгоритм по структуре довольно сложен, однако, в силу концепции, он избегает ряда важных проблем, свойственных современным системам искусственного интеллекта. А именно, в каждый момент времени обучается не вся сеть, а лишь небольшая часть, та, которая ближе всего по специализации. Это биологически правдоподобно – подсети мозга вырабатывают специализацию, и обучается на текущем входном сигнале не весь мозг. Кроме того, сеть данного типа “знает, когда она не знает” (если при прохождении по ребрам предсказательных отношений получаются редкие события, то обнаружена новизна).

Литература

1. Friston K. et al. Perceptions as hypotheses: saccades as experiments //Frontiers in psychology. – 2012. – Т. 3. – С. 151.
2. Neklyudov K. et al. Structured bayesian pruning via log-normal multiplicative noise //arXiv preprint arXiv:1705.07283. – 2017.
3. Sereda I. et al. Problems of representation of electrocardiograms in convolutional neural networks //2020 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN). – IEEE, 2020. – С. 1-6.
4. Rusu A. A. et al. Progressive neural networks //arXiv preprint arXiv:1606.04671. – 2016.
5. Fritzke B. et al. A growing neural gas network learns topologies //Advances in neural information processing systems. – 1995. – Т. 7. – С. 625-632.

АВТОМАТИЗАЦИЯ СБОРА ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ВЫВОДА ГЛУБОКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В СИСТЕМЕ DEEP LEARNING INFERENCE BENCHMARK[1*]

А.К. Сидорова, М.Р. Алибеков, А.А. Макаров, Е.П. Васильев, В.Д. Кустикова

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Описывается архитектура программной системы Deep Learning Inference Benchmark, которая разрабатывается для автоматизации сбора показателей производительности вывода глубоких нейросетевых моделей на аппаратных платформах компании Intel. Перечисляются ключевые особенности системы в сравнении с предыдущей версией. Результаты производительности вывода демонстрируются на примере открытой модели MobileNet, решающей задачу классификации изображений. Вывод реализуется с помощью известных библиотек, оптимизированных под платформы Intel (Intel Distribution of OpenVINO toolkit, Intel Optimization for Caffe, Intel Optimization for TensorFlow). Описывается процедура подбора оптимальных параметров запуска вывода, приводятся и анализируются результаты производительности вывода.

Ключевые слова: глубокое обучение, вывод нейронных сетей, производительность, Intel Distribution of OpenVINO toolkit.

1. Введение

Глубокое обучение (deep learning) – область машинного обучения, которая исследует возможности решения задач искусственного интеллекта с помощью глубоких нейронных сетей. В настоящее время разработано множество глубоких моделей, позволяющих решать классические задачи компьютерного зрения и обработки естественного языка. К таким задачам относятся классификация изображений [1], детектирование объектов [2], семантическая сегментация изображений [3], распознавание речи [4], генерация текста [5], синтаксический анализ текста [6] и многие другие. Эти задачи возникают, например, в ходе разработки систем видеонаблюдения, онлайн-переводчиков, чат-ботов. Внедрение глубоких нейросетей в подобные системы требует оценки производительности вывода обученных моделей на имеющихся вычислительных ресурсах. Вывод предполагает прямой проход по обученной сети для решения задачи. На практике вывод должен выполняться в режиме реального времени. В противном случае, исследуются возможности оптимизации обученной модели.

Существуют программные системы, которые позволяют оценивать производительность вывода широко известных глубоких моделей. Среди систем можно выделить DAWNBench [7], AI Matrix [8] и MLPerf [9]. Deep Learning Inference Benchmark (DLI) [10] – одна из таких систем, разрабатываемая в ННГУ. Отличие данной системы от существующих состоит в том, что результаты производительности вывода собираются на аппаратных решениях Intel (Intel CPUs, Intel Processor Graphics, Intel Movidius Neural Compute Stick). Полученные значения показателей производительности для широкого спектра моделей и некоторых аппаратных конфигураций публикуются в открытом доступе [11]. Система поддерживает реализацию вывода средствами библиотек Intel Distribution of OpenVINO toolkit [12], Intel Optimization for Caffe [13] и Intel Optimization for TensorFlow [14]. Отметим, что OpenVINO обеспечивает конвертацию моделей из формата, в котором они сохраняются в результате обучения, во внутреннее представление, оптимизированное под архитектуры Intel. Как следствие, с использованием DLI можно оценить производительность вывода практически любой пользовательской модели.

Цель настоящего исследования – модифицировать разработанный ранее функционал системы DLI с тем, чтобы автоматизировать развертывание тестовой инфраструктуры и формирование описания проводимых экспериментов. Наряду с этим, необходимо обеспечить определение качества работы тестируемых глубоких моделей на стандартных наборах данных для до-

[1*] Работа выполнена при поддержке компании Intel.

казательства корректности решения исходных задач с помощью моделей, сконвертированных OpenVINO.

Работа построена следующим образом. Вначале рассматривается архитектура системы DLI, отмечаются отличия от предыдущей версии. Кратко описываются особенности программной реализации. Приводятся результаты вычислительных экспериментов, полученные с помощью DLI для тестовой модели MobileNet-v1-1.0-224 [1], которая обеспечивает решение задачи классификации изображений. Вывод реализуется средствами библиотек, доступных в DLI. Предлагается сравнение полученных показателей производительности. Рассматриваются перспективы дальнейшего развития системы.

2. Архитектура системы

Разрабатываемая система состоит из нескольких основных компонент (рис. 1).

1. ConfigMaker – графическое приложение для автоматизации процедуры формирования конфигурационных файлов для разных запускаемых компонент системы. Приложение является самостоятельным и не зависит от остальных компонент системы.
2. Deployment – компонент, обеспечивающий автоматическое развертывание тестовой инфраструктуры на вычислительных узлах средствами технологии Docker [15]. Информация о вычислительных узлах содержится в конфигурационном файле компонента.
3. BenchmarkApp – компонент, отвечающий за сбор показателей производительности вывода набора моделей с использованием различных инструментов глубокого обучения. Информация о моделях и параметрах запуска вывода содержится в конфигурационном файле компонента.
4. Inference – компонент, содержащий реализацию вывода глубоких нейросетевых моделей с помощью различных инструментов глубокого обучения. Используется компонентом BenchmarkApp для непосредственного запуска вывода нейросетей с заданными параметрами.
5. AccuracyChecker – компонент, обеспечивающий оценку качества работы моделей на открытых данных. Является надстройкой над аналогичным компонентом в OpenVINO [16].
6. RemoteController – компонент, выполняющий удаленный запуск экспериментов для определения производительности и качества глубоких моделей на вычислительных узлах.
7. Converters – вспомогательный компонент, содержащий различные конвертеры для удобного представления результатов производительности и качества работы моделей. В частности, данный компонент обеспечивает преобразование выходных данных в HTML-формат для публикации результатов экспериментов на странице проекта [11].

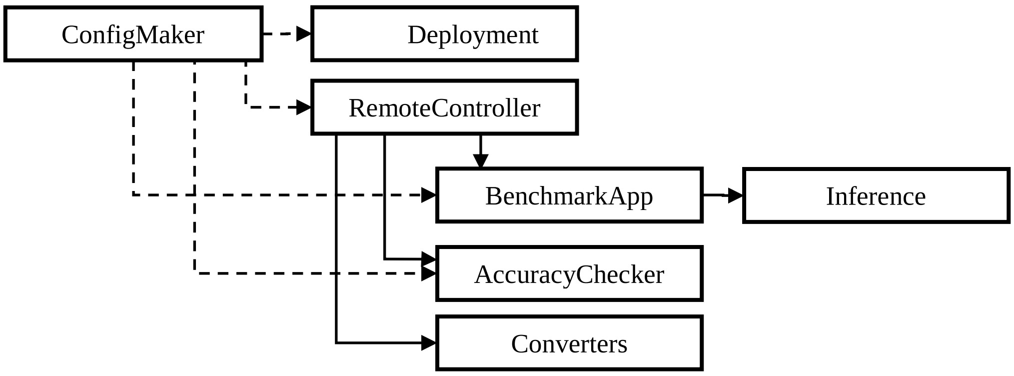


Рис. 1. Диаграмма компонент системы DLI

Основной сценарий работы предполагает выполнение следующих действий.

1. Формирование конфигурационных файлов с помощью ConfigMaker для компонент Deployment, RemoteController, BenchmarkApp и AccuracyChecker.
2. Развертывание тестовой инфраструктуры на вычислительных узлах с использованием компонента Deployment. Все необходимые данные для запуска экспериментов хранятся на FTP-сервере. На данном этапе выполняется подготовка структуры директорий на FTP-

сервере (директории для сохранения конфигурационных файлов, результатов экспериментов и docker-образов целевых машин), копирование шаблонного docker-образа машины с готовой тестовой инфраструктурой на FTP-сервер, удаленное скачивание docker-образа с FTP-сервера на вычислительный узел и локальное развертывание docker-образа, копирование конфигураций проводимых экспериментов локально на узел.

3. Удаленный запуск экспериментов на вычислительных узлах средствами RemoteController. RemoteController запускает AccuracyChecker, где сначала определяется качество исходных моделей, а затем качество моделей, которые сконвертированы в промежуточное представление с помощью OpenVINO с форматами весов FP32 и FP16. Далее RemoteController запускает BenchmarkApp для определения показателей производительности вывода (порядок тестов такой же, как для AccuracyChecker). BenchmarkApp использует компонент Inference для запуска вывода отдельной модели из перечня проводимых экспериментов, каждая модель запускается средствами OpenVINO и исходного фреймворка, в котором она была обучена, если DLI поддерживает данный фреймворк для запуска вывода. После всех вычислений RemoteController формирует файл с результатами экспериментов на FTP-сервере.
4. Конвертирование таблицы результатов в HTML-формат средствами Converters. Данный компонент преобразовывает таблицы с результатами работы компонент BenchmarkApp и AccuracyChecker в HTML-формат для их публикации на официальной странице проекта.

3. Программная реализация

Программная реализация выполнена на языке Python 3. Обеспечивается поддержка вывода с использованием библиотек Intel Distribution of OpenVINO toolkit [12], Intel Optimization for Caffe [13] и Intel Optimization for TensorFlow [14]. Графическое приложение для автоматизации формирования конфигурационных файлов системы разработано с помощью технологии Qt. Исходный код системы выложен в отрытый доступ на GitHub [10].

4. Вычислительные эксперименты

4.1. Тестовая инфраструктура

В процессе проведения экспериментов использована инфраструктура, параметры которой приведены в таблице 1.

Таблица 1. Тестовая инфраструктура

CPU	Intel® Core™ i7-8700 3.20GHz (6 ядер и 12 потоков)
GPU	Intel® Gen9 HD Graphics (iGPU)
VPU	Intel® Neural Compute Stick 2 with Intel® Movidius™ Myriad™ X Vision Processing Unit
Оперативная память	64 ГБ
Операционная система	Ubuntu 18.04
Библиотеки	Intel Distribution of OpenVINO toolkit 2021.4 Intel Optimizations for TensorFlow 1.15.2 Intel Optimizations for Caffe 1.11

4.2. Тестовые модели

В качестве тестовой модели используется MobileNet-v1-1.0-224 [1]. При проведении экспериментов через mobilenet-v1-1.0-224 и mobilenet-v1-1.0-224-tf обозначаются модели, обученные на наборе данных ImageNET [17] с помощью оригинальных библиотек Caffe [18] и TensorFlow [19] соответственно. Модель обеспечивает решение задачи классификации изображений, принадлежащих 1 000 классам. Для вывода обученных моделей с помощью OpenVINO они предварительно конвертируются из форматов хранения Caffe и TensorFlow в промежуточное представление OpenVINO. Конвертация предполагает оптимизацию нейросетей.

4.3. Тестовые данные

Для оценки производительности вывода используются 32 случайных изображения из набора ImageNET [17]. Каждое изображение масштабируется до размеров входа сети. Множество изображений разбивается на пачки (batch), пачка обрабатывается за один прямой проход по сети.

Для проверки качества моделей используется валидационная выборка набора данных ImageNET размером в 50 000 изображений.

4.4. Показатели производительности

Intel Distribution of OpenVINO toolkit поддерживает два режима вывода.

1. *Режим минимизации времени выполнения одного запроса* (latency mode). Предполагает создание и выполнение одного запроса для вывода модели на выбранном устройстве. Следующий запрос на вывод создается по завершении предыдущего. Количество сгенерированных запросов определяется числом итераций цикла тестирования модели.
2. *Режим минимизации времени выполнения набора запросов* (throughtput mode). Предполагает создание набора запросов для вывода нейронной сети на выбранном устройстве. Порядок выполнения запросов может быть произвольным. Количество наборов запросов определяется количеством итераций цикла тестирования модели.

При оценке производительности вывода для latency-режима запросы выполняются последовательно. Для каждого запроса измеряется продолжительность его выполнения. Стандартное отклонение рассчитывается на основе набора полученных длительностей, а те, которые выходят за пределы трех стандартных отклонений относительно среднего времени вывода, отбрасываются. Результирующий набор времен используется для вычисления *латентности* – медианы времен выполнения. На основании латентности рассчитывается *среднее количество кадров, обрабатываемых за секунду* (Frames per Second, FPS) – отношение размера пачки изображений к латентности. Для режима минимизации времени выполнения набора запросов вычисляется *среднее количество кадров, обрабатываемых за секунду* (Frames per Second, FPS) как отношение произведения размера пачки изображений и числа итераций тестирования ко времени выполнения всех запросов.

Intel Optimization for Caffe и Intel Optimization for TensorFlow работают только в одном режиме, аналогичном latency-режиму. Поэтому для них справедлив показатель FPS, который введен для данного режима работы OpenVINO.

4.5. Показатели качества

Для проверки качества работы моделей на задаче классификации используются показатели точности top-1 и top-5. Предположим, что N – количество категорий изображений. Для каждого изображения $I_j, j = \overline{1,S}$ в выборке модель формирует на выходе вектор достоверностей $p^j = \left(p_1^j,\, p_2^j, \dots, p_N^j\right)$, где p_i^j – достоверность того, что изображение I_j принадлежит классу i.

Точность top-K (top-K accuracy) определяется следующим образом:

$$topK = \frac{\sum_{j=1}^{S} 1_{\left\{i_1^j, i_2^j, \dots, i_K^j\right\}}\left(l_j\right)}{S},$$

где $\left\{i_1^j, i_2^j, \dots, i_K^j\right\} \subseteq \left\{1, 2,\ \dots,\ N\right\}$, а $p_{i_1^j}^j, p_{i_2^j}^j, \dots, p_{i_K^j}^j$ – K наибольших достоверностей, l_j – класс, которому принадлежит изображение I_j согласно разметке, $1_{\left\{i_1^j, i_2^j, \dots, i_K^j\right\}}\left(l_j\right)$ – индикаторная функция, значение которой равно 1, если $l_j \in \left\{i_1^j, i_2^j, \dots, i_K^j\right\}$, и 0, в противном случае.

4.6. Результаты экспериментов

Для доказательства корректности работы моделей приведем результаты, полученные с использованием компонента AccuracyChecker. Полученные значения точности top-1 и top-5 приведены в таблице 2. Из этих результатов можно сделать вывод, что показатели точности соответствуют тем, которые получены с использованием оригинальных фреймворков. Небольшие отличия обусловлены оптимизациями, выполняемыми пакетом OpenVINO в процессе конвертации моделей.

Анализ результатов производительности требует подбора оптимальных параметров запуска вывода на предоставляемом вычислительном узле (числа потоков и ряда других). В [20] показано, что оптимальными являются параметры по умолчанию. Здесь выполняется подбор параметров для библиотек Intel Optimization for Caffe и Intel Optimization for TensorFlow.

Таблица 2. Точность top-1 и top-5 для моделей mobilenet-v1-1.0-224 и mobilenet-v1-1.0-224-tf, обученных в оригинальных фреймворках Caffe и TensorFlow, а также точность соответствующих моделей, сконвертированных с использованием OpenVINO под устройства Intel CPUs (CPU), Intel Processor Graphics (iGPU) и Intel Movidius Neural Compute Stick 2 (MYRIAD)

Модель	**mobilenet-v1-1.0-224**					**mobilenet-v1-1.0-224-tf**				
Библиотека	**Caffe**	**OpenVINO**				**TensorFlow**	**OpenVINO**			
Устройство	CPU	CPU	iGPU		MYRIAD	CPU	CPU	iGPU		MYRIAD
Формат весов	FP32	FP32	FP32	FP16	FP32	FP32	FP32	FP32	FP16	FP16
top-1, %	69.49	69.49	69.49	69.48	69.45	71.11	71.11	71.11	71.06	71.06
top-5, %	89.24	89.24	89.24	89.22	89.18	89.88	89.88	89.88	89.86	89.85

Для библиотеки Caffe перебираются значения двух параметров: количество параллельно запускаемых потоков и расположение потоков на ядрах системы (задается через переменную окружения KMP_AFFINITY). Для каждого сценария расположения потоков перебираются значения числа потоков, равные 1, 2, 4, 6, 8, 12. При этом рассматриваются размеры обрабатываемой пачки изображений 1, 2, 4, 8, 16, 32. Выбирается оптимальное количество потоков для каждого возможного сценария. Оно соответствует числу физических или логических ядер на узле. Полученные результаты приведены на рисунке 2. Лучшая производительность ~98 fps достигается на 6 потоках при использовании сценариев распределения core (balanced, disabled, scatter), thread (balanced, disabled, scatter) и tile (balanced, disabled, scatter) при размере пачки в 4 изображения. При увеличении размера пачки наблюдается падение производительности (на 8 изображениях FPS выравнивается около 90, далее при 16 – ~94, а при 32 – ~92. Данный факт можно объяснить неэффективным доступом к кэш-памяти.

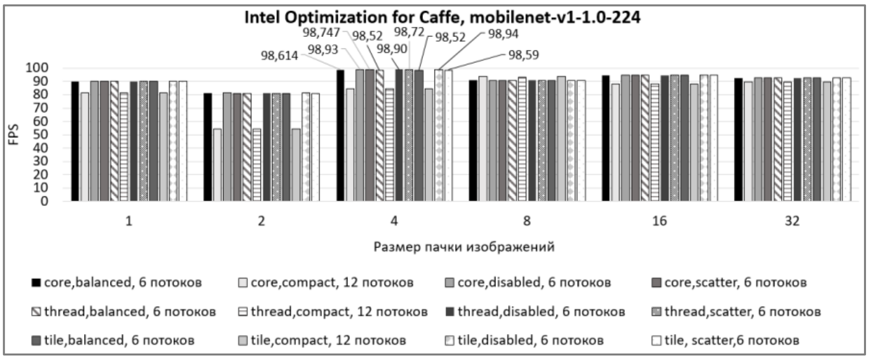


Рис. 2. Подбор параметров запуска вывода для Intel Optimization for Caffe. Значения FPS для каждого допустимого сценария расположения потоков на ядрах системы при оптимальном количестве потоков

Для библиотеки TensorFlow перебираются значения двух аналогичных параметров. Следует отметить, что наряду с этими параметрами имеются еще два других. num_intra_threads контролирует параллелизм внутри операции (например, матричное умножение может выполняться в несколько потоков). num_inter_threads контролирует параллелизм между независимыми операциями топологии. num_intra_threads выбирается равным числу физических ядер, а num_inter_threads – количеству вычислительных устройств с общим кэшем (сокетов). Данный выбор обусловлен рекомендациями из [21]. На рисунке 3 приведены результаты производительности вывода для каждого сценария при оптимальном количестве потоков. Наилучшая производительность ~165 fps достигается на обрабатываемой пачке, состоящей из двух изображений, на 6 потоках для сценариев thread и tile (scatter), num_intra_threads = 6.

Теперь сравним результаты производительности вывода, которые получены при запуске OpenVINO в latency-режиме, Intel Optimization for Caffe и Intel Optimization for TensorFlow при подобранных оптимальных параметрах запуска (рис. 4). Для каждой модели фреймворк OpenVINO при параметрах, заданных по умолчанию, показывает лучшую производительность для каждого размера обрабатываемой пачки изображений, чем соответствующие библиотеки с подобранными оптимальными параметрами. OpenVINO выигрывает более 300 fps у Caffe и немного меньше у TensorFlow. Данный факт свидетельствует об эффективности оптимизаций нейронной сети, выполняемых на этапе конвертации модели во внутреннее представление библиотеки. Следует также отметить, что запуск на iGPU дает практически вдвое лучшие результаты производительности по сравнению с Caffe и TensorFlow даже для формата FP32, что говорит о перспективности использования Intel Processor Graphics.

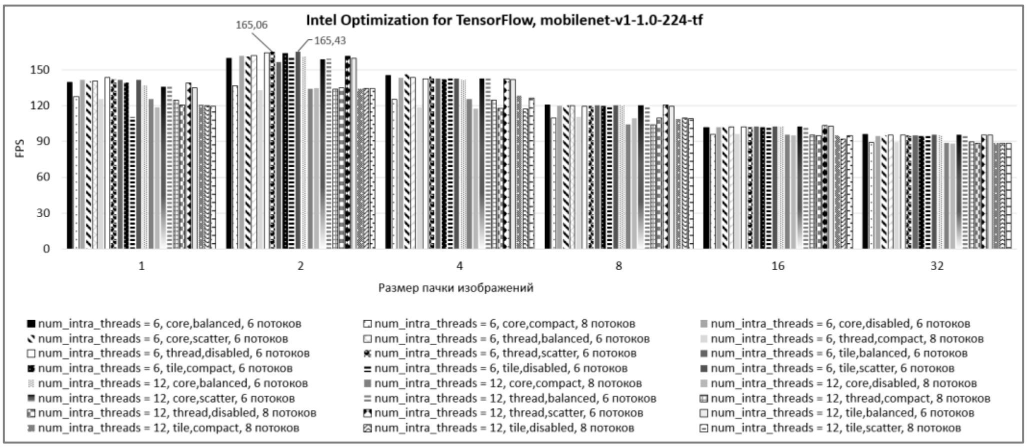


Рис. 3. Подбор параметров запуска вывода для Intel Optimization for TensorFlow. Значения FPS для каждого допустимого сценария расположения потоков на ядрах системы при оптимальном числе потоков

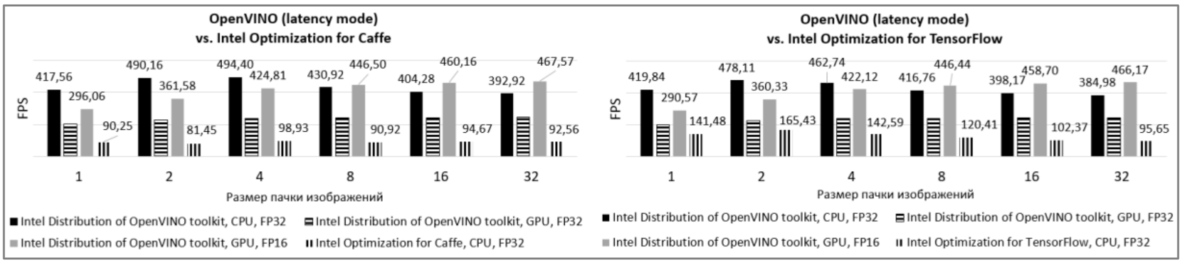


Рис. 4. Сравнение результатов производительности на CPU Intel Distribution of OpenVINO toolkit в latency-режиме (формат весов FP32), Intel Optimization for Caffe и Intel Optimization for TensorFlow при подобранных оптимальных параметрах

Ниже (рис. 5) приведем результаты производительности вывода, полученные при запуске OpenVINO в throughput-режиме. Аналогов, известных авторам, для данного режима не существует. Лучшая производительность достигается на CPU при пачке обрабатываемых изображений, равной 1. Отметим, что с увеличением пачки FPS на CPU падает, и разница достигает около 300 fps.

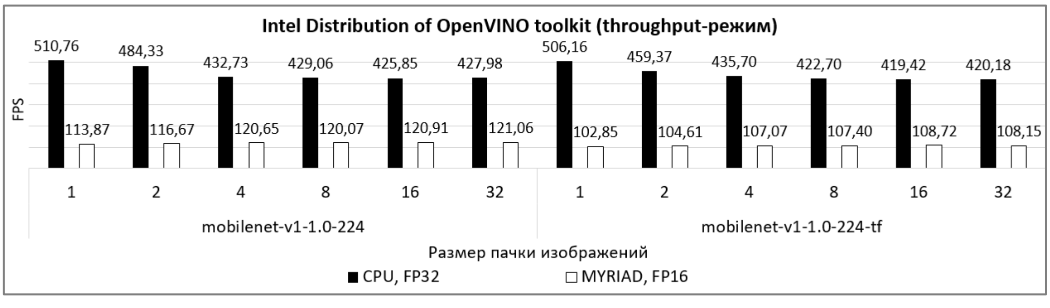


Рис. 5. Сравнение результатов производительности моделей на различных устройствах с помощью Intel Distribution of OpenVINO toolkit в throughput-режиме

Это доказывает эффективность данного режима на маленьких пачках данных, именно поэтому его имеет смысл использовать в случае, когда обрабатываемые кадры поступают с задержкой. Movidius является энергоэффективным вычислительным устройством с энергопотреблением порядка 1 Вт, производительность которого ниже в 4.5 и 5 раз в зависимости от модели на пачке из одного изображения по сравнению с CPU потребляющим до 65 Вт.

5. Заключение

В ходе исследований разработана система DLI, которая позволяет автоматизировать сбор показателей производительности вывода глубоких нейросетевых моделей на различных платформах компании Intel. В настоящее время собираются и публикуются показатели производительности, полученные средствами OpenVINO для 100 моделей на трех аппаратных конфигурациях [11]. Интегрированы библиотеки Intel Optimization for Caffe и Intel Optimization for TensorFlow для вывода нейросетей. Разработан компонент для определения качества моделей на основании соответствующего инструмента в составе OpenVINO.

Далее планируется автоматизировать сбор и публикацию показателей производительности вывода моделей через Intel Optimization for Caffe и Intel Optimization for TensorFlow, а также показателей качества моделей; интегрировать библиотеки PyTorch и MXNet для вывода; обеспечить поддержку вывода моделей, квантизованных средствами OpenVINO.

Литература

1. Howard A. G. et al.: MobileNets: Efficient Convolutional Neural Networks for Mobile Vision Applications. 2017. URL: https://arxiv.org/abs/1704.04861 (дата обращения: 20.10.2021).
2. Redmon J., Farhadi A.: YOLOv3: An Incremental Improvement. 2018. URL: https://arxiv.org/abs/1804.02767 (дата обращения: 20.10.2021).
3. Chen, L.-C., et al.: DeepLab: semantic image segmentation with deep convolutional nets, atrous convolution, and fully connected CRFs. 2017. URL: https://arxiv.org/abs/1606.00915 (дата обращения: 20.10.2021).
4. Hannun A. et al.: Deep Speech: Scaling up end-to-end speech recognition. 2014. URL: https://arxiv.org/pdf/1412.5567 (дата обращения: 20.10.2021).
5. Strobelt H. et al.: GenNI: Human-AI Collaboration for Data-Backed Text Generation. 2021. URL: https://arxiv.org/abs/2110.10185 (дата обращения: 20.10.2021).
6. Marquart I. Text analysis and deep learning: A network approach. 2021. URL: https://arxiv.org/abs/2110.04151 (дата обращения: 20.10.2021).
7. DAWNBench. An End-to-End Deep Learning Benchmark and Competition. URL: https://dawn.cs.stanford.edu/benchmark/ (дата обращения: 20.10.2021).
8. AI Matrix. AI Benchmark. URL: https://aimatrix.ai/en-us (дата обращения: 20.10.2021).
9. MLPerf Benchmark. URL: https://github.com/mlperf (дата обращения: 20.10.2021).
10. DLI: Deep Learning Inference Benchmark. URL: https://github.com/itlab-vision/dl-benchmark (дата обращения: 20.10.2021).
11. DLI: Deep Learning Inference Benchmark. Официальная страница проекта. URL: http://hpc-education.unn.ru/dli-ru (дата обращения: 20.10.2021).
12. Intel Distribution of OpenVINO toolkit. URL: https://software.intel.com/en-us/openvino-toolkit (дата обращения: 18.10.2021).
13. Intel Optimization for Caffe. URL: https://github.com/intel/caffe (дата обращения: 18.10.2021).
14. TensorFlow Optimizations on Modern Intel Architecture. 2017. URL: https://www.intel.com/content/www/us/en/developer/articles/technical/tensorflow-optimizations-on-modern-intel-architecture.html (дата обращения: 20.10.2021).
15. Docker. URL: https://www.docker.com (дата обращения: 22.10.2021).
16. Accuracy Checker. Deep Learning accuracy validation framework. URL: https://docs.openvino.ai/latest/omz_tools_accuracy_checker.html (дата обращения: 22.10.2021).
17. ImageNet. URL: https://image-net.org (дата обращения: 22.10.2021).
18. Caffe. URL: http://caffe.berkeleyvision.org (дата обращения: 22.10.2021).
19. TensorFlow. URL: https://www.tensorflow.org (дата обращения: 22.10.2021).

20. Kustikova V., et al.: DLI: Deep Learning Inference Benchmark // CCIS. V. 1129. 2019. P. 542-553.
21. Xu J., et al.: Maximize TensorFlow Performance on CPU: Considerations and Recommendations for Inference Workloads. URL: https://www.intel.com/content/www/us/en/developer/articles/technical/maximize-tensorflow-performance-on-cpu-considerations-and-recommendations-for-inference.html (дата обращения: 30.10.2021).

МОДИФИКАЦИЯ АЛГОРИТМА ГЛОБАЛЬНОГО ПОИСКА С ПОМОЩЬЮ ЛОКАЛЬНОЙ НАСТРОЙКИ[1*]

Д.И. Силенко, И.Г. Лебедев

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Рассматриваются задачи одномерной оптимизации и локальные методы поиска минимума. Об оптимизируемой функции делается лишь общее предположение, что она удовлетворяет условию Липшица с априори неизвестной константой. Локальные методы являются локальным уточнением для алгоритма глобального поиска и призваны улучшить его работу. Проведены численные эксперименты на тестовых задачах, подтверждающие что использование локального уточнения уменьшает число вычислений значений функции при решении задачи глобальной оптимизации.

Ключевые слова: глобальная оптимизация, локальная оптимизация, многоэкстремальные функции.

1. Введение

При поиске глобального минимума функции можно придерживаться различных алгоритмов: от основанных на идее случайного поиска [2, 3, 9], до детерминированных алгоритмов гарантирующих сходимость к глобальному минимуму [13, 7, 10]. Поскольку в реальных задачах глобальной оптимизации каждое вычисление значения функции представляет собой весьма трудоемкую задачу, необходимо уменьшить количество таких операций. Этого можно добиться целенаправленным выбором вариантов в процессе поиска оптимального решения. На этой идее основывается алгоритм глобального поиска (АГП) [11]. Но в данной работе речь пойдет не только непосредственно об АГП, но также и об ином подходе, который может достаточно сильно ускорить работу всего глобального поиска.

Данный подход называется локальной настройкой. Ее использование вполне оправдано – было показано, что для некоторых функций использование оценок константы Липшица лишь замедляет поиск в подобластях, где локальные константы Липшица значительно меньше самой L (по сути, глобальной константы Липшица)[4-6]. Чтобы избежать подобных ситуаций будем адаптивно оценивать локальные константы в различных подобластях поиска, чтобы ускорить работу в целом. Подробнее о том, как именно это сделать будет описано ниже.

Сам по себе АГП достаточно хорошо параллелится, что также было показано в данной работе. Причем использовались сразу две технологии параллельного программирования – OpenMP и MPI. При решении серии задач проверялась параллельная работа как самого АГП, так и его модернизации с использованием локальной настройки, а также проведено их сравнение. Результаты данных сравнений находятся в разделе «Эксперименты».

2. Постановка задачи

Рассмотрим задачу поиска глобального минимума одномерной функции $\varphi(x)$ в гиперинтервале $D = \{x \in R: a \leq x \leq b\}$ При этом будем предполагать, что функция удовлетворяет условию Липшеца с априори неизвестной константой L.

$$\varphi(x^*) = min\{\varphi(x): x \in D\} \quad (3)$$

$$D = \{x \in R: a \leq x \leq b\}$$

$$|\varphi(x_1) - \varphi(x_2)| \leq L\|x_1 - x_2\|, x_1, x_2 \in D \; 0 < L < \infty \quad (4)$$

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0729-2020-0055) и научно-образовательного математического центра “Математика технологий будущего” (соглашение № 075-02-2021-1394).

3. Описание алгоритмов

3.1. Алгоритм глобального поиска

Основная идея данного подхода заключается в том, что минимизируемая функция рассматривается как реализация некоторого случайного процесса. Решающие правила алгоритма конструируются таким образом, что очередная итерация проводится в точке глобального минимума математического ожидания значений функции. Эта точка записывается в список известных значений и итерации повторяются. Так происходит до тех пор, пока не достигнут один из выбранных критериев остановки: расстояние между точками отрезка не становится меньше заданного значения или новые точки не попадают в окрестность истинного глобального минимума. Еще одним вариантом остановки работы алгоритма является достижение установленного максимума возможных итераций [16].

Схема алгоритма:

Первые два испытания: $x^0 = 0$ и $x^1 = 1$.

1. Упорядочить точки по координате:

$$0 = x_0 < \ldots < x_i < \ldots < x_k = 1 \tag{5}$$

2. Вычислить оценку μ для неизвестной константы Липшица L,

$$\mu = max\left\{\frac{|z_i - z_{i-1}|}{(x_i - x_{i-1})^{1/N}}, i = 1, \ldots, k\right\} \tag{6}$$

3. Для каждого $(x_{i-1}, x_i), 1 \le i \le k$, вычислить характеристику $R(i)$,

$$R(1) = 2\Delta_1 - 4\frac{z_1}{\mu r}$$

$$R(k) = 2\Delta_k - 4\frac{z_{k-1}}{\mu r} \tag{7}$$

$$R(i) = \Delta_i + \frac{(z_i - z_{i-1})^2}{r^2\mu^2\Delta_i} - 2\frac{(z_i + z_{i-1})}{r\,\mu},\ 1 < i < k$$

где Δ_i – корень степени N из длины интервала, $r > 1$, – параметр метода.

4. Определить номер t:

$$R(t) = max\{R(i) : 1 \le i \le k\} \tag{8}$$

Провести очередное испытание в точке из интервала (x_{t-1}, x_t)

$$x^{k+1} = \frac{x_t + x_{t-1}}{2}, t = 1, t = k \tag{9}$$

$$x^{k+1} = \frac{x_t + x_{t-1}}{2} - sign(z_t - z_{t-1})\frac{1}{2r}\left[\frac{|z_t - z_{t-1}|}{\mu}\right]^N$$

Алгоритм прекращает работу, если выполняется условие $\Delta_{t_j} \le \varepsilon$ хотя бы для одного номера t_j, $1 \le j \le P$; здесь $\varepsilon > 0$ есть заданная точность. В качестве оценки глобально-оптимального решения задачи (3) выбираются значения

$$f_k^* = \min_{1 \le i \le k} f(x^i), x_k^* = \arg \min_{1 \le i \le k} f(x^i) \tag{10}$$

Обоснование данного способа организации параллельных вычислений см. в [14]. Модификации, учитывающие наличие ограничений-неравенств в задаче, а также информация о производной целевой функции, представлены в [1, 12, 8].

3.2. Локальная настройка (Local Tuning)

Нами была рассмотрена реализация АГП с оценкой глобальной константы Липшеца, но стоит уточнить, что это не единственный подход. Есть случаи, когда в силу поведения функции использование оценки глобальной константы Липшеца на подинтервале поиска ведет к очень медленной работе алгоритма. [15] По сути, это происходит из-за того, что если бы мы подсчитали оценку константы L для этого конкретного подинтервала, то получили бы значение заметно меньше глобальной L. Чтобы этого избежать воспользуемся подходом, позволяющим настраивать поведение метода в различных секторах поиска, что, в свою очередь, помогает согласовывать полученную локальную и глобальную информации. Если текущий обрабатываемый интервал узкий, то основное влияние оказывает локальная информация, в противном случае (когда интервал достаточно большой) необходимо учитывать данные со всей области для корректной работы.

Схема алгоритма в точности повторяет АГП за исключением пункта 2 с подсчетом оценки глобальной константы L. Именно этот новый пункт мы и распишем:

2. Вычислить оценку μ_j для локальной константы Гельдера H_j для интервалов $[x_{j-1}, x_j], 2 \le j \le k$, используя одну из следующих формул:

$$\mu_j = \max\{\lambda_j, \gamma_j, \xi\} \text{ ; LT – Local Tuning Maximum} \tag{9}$$

$$\mu_j = \max\{\frac{\lambda_j}{r} + \frac{r-1}{r}\gamma_j, \xi\} \text{ ; LTA – Local Tuning Additive} \tag{10}$$

$$\mu_j = \max\{H_j, \frac{\lambda_j}{r} + \frac{r-1}{r}\gamma_j, \xi\} \text{ , где } H_j = \frac{|z_j - z_{j-1}|}{x_j - x_{j-1}}; \tag{11}$$

LTMA – Local Tuning Maximum-Additive

Здесь, ξ – маленькое число (порядка 10^{-6}); λ_j отслеживает локальную информацию и вычисляется по формуле

$$\lambda_j = \max\left\{\frac{|f(x_i) - f(x_{i-1})|}{|x_i - x_{i-1}|^{1/N}} : i \in I_j\right\},$$
$$I_j = \begin{cases} \{2, 3\}, & \text{если } j = 2 \\ \{j-1, j, j+1\}, & \text{если } 3 \le j \le k-1 \\ \{k-1, k\}, & \text{если } j = k \end{cases} \tag{12}$$

А γ_j отвечает за накопление глобальной информации на всех предыдущих итерациях. Для нее формула

$$\gamma_j = \mu \frac{(x_j - x_{j-1})^{1/N}}{(X^{max})^{1/N}}, \tag{13}$$

где

$$\mu = \max\left\{\frac{|f(x_j) - f(x_{j-1})|}{(x_j - x_{j-1})^{\frac{1}{N}}} : 2 \le j \le k\right\} \tag{14}$$

$$X^{max} = \max\{x_i - x_{i-1} : 2 \le i \le k\} \tag{15}$$

Далее алгоритм идентичен представленному в пункте 3.1 (вместо μ теперь везде используется вычисленное на итерации μ_j).

3.3. Параллельная версия с использованием MPI и OpenMP

Выбор сразу двух данных технологий параллельного программирования призван в первую очередь ускорить работу АГП на высокопроизводительном кластере, который имеет большое количество вычислительных ядер и при этом большое количество потоков на каждом. Идея в том, чтобы на каждой итерации брать несколько интервалов, на которых будут производиться вычисления новой точки и всей сопутствующей информации. Стоит подробнее поговорить о том, как эти интервалы (а следовательно и точки) будут распределяться между процессами.

Итак, нам необходимо на каждой итерации вычислять определенное число точек. Будем отправлять их на процессы по группам. Для этого используется библиотека для работы параллельных процессов MPI, причем нулевой процесс занимается отправкой точек на вычисление остальным и сбором результатов, но непосредственно в подсчетах не участвует.

Теперь на каждом процессе, кроме нулевого, мы имеем целую группу, вычислять которые будем также параллельно с использованием стандарта OpenMP (позволяет производить подсчеты на разных потоках внутри процесса).

Такая схема параллельных вычислений, в теории, позволяет по максимуму реализовать потенциал высокопроизводительных систем, используя большую часть их ресурсов. Далее мы проверим как она работает и какие результаты показывает на практике.

4. Эксперименты

Вычислительные эксперименты проводились на узлах вычислительного кластера ННГУ им. Н.И. Лобачевского (под управлением операционной системы CentOS 7.2). Узел кластера располагает 2-я процессорами Intel Sandy Bridge E5-2660 2.2 GHz, 64 Gb RAM. Центральный процессор является 8-х ядерным. Для построения разработанных алгоритмов использовался компилятор GCC 5.5.0 и Intel MPI 2017.

В работе [17, 18] описан GKLS-генератор, позволяющий порождать задачи многоэкстремальной оптимизации с заранее известными свойствами: количеством локальных минимумов, размерами их областей притяжения, точкой глобального минимума, значением функции в ней и т.п.

Ниже приведены результаты сравнения двух параллельных алгоритмов – стандартного АГП и его модификации с использованием локальной настройки. Численное сравнение проводилось на классах функций Simple и Hard размерности 4 и 5 из [19], т.к. решение задач размерности 2 и 3 требует малого числа итераций то использование GPU для решения этих задач нецелесообразно. Критерием остановки служило попадание точки испытания в эпсилон окрестность истинного глобального минимума.

Запуск производился на 4 узлах кластера, с 5 MPI-процессами (напомним, что один из них – нулевой в расчетах не участвует) и 16 OMP-потоками. Следовательно за одну итерацию вычислялось 64 точки, причем рассылались они на процессы группами по 16 точек, где вычислялись каждая отдельным потоком.

В таблице 1 представлено среднее количество итераций, проводимое двумя методами: алгоритмом глобального поиска (АГП) и локальной настройкой (LT) на задачах разной размерности (N) и разного класса (Класс). Значение в скобках (если оно есть) показывает количество не решенных задач. Это означает, что было достигнут максимум по числу проводимых итераций, но в окрестность глобального минимума точка так и не попала.

Таблица 1. Среднее число испытаний, проводимое разными алгоритмами

N	Класс	АГП (последовательный)	АГП (параллельный)	LT (параллельный)
4	Simple	12168.9	161.2	136.7 (1)
	Hard	25636.5	499.4	434.1
5	Simple	20633.6	720.9	208.1
	hard	161094.9 (4)	2529.1 (1)	1722.9 (2)

5. Заключение

В результате работы удалось реализовать альтернативный подход к вычислению оценки константы Липшеца – локальную настройку, основанную на трех основных формулах: Local Tuning Maximum, Local Tuning Additive, Local Tuning Maximum-Additive. Такая реализация позволяет более гибко подстраивать работу всего алгоритма к специфики каждой конкретной функции и благодаря этому производить меньше вычислений. Причем при вычислениях использовались параллельные версии АГП и локальной настройки. Для проведения сравнения – какой алгоритм лучше себя демонстрирует были проведены вычсилетильные эксперименты на серии из сотни тестовых задач.

Литература

1. Barkalov K.A. A global optimization technique with an adaptive order of checking for constraints / Barkalov K.A., Strongin R.G. // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2002. – Vol. 42, No. 9. – P. 1289-1300.
2. Ferreiro A.M., Garcia J.A., Lopez-Salas J.G., Vazquez C. An efficient implementation of parallel simulated annealing algorithm in GPUs // Journal of global optimization. – 2013. – Vol. 57, No. 3. – P. 863–890.

