

МНС

2015

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ – 2015**

**Красноярск
2015**

Министерство образования и науки РФ
Сибирское отделение РАН
Сибирский федеральный университет
Институт вычислительного моделирования СО РАН
Институт систем энергетики им. Л. А. Мелентьева СО РАН
Институт физики СО РАН

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ – 2015

МАТЕРИАЛЫ
ВОСЕМНАДЦАТОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
2 – 4 октября 2015 года

Красноярск 2015

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных систем: Материалы XVIII Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2015. –143 с.

В сборнике представлены материалы XVIII Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем» (МНС–2015), проходившего в городе Красноярске 2–4 октября 2015 г.

Проблема моделирования неравновесных систем – одна из важнейших современных научных проблем на стыке математического моделирования, физики, химии, биологии, социальных наук. Важнейшим итогом конференции является обмен последними результатами в различных областях моделирования и исследования неравновесных моделей, описывающих самые различные конкретные системы в области химии, биоинформатики, экологии, генетики, биофизики, социологии, демографии, теории управления сложными системами, теории управления рефлексивными системами, политологии. Среди главных достижений конференции – формирование целостного взгляда на подходы в моделировании неравновесных систем различной природы среди участников этой конференции, распространение опыта и новейших методов моделирования и анализа таких систем на более широкие области применимости.

Материалы предназначены для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

Редакционная коллегия:

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2015

© Коллектив авторов, 2015

ISBN 978-5-906455-06-2



9 785906 455062

ОБЗОР МОДЕЛЕЙ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ОРГАНИЗМЕ ЧЕЛОВЕКА

Н.М. Богатов, М.А. Волошин, А.С. Сеницын

Кубанский государственный университет, bogatov@phys.kubsu.ru

Процесс переноса тепла в биологических тканях является сложным процессом, зависящим от теплопроводности тканей, конвекции, интенсивности перфузии крови, выделения метаболической теплоты. Разработка математических моделей, описывающих перенос тепла в организме, является актуальной задачей современной прикладной математики и медицинской техники. Такие модели находят применение в анализе гипертермии при лечении рака, лазерной хирургии, криохирургии, создании систем температурного комфорта, медицинском тепловидении и др.

Макроскопическая пространственно-временная зависимость температуры $T(x, y, z, t)$ описывается неоднородным, нестационарным, дифференциальным уравнением теплопроводности (уравнение Фурье):

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = k\Delta T + G, \quad (1)$$

где c – удельная теплоемкость, ρ – плотность, k – теплопроводность биологической ткани, Δ – оператор Лапласа, $G(x, y, z, t)$ – функция объемного тепловыделения или результирующая объёмная скорость генерации-потребления энергии в форме тепла. Функция $G(x, y, z, t)$ строится как результат усреднения всех нано- и микромасштабных источников (стоков) тепла в микроскопической области с координатами x, y, z, t .

В работе [1] предлагается классификация моделей переноса тепла в биологических тканях, основанная на отображении механизмов распространения крови по сосудам:

- 1 - континуальные модели, рассматривающие ткань как единую систему, не выделяя в ней отдельные сосуды, теплопроводность такой системы напрямую зависит от интенсивности перфузии;
- 2 - сосудистые модели, рассматривающие локальную геометрию сосудов в ткани и учитывающие вклад каждого сосуда в общий тепловой баланс;
- 3 - гибридные модели, сочетающие в себе черты как континуальных, так и сосудистых моделей;
- 4 - пористые модели, рассматривающие ткань как пористое тело.

В континуальных моделях вводятся эффективная теплопроводность среды, объёмные источники тепла [2]. Для ряда теплофизических параметров, таких как перфузия, теплопроводность, удельная теплопроводность, термическая диффузия, используются экспериментальные оценки этих величин [3 – 5].

Общая форма уравнения для континуальных моделей:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k\Delta T + q_{perf} + q_{met} + q_{ext}, \quad (2)$$

где q_{perf} , q_{met} , q_{ext} – объёмная скорость генерации-потребления энергии в форме тепла, соответственно, в результате перфузии крови, метаболических процессов, внешних источников.

В континуальных моделях проводится усреднение температуры в локальном объеме ткани δV вокруг точки с радиус-вектором \vec{r} [6]:

$$T(\vec{r}, t) = \frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} T(\vec{r}', t) d\vec{r}'. \quad (3)$$

Одной из наиболее распространенных моделей, использующей континуальный подход, является модель Пеннеса [7], в которой не учитывается локальная сосудистая геометрия, температура крови в артериолах, питающих капиллярные русла, считается равной температуре тела, а в капиллярах происходит практически мгновенный энергетический обмен и установление температурного баланса с тканью. Благодаря своей простоте эта модель нашла широкое применение в различных исследованиях [8].

Сосудистая модель процесса отдачи тепла кровью при ее движении по сосудам кожи различного диаметра построена в работе Иванова и Лучакова [9]. В расчетах использовались физиологические данные о диаметре, длине кожных сосудов и скорости движения крови в сосудах.