3. Garcia-Martinez J.M., Garzon E.M., Ortigosa P.M. A GPU implementation of a hybrid evolutionary algorithm: GPuEGO // Journal of super-computing. – 2014. – Vol. 70, No. 2. – P. 684–695.
4. Sergeyev Ya.D. A one-dimensional deterministic global minimization algorithm, Comput. Maths. Math. Phys. 1995, 35(5): 705–717.
5. Sergeyev, Ya.D., An information global optimization algorithm with local tuning, SIAM J. 1995, Optimization 5(4): 858–870.
6. Sergeyev, Ya.D., Global one-dimensional optimization using smooth auxiliary functions, Mathematical Programming 1998, 81(1): 127–146.
7. He J., Verstak A., Watson L.T., Sosonkina M. Design and implementation of a mas-sively parallel version of DIRECT // Computational optimization and applications. – 2008. – Vol. 40, No. 2. – P. 217–245
8. Gergel V.P. A global optimization algorithm for multivariate functions with lipschitzian first derivatives / Gergel V.P. // Journal of Global Optimization. – 1997. – Vol. 10, No. 3. – P. 257-281.
9. Langdon W.B. Graphics processing units and genetic programming: an overview // Soft Computing. – 2011. – Vol. 15, No 8. – P. 1657–1669.
10. Paulavicius R., Žilinskas J., Grothey A. Parallel branch and bound for global optimiza-tion with combination of Lipschitz bounds // Optimization methods and software. – 2011. – Vol. 26, No. 3. – P. 487–498.
11. Глобальная оптимизация: приложения и вычислительная сложность. URL: http://hpc-education.unn.ru/ru/globopt/глобальная-оптимизация-приложения-и (дата обращения: 10.10.2020).
12. Городецкий С. Ю. Методические материалы к лабораторной работе «Вычислительные методы поиска локальных минимумов функций», 2001. URL: http://itmm.unn.ru/files/2016/09/MO_Lab2_LocOpt.pdf (дата обращения: 09.10.2020).
13. Евтушенко Ю.Г., Малкова В.У., Станевичюс А.А. Параллельный поиск глобального экстремума функций многих переменных // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2009. – Т. 49, №2. – С. 255–269.
14. Стронгин Р.Г. Параллельные вычисления в задачах глобальной оптимизации / Стронгин Р.Г., Гергель В.П., Гришагин В.А., Баркалов К.А. – М.: Издательство Московского университета, 2013. 280 с.
15. Strongin R. G. and Sergeyev Ya. D. Global Optimization with Non-Convex Constraints, Springer-Science+Buisiness Media, 2000, P: 289-291 & 541-543
16. Шефов К. С., Степанова М. М. Реализация и применение параллельного алгоритма глобального поиска минимума к задаче оптимизации параметров молекулярно-динамического потенциала ReaxFF: URL: http://crm.ics.org.ru/uploads/crmissues/crm_2015_3/15750.pdf, 2015 (дата обращения: 13.10.2020).
17. Gaviano, M. Software for generation of classes of test functions with known local and global minima for global optimization/ M. Gaviano, D. Lera, D. E. Kvasov, Y. D. Sergeyev // ACM Transactions on Mathematical Software. – 2003. – Vol. 29. – P. 469-480.
18. Сергеев, Я.Д. Диагональные методы глобальной оптимизации / Я.Д. Сергеев, Д.Е. Квасов – М.: Физматлит, 2008. – 352 с.
19. Sergeyev, Ya.D. Global search based on efficient diagonal partitions and a set of Lipschitz constants / Ya.D. Sergeyev, D.E. Kvasov // SIAM Journal on Optimization. – 2006. Vol. 16, No. 3. – P. 910–937

ОЦЕНИВАНИЕ МНОЖЕСТВ ДОСТИЖИМОСТИ В ЗАДАЧАХ С ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЬЮ[1*]

М.С. Сорокина

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Ключевые слова: множество достижимости, эллипсоидальные множества достижимости, система с параметрической неопределенностью, нестационарная система

Рассматривается линейная нестационарная система, включающая в себя параметрическую неопределенность, при неточно известных начальном состоянии и действующем возмущении, удовлетворяющих единому ограничению. Параметрическая неопределенность является нестационарной. Ограничение представляет собой сумму квадратичной формы начального состояния и интеграла по времени от квадратичной формы возмущения (квадратичные формы могут быть вырожденными). Динамические системы, включающие влияние различных неопределенных факторов: внешних неизвестных, но ограниченных возмущений, неконтролируемых вариаций параметров и т.д., часто встречаются в прикладных задачах. В них необходимо определить, куда могут попасть траектории систем при наложенных ограничениях и различных возмущениях. Помимо этого, как правило, ресурс управления ограничен, а модель системы известна неточно и имеются неконтролируемые внешние возмущения. В связи с этим, множества достижимости играют важную роль в теории управления динамическими системами, имея способы эффективного их построения или оценивания, можно продвинуться в решении многих задач. Необходимость описания областей притяжения возникает во многих практических приложениях, например, при исследовании поведения и управлении механическими системами. Так как список решаемых с использованием множеств достижимости задач велик, то их применение не ограничивается механическими системами, например, задачи оптимального управления встречаются практически во всех сферах деятельности: в технической деятельности, экономике, медицине и т. д. Для такой системы приведен способ оценки эллипсоидального множества достижимости с использованием матричного дифференциального уравнения Риккати. В [1] приведен способ для оценки множеств достижимости для таких систем не замкнутых выходом. В данной работе рассматривается линейная нестационарная система, включающая в себя параметрическую нестационарную неопределенность, замкнутая выходом. Применим к такой системе подход, предложенный в [2]. Для этого применим к системе с параметрической неопределенностью технику оценивания состояния системы с использованием уравнения, указанного в теореме из [2]. Вид матрицы параметров наблюдателя возьмем в неизменном виде. В поставленной задаче изменится вид матрицы A системы. Рассмотрим поставленную задачу на примере уравнения Матье-Хилла с затуханием. В дальнейшем предполагается получить вид матрицы параметров наблюдателя для системы с неопределенностью и сравнить результаты построения оценки множества достижимости с результатами, приведенными здесь.

Литература

1. Sorokina M. Application of Optimal Evaluation of Linear Time-Varying Systems Using Reachable Sets// Communications in Computer and Information Science. 2021. V. 1413.
2. Баландин Д.В., Бирюков Р.С., Коган М.М. Эллипсоидальные множества достижимости линейных нестационарных систем в задачах оценивания и управления // Дифференциальные уравнения. 2019. Т. 55, № 11. С. 1485 – 1498.
3. Квакернаак Х., Сиван Р. Линейные оптимальные системы управления. М.: Мир, 1977.
4. Андреев Ю.Н. Управление конечномерными линейными объектами. М: Наука, 1976.

[1*] Работа выполнена при поддержке министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0729-2020-0055) и научно-образовательного центра «Математика технологий будущего» (проект № 075-02-2021-1394).

5. Баландин Д.В., Коган М.М. Синтез законов управления на основе линейных матричных неравенств. М: Наука, 2007.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КАЧЕСТВА ВОЗДУХА В Г. ТОМСК С ПОМОЩЬЮ КОМПЛЕКСА МОДЕЛЕЙ WRF/CAMX[1*]

Е.А. Стребкова[1], А.В. Старченко[1,2]

[1]Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
[2]Томский государственный университет

Представлены результаты численного моделирования метеорологических параметров и концентраций малых компонентов атмосферного воздуха в г. Томске, полученные с использованием моделей Weather Research & Forecasting (WRF) и Comprehensive Air quality Model with eXtensions (CAMx). Для оценки уровня качества атмосферного воздуха в городе на основе численного моделирования было выбрано несколько периодов, когда на TOP-станции ИАО СО РАН наблюдались повышенные концентрации загрязняющих веществ. Для этих периодов значения индекса качества воздуха были рассчитаны комплексом моделей WRF/CAMX с использованием рекомендаций Агентства по охране окружающей среды США (EPA). Полученные результаты численного прогноза показывают возможность формирования высокого уровня загрязнения атмосферного воздуха при конкретных метеорологических условиях в городе.

Ключевые слова: численное моделирование, качество воздуха, WRF, CAMx.

1. Введение

В общем случае уровень загрязнения воздуха в городах России зависит от комбинации различных факторов, среди которых важную роль играют явления как антропогенного, так и природного характера. Томск относится к городам с высоким уровнем влияния внутренних антропогенных источников загрязнения. Ухудшению циркуляции воздушных масс могут способствовать, как и естественные атмосферные явления, например, штилевые условия, так и антропогенное воздействие. К нему можно отнести неправильную застройку городов и пригородов высотными зданиями [1]. Ухудшение качества приземного воздуха над крупными урбанизированными территориями за счёт антропогенного воздействия на атмосферу может послужить причиной возникновения неблагоприятных экологических условий и причиной ухудшения состояния здоровья населения. Поэтому вопрос обеспечения мониторинга и прогнозирования состояния атмосферы над населёнными пунктами и их близлежащими территориями актуален [2,3]. Одним из способов проведения мониторинга и прогнозирования качества атмосферного воздуха в городе является численное моделирование. Для реализации этого способа в конкретных городах в настоящее время созданы и активно развиваются модели численного прогноза погоды и качества атмосферного воздуха.

Целью данной работы является применение комплекса мезомасштабных моделей численного прогноза погоды WRF и качества атмосферного воздуха CAMx для оценки уровня загрязнения приземного воздуха в г. Томск.

2. Материалы и методы

Комплекс оборудования «TOP-станция» ИОА СО РАН (56,478° с.ш. и 85,054° в.д.) состоит из нескольких блоков: аэрозольного, газоаналитического, метеорологического, радиационного и блока управления, сбора и передачи данных [4]. В распоряжении авторов имеются результаты измерений концентраций аэрозоля разного диаметра (от 0,25 мкм до 32 мкм) с аэрозольного блока и ряда газов с газоаналитического блока: CO, O_3, SO_2, NO и NO_2, измеренных в пункте наблюдения «TOP-станция» ИОА СО РАН с 1 января по 31 октября 2020г.

[1*] Работа выполнена в рамках гос. задания ИОА СО РАН при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ.

Для контроля и сравнения наблюдений TOP-станции и расчётов WRF по температуре воздуха и скорости ветра используется информация с метеостанции г. Томск (56,4666° с.ш. и 84,9666° в.д.) [5]

Область моделирования для модели WRF имеет размеры 450x450 км (географические координаты центра области 56,5° с.ш., 85° в.д. совпадают с центром города) и включает две вложенные подобласти размерами 150x150 - d02 и 50x50 км - d03 (Рис. 1). Шаг сеток для областей составляет 9, 3 и 1 км, соответственно. В вертикальном направлении рассматривался 41 расчетный уровень. Расчеты выполнялись на период времени продолжительностью в трое суток, время разгона модели WRF составило 24 часа, и этот период не учитывался в анализе.

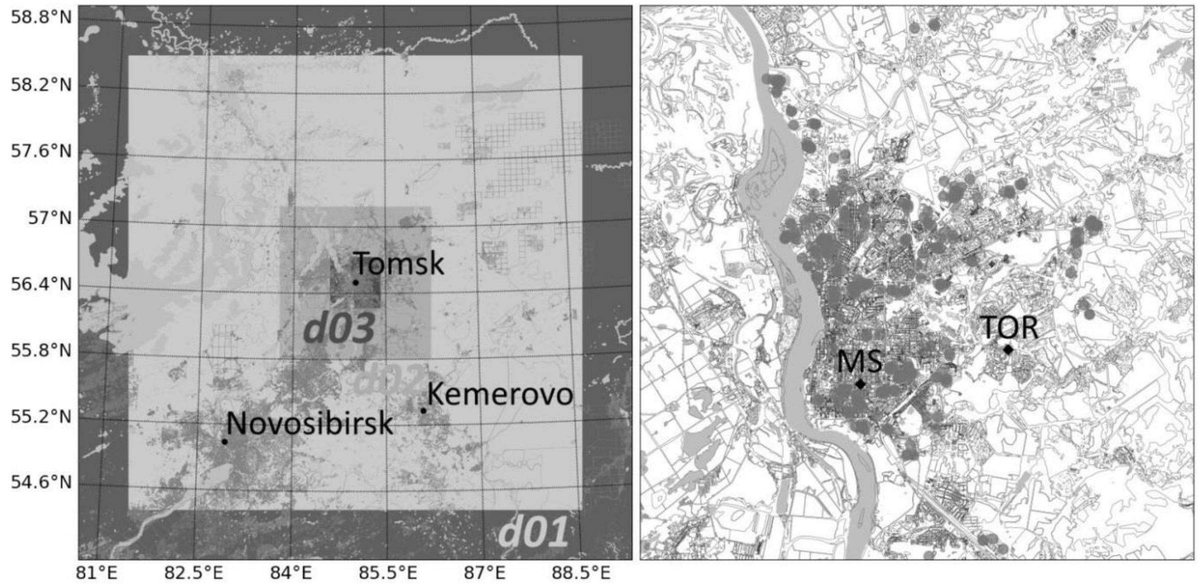


Рис. 1. Области моделирования, стационарные источники загрязнения атмосферы в г. Томск и его окрестностях, расположение TOP-станции и метеостанции

Модель CAMx - это некоммерческая система с открытым программным кодом для проведения наукоёмких исследований, которая является вычислительно эффективной, гибкой и публично доступной [6]. Fortran-код модели имеет модульный характер и хорошо документирован. Система требует адаптации и настройки под условия расчётной области и подготовки входных данных с помощью пользовательских препроцессорных программ или готового вспомогательного программного обеспечения. Именно поэтому CAMx удобна для моделирования качества воздуха. С помощью неё можно моделировать эмиссию, дисперсию, химические реакции и осаждение примесей путём численного решения уравнений, сформулированных в рамках подхода Эйлера для сплошной среды, путём интегрирования их по времени для каждой химической компоненты. Для ускорения проведения вычислений разработаны параллельные версии для технологий OpenMP и MPI и возможно использование комбинированного подхода для достижения максимального быстродействия.

Модель CAMx версии 6.30 [6] запускалась на вложенных сетках по метеорологическим полям, рассчитанным с использованием моделирующей системы WRF версии 4.2 [7] для областей d03 и d02.

В качестве химического механизма в CAMx выбирался Carbon Bond6 с моделированием образования аэрозольных частиц, включающий в себя 216 разнообразных реакций химии и фотолиза газов. Информация об общем атмосферном озоновом слое берётся из открытых источников [8]. Измерения TOR-станции учитываются в качестве фоновых концентраций загрязняющих веществ, когда набегающие потоки воздуха поступают с территорий с малой антропогенной нагрузкой: восточное, северо-восточное и южное направления ветра (Рис. 2). Фоновые концентрации, получены из осреднённых среднесуточных наблюдений для выбранных направлений при слабом ветре (до 3 м/с).

Ввиду отсутствия покомпонентных наблюдений по аэрозолю, а также для других малых составляющих загрязнителей атмосферного воздуха, их фоновые концентрации задаются нулевыми.

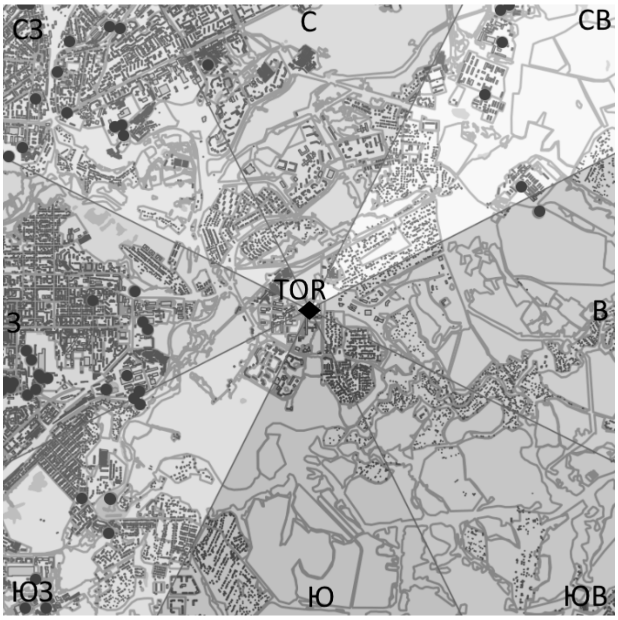


Рис. 2. Распределение направлений ветра и источников загрязнения атмосферы в районе TOR-станции

Интенсивность сеточных антропогенных источников выбросов изменяется в течение суток с максимумом в дневной период, что соответствует трафику дорожного движения. При моделировании влияния точечных источников используются параметры выбросов крупных дымовых труб промышленных предприятий, отмеченных значками на Рис. 1. Суммарные по городу суточные значения выбросов автомобильного транспорта и точечных источников оценивались из отчёта Департамента охраны окружающей среды Томской области [9].

3. Результаты

Для оценки качества атмосферного воздуха в г. Томск был проведен анализ имеющихся наблюдений TOR-станции за газовым и аэрозольным составом приземного воздуха на восточной окраине города. Было выбрано несколько периодов для дальнейшего анализа:11.01-12.01, 16.02-17.02 и 26.07 2020г. У этих периодов некоторые среднесуточные концентрации, а именно концентрации CO, O_3 и PM10, сильно выделяются на фоне остальных среднесуточных концентраций.

11 января было облачно с прояснениями, шёл слабый непрерывный снег, а 12 января было ясно и малооблачно.

16-17.02 за весь рассматриваемый период наблюдалась 100% облачность, за исключением периодов с 1 до 4 и с 13 до 19 часов 16 февраля. Начиная с 13 часов 17 февраля шёл непрерывный слабый снег.

В период 25-26.07 в ночное время небо было ясным, в остальное - облачным с прояснениями. С 7 до 13 часов 26 июля местного времени был туман.

Для оценки уровня качества атмосферного воздуха в г. Томск для трех выбранных временных периодов были проведены расчеты с использованием модели CAMx для двух вложенных областей. Для каждого периода одни сутки использовались для спинапа модели качества воздуха, двое других для оценки качества воздуха из результатов численного прогноза. Оценка качества приземного воздуха проводилась по результатам численного прогноза для вложенной области размером 44x44км, в центре которой располагался г. Томск. По результатам расчетов за двое контрольных суток определялись осредненные в соответствии с правилами расчета Индекс Качества Вохдуха (AQI) Агентства по охране окружающей среды США (EPA) [10]. В таблице 1 представлены правила расчёта AQI по трём осреднённым концентрациям:

$$AQI = \max \left\{ \max_{\substack{time\ average,\\ d03}} (AQI_{CO}), \max_{\substack{time\ average,\\ d03}} (AQI_{O_3}), \max_{\substack{time\ average,\\ d03}} (AQI_{PM10}) \right\}$$

Таблица 1. Контрольные точки агентства США по охране окружающей среды

O_3 (ppb)	**PM 10 (μg/m^3)**	**CO (ppm)**	**AQI**	
$C_{low} - C_{hight}$ (avg)	$C_{low} - C_{hight}$ (avg)	$C_{low} - C_{hight}$ (avg)	$I_{low} - I_{hight}$	Категория
0–54 (8-hr)	0–54 (24-hr)	0.0–4.4 (8-hr)	0–50	Хороший
55–70 (8-hr)	55–154 (24-hr)	4.5–9.4 (8-hr)	51–100	Умеренный
71–85 (8-hr)	155–254 (24-hr)	9.5–12.4 (8-hr)	101–150	Нездоровый для чувствительных
86–105 (8-hr)	255–354 (24-hr)	12.5–15.4 (8-hr)	151–200	Нездоровый
106–200 (8-hr)	355–424 (24-hr)	15.5–30.4 (8-hr)	201–300	Очень нездоро-вый

AQI для CO, O_3 and PM 10 вычислено по следующей формуле:

$$AQI_* = \frac{I_{high} - I_{low}}{C_{high} - C_{low}}(C - C_{low}) + I_{low},$$

где AQI_* – индекс качества воздуха, C - осреднённая концентрация загрязняющего вещества, C_{low} - контрольная точка $\leq C$, C_{high} - контрольная точка $\geq C$, I_{low} - индекс контрольной точки, относящийся к C_{low}, I_{high} - индекс контрольной точки. относящийся к C_{high}.

Таблица 2. Максимальное значение AQI за все рассматриваемые периоды в соответствии с осреднением

Период	**AQI_{CO}**	**AQI_{O3}**	**AQI_{PM10}**	**AQI**
11-12.01	9	23	4	23
16-17.02	24	201	17	201
25-26.07	15	47	31	47

В таблице 2 представлены максимальные значения Индекса Качества Воздуха за двое рассмотренных суток по компонентам примеси CO, O_3 and PM 10. Из таблицы видно, что хорошие для качества воздуха значения получаются для периодов с 11 по 12 января 2020 г. и с 25 по 26 июля 2020г. (в соответствии с критериями Таблицы 1).

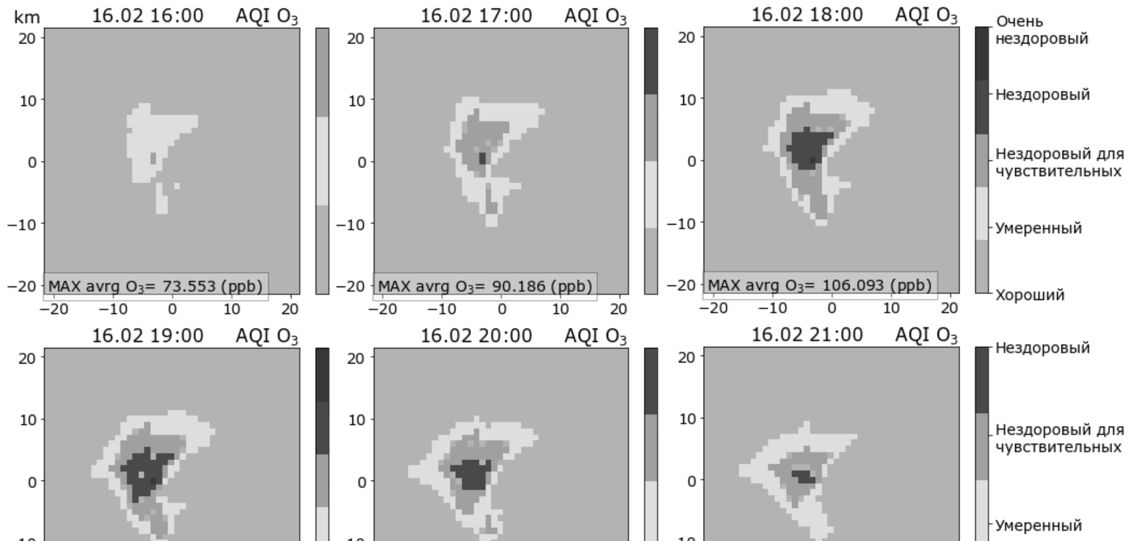


Рис. 3. Карта рассчитанного по критерию из таблицы 1 AQI для O_3 в период с 16:00 до 21:00

В зимний период времени с 16 по 17 февраля расчёты по комплексу WRF/CAMx показали резкое ухудшение качества воздуха в городе в связи с повышением концентрации озона (Рис. 3). Опять основным «виновником» ухудшения качества воздуха является озон. Заметим, что во все три рассмотренных периода времени измеренные значения концентраций озона находились в «хорошей» зоне в соответствии с таблицей 1. Полученные результаты указывают на необходимость увеличения количества измерительных станций, следящих за качеством воздуха в г. Томск или постоянное применение численного мониторинга за качеством воздуха в городе в совокупности с мобильными измерительными станциями.

4. Выводы

Представлены результаты численного моделирования метеорологической ситуации и качества атмосферного воздуха в г. Томск для двухдневных периодов времени: с 11 по 12 января, с 16 по 17 февраля и с 25 по 26 июля 2020 г. Их выбор производился на основе измерительных приборов TOP-станции ИОА СО РАН, результаты которых показали увеличение концентраций монооксида углерода, озона и частиц PM 10 в рассматриваемые дни.

Выполнена привязка моделей WRF и CAMx к выбранной территории, представлены сеточные и точечные источники, заданы граничные условия.

На основе проводимых расчётов с помощью комплекса WRF/CAMx для рассмотренных исторических дат установлено, что с 16 по 17 февраля 2020 г. численно было предсказано ухудшение качества воздуха в городе, причём это связано с повышением концентрации озона.

В качестве критериев оценка качества использовался показатель AQI US EPA.

Литература

1. Slimic I., Lovric M., Codec R., et al. Applying machine learning methods to better understand, model and estimate mass concentrations of traffic-related pollutants at a typical street canyon // Environmental pollution. 2020. Vol. 263, No. 114587.
2. Sokhi R., Baklanov A., Schlünzen H., et al. Mesoscale Modelling for Meteorological and Air Pollution Applications. New York, NY: Anthem Press, 2018. 260 p.
3. Allard J., Day. D., Alleyne M., Griffin R., et al. Analysis of the Effects of the Thai Power Development Plan 2015 on Air Quality from 2016 to 2036 // In Proccecing of the 2nd International Electronic Conference on Atmospheric Science (16-31 July); MDPI: Basel, Switzerland, 2016.
4. Давыдов Д.К., Белан Б.Д., Антохин П.Н. и др., Мониторинг атмосферный параметров: 25 лет TOP-станции ИОА СО РАН // Оптика атмосферы и океана. 2018. Vol. 31. No. 10, C. 845–855. DOI: 10.15372/AOO20181011.
5. Расписание погоды: архив погоды в г. Томск. URL: http://rp5.ru/ (дата обращения: 17.02.2021).
6. Ramboll Environ. CAMx usersguide v6.30. URL: http://www.camx.com/files/camxusersguide_v6-30.pdf (дата обращения: 16.03.2020).
7. National Center for Atmospheric Research. User’s Guide for the Advanced Research WRF (ARW) Modeling System Version 4.2. URL: https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/user_guide_v4/v4.2/contents.html (дата обращения: 05.2021).
8. NASA Ozone Watch. Images, data, and information for atmospheric ozone. https://ozonewatch.gsfc.nasa.gov/ozone_maps/ftptoms/omi/data/ozone/ (дата обращения: 03.2021).
9. Департамент природных ресурсов и охраны окружающей среды Томской области. Государственный доклад о состоянии и охране окружающей среды Томской области. URL: https://depnature.tomsk.gov.ru/2019-god (дата обращения: 17.06.2021).
10. United States Environmental Protection Agency. AQI Calculator. URL: https://www.airnow.gov/aqi/aqi-calculator-concentration/ (дата обращения: 18.06.2021).

КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ КОНКРЕТНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИСТЕМЫ АНАЛИТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ MAPLE

С.Н. Стребуляев, Д.А. Сироткина, А.М. Урбан

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Рассматривается типовая структурная схема системы электропривода, включающая в себя систему управления и двигатель. Исследуется задача об устойчивости перевернутого маятника. Проводится компьютерный анализ рассматриваемых систем при изменении отдельных параметров. Получена общая передаточная функция изучаемой системы и характеристическое уравнение в символьном виде. Проведен анализ устойчивости изучаемой системы по расположению корней характеристического уравнения на комплексной плоскости. Построены границы областей устойчивости в плоскостях различных параметров. Впервые получены границы областей устойчивости в виде поверхностей в трехмерном пространстве конструктивных параметров и найдены параметры, оказывающие наибольшее влияние на устойчивость системы электропривода.

Ключевые слова: система электропривода, математическая модель, характеристическое уравнение, область устойчивости, система аналитических вычислений, чувствительные параметры.

На первом этапе проводится анализ динамических характеристик системы электропривода.

Методы исследования динамики электропривода базируются на общих методах теории автоматического регулирования, которые в настоящее время в значительной степени модернизируются [1]. Это связано с широким внедрением в расчетную практику численных методов, основанных на применении ЭВМ. Электропривод является составной частью почти любой современной машины или оборудования. Система электропривода является сложной многоконтурной системой с несколькими цепями обратной связи и большим количеством регулируемых параметров. Значения этих параметров не всегда известны точно или могут варьироваться в процессе эксплуатации. Использование систем аналитических вычислений (САВ) в процессе создания математических моделей, и, особенно при их анализе сопряжено с необходимостью выполнения громоздких преобразований и вычислений. Актуальна задача построения математических моделей и создания программного обеспечения и расчёта устойчивости, в том числе и робастной, исследуемых систем.

Структурная схема рассматриваемого электропривода приведена на рисунке 1. Эта схема состоит из двух частей: собственно, электропривода (ЭП) и двигателя (Д). Сигнал от устройства числового программного управления U_3 поступает на вход регулятора скорости (коэффициент передачи в изображении по Лапласу $W_1(p), p = i\omega$). При наличии рассогласования ΔU_2 на входе регулятора скорости, на его выходе формируется сигнал, пропорциональный этому рассогласованию, который, сравниваясь с текущим значением тока якоря, поступает на вход регулятора тока.

На рис.1 $W_3(p)$, $W_4(p)$ и $W_5(p)$ – передаточные функции тиристорного преобразователя, цепи якоря и двигателя соответственно; K_1, K_2 – коэффициенты усиления в цепи обратной связи контура тока и скорости; C_m, C_e – коэффициенты усиления по моменту и ЭДС. K_1, K_2, C_m, C_e являются усилительными безынерционными звеньями, $W_1(p)$ и $W_2(p)$ – позиционными, $W_3(p)$ и $W_4(p)$ – апериодическими, $W_5(p)$ – интегрирующим.

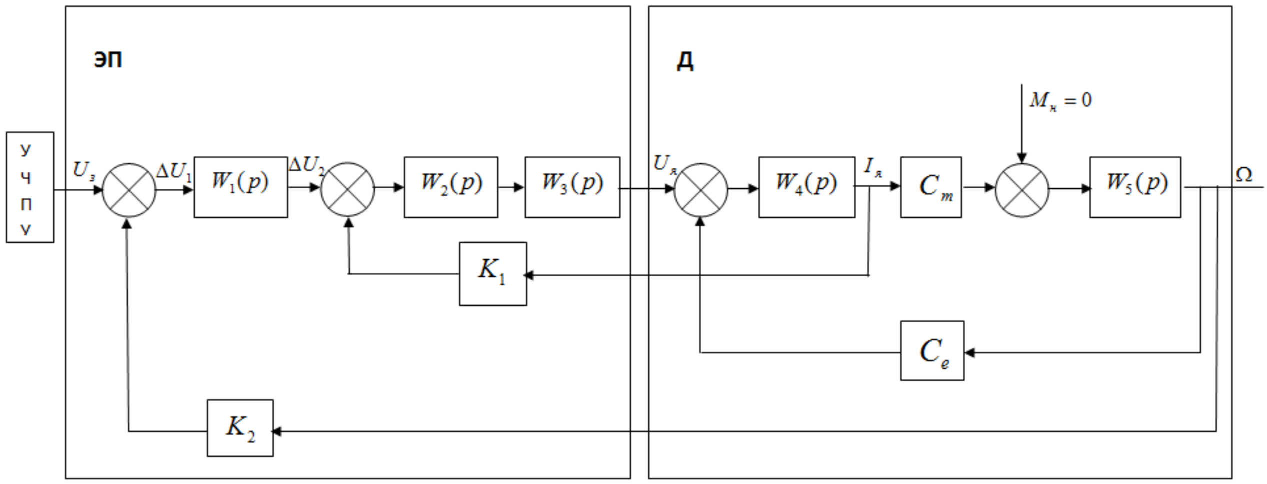


Рис.1. Структурная схема системы электропривода

Передаточные функции отдельных звеньев системы хорошо известны из теории автоматического регулирования и имеют вид:

$$W_3(p) = \frac{T_1}{1+T_2 p}, \tag{1}$$

$$W_5(p) = \frac{1}{T_5 p}, \tag{2}$$

$$W_4(p) = \frac{T_3}{1+T_4 p}, \tag{3}$$

где T_1 и T_2 – коэффициент усиления и малая постоянная времени, соответственно, тиристорного преобразователя;

$T_3 = \frac{1}{R_я}$, Ом$^{-1}$ и $T_4 = \frac{L_я}{R_я}, \frac{Гн}{Ом}$, где $L_я$ и $R_я$ – индуктивность и сопротивление в цепи якоря двигателя,

T_5 – суммарный момент инерции ротора с приведенной инерционной нагрузкой.

Отличия в структурных схемах рассматриваемых приводов состоят в видах передаточных функций регуляторов скорости $W_1(p)$ и тока $W_2(p)$. В настоящем рассмотрении эти передаточные функции представлены в общем виде отношением полиномов:

$$W_1(p) = \frac{a_1+a_2 p}{b_1+b_2 p}, \tag{4}$$

$$W_2(p) = \frac{c_1+c_2 p}{d_1+d_2 p+d_3 p^2}, \tag{5}$$

Анализ структурной схемы (рис. 1) показывает, что общая передаточная функция системы может быть получена из следующих очевидных соотношений:

$$\begin{cases} [(U_3 - K_2\Omega)W_1(p) - I_я K_1]W_2(p)W_3(p) = U_я \\ (U_я - \Omega C_e)W_4(p) = I_я \\ (U_я - \Omega C_e)W_4(p)C_m = \frac{\Omega}{W_5(p)} \end{cases} \tag{6}$$

где Ω – скорость вращения ротора двигателя. После преобразования выражений из (6) получим:

$$\Omega(p) = F(p)U_3(p). \tag{7}$$

Общая передаточная функция $F(p)$ определяется из соотношения:

$$F(p) = \frac{(C_m W_1(p)W_2(p)W_3(p)W_4(p)W_5(p))}{(K_2 C_m W_1(p)W_2(p)W_3(p)W_4(p)W_5(p) + 1 + K_1 W_2(p)W_3(p)W_4(p) + C_e C_m W_4(p)W_5(p))}$$

Для рассматриваемого электропривода общая передаточная функция $F(p)$ представляется в виде отношения полинома второго порядка к полиному шестого порядка:

$$F(p) = \frac{R_2(p)}{Q_6(p)} = \frac{r_2 + r_1 p + r_0 p^2}{q_6 + q_5 p + q_4 p^2 + q_3 p^3 + q_2 p^4 + q_1 p^5 + q_0 p^6} \quad (8)$$

Приравниваем знаменатель общей передаточной функции к нулю и получаем характеристическое уравнение вида:

$$Q_6(p) = q_0 p^6 + q_1 p^5 + q_2 p^4 + q_3 p^3 + q_4 p^2 + q_5 p^1 + q_6 p = 0 \quad (9)$$

где

$q_0 = T_5 b_2 d_3 T_2 T_4$;

$q_1 = T_5 b_2 d_3 T_4 + T_5 b_1 d_3 T_2 T_4 + T_5 b_2 d_2 T_2 T_4 + T_5 b_2 d_3 T_2$;

$q_2 = C_e C_m T_3 b_2 d_3 T_2 + T_5 b_1 d_3 T_2 + T_5 b_1 d_2 T_2 T_4 + T_5 b_2 d_1 T_2 T_4 + T_5 b_2 d_3 + T_5 b_2 d_2 T_2 + T_5 b_1 d_3 T_4 + T_5 b_2 d_2 T_4$;

$q_3 = C_e C_m T_3 b_1 d_3 T_2 + T_5 b_1 d_2 T_4 + C_e C_m T_3 b_2 d_2 T_2 + K_1 T_1 T_3 T_5 c_2 b_2 + T_5 b_2 d_1 T_4 + T_5 b_1 d_2 T_2 + T_5 b_2 d_1 T_2 + T_5 b_2 d_2 + T_5 b_1 d_3 + C_e C_m T_3 b_2 d_3 + T_5 b_1 d_1 T_2 T_4$;

$q_4 = C_e C_m T_3 b_1 d_2 T_2 + C_e C_m T_3 b_1 d_3 + T_5 b_1 d_2 + C_e C_m T_3 b_2 d_2 + K_2 C_m T_1 T_3 a_2 c_2 + T_5 b_1 d_1 T_4 + T_5 b_1 d_1 T_2 + C_e C_m T_3 b_2 d_1 T_2 + K_1 T_1 T_3 T_5 c_1 b_2 + K_1 T_1 T_3 T_5 c_2 b_1 + T_5 b_2 d_1$;

$q_5 = C_e C_m T_3 b_2 d_1 + K_2 C_m T_1 T_3 a_1 c_2 + T_5 b_1 d_1 + C_e C_m T_3 b_1 d_1 T_2 + K_1 T_1 T_3 T_5 c_1 b_1 + C_e C_m T_3 b_1 d_2 + K_2 C_m T_1 T_3 a_2 c_1$;

с соответствующими начальными условиями. Эта модель была использована для расчета и анализа качества переходного процесса.

Исследование устойчивости в плоскости параметров проводилось с использованием критерия Раусса-Гурвица. При проведении вычислительного эксперимента использовался разработанный достаточно универсальный комплекс программ. Это программное обеспечение позволяет определять область устойчивости (или неустойчивости) в плоскости двух любых задаваемых пользователем параметров. При этом также задаются пределы изменения указанных параметров. Расчет показал, например, что при увеличении момента инерции ротора двигателя с приведенной инерционной нагрузкой T_5 область устойчивости в плоскости параметров (K_1, K_2) увеличивается (рис.2).

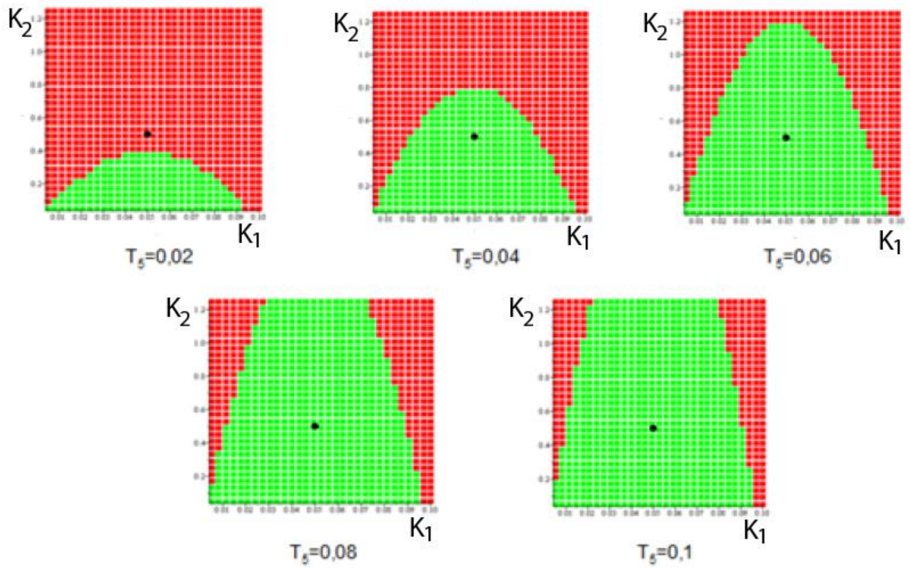


Рис.2. Границы областей устойчивости в плоскости параметров *(K_1, K_2)* для разных значений T_5

Вместе с тем при увеличении параметра T_3, величины, обратной сопротивлению цепи якоря двигателя, область устойчивости в плоскости тех же параметров уменьшается (рис.3).

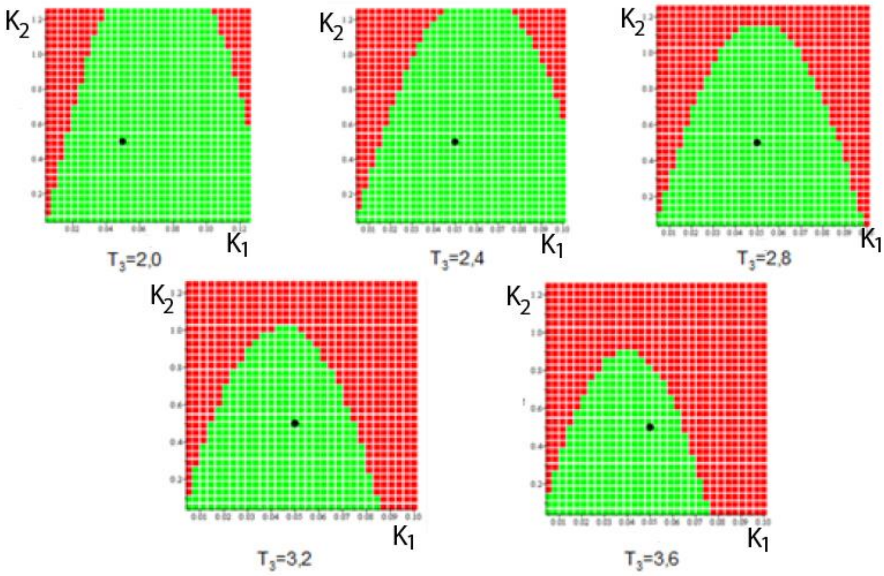


Рис.3. Границы областей устойчивости в плоскости параметров *(K_1, K_2)* для разных значений T_3

На втором этапе проводится компьютерный анализ системы перевернутого маятника [2].

$$\ddot{\varphi} + \frac{g}{l}\varphi = \frac{\ddot{u}}{l}, \ddot{u} = -(g + l\omega^2)\varphi - 2l\delta\dot{\varphi} \tag{10}$$

$$\ddot{\varphi} + \frac{g}{l}sin\varphi = \frac{\ddot{u}}{l}cos\varphi, \ddot{u} = gtg\varphi - \frac{\omega^2 l}{cos\varphi}\varphi - \frac{2l\delta}{cos\varphi}\dot{\varphi} \tag{11}$$

Система (10) – упрощенная модель перевернутого маятника, используем линейное управление. Система (11) – модель перевернутого маятника с нелинейным управлением.

Исследуем динамику каждой из систем, построим их фазовые портреты, а также графики зависимости отклонения угла и скорости маятника от времени.

Сначала будем наблюдать динамику при малых углах φ. Видим, что при различных стратегиях управления поведение систем (10) и (11) не отличается. Колебания в обоих случаях затухающие, амплитуда колебаний и их фаза совпадают.

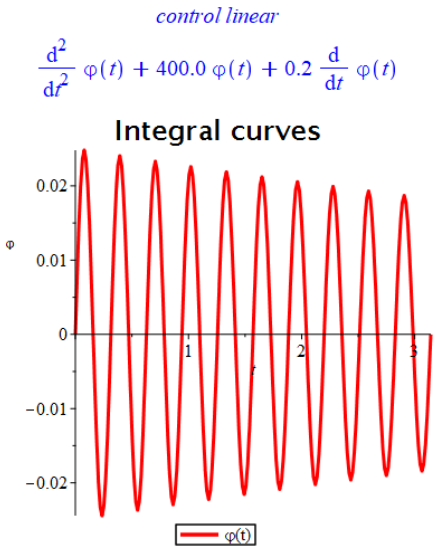


Рис. 4

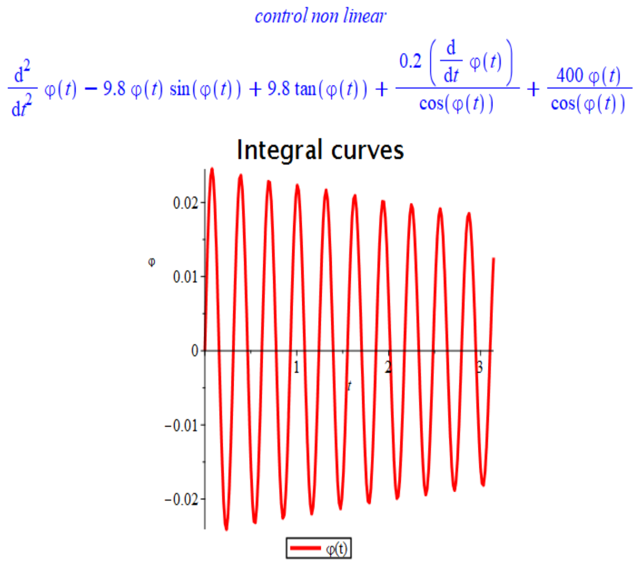


Рис. 5

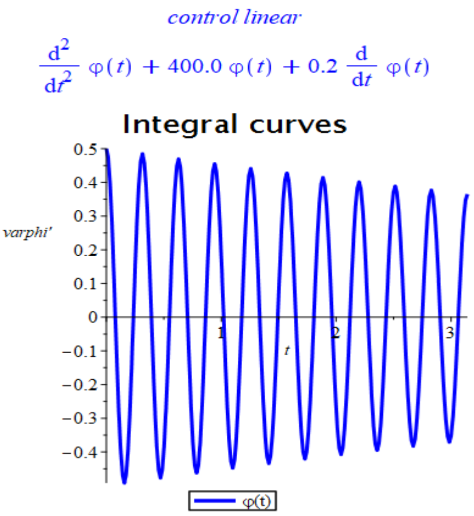


Рис. 6

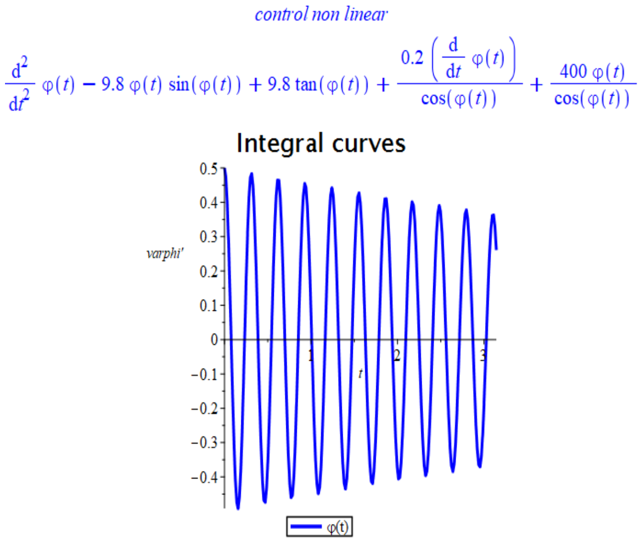


Рис. 7

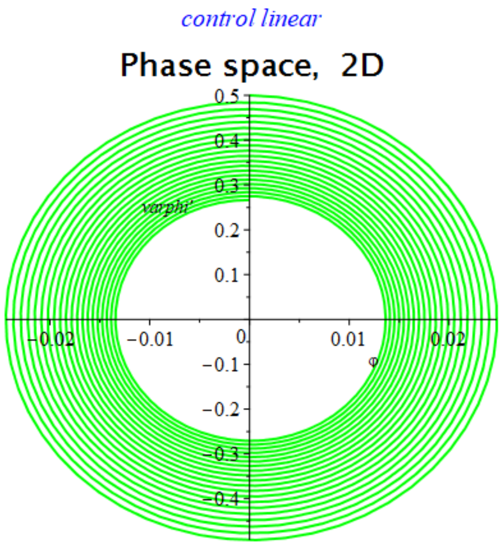


Рис. 8

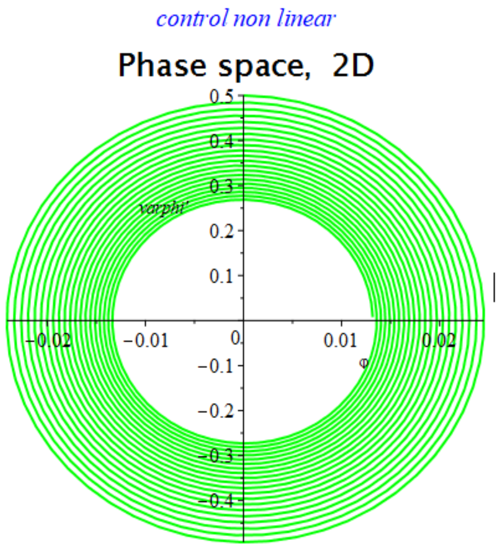


Рис. 9

Литература

1. Стребуляев С.Н., Петрова М.С. Использование компьютерных технологий для исследования робастной устойчивости электромеханических систем. Устойчивость и колебания нелинейных систем управления: Материалы XIV Международной научной конференции (30 мая -1 июня 2018г., Москва)/[Ред. В.Н.Тхай].-М.:ИПУ РАН, 2018. – 499 с.
2. Неймарк Ю.И. Математические модели в естествознании и технике: Учебник. Н.Новгород: Издательство Нижегородского госуниверситета им. Н.И.Лобачевского, 2004, 401с.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКРЫТЫХ ПЛАЗМЕННЫХ ЛОВУШЕК ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ УПРАВЛЯЕМОГО ТЕРМОЯДЕРНОГО СИНТЕЗА

А.М. Судаков, В.А. Вшивков

ИВМиМГ СО РАН

Работа посвящена разработки параллельного программного кода с использованием технологии MPI для изучения и моделирования удержания плазмы в осесимметричных открытых ловушках. Целью работы является реализация параллельного кода расчета координат и скоростей частиц. В работе рассматривается новый режим удержания плазмы в осесимметричной магнитной ловушке, предложенный Беклемишевым А. Д. в 2016 году. Для описания состояния плазмы использовалась гибридная модель: для ионов кинетическое уравнение; для электронов гидродинамические уравнения. Для описания электромагнитного поля используется система уравнений Максвелла. На языке Fortran разработан параллельный алгоритм динамики заряженных частиц в ловушке с использованием MPI.

Ключевые слова: физика плазмы, метод частиц в ячейках, гибридная модель, параллельный алгоритм, MPI.

1. Введение

Создание эффективных параллельных алгоритмов для решения задач физики плазмы является актуальной научной проблемой. Трудность получения достоверной информации о текущих параметрах плазмы в наблюдениях и экспериментах, приводит к необходимости использования численного моделирования.

В работе рассматривается новый режим удержания плазмы в осесимметричной магнитной ловушке, предложенный Беклемишевым А. Д. в 2016 году [1], при котором внешнее магнитное поле практически полностью вытесняется высокотемпературной плазмой (диамагнитный режим удержания плазмы). В данном режиме достигается многократное подавление потери частиц и энергии из области высокого давления вдоль открытых силовых линий, что позволяет существенно улучшить параметры термоядерной системы.

2. Постановка задачи

На концах цилиндрической камеры устанавливаются катушки, задающие определенную конфигурацию магнитного поля, усиливающегося к краям ловушки (рис. 1). В результате образуются магнитные “пробки”, от которых происходит отражение частиц.

Нахождения оптимальных характеристик ловушки, а также решение основной проблемы открытых ловушек – высокой скорости потерь вещества и энергии в направлении магнитного поля - невозможно без детального полномасштабного численного моделирования, учитывающего основные закономерности физических процессов, протекающих в условиях лабораторных экспериментов.

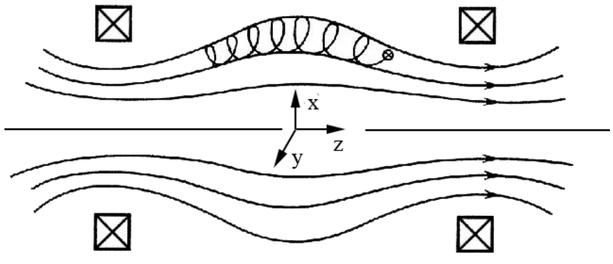


Рис. 1. Магнитное поле и траектория движения частицы

Сложный нелинейный характер происходящих в ловушке процессов требует применения численного моделирования, на основе результатов которого могут быть определены необходимые условия формирования и устойчивости формируемых плазменных конфигураций.

Состояние плазмы описывается при помощи гибридной модели [2,3]: кинетическое уравнение для ионной компоненты и приближение магнитной гидродинамики для электронов. Для решения кинетического уравнения используется метод частиц в ячейках [4,5]. Плазма представляется набором достаточно большого числа модельных частиц, траектории которых являются характеристиками уравнений Власова.

Частицы движутся в соответствии с законами классической механики в электромагнитном поле, определяемом из уравнений Максвелла. Плотности зарядов и токов вычисляются по координатам и скоростям частиц с использованием метода частиц в ячейках (PIC).

В расчетной области введена двумерная равномерная сетка. Решение уравнений движения ионов осуществляется с использованием схемы Бориса [6], которая состоит в решении уравнений движения в декартовых координатах с последующим пересчетом координат и скоростей частиц в цилиндрические координаты.

3. Реализация параллельной программы

В ходе выполнения программы происходит инжекция частиц в расчетную область. Расчет новых координат и скоростей частиц происходит в подпрограмме «move» (рис. 2).

В основном вычислительном цикле происходит распределение элементов массивов координат «rr», «zz» частиц и скоростей «uu», «vv», «ww» на соответствующие процессоры.

```
subroutine move (nl, nt, nom, nom_dim)
      ...
      call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, size, ierr)
      call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, rank, ierr)

      jm1=jm

      do j=rank+1, jm, size !Основной вычислительный цикл
         x=rr(j)
         z=zz(j)
         ui=uu(j)
         vi=vv(j)
         wi=ww(j)
         ...
      enddo
      ...
return
end
```

Рис. 2. Параллельная часть программы расчета координат и скоростей частиц

После интерполяции значений электрического и магнитного полей в местоположение частиц и расчета их новых координат и скоростей на конкретном процессоре происходит рассылка полученных значений всем остальным процессорам для последующего расчета нового электромагнитного поля.

4. Полученные результаты

В результате применения параллельной технологии удалось добиться существенного прироста в скорости вычисления по сравнению с последовательной программой. Разлет облака сопровождается вытеснением магнитного поля и формированием магнитной каверны. Картина силовых линий магнитного поля и траектории движения двух отразившихся частиц представлены на рис. 3. Производился параллельный расчет на 2 процессорах.

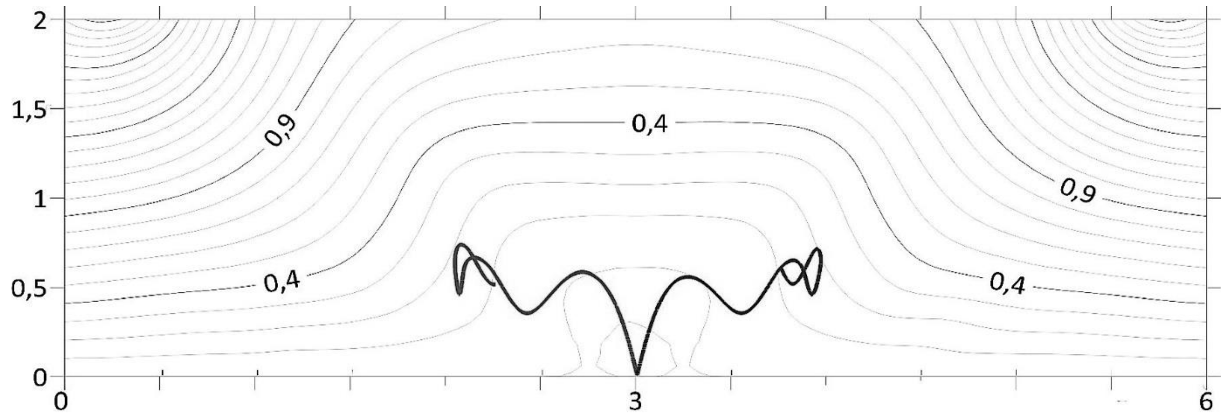


Рис. 3. Магнитное поле и траектория движения частицы

Основной сложностью, с которой предстоит разобраться для еще более значительного прироста, при использовании параллельных технологий для метода частиц в ячейках, является согласование расчета движущихся частиц, которые непрерывно инжектируются в область, и неподвижной сетки [7].

Литература

1. Beklemishev A. D. Diamagnetic “bubble” equilibria in linear traps //Physics of Plasmas. – 2016. – Т. 23. – №. 8.
2. Березин Ю.А., Дудникова Г.И., Лисейкина Т.В., Федорук М.П. Моделирование нестационарных плазменных процессов. Издательство НГУ, Новосибирск, 2018.
3. Вшивкова Л. В. Численное моделирование динамики многокомпонентной плазмы //Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Математика, механика, информатика. – 2003. – Т. 3. – №. 2. – С. 3-12.
4. Григорьев Ю. Н., Вшивков В. А., Федорук М. П. Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. – Изд-во Сиб. отд-ния Рос. акад. наук, 2004.
5. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. - 640 с.
6. Boris J. P. Relativistic plasma simulation-optimization of a hybrid code //Proc. Fourth Conf. Num. Sim. Plasmas. – 1970. – С. 3-67.
7. Андрианов А. Н., Ефимкин К. Н. Подход к параллельной реализации метода частиц в ячейках //Препринты Института прикладной математики им. МВ Келдыша РАН. – 2009. – №. 0. – С. 9-20.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЧИСЛЕННЫХ ОЦЕНОК ПРОИЗВОДНЫХ МИНИМИЗИРУЕМОЙ ФУНКЦИИ

А.В. Сысоев, И.С. Ямщиков

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В работе рассматривается метод решения вычислительно трудоемких многомерных задач глобальной оптимизации, сочетающий использование схемы вложенной редукции размерности и численных оценок производных целевой функции. Описывается параллельная схема метода. Представлены результаты численных эксперимен-тов, в которых метод с использованием производных сравнивается с методом без их использования.

Ключевые слова: многомерная оптимизация, алгоритмы глобального поиска, условие Липшица, численные оценки производных, редукция размерности, параллельная вычислительная схема.

1. Введение

Рассмотрим задачу многомерной многоэкстремальной оптимизации в виде

$$\begin{aligned} &\phi(y^*) = \min\{\phi(y) : y \in D\}, \\ &D = \{y \in R^N : a_i \le y_i \le b_i,\ 1 \le i \le N\}. \end{aligned} \tag{1}$$

Численное решение задачи (1) состоит в отыскании оценки

$$y_k^* \in D \tag{2}$$

близкой к точке y^*, где k – число вычислений значений оптимизируемой функции. Близость может быть определена, например, так

$$\| y^* - y_k^* \| \le \varepsilon, \tag{3}$$

где $\varepsilon > 0$ есть заданная точность. С учетом многоэкстремальности целевой функции, чтобы гарантировать получение оценки глобального минимума, требуются априорные предположения о функции $\phi(y)$. Одним из часто используемых предположений является выполнение для целевой функции условия Липшица

$$|\phi(y_1) - \phi(y_2)| \le L\|y_1 - y_2\|,\ \ y_1, y_2 \in D,\ \ 0 < L < \infty, \tag{4}$$

где L – константа Липшица. Данное условие позволяет на основе конечного множества вычисленных значений целевой функции оценивать ее значения в еще неизвестных точках.

Объем вычислений, необходимых для решения задачи (1), растет экспоненциально с ростом размерности N. Широко используемым подходом к решению многомерных задач оптимизации является сведение их к одномерным. Редукция может выполняться как по пространству, применяя кривые, заполняющие пространство [4, 5], так и с помощью многошаговой схемы [6, 7].

Редукция размерности позволяет использовать для решения задач эффективные методы одномерной оптимизации, однако не меняет вычислительной сложности исходной задачи. Одним из путей ее уменьшения является использование предположений о дифференцируемости целевой функции и о липшицевости ее частных производных [1]

$$|\phi_i'(y_1) - \phi_i'(y_2)| \le L_i\|y_1 - y_2\|,\ \ y_1, y_2 \in D,\ \ 1 \le i \le N, \tag{5}$$

где L_i – соответствующие константы Липшица для частных производных $\phi_i'(y),\ 1 \le i \le N$. Поскольку во многих прикладных задачах аналитическое вычисление производных может быть затруднено или невозможно, в работе производные оцениваются численно. Применимость такого подхода рассмотрена в [2, 3].

Отметим еще одно существенно обстоятельство. Известно, что использование схемы вложенной многошаговой редукции может приводить к выполнению избыточного числа итераций глобального поиска. Этот недостаток также можно уменьшить, используя значения производных целевой функции [2, 3].

Наконец, дальнейшее уменьшение времени решения задач может быть достигнуто за счет распараллеливания соответствующих алгоритмов.

Статья построена следующим образом: в разделе 2 приведена схема одномерного алгоритма глобального поиска с использованием численных оценок производных; его использование при решении многомерных задач (1) и условия применимости описаны в разделе 3; в разделе 4 излагается реализованная в работе схема распараллеливания; в разделе 5 представлены результаты вычислительных экспериментов.

2. Одномерный алгоритм глобального поиска, использующий численные оценки производной целевой функции (АГПЧП)

Рассмотрим вычислительную схему алгоритма АГПЧП.

Первые два испытания (вычисления целевой функции в выбранной точке области поиска D) проводятся в граничных точках D, т.е. $x_0 = a_1$, $x_1 = b_1$. Для выбора точки x_{k+1}, $k > 1$, очередного испытания требуется выполнить следующие действия.

1. Перенумеровать нижним индексом точки x_i, $0 \le i \le k$

$$a_1 = x_0 < x_1 < \ldots < x_i < \ldots < x_k = b_1 \tag{6}$$

2. Полагая $z_i = \phi(x_i)$, $0 \le i \le k$, вычислить численные оценки первой производной

$$\dot{z}_i = \begin{cases} \frac{z_{i+1} - z_i}{x_{i+1} - x_i}, i = 0, \\ \frac{z_i - z_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, 1 \le i \le k. \end{cases} \tag{7}$$

3. Для каждого интервала (x_{i-1}, x_i), $1 \le i \le k$ вычислить оценку константы Липшица для первой производной

$$M_i = max \begin{cases} \frac{|\dot{z}_i - \dot{z}_{i-1}|}{|\dot{x}_i - \dot{x}_{i-1}|} \\ \frac{-2[z_i - z_{i-1} - \dot{z}_{i-1}(x_i - x_{i-1})]}{(x_i - x_{i-1})^2} \\ \frac{2[z_i - z_{i-1} - \dot{z}_i(x_i - x_{i-1})]}{(x_i - x_{i-1})^2} \end{cases} \tag{8}$$

Вычислить оценку константы Липшица целевой функции

$$m = \begin{cases} rM, \ M > 0 \\ 1, \ M = 0 \end{cases} \tag{9}$$

где r >1 является заданным параметром метода, а $M = \max(M_i)$, $1 \le i \le k$.

4. Для каждого интервала (x_{i-1}, x_i), $1 \le i \le k$ вычислить характеристику

$$R(i) = \begin{cases} \hat{\varphi}_i(\hat{x}_i), \ \hat{x}_i \in [\bar{x}_i, \bar{\bar{x}}_i] \\ \min\left(\hat{\varphi}_i(\bar{x}_i), \hat{\varphi}_i(\bar{\bar{x}}_i)\right), \ \hat{x}_i \notin [\bar{x}_i, \bar{\bar{x}}_i] \end{cases} \tag{10}$$

где

$$\hat{x}_i = \frac{-\varphi'(x_{i-1}) + m(\bar{x}_i - x_{i-1}) + mx_i}{m},$$

$$\hat{\varphi}_i(x) = \begin{cases} \hat{\varphi}_{i1}(x) = z_{i-1} + \dot{z}_{i-1}(x_i - x_{i-1}) - 0.5m(x_i - x_{i-1})^2, & x \in [x_{i-1}, \bar{x}_i] \\ \hat{\varphi}_{i2}(x) = A_i(x_i - \bar{x}_i) + 0.5m(x_i - \bar{x}_i)^2 + B_i, & x \in [\bar{x}_i, \bar{\bar{x}}_i] \\ \hat{\varphi}_{i3}(x) = z_i - \dot{z}_i(x - x_i) - 0.5m(x - x_i)^2, & x \in [\bar{\bar{x}}_i, x_i] \end{cases}$$

$$A_i = \dot{z}_{i-1} - m(\bar{x}_i - x_{i-1}),$$

$$B_i = \hat{\varphi}_{i1}(\bar{x}_i),$$

$$\bar{x}_i = \frac{(z_{i-1} - \dot{z}_{i-1}x_{i-1}) - (z_i - \dot{z}_i x_i) + m\frac{x^2{}_i - x^2{}_{i-1}}{2} - md^2{}_i}{m(x_i - x_{i-1}) - (\dot{z}_i - \dot{z}_{i-1})}$$

$$\bar{\bar{x}}_i = \frac{(z_{i-1} - \dot{z}_{i-1}x_{i-1}) - (z_i - \dot{z}_i x_i) + m\frac{x^2{}_i - x^2{}_{i-1}}{2} + md^2{}_i}{m(x_i - x_{i-1}) - (\dot{z}_i - \dot{z}_{i-1})}$$

$$d_i = \frac{(x_i - x_{i-1})}{2} - \frac{\dot{z}_i - \dot{z}_{i-1}}{2m}.$$

5. Найти интервал (x_{t-1}, x_t), которому соответствует минимальная характеристика
$$R(t) = \min\{R_i : 1 \le i \le k\} \qquad (11)$$
(в случае наличия нескольких таких интервалов, выбрать интервал с наименьшим t).
6. Провести новое испытание в точке
$$x^{k+1} = \begin{cases} \hat{x}_t, & \hat{x}_t \in [\bar{x}_t, \bar{\bar{x}}_t] \\ \bar{x}_i, & \hat{\varphi}(\bar{x}_t) \le \hat{\varphi}(\bar{\bar{x}}_t) \\ \bar{\bar{x}}_t, & \hat{\varphi}(\bar{x}_t) > \hat{\varphi}(\bar{\bar{x}}_t) \end{cases} \qquad (12)$$
7. Проверить условие остановки $x_t - x_{t-1} < \epsilon$, где $\epsilon > 0$ – заданная точность.

3. Схема решения многомерных задач с использованием АГПЧП

Один из подходов к решению задач вида (1) состоит в редукции размерности, сводящей многомерную задачу к набору одномерных. При этом редукция может применяться как к области D, взаимно однозначно отображая гиперпараллелепипед D на отрезок [0,1], так и к функции $\varphi(y)$, минимизацию которой можно выполнять на основе рекурсивной схемы [8]

$$\min\{\phi(y) : y \in D\} = \min_{a_1 \le y_1 \le b_1} \min_{a_2 \le y_2 \le b_2} \dots \min_{a_N \le y_N \le b_N} \phi(y). \qquad (13)$$

Каждая из одномерных задач может решаться любым эффективным методом глобальной оптимизации. В работе использовались два метода: алгоритм глобального поиска [9] (АГП) и АГПЧП.

Касательно использования метода с производными необходимо сделать одно существенное замечание. Такое использование корректно, только при наличии гладкости целевой функции. Однако одномерные задачи, порождаемые схемой (13), могут не являться гладкими в отдельных точках области поиска, т.е. производные соответствующих функций могут иметь разрывы. При условии дифференцируемости исходной целевой функции из (1) гладкость при использовании схемы (13) гарантирована только для последней переменной y_N. Таким образом, в вычислительных экспериментах, представленных далее, применялись два подхода:

- все N одномерных подзадач решались, используя АГП,
- N-1 одномерная подзадача решались, используя АГП, а для решения задачи по последней переменной – АГПЧП.

4. Схема распараллеливания

Распараллеливание многошаговой схемы решения многомерных задач может быть выполнено на разных ее «уровнях».

Во-первых, решение задачи (1) начинается с выбора и фиксации некоторого значения параметра y_1, который порождает подзадачу оптимизации аналогичную (1), но на единицу меньшей размерности. Выбрав на очередном испытании не один, а столько интервалов с максимальными характеристиками, сколько ядер/процессоров доступно для вычислений, можно получить требуемое число подзадач и далее в силу их независимости решать их параллельно, задействовав доступные ядра/процессоры.

Во-вторых, аналогичными образом можно поступить при решении самих вложенных подзадач. И, наконец, распараллеливать можно решение подзадачи по последнему параметру y_N.

В настоящей работе реализован первый из указанных вариантов.

5. Результаты экспериментов

В представленных в этом разделе экспериментах использовались 100 четырехмерных тестовых задач, созданных с помощью генератора GKLS [10]. Точность поиска решения составляла $\epsilon = 10^{-4}$, параметр методов АГП и АГПЧП $r = 4.0$.

Эксперименты выполнялись на вычислительной системе со следующими характеристиками.

Таблица 5. **Тестовая инфраструктура**

Процессор	Intel Core i5-10600 (3.3 GHz, 6 ядер)
Память	32 Gb
Операционная система	Microsoft Windows 10

Первый эксперимент состоял в сравнении эффективности последовательных реализаций двух указанных в разделе 3 подходов. В таблице 2 приведены наименьшее, наибольшее и среднее по всей серии времена решения задач.

Таблица 6. **Результаты сравнения АГП и АГПЧП (последовательные версии)**

	АГП	**АГПЧП**	**Отношение**
Наименьшее время	99.0 сек.	40.2 сек.	2.46
Наибольшее время	712.5 сек.	672.6 сек.	1.06
Среднее время	187.8 сек.	95.8 сек.	1.96

Результаты экспериментов показывают, что использование метода с численным оцениванием производной при решении подзадач по переменной y_N приводит в среднем к почти двукратному уменьшению затрат времени на решение четырехмерных задач.

Во втором эксперименте замерялось ускорение параллельной реализации с использованием АГП. Были задействованы 2, 4, 6 ядер.

Таблица 7. **Параллельная версия АГП**

	T1 (1 ядро)	**T2 (2 ядра)**	**S=T2/T1**	**T4**	**S=T4/T1**	**T6**	**S=T2/T1**
Среднее время	187.8 сек.	69.1 сек.	2.72	50.6 сек.	3.71	53.6 сек.	3.50

Результаты экспериментов показывают существенное уменьшение времени решения задач при использовании двух и четырех ядер. Также видно, что применение 6 ядер не только не приводит к дальнейшему уменьшению времени, на наоборот ухудшает среднее время решения.

В третьем эксперименте замерялось ускорение параллельной реализации с использованием АГПЧП. Были задействованы 2, 4, 6 ядер.

Таблица 8. **Параллельная версия АГПЧП**

	T1 (1 ядро)	**T2 (2 ядра)**	**S=T2/T1**	**T4**	**S=T4/T1**	**T6**	**S=T2/T1**
Среднее время	95.8 сек.	31.6 сек.	3.03	20.8 сек.	4.6	23.1 сек.	4.14

Как и в предыдущем случае результаты экспериментов показывают значительное уменьшение времени решения задач с использованием двух и четырех ядер. Также видно, что с ростом числа ядер от 4-х до 6-ти среднее ускорение снова уменьшается. Однако в целом ускорение параллельного метода, использующего АГПЧП для решения подзадачи по переменной y_N, существенно превышает ускорение метода, в котором применяется только АГП.

В таблице 5 представлено отношение среднего времени АГП к АГПЧП при использовании от 1 до 6 ядер.

Таблица 9. **Отношение времени АГП к АГПЧП**

	1 ядро	**2 ядра**	**4 ядра**	**6 ядер**
Среднее время	1.96	2.18	2.43	2.32

Таблица 5 показывает, что использование АГПЧП существенно уменьшает время решения задач по отношению к АГП, как в последовательной, так и в параллельной версиях. Более того, в параллельной версии сокращение времени оказывается даже более значительным, чем в последовательной.

Дополнительно был исследован тот факт, что ускорение с ростом числа используемых ядер от 4 до 6 уменьшается как в АГП, так и в АГПЧП.

Во-первых, для выбранной точности поиска решения ($\epsilon = 10^{-4}$) для выполнения условия останова в минимальном случае требуется $\log_2((b-a)*10^4)$ итераций. На практике минимальное число никогда не достигается, но, поскольку эффективные одномерные методы на каждой итерации выбирают для проведения очередного испытания наиболее перспективный интервал, общее число испытаний при решении одномерных задач обычно составляет от нескольких десятков до нескольких сотен. На использованной в экспериментах серии задач это число было подсчитано по каждой из 100 задач и в среднем составило в последовательном АГП 94.12, в последовательном АГПЧП – 368.75.

В случае параллельного решения задач прежде всего меняется схема выбора интервалов для проведения испытаний: теперь это уже не только интервал с наилучшей характеристикой, но и другие интервалы, которые последовательный алгоритм не рассматривает. Как результат, чем большее число ядер мы используем, т.е. чем большее число точек ставит метод на каждой итерации, тем больше точек ставится в интервалах малоперспективных, а, значит, растет общее число точек, которое должен поставить метод до выполнения условия остановки. Как результат, для дальнейшего увеличения эффективности распараллеливания требуется менять параллельную схему. В методах редукции размерности на основе кривых, заполняющих пространство, это возможно с использованием множественных разверток [11]. В многошаговой схеме повышения эффективности можно добиться, применяя блочно-многошаговую схему [12].

6. Заключение

В работе представлен метод решения вычислительно-трудоемких многомерных задач глобальной оптимизации, сочетающий использование многошаговой схемы редукции размерности с методом решения одномерных задач с использованием численно вычисляемых оценок производных целевой функции. Описана параллельная схема метода. Представлены результаты численных экспериментов, демонстрирующие значительное сокращение времени решения задач методом с использованием производных по отношению к методу без их использования как в последовательном, так и в параллельном вариантах.

Литература

1. Гергель В.П. Об одном способе учета значений производных при минимизации многоэкстремальных функций // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1996. Т. 36, №5. С. 51–67.
2. Gergel V. and Goryachih A.: Multidimensional global optimization using numerical estimates of objective function derivatives. In: Optimization Methods and Software (2019).
3. Gergel V. and Sysoyev A. Global Optimization Method with Numerically Calculated Function Derivatives. In: Communications in Computer and Information Science. № 1340. 2020. P. 3-14.

4. Пиявский С.А. Один алгоритм отыскания абсолютного экстремума функций // Журнал вычислительной математики и математической физики, т.12, № 4 (1972), С. 885-896.
5. Strongin, R.G., Sergeyev, Ya.D.: Global Optimization with non-convex constraints: sequential and parallel algorithms. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers. 2014.
6. Dam E.R., Husslage B. and Hertog D.: One-dimensional nested maximin designs, Journal of Global Optimization, 46. 2010. P. 287-306.
7. Shi L. and Olafsson S.: Nested partitions method for global optimization. Operations Research, 48. 2000. P. 390-407.
8. Городецкий С.Ю., Гришагин В.А. Нелинейное программирование и многоэкстремальная оптимизация. Н.Новгород: Изд-во ННГУ, 2007.
9. Стронгин Р.Г., Гергель В.П., Гришагин В.А., Баркалов К.А. Параллельные вычисления в задачах глобальной оптимизации. М.: Издательство Московского университета. 2013. 280 с.
10. Gaviano M., Kvasov D.E., Lera D., and Sergeyev Ya.D. Algorithm 829: Software for generation of classes of test functions with known local and global minima for global optimization // ACM Transactions on Mathematical Software, 2003, 29(4), P. 469-480.
11. Сысоев А.В. О построении семейства множественных разверток на основе кривых Пеано для параллельного решения задач глобально-оптимального поиска // Известия вузов. Приборостроение. Вып. 10, 2011. С. 100-102.
12. Сысоев А.В., Баркалов К.А., Гергель В.П., Лебедев И.Г. MPI-реализация блочной многошаговой схемы параллельного решения задач глобальной оптимизации // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции. М.: Изд-во МГУ, 2015. С. 61-68.

О ДЕРЕВЬЯХ ДИАМЕТРА 8 И 9 С МАКСИМАЛЬНЫМ КОЛИЧЕСТВОМ НАИМЕНЬШИХ ТОТАЛЬНО ДОМИНИРУЮЩИХ МНОЖЕСТВ

Д.С. Талецкий[1,2]

[1]Высшая школа экономики
[2]Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

В настоящей работе для всех $n > 20$ приведена точная верхняя оценка количества наименьших тотально доминирующих множеств в классе n-вершинных деревьев диаметра 8 и описана структура соответствующих экстремальных деревьев. Кроме того, приведена верхняя оценка количества наименьших тотально доминирующих множеств в классе n-вершинных деревьев диаметра 9.

Ключевые слова: тотально доминирующее множество, наименьшее тотально доминирующее множество, дерево

1. Введение

Доминирующим множеством в графе называется подмножество вершин D такое, что любая вершина не из D смежна хотя бы с одним элементом из D. *Тотально доминирующим множеством* в графе называется множество TD такое, что любая вершина графа смежна хотя бы с одним элементом из TD. Доминирующее множество называется *наименьшим*, если оно является наименьшим по мощности. *Числом доминирования* графа называется мощность его наименьшего доминирующего множества. Мы будем использовать сокращения «ДМ», «ТДМ», «НДМ» и «НТДМ» для терминов «доминирующее множество», «тотально доминирующее множество», «наименьшее доминирующее множество» и «наименьшее тотально доминирующее множество», соответственно.

В 2006 году Bród и Skupień в своей статье [1] описали деревья, содержащие наименьшее и наибольшее количество ДМ среди всех n-вершинных деревьев. В 2018 году в работе [2] были описаны деревья и связные графы, содержащие наименьшее и наибольшее количество ТДМ. Вопрос о том, может ли дерево с числом доминирования γ содержать более чем 2^{γ} НДМ, оставался открытым до 2017 года, когда в работе [3] Bień привел пример такого дерева. Тем не менее, в [4] было показано, что дерево с числом доминирования γ содержит не более 2.4606^{γ} НДМ. В работе [5] приводятся четыре оценки на количество НТДМ в лесах. В частности, было показано, что любой n-вершинный лес содержит не более 1.4865^{n} НТДМ.

На сегодняшний день неизвестна структура графов, содержащих максимально возможное количество НДМ в классе всех n-вершинных графов, связных графов, деревьев и лесов. Аналогичная задача для НТДМ также является открытой для всех перечисленных классов графов. По-видимому, деревья с максимально возможным количеством НДМ и НТДМ в классе всех n-вершинных деревьев имеют весьма сложную структуру, которая плохо поддается описанию.

2. Основной результат

Назовем лес *элементарным*, если каждая его компонента является графом-звездой, состоящей хотя бы из двух вершин. Назовем n-вершинный элементарный лес *максимальным*, если он содержит максимально возможное количество НТДМ среди всех таких лесов, а само это количество обозначим через $f(n)$.

В работе показано, что для класса деревьев диаметра 8, имеющих значительно более сложную структуру, чем элементарные леса, функция $f(n)$ является точной верхней оценкой на количество НТДМ. При этом из каждого экстремального дерева можно удалить несколько ребер таким образом, чтобы получился максимальный элементарный лес. Таким образом, имеет место следующая

Теорема 1. Пусть дерево T содержит максимально возможное количество НТДМ среди всех n-вершинных деревьев диаметра 8, при этом $n > 20$. Тогда T содержит в точности $f(n)$ НТДМ. Кроме того, существует элементарный остовный лес F, содержащий $f(n)$ НТДМ.

В классе деревьев диаметра 9 условие теоремы не выполняется и сами экстремальные деревья устроены весьма сложно, что затрудняет получение точной верхней оценки для них. Однако, имеет место следующее утверждение.

Теорема 2. Каждое n-вершинное дерево диаметра 9 содержит не более, чем $2 \cdot f(n)$ НТДМ.

Литература

1. Bród D., Skupień Z. Trees with extremal numbers of dominating sets // Australasian Journal of Combinatorics. 2006. Vol. 35. P. 273–290.
2. Krzywkowski M., Wagner S. Graphs with few total dominating sets // Discrete Mathematics. 2018. Vol. 341. No. 4. P. 997–1009.
3. Bień A. Properties of gamma graphs of trees, presentation at the 17th Workshop on Graph Theory Colourings, Independence and Domination (CID 2017), Piechowice, Poland.
4. Alvarado J., Dantas S., Mohr E., Rautenbach D. On the maximum number of minimum dominating sets in forests // Discrete Mathematics. 2018. Vol. 342, No. 4. P. 934–942.
5. Henning M. A., Mohr E., Rautenbach D. On the maximum number of minimum total dominating sets in forests, Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, January 23, 2019, Vol. 21 No. 3.

ВЛИЯНИЕ НАЧАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ ОКЕАНА НА ВОСПРОИЗВЕДЕНИЕ СЕЗОННЫХ АНОМАЛИЙ ДЛЯ ЗИМЫ 2019–2020 ГГ В РЕТРОСПЕКТИВНЫХ ПРОГНОЗАХ КЛИМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ИВМ РАН[1*]

М.А. Тарасевич[1,2], В.В. Воробьева[1,2], А.Ю. Черненков[1], М.Э. Гасанов[3], Д.Р. Бардашов[4], Д.С. Харченко[5], Д.М. Ахметов[6], Е.М. Володин[2]

[1]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),*
[2]*Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской академии наук,*
[3]*Сколковский институт науки и технологий,*
[4]*Московский госуниверситет имени М.В. Ломоносова, географический факультет,*
[5]*Санкт-Петербургский госуниверситет*
[6]*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет*

В данной работе на примере зимнего сезона 2019–2020 гг изучается влияние начального состояния океана на воспроизведение сезонных аномалий прогностических переменных в ретроспективных прогнозах модели климата ИВМ РАН. Для этого с климатической моделью ИВМ РАН проводятся эксперименты, отличающиеся начальными состояниями океана. Анализ результатов экспериментов демонстрирует, что наибольшее влияние на качество сезонного прогноза оказывает начальное состояние океана в тропиках.

Ключевые слова: климатическая модель, сезонный прогноз, начальное состояние, океан, аномалия, коэффициент корреляции, среднеквадратичная ошибка.

1. Введение

В настоящее время ведущие метеорологические службы, придерживаясь концепции бесшовного прогноза, и для прогнозирования погоды (от суток до сезона и десятилетия), и для моделирования климата (на несколько десятков или сотен лет) используют одну и ту же модель. По этой причине созданная в ИВМ РАН [1] и участвовавшая в CMIP6 [2] климатическая модель (INMCM5) была использована для расчёта ансамбля ретроспективных прогнозов на зимние сезоны 1981–2020 гг. Для проведения экспериментов на сезонном временном масштабе была разработана схема подготовки начальных данных [3], заключающаяся в устранении смещения модельного климата по отношению к реальному с использованием данных реанализов ERA-Interim [4], ERA5 [5] и SODA 3.4.2 [6].

В [3] проведены интегральные оценки качества прогнозов на зимние сезоны 1981–2015 годов. В [7, 8] показано, что INMCM5 обеспечивает очень хорошую предсказуемость индексов северо-атлантического (NAO) и тихоокеанско-североамериканского (PNA) колебаний. В [7, 8] также рассмотрено влияние начального состояния водно-эквивалентной толщины снега на воспроизведение индекса NAO.

В настоящей работе изучается влияние начального состояния океана, задаваемого 1 ноября каждого года [3], на качество сезонных прогнозов. Для исследования был выбран зимний сезон 2019–2020 гг., на протяжении которого преобладало положительное значение индекса северо-атлантического колебания. Соответственно, и приземная температура воздуха во внетропической области северного полушария рассматриваемой зимой была выше климатической нормы.

1[*] Исследование проводилось в рамках студенческой образовательной программы «Вычислительные технологии, многомерный анализ данных и моделирование» Университета «Сириус». Подготовка и проведение численных экспериментов выполнены при поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 20-17-00190).

2. Численные эксперименты

Начальные состояния для выполнения сезонных прогнозов с использованием модели климата ИВМ РАН формируются как аномалии прогностических переменных по данным реанализов относительного модельного среднего климата [3]. Для изучения влияния задаваемых в океане аномалий на качество сезонных прогнозов INMCM5 были проведены следующие эксперименты, каждый из которых содержит ансамбль из 30–50 прогнозов на зимний сезон 2019–2020 гг:

- ATMOC – аномалии начального состояния океана заданы везде;
- ATM – аномалии начального состояния океана везде равны 0 (то есть, начальное состояние океана соответствует модельному среднеклиматическому);
- ATLOC – аномалии начального состояния океана заданы в северной Атлантике и Арктике;
- INDOC – аномалии начального состояния океана заданы в Индийском океане;
- TROPOC – аномалии начального состояния океана заданы в тропиках (20S–20N);
- ATLTROPOC – аномалии начального состояния океана заданы в северной Атлантике и тропиках (20S–20N).

Во всех экспериментах начальные состояния для атмосферы и деятельного слоя суши соответствуют наблюдаемым по данным реанализа ERA5 на 1 ноября 2019 г.

3. Результаты

Получаемые с помощью INMCM5 сезонные прогнозы формулируются в терминах аномалий: прогнозируются отклонения некоторого параметра от его климатической нормы. Для оценки качества сезонных прогнозов модели климата ИВМ РАН в этой работе используются коэффициент корреляции аномалий (ACC) и среднеквадратичная ошибка (RMSE). ACC и RMSE вычисляются по данным INMCM5 и реанализа ERA5.

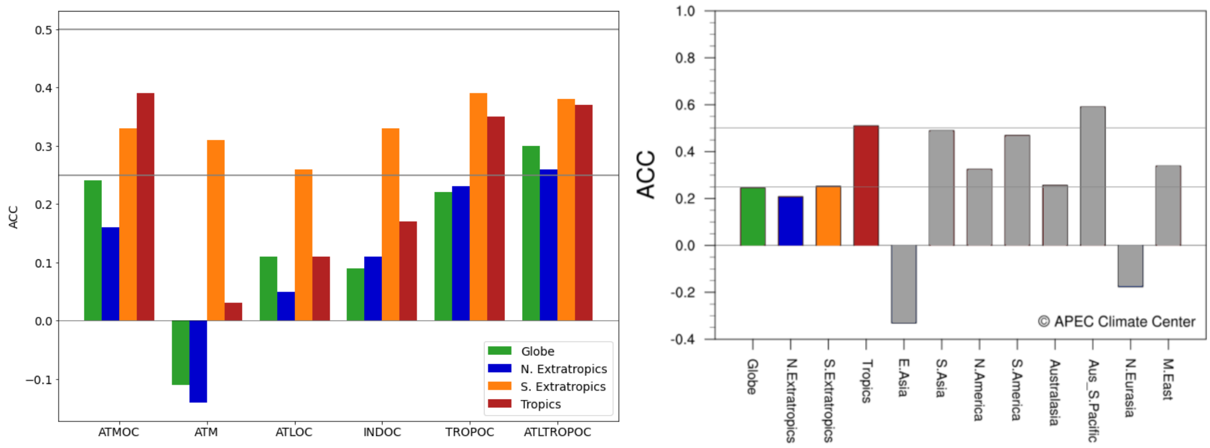


Рис. 1. Коэффициенты корреляции аномалий (ACC) температуры воздуха на уровне 2 м между данными различных экспериментов с INMCM5 и реанализа ERA5 (слева) и мультимодельного ансамбля климатического центра APEC (справа). Зелёным обозначены значения ACC для всего Земного шара, синим – для внетропической области северного полушария, оранжевым – для внетропической области южного полушария, красным – для тропиков (20S–20N)

На рисунке 1 показаны коэффициенты корреляции аномалий приземной температуры воздуха по данным различных экспериментов с моделью климата ИВМ РАН и мультимодельного ансамбля климатического центра Азиатско-Тихоокеанского экономического сотрудничества (APEC). ACC для всего Земного шара и во внетропической области северного и южного полушарий в экспериментах ATMOC, TROPOC и ATLTROPOC соответствуют таковым по данным мультимодельного ансамбля. При этом коэффициент корреляции аномалий в тропиках во всех экспериментах с INMCM5 не достигает значения, получающегося для мультимодельного ансамбля климатического центра APEC.

В эксперименте ATM замена реального начального состояния океана модельным средне-климатическим приводит к уменьшению, вплоть до отрицательных, значений ACC везде, кроме внетропической области южного полушария. Учёт аномалий начального состояния океана в северной Атлантике и Арктике и, главным образом, в тропиках (эксперименты TROPOC и ATLTROPOC), напротив, обеспечивает увеличение ACC везде, кроме тропиков. В целом, и модель климата ИВМ РАН, и мультимодельный ансамбль не очень хорошо прогнозируют приземную температуру воздуха на зимний сезон 2019–2020 гг.

В таблицах 1 и 2 представлены значения ACC и RMSE для различных месяцев и среднего за зиму прогноза по данным различных экспериментов с INMCM5. При замене реального начального состояния модельным среднеклиматическим (эксперимент ATM) ухудшается и качество прогноза давления на уровне моря: коэффициенты корреляции аномалий уменьшаются, а среднеквадратичные ошибки увеличиваются как для каждого прогнозируемого месяца, так и для зимы в целом. В экспериментах ATLOC, INDOC, TROPOC, ATLTROPOC последовательный учёт аномалий начального состояния океана в северной Атлантике и Арктике, в Индийском океане, тропиках, в северной Атлантике и тропиках приводит к увеличению ACC и уменьшению RMSE зимой. При этом наилучшие значения коэффициента корреляции аномалий и среднеквадратичной ошибки в январе демонстрирует эксперимент TROPOC.