Совершенствование знаний о теплообмене между кровью, протекающей по сосудам, и окружающей тканью нашло отражение в гибридных моделях Вулфа [10], Клингера [11].

Модель Чена-Холмса [12] считается одной из самых развитых моделей теплопереноса в биологической ткани [13]. Они предложили отдельно моделировать крупные и мелкие сосуды. В данной модели полный объем ткани разделяется на два вспомогательных объема: объем по ткани, содержащий поры, и объем пор, по которым течет кровь.

Более точно геометрия артериального русла учитывается в гибридной модели теплопереноса в слое кожи с кровеносными сосудами [14], при этом использована балансная схема теплообмена для элемента сосуда и окружающей ткани, построенная в [9].

Рассмотренные модели переноса тепла в биологических тканях являются региональными, так как применяются только к отдельным частям тела. Модель теплообмена в организме человека, позволяющая построить распределение температуры в объеме тела, далека от завершения. Существующие модели теплообмена в организме являются объединением региональных моделей.

Разделим тело на N областей. Проинтегрируем левую и правую части уравнения (1) по макроскопической области Γ_i объемом V_i , получим

$$c_i m_i \frac{d}{dt} T_{evi} = Q_i + G_{vi}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (4)$$

где m_i – масса области Γ_i , T_{evi} – средняя температура, Q_i – результирующий поток тепла через границы области Γ_i , G_{vi} – полная скорость генерации-потребления тепла в области Γ_i . Уравнения (4) являются основой для построения системы уравнений теплового баланса многослойных моделей организма [15–17]. Решением этой системы уравнений являются средние значения температуры T_{evi} в N областях.

В работе [18] показано, что для дифференциальной диагностики заболеваний тепловизионным методом недостаточно знать только средние значения температуры в выделенных областях, а необходимы значения разности температуры в каждой исследуемой области поверхности тела. Существенным фактом, влияющим на процессы терморегуляции организма, является обмен информацией между объектами системы саморегуляции, осуществляющийся посредством гормонов, распространяющихся с током крови [19]. Эти результаты свидетельствуют о неполноте рассмотренных моделей теплообмена.

Реальная модель теплообмена в организме человека должна включать в себя цепи передачи энергии и информации, представленные на рис. 1, таким образом, она является энергоинформационной моделью системы терморегуляции. В этой модели уравнение (1) записывается с учетом неоднородности тканей организма: $c(x, y, z)$, $\rho(x, y, z)$, $k(x, y, z)$. Функция объемного тепловыделения описывает не только

теплообмен между кровеносной системой и окружающей тканью, но и информационный обмен между центрами терморегуляции, например, в системе гипоталамус – гипофиз – надпочечники [19], или центральные рецепторы – гипоталамус – внутренние органы (рис. 1) и др.