Таблица 1. Коэффициенты корреляции аномалий давления на уровне моря для каждого прогнозируемого месяца и среднего за зиму (декабрь–февраль) между данными различных экспериментов с INMCM5 и реанализа ERA5. Выделены наибольшие значения

ACC	ATMOC	ATM	ATLOC	INDOC	TROPOC	ATLTROPOC
Ноябрь	**0.61**	0.56	0.53	0.52	0.57	0.60
Декабрь	**0.66**	0.46	0.52	0.54	0.63	0.58
Январь	0.26	-0.13	0.06	0.14	**0.33**	0.26
Февраль	0.42	-0.04	0.33	0.22	0.53	**0.57**
Зима	0.53	0.28	0.34	0.42	0.57	**0.59**

Таблица 2. Среднеквадратичная ошибка аномалий давления на уровне моря для каждого прогнозируемого месяца и среднего за зиму (декабрь–февраль) между данными различных экспериментов с INMCM5 и реанализа ERA5. Выделены наименьшие значения

RMSE	ATMOC	ATM	ATLOC	INDOC	TROPOC	ATLTROPOC
Ноябрь	2.79	2.87	2.93	2.95	2.87	**2.75**
Декабрь	**2.24**	2.61	2.51	2.49	2.29	2.39
Январь	2.93	3.21	3.03	3.03	**2.86**	2.91
Февраль	3.62	4.05	3.76	3.85	3.51	**3.44**
Зима	1.67	1.92	1.83	1.79	1.61	**1.55**

4. Заключение

В ходе исследования установлено, что замена реального начального состояния океана модельным среднеклиматическим приводит к значительному ухудшению качества сезонного прогноза климатической моделью ИВМ РАН.

Учёт реального начального состояния океана в тропиках наиболее, а в северной Атлантике и Арктике и Индийском океане, менее существенно влияет на качество прогноза.

Наибольшее влияние на качество прогноза оказывает совместный учёт реального начального состояния океана в тропиках и северной Атлантике.

Литература

1. Володин Е.М., Мортиков Е.В., Кострыкин С.В., Галин В.Я., Лыкосов В.Н., Грицун А.С., Дианский Н.А., Гусев А.В., Яковлев Н.Г. Воспроизведение современного климата в новой версии модели климатической системы ИВМ РАН // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2017. Т. 53, N. 2. С. 164–178.
2. Kim Y.-H., Min S.-K., Zhang X., Sillmann J., Sandstad M. Evaluation of the CMIP6 multi-model ensemble for climate extreme indices // Weather and Climate Extremes. 2020. V. 29. P. 100269. DOI: 10.1016/j.wace.2020.100269.
3. Воробьева В.В., Володин Е.М. Экспериментальные исследования сезонной предсказуемости погоды, выполненные на основе климатической модели ИВМ РАН // Матем. Моделирование. 2020. Т. 32, № 11. С. 47–58.
4. Dee D.P., et al. The ERA–Interim reanalysis: Configuration and performance of the data assimilation system // Quart. Journal. Roy. Meteorol. Soc. 2011. V. 137. P. 553–597.
5. Hersbach H, Bell B, Berrisford P, et al. The ERA5 global reanalysis // Quart. Journal. Roy. Meteorol. Soc. 2020. V. 146. P. 1999–2049. DOI: 10.1002/qj.3803.
6. Carton J.A., Chepurin G.A., Chen L. SODA3: A New Ocean Climate Reanalysis // Journal of Climate. 2018. V. 31, N. 17. P. 6967–6983.
7. Vorobyeva Vasilisa, Volodin Evgeny Evaluation of the INM RAS climate model skill in climate indices and stratospheric anomalies on seasonal timescale // Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography. 2021. V. 73, N. 1. P. 1–12.
8. Vorobyeva V.V., Volodin E.M. Analysis of the predictability of stratospheric variability and climate indices based on seasonal retrospective forecasts of the INM RAS climate model // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2021. V. 36, N. 2. P. 117–126.

СПОНТАННЫЕ И ИНДУЦИРОВАННЫЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ БИСТАБИЛЬНОЙ ЯЧЕЙКИ ПАМЯТИ MRAM[1*]

А.М. Тузиков, А.В. Половинкин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Изучались стохастические переключения модели ячейки памяти STT-MRAM, нормированный вектор намагниченности свободного слоя которой удовлетворяет уравнению Ландау-Лифшица. В работе исследуется как зависимость от параметров скорости накопления ошибок записи вследствие спонтанных переключений, обусловленных тепловым шумом магнитного поля, так и вероятность возникновения ошибки при переключении магнитной ячейки под совместным влиянием флуктуаций магнитного поля и спин-поляризованного токового сигнала. Получено асимптотическое выражение для среднего времени первого достижения границы, совпадающей с линией неустойчивых состояний равновесия соответствующей бесшумовой системы, разделяющей бассейны притяжения двух устойчивых направлений ориентации намагниченности свободного слоя. Найдено, что при фиксированной энергии сигнала переключения существует оптимальная длительность сигнала, обеспечивающая переключение с наибольшей вероятностью, и эта оптимальная длительность уменьшается с увеличением энергии сигнала.

Ключевые слова: спинтроника, управление, флуктуации, магниторезистивная память

1. Введение

Магниторезистивная оперативная память (MRAM) стала актуальным объектом исследования, так как обладает многими преимуществами по сравнению с другими аналогами, такими как высокая плотность размещения элементов на микросхеме, сравнимая с DRAM, высокое быстродействие, превосходящее быстродействие типа памяти SRAM, неограниченная долговечность, низкое энергопотребление [1, 2]. Для дальнейшей коммерциализации одним из главных вопросов является влияние шумов на операции чтения/записи и то, какими характеристиками должна обладать ячейка памяти для минимизации влияния этих шумов. Этот вопрос, а также поиск переключающего импульса, минимизирующего ошибку чтения, исследовались в нашей работе.

Наиболее актуальной является модель ячейки памяти с магнитной анизотропией перпендикулярной слоям магнитной структуры, так как такая конфигурация позволяет увеличить плотность размещения элементов на схеме. Ранее для этой модели в присутствии шума были проведены исследования на тему влияния различных характеристик модели на процесс чтения/записи при помощи численного решения уравнения Фоккера-Планка [3], которое описывает эволюцию плотности вероятности переключения ячейки во времени. Используя альтернативный подход моделирования динамики намагниченности, а именно численное решение уравнения Ландау-Лифшица с дополнительным слагаемым Слончевского, мы исследовали зависимость статистических характеристик от параметров шума и сигнала переключения.

2. Стохастическая динамика магнитного момента

Рассматривается магнитная структура, состоящая из двух ферромагнитных слоев, разделенных немагнитным слоем (см. рис. 1). Управление намагниченностью реализуется в более тонком свободном слое F_1 ($d \ll d_F$). Слой F_2 называется фиксированным, его намагниченность предполагается постоянной.

[1*] Работа выполнена в рамках Программы развития регионального научно-образовательного математического центра “Математика технологий будущего”, проект #075-02-2020-1483/1.

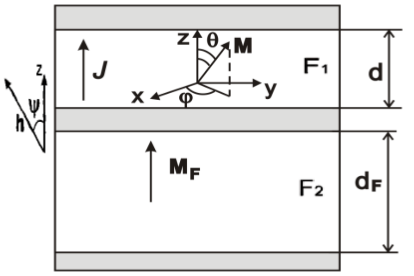


Рис. 1. Рассматриваемая структура

Воспользовавшись результатами работы [4], но также учитывая добавочное слагаемое Слончевского, описывающее эффект переноса магнитного момента спин-поляризованным током [5], записываем уравнения Ланжевена стохастической динамики вектора намагниченности свободного слоя (рис. 1) с учётом флуктуаций магнитного поля в форме Ландау-Лифшица в безразмерных переменных в виде [6]:

$$\frac{d\vec{m}}{d\tau} = \left[\left(\vec{h}_{eff} + \vec{\tilde{h}}(\tau)\right), \vec{m}\right] - \lambda\left[\vec{m}, \left[\vec{m}, \vec{h}_{eff}\right]\right] + \frac{JP\left[\vec{m}, [\vec{m}, \vec{n}]\right]}{1 + \varepsilon(\vec{m}, \vec{n})} \tag{1}$$

Здесь $\tau = |\gamma| M_s t$ – безразмерное время, $M_s = \left|\vec{M}\right|$ – величина намагниченности насыщения, γ – гиромагнитное отношение электрона, $\vec{m} = \vec{M}/|M_s|$ – единичный вектор, указывающий направление вектора намагниченности свободного слоя, $\vec{n}$ – единичный вектор, ортогональный граничным поверхностям слоистой структуры и указывающий направление намагниченности фиксированного слоя, γ – гиромагнитное отношение электрона, λ – нормированный параметр магнитной релаксации Ландау-Лифшица, J – параметр, пропорциональный плотности спин-поляризованного тока, $\varepsilon = P^2$ – определяет ассиметрию спинового момента, P – коэффициент спиновой поляризации [7]. $\vec{h}_{eff} = (k-1)(\vec{m}, \vec{n})\vec{n}$ – нормированная на M_s детерминированная составляющая эффективного поля, обусловленная магнитной анизотропией среды и полем размагничивания, k – коэффициент магнитной анизотропии. $\vec{\tilde{h}}(\tau)$ – относительные белошумовые флуктуации магнитного поля.

Следуя [4] и учитывая взаимосвязь релаксационных и флуктуационных характеристик движения магнитного момента, будем предполагать флуктуации магнитного поля изотропным белым гауссовым шумом с функцией корреляции:

$$\langle \tilde{h}_i(\tau_1)\tilde{h}_j(\tau_2)\rangle = D_h \delta_{ij} \delta(\tau_2 - \tau_1), \tag{2}$$

где δ_{ij} – символ Кронекера, $\delta(\tau)$ – дельта-функция Дирака, $D_h = 2\lambda k_B T / M_s^2 V$ – интенсивность шума, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, V – объём свободного слоя.

Так как воздействие магнитного поля приводит лишь к поворотам вектора намагниченности свободного слоя, перейдём от векторного уравнения (1) к уравнениям Ланжевена стохастической динамики на единичной сфере для точки, указывающей направление вектора $\vec{m}(\tau)$:

$$\dot{\theta} = \lambda sin(\theta)\left(\frac{JP}{\lambda(1 + \varepsilon\, cos(\theta))} - kcos(\theta)\right) - \tilde{h}_x sin(\varphi) + \tilde{h}_y cos(\varphi) \tag{3а}$$

$$\dot{\varphi} = kcos(\theta) - \frac{\tilde{h}_x cos(\varphi) + \tilde{h}_y sin(\varphi)}{tan(\theta)} + \tilde{h}_z \tag{3б}$$

В бесшумовом случае ($D_h = 0$) система (3) обладает двумя устойчивыми состояниями равновесия: $\theta = 0$ и $\theta = \pi$, а также линией неустойчивых состояний равновесия $\theta = \pi/2$.

3. Индуцированные стохастические переключения вектора намагниченность

3.1 Спонтанные шумоиндуцированные переключения

Необходимость исследовать этот вид переключения связана с обеспечением надёжности хранения информации при современной тенденции к миниатюризации схем.

Изменение плотности вероятности возможных значений координат изображающей точки системы (3) задается уравнением Фоккера-Планка [8, 9]:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \hat{L}_x W, \text{где}$$
$$\hat{L}_x W = -\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial}{\partial x_i}(K_i(\vec{x})W) + \frac{D_h}{2}\sum_{i,j=1}^{m}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}\left(Q_{ij}(\vec{x})W\right), x_1 = \theta, x_2 = \varphi \tag{4}$$

Применяя схему Стратоновича [10], из уравнений (3) можно получить следующие выражения для кинетических коэффициентов $K_i(\vec{x})$ и $Q_{ij}(\vec{x})$

$$K_\theta = \lambda \sin(\theta)\left(\frac{JP}{\lambda(1+\varepsilon\cos(\theta))} - k\cos(\theta)\right), \quad K_\varphi = k\cos(\theta)$$
$$Q_{\theta\theta} = D_h, Q_{\varphi\varphi} = D_h/\sin^2(\theta), \quad Q_{\theta\varphi} = Q_{\varphi\theta} = 0 \tag{5}$$

При этом среднее время $T_1(\vec{x})$ первого достижения некоторой границы $\partial\Omega$, являющееся функцией начальной координаты $\vec{x}$, принадлежащей области Ω, удовлетворяет уравнению Понтрягина:

$$\hat{L}_x^+(T_1) = -1, \quad T_1(\vec{x})|_{\vec{x}\in\partial\Omega} = 0, \quad \text{где}$$
$$\hat{L}_x^+ = \sum_{i=1}^{m} K_i(\vec{x})\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{D_h}{2}\sum_{i,j=1}^{m} Q_{ij}(\vec{x})\frac{\partial}{\partial x_i \partial x_j} - \tag{6}$$

сопряженный по отношению к $\hat{L}_x$ оператор.

Путём рассуждений, аналогичным приведённым в работе [11] для нахождения среднего времени первого достижения границы, включающей устойчивое многообразие седла, было найдено среднее время первого достижения границы $\partial\Omega$, совпадающей с линией неустойчивых состояний равновесия соответствующей бесшумовой системы, разделяющей бассейны притяжения двух устойчивых направлений ориентации намагниченности свободного слоя:

$$T_1^{-1} = \frac{D_h}{2}\int_{\partial\Omega} \frac{(Q_{11}(\vec{y})z(\vec{y},D_h)exp(-\frac{\Phi(\vec{y})}{D_h}))}{\int_0^{y_{1out}} exp\left(\frac{\Psi(\eta|\vec{y}_{||})}{D_h}\right)d\eta}|B(\vec{y})|d\vec{y}_{||}, \tag{7}$$

Здесь $z(\vec{y}, D_h)$ – префактор, $\Psi(\eta|\,\vec{y}_{||}) = \Phi(\eta|\vec{y}_{||}) - \Phi(\vec{y})$, $\eta = |\vec{y}_{||} - \vec{y}|$ – отклонение значения $\vec{y}$ от соответствующего значения $\vec{y}_{||}$ вдоль неустойчивого многообразия состояния равновесия, $\Phi(\vec{y})$ – обобщенный потенциал, y_{1out}– значение координаты η изображающей точки, для которого вероятность дальнейшего возвращения к исходному устойчивому состоянию равновесия пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью достигнуть противоположное устойчивое состояние равновесия, $\vec{y}_{||}$ – (m-1)-мерный вектор, лежащий в пространстве, касательном к $\partial\Omega$, $|B(\vec{y})|$ – якобиан преобразования из локальной системы координат, связанной с начальным состоянием к системе координат, связанной с неустойчивым состоянием равновесия.

В частности, для системы, описываемой уравнениями (3а), (3б), начальной точки, находящейся в окрестности метастабильного состояния $\theta = \pi$ и границы, совпадающей с линией неустойчивых состояний равновесия $\theta = \pi/2$:

$$T_1 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi D_h}{\lambda^3(k-1)^{3/2}}}exp\left(\frac{\lambda(k-1)}{D_h}\right) \tag{8}$$

Как видно из выражения для интенсивности шума: $D_h = 2\lambda k_B T/M_s^2 V$, уменьшение размеров схемы приводит к увеличению шума магнитного поля, что в свою очередь приводит к уменьшению надежности хранения информации, поэтому найденная нами поправка пропорциональная $\sqrt{D_h}$ к экспоненциальному множителю может быть существенной при определении оптимальных размеров схемы.

На рис. 2 представлены: теоретическая оценка логарифма времени первого достижения границы $\theta = \pi/2$, полученная с использованием выражения (8) (сплошная линия), и результаты, полученные путем численного моделирования (маркеры), в зависимости от интенсивности шума. Параметры системы: $k = 16$, $\lambda = 0.03$ (CoFeB), $M_s = 1000, N_r = 10^3$ – количество реализаций. Переключение происходило из состояния равновесия $\theta = \pi$ в состояние равновесия $\theta = 0$.

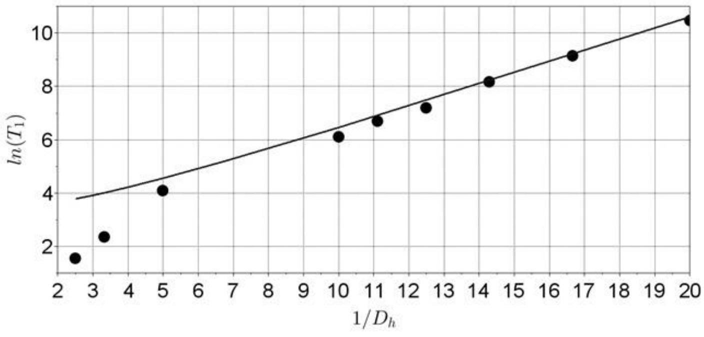


Рис. 2. Теоритические и практические зависимости логарифма среднего времени первого достижения границы от интенсивности шума

Из найденных зависимостей видно, что результаты, полученные при помощи формулы (8), хорошо согласуются с результатами численного счёта.

3.2 Переключение вектора намагниченности под воздействием спинового тока

Постановка этой задачи связана с наличием ограничений на тепловыделение в схемах, а, следовательно, и на максимальную энергию сигнала переключения бистабильной ячейки памяти при записи информации. Действительно, избыточное тепловыделение вызывает повышение температуры, которое лишь частично может быть скомпенсировано системами охлаждения. Повышение температуры, в свою очередь, может привести к росту интенсивности шумов, и к нарушению стабильной работы интегральных схем. Поэтому естественной задачей является поиск параметров сигнала спин-поляризованного тока фиксированной энергии, обеспечивающего минимальную вероятность непереключения к моменту возможного начала считывания информации.

Предположим, в начальный момент времени вектор магнитного момента свободного слоя был направлен вниз, так что изображающая точка системы находилась вблизи метастабильного состояния $\theta = \pi$. Подается отрицательный токовый сигнал, в квазистатическом приближении это состояние равновесия становится неустойчивым, и изображающая точка начинает движение к другому состоянию равновесия $\theta = 0$. При этом если в качестве границы, отделяющей область, где, после окончания импульса спин-поляризованного тока переключение уже произошло и ещё не произошло, выбирать неустойчивый предельный цикл $\theta = \pi/2$, то при нахождении на самой границе с вероятность ½ после окончания импульса под действием флуктуаций система возвратится к исходному состоянию до переключения. Поэтому аналогично тому, как это было сделано в ряде статей зарубежных авторов [12], в качестве критерия надежного переключения примем переход через границу $\theta = \pi/12$ при переключении из окрестности метастабильного состояния $\theta = \pi$ в окрестность метастабильного состояния $\theta = 0$ и через границу $\theta = 11\pi/12$ при обратном переключении.

При моделировании мы использовали сигналы переключения прямоугольной формы с различными длительностями T, амплитудами A и безразмерными энергиями $E_s = \int_0^T A^2 d\tau = A^2 T$. Для фиксированного времени наблюдения 2 нс была построена зависимость логарифма вероятности непереключения $1 - P$ (полученная при помощи моделирования стохастической системы

(3) с параметрами: $k = 16$, $\lambda = 0.03$ (CoFeB), $M_s = 1000$, $D_h = 2\lambda k_B T_a / M_s^2 V = 8.78535 * 10^{-4}$) от таких параметров спин-поляризованного сигнала, как энергия сигнала E_s и длительность T, (см. рис. 3). Переключение происходило из малой окрестности состояния равновесия $\theta = \pi$ в $\mu = \pi/12$ – окрестность состояния равновесия $\theta = 0$. Черной линией изображена зависимость длительности сигнала, при которой достигается минимум вероятности непереключения, от безразмерной энергии сигнала.

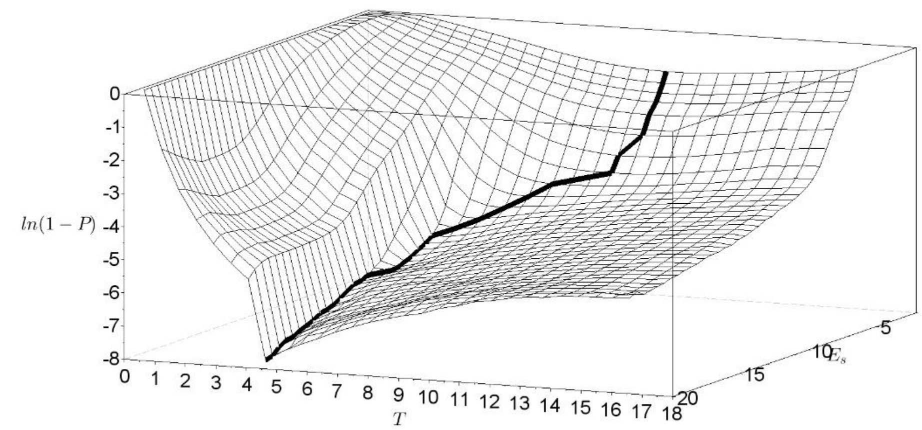


Рис. 3. Зависимость вероятности непереключения от параметров сигнала

Из построенной зависимости видно, что при фиксированной энергии сигнала переключения для любого интервала времени между началом переключения и моментом считывания информации существует оптимальная длительность сигнала, обеспечивающая минимальную ошибку считывания. Можно отметить, что оптимальная длительность уменьшается при увеличении энергии сигнала.

Литература

1. Apalkov D. et al. Spin-transfer torque magnetic random access memory (STT-MRAM) // ACMJ. Emerg. Technol. Comput. Syst. 2013. Vol. 9. P. 1–35. DOI: 10.1145/2463585. 2463589.
2. Slaughter J.M. et al. Technology for reliable spin-torque MRAM products // IEDM Tech. Dig. 2016. P. 1–21. DOI: 10.1109/IEDM.2016.7838467.
3. Song J., Dixit H. et al. Impact of Process Variability on Write Error Rate and Read Disturbance in STT-MRAM Devices // IEEE TRANS. ON MAGN. 2020. Vol. 56. P. 1–11. DOI: 10.1109/TMAG.2020.3028045.
4. Brown W.F. Thermal Fluctuations of a Single-Domain Particle // Phys. Rev. 1963. Vol. 130. P. 1677–1686. DOI: 10.1103/PhysRev.130.1677.
5. Slonczewski J. Current-driven excitation of magnetic multilayers // J. Magn. Magn. Mater. 1996. Vol. 159. P. L1–L7. DOI: 10.1016/0304-8853(96)00062-5.
6. Половинкин А.В., Мишагин К.Г. Аналитический подход к определению влияния теплового шума на среднюю частоту и амплитуду спинового генератора // Письма в ЖТФ. 2018. Т. 44, № 8. С. 20–28. DOI: 10.21883/PJTF.2018.08.45962.17072.

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В КВАЗИСТАЦИОНАРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ[1*]

А.А. Тюхтина

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Рассматриваются обратные задачи финального наблюдения для системы уравнений Максвелла в квазистационарном приближении,обобщающем наслучай неоднородныхсред квазистационарное приближениеДарвина, которые трактуются как задачи выпуклой оптимизации с операторными ограничениями типа равенства.

Ключевые слова: система уравнений Максвелла в квазистационарных приближениях, обратная задача финального наблюдения, выпуклое программирование.

Необходимость формирования электромагнитных полей заданной конфигурации, возникающая при решении широкого класса технологических проблем, естественным образом приводит к исследованию обратных задач для системы уравнений Максвелла [1-3]. Изучению различных классов обратных задач электромагнитной теории посвящена обширная литература, в частности [4-12]. Значительная часть современных технологических процессов при этом допускает описание в рамках квазистационарных приближений для системы уравнений Максвелла [1-3].

Для описания медленных процессов в средах с достаточно высокой проводимостью применяется нерелятивистское магнитное приближение [1, 13-18]. Обратные задачи для системы уравнений Максвелла в этом приближении рассматривались, в частности, в [11, 12, 19-22]. Работы [20-22] посвящены изучению обратных задач финального наблюдения, то есть задач о восстановлении источников и начальных данных по известной с определенной погрешностью конфигурации магнитного поля в конечный момент времени. Рассматриваемые задачи трактуются как задачи оптимального управления с операторным ограничением–равенством, обсуждается возможность применения для ихрешения устойчивых секвенциальных принципов Лагранжа и теоремы Куна-Таккера [23-25].

Нерелятивистское электрическое приближение [2], формально заключающееся в условии потенциальности электрического поля, используется для описания достаточно медленных процессов в средах с низкой проводимостью, в частности, при моделировании электромагнитных процессов в нижних слоях атмосферы [26-30]. Обратные задачи для уравнения глобальной электрической цепи, полученного в рамках квазистационарного электрического приближения для системы уравнений Максвелла, рассматриваются в [31-33].

При моделировании относительно медленных электромагнитных процессов в плазме получило распространение приближение Дарвина [1, 34-37], основанное на сохранении в системе уравнений Максвелла потенциальной компоненты тока смещения. Задачи для этого приближения в [34-37] рассматривались в однородных средах в предположении, что объёмная плотность тока и объёмная плотность зарядов – заданные функции. В [38, 39] приближение Дарвина обобщается на случай неоднородных проводящих сред и доказывается существование и единственность решения начально-краевой задачи для системы уравнений Максвелла в этом приближении. В работах [39,40] проведено сравнение решений рассматриваемой квазистационарной задачи и соответствующих задач для нестационарной системы уравнений Максвелла и системы уравнений Максвелла в нерелятивистском магнитном и нерелятивистском электрическом приближениях.

[1*] Работа поддержана научно-образовательным математическим центром "Математика технологий будущего" (Соглашение № 075-02-2020-1483/1).

Система уравнений Максвелла в квазистационарном приближении Дарвина имеет вид [34]

$$\begin{cases} m\ell\ddot{x}\cos\varphi + m\ell^2\ddot{\varphi} + mg\ell\sin\varphi = -h_\varphi\dot{\varphi}, \\ (M+m)\ddot{x} + m\ell\ddot{\varphi}\cos\varphi - m\ell\dot{\varphi}^2\sin\varphi = f(t) - h_x\dot{x}, \\ f(t) = c\cdot((v(t) - (\varepsilon/b)\dot{x})/R) \quad , \end{cases} \tag{1}$$

$$\mathrm{rot}\vec{H}(x,t) = \frac{4\pi}{c}\vec{J}(x,t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\varepsilon\mathrm{grad}\varphi(x,t), \tag{2}$$

$$\mathrm{rot}\vec{E}(x,t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{B}(x,t), \tag{3}$$

$$\mathrm{div}\vec{B}(x,t) = 0, \tag{4}$$

$$\mathrm{div}\vec{D}(x,t) = 4\pi\rho(x,t), \tag{5}$$

где $(x,t) \in Q = \Omega \times (0,T)$, $\Omega \subset R^3$, $T > 0$,

$$\vec{E} = \vec{\mathcal{E}} - \mathrm{grad}\varphi,\ \mathrm{div}\varepsilon\vec{\mathcal{E}} = 0.$$

Предполагается, что справедливы материальные соотношения

$$\vec{D} = \varepsilon\vec{E}, \vec{B} = \mu\vec{H}, \vec{J} = \sigma\vec{E} + \vec{J}^{ext}, \tag{6}$$

где $\vec{J}^{ext}$ – объёмная плотность сторонних токов.

Система (1)-(5) рассматривается при граничных условиях

$$\vec{E}(x,t) \times \vec{v}(x) = 0,\ (x,t) \in \partial\Omega \times (0,T), \tag{7}$$

где $\vec{v}(x)$ – единичный вектор внешней нормали в точке $x \in \partial\Omega$, и начальных условиях

$$\vec{H}(x,0) = \vec{h}(x),\ \mathrm{grad}\varphi(x,0) = \mathrm{grad}\varphi_0(x),\ x \in \Omega. \tag{8}$$

В настоящей работе рассматривается обратная задача финального наблюдения для системы (1)-(5), то есть задача восстановления исходных данных $\vec{h}$, $\mathrm{grad}\varphi_0$, $\vec{J}^{ext}$ по известному в момент времени T значению напряженности магнитного поля $\vec{H}$ и потенциальной части электрического поля – $\mathrm{grad}\varphi$.

С учетом соотношений (5) система (1)-(3) принимает вид

$$\mathrm{rot}\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\sigma\vec{E} + \frac{4\pi}{c}\vec{J}^{ext} - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\varepsilon\mathrm{grad}\varphi, \tag{9}$$

$$\mathrm{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mu\vec{H}. \tag{10}$$

Пусть ε, μ и σ – функции из $L_\infty(\Omega)$,

$$\varepsilon_1 \le \varepsilon(x) \le \varepsilon_2,\ \mu_1 \le \mu(x) \le \mu_2,\ \sigma_1 \le \sigma(x) \le \sigma_2,$$

где ε_i, μ_i, σ_i (i=1, 2) – заданные положительные постоянные.

Предполагается, что $\Omega \subset R^3$ – открытая ограниченная односвязная область с липшицевой границей $\partial\Omega$ с компонентами связности $\Gamma_0, \ldots, \Gamma_k$, гомеоморфными сферам в R^3, причем Γ_i, $i = 1, \ldots, k$, лежат в области, ограниченной Γ_0. Определим следующие гильбертовы пространства вектор-функций с соответствующими скалярными произведениями [41]:

$$H(\mathrm{div};\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \mathrm{div}\vec{u} \in L_2(\Omega)\},\ K(\mathrm{div};\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \mathrm{div}\vec{u} = 0\},$$

$$(\vec{u},\vec{v})_{div} = (\vec{u},\vec{v})_{2,\Omega} + (\mathrm{div}\vec{u},\mathrm{div}\vec{v})_{2,\Omega},$$

$$H(\mathrm{rot};\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \mathrm{rot}\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3\},\ K(\mathrm{rot};\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \mathrm{rot}\vec{u} = 0\},$$

$$(\vec{u},\vec{v})_{rot} = (\vec{u},\vec{v})_{2,\Omega} + (\mathrm{rot}\vec{u},\mathrm{rot}\vec{v})_{2,\Omega},$$

где $(\cdot,\cdot)_{2,\Omega}$ обозначает скалярное произведение в $L_2(\Omega)$ или в $\{L_2(\Omega)\}^3$. Замыкания множества пробных вектор-функций $\{\mathcal{D}(\Omega)\}^3$ в $H(\mathrm{div};\Omega)$ и $H(\mathrm{rot};\Omega)$ обозначаются $H_0(\mathrm{div};\Omega)$ и $H_0(\mathrm{rot};\Omega)$ соответственно, $K_0(\mathrm{rot};\Omega) = K(\mathrm{rot};\Omega) \cap H_0(\mathrm{rot};\Omega)$, $K_0(\mathrm{div};\Omega) = K(\mathrm{div};\Omega) \cap H_0(\mathrm{div};\Omega)$.

Определен оператор следа $\gamma_v : H(\mathrm{div};\Omega) \to H^{-1/2}(\partial\Omega)$, $\gamma_v\vec{u}(x) = \vec{u}(x)\cdot\vec{v}(x)$, $x \in \partial\Omega$, для гладких функций $\vec{u}$. Положим

$$K(\Omega) = \{\vec{u} \in K(\mathrm{div};\Omega) : \langle\gamma_v\vec{u}, 1\rangle_{\Gamma_i} = 0, i = 1, \ldots, k\},$$

$$H(\Omega) = \{\psi \in H^1(\Omega) : \psi(x) = 0, x \in \Gamma_0, \psi(x) = c_i \in R, x \in \Gamma_i, i = 1, \ldots, k\}.$$

Для любой функции $\vec{u} \in K(\mathrm{rot};\Omega)$ найдётся функция $p \in H^1(\Omega)$ такая, что $\vec{u} = \mathrm{grad}p$. Если $\vec{u} \in K_0(\mathrm{rot};\Omega)$, то можно выбрать $p \in H(\Omega)$.

Пусть $\eta \in L_\infty(\Omega)$ и найдутся положительные постоянные η_1, η_2 такие, что $\eta_1 \le \eta(x) \le \eta_2$ для почти всех $x \in \Omega$. Обозначим через $\{L_2(\eta;\Omega)\}^3$ пространство $\{L_2(\Omega)\}^3$, рассматриваемое со скалярным произведением $(\eta\vec{u},\vec{v})_{2,\Omega}$,

$$K(\eta;\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \eta\vec{u} \in K(\Omega)\},\ K_0(\mathrm{div}\eta;\Omega) = \{\vec{u} \in \{L_2(\Omega)\}^3 : \eta\vec{u} \in K_0(\mathrm{div};\Omega)\},$$

$$U_1(\eta;\Omega) = K(\eta;\Omega) \cap H_0(\mathrm{rot};\Omega),\ U_2(\eta;\Omega) = K_0(\mathrm{div}\eta;\Omega) \cap H(\mathrm{rot};\Omega).$$

В пространстве $\{L_2(\eta;\Omega)\}^3$ ортогональное дополнение к $K(\eta;\Omega)$ совпадает с $K_0(\mathrm{rot};\Omega)$, а ортогональное дополнение к $K_0(\mathrm{div}\eta;\Omega)$ – с $K(\mathrm{rot};\Omega)$.

Пусть $\vec{J}^{ext}: Q \to R^3$, $\vec{h}: \Omega \to R^3$, $\vec{e}: \Omega \to R^3$, $\mathrm{grad}\varphi_0: \Omega \to R^3$ – интегрируемые с квадратом функции. Обозначим $L(\Omega) = \{L_2(\mu;\Omega)\}^3 \times \{L_2(\varepsilon;\Omega)\}^3$, $V_0(\Omega) = H(\mathrm{rot};\Omega) \times K_0(\mathrm{rot};\Omega)$. Начально-краевая задача (8), (9), (6), (7) допускает следующую постановку: найти функции $\Psi = \{\vec{H}, \mathrm{grad}\varphi\} \in L_2(0,T,V_0(\Omega))$ и $\vec{\mathcal{E}} \in L_2(0,T,U_1(\varepsilon,\Omega))$ такие, что $\Psi(0) = \Psi_0 = \{\vec{h}, \mathrm{grad}\varphi_0\}$, и для всех $\Phi = \{\vec{u}, \mathrm{grad}\psi\} \in V_0(\Omega)$, $\vec{v} \in U_1(\varepsilon,\Omega)$

$$\frac{1}{c}\frac{d}{dt}(\Psi,\Phi)_{L(\Omega)} + (\vec{\mathcal{E}}, \mathrm{rot}\vec{u})_{2,\Omega} - \frac{4\pi}{c}(\sigma\vec{\mathcal{E}}, \mathrm{grad}\psi)_{2,\Omega} + \frac{4\pi}{c}(\sigma\mathrm{grad}\varphi, \mathrm{grad}\psi)_{2,\Omega} =$$
$$= \frac{4\pi}{c}(\vec{J}^{ext}, \mathrm{grad}\psi)_{2,\Omega}, \tag{11}$$
$$(\vec{\mathcal{E}}, \vec{v})_{2,\Omega} - (\sigma\mathrm{grad}\varphi, \vec{v})_{2,\Omega} - \frac{c}{4\pi}(\vec{H}, \mathrm{rot}\vec{v})_{2,\Omega} = -(\vec{J}^{ext}, \vec{v})_{2,\Omega}. \tag{12}$$

Справедливо следующее утверждение [38,39].

Теорема 1. *Для всех $\Psi_0 \in V_0(\Omega)$, $\vec{J}^{ext} \in H^1(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$ задача (10), (11) имеет единственное решение Ψ, $\vec{\mathcal{E}}$. При этом $\Psi \in C(0,T,L(\Omega))$, $\partial/\partial t\Psi \in L_2(0,T,L(\Omega))$ и выполнены соотношения (8), (9). Справедливы оценки*

$$\|\Psi(t)\|_{2,\Omega} \le C_1\left(\|\vec{J}^{ext}\|_{2,Q} + \|\Psi_0\|_{L(\Omega)}\right), t \in (0,T),$$
$$\|\vec{\mathcal{E}}\|_{2,Q} \le C_2\left(\|\vec{J}^{ext}\|_{2,Q} + \|\Psi_0\|_{L(\Omega)}\right),$$
$$\left\|\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right\|_{2,Q} \le C_3\left(\|\vec{J}^{ext}\|_{2,Q} + \left\|\frac{\partial}{\partial t}\vec{J}^{ext}\right\|_{2,Q} + \|\Psi_0\|_{V_0(\Omega)}\right).$$

Если

$$\mathrm{rot}\vec{h} = -\frac{4\pi}{c}\sigma\mathrm{grad}\varphi_0 + \frac{4\pi}{c}\vec{J}^{ext}(0) \tag{13}$$

то $\partial/\partial t\Psi \in L_\infty(0,T,L(\Omega))$, $\partial/\partial t\vec{\mathcal{E}} \in L_2(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$ и справедливы оценки

$$\left\|\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right\|_{L(\Omega)} \le C_4\left\|\frac{\partial}{\partial t}\vec{J}^{ext}\right\|_{2,Q},$$
$$\|\vec{\mathcal{E}}\|_{2,Q} \le C_5\left\|\frac{\partial}{\partial t}\vec{J}^{ext}\right\|_{2,Q}, \left\|\frac{\partial}{\partial t}\vec{\mathcal{E}}\right\|_{2,Q} \le C_6\left\|\frac{\partial}{\partial t}\vec{J}^{ext}\right\|_{2,Q}.$$

Положительные постоянные $C_1 - C_6$ зависят от коэффициентов задачи и области Ω.

Из теоремы вытекает, что задание напряженности магнитного поля в начальный момент времени, потенциальной части напряженности электрического поля в начальный момент времени и плотности тока сторонних электродвижущих сил полностью определяет конфигурацию квазистационарного электромагнитного поля.

Обозначим исходные данные задачи (8), (9), (6), (7) через $\Pi \equiv (\Psi_0, \vec{J}^{ext})$, решение соответствующей задачи (10), (11) с данными Π – через $(\Psi[\Pi], \vec{\mathcal{E}}[\Pi])$. Пусть $\Psi_T \equiv (\vec{h}_T, \mathrm{grad}\varphi_T) \in K_0(\mathrm{div}\mu;\Omega) \times K_0(\mathrm{rot};\Omega)$, $\varphi_T \in H(\Omega)$.

Поставим задачу поиска пары $(\Psi_0, \vec{J}^{ext})$ по финальному (в момент времени T) наблюдению

$$\Psi_T = \Psi[\Pi](T).$$

Положим $Z = H(\mathrm{rot};\Omega) \times K_0(\mathrm{rot};\Omega) \times H^1(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)$, задан линейный непрерывный оператор $A: Z \to L(\Omega)$, $A[\Pi] = \Psi[\Pi](T)$, $\Pi \in Z$. Обратная задача финального наблюдения может быть сформулирована как задача поиска элемента $\Pi \in Z$ такого, что

$$A[\Pi] = \Psi_T, \qquad \Psi_T \in K_0(\mathrm{div}\mu;\Omega) \times K_0(\mathrm{rot};\Omega).$$

Поскольку решение обратной задачи финального наблюдения, вообще говоря, не единственно, рассматривается задача поиска решения обратной задачи, минимизирующего непрерывный и сильно выпуклый квадратичный функционал $f: Z \to R^1$,

$$f(\Pi) = (\mu\vec{h}, \vec{h})_{2,\Omega} + \|\mathrm{rot}\vec{h}\|^2_{2,\Omega} + \|\mathrm{grad}\varphi_0\|^2_{2,\Omega} + \|\vec{J}^{ext}\|^2_{H^1(0,T,\{L_2(\Omega)\}^3)}.$$

Таким образом, получаем задачу выпуклого программирования в гильбертовом пространстве с непрерывным сильно выпуклым целевым функционалом и с операторным ограничением-равенством

$$f(\Pi) \to \inf,\ A[\Pi] = \Psi_T,\ \Pi \in Z, \Psi_T \in K_0(\mathrm{div}\mu;\Omega) \times K_0(\mathrm{rot};\Omega).$$

Определим оператор $B: Z \to \{L_2(\Omega)\}^3$ соотношением

$$B[\Pi] = \frac{c}{4\pi}\mathrm{rot}\vec{h} - \sigma\vec{e} - \vec{F}(0), \qquad \Pi = (\vec{h}, \vec{e}, \vec{F}) \in Z.$$

Задача поиска по финальному наблюдению исходных данных задачи (10), (11), удовлетворяющих условию (12), может быть сформулирована как оптимизационная задача

$$f(\Pi) \to \inf,\ A[\Pi] = \Psi_T, B[\Pi] = 0, \Pi \in Z, \Psi_T \in K_0(\mathrm{div}\mu;\Omega) \times K_0(\mathrm{rot};\Omega).$$

Для решения поставленных задач могут применяться алгоритмы выпуклой оптимизации, основанные на использовании принципа Лагранжа и теоремы Куна-Таккера, в том числе предложенные в [23-25] устойчивые к ошибкам исходных данных регуляризирующие алгоритмы.

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 8.Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, Физматлит, 1982.
2. Толмачев В.В., Головин А.М., Потапов В.С. Термодинамика и электродинамика сплошной среды. М.: Изд-во МГУ, 1988.
3. Тамм И.Е. Основы теории электричества. М.: Наука, 1989.
4. Дмитриев В.И., Ильинский А.С., Свешников А.Г. Развитие математических методов исследования прямых и обратных задач электродинамики// УМН 1976. Т. 31. N 6. С. 123-141.
5. Романов В.Г., Кабанихин С.И., Пухначева Т.П. Обратные задачи электродинамики. Новосибирск: Вычислительный центр СО АН СССР, 1984.
6. Романов В.Г., Кабанихин С.И. Обратные задачи геоэлектрики. М.: Наука, 1991.
7. Ola P., Paivarinta L., Somersalo E. An inverse boundary value problem in electrodynamics// Duke math. J. 1993. V. 70. P. 617-653.
8. Li S., Yamamoto M. An inverse problem for Maxwell's equations in anisotropic media// Chin. Ann. Math. 2007. V 28B. No 1. P.35-54.
9. Дмитриев В.И., Захаров Е.В. Метод интегральных уравнений в вычислительной электродинамике. – М.: МАКС Пресс, 2008.
10. Алексеев Г.В. Оптимизация в стационарных задачах тепломассопереноса и магнитной гидродинамики. – М.: Научный мир, 2010.
11. Alonso Rodriguez A., Camano J., Valli A. Inverse source problems for eddy current equations// Inverse problems. 2012. V.28. 15 pp.
12. Arnold L., Harrach B. Unique shape detection in transient eddy current problems// Inverse Problems. 2013. V.29. 19 pp.
13. Kawashima S., Shizuta Y. Magnetohydrodynamic approximation of the complete equations for an electromagnetic fluid. II // Proc. Japan Acad. 1986. Vol. 62, ser. A. No. 5. P. 181-184.
14. Кулон Ж.-Л., Сабоннадьер Ж.-К. САПР в электротехнике. М.: Мир, 1988.
15. Галанин М.П., Попов Ю.П. Квазистационарные электромагнитные поля в неоднородных средах. М.: Физматлит, 1995.
16. Ammari, H., Buffa, A., Nedelec, J.-C.: A justification of eddy currents model for the Maxwell equations SIAM J. Appl. Math. 2000. Vol. 60. No. 5. P. 1805-023.
17. Alonso Rodriguez A., Valli A. Eddy current approximation of Maxwell equations. Theory, algorithms and applications. Milan: Spriner-Verlag Italia, 2010.
18. Kalinin A.V., Tyukhtina A.A. Lp-estimates for scalar products of vector fields and their application to electromagnetic theory problems // Mathematical Methods in the Applied Sciences. 2018. Vol. 41. No. 18. P. 9283-9292.
19. Калинин А.В., Тюхтина А.А О единственности решения ретроспективной обратной задачи для системы уравнений Максвелла в квазистационарном магнитном приближении// Вест. ННГУ им. Н.И. Лобачевского. 2014. N 4. С.263-270.

20. Kalinin A.V., Sumin M.I., Tyukhtina A.A. Methods of dual regularization for solving inverse problems of quasistationary electromagnetic fields theory// Baswell A.R., ed. Advances in Mathematics Research. V.24. – New York: Nova Science Publishers, 2017. Ch.4. P. 59–124.
21. Калинин А.В., Сумин М.И., Тюхтина А.А. Устойчивые секвенциальные принципы Лагранжа в обратной задаче финального наблюдения для системы уравнений Максвелла в квазистационарном магнитном приближении // Дифференц. ур-ния. 2016. Т. 52. № 5. С. 608-624.
22. Калинин А.В., Сумин М.И., Тюхтина А.А. Об обратных задачах финального наблюдения для системы уравнений Максвелла в квазистационарном магнитном приближении и устойчивых секвенциальных принципах Лагранжа для их решения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2017. Т. 57. № 2. С. 18-40.
23. Сумин М.И Регуляризованный градиентный двойственный метод решения обратной задачи финального наблюдения для параболического уравнения// Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2004. Т.44. N. 11. С. 2001-2019.
24. Сумин М.И. Регуляризованная параметрическая теорема Куна-Таккера в гильбертовом пространстве// Ж. вычислит. матем. и матем. физ. 2011. Т.51. N 9. С.1594-1615.
25. Сумин М.И. Устойчивое секвенциальное выпуклое программирование в гильбертовом пространстве и его приложение к решению неустойчивых задач// Ж. вычислит. матем. и матем. физ. 2014. Т.54. N 1. С.25-49.
26. Boström R., Fahleson U. Vertical propagation of time-dependent electric fields in the atmosphere and ionosphere // in H.Dolezalek, R.Reiter (Eds.), Electrical Processes in Atmospheres, Steinkopff, 1977. P. 529-535.
27. Жидков А.А., Калинин А.В. Корректность одной математической задачи атмосферного электричества // Вестник ННГУ им. Н.И. Лобачевского. 2009. № 4. С. 123-129.
28. Мареев Е.А. Достижения и перспективы исследований глобальной электрической цепи // Успехи физ. наук. 2010. Т. 180. № 5. С. 527-534.
29. Калинин А.В., Слюняев Н.Н., Мареев Е.А., Жидков А.А. Стационарные и нестационарные модели глобальной электрической цепи: корректность, аналитические соотношения, численная реализация // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2014. Т. 50. № 3. С. 314-322.
30. Kalinin A.V., Slyunyaev N.N. Initial-boundary value problems for the equations of the global atmospheric electric circuit // J. Math. Anal. Appl. 2017. Vol. 450. No. 1. P. 112-136.
31. Жидков А.А., Калинин А.В., Сумин М.И. Алгоритм двойственной регуляризации в обратных задачах теории глобальной электрической цепи// Вестник ТГУ 2011. Т.16. Вып. 4. С. 1074-1076.
32. Чернов А.В. О единственности решения обратной задачи атмосферного электричества// Вестник российских университетов. Математика. 2020. Т. 25. N 129. С. 85-99.
33. Чернов А.В. О дифференцировании функционала в задаче параметрической оптимизации коэффициента полулинейного уравнения глобальной электрической цепи// Уфимский математический журнал 2021. Т. 13. N 3. С. 155-177.
34. Degond P., Raviart P.-A. An analysis of the Darwin model of approximation to Maxwell's equations // Forum Math. 1992. Vol. 4. P. 13-44.
35. Raviart P.-A., Sonnendrücker E. Approximate models for the Maxwell equations // J. Comput. Appl. Math. 1994. Vol. 63. P. 69-81.
36. Raviart P.-A., Sonnendrücker E. A hierarchy of approximate models for the Maxwell equations // Numer. Math. 1996. Vol. 73. P. 329-372.
37. Weitzner H., Lawson W.S. Boundary conditions for the Darwin model // Phys. Fluids B. 1989. Vol. l. P. 1953-1957.
38. Калинин А.В., Тюхтина А.А., Лаврова С.Р. Неклассические задачи в моделях глобальной электрической цепи// Марчукоские научные чтения – 2019: Труды Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики"» (Новосибирск, 1–5 июля 2019 г.) – Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2019. С. 203-209.
39. Калинин А.В., Тюхтина А.А. Приближение Дарвина для системы уравнений Максвелла в неоднородных проводящих средах// ЖВМ и МФ. 2020. Т.60, № 8. С. 121-134.

40. Kalinin A.V., Tyukhtina A.A. Hierarchy of Models of Quasi-stationary Electromagnetic Fields // Mathematical Modeling and Supercomputer Technologies. 20th International Conference, MMST 2020, Nizhny Novgorod, Russia, November 23 – 27, 2020, Revised Selected Papers. Communications in Computer and Information Science, v.1413. Springer, 2021. P. 77-92.
41. Girault V., Raviart P. Finite element methods for Navier--Stokes equations. N.Y.: Springler-Verlag, 1986.

СПОСОБЫ ОПИСАНИЯ ВХОДНЫХ ПОТОКОВ НЕОДНОРОДНЫХ ТРЕБОВАНИЙ

А.М. Федоткин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Дается построение математической модели динамики движения потока неоднородных машин при плохих погодных условиях на магистрали с учётом как пространственного, так и временного процесса. Показано, что при некоторых ограничениях нелокальное описание [1] установившегося режима потока машин можно выполнить с помощью стационарного потока без последействия, когда в любой вызывающий момент случайным образом поступает не более двух заявок.

Ключевые слова: конфликтный поток, нелокальное описание, условное распределение.

1. Введение

В отличие от большинства известных трудов, для построения математической модели выходных потоков в работе используется так называемое нелокальное описание потока требований, предложенное в [1–2]. Изучается способ нелокального описания потока неоднородных требований. При $i = 1, 2, ...$ обозначим через τ'_i момент i-го появления в системе требования с номером i. Последовательности $\{\tau'_i;\ i \geq 1\}$ взаимно однозначно соответствует [3] считающий случайный процесс $\{\eta(t)\colon t \geq 0\}$. Как правило, случайные величины $\tau'_{i+1} - \tau'_i$, $i \geq 1$, являются зависимыми и имеют различные функции распределения. В этом случае практически не удается определить конечномерные распределения считающего случайного процесса $\{\eta(t)\colon t \geq 0\}$. В работе рассматривается именно такая сложная ситуация.

2. Нелокальное описание неоднородных требований

В теоретических исследованиях и приложениях очень часто поток $\{\tau'_i;\ i \geq 1\}$ подвергается различным преобразованиям. Эти преобразования приводят либо к изменениям расположений моментов τ'_i, $i \geq 1$ на оси времени, либо к появлению новых и исчезновению прежних моментов [4]. В отличие от этого в данной работе первоначальный поток $\{\tau'_i;\ i \geq 1\}$ не изменяется. Строится последовательность случайных точек τ_i, $i = 0, 1, ...$ на оси времени с помощью выбора некоторой функциональной зависимости каждого элемента τ_i от моментов τ'_i, $i \geq 1$. На содержательном уровне это означает, что происходит разбиение потока $\{\tau'_i;\ i \geq 1\}$ моментами τ_i, $i = 0, 1, ...$ с целью более простого его описания. Тогда нелокальное описание входного потока заявок представляется в виде векторной случайной последовательности $\{(\tau_i, \eta_i);\ i \geq 0\}$, где случайная величина η_i задает число оступивших заявок за промежуток $[\tau_i, \tau_{i+1})$. Таким образом, цели и методы преобразования потока $\{\tau'_i;\ i \geq 1\}$ здесь совершенно отличаются от известных в литературе [8, 23]. В работе [125] в случае появления в потоке групп большого размера впервые предложены и изучены три следующих способа разбиения потока $\{\tau'_i;\ i \geq 1\}$ или получения маркированного точечного процесса $\{(\tau_i, \eta_i);\ i \geq 0\}$.

Первый способ. Предположим, что первая заявка поступает в систему в момент $\tau'_1 = 0$. В этом так называемом синхронном случае случайные величины $\tau_0, \tau_1, ...$ определяются соотношениями вида

$$\tau_i = \tau'_{k_i},\ k_{i+1} = \inf\{k\colon k > k_i,\ \tau'_k - \tau'_{k-1} \geq h_0\},\ k_0 = 1,\ h_0 = \text{const} > 0,$$

и $\tau'_1, \tau'_2, ...$ — абсциссы точек разрыва исходного случайного процесса $\{\eta(t)\colon t \geq 0\}$ или моменты поступления заявок в систему. Если множество $\{k\colon k > k_i,\ \tau'_k - \tau'_{k-1} \geq h_0\} = \varnothing$ при некотором $i \geq 0$, то полагаем $\tau_{i+1} = +\infty$. Итак, этот алгоритм так выбирает случайные точки $\tau_0, \tau_1, ...$ на оси времени, что каждому промежутку $[\tau_i, \tau_{i+1})$ соответствует i-я случайная величина $\eta_i = k_{i+1} - k_i$ или величина i-й транспортной пачки для потока машин. Случайная величина η_i всегда определяет количество требований на промежутке $[\tau_i, \tau_{i+1})$. При этом произвольный i-й момент τ_i совпадает с некоторым моментом τ'_{k_i} разрыва считающегослучайного процесса $\{\eta(t)\colon t \ge 0\}$, а интервалы между любыми двумя последовательными требованиями из i-й группы строго меньше величины h_0, т. е. требования условно объединяются в группы (пачки) по принципу близости моментов их поступления. Наконец, интервал между моментом поступления последнего требования из i-й группы и моментом поступления первого требования пачки с номером $i + 1$ не меньше величины h_0. Этот интервал будем называть интервалом между двумя последовательными пачками.

Второй способ. Пусть теперь момент τ'_1 первого поступления требования удовлетворяет условию $\tau'_1 \ne 0$. В этом так называемом асинхронном случае предлагается второй способ разбиения первоначального потока $\{\tau'_i;\ i \ge 1\}$ на группы. Согласно этому способу будем определять случайные величины τ_0, τ_1, ... равенствами

$$\tau_i = \tau'_{k_i},\ k_0 = \inf\{k\colon k \ge 1,\ \tau'_{k+1} - \tau'_k \ge h_0\} + 1,\ k_{i+1} = \inf\{k\colon k > k_i,\ \tau'_k - \tau'_{k_i} \ge h_0\}.$$

При втором алгоритме выбора точечного процесса $\{\tau_i;\ i \ge 0\}$ сначала идет поиск момента $\tau_0 = \tau'_{k_0}$ поступления такого требования, за которым впервые последует группа требований. При $i \ge 1$ каждый следующий момент τ_i выбирается так, что интерал времени между моментом τ_i поступления первого требования из i-й группы и моментом τ_{i-1} поступления первого требования пачки с номером $(i - 1)$ будет не меньше заданной величины h_0. Этот способ выделения первых требований в группе следует применять в случае интенсивного входного потока $\{\tau'_i;\ i \ge 1\}$. Итак, требования в потоке условно объединяются в пачки (группы) не только по принципу близости моментов их поступления, но и с учетом более детального поиска первого требования в каждой из групп.

Третий способ. При каждом $c = 0,1,...$ обозначим через $\tau^{(c)} = \{\tau_i^{(c)};\ i \ge 0\}$ определяемый ниже поток случайных точек на оси времени $[0, \infty)$, которые связаны определенным образом с некоторыми моментами поступления требований в систему. Предполагаем, что моменты $\tau_i^{(c)}$; $i \ge 0$, этого потока совпадают с некоторыми точками разрыва исходного считающего случайного процесса $\{\eta(t)\colon t \ge 0\}$. Тогда имеем $\tau_i^{(c)} = \tau'_{k_{c,i}}$, $k_{c,i} \in \{1, 2, \ldots\}$. Пусть величина $\eta_i^{(c)} = k_{c,i+1} - k_{c,i}$ задает число поступивших требований на промежутке $[\tau_i^{(c)}, \tau_{i+1}^{(c)})$ и является величиной i-ой группы потока вида $\{(\tau_i^{(c)}, \eta_i^{(c)});\ i \ge 0\}$. Величина $\delta_i^{(c)} = \tau'_{k_{c,i+1}} - \tau'_{k_{c,i+1}-1}$ определяет временной интервал между последовательными группами с номерами i и $i + 1$ исходного считающего процесса $\{\eta(t)\colon t \ge 0\}$ при его новом нелокальном описании в виде последовательности $\{(\tau_i^{(c)}, \eta_i^{(c)});\ i \ge 0\}$. Тогда элементы $\tau_i^{(c)}$, $c \ge 0$, $i \ge 0$, потоков $\{(\tau_i^{(c)}, \eta_i^{(c)});\ i \ge 0\}$ будем строить с помощью рекуррентных соотношений следующего вида:

$$k_{0,i+1} = \inf\{k\colon\ k > k_{0,i},\ \tau'_k - \tau'_{k-1} \ge h_0\},$$

$$s_c = \min\{\inf\{k\colon k \ge 0,\ \eta_k^{(c)} \le d,\ \eta_{k+1}^{(c)} = d + 1,\ \delta_k^{(c)} < h_1\},$$

$$\inf\{k\colon k \ge 0,\ \eta_k^{(c)} \le d,\ \eta_{k+1}^{(c)} \le d,\ \delta_k^{(c)} < h_2\}\};$$

$$\tau_i^{(c+1)} = \begin{cases} \tau_i^{(c)} & \text{при } i \le s_c, \\ \tau_{i+1}^{(c)} & \text{при } i > s_c. \end{cases}$$

В этих формулах $k_{0,0} = 1$, d – некоторое натуральное число, и постоянные величины h_0, h_1, h_2 удовлетворяют условию $h_0 < h_1 < h_2$. При третьем алгоритме выбора точечного процесса $\{\tau_i$; $i \ge 0\}$ сначала происходит разбиение исходного точечного процесса $\{\tau'_i;\ i \ge 1\}$ первым способом с целью получения маркированного точечного процесса $\{(\tau_i^{(0)}, \eta_i^{(0)});\ i \ge 0\}$ нулевого уровня. Далее, последовательно начиная с нулевой пачки $\eta_0^{(0)}$ объединяются первые две соседние группы в одном из следующих случаев: а) если предыдущая пачка содержит не более d заявок, последующая включает ровно $d + 1$ требований и одновременно интервал между такими группами строго меньше величины h_1; б) если предыдущая и последующая группа содержат каждая не более d требований и интервалы между ними строго меньше величины h_2. Это позволяет найти маркированный точечный процесс $\{(\tau_i^{(1)}, \eta_i^{(1)});\ i \geq 0\}$ первого уровня, к которому применяем ту же самую процедуру, что и к маркированному точечному процессу $\{(\tau_i^{(0)}, \eta_i^{(0)});\ i \geq 0\}$. В результате получаем маркированный точечный процесс $\{(\tau_i^{(2)}, \eta_i^{(2)});\ i \geq 0\}$ второго уровня и т. д. Легко видеть, что множество $\{\omega\text{: } \lim_{c\to\infty}\tau_i^{(c)} \text{ существует}\}$ совпадает с достоверным событием Ω для любого $i \geq 0$. Отсюда вытекает, что для любого $i \geq 0$ можно определить случайную величину $\tau_i = \lim_{c\to\infty}\tau_i^{(c)}$. При таком алгоритме выбора потока $\{(\tau_i, \eta_i);\ i \geq 0\}$ имеем: $\tau_i = \tau'_{k_i}$, $\eta_i = k_{i+1} - k_i$ для всех $i \geq 0$.

Если транспортный поток или поток требований другой физической природы имеет тенденцию к образованию группы небольшого размера, то здесь предлагается использовать разбиение входного потока $\{\tau'_i;\ i \geq 1\}$ с помощью следующего способа.

Четвертый способ. Пусть при фиксированном $c = 0,1,...$ моменты $\tau_i^{(c)}$, $i \geq 0$, на оси времени $[0, \infty)$ совпадают с некоторыми моментами τ'_i, $i \geq 1$ поступления требований в систему. Другими словами, моменты $\tau_i^{(c)}$, $i \geq 0$, совпадают с некоторыми точками разрыва исходного считающего случайного процесса $\{\eta(t)\text{: } t \geq 0\}$, т. е. $\tau_i^{(c)} = \tau'_{k_{c,i}}$, $k_{c,i} \in \{1, 2, \dots\}$. Тогда при каждом $c \geq 0$ величина $\eta_i^{(c)} = k_{c,i+1} - k_{c,i}$ задает число поступивших требований на промежутке $[\tau_i^{(c)}, \tau_{i+1}^{(c)})$ первоначального потока и является величиной i-ой группы виртуального потока $\{(\tau_i^{(c)}, \eta_i^{(c)});\ i \geq 0\}$. Величина $\delta_i^{(c)} = \tau'_{k_{c,i+1}} - \tau'_{k_{c,i+1}-1}$ определяет временной интервал между последовательными группами с номерами i и $i + 1$ исходного входного потока $\{\eta(t)\text{: } t \geq 0\}$ при его нелокальном описании в виде последовательности $\{(\tau_i^{(c)}, \eta_i^{(c)});\ i \geq 0\}$. Тогда при каждом фиксированном $c \geq 0$ элементы $\tau_i^{(c)}$, $i \geq 0$, потока $\{(\tau_i^{(c)}, \eta_i^{(c)});\ i \geq 0\}$ будем строить с помощью рекуррентных соотношений вида:

$$k_{0,i+1} = \inf\{k\text{: } k > k_{0,i},\ \tau'_k - \tau'_{k-1} \geq h_0\},$$

$$s_c = \inf\{k\text{: } k \geq 0,\ \eta_k^{(c)} \leq d,\ \eta_{k+1}^{(c)} \leq d,\ \delta_k^{(c)} < h_1,\ \eta_k^{(c)} = \eta_{k-1}^{(c)}\},$$

$$\tau_i^{(c+1)} = \begin{cases} \tau_i^{(c)} & \text{при } i \leq s_c, \\ \tau_{i+1}^{(c)} & \text{при } i > s_c. \end{cases}$$

В этих формулах $\eta_{-1}^{(c)} = 1$ при каждом $c \geq 0$, $k_{0,0} = 1$, d – некоторое натуральное число, и постоянные величины h_0, h_1, удовлетворяют условию $h_0 < h_1$.

При четвертом алгоритме выбор окончательного точечного процесса $\{\tau_i;\ i \geq 0\}$ осуществляется в несколько этапов. Сначала, подбирая постоянную величину h_0 специальным образом, происходит разбиение исходного точечного процесса $\{\tau'_i;\ i \geq 1\}$ первым способом с целью получения маркированного точечного процесса $\{(\tau_i^{(0)}, \eta_i^{(0)});\ i \geq 0\}$ нулевого уровня. Если в реальном потоке могут образовываться группы (пачки) небольшого размера, то величина $h_0 \approx \min\{x_1, x_2, ..., x_n\}$. Например, если в реальном потоке число требований в группе (пачке) не может быть больше двух, то $h_0 \leq \min\{x_1, x_2, ..., x_n\}$. Далее, к полученному маркированному точечному процессу $\{(\tau_i^{(0)}, \eta_i^{(0)});\ i \geq 0\}$ нулевого уровня применяем следующую процедуру: последовательно начиная с нулевой пачки $\eta_0^{(0)}$ объединяем первые две соседние группы, если предыдущая группа $\eta_k^{(c)}$ и последующая группа $\eta_{k+1}^{(c)}$ содержат каждая не более d требований, интервалы между ними строго меньше величины h_1 и, наконец, выполняется равенство $\eta_{k-1}^{(c)} = \eta_k^{(c)}$. Это позволяет найти маркированный точечный процесс $\{(\tau_i^{(1)}, \eta_i^{(1)});\ i \geq 0\}$ первого уровня, к которому применяем ту же самую процедуру, что и к маркированному точечному процессу $\{(\tau_i^{(0)}, \eta_i^{(0)});\ i \geq 0\}$. В результате получаем маркированный точечный процесс $\{(\tau_i^{(2)}, \eta_i^{(2)});\ i \geq 0\}$ второго уровня и т. д. Легко видеть, что множество $\{\omega:\ \lim_{c\to\infty}\tau_i^{(c)}$ существует$\} = \Omega$ для любого $i \geq 0$. Теперь для любого $i \geq 0$ определим случайную величину $\tau_i = \lim_{c\to\infty}\tau_i^{(c)}$. При таком алгоритме выбора потока $\{(\tau_i, \eta_i);\ i \geq 0\}$ имеем: $\tau_i = \tau'_{k_i}$, $\eta_i = k_{i+1} - k_i$ для всех $i \geq 0$.

Используя один из предложенных способов и подбирая соответствующим образом параметры h_0, h_1, h_2 и d, как правило, удается построить последовательности $\{\tau_i - \tau_{i-1};\ i \geq \geq 1\}$ и $\{\eta_i;\ i \geq 0\}$, каждая из которых составлена из независимых и одинаково распределенных случайных величин. Для проверки гипотезы о независимости и одинаковом распределении указанных случайных величин, которые соответствуют различным реальным задачам, применялось различные критерии. Приведем схему применения этих критериев на примере случайных величин $X_i = \tau_i - \tau_{i-1}$, $i \geq 1$.

Первый критерий. Фазово-частотный критерий Валлиса и Мура, основанный на статистике

$$Z_1(n, X_1, X_2, ..., X_n) = \left(\Upsilon_1(n, X_1, X_2, ..., X_n) - \frac{2n-7}{3}\right)\frac{\sqrt{90}}{\sqrt{16n-29}}.$$

Здесь n объем повторной выборки $(X_1, X_2, ..., X_n)$, а $\Upsilon_1(n, X_1, X_2, ..., X_n)$ — так называемое случайное число фаз. Значение случайной величины $\Upsilon_1(n, X_1, X_2, ..., X_n)$ определяется по выборочным значениям $x_1, x_2, ..., x_n$ случайных интервалов $X_1, X_2, ..., X_n$ следующим образом. Для всех $i = 1, 2, ..., (n-1)$ вычисляется знак разности $x_{i+1} - x_i$. Нулевые значения разностей не учитываются. Последовательность одинаковых знаков называют фазой. Далее вычисляют суммарное число плюсовых и минусовых фаз, причем начальная и конечная фазы исключаются. Тогда значение случайной величины $\Upsilon_1(n, X_1, X_2, ..., X_n)$ равно такому суммарному числу. В случае справедливости выдвинутой гипотезы последовательность случайных величин $\{Z_1(n, X_1, X_2, ..., X_n);\ n \geq 30\}$ сходится по распределению к стандартному нормальному закону. Согласно фазово-частотному критерию выдвинутую гипотезу следует отвергать, если наблюдаемое значение $Z_1(n, x_1, x_2, ..., x_n)$ случайной величины $Z_1(n, X_1, X_2, ..., X_n)$ удовлетворяет условию: $|\ Z_1(n, x_1, x_2, ..., x_n)\ | > C_\alpha$. Пороговое значение C_α определяется при заданном уровне значимости α по интегральной функции распределения $\Phi(x)$ стандартной нормальной случайной величины из условия: $\Phi(-C_\alpha) = \alpha/2$.

Второй критерий. Инверсионный критерий базируется на статистике

$$Z_2(n, X_1, X_2, ..., X_n) = \left(\Lambda(n, X_1, X_2, ..., X_n) - \frac{n(n-1)}{4}\right)\frac{6}{n^{3/2}}.$$

Здесь $\Lambda(n, X_1, X_2, ..., X_n)$ — случайное число инверсий для выборки $X_1, X_2, ..., X_n$, которое определяем следующим способом. Строим вариационный ряд $X_{(1)} \leq X_{(2)} \leq ... \leq X_{(n)}$ для исходной выборки $(X_1, X_2, ..., X_n)$. Пусть $\Lambda_i(n, X_1, X_2, ..., X_n)$ есть случайное число элементов множества $\{X_{i+1}, X_{i+2}, ..., X_n\}$, которые стоят в вариационном ряду левее элемента X_i. Тогда $\Lambda(n, X_1, X_2, ..., X_n) = \Lambda_1(n, X_1, X_2, ..., X_n) + \Lambda_2(n, X_1, X_2, ..., X_n) + \Lambda_{n-1}(n, X_1, X_2, ..., X_n)$ определяет общее число инверсий для выборки $(X_1, X_2, ..., X_n)$. Предлагаемая во втором критерии статистика в условиях выдвинутой гипотезы при $n \to \infty$ распределена по стандартному нормальному закону. Согласно инверсионному критерию выдвинутую гипотезу следует отвергать, если значение $Z_2(n, x_1, x_2, ..., x_n)$ статистики $Z_2(n, X_1, X_2, ..., X_n)$ удовлетворяет неравенству: $|\ Z_2(n, x_1, x_2, ..., x_n)\ | > C_\alpha$.

Применение критерия хи-квадрат для обработки различных конкретных статистических данных об интервалах $\tau_{i+1} - \tau_i$, $i \geq 0$ указывает на хорошую согласованность распределения каждого из этих интервалов с распределением вида

$$\mathbf{P}(\{\omega:\ \tau_{i+1} - \tau_i < t\}) = 1 - \exp\{-(t-h)/\sigma\},\ t > h;$$

$$\mathbf{P}(\{\omega:\ \tau_{i+1} - \tau_i < t\}) = 0,\ t \leq h.$$

Это распределение является смещенным экспоненциальным распределением с параметрами $h \geq 0$ и $\sigma > 0$. При этом неизвестные параметры h и σ оценивались видоизмененным методом минимума хи-квадрат . Итак, в работе рассмотрен нелокальный способ задания потоков неоднородных требований. Эффективность такого подхода показана на примерах описания потоков неоднородных требований разной физической природы [6-7].

Литература

1. Федоткин А.М., Федоткин М.А. Анализ и оптимизация выходных процессов при циклическом управлении конфликтными транспортными потоками Гнеденко-Коваленко // Автоматика и телемеханика. РАН. 2009. № 12. С. 92 – 108.
2. Fedotkin A.M., Fedotkin M. A. Construction and Analysis of a Mathematical Model of Spatial and Temporal Characteristics of Traffic Flows // Automatic Control and Computer Sciences. Allerton Press, Inc. 2014. Vol. 48. No 6. Pp. 358 – 367.
3. Федоткин А.М. Определение стационарного режима рекуррентных марковских цепей итеративно-мажорантным методом // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2009. № 4. С. 130 – 140.
4. Федоткин М.А., Федоткин А.М., Кудрявцев Е.В. Динамические модели неоднородного потока транспорта на магистралях // Автоматика и телемеханика. РАН. 2020. № 8. С. 149 – 164.
5. Федоткин, М.А. Неполное описание потоков неоднородных требований / М.А. Федоткин – В кн.: Теория массового обслуживания. М.: МГУ, ВНИИСИ, 1981. – С. 113 – 118
6. Федоткин, А.А. Изучение свойств потока Гнеденко-Коваленко / А.А. Федоткин, А.М. Федоткин // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. –2008. – №6. – С. 156 – 160.

СТАБИЛИЗАЦИЯ С ПОМОЩЬЮ СТАТИЧЕСКОГО РЕГУЛЯТОРА ДИНАМИЧЕСКОГО ОБЪЕКТА С ОГРАНИЧЕНИЯМИ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕМЕННЫЕ[1*]

А.А. Федюков

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Рассматривается задача синтеза статического регулятора, который обеспечивает стабилизацию линейного динамического объекта при наличии ограничений на фазовые переменные. Приведена оценка области допустимых начальных состояний системы, при которых регулятор, полученный в задаче синтеза управления при ограничениях на фазовые переменные без учета ошибки в измеряемом выходе, будет обеспечивать стабилизацию и в случае наличия ошибки в измеряемом выходе. Подход к решению основан на применении метода функций Ляпунова и аппарата линейных матричных неравенств. Сформулированы достаточные условия для нахождения границ этой области. В качестве примера рассмотрена задача стабилизации перевернутого маятника. Приведены результаты численного моделирования.

Ключевые слова: стабилизация, линейные матричные неравенства, статический регулятор.

1. Введение

Существуют разные способы построения регуляторов [1-6], в том числе способ, основанный на применении аппарата линейных матричных неравенств [1]. В задаче стабилизации с помощью статического регулятора предполагают, что состояние системы не доступно измерению, а доступны измерению только часть фазовых переменных или их линейная комбинация. Известно [1, 4, 5], что решение такой задачи сводится к разрешимости системы билинейных матричных неравенств. Эта задача не принадлежит классу задач выпуклого программирования и в настоящее время отсутствуют эффективные с вычислительной точки зрения численные методы решения такого класса задач. Вместе с тем возможна ситуация, когда полученное решение физически не может быть реализовано. Это связано с тем, что синтез линейных законов управления на основе линейной модели управляемого объекта может быть эффективно применен только там, где линейная модель более или менее адекватно описывает реальный объект, т.е. в ограниченной области фазового пространства. Заметим, что в реальных условиях работы система также должна находиться в области ее допустимых состояний. В связи с этим возникает необходимость учитывать в модели ограничения на фазовые переменные объекта.

В данной статье обсуждаются вопросы по оценке области допустимых начальных состояний динамической системы, при которых регулятор, полученный в задаче синтеза статического регулятора для линейной системы при ограничениях на фазовые переменные, будет обеспечивать стабилизацию также и в случае, когда выходные переменные системы измеряются с ошибкой. Получены достаточные условия, которые позволяют оценить множество допустимых начальных состояний динамической системы. Подход к решению основан на применении метода функций Ляпунова, аппарата линейных матричных неравенств и неущербности для квадратичных форм S-процедуры при двух ограничениях [7]. В качестве примера рассмотрена задача стабилизация перевернутого маятника. Численные эксперименты согласуются с теоретическими результатами.

2. Постановка задачи

Рассмотрим линейный управляемый объект с не измеряемым состоянием

[1*] Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 18-41-520002, № 19-01-00289).

$$\dot{x} = Ax + Bu\,,\ x(0) = x_0\,, \tag{1}$$

$$z_i = C_i x\,,\ i = \overline{1, N}\,, \tag{2}$$

где $x \in R^n$ – состояние системы, $u \in R^l$ – управление, $l < n$, $z_i \in R^{m_i}$ – управляемые выходы системы; A, B и C_i – заданные матрицы соответствующих размеров. Предполагаем, что пара (A, B) – стабилизируема, а пара (A, C) – детектируема.

Введем измеряемый выход системы

$$y = Cx\,, \tag{3}$$

где $y \in R^k$, $k < n$, C – заданная матрица размера $k \times n$.

Требуется построить статический регулятор в виде линейной обратной связи по измеряемому выходу

$$u = \Theta y\,, \tag{4}$$

который будет обеспечивать асимптотическую устойчивость замкнутой системы (1)--(4) и выполнение при заданных значениях γ_i ограничений

$$\max_{t \ge 0} |z_i(t)| \le \gamma_i\,,\ i = \overline{1, N}\,. \tag{5}$$

Предположим, что для объекта (1)--(3) решена задача стабилизации по измеряемому выходу при ограничениях на фазовые переменные и найден закон управления (4). Заметим, что в реальной ситуации выходные переменные системы всегда измеряются с некоторой ошибкой. В связи с этим введем измеряемый выход системы

$$y = C\big(I + \Delta(t)\big)x\,, \tag{6}$$

где I – единичная матрица размера $n \times n$, а матрица $\Delta(t)$ определяет относительные ошибки измерения фазовых переменных, и в любой момент времени удовлетворяет условию $\Delta^T \Delta \le \delta^2 I$, $\delta > 0$ – заданный параметр. Рассмотрим задачу стабилизации системы (1), (2), (6) статическим регулятором (4), полученным как решение задачи стабилизации системы (1) -- (3) при ограничениях на фазовые переменные (5). Возникает вопрос о влиянии ошибок измерения фазовых переменных на выполнение ограничений (5). Другими словами, возникает вопрос о том, как изменится множество начальных состояний системы, для которых управление (4), обеспечивает стабилизацию при ограничениях (5) и в случае наличия ошибки в измеряемом выходе (6)?

3. Достаточные условия существования регулятора

Запишем уравнения замкнутой системы (1) -- (4) в виде

$$\dot{x} = (A + B\Theta C)x\,, \tag{7}$$

$$z_i = C_i x\,,\ i = \overline{1, N}\,. \tag{8}$$

Заметим, что если функция $V(x) = x^T X x$ с матрицей $X = X^T > 0$ является квадратичной функцией Ляпунова системы (7), тогда все траектории этой системы, выходящие из множества $E(X) = \{x : x^T X x \le 1\}$, ограниченного эллипсоидом $x^T X x = 1$, вписанным в область фазового пространства, которая задана неравенствами $|z_i(t)| \le \gamma_i$, $i = \overline{1, N}$, удовлетворяют ограничениям (5). Тогда область фазового пространства, определяемую объединением всех таких множеств $E(X)$ при всевозможных функциях Ляпунова указанного вида, можно выделить в терминах линейных матричных неравенств следующим образом.

Теорема 1. Пусть взаимнообратные матрицы $X = X^T > 0$, $Y = Y^T > 0$ и величины $\gamma_i > 0$, $i = \overline{1, N}$ удовлетворяют системе линейных матричных неравенств

$$W_{B^T}{}^T (YA^T + AY) W_{B^T} < 0\,,$$

$$W_C{}^T(A^TX+XA)W_C<0,$$
$$C_i{}^TC_i\le\gamma_i{}^2X,\ i=\overline{1,N},$$
где столбцы матриц W_{B^T}, W_C образуют базисы ядер матриц B^T, C соответственно, т.е. $B^TW_{B^T}=0$, $CW_C=0$. Тогда все траектории системы (7) с начальными условиями $x(0)\in E(X)$ удовлетворяют ограничениям (5). Параметры регулятора (4) для линейной динамической системы с ограничениями на фазовые переменные находим как решение относительно неизвестной матрицы Θ линейного матричного неравенства
$$\Psi+P^T\Theta^TQ+Q^T\Theta P<0,$$
где
$$\Psi=YA^T+AY,\ P=CY,\ Q=B^T.$$

4. Оценка области допустимых начальных состояний

Представим измеряемый выход системы (6) в виде
$$y=Cx+Cw, \tag{9}$$
где $w=\Delta(t)x$. Так как матрица неопределенности $\Delta(t)$ удовлетворяет условию $\Delta^T\Delta\le\delta^2I$, то
$$w^Tw\le\delta^2x^Tx. \tag{10}$$
Запишем замкнутую систему (1), (2), (4), (9) в виде
$$\begin{aligned}\dot{x}&=\overline{A}x+\overline{B}w,\\ z_i&=C_ix,\ i=\overline{1,N},\end{aligned} \tag{11}$$
где $\overline{A}=A+B\Theta C$, $\overline{B}=B\Theta C$.

Рассмотрим вспомогательную задачу. Пусть требуется найти множество допустимых начальных состояний, при которых управление (4) обеспечивает стабилизацию системы (11) для каждого i при одном ограничении $\max\limits_{t\ge0}|z_i(t)|\le\gamma_i$. Справедлива следующая теорема.

Теорема 2. Пусть матрица $X_i=X_i{}^T>0$ и величины $\mu_1>0$, $\mu_2>0$, $\delta>0$, $\gamma_i>0$ удовлетворяют системе матричных неравенств
$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix}\overline{A}^{\mathrm T}X_i+X_i\overline{A}+\mu_1\delta^2I & X_i\overline{B}\\ \overline{B}^{\mathrm T}X_i & -\mu_1I\end{pmatrix}<0,\\ &C_i{}^{\mathrm T}C_i+\mu_2\delta^2I-\gamma_i{}^2X_i\le0.\end{aligned} \tag{12}$$

Тогда все траектории замкнутой системы (11) с начальными условиями $x(0)\in E(X_i)$, $E(X_i)=\{x:x^TX_ix\le1\}$ удовлетворяют ограничению $\max\limits_{t\ge0}|z_i(t)|\le\gamma_i$.

Обозначим через X_i множество всех матриц X_i, удовлетворяющих неравенствам (12). В качестве критерия минимальности X_i выберем критерий следа. Максимальную по всем $X_i\in\mathrm{X}_i$ область $E(X_i^*)$, находим путем минимизации следа матрицы X_i. Эта операция является стандартной в пакете программ для инженерных расчетов Matlab [8] с использованием приложениях CVX.

Сформулируем достаточные условия для поиска области допустимых начальных состояний динамической системы, при которых управление (4), с матрицей параметров регулятора Θ полученной в задаче синтеза управления при ограничениях на фазовые переменные без учета ошибки в измеряемом выходе, будет обеспечивать стабилизацию и в случае наличия ошибки в измеряемом выходе. Пусть матрицы X_i, $i=\overline{1,N}$ имеют минимальный след и являются решениями системы (12) для значений γ_i соответственно. Тогда все траектории замкнутой системы (11) с начальными условиями $x(0) \in E(X_i)$, $E(X_i) = \{x : x^T X_i x \le 1\}$ будут удовлетворять ограничению $\max\limits_{t \ge 0} |z_i(t)| \le \gamma_i$. Следовательно, для всех начальных состояний $x(0) \in \bigcap\limits_{i=1}^{N} E(X_i)$, управление с заданной матрицей параметров регулятора Θ стабилизирует замкнутую систему при ограничениях (5).

5. Результаты численного моделирования

Рассмотрим управляемый перевернутый маятник

$$\ddot{\varphi} - \varphi = u \tag{13}$$

при ограничениях на φ – угол отклонения звена маятника от вертикали

$$\max_{t \ge 0} |\varphi(t)| \le 0.1, \tag{14}$$

Предполагаем, что φ – угол отклонения звена маятника, и $\dot{\varphi}$ – скорость изменения угла маятника измерению не доступны, но доступна измерению их линейная комбинация $y = \varphi + 10\dot{\varphi}$.

Численное решение получено в пакете Matlab. Для объекта (13) решен ряд задач. В задаче о стабилизации объекта при отсутствии ошибки в измеряемом выходе найдено управление

$$u = -49.9677y, \tag{15}$$

которое обеспечивает асимптотическую устойчивость замкнутой системы (13), (15) и выполнение ограничений на фазовую переменную (14).

На рис. 1 в фазовой плоскости пунктиром отмечены прямые $\phi = -0.1$ и $\phi = 0.1$. Оценим изменение оценки области допустимых начальных состояний динамической системы, при которых управление (15) будет обеспечивать стабилизацию и в случае наличия ошибки в измеряемом выходе. Обозначим Σ_δ оценку множества допустимых начальных состояний, для которых управление стабилизирует систему при значении δ. На рис. 1 приведены области Σ_0, $\Sigma_{0.05}$, $\Sigma_{0.0975}$, соответствующие значениям $\delta = 0$, $\delta = 0.05$, $\delta = 0.0975$, и показано пересечение этих областей. Из рисунка следует, что область $\Sigma_{0.0975}$ лежит внутри области $\Sigma_{0.05}$, а область $\Sigma_{0.05}$ лежит внутри Σ_0. Заметим, что для значений $\delta > 0.0975$ система линейных матричных неравенств (12) не имела решений.

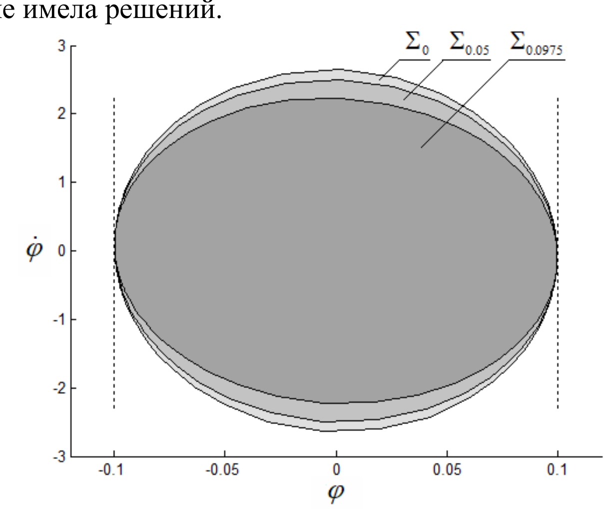


Рис. 1. Пересечение областей Σ_0, $\Sigma_{0.05}$ и $\Sigma_{0.0975}$

На рис. 2 представлен график зависимости площади S области Σ_δ от величины δ, которая определяет величину ошибки в изменяемом выходе. В частности, получены значения $S(0)=0.8311$, $S(0.05)=0.7857$, $S(0.0975)=0.7011$.

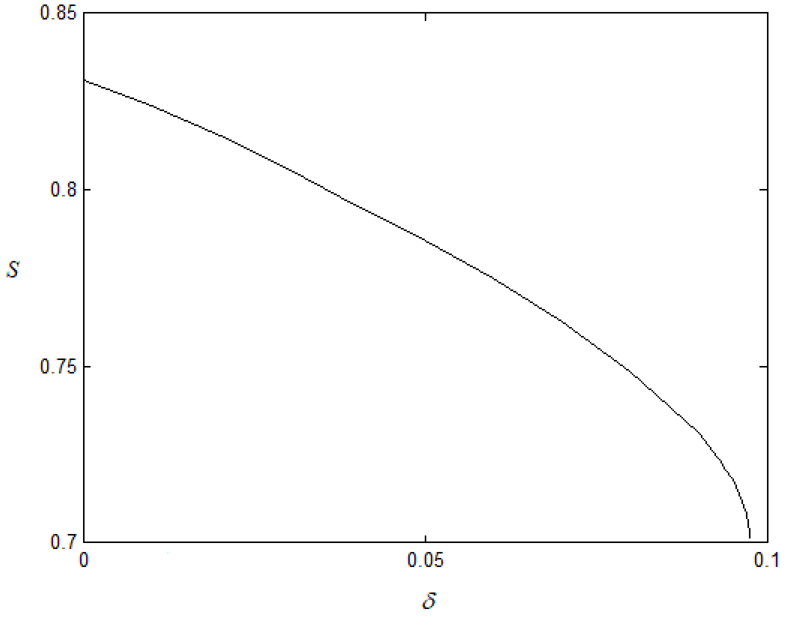


Рис. 2. График зависимости площади области Σ_δ

Таким образом, при увеличении значения δ размеры области допустимых начальных состояний уменьшаются.

Литература

1. Баландин Д.В., Коган М.М. Синтез законов управления на основе линейных матричных неравенств. М.: Физматлит, 2007. 280 с.
2. Баландин Д.В., Коган М.М. Синтез линейных законов управления при фазовых ограничениях // Автоматика и телемеханика, 2009. № 6. С 48-57.
3. Polyak, B.T., Khlebnikov M.V., Shcherbakov P.S. Linear Matrix Inequalities in Control Systems with Uncertainty // Automation and Remote Control, 2021. V. 82, №. 1. P. 1–40. DOI: 10.1134/S000511792101001X.
4. Syrmos, V. L., Abdallah C.T., Dorato P., Grigoriadis K. Static Output Feedback.: A Survey // Automatica, 1997. V.33, No. 2. P. 125-137. DOI: 10.1016/S0005-1098(96)00141-0.
5. Sadabadi, M., Peaucelle D. From Static Output Feedback to Structured Robust Static Output Feedback: A Survey // Annual Reviews in Control, Elsevier. 2016. V.42. P. 11-26. DOI: 10.1016/j.arcontrol.2016.09.014.
6. Поляк Б.Т., Щербаков П.С. Робастная устойчивость и управление. М.: Наука, 2002. 303 с.
7. Поляк Б.Т., Хлебников М.В., Рапопорт Л.Б. Математическая теория автоматического управления: учебное пособие. М.: ЛЕНАНД, 2019. 500 с.
8. Gahinet P., Nemirovski A., Laub A.J., Chilali M. The LMI Control Toolbox. For Use with Matlab. User’s Guide. Natick, MA: The MathWorks, Inc. 1995. 227 p.