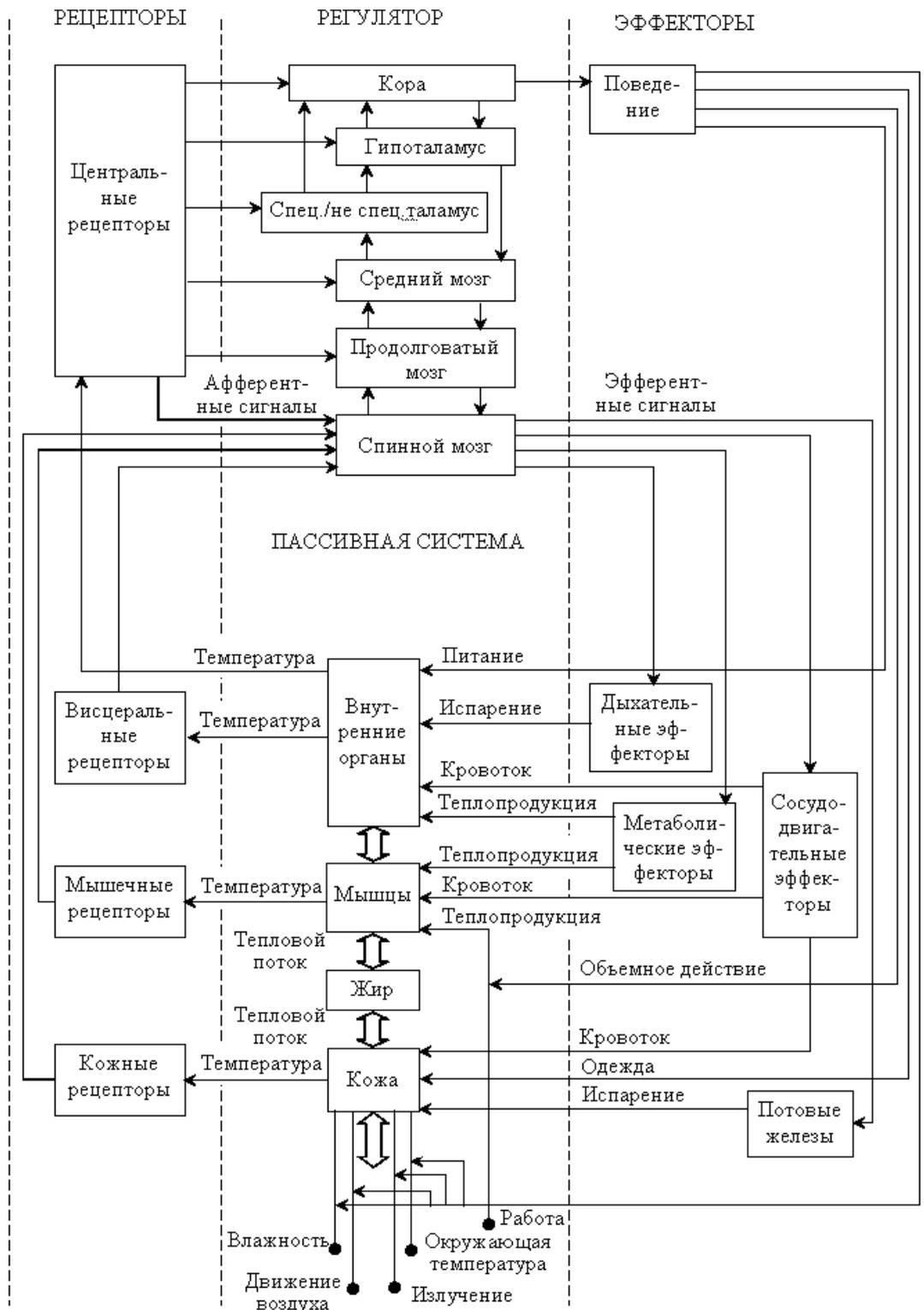


Рис.1. Схема процессов терморегуляции в организме человека [15]

Динамика потоков энергии и информации описывается системой обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений вида

$$\frac{d}{dt} \vec{C}_j = \sum_{l \neq j} (a_{lj} f_{lj}(\vec{C}_l, \vec{C}_j) - a_{jl} f_{jl}(\vec{C}_j, \vec{C}_l)), \quad (5)$$

где \vec{C}_j – вектор, компоненты которого соответствуют количеству вещества, энергии или информации, поступающих в точку или элемент объема с радиус-вектором \vec{r}_j , a_{lj} – весовые коэффициенты, характеризующие конкретный процесс, $f_{lj}(\vec{C}_l, \vec{C}_j)$ – функции, характеризующие состояние объектов системы терморегуляции.

Структуру потоковой системы можно представить в виде функционально-взвешенного графа (рис. 2).

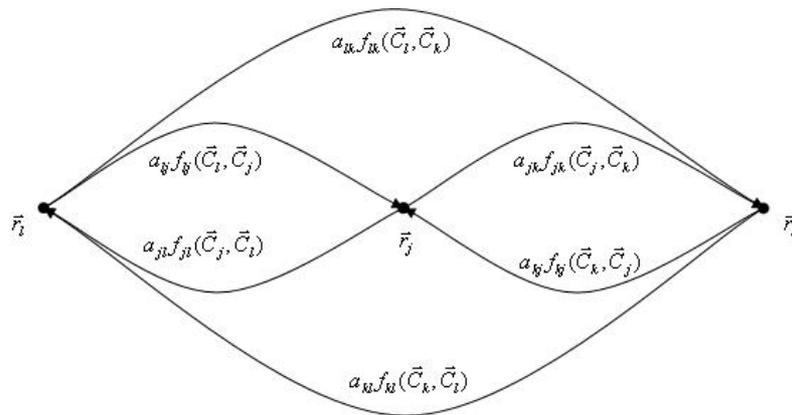


Рис.2. Элемент функционально-взвешенного графа потоковой системы энергии и информации

Результирующая объёмная скорость генерации-потребления энергии в форме тепла $G(\vec{r}, t, \vec{C})$ строится с учетом переноса энергии и информации, заданных вектором \vec{C} .

В общем случае уравнение теплопроводности (1) и уравнения для потоков энергии и информации (5) образуют нелинейную систему дифференциальных уравнений в частных производных, для решения которой целесообразно использовать метод конечных элементов.

Задача значительно упрощается, если использовать преобразования, аналогичные преобразованиям от уравнения (1) к уравнениям (4). В этом случае получим нелинейную систему дифференциальных уравнений первого порядка в обыкновенных производных.

Список литературы

1. Khaled A.R. A. The role of porous media in modeling flow and heat transfer in biological tissues / A. R. A. Khaled, K. Vafai // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2003. — № 46. — P. 4989 – 5003.
2. Жмакин А. И. Физические основы криобиологии / А. И. Жмакин // Успехи физических наук. — 2008. — Т. 178. — № 3. — С. 243 – 266.
3. Yue K Noninvasive method for simultaneously measuring the thermophysical properties and blood perfusion in cylindrically shaped living tissues / K Yue , X Zhang, YY Zuo // CellBiochem Biophys. — 2008. — Vol. 50. — №. 1. P. 41 – 51.

4. A Method for in vivo measurement of thermophysical properties of biological tissues / M. Fujii, X Zhang, T. Fujino