РАЗРАБОТКА КОМПЛЕКСНОГО МЕТОДА СКАНИРОВАНИЯ ДЛЯ ОДНОВОЛНОВОЙ И СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ИНТРАВАСКУЛЯРНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ КОГЕРЕНТНОЙ ТОМОГРАФИИ: ТЕХНИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ И МОДЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ[1*]

С.В. Фролов, А.Ю. Потлов, Т.А. Фролова

ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет»

Целью проводимых исследований является повышение информативности результатов сканирования полостей и трактов исследуемого биообъекта, вызванное комбинированием режимов кругового и бокового (секторного) сканирования. Поставленная цель была достигнута посредством использования особой конструкции сканирующей головки интраваскулярного зонда, корректно работающей в режимах, как полного кругового сканирования, так и малоуглового растрового сканирование для множества точек в составе линий сканирования, перпендикулярных траектории кругового движения. Техническая реализация предложенного метода отличается использованием линзы с градиентным показателем преломления и двухкоординатного микроэлектромеханического гальвано-сканера с зеркалами продольного и поперечного сканирования, причем линза с градиентным показателем преломления жестко закреплена на фокусном расстоянии от дистального конца волоконного жгута плеча детектирования, а пучки излучения от источника посредством дистального конца оптического волокна доставляются к краю вышеуказанной линзы, который характеризуется коэффициентом преломления достаточным, чтобы излучение от источника попало на исследуемый объект. Повышение информативности результатов сканирования, оцененное площадью сканируемой поверхности за единицу времени составило 36%, что свидетельствует о достижении поставленной цели.

Ключевые слова: интраваскулярный зонд, оптическая когерентная томография, круговое сканирование, секторное сканирование, микроэлектромеханическая система, гидравлический привод, линзы с градиентным показателем преломления.

Введение

Оптическая когерентная томография (ОКТ) представляет собой метод медицинской визуализации внутренней структуры биологических объектов и неразрушающего контроля сильно рассеивающих сред, основанный на зондировании исследуемого объекта излучением ближнего инфракрасного диапазона с последующим детектированием и анализом обратно отраженных и рассеянных назад фотонов [1-3]. Ключевое преимущество ОКТ по сравнению с другими методам медицинской визуализации заключается в очень высоком пространственном разрешении получаемых изображений, составляющем единицы микрон (2-6 микрон у современных систем). Однако, это преимущество во многом нивелируется низкой глубиной когерентного зондирования, в идеальном случае не превышающей 2.5 миллиметров, а во многих реальных клинических случаях составляющей не более 1.5 миллиметров [4,5]. В связи с вышесказанным применяются различные программные и аппаратные решения для расширения диагностических возможностей ОКТ. Программные решения заключаются в более эффективной обработке интерференционных сигналов (А-сканов), позволяющей снизить уровень шумов, повысить контраст тканевых структур на изображениях, оценить доплеровские сдвиги несущей частоты, фазовые смещения между соседними А-сканами, спекл-контраст и т.п. Такие подходы улучшают качество получаемых структурных изображений и позволяют получать некоторые типы функциональных изображений (цветовые доплеровские картограммы и ангиограммы). Аппаратные решения

[1*] Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 16-15-10327).

по расширению диагностических возможностей ОКТ во многом направлены на переход от время-разрешенных к частотно-разрешенным системам, повышение скорости и эффективности режимов сканирования, а также разработку мультимодальных систем. Весьма перспективным является сочетание лежащих в основе ОКТ принципов низкокогерентной интерферометрии со спектроскопическими и эндоскопическими подходами к медицинской визуализации. Конструирование опорного плеча ОКТ-системы в виде эндоскопического зонда позволяет использовать ОКТ не только в офтальмологии и дерматологии, но и для диагностики полостей и трактов организма человека, т.е. в гастроэнтерологии, стоматологии, оториноларингологии, урологии, гинекологии и т.п. Использование источников излучения с перестраиваемой длиной волны не только повышает качество получаемых изображений, но и позволяет оценивать уровень оксигенации исследуемой ткани [6-8]. Тем не менее, не смотря на свою перспективность технические решения по использованию эндоскопических зондов, особенно в спектроскопической ОКТ нуждаются в серьезном совершенствовании. В частности, отдельное использование зондов прямого, бокового, кругового, проградного и ретроградного сканирования является весьма неудобным. Имеется потребность в создании и использовании эндоскопического зонда с универсальной сканирующей головкой.

Целью проводимых исследований является повышение информативности результатов сканирования полостей и трактов исследуемого биообъекта (в первую очередь стенок церебральных артерий с аневризмами) посредством сочетания режимов кругового и бокового (секторного) сканирования.

1. Комплексный метод сканирования и его техническая реализация

Метод объемного сканирования

Анализ современных методов и технических решений по организации сканирования в эндоскопической и, особенно интраваскулярной, ОКТ, показал, что одни режимы диагностики, как правило реализуются в ущерб другим [9]. В связи с вышесказанным разработан метод сканирования в интраваскулярной ОКТ (как в одноволновой, так и в спектроскопической) с объемным, т.е. полным обзором исследуемой биологической ткани.

Серия экспериментов по математическому моделированию движения сканирующего пучка излучения в спектроскопической ОКТ эндоскопическими и интраваскулярными зондами, а также физических экспериментов с устройствами классической и спектроскопической ОКТ показала наличие существенного потенциала для повышения эффективности сбора интерференционного сигнала посредством использования малоуглового растрового сканирования с частичным перекрытием областей сканирования и последующими усреднениями полученного сигнала. Также имеется потребность в уменьшении числа движений зонда при проведении интраваскулярных операций, вызванная тем, что не смотря на высокую квалификацию медицинского персонала и использование передовых достижений медицинской техники интраваскулярные операции все же связаны с существенными рисками непреднамеренных повреждений кровеносных сосудов. Соответственно, меньше движений зонда – меньше риск вышеуказанных повреждений. Для удовлетворения обоих потребностей (необходимость организации высокоэффективного сбора и обработки данных, а также медицинские предостережения от излишних манипуляций) предложена особая конструкция сканирующей головки интраваскулярного зонда, сочетающая в себе полное круговое сканирование и малоугловое растровое сканирование для множества точек в составе линий сканирования, перпендикулярных траектории кругового движения.

Техническая реализация предложенного метода

Технической задачей разрабатываемой модели является повышение информативности результатов сканирования полостей и трактов исследуемого биообъекта, вызванное сочетанием режимов кругового и бокового (секторного) сканирования.

Поставленная техническая задача достигается тем, что в устройстве интраваскулярного зонда для спектроскопической ОКТ, так же, как и в устройстве, которое является ближайшим аналогом, содержатся корпус, турбина с лопастями, оптическое волокно, фокусирующий элемент, система полых трубок и гидравлический привод, причем корпус включает в себя цилиндр и крышку с множеством клапанов, цилиндр состоит из центральной камеры и дистального отверстия, клапаны соединены с впускными и выпускными трубками для гидравлической жидкости, а впускные и выпускные трубки соединены с емкостью для гидравлической жидкости, турбина расположена внутри корпуса, корпус и турбина содержат отверстия которые при соосном совмещении образуют центральное отверстие, система полых трубок проходит через турбину и представляет собой гидролинии заполненные гидравлической жидкостью, гидравлический привод функционально связан с корпусом и турбиной, причем корпус, турбина и система полых трубок образуют выполненный из биосовместимого прозрачного пластика вращающийся узел катетера, сконструированный таким образом, чтобы турбина вращалась вокруг центрального отверстия посредством гидравлической энергии и при любых пространственных позициях турбины отраженное излучение перенаправлялось внутрь катетера посредством расположенных в центральном отверстии оптически связанных фокусирующего элемента и оптического волокна.

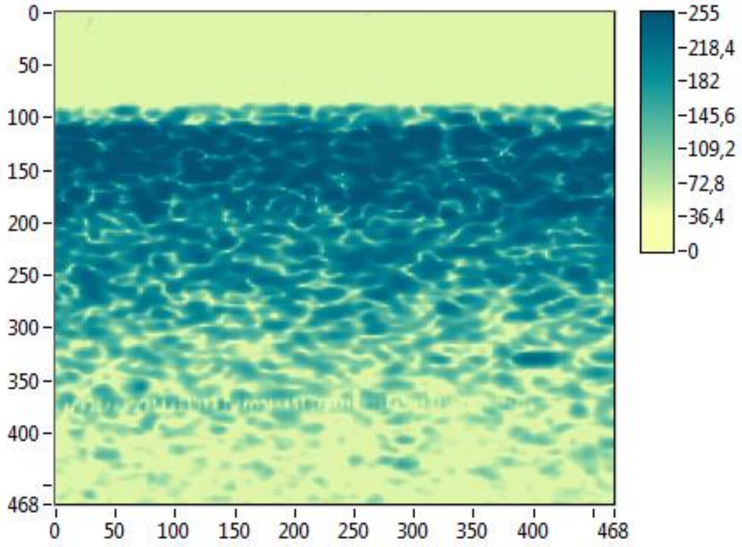
Новым в разработанном устройстве интраваскулярного зонда для спектроскопической ОКТ является то, что фокусирующим элементом является линза с градиентным показателем преломления, причем линза изготовлена таким образом, что показатель преломления возрастает в направлении от центра к краям, линза с градиентным показателем преломления жестко закреплена на фокусном расстоянии от дистального конца волоконного жгута плеча детектирования, волоконный жгут натянут вдоль центрального отверстия строго по оси вращения турбины, на дистальном конце турбины расположен двухкоординатный микроэлектромеханический гальвано-сканер с зеркалами продольного и поперечного сканирования, причем пучки излучения от источника посредством дистального конца оптического волокна доставляются к краю фокусирующей линзы, который характеризуется коэффициентом преломления достаточным, чтобы излучение от источника попало на исследуемый объект отразившись сначала от зеркала продольного сканирования, а затем от оптически связанного с ним зеркала поперечного сканирования, проксимальный конец оптического волокна, проксимальный конец волоконного жгута, проксимальные концы впускных и выпускных трубок, а также электрический провод управления работой двухкоординатного микроэлектромеханического гальвано-сканер с зеркалами продольного и поперечного сканирования оснащены коннекторами в составе единого разъема для интеграции эндоскопического зонда с основным модулем системы спектроскопической ОКТ-системы.

2. Оценка эффективности предложенных решений

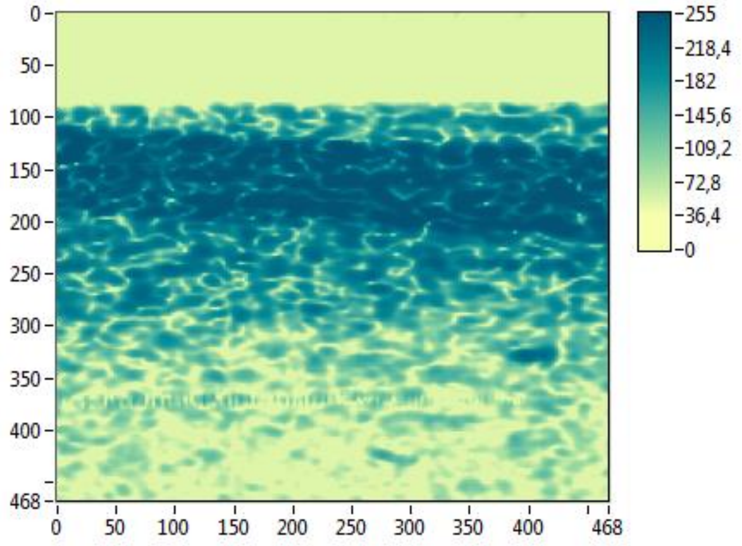
Серия экспериментов с конкретными реализациями предложенной полезной модели показала высокую эффективность сочетания полного кругового сканирования (т.е. на 360˚) вдоль исследуемых полостей или трактов с получением для каждой точки круговой траектории дополнительного сектора углом 120˚ поперек исследуемых полостей и трактов. Дальнейшее увеличение угла сканируемого сектора ограничивается потерями полезного сигнала, связанными с ростом расстояния от зонда до сканируемого объекта. Повышение информативности результатов сканирования, оцененное площадью сканируемой поверхности за единицу времени (без потерь в качестве получаемых структурных изображений) составило 36%, что свидетельствует о достижении поставленной технической задачи. Следует отметить, что полученный результат позволяет существенно сократить продолжительность диагностического обследования и снизить вероятность медицинских ошибок (меньше движений зонда – меньше рисков непреднамеренных повреждений мягких биологических тканей).

Пример практического использования предложенных метода и технических средств для комплексного сканирования в интраваскулярной ОКТ показан на рисунке 1. Исследуемый объект – стенки кровеносных сосудов говяжьей печени *ex vivo*. На рисунке 2 приведены примеры профилей полученных структурных изображений (рисунок 1). Из рисунков следует, что предложенный комплексный подход к сканированию в интраваскулярной ОКТ позволяет фиксировать даже такие малозаметные события – как распространение пульсовой волны в толще стенки кровеносного сосуда.

Предлагаемое устройство интраваскулярного зонда для спектроскопической ОКТ предназначено для совместного использования с устройствами спектроскопической ОКТ в качестве выносного и сменного плеча образца.



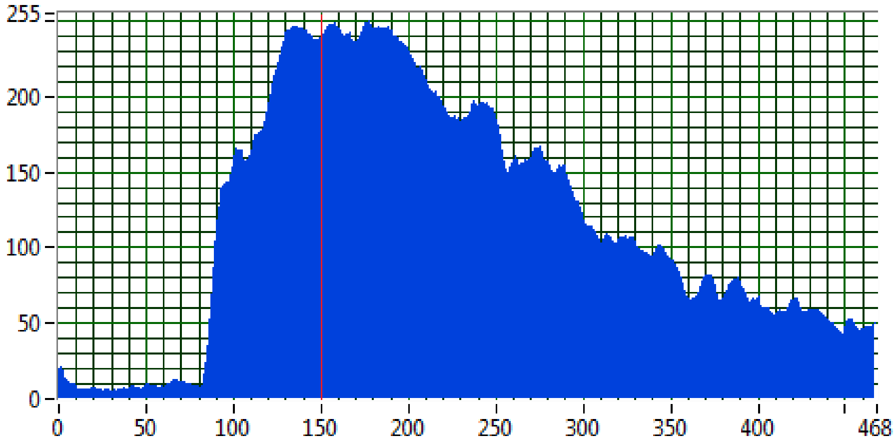
(а)



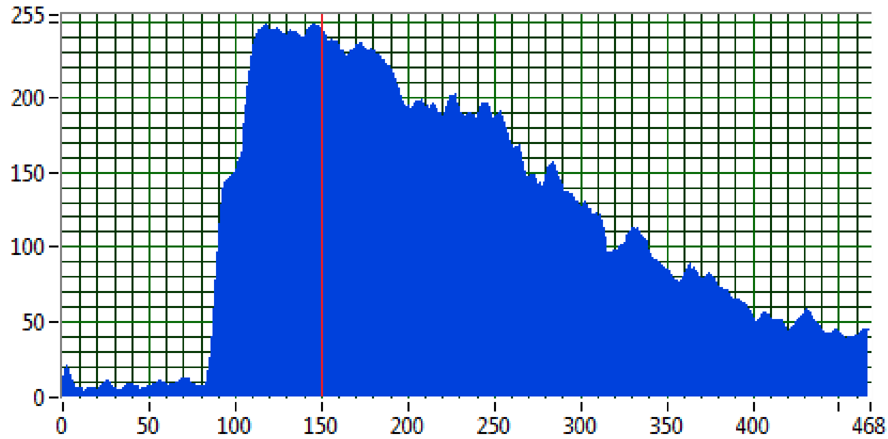
(б)

Рис. 1. Структурные изображения интраваскулярной ОКТ, полученные для стенок кровеносных сосудов говяжьей печени: (а) – имитация диастолы, (б) – имитации сдвиговой деформации в стенке сосуда

Основным направлением практического использования полезной модели является медицина и ветеринария, где устройство эндоскопического зонда для спектроскопической JRN может быть применено для проведения диагностических исследований полостей и трактов организма, в первую очередь отдельных участков сердечно-сосудистой системы, а также желудочно-кишечного тракта и дыхательных путей. Другие направления использования полезной модели связаны с физикой неразрушающего контроля, в частности, лабораторный контроль над качеством лекарственных препаратов в фармацевтической промышленности, лабораторный контроль над качеством жидкокристаллических дисплеев, интегральных схем, микроэлектромеханических систем в электронной и электротехнической промышленности, лабораторный контроль над качеством пластмасс и волокон в химической промышленности и т.п.



(а)



(б)

Рис. 2. Профили структурных изображений стенки фантома кровеносного сосуда с рисунка 2, полученные посредством вычисления среднего усеченного уровня интенсивности интерференционного сигнала

Заключение

Разработан метод комплексного сканирования для эндоскопической и интраваскулярной ОКТ (как классической, так и спектроскопической версии). Предложенный метод, отличается сочетанием режимов полного кругового сканирования и малоуглового растрового сканирования для множества точек в составе линий сканирования, перпендикулярных траектории кругового движения. При этом процесс сбора интерференционного сигнала организован с частичным перекрытием областей сканирования и последующими усреднениями полученного сигнала.

Предложенный метод объемного сканирования для эндоскопической и интраваскулярной ОКТ был практически реализован посредством особой конструкции сканирующей головки. Которая в свою очередь отличается использованием линзы с градиентным показателем преломления и двухкоординатного микроэлектромеханического гальвано-сканера с зеркалами продольного и поперечного сканирования, причем линза с градиентным показателем преломления жестко закреплена на фокусном расстоянии от дистального конца волоконного жгута плеча детектирования, а пучки излучения от источника посредством дистального конца оптического волокна доставляются к краю вышеуказанной линзы, который характеризуется коэффициентом преломления достаточным, чтобы излучение от источника попало на исследуемый объект.

Повышение информативности результатов сканирования, оцененное площадью сканируемой поверхности за единицу времени (без потерь в качестве получаемых структурных изображений) составило 36%, что свидетельствует о достижении цели исследования.

Предлагаемое техническое решение помимо медицинских приложений связанных с исследованием стенок кровеносных сосудов может быть использовано, также в физике неразрушающего контроля для исследования или анализа материалов с помощью оптических средств.

Литература

1. Фролова, М. С. Оптимальный выбор изделия медицинской техники с использованием информационных систем в здравоохранении / М. С. Фролова, С. В. Фролов // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2013. – Т. 19(3). – С. 553 – 561.
2. Wang, R. K. Doppler Optical Micro-Angiography for Volumetric Imaging of Vascular Perfusion in vivo / R. K. Wang, L. An // Optics Express. – 2009. – Vol. 17. – Is. 11. – P. 8926 – 8940.
3. Зимняков, Д. А. Оптическая томография тканей / Д. А. Зимняков, В. В. Тучин // Квантовая электроника. – 2002. – № 10. – С. 849 – 867.
4. Frolov S. V. Biotechnical system for endovascular treatment of cerebral aneurysms using mathematical modeling of hemodynamics and endoscopic optical coherence tomography / S. V. Frolov, A. Yu. Potlov, S. V. Sindeev // WSEAS Transactions on Computer Research. – 2018. – Vol. 6(4). – P. 29–35.
5. Фролова, М. С. Требования, предъявляемые к медицинским изделиям в разных странах / М. С. Фролова, С. В. Фролов, И. А. Толстухин // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2014. – Т. 20, № 4. – С. 726 – 733.
6. Proskurin, S. G. Specific Features of Diffuse Photon Migration in Highly Scattering Media with Optical Properties of Biological Tissues / S. G. Proskurin, A. Yu. Potlov, S. V. Frolov // Quantum Electronics. – 2015. – V. 45, N 6. – P. 540 – 546.
7. Moffitt, T. Preparation and Characterization of Polyurethane Optical Phantoms / T. Moffitt, Y. C. Chen, S. A. Prahl // Journal of Biomedical Optics. – 2006. – Vol. 11. – Is. 4. – No. 041103.
8. Review of Tissue Simulating Phantoms with Controllable Optical, Mechanical and Structural Properties for use in Optical Coherence Tomography / G. Lamouche, B. F. Kennedy, K. M. Kennedy, C. E. Bisaillon, A. Curatolo, G. Campbell., V. Pazos, D. Sampson // Biomedical Optics Express. – 2012. – Vol. 3. – Is. 6. – P. 1381–1398.
9. Frolov, S. V. Selection of Flow-Diverter Stent Models Using Optical Coherence Tomography and Mathematical Modeling of Hemodynamics / S. V. Frolov, A. Y. Potlov, S. V. Sindeev // Biomedical Engineering. – 2018. – Vol. 51(6). – P. 381–384.

ОСОБЕННОСТИ ОБОБЩЕННОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ В СИСТЕМАХ СО СЛОЖНОЙ ТОПОЛОГИЕЙ АТТРАКТОРА[1*]

В.А. Ханадеев, О.И. Москаленко

*Саратовский национальный исследовательский госуниверситет им. Н.Г. Чернышевского,
Региональный научно-образовательный математический центр
«Математика технологий будущего»*

Рассмотрены особенности обобщенной синхронизации и перемежающегося поведения, имеющего место вблизи ее границы, в однонаправленно и взаимно связанных системах со сложной топологией аттрактора. Обнаружены новые типы поведения, не свойственные системам с достаточно простой топологией аттрактора. В качестве объектов исследования выбраны однонаправленно и взаимно связанные системы Чена.

Ключевые слова: обобщенная синхронизация, перемежающееся поведение, шум, сложная топология аттрактора

1. Введение

Исследование синхронизации является важным направлением радиофизики [1]. Режимы хаотической синхронизации присутствуют в системах различной природы: физических [2], биологических [3], химических [4]. Известно о существовании таких типов синхронизации как фазовая синхронизация [1], полная синхронизация [5], обобщённая синхронизация [6] и др. Особый интерес представляет собой обобщенная синхронизация, которая достаточно хорошо изучена для систем с относительно простой топологией аттрактора, но почти не изучена для систем со сложной (двулистной) структурой аттрактора, например, как у системы Лоренца. Для систем с таким строением аттрактора процесс наступления режима обобщенной синхронизации может отличатся от случая систем с простой топологией. Поэтому в рамках настоящей работы для таких систем будут рассмотрены особенности установления этого режима и характеристики перемежаемости, имеющей место вблизи его границы.

2. Исследуемая система

В качестве объектов исследования выбраны однонаправленно и взаимно связанные системы Чена [7], которые являются модифицированными системами Лоренца, способными демонстрировать гиперхаос и, следовательно, иметь два положительных показателя Ляпунова. Динамика систем Чена описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{gathered}\dot{x}_{1,2} = a\left(y_{1,2} - x_{1,2}\right) + e y_{1,2} z_{1,2}\\ \dot{y}_{1,2} = c x_{1,2} - d x_{1,2} z_{1,2} + y_{1,2} + u_{1,2}\\ \dot{z}_{1,2} = x_{1,2} y_{1,2} - b z_{1,2}\\ \dot{u}_{1,2} = -k_{1,2} y_{1,2} + \varepsilon_{1,2}(x_{2,1} - x_{1,2}) + D_{1,2}\zeta\end{gathered} \tag{1}$$

где $\mathbf{x}_{1,2} = (x_{1,2}, y_{1,2}, z_{1,2}, u_{1,2})$ – векторы состояний взаимодействующих ведущей и ведомой систем, соответственно, $a = 35$, $b = 4.9$, $c = 25$, $d = 5$, $e = 35$, $k_1 = 190$ и $k_2 = 110$ – управляющие параметры, $\varepsilon_{1,2}$ – параметры связи. В случае однонаправленной связи $\varepsilon_1 = 0$, $\varepsilon_2 = \varepsilon$, при взаимной связи $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$. Слагаемые $D_{1,2}\zeta$ соответствуют внешнему шумовому воздействию. Для диагностики режима обобщенной синхронизации в системе (1) будут использоваться методы расчета спектра показателей Ляпунова, ближайших соседей, фазовых трубок, а для однонаправленной связи – еще и метод вспомогательной системы.

[1*] Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых докторов наук (проект № МД-21.2020.2).

3. Результаты исследования

3.1 Метод фазовых трубок

Применим метод ближайших соседей для диагностики режима обобщенной синхронизации в системе (1) в случае взаимной связи. Расчет спектра показателей Ляпунова для этой системы показывает, что при $\varepsilon = 250$ синхронный режим уже установился, а следовательно, метод ближайших соседей должен также показывать наличие обобщенной синхронизации. В то же самое, время, как видно из рисунка 1, образы опорных точек и их ближайшие соседи распределены по всему фазовому портрету второй системы, а не сгруппированы, как должно быть при наличии обобщенной синхронизации. В связи с этим было предложено использовать метод фазовых трубок [8], суть которого заключается в рассмотрении трубок траекторий в фазовом пространстве взаимодействующих систем.

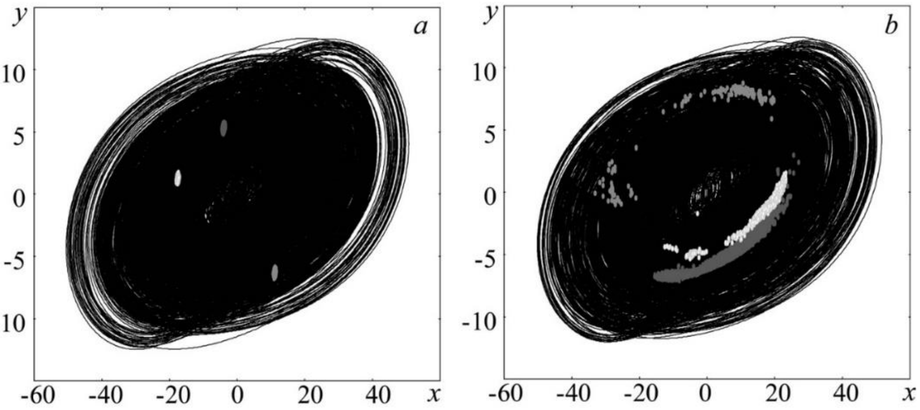


Рис. 1. Фазовые портреты первой (a) и второй (b) взаимодействующих систем (1) при значении параметра связи $\varepsilon = 250$. На фазовом портрете первой системы выбраны три случайные опорные точки и найдены их ближайшие соседи (показаны оттенками серого). Образы этих ближайших соседей в фазовом пространстве второй системы показаны теми же оттенками серого на рисунке 1b

На рисунке 2 приведены результаты применения метода фазовых трубок к исследуемой системе (1). Длина фазовой трубки выбрана равной $\tau = 0.03$. Видно, что даже при малой длине фазовой трубки образы ближайших соседей оказываются локализованными в ограниченных областях аттрактора. Полученные результаты свидетельствуют о применимости метода фазовых трубок для диагностики режима обобщенной синхронизации в системах со сложной топологией хаотических аттракторов.

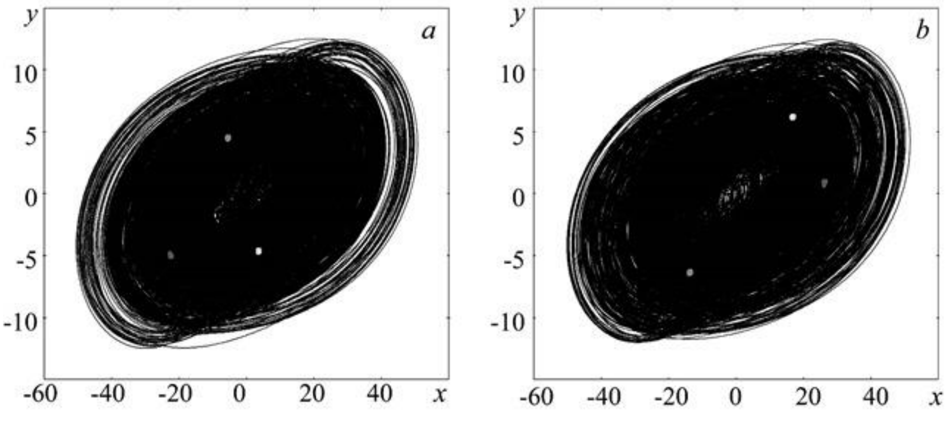


Рис. 2. Результаты применения метода фазовых трубок к системе (1). Фазовые портреты первой (a) и второй (b) взаимодействующих систем Чена получены при значении параметра связи $\varepsilon = 250$. На фазовом портрете первой системы выбраны три случайные опорные точки и найдены их ближайшие соседи, прошедшие через фазовую трубку длиной $\tau = 0.03$ (показаны оттенками серого). Образы этих «ближайших» соседей в фазовом пространстве второй системы показаны теми же оттенками серого на рисунке 2b

3.2 Перемежаемость на границе обобщенной синхронизации

Далее рассмотрим перемежающийся процесс, который предшествует наступлению обобщенной синхронизации. Перемежаемость представляет собой чередование двух состояний: хаотического (турбулентного) и синхронного (ламинарного) режима. Существуют различные типы перемежаемости, которые предшествуют наступлению различных типов синхронизации, каждый из которых характеризуется своими особенностями и статистическими характеристиками длительностей ламинарных фаз.

На рисунке 3a приведены численно полученные распределения длительностей ламинарных фаз для трёх различных значений параметра связи и их аналитические аппроксимации экспоненциальной закономерностью, а на рисунке 3b – зависимость средней длительности ламинарных фаз от параметра связи ε. Видно, что в рассмотренных случаях наблюдается хорошая аппроксимация данных численного моделирования экспоненциальными зависимостями, что характерно для перемежаемости перескоков.

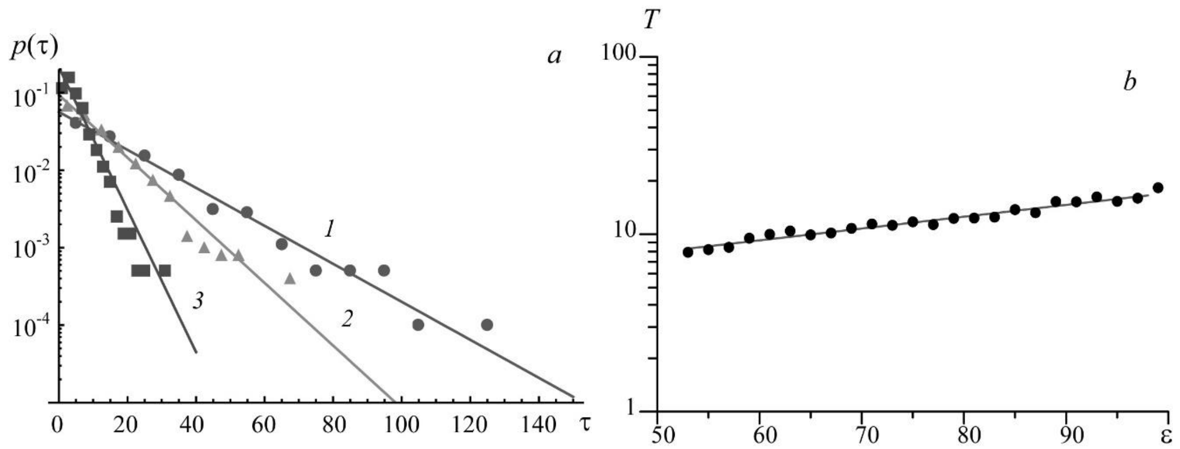


Рис. 3. Распределения длительностей ламинарных фаз (a) и зависимость средней длительности ламинарных фаз (b) от параметра связи ε, полученные численно для системы (1) при *1* – ε = 100, *2* – ε = 70, *3* – ε = 50, и их аппроксимации экспоненциальными закономерностями соответственно

3.3 Влияние шума на наступление режима обобщенной синхронизации

Также рассмотрим, как внешнее шумовое воздействие влияет на систему (1) в случае однонаправленной связи. Ранее уже проводились исследования влияния внешнего шумового воздействия на системы с простой топологией аттрактора, как, например, у систем Ресслера, и в рассмотренных случаях шум не оказывал значительного воздействия на наступление обобщенной синхронизации. Рассмотрим систему (1) и проверим, какое влияние на неё оказывает шум. На рисунке 4 приведены зависимости порога возникновения режима обобщенной хаотической синхронизации от интенсивности шума для трех различных значений управляющего параметра k_1 при фиксированных значениях остальных управляющих параметров. Легко увидеть, что при различных значениях управляющего параметра k_1, границы возникновения режима обобщенной синхронизации практически не зависят от интенсивности шума.

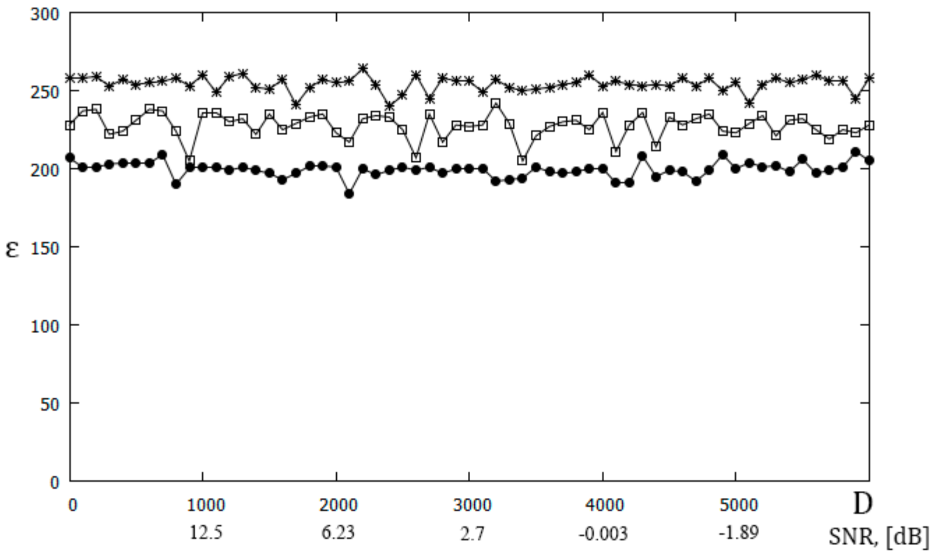


Рис. 4. Зависимости порога возникновения режима обобщенной синхронизации в двух однонаправленно связанных системах Чена от интенсивности шума (отношения сигнал/шум SNR) при управляющих параметрах: ● – k_1=110, k_2=190; □ – k_1=110, k_2=240; * – k_1=110, k_2=310

4. Заключение

Таким образом, в рамках настоящей работы проведено исследование особенностей обобщенной синхронизации в системах со сложной топологией аттрактора. Рассмотрен метод фазовых трубок, с помощью которого можно диагностировать режим обобщенной синхронизации в системах со сложной топологией аттрактора. Изучено перемежающееся поведение на границе наступления режима обобщенной синхронизации в системах Чена. Обнаружено, что статистические характеристики подчиняются экспоненциальному закону, что характерно для перемежаемости перескоков. Проанализирован вопрос о влиянии шума на установление обобщенной синхронизации в системе со сложной топологией аттрактора. Обнаружена устойчивость этого режима по отношению к шумам.

Литература

1. Pikovsky A., Rosenblum M.G., Kurths J. Synchronization: a universal concept in nonlinear sciences // Cambridge University Press, 432 p. (2001).
2. Dmitriev B.S., Hramov A.E., Koronovskii A.A. et al. First experimental observation of generalized synchronization phenomena in microwave oscillators // Phys. Rev. Lett. 102(7), 074101 (2009).
3. Wennekers T., Pasemann F. Generalized types of synchronization in networks of spiking neurons// Neurocomputing, 38-40, 1037-1042 (2001).
4. Parmananda P. Generalized synchronization of spatiotemporal chemical chaos // Physical Review E 56, 1595-1598 (1997).
5. Pecora L. M., Carroll T. L. Synchronization of chaotic systems // Chaos:An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science 25 (9), 97611 (2015).
6. Rulkov N.F., Sushchik M.M., Tsimring L.S. et al. Generalized synchronization of chaos in directionally coupled chaotic systems // Phys. Rev. E. 51(2), 980–994 (1995).
7. Chen Z., Yang Y., Qi G., Yuan Z. A novel hyperchaos system only with one equilibrium // Phys. Lett. Sect. A Gen. At. Solid State Phys 360(6), 696–701 (2007).
8. Koronovskii A.A., Moskalenko O.I., Hramov A.E. // Phys. Rev. E 84(3), 037201 (2011).

НАХОЖДЕНИЕ ХРОМАТИЧЕСКОГО ЧИСЛА ГРАФА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ

С.Д. Холькин, А.В. Филимонов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Эта статья представляет способ определения хроматического числа графа с помощью методов глубокого обучения. В качестве архитектуры используются графовые нейронные сети (GNN), со специальным способом задания числа цветов для раскраски, чтобы выучить эмбеддинги вершин графа и провести бинарную классификацию, может данный граф быть раскрашен соответствующим количеством цветов или нет. Обучаясь на синтетическом датасете метод показал себя, как на тестовых данных, так и на ограниченном наборе ”природных” данных, гораздо лучше жадного алгоритма и сравнимо с эвристикой tabucol, имея при этом меньшие относительно tabucol временные затраты.

Ключевые слова: нейронная сеть, глубокое обучение, хроматическое число графа.

1. Введение

В последнее время стал активно развиваться класс алгоритмов приблизительного решения задач, основанных на машинном обучении (Machine Learning), а также подкласс самых тяжеловесных из них - алгоритмов на основе глубокого обучения (Deep Learning). Они уже показали множество удивительных результатов, например глубокая нейронная сеть AlphaGo[1] смогла победить профессионала мирового уровня в игру Го, также глубокие нейронные сети показали большие успехи в компьютерном зрении и обработке естественного языка. Есть также попытки применения глубоких нейронных сетей для комбинаторной оптимизации, к примеру для решения задачи о выполнении булевых формул (SAT) [2] или для решения задачи о коммивояжере (TSP)[3]. Также недавно начали очень активно развиваться графовые нейронные сети GNN[5], которые работают со структурой графа, что открывает новые возможности в комбинаторной оптимизации с помощью глубокого обучения.

В этой работе будет рассмотрена задача о нахождении хроматического числа графа. У этой задачи есть применения, например, при построении расписания в аэропортах [7], при работе планировщика задач [8] или при распределении регистров[9]. Однако сложность этой задачи имеет экспоненциальную асимптотику, а значит не существует алгоритмов способных найти точное решение задачи за адекватное время, поэтому эта задача преимущественно решается приблизительно, используя различные эвристики.

Архитектура представленной нейронной сети основывается на [6], проверяется на большем количестве синтетически сгенерированных примеров раскраски, и ограниченном количестве примеров раскраски из Color02/03/04 датасета[11], и наконец сравнивается с другими эвристиками, которые также решают задачу GCP.

2. Формальная постановка задачи

Найти такое минимальное $C \mid C \in N \vee C > 0$ для графа $G(V, E)$, что $\exists f\ v \to c, v \in V$,
$c \in \{1, 2..C\}, \neg\exists\ i, j\ v_i, v_j \to c, e_{ij} \in E$

В терминологи машинного обучения: дан граф G(V, E) и перебирая C от 2 до |V| нужно выбрать минимальное количество цветов C, которое будет классифицировано моделью, как возможное для C-раскраски G(V, E). При этом сама раскраска, то есть отображение V -> {1, 2..C} не находится.

3. Модель

3.1. GNN

GNN - это архитектура нейронной сети, которая работает над графом G(V, E), где у каждой вершины есть векторное представление $Em(V_i) \in R^d | \forall V_i \in V$, которое итерационно обновляется, используя информацию о структуре графа. Обновление зависит от векторного представления самой вершины, а также от векторных представлений всех ее соседей.

Функция обновления:

$$Em(V_i)^{t+1} = Update(Em(V_i)^t, M_{vv} \times Em(\mathrm{V})^t) | \forall V_i \in V,$$

где $Em(V_i)^t \in R^d$ – векторное представление вершины V_i в момент $\boldsymbol{t}$, $Em(V)^t \in R^{|V|xd}$ – векторные представления всех вершин в момент t, M_{vv} -матрица смежностей графа $G(V, E)$.

В этой работе будет использоваться несколько модифицированная версия GNN. Чтобы имитировать зависимость векторных представлений вершин от цветов доступных для раскраски графа, вводятся векторные представления цветов раскраски $Em(C_j) \in R^{\mathrm{d}} | C_j \in \{1, 2..C\}$ ($Em(C) \in R^{C\,x\,d}$ – для всех цветов вместе) подобно векторным представлениям $Em(V_i) \in R^d$ для вершин.

Тогда новая функция обновления:

$$Em(V_i)^{t+1} = UpdateV(Em(V_i)^t, M_{vv} \times Em(V)^t, M_{vc}^T \times C_{msg}(Em(C)^t)) | \forall V_i \in V$$

$$Em(C_j)^{t+1} = UpdateC(Em(C_j)^t, M_{vc}^T \times V_{msg}(Em(V)^t)) | C_j \in \{1, 2..C\}$$

где $C_{msg}: R^d \to R^d$ – функция, транслирующая векторное представление цветов в сообщение, готовое к обработке UpdateV функцией, $V_{msg}: R^d \to R^d$ – функция, транслирующая векторное представление вершин в сообщение, готовое к обработке UpdateC функцией. C_{msg} и V_{msg} представлены 3х-слойными перцептронами.

$$UpdateV: R^{3d} \to R^d$$

$$UpdateC: R^{2d} \to R^d$$

Функции UpdateV и UpdateC являются рекуррентными нейронными сетями (RNN), что и позволяет алгоритму быть итерационным, в нашем же конкретном случае это были сети, состоящие каждая из двух LSTM блоков [10]. Таким образом сеть выучивает структурные паттерны в предоставленных графах, и далее после обучения в соответствии с этими паттернами выстраивает векторные представления вершин, на основе которых далее происходит классификация графа, которая происходит с помощью отдельной функции $V_{vote}: R^d \to R$, так мы получаем “голоса” всех вершин, а далее ищем среднее $mean(V_{vote})$ и превращаем его в вероятность $sigmoid(mean(V_{vote}))$, которая является вероятностью того, можно ли раскрасить граф G(V, E) с помощью C цветов. Полный алгоритм на псевдо языке представлен на рис. 1, а блочная визуализация нейросети показана на рис. 2.

```
float GNN(G(V, E), C)
{
    M_vv[i,j] ← 1 if (∃e ∈ E|e = (V_i,V_j))|∀V_i ∈ V,V_j ∈ V else 0
    M_vc[i,j] ← 1 ∀V_i ∈ V 1 if C_j ∈ {1..C}
    Em(V_i)~N(0,1) | ∀V_i ∈ V
    Em(C_i)~U(0,1) if C_i ∈ {1..C}
    for t = 1 ... t_max do:
        Em(V_i)^(t+1) = Update(Em(V_i)^t, M_vv × Em(V_i)^t, M_vc^T × C_msg(Em(C)^t))| ∀V_i ∈ V
        Em(C_j)^(t+1) = Update(Em(C_j)^t, M_vc^T × V_msg(Em(V_i)^t))| C_j ∈ {1,..C}}
    V_logits = V_note(Em(V)^(t_max))
    prediction = sigmoid(mean(V_logits))
    return prediction
}
```

Рис. 1. Алгоритм GNN

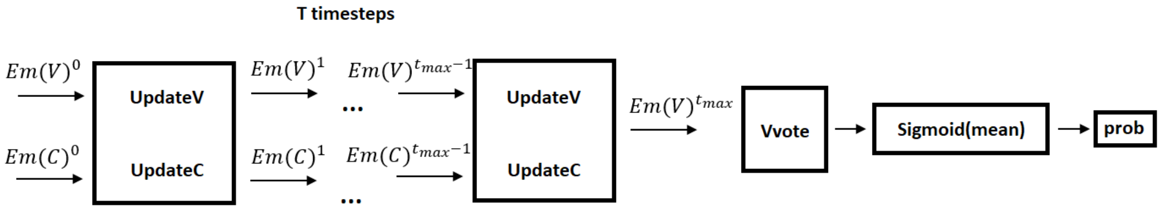


Рис. 2. Схема GNN

3.2. Датасет

Для тренировки глубокой нейросети необходим датасет, то есть набор данных, на которых будет осуществляться обучение и тестирование GNN. Пригодных датасетов, состоящих из естественных графов, полученных из какой-либо предметной области, не было замечено, поэтому придется генерировать датасет. Однако просто так сгенерировать графы (например с помощью модели Эрдеша-Реньи) и раскрасить, не получится, так как эти случаи будут достаточно легкими для раскраски. Увеличить сложность раскраски можно с помощью особой модели генерации, основанной на фазовых сдвигах[6]. Берется тот или иной сгенерированный граф, раскрашивается с помощью прямого алгоритма, а далее находится и добавляется такое ребро, что меняет раскраску, то есть увеличивает хроматическое число графа. Таким образом получается пара графов, которая описывает сложный случай раскраски.

3.3. Конечная конфигурация модели

Для обучения, описанной выше, модели было сгенерировано 15710 тренировочных и 1024 тестовых пар графов, где $40 \le |V| \le 60$ и $3 \le \chi \le 8$.

Модель обучалась с количеством внутренних итераций $timesteps = 32$ и размерностью векторного представления в $d = 64$, в течении около 1000 эпох с батчем $batchsize = 16$, имея по 128 итераций в одной эпохе, с экспоненциальным learning rate расписанием от $lr = 1e - 04$ до $lr = 1e - 06$. Метрика успешности обучения модели (точности):

$$acc = \frac{\sum_i^n f(ground_t ruth_i, pred_i)}{n}, \text{где} ground_t ruth_i = \chi\big(G(V,E)^i\big),$$

где $f(x, y) \ = \{1, x = y, \text{иначе } 0\}$, $pred_i$ – предсказанное нейросетью хроматическое число.

4. Результаты экспериментов

4.1. Эвристики для сравнения

Существует множество эвристик для решения GCP, но здесь будут рассматриваться две из них: жадный поиск и tabucol [4].

Жадный поиск “жадно” раскрашивает вершины графа в доступные цвета. Алгоритм очень простой, но не очень эффективный в смысле точности получаемого решения.

Tabucol[4] это эвристика локального поиска, основанная на поиске с запретами(табу-поиск).

4.2. Синтетический датасет

Процедура тренировки была остановлена, когда модель достигла $acc = 0.82$ точности на тренировочных данных и $acc = 0.75$ точности на тестовых данных.

Далее приведены результаты тестов на тестовых сгенерированных данных(см рис.3, рис.4, рис.5). По вертикали изображены хроматические числа предсказанные алгоритмом, а по горизонтали настоящие хроматические числа. На диагонали, подсвеченной зеленым, располагаются правильные ответы (предсказание алгоритма совпадает с тем, что есть на самом деле), соответственно все, что выше или ниже это ошибка. Как метрика для общей оценки качества алгоритма используется Mean Absolute Error (MAE) или Среднее Абсолютное Отклонение.

10	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0.05
7	0	0	0	0.35	0.75
6	0	0	0	0.55	0.2
5	0	0.16	0.66	0.1	0
4	0.02	0.83	0.19	0	0
3	0.97	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0
pred/color	3	4	5	6	7
MAE	0.2486				

Рис. 3. Результаты для GNN

10	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	
8	0	0	0	0	0.8
7	0	0	0	0.6	0.92
6	0	0	0.3	0.39	0
5	0	0.26	0.7	0	0
4	0.15	0.74	0	0	0
3	0.85	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0
pred/color	3	4	5	6	7
MAE	0.2764				

Рис. 4. Результаты для Tabucol

10	0	0	0	0.05	0.12
9	0	0	0	0.34	0.5
8	0	0	0.18	0.44	0.37
7	0	0.07	0.29	0.16	0.01
6	0	0.26	0.43	0.01	0
5	0.3	0.26	0.09	0	0
4	0.65	0.38	0	0	0
3	0.05	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0
pred/color	3	4	5	6	7
MAE	0.892				

Рис. 5. Результаты для Greedy

Как видно, жадный алгоритм очень сильно отстает по качеству от остальных алгоритмов. В общем tabucol и GNN имеют схожее качество, но стоит заметить, что GNN имеет чуть меньшую MAE чем tabucol, а также лучше работает на графах с низким хроматическим числом. Также поскольку tabucol и жадный алгоритм ищут полную раскраску и по ней определяют хроматическое число, то они не ошибаются в сторону уменьшения оценки хроматического числа, в отличие от GNN, тенденцию которой ошибаться в сторону уменьшения хорошо видно на графах с большими хроматическими числами.

4.3. COLOR02/03/04 датасет

graph	size	C_numb	GNN	GREEDY	TABUCOL	GNN TIME	GREEDY TIME	TABUCOL TIME
1-FullIns_3	30	4	**4**	8	**4**	0.32	0.0039	2.73
1-Insertions_4	67	5	4	**5**	**5**	0.33	0.0045	15.74
2-FullIns_3	52	5	4	9	**5**	0.32	0.0029	9.51
2-Insertions_3	37	4	3	**4**	**4**	0.3	0.0016	4.62
3-Insertions_3	56	4	3	**4**	**4**	0.3	0.0044	9.72
DSJC125.1	125	5	**5**	8	8	0.37	0.014	58.36
games120	120	9	6	10	**9**	0.37	0.013	108.76
mug88_1	88	4	3	**4**	**4**	0.3	0.0071	22.62
mug88_25	88	4	3	**4**	**4**	0.3	0.007	25.2
myciel3	11	4	**4**	**4**	**4**			0.56
myciel4	23	5	**4**	5	5			2.64
myciel5	47	6	5	**6**	**6**	0.3	0.002	11
2-FullIns_4	212	6	**6**	13	15	0.41		74.3
5-FullIns_3	154	8	6	16	**9**	0.36		47.3
mug100_1	100	4	3	**4**	**4**	0.31	0.0086	30.44
mug100_25	100	4	3	**4**	**4**			28.3
queen5_5	25	5	6	8	**5**		0.0017	2.99
queen6_6	36	7	**7**	10	8	0.36	0.0019	11.22
queen7_7	49	7	**8**	10	9	0.36	0.0032	25.04
queen8_8	64	9	**9**	13	12	0.35	0.0032	45.8
		MAE	0.81	2	0.9			
					AVG TIME	0.33	0.009	25.5

Рис. 6. Результаты на Color02/03/04 датасете

Чтобы посмотреть как натренированная на синтетических данных GNN ведет себя на графах сильно отличающихся от тех, что она видела при тренировке проводились замеры на выборочных графах из публично открытого датасета Color02/03/04[11](см рис. 6).

Как видно, GNN себя неплохо показывает себя графах с количеством вершин больше чем у тренировочных графов и выдает предсказания, близкие к реальности, однако еще чаще начинает ошибаться в сторону занижения оценки. По подсчитанной MAE также можно заметить, что жадный алгоритм сильно отстает и GNN более консистентно сравнивать с tabucol. Хотя у GNN MAE меньше, чем у tabucol, из-за нестабильности выборки нельзя сказать, что на этих примерах GNN работает лучше.

Можно сделать вывод, что GNN в определенных пределах не чувствительна к увеличению вершин в тестовых графах, пока хроматическое число остается близким к тренировочным примерам. Другими словами, GNN, даже будучи обучена на графах малой размерности, масштабируема относительно размера графа.

Также был проведен замер времени работы алгоритмов, и, как видно, GNN работает медленнее жадного алгоритма, однако гораздо быстрее tabucol. К примеру, проведение замеров на валидационном датасете у GNN занимало 8 минут, однако у tabucol - несколько часов.

К сожалению, бенчмаркинг на графах с большими хроматическим числами оказался очень нестабильным в виду того, что сами графы очень разные и GNN при тренировке не видела ничего подобного, поэтому результаты не были представлены и можно сказать, что на графах с хроматическими числами больше того, что она видела на тренировке, GNN работает плохо.

4.3. Ограничения связанные с данными

Как уже было подмечено массив данных для тренировки и тестирования модели был сгенерирован по специальной модели [6]. Однако хроматические числа для графов в этой модели определяются с помощью полного перебора, поэтому сгенерировать датасет из графов с количеством вершин более 60 за адекватное время не представляется возможным. И хотя было показано, что GNN может быть скалируема относительно количества вершин, то относительно хроматического числа того же сказать нельзя. Ограниченное количество вершин в генерируемых данных также ограничивает и возможность генерировать качественные примеры раскраски с большими хроматическими числами, что уже ставит под вопрос применение GNN для графов с большими хроматическими числами.

5. Заключение

Подход к раскраске графов через глубокое обучение показал себя вполне неплохо. GNN, тренируясь на синтетически сгенерированных данных показывает себя, как на синтетически сгенированном тренировочно-валидационном датасете, так и на реальных графах с увеличенным размером, значительно лучше чем жадный алгоритм и сравнимо с довольно эффективной эвристикой tabucol. GNN обладает большей вычислительной сложностью по отношению к жадному алгоритму, но меньшей по отношению к tabucol. В итоге GNN, натренированная на специально подготовленных для какой-либо задачи данных небольшого размера предположительно будет показывать себя лучше, чем жадный алгоритм, при этом затрачивая чуть больше времени и сравнимо по качеству с tabucol, при этом работая гораздо быстрее его. В качестве дальнейшего улучшения можно было бы попробовать другие, более мощные, архитектуры графовых нейронных сетей, которые предположительно поднимут качество модели, однако как уже отмечалось выше существуют ограничения по данным.

Литература

1. D. Silver, J. Schrittwieser, K. Simonyan, I. Antonoglou, A. Huang, A. Guez et al., “Mastering the game of go without human knowledge,” Nature, vol. 550, no. 7676, p. 354, 2017.
2. D. Selsam, M. Lamm, B. Bunz, P. Liang, L. de Moura, and D. Dill, “Learning a sat solver from single-bit supervision,” arXiv preprint arXiv:1802.03685, 2018.
3. Chaitanya K Joshi, Thomas Laurent, and Xavier Bresson. 2019. An efficient graph convolutional network technique for the travelling salesman problem. arXiv preprint arXiv:1906.01227 (2019).
4. A. Hertz and D. de Werra, “Using tabu search techniques for graph coloring,” Computing, vol. 39, no. 4, pp. 345–351, Dec. 1987. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1007/BF02239976
5. F. Scarselli, M. Gori, A. Tsoi, M. Hagenbuchner, and G. Monfardini, “The graph neural network model,” IEEE Tran. Neural Networks, vol. 20, no. 1, pp. 61–80, 2009.
6. Henrique Lemos, Marcelo Prates, Pedro Avelar, and Luis Lamb. Graph colouring meets deep learning: Effective graph neural network models for combinatorial problems. In IEEE International Conference on Tools with Artificial Intelligence (ICTAI), pp. 879–885. IEEE, 2019.
7. N. Barnier and P. Brisset, “Graph coloring for air traffic flow management,” Annals of Operations Research, vol. 130, no. 1, pp. 163–178, Aug 2004.
8. S. Thevenin, N. Zufferey, and J. Potvin, “Graph multi-coloring for a job scheduling application,” Discrete App. Math., vol. 234, pp. 218 – 235, 2018.
9. W. Chen, G. Lueh, P. Ashar, K. Chen, and B. Cheng, “Register allocation for intel processor graphics,” in CGO 2018, 2018, pp. 352–364. [Online]. Available: http://doi.acm.org/10.1145/3168806.
10. Sepp Hochreiter, Jurgen Schmidhuber, “LONG SHORT-TERM MEMORY”, Neural Computation 9(8):1735-1780, 1997 https://www.bioinf.jku.at/publications/older/2604.pdf.
11. https://mat.tepper.cmu.edu/COLOR02/.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРАТКОВРЕМЕННОЙ ПАМЯТИ В СПАЙКОВОЙ НЕЙРОН-АСТРОЦИТАРНОЙ СЕТИ[1*]

Ю.А. Цыбина[1], М.И. Кривоносов[1], А.А. Заикин[1,2], А.Н. Горбань[1,3], С.Ю. Гордлеева[1]

[1]ННГУ им. Н.И. Лобачевского,
[2]University College London, United Kingdom,
[3]University of Leicester, United Kingdom

В данной работе показано, что астроцитарная модуляция синаптической передачи может являться механизмом кратковременной памяти в модели взаимодействующих нейронной и астроцитарной сетей на временах повышения внутриклеточной концентрации Ca^{2+} в астроцитах. Астроцитарная регуляция синаптической передачи индуцирует возникновение пространственной синхронизации в нейронной сети и за счет этого улучшает качество хранения информации в нейронной сети.

Ключевые слова: астроцит, рабочая память, нейронная сеть, нейрон-астроцитарное взаимодействие

1. Введение

Кратковременная рабочая память – тип памяти, который позволяет удерживать и обрабатывать на коротком времени небольшое количество информации, поступающей, например, из сенсорных систем. Большинство существующих работ, посвященных изучению эффекта кратковременной памяти в нейронных сетях используют формальные нейроны. Такие модели демонстрируют отличную вычислительную производительность и большой объем памяти, но не являются биологически релевантными. Существуют также модели кратковременной памяти в импульсных нейронных сетях, в которых обучение осуществляется с помощью механизмов синаптической пластичности [1]. Эти модели способны качественно воспроизводить динамику нейронных сетей, наблюдаемую в экспериментах. В спайковых моделях нейронных сетей, реализующих кратковременную память, разные информационные паттерны обычно обрабатываются неперекрывающимися нейронными подсетями. Паттерны с большими перекрытиями в нейронных популяциях вызывают генерацию химерных состояний в сетях такого типа, что снижает эффективность работы сети и качество хранения информации. Одним из решений данной проблемы является включение внесинаптических механизмов регуляции передачи сигналов в нейронной сети за счет действия, например, астроцитов. Экспериментально было показано, что астроциты являются сигнальными клетками мозга и способны модулировать синаптическую передачу, вызывая возникновение пространственной синхронизации в нейронной сети на временах астроцитарной кальциевой динамики.

В данной работе мы показываем, что рабочая память может быть реализована в модели взаимодействующих нейронной и астроцитарной сетей. Нейронная сеть состоит из возбуждающих и тормозных синаптически-связанных спайковых нейронов. Обучение синаптических связей в нейронной сети реализуется с помощью правила Хебба [2]. Информационные сигналы в разработанной модели хранятся в пространственно-распределенном паттерне кальциевой активности в астроцитарной сети [3]. В работе изучается роль взаимодействия индуцированной астроцитами модуляции передачи сигналов в нейронной сети и синаптической пластичности Хебба в процессе организации рабочей памяти. Показано, что модель нейрон-астроцитарной сети способна хранить и извлекать несколько информационных сигналов, подаваемых на сильно перекрывающиеся нейронные ансамбли.

[1*] This work is supported by RFBR projects No. 20-32-70081, 18-29-10068.

2. Модель и архитектура нейрон-астроцитарной сети

Модель нейрон-астроцитарной сети состоит из 3 взаимодействующих между собой слоев: первый слой возбуждающих пирамидальных нейронов (размерность 79х79), второй слой тормозных интернейронов (размерность 40х40) и третий слой, состоящий из диффузионно-связанных астроцитов (размерность 26х26). Каждый астроцит сети взаимодействует с 16 пирамидальными нейронами (ансамбль 4х4) с перекрытием в один ряд.

Динамика мембранного потенциала каждого нейрона в сети описывается моделью Ижикевича [4]. Пирамидальные нейроны связаны друг с другом обучающимися локальными синаптическими связями. Сети пирамидальных нейронов и интернейронов двунаправленно взаимодействуют между собой, при этом обучение синаптических связей между нейронами сетей осуществляется согласно правилу Хебба.

Динамика внутриклеточной концентрации кальция в каждом астроците описывается моделью Уллаха [5]. Астроциты связаны друг с другом щелевыми контактами, проницаемыми для ионов Ca^{2+} и молекул вторичного мессенджера, инозитол-трифосфата (ИТФ).

Связь между нейронами и астроцитами организована следующим образом: в случае генерации потенциала действия на пресинаптическом пирамидальном нейроне концентрация нейротрансмиттера глутамата в соответствующем синапсе кратковременно увеличивается. При достаточном уровне синхронной активности нейронного ансамбля, взаимодействующего с данным астроцитом, в нем происходит ИТФ-зависимое повышение внутриклеточной концентрации кальция. Достижение концентрации кальция в астроците определенного порога индуцирует высвобождение глиапередатчика из астроцита в синапсы, что приводит к повышению эффективности синаптической передачи в ансамбле синапсов, взаимодействующих с данным астроцитом [6].

Были исследованы процессы взаимодействия двух механизмов формирования памяти: астроцитарной модуляции синаптической передачи и Хеббовской пластичности синаптических связей, с помощью реализации задачи фильтрации изображений в разработанной нейрон-астроцитарной сети. На рис. 1 представлен результат фильтрации 7 тестовых циклов, по 7 изображений в каждом цикле с добавлением 20% шума типа «соль и перец» (рис. 1а). В ответ на предъявление каждого тестового изображения обученная нейрон-астроцитарная сеть фильтровала изображение, устраняя шум (рис. 1б). Выявлено, что астроцитарная модуляция синаптической передачи улучшает качество хранения информации в нейронной сети.

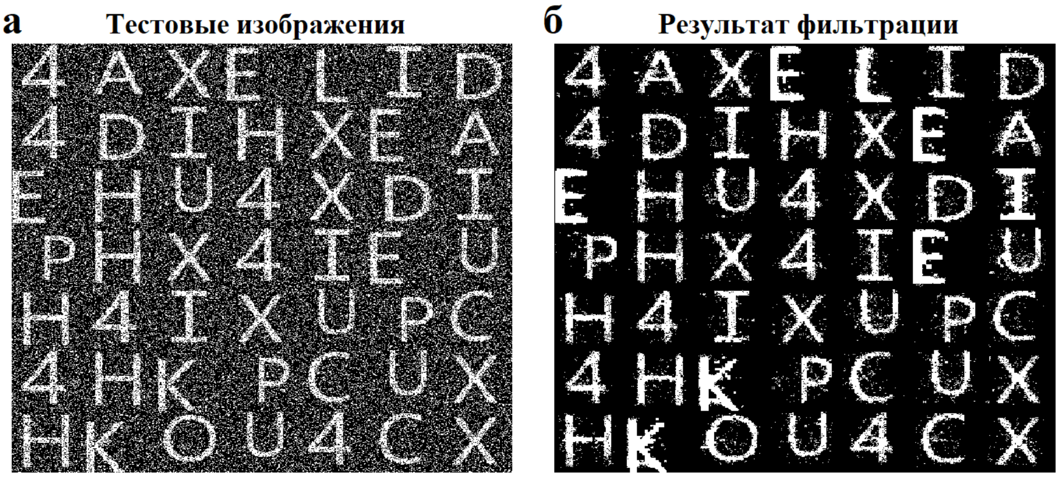


Рис. 1. Пример тестирования рабочей памяти в нейрон-астроцитарной сети

Литература

1. Lansner A., Associative memory models: from the cell-assembly theory to biophysically detailed cortex simulations, 32rd ed., vol. 3 Trends in neurosciences, 2009, pp.178-186.
2. Hebb D.O., The Organization of Behavior, John Wiley & Sons inc, 1949.

3. Gordleeva S.Y., Lebedev S.A., Rumyantseva M.A., and Kazantsev V.B., Astrocyte as a detector of synchronous events of a neural network, vol. 107(7) JETP Letters, 2018, pp. 440–445.
4. E. Izhikevich, Simple model of spiking neurons, vol. 14 IEEE transactions on neural networks, 2003, pp. 1569- 1572.
5. Ullah, G., Jung, P., Cornell-Bell, A., 2006. Anti-phase calcium oscillations in astrocytes via inositol (1, 4, 5)-trisphosphate regeneration. Cell Calcium 39, 197-208.
6. O. Kanakov, S. Gordleeva, A. Ermolaeva, S. Jalan, and A. Zaikin, Astrocyte-induced positive integrated information in neuron-astrocyte ensembles, vol. 99 PHYSICAL REVIEW E, 2019, pp. 012418.

МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫЙ АЛЬТЕРНАТИВНЫ ВЫБОР ПРИ НЕЧЕТКИХ ОЦЕНКАХ СИТУАЦИИ, ТРЕБУЮЩЕЙ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЯ

В.Г. Чернов

Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых

Рассматривается модель многокритериального альтернативного выбора с учетом неопределенности оценок ситуации, требующей принятия решений. Выбор наилучшей альтернативы основывается на оценках необходимого и возможного уровня соответствия альтернатив требованиям критериев.

Ключевые слова: нечеткое множество, функция принадлежности, уровень идентичности, мера различия.

1. Введение

Неопределенности, которые возможны при оценке ситуации, требующей принятия решений, могут привести к тому, что при реализации выбранной альтернативы, возможно, придется столкнуться либо с избыточностью требований и соответственно с излишними затратами при реализации соответствующего решения, либо наоборот, заниженные требования приведут к неудачному выбору. Поэтому полезно рассмотрение ситуации, когда допускается некоторая вариабельность оценок, т.е. допускается «люфт» в оценках критериального соответствия. В этом смысле представляется целесообразным решение задач многокритериального выбора альтернатив, основываясь на оценках необходимого и возможного уровня соответствия альтернатив требованиям критериев.

2. Постановка и решение задачи

Пусть имеется некоторая ситуация S, разрешение которой возможно выбором некоторого альтернативного решения из множества $P = \{p_i : i = \overline{1,I}\}$, множество критериев $C = \{c_j : j = \overline{1,J}\}$ и отображение $P \to C$, задаваемое матрицей $R = \|r_{ij}\|$. При этом допускается, что в процессе реализации того или иного решения, даже того, которое принято в качестве наилучшего, возможны отклонения от оценок соответствия критериям, принятых в начале анализа. Оценки возможных отклонений задаются вектором

$$\vec{E} = \{e_j : j = \overline{1,J}\}, e_j \in [0,1], \tag{1}$$

определяющим допустимую вариабельность значений соответствия критериям при реализации выбранной альтернативы. Этот вектор можно интерпретировать как оценку минимально возможного уровня критериального соответствия, до которого можно опуститься без потери конкурентной способности. Вектор желаемого соответствия $\vec{E}$ можно также считать аналогом вектора важности критериев, т. к. вполне очевидно, что критерию с наибольшим значением важности должно отвечать наибольшее значение соответствующей координаты вектора желаемого соответствия.

Необходимо из множества альтернативных решений P найти p_j, наилучшим образом соответствующее оценке (1). Обозначим:

$I(e_j, r_{ji})$ – уровень идентичности необходимого соответствия j-му критерию, полученный на основе матрицы R и оценки (1)

$$Max\{I(e_j, r_{ij})\} = 1,$$

$D(e_j, r_{ij})$ – меру различия оценок e_j и r_{ij},

$$D(e_j, r_{ij}) = e_j - r_{ij},$$

$$I(e_j, r_{ij}) = 1 - D(e_j, r_{ij}).$$

Нетрудно увидеть, что при $e_j = r_{ij}$ альтернатива p_j по j-му критерию эквивалентна необходимому уровню соответствия. Если $e_j - r_{ij} > 0$, то альтернатива p_j имеет недостаточный уровень соответствия j-му критерию. При $e_j - r_{ij} < 0$ имеет место превосходство альтернативы над уровнем требований. В этом случае при выборе альтернативы могут учитываться какие-то дополнительные факторы, например, добавочные финансовые затраты при реализации i-й альтернативы.

Введем меру возможного соответствия

$$Pos(e_j, r_{ij}) = \min[\frac{e_j}{r_{ij}}, 1]$$

как меру возможности соответствия i-й альтернативы j-му критерию, при которой может быть принято решение по этой альтернативе. По существу, это тот уровень, достижение которого позволяет считать принятое решение обоснованным.

Вместе с этой мерой целесообразно ввести меру минимально необходимого соответствия, которую определим как

$$Nes(e_j, r_{ij}) = \frac{Max[1 - Pos(e_j, r_{ij}), 1 - I(e_j, r_{ij})]}{w},$$

где w – целое число, $w \geq 1$.

Выбирая значения w, мы тем самым будем определять и границу минимально необходимого соответствия, при котором можно начинать проведение следующих этапов анализа. В завершении определим

$$\mu(e_j, r_{ij}) = \frac{Pos(e_j, r_{ij}) + I(e_j, r_{ij})}{2}$$

как субъективную уверенность в том, что при реализации i-й альтернативы соответствие j-му критерию будет не хуже, чем это определяется вектором $\vec{E}$.

Все оценки определялись для конкретного j-го критерия. Для получения альтернативной оценки по всем критериям необходимо провести усреднение по всему множеству критериев. Соответственно получим

$$\overline{D}(e, r_i) = \frac{1}{J}\sum_{j=1}^{J} D(e_j, r_{ij}), \qquad \overline{Pos}(e, r_i) = \frac{1}{J}\sum_{j=1}^{J} Pos(e_j, r_{ij}),$$

$$\overline{Nes}(e, r_i) = \frac{1}{J}\sum_{j=1}^{J} Nes(e_j, r_{ij}), \bar{\mu}(e, r_i) = \frac{1}{J}\sum_{j=1}^{J} \mu(e_j, r_{ij}),$$

$$\overline{I}(e, r_i) = 1 - \overline{D}(e, r_i).$$

Может сложиться ситуация, когда эксперту более предпочтительно использовать вместо числовых оценок вербальные. Тогда элементами матрицы R и вектора $\vec{E}$ будут словесные оценки типа «малая степень соответствия», «степень соответствия меньше (выше) средней», «достаточно большая» и т.п.

Решение задачи выбора альтернативной программы в этом случае может быть осуществлено следующим образом.

Пусть матрица R в качестве своих элементов содержит лингвистические оценки $R_l = \left\| l_{ij}^r \right\|$, где каждому элементу l_{ij}^r поставлено в соответствие нечеткое множество с функцией принадлежности $\mu_{l_{ij}^r}(x)$, где для определенности $x \in [0,1]$,x∈[0,1], $l_{ij}^r \in L_R$ – множество используемых лингвистических оценок. Вектор $\vec{E}$ тоже имеет лингвистическое представление $\vec{E}_L = \{l_j^e\}$ и существуют нечеткие множества с функцией принадлежности $\mu_{l_j^e}(y), y \in [0,1]$.

Каждую строку матрицы R можно рассматривать как вектор $\vec{l}_{ij}$ с координатами $l_{ij}^r, j = \overline{1, J}$. В силу нечеткости определения $\vec{l}_{ij}$ и $\vec{E}_L$ степень соответствия между векторами $\vec{l}_{ij}$ и $\vec{E}_L$ будет представляться нечетким множеством $S_j = \vec{l}_{ij} \cap \vec{E}_L$ или $\mu_{S_j} = \min\{\mu_{l_{ij}^r}(x), \mu_{l_j^e}(y)\}$.

Степень несоответствия будет представляться множеством $S_j = 1 - S_j$ или $\mu_{\neg S_j} = 1 - \mu_{S_j}$

$$S = \begin{cases} \min\{\mu_j \, \mu_j \neq 0 \\ 0, \mu_j = 0 \end{cases}.$$

Для сравнения этих множеств будем использовать точечные оценки [1,2], получаемые на основе α- разбиения соответствующих нечетких множеств

$U_{S_j} = \sum_{\alpha_i} x_i d_{\alpha_i}$, где $x_i \in S_j, U_{S_j} = \sum_{\alpha_i} x_i d_{\alpha_i}$, где $x_i \in S_j$,

$U_S = \sum_j U_{S_j}, U_S = \sum_j U_{S_j}$,

где x_i – аргумент соответствующей функции принадлежности: $d\alpha_i = \alpha_i - \alpha_{i-1}$, α– уровни.

Для каждого α_i рассматриваются только значения x_i, для которых $\mu_S(x_i) \geq \alpha_i$ или $\mu_S(x_i) \geq \alpha_i$. Очевидно, что если $U_S > U_S$, то преобладает сходство оценок, при $U_S < U_S$ – различие.

При нечетких мерах сходства и различия сохраняется неопределенность (неуверенность) в этих оценках, которая может быть охарактеризована нечетким множеством $N = S \cap S$ или $\mu_N = \mu_S \cap \mu_S$.

Количественной мерой этой неуверенности может быть точечная оценка $U_N = \sum_{\alpha_i} x_i d_{\alpha_i}, x_i \in N$. Существенным достоинством такого подхода является то, что мера неуверенности однозначно зависит от вида оценок, по которым есть различия между векторами $\vec{l}_{ij}$ и $\vec{E}$.

Так, значение U_N, рассчитанное при совпадении оценок типа «малая», «ниже среднего» и т.п., меньше U_N, рассчитанного при несовпадении оценок типа «выше среднего», «достаточно большое», «большое» и т.п. Очевидно, что наилучшая альтернатива будет иметь наибольший показатель сходства U_S, наименьший U_S и меньшее значение U_N.

Рассмотренный метод может использоваться, например, при решении задачи альтернативного выбора при ограничениях на финансовые ресурсы. Если выбранное решение при первоначальном уровне соответствия условиям критериев требует больше, чем можно финансовых ресурсов, то можно, задавая вектор критериального соответствия, определить по каким критериям и насколько возможно снижение требований без потери предпочтительности данного решения.

Литература

1. Yager R.R. Multiple-objective decision-making using a fuzzy sets // International Journal. Man-Machine Studies. 1977. Vol.9, No. 4. P.375-382.
2. Yager R.R. Multicriteria decisions with soft: an application of fuzzy set and possibility theory // Fuzzy Mathematics. 1982. Vol.2, No. 2. Pt.1. P.21-28; Vol.2, No 3. Pt.2, P.7-16.

О БЛИЗОСТИ ОПТИМАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЦЕЛОЧИСЛЕННОЙ ЗАДАЧИ О МНОГОМЕРНОМ РАНЦЕ И ЦЕЛОЧИСЛЕННОЙ ЗАДАЧИ О МНОГОМЕРНОМ РАНЦЕ С ОГРАНИЧЕНИЕМ НА МОЩНОСТЬ[1*]

***А.Ю. Чирков*[1]*, Д.В. Грибанов*[1,2]**

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Высшая школа экономики*

В работе исследуется близость оптимальных решений задач о многомерном ранце с ограничением и без ограничений на мощность.

Ключевые слова: многомерный ранец, приближенный алгоритм, точность приближения.

Пусть $A \in R_{\geq 0}^{m\times d}$и $b \in R_{\geq 0}^{m}, c \in R_{\geq 0}^{d}$. Обозначим через $L(A,b)$ множество $\{x: x \in Z_{\geq 0}^{d}, Ax \leq b\}$, а через $L_k(A,b)$- множество наборов из $L(A,b)$, имеющих не более k ненулевых компонент. Положим $\lambda(A,b,c) = max_{x\in L(A,b)} c^\top x$ и $\lambda_k(A,b,c) = max_{L_k(A,b)} c^\top x$. Величины $\lambda(A,b,c)$ и $\lambda_k(A,b,c)$называются оптимальными значениями задач соответственно о -мерном рюкзаке и о m-мерном рюкзаке с ограничением на мощность. Для оценки близости значений этих величин введем отношение $\alpha_k(A,b,c) = \lambda_k(A,b,c)/\lambda(A,b,c)$ (если $L(A,b)$, то будем считать, что $\alpha_k(A,b,c) = 1$). Положим $\alpha_{k\,m\,d} = inf\{\alpha(A,b,c): A \in R_{\geq 0}^{m\times d}, b \in R_{\geq 0}^{m}, c \in R_{\geq 0}^{d}\}$. Величину $\alpha_{k\,m\,d}$назовем гарантированной близостью.

Значение величин $\alpha_{k\,1\,d}$ исследовалось в [1-3]. В частности, получены формулы для вычисления $\alpha_{1\,1\,d}$ и показано равенство $\alpha_{(d-1)\,1\,d} = 1-(2^d-1)^{-1}$. При остальных значениях kимеются неравенства $\alpha_{k\,1\,d} \geq (2^d - 2^{d-k})/(2^d-1)$. Когда $m > d$, то нетрудно показать, что $\alpha_{k\,m\,d} = k/d$. Таким образом, интерес представляет поведение величины $\alpha_{k\,m\,d}$, при $m \leq d$.

В работе [4] исследован случай $k = 1$и получены формулы для вычисления величины $\alpha_{1\,m\,d}$. Более конкретно $\alpha_{1\,m\,d} = \frac{\alpha_{1\,1\,q}}{m + r\,(\frac{\alpha_{1\,1\,q}}{\alpha_{1\,1\,(q+1)}}-1)}$, где $d = mq + r$, $q = \left[\frac{d}{m}\right]$ и $r = d \ mod \ m$.

По-видимому, самый плохой случай при $k = d - 1$достигается, когда каждая переменная входит ровно в одно неравенство. Если данная данное утверждение верно, то $\alpha_{(d-1)\,m\,d} \leq \frac{m-1+\alpha_{k\,m\,[d/m]}}{m} = 1 - m^{-1}(2^{[d/m]}-1)^{-1}$.

Литература

1. Kohli R., Krishnamurti R. A total-value greedy heuristic for the integer knapsack problem // Operations Research Letters. 1992. V. 12, 65-71.
2. Kohli R., Krishnamurti R. Joint performance of greedy heuristics for the integer knapsack problem // Discrete Applied Mathematics. 1995. V. 56, 37-48.
3. Чирков А.Ю., Шевченко В.Н. О приближении оптимального решения целочисленной задачи о ранце оптимальными решениями целочисленной задачи о ранце с ограничениями на мощность // Дискретный анализ и исследование операций. 2006. Серия 2. Т13 №2, 56-73.
4. Chirkov A.Y., Gribanov D.V., Zolotykh N.Y. On the Proximity of the Optimal Values of the Multi-dimensional Knapsack Problem with and Without the Cardinality Constraint. In: Kochetov Y., Bykadorov I., Gruzdeva T. (eds) Mathematical Optimization Theory and Operations Re-

[1*] Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда (РНФ) № 21-11-00194.

search. MOTOR 2020. Communications in Computer and Information Science. 2020. V. 1275, 16-22, Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-58657-7_2.

СЕРВИС ПОТОКОВОЙ ОБРАБОТКИ СОБЫТИЙ И ИСПОЛНЕНИЯ АКТИВНЫХ ПРАВИЛ

С.В. Шибанов, Я.С. Шлепнёв

Пензенский государственный университет

Рассматривается принципы построения, архитектура и варианты использования сервиса для потоковой обработки событий и реагирования на них в виде исполнения активных правил. Приводится структура метаданных для поддержки работы серви-са, моделирования и исполнения активных правил в нотации ECA (Event-Condition-Action, Событие-Условие-Действие).

Ключевые слова: событийно-ориентированные системы, потоковая обработка событий, активные правила

1. Введение

Объемы собираемых и обрабатываемых данных неуклонно растут, что влечет за собой развитие инфраструктуры для управления данными. В своей повседневной деятельности компании используют системы транзакционной обработки, в которых предусмотрены отдельные уровни для обработки данных (приложения) и хранения данных (транзакционная база данных). Приложения связаны с внешними службами или взаимодействуют с пользователями и непрерывно обрабатывают входящие события (заказы, электронные письма, действия пользователя на веб-сайте). При обработке события, приложение считывает или обновляет его состояние, выполняя транзакции к системе управления базами данных (СУБД). Если со временем приложения развиваются или масштабируются, такой подход может вызвать серьезные проблемы.

Один из подходов к преодолению тесного связывания приложений основан на применении микросервисов – небольших, автономных и независимых приложений. Приложения обработки данных создаются из нескольких микросервисов, которые взаимодействуют друг с другом через стандартизованные интерфейсы (например, HTTP-соединения RESTful).

Практически все данные в настоящее время создаются как непрерывные потоки событий (взаимодействие с пользователями на веб-сайтах или в мобильных приложениях, размещение заказов или заявок, получение измерений от датчиков). Событийно-ориентированные приложения (event-driven application) – это потоковые приложения, которые принимают потоки событий и обрабатывают события с помощью бизнес-логики приложения. Событийно-ориентированные приложения являются развитием микросервисов, они обмениваются данными через очереди событий и хранят данные приложения в виде локального состояния вместо обращения к внешним хранилищам данных. Событийное приложение может инициировать отправку предупреждения или электронного письма ответственному лицу, передачу события другому приложению. Активное поведение предполагает оперативное реагирование на возникновение тех или иных событий в процессе их обработки.

2. Расширенная нотация ECA для моделирования активных правил

Для реализации активного поведения могут использоваться активные правила в нотации ECA (Event-Condition-Action, Событие-Условие-Действие).

ECA-правило описывает реакцию на появление события, выполняя последовательность кода действия, если заданное условие истинно. Правила ECA позволяют определять и управлять реактивным поведением в рамках единой базы правил вместо того, чтобы реализовывать его в разных программах. Подход, заключающийся в сборе реактивного поведения в базе правил, облегчает обслуживание и реконфигурацию, поскольку изменения выполняются в одном месте [1].

Активные правила в классической ECA-модели [2] состоят из трех компонентов – инициирующего события (event), условия срабатывания правила (condition) и выполняемого действия (action): $r = <e, c, a>$.

По мере развития технологий активных баз данных развивались модели активных правил. В [3] предлагаются расширенные ECA-правила, которые имеют дополнительный компонент для запуска альтернативных действий (alternative action), если условие принимает значение ЛОЖЬ:

$r = <e, c, \{a_{main}, a_{alt}\}>$, где a_{main} – основное действие, a_{alt} – альтернативное действие.

В классическом варианте события могут произойти или не произойти. Однако составные (сложные) события, в отличии от простых (примитивных), могут иметь несколько вариантов (режимов) завершения: «произошло», «не произошло», «произошло частично» [4]. Поэтому активные правила для сложных событий могут иметь несколько блоков, описывающих реакцию для каждого из режимов завершения:

$r = <e, b_1, \ldots, b_n>$, где b_i – исполняемый блок активного правила вида $<c, \{a_{main}, a_{alt}\}>$.

Модель, учитывающая состояние объекта, называется моделью SECA-правил или SECA-моделью (State–Event–Condition–Action) [5]. Добавление в модель ECA-правил понятия состояния сокращает количество порождаемых событий, уменьшает объем обрабатываемых правил и упрощает процесс разработки активной системы. Активные правила SECA-модели (SECA-правила), наряду с компонентами ECA–правил, включают условие проверки состояния объекта-источника событий.

Приложения, построенные как набор ECA- правил, были впервые использованы в качестве реактивного механизма в системах активных баз данных. В дальнейшем области применения активных правил расширились. Во многих исследованиях правила отделяются от платформы монолитной базы данных, что позволяет использовать парадигму, основанную на правилах, для более широкого набора приложений. Например, ECA- правила используются в следующих областях:

– определение поведения на локальных узлах семантической сети для поддержки реактивного поведения в электронной коммерции и электронном обучении;

– определение состояния объектов управления в технических системах для реализации реактивного управляющего воздействия и перенастройки объектов;

– в комплексной обработке событий (CEP) для запуска правила при обнаружении заранее заданного шаблона возникновения событий и многих других.

Несмотря на то, что технология активных правил появилась давно, исследования в этой области активно продолжаются. Одним из актуальных направлений исследований и разработок событийно-ориентированных систем является интеграция потоковой обработки событий и технологии активных правил.

3. Назначение сервиса потоковой обработки событий и исполнения активных правил

Сервис потоковой обработки событий и исполнения активных правил предназначен для реализации событийно-ориентированной обработки данных и событий, поступающих от наблюдаемых систем (баз данных, технических объектов), а также выявляемых в соответствии с заданными шаблонами, и реагирования на события в виде исполнения активных правил, воздействующих на управляемые системы (базы данных, технические объекты). Применительно к базам данных механизмы исполнения активных правил могут быть использованы для поддержания ограничений целостности, материализованных представлений, производных данных, координировании распределённых вычислений, поддержки транзакций, принятия решений по результатам изменений данных. Применительно к техническим объектам механизм исполнения активных правил могут быть использованы в приложениях управления и контроля техническими объектами, в медицинских приложениях для предупреждения врачей о состоянии пациента, в транспортных приложениях для прогноза пробок и в контроле воздушных сообщений для обнаружения потенциально опасных маршрутов и предупреждении диспетчера о сближении самолетов.

Основными функциями сервиса являются (рис. 1):

– конструирование и управление активными правилами – создание и редактирование правил и их компонент, проверка корректности правила, подключение и отключение правила;

анализ активных правил – выявление и устранение коллизий исполнения активных правил (статический анализ на этапе конструирования и динамический анализ на этапе исполнения);

– обработка событий – обработка потока событий от наблюдаемых систем, первичная обработка входных событий и формирование событий на основе агрегации входных данных, выявление сложных событий на основе заданных шаблонов, доставка событий к соответствующим компонентам сервиса для их обработки;

– исполнение активных правил – выбор экземпляра активного правила (группы правил) для исполнения, вычисление условия экземпляра активного правила, принятие решение о выполнении действия экземпляра активного правила, применение действия к исполняемому объекту;

– журнализация и анализ данных журналов событий – журнализация обрабатываемых событий, исполнения активных правил, обработки компонент активных правил, выявление закономерностей в журналах событий, моделирование новых событий и активных правил на основе выявленных закономерностей;

– аудит – аудит обрабатываемых событий и активных правил в режимах онлайн (на основе актуальной информации) и офлайн (на основе данных журналов), выявление «проблемных» событий;

– настройка и масштабирования сервиса – настройка параметров функционирования отдельных компонент с учетом результатов аудита, масштабирование отдельных компонент (изменение параметров и распределение очередей и потоков обработки) и сервиса в целом (подключение/отключение компонентов), синхронизация глобальных и локальных метаданных, описывающих конфигурацию системы и отдельных компонент.

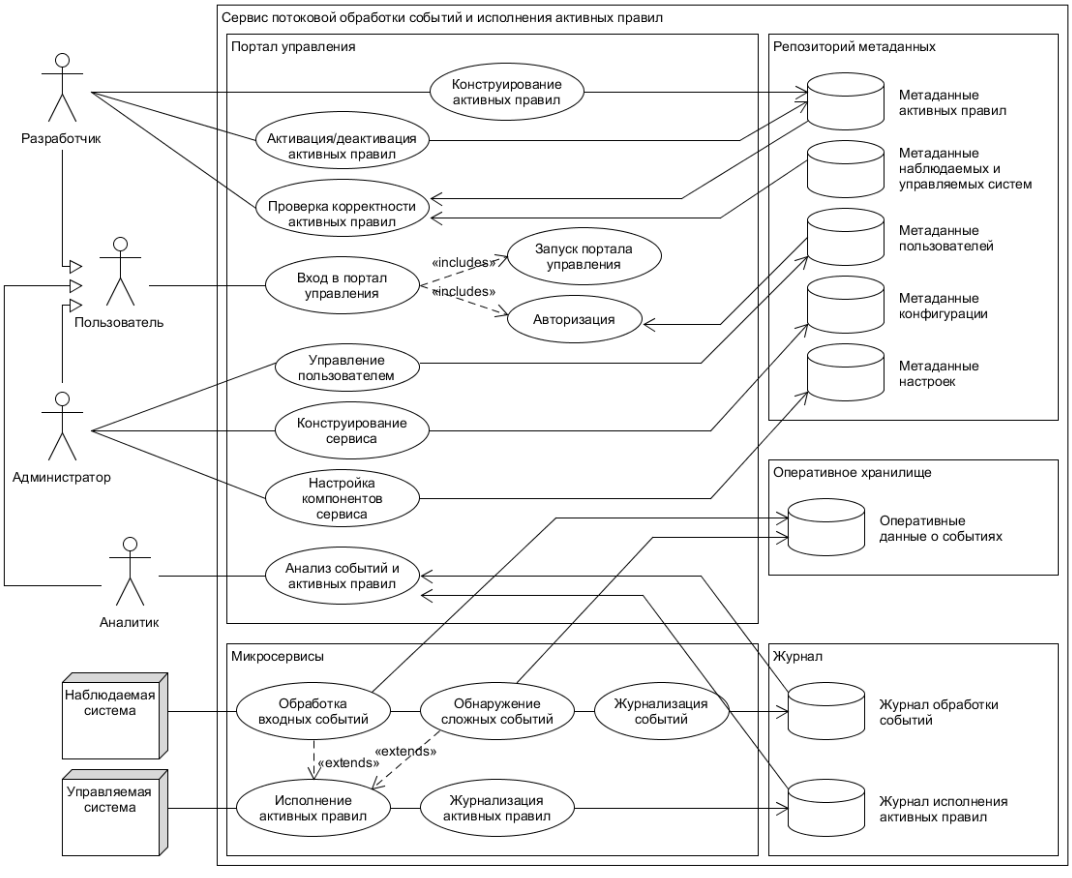


Рис. 1. Варианты использования сервиса потоковой обработки событий и исполнения активных правил

В процессе развития сервиса его функции могут быть дополнены и скорректированы.

4. Архитектура сервиса потоковой обработки событий и исполнения активных правил

Архитектура сервиса потоковой обработки событий и исполнения активных правил построена на принципах интеграции микросервисного и событийно-ориентированных подходов. Для доставки событий, поступающих от наблюдаемых систем, используется событийно-ориентированный подход на основе механизма очередей и платформы потоковой обработки данных Kafka с применением фреймворка Kafka Stream. Для обращения к компонентам сервиса в процессе их настройки, запуск и останова, синхронизации метаданных используется REST.

Архитектура сервиса потоковой обработки событий и исполнения активных правил представлена на рисунке 2.

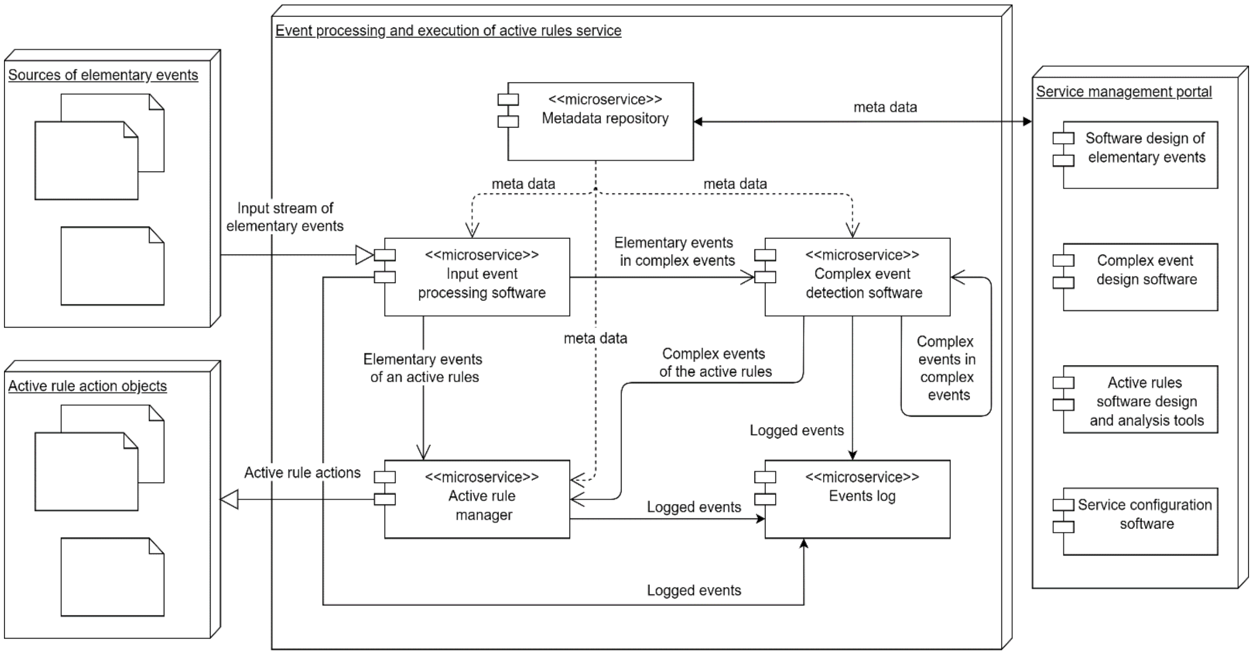


Рис. 2. Архитектура сервиса потоковой обработки событий и исполнения активных правил

Для хранения метаданных в процессе функционирования сервиса потоковой обработки событий и исполнения активных правил спроектирован централизованный репоиторий метаданных (рис. 3). Набор метаданных расширен и включает не только спецификации событий и активных правил, но и метаданных о наблюдаемых системах и системах управления, а также их объектах, правила обработки событий и правила формирования управляющих воздействий, промежуточные результаты статистического анализа правил и многое другое.

Для повышения эффективности обработки событий, исполнения активных правил и функционирования сервиса в целом, каждый из компонент сервиса имеет локальный репозиторий метаданных в виде in-memory хранилища под управлением Redis. Синхронизация централизованного и локального репозиториев метаданных осуществляется по специальному сценарию, призванному снизить время ожидания при запросе к метаданных без ущерба актуальности метаданных.

В виде in-memory хранилища реализован и динамический кэш для работы с динамическими структурами данных, в том числе, с графовыми, автоматными и сетевыми моделями при выявлении сложных событий.

Репозиторий метаданных реализован в виде реляционной базы данных под управлением СУБД PostgreSQL.

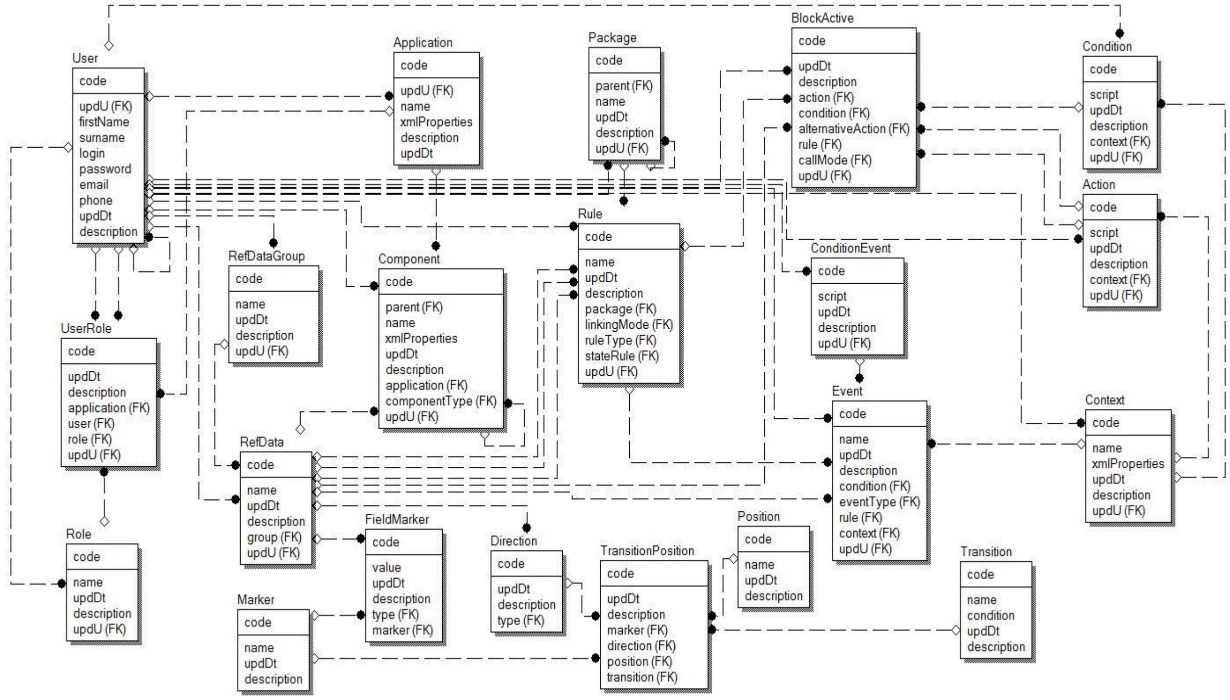


Рис. 3. Логическая схема реляционной базы данных централизованного репозитория метаданных

Архитектура многопользовательского приложения портала управления основана на использовании REST-API (Representational State Transfer) и включает в себя две части – клиентскую и серверную [6]. Данная архитектура лучше всего подходит для многопользовательской системы, в которой имеется единая база данных и возможность работы с ней для нескольких удалённых пользователей.

Литература

1. M. Stonebraker. The integration of rule systems and database systems. IEEE Trans. on Know ledge and Data Engineering, 4(5):415{423, October 1992.
2. Paton N.W. Active database systems / N.W.Paton, O.Diaz // ACM Computing Surveys (CSUR). - 1999 - №31.1 - p63-103.
3. Adaikkalavan R. Active Authorization Rules for Enforcing Role-Based Access Control and its Extensions / Adaikkalavan R., Chakravarthy S.// in Proceedings, IEEE International Conference on Data Engineering (International Workshop on Privacy Data Management), Tokyo, Japan, Apr. 2005, p. 1197.
4. Adaikkalavan R. When to Trigger Active Rules? / Adaikkalavan R., Chakravarthy S.// in 15th International Conference on Management of Data COMAD 2009, Mysore, India, December 9–12, 2009.
5. Шибанов С.В., Скоробогатько, Э.В. Лысенко. Интегрированная модель активных правил // Математическое и программное обеспечение систем в промышленной и социальной сферах: междунар. сб. науч. трудов - Магнитогорск: Изд-во Магнитогорск. гос. техн. ун-та им. Г.И. Носова, 2011 - Ч1. - с.41-46.
6. Шибанов С.В., Курбатова М. Н., Шлепнёв Я.С. REST-сервер для реализации портала управления сервисом конструирования и исполнения активных правил // В сборнике: Информационные технологии в науке и образовании. Проблемы и перспективы Сборник статей по материалам VIII Всероссийской межвузовской научно-практической конференции. Под редакцией Л.Р. Фионовой. – Пенза: Изд-во ПГУ, 2021. - С. 183-185.

НЕЙРО-НЕЧЁТКОЕ УПРАВЛЕНИЕ МОБИЛЬНЫМ РОБОТОМ В НЕИЗВЕСТНОМ ОКРУЖЕНИИ

С.М. Шульпин

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В работе рассматривается задача управления мобильным агентом в динамическом неизвестном окружении при помощи нейро-нечеткого регулятора. Для настройки параметров регулятора предлагается использовать модифицированный генетический алгоритм. Эффективность предложенного подхода подтверждается численными и физическими экспериментами.

Ключевые слова: планирование путей, генетический алгоритм, нейронная сеть, нечёткая логика.

1. Введение

Решение задач, связанных с управлением мобильными агентами, функционирующими в неизвестном окружении, все чаще основывается на применении технологий искусственного интеллекта, таких как нечеткая логика, нейронные сети и генетические алгоритмы. Эффективность такого управления зависит от выбора базы правил и определения функций принадлежности входных и выходных переменных. В [1,2] было предложено применять генетический алгоритм для адаптации функций принадлежности. В настоящей работе предлагается модификация генетического алгоритма, позволяющая настраивать как параметры функций принадлежности лингвистических переменных, так и их тип.

2. Постановка задачи

В данной работе используется классическая модель мобильного агента, представляющего собой платформу с двумя ведущими колесами, вращение которых обеспечивается двумя электродвигателями постоянного тока. Математическая модель такого агента может быть записана следующим образом:

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k - \tau \dfrac{R}{2}(\omega_{r,k} + \omega_{l,k}) \sin \varphi_k, \\ y_{k+1} = y_k + \tau \dfrac{R}{2}(\omega_{r,k} + \omega_{l,k}) \cos \varphi_k, \\ \varphi_{k+1} = \varphi_k + \tau \operatorname{arctg} \dfrac{R(\omega_{r,k} - \omega_{l,k})}{2l}, \end{cases}$$

здесь x и y – координаты агента, φ – его ориентация в пространстве, τ – интервал дискретизации, R – радиус колеса, l – половина длины стержня, соединяющего колёса, ω_r и ω_l – угловые скорости вращения правого и левого колёс.

Используемая модель оборудована пятью датчиками расстояния, равномерно распределенными в передней части платформы, так что третий датчик направлен вперед. Данные, поступающие с датчиков расстояния, являются основой для планирования движения в условиях динамического окружения.

Обозначим через d_k значение дистанции, возвращаемое k-ым датчиком робота, $k = \overline{1,5}$. Требуется синтезировать нейро-нечеткий регулятор вида

$$\begin{pmatrix} \omega_l \\ \omega_r \end{pmatrix} = \Theta(x, y, \varphi; d_1, d_2, d_3, d_4, d_5),$$

обеспечивающий движение агента в динамической среде с минимальным числом столкновений.

2. Регулятор на основе нечеткой логики

Работа регулятора на основе нечёткой логики состоит из трёх этапов: фаззификации, нечёткого вывода и дефаззификации.

На этапе фаззификации происходит активация функций принадлежности всех входных числовых переменных, которые соответствуют лингвистическим переменным. В качестве входных лингвистических переменных в данной работе используются значения дистанции d_k, которые принимают нечеткие значения «близко» (Б) и «далеко» (Д).

На этапе логического вывода происходит переход от нечётких условий к нечётким заключениям о требуемом выводе системы, на основе данных, полученных на этапе фаззификации, и заданной базы продукционных правил. Правила, используемые в работе, представлены в Таблице 1.

Таблица 1. База продукционных правил

Входные переменные					Выходные переменные	
d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	ω_l	ω_r
Б					УП	УО
	Б				УП	УО
		Б	Д		УП	УО
		очень Б	Д		НП	НО
	Д	Д	Д		очень ВП	очень ВП
	Б	Б	Б		ВП	НО
	Д	очень Б			НО	НП
	Д	Б			УО	УП
			Б		УО	УП
				Б	УО	УП

Процедура дефаззификации заключается в приведении нечеткого множества выходных переменных к числовым значениям. В качестве выходных лингвистических переменных в данной работе используются значения угловых скоростей левого и правого колёс ω_r и ω_l. Выходные переменные принимают нечёткие значения «высокая отрицательная» (ВО), «умеренная отрицательная» (УО), «низкая отрицательная» (НО), «низкая положительная» (НП), «умеренная положительная» (УП) и «высокая положительная» (ВП).

Алгоритм вывода Мамдани, используемый в работе, описывает последовательное применение представленных процедур.

3. Адаптация параметров нейро-нечёткого регулятора

В данной работе при помощи генетического алгоритма предлагается настраивать параметры функций принадлежности, при этом предлагается модификация общепринятого подхода. Для описания параметров регулятора введём понятие «нечёткий ген». Каждый «нечёткий ген» будет кодировать функцию принадлежности $\mu_{type}(x, \lambda)$, а именно её форму и набор параметров: $G_{T_k} = \langle type_k, \lambda_{k1} \dots \lambda_{kn} \rangle$. «Нечёткая хромосома» представляет собой список «нечётких генов»: $Y = \{G_{T_k}, k = \overline{1, M}\}$.

Использование «нечёткой хромосомы» позволяет более тонко настроить параметры и, таким образом, улучшить сходимость генетического алгоритма. Для этого были разработаны два вида оператора мутации: мутация типа функции принадлежности и мутация её параметров. Мутация типа функции принадлежности нечёткого терма позволяет менять вид функций внутри одного класса эквивалентности.

Для каждого типа функции принадлежности можно задать формулы перевода специфичных параметров типа в обобщенные и обратно. За счет этого происходит преобразование типа функции принадлежности, используемое в мутации.

Качество хромосомы определяется на основе её приспособленности, которая соответствует расстоянию, пройденному агентом в окружении с динамическими препятствиями до первого столкновения.

4. Эксперименты

Для проведения симуляции была разработана виртуальная тестовая среда на базе «движка» Unity, в которой случайным образом генерируются статические и динамические препятствия. Цель виртуального агента, управляемого нейро-нечётким регулятором, достичь бесконечно удаленной точки, избежав столкновений с окружающими объектами. Приспособленность особей определяется на основе пройденного расстояния до первого столкновения.

Настройка параметров регулятора происходила в течение 500 эпох при одновременной симуляции движения 100 виртуальных агентов. Использовались следующие настройки генетического алгоритма: вероятность мутации – 0.3, для рекомбинации выбирались 100 пар родительских особей, являющихся победителями с точки зрения пройденного расстояния среди 50 выбранных случайно агентов, далее лучшие 10% исходной популяции переносились в новую без фильтрации, а среди остальных участников предыдущей популяции и среди особей, полученных в результате рекомбинации, проводился турнирный отбор до тех пор, пока размер нового поколения не равнялся 100.

На рисунках 1 и 2 приведены полученные в результате обучения лингвистические переменные с их функциями принадлежности.

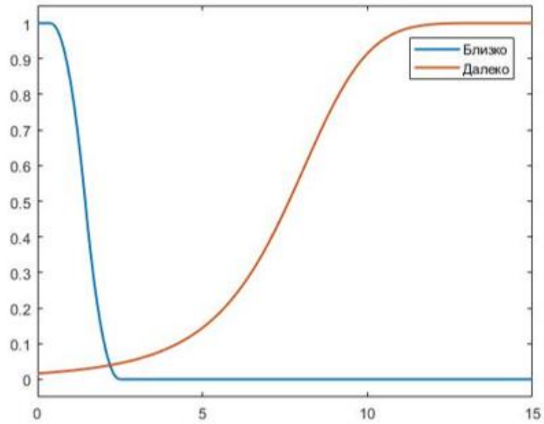


Рис. 1. Функции принадлежности для лингвистической переменной «расстояние»

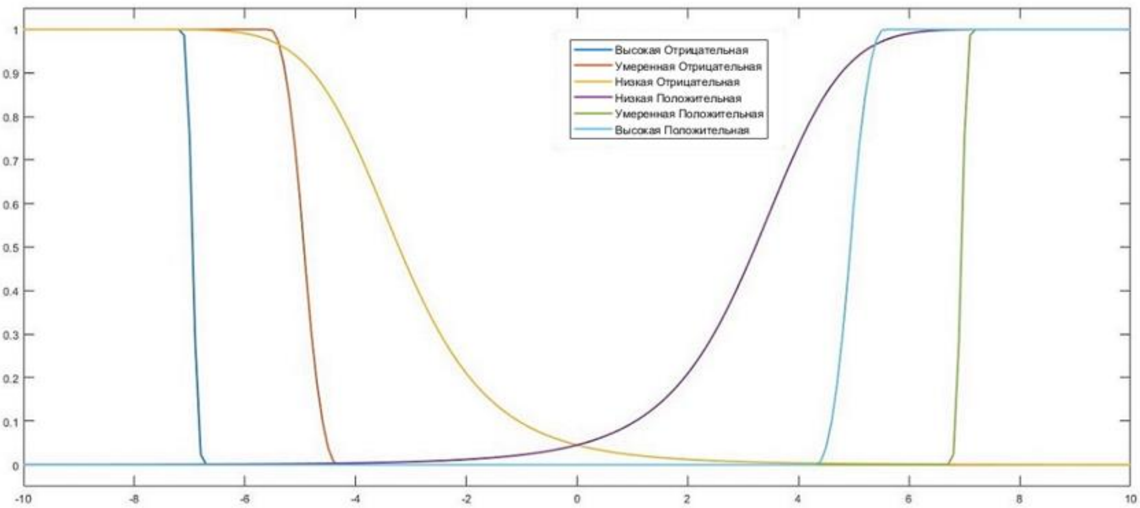


Рис. 2. Функции принадлежности для лингвистической переменной «скорость»

Синтезированный нейро-нечёткий регулятор был использован при проведении эксперимента в реальном окружении с физической моделью. Физическая модель была реализована на основе микроконтроллера Arduino Uno, который был дополнен платформой, двумя двигателями постоянного тока, пятью ультразвуковыми дальномерами и двумя модулями для обмена данными XBee Series 2.

Для упрощения работы была принята следующая цель навигации – двигаться прямо, избегая при этом столкновений с препятствиями в неизвестном окружении. Данная постановка задачи соответствует описанному в [3] делению системы управления на две части. Описанная выше система отвечает за локальное планирование маршрута, тогда как глобальное может быть реализовано посредством алгоритмов, работающих с известным статическим окружением.

Была проведена серия экспериментов с разными конфигурациями расположения статических препятствий на площадке размером 153 см × 287 см при размерах мобильного агента 16 см × 23 см. Агент запускался в неизвестном статическом окружении с различным временем работы, средней скоростью движения, плотностью расположения препятствий. Для каждой совокупности параметров вычислялось среднее количество столкновений среди десяти запусков.

При средней скорости движения 27 см/сек и среднем расстоянием между препятствиями 40 см наблюдалось в среднем 3 столкновения за 50 минут работы. При увеличении скорости до 35 см/сек и уменьшении среднего расстояния между препятствиями до 30 см наблюдалось в среднем 15 столкновений за 50 минут работы.

При добавлении в окружение динамического препятствия число столкновений не меняется при условии, что скорость движения препятствия ниже скорости движения мобильного агента. При увеличении скорости движения динамического препятствия на первый план выходит запаздывание, существующее в системе. Таким образом скорости передачи сигнала становится недостаточно для принятия своевременного решения.

5. Заключение

В работе рассмотрена задача построения нейро-нечёткого регулятора в задаче управления мобильным агентом в неизвестном окружении. Для настройки параметров регулятора использовался модифицированный генетический алгоритм. Эффективность предложенного подхода подтверждается как численными экспериментами в тестовой виртуальной среде, так и физическими экспериментами с использованием мобильного робота на основе микроконтроллера Arduino Uno в среде со статическими и динамическими препятствиями.

Литература

1. Hassanzadeh I., Sadigh S.M. Path planning for a mobile robot using fuzzy logic controller tuned by GA // 6th International Symposium on Mechatronics and its Applications. 2009. P. 1–5.
2. Liu Q., Lu Y.-g., Xie C.-x. Optimal genetic fuzzy obstacle avoidance controller of autonomous mobile robot based on ultrasonic sensors // IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics. 2006. P. 125–129.
3. Latombe J. C. Robot Motion Planning (the Kluwer international series in engineering and computer science). 1990.

ЭПИГЕНЕТИЧЕСКИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПРИ ПСИХИЧЕСКИХ И ПОВЕДЕНЧЕСКИХ РАССТРОЙСТВАХ: КЛАССИФИКАЦИЯ И XAI[1*]

И.И. Юсипов, А.И. Калякулина, А.С. Неробова, М.В. Иванченко

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Психические и поведенческие расстройства характеризуются нарушениями когнитивных функций. Существует множество исследований, которые изучают генетические и эпигенетические факторы развития данных заболеваний. В данной работе решается задача классификации различных типов психических и поведенческих заболеваний (шизофрения, психоз, депрессия, разные типы деменции, легкие когнитивные нарушения) на открытых данных метилирования ДНК. Редукция размерности позволила построить компактную модель, осуществляющую классификацию заболеваний с взвешенным f1 score равным 0.91. При помощи SHAP значений был проанализирован вклад каждого CpG сайта в результирующую модель и объяснены предсказания модели для отдельно взятых субъектов (XAI).

Ключевые слова: метилирование ДНК, мультиклассовая классификация, XAI.

1. Введение

Психические и поведенческие расстройства, многие из которых имеют нейродегенеративную природу и характеризующиеся нарушениями когнитивных функций, являются серьезной социально-экономической проблемой. Существует множество исследований, которые изучают генетические и эпигенетические факторы развития данных заболеваний. В частности, для шизофрении (ICD-10: F20), которая является наследственным психоневрологическим расстройством с эпизодическим психозом и измененной когнитивной функцией, есть работы, в которых были выделены эпигенетические биомаркеры (CpG-сайты) и соответствующие им гены, участвующие в патогенезе болезни [1, 2]. Для депрессии (ICD-10: F32), которая влечет за собой сокращение продолжительности жизни и прогрессированием сердечно-сосудистых и аутоиммунных заболеваний [3], также были найдены CpG-сайты, связанные с патогенезом депрессии и иммунной дисфункцией [4]. Также существуют исследования, выделяющие дифференциально метилированные CpG-сайты в группах больных деменцией, развивающейся на фоне различных нейродегенеративных заболеваний [5]. В недавней работе [6] были исследованы зависимости между уровнем метилирования отдельных генов и наличием болезни Альцгеймера (в том числе на ранних стадиях – легкие когнитивные нарушения).

Целью данной работы является отбор признаков из сотен тысяч CpG-сайтов для построения компактного классификатора различных видов психических и поведенческих расстройств с использованием данных метилирования крови. Немаловажных аспектом является анализ влияния значений отдельно взятых CpG-сайтов на вывод модели в рамках всей популяции (глобальная объяснимость) и объяснение предсказания модели для отдельно взятых субъектов (локальная объяснимость).

2. Материалы и методы

В качестве данных для задачи классификации используются открытые датасеты из репозитория GEO [7]: GSE152027, GSE84727, GSE80417, GSE152027, GSE125105, GSE113725, GSE53740, GSE156994, GSE144858. Все перечисленные датасеты содержат данные метилирования крови стандарта Illumina Infinium HumanMethylation450 [8] для 480 тысяч CpG-сайтов.

[1*] Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № 075-15-2020-808.

Распределение субъектов из датасетов по классам (болезням) показаны на рис. 1. После всех стандартных процедур исключения, нормализации и фильтрации данных метилирования остается 375614 CpG-сайтов, общих для всех датасетов. Они будут являться признаками в рассматриваемой HDLSS задаче классификации. Датасет разделялся на тренировочную, валидационную и тестовую выборки в соотношении 70%, 15%, 15% соответственно. В качестве оптимизационной метрики для выбора лучшей модели использовалось взвешенное f1-значение на тестовой выборке.

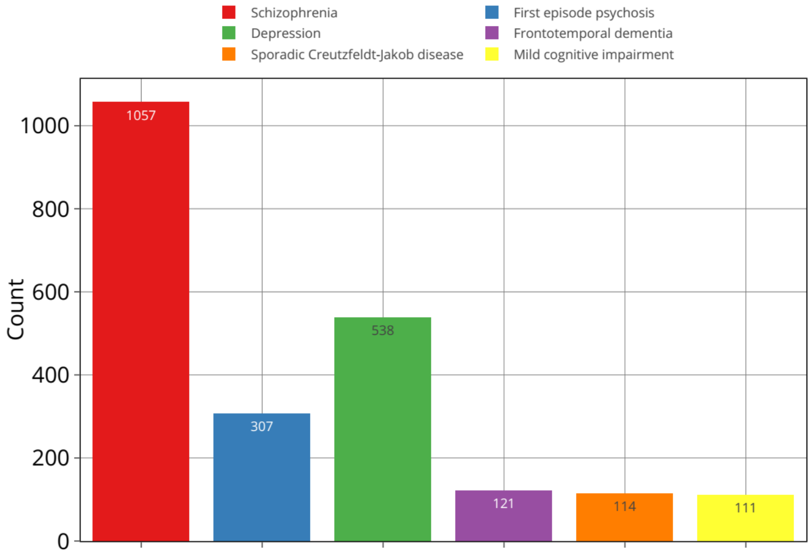


Рис. 1. Распределение субъектов по классам (психические и поведенческие расстройства)

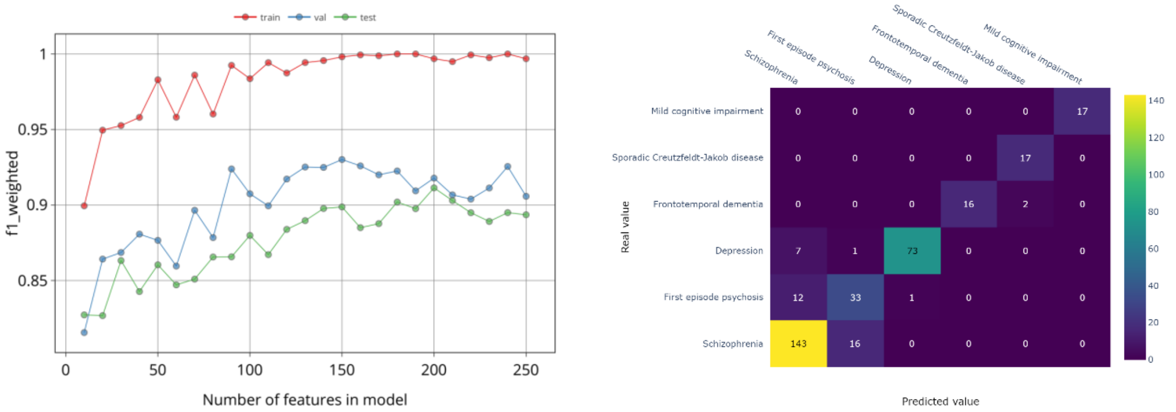
Для получения первичных результатов, определения наиболее важных признаков (CpG-сайтов) и редукции размерности использовалась модель глубокого обучения TabNet [9]. Глубокое обучение широко используется в компьютерном зрении, обработке естественного языка, распознавании речи и многих других областях, позволяющих достичь поразительных результатов. Однако, использование глубокого обучения для моделирования табличных данных, которыми являются данные метилирования ДНК, являлось относительно менее развитым. TabNet – это нейросетевая архитектура, которая сочетает в себе возможности нейронных сетей по аппроксимации сложных функций и возможности древовидных алгоритмов по отбору признаков. TabNet обучается отбирать только релевантные признаки в процессе тренировки.

После определения важности всех CpG-сайтов будет проведен анализ точности моделей в зависимости от числа наиболее важных признаков, участвующих при построении данных моделей. Будут отобраны модели, обеспечивающие лучшую точность при минимально допустимом количестве наиболее важных CpG-сайтов в модели.

Объяснимость лучших моделей будет проанализирована при помощи SHAP-значений [10] – подхода, основанного на теории игр и позволяющем объяснить вывод любой модели машинного обучения. Коллективные SHAP-значения могут показать, насколько каждый CpG положительно или отрицательно влияет на вероятность каждой метки класса (глобальная объяснимость). При этом каждый субъект имеет свой собственный набор SHAP-значений, позволяющий объяснить почему данный субъект получает данное предсказание модели (локальная объяснимость).

3. Результаты

В ходе гиперпараметрического анализа модели TabNet на всех данных метилирования (375614 признака) была найдена сеть, обеспечивающая f1-значение в 0.925 на тестовой выборке. Кроме этого, из первичного анализа были получены оценки важности (feature importance) для всех признаков. Для построения компактной модели, содержащей относительно небольшое количество признаков, итеративно выбирались лучшие признаки с шагом в 10 признаков. На рис. 2(a) показана зависимость лучшего взвешенного f1-значения, полученного среди всех рассматриваемых в ходе гиперпараметрического поиска TabNet моделей, построенных на заданном количестве лучших признаков от количества данных признаков. Локальный максимум f1-значения на тестовой выборке достигается при числе CpG-сайтов равным 200. Данная модель, построенная на 200 признаках, имеет f1-значение на тестовой выборке равное 0.911. Матрица ошибок для данной модели изображена на рис. 2(б). Из нее видно, что больше всего ошибок классификации возникает при разделении классов шизофрении и субъектов с первичными эпизодами психоза, который является одним из проявлений шизофрении [2].



(а) (б)

Рис. 2. Построение модели в редуцированном пространстве признаков: (а) – зависимость лучшего взвешенного f1-значения от количества отобранных лучших признаков; (б) Матрица ошибок для лучшей TabNet модели, построенной на 200 CpG сайтах.

В ходе анализа объяснимости данной модели было установлено глобальное влияние каждого CpG-сайта на выход модели. На рис. 3 изображены усреднённые абсолютные SHAP-значения для 50 из 200 CpG-сайтов в модели, иллюстрирующие это влияние. В частности, первый CpG-сайт с идентификатором cg25739700 обладает максимальным влиянием на вероятности предсказания класса шизофрении (красный) и класса деменции при болезни Кройцфельдта-Якоба (оранжевый), при этом третий CpG-сайт (cg11493553) больше всего влияет на вероятность предсказания класса депрессии (зелёный).

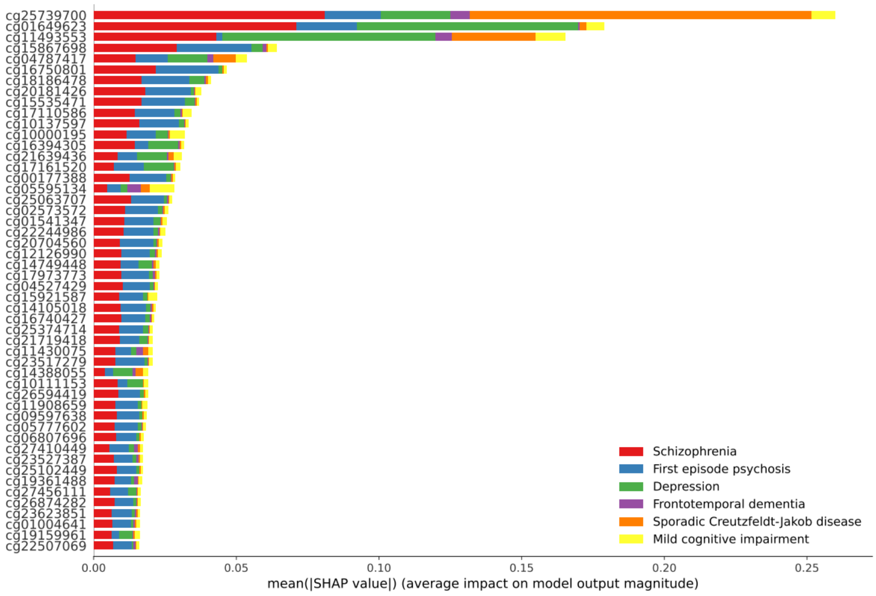
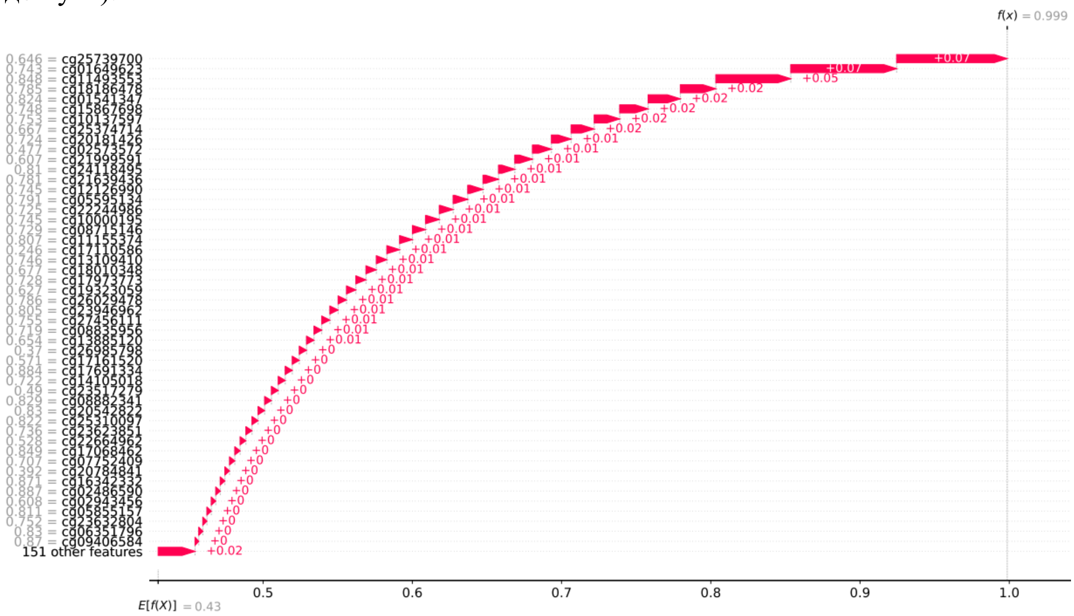
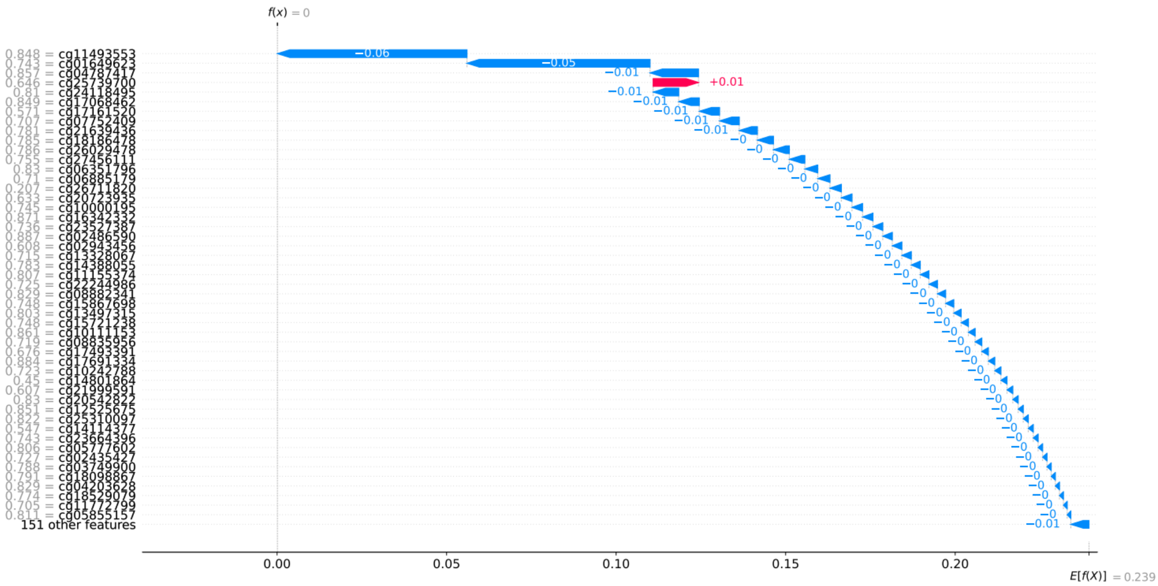


Рис. 3. Усреднённые абсолютные SHAP-значения (влияние на вероятности предсказываемых моделью классов)

Кроме этого, была проанализирована локальная объяснимость: SHAP-значения позволяют объяснить предсказания модели для конкретного субъекта. Рассмотрим индивидуума с шизофренией (истинная метка класса). На рис. 4(а) изображено влияние конкретных значений CpG-сайтов на вероятность предсказания этого класса. Значения двух CpG-сайтов (cg25739700 и cg01649623) увеличивают вероятность предсказания шизофрении на 0.07. При аккумулировании влияния значений всех CpG-сайтов вероятность предсказания шизофрении изменяется с базового значения $E[f(X)] = 0.43$ (доля субъектов с шизофренией в датасете) до вероятности $f(x) = 0.999$. Для того же самого индивидуума с шизофренией на рис. 4(б) показано влияние значений CpG-сайтов на вероятность предсказания депрессии (уменьшение с базового значения 0.24 до нуля).



(а)



(б)

Рис. 4. Влияние значений CpG-сайтов на вероятность предсказания моделью классов шизофрении (а) и депрессии (б) у конкретного субъекта с шизофренией.

4. Заключение

В данной работе были проанализированы различные наборы данных метилирования ДНК (крови) для субъектов с различными психическими и поведенческими расстройствами. Был построен классификатор, использующий наиболее значимые признаки (CpG-сайты) и обеспечивающий f1-значение равное 0.91 на тестовой выборке. Была установлена и проинтерпретирована природа немногочисленных ошибок данного классификатора. При помощи подхода, основанного на теории игр, были получены различные типы объяснимости модели (XAI): глобальная (насколько каждый CpG положительно или отрицательно влияет на вероятность каждой метки класса) и локальная (объяснение предсказания модели для конкретного субъекта).

Литература

1. Hannon E, Dempster E, Viana J, Burrage J, Smith AR, Macdonald R, St Clair D, Mustard C, Breen G, Therman S, et al. An integrated genetic-epigenetic analysis of schizophrenia: evidence for co-localization of genetic associations and differential DNA methylation. Genome Biology. 2016;17(1):176. doi:10.1186/s13059-016-1041-x.
2. Hannon E, Dempster EL, Mansell G, Burrage J, Bass N, Bohlken MM, Corvin A, Curtis CJ, Dempster D, Di Forti M, et al. DNA methylation meta-analysis reveals cellular alterations in psychosis and markers of treatment-resistant schizophrenia. eLife. 2021;10:e58430. doi:10.7554/eLife.58430.
3. Berk M, Williams LJ, Jacka FN, O'Neil A, Pasco JA, Moylan S, Allen NB, Stuart AL, Hayley AC, Byrne ML, et al. So depression is an inflammatory disease, but where does the inflammation come from? BMC Medicine. 2013;11(1):200. doi:10.1186/1741-7015-11-200.
4. Crawford B, Craig Z, Mansell G, White I, Smith A, Spaull S, Imm J, Hannon E, Wood A, Yaghootkar H, et al. DNA methylation and inflammation marker profiles associated with a history of depression. Human Molecular Genetics. 2018;27(16):2840–2850. doi:10.1093/hmg/ddy199.
5. Dabin LC, Guntoro F, Campbell T, Bélicard T, Smith AR, Smith RG, Raybould R, Schott JM, Lunnon K, Sarkies P, et al. Altered DNA methylation profiles in blood from patients with sporadic Creutzfeldt–Jakob disease. Acta Neuropathologica. 2020;140(6):863–879. doi:10.1007/s00401-020-02224-9.
6. Roubroeks JAY, Smith AR, Smith RG, Pishva E, Ibrahim Z, Sattlecker M, Hannon EJ, Kłoszewska I, Mecocci P, Soininen H, et al. An epigenome-wide association study of Alzheimer's disease blood highlights robust DNA hypermethylation in the HOXB6 gene. Neurobiology of Aging. 2020;95:26–45. doi:10.1016/j.neurobiolaging.2020.06.023.
7. Edgar R. Gene Expression Omnibus: NCBI gene expression and hybridization array data repository. Nucleic Acids Research. 2002;30(1):207–210. doi:10.1093/nar/30.1.207.
8. Bibikova M, Barnes B, Tsan C, Ho V, Klotzle B, Le JM, Delano D, Zhang L, Schroth GP, Gunderson KL, et al. High density DNA methylation array with single CpG site resolution. Genomics. 2011;98(4):288–295. doi:10.1016/j.ygeno.2011.07.007.
9. Arik SO, Pfister T. TabNet: Attentive Interpretable Tabular Learning. arXiv:1908.07442 [cs, stat]. 2020 Dec 9 [accessed 2021 Oct 25]. http://arxiv.org/abs/1908.07442.
10. Lundberg S, Lee S-I. A Unified Approach to Interpreting Model Predictions. arXiv:1705.07874 [cs, stat]. 2017 Nov 24 [accessed 2021 Oct 25]. http://arxiv.org/abs/1705.07874.

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Труды XXI Международной конференции

Нижний Новгород, 22–26 ноября 2021 г.

Под ред. проф. Д.В. Баландина

Отв. за выпуск К.А. Баркалов

Публикуется в авторской редакции

Издательство Нижегородского госуниверситета им. Н.И. Лобачевского.
603950, Н. Новгород, пр. Гагарина, 23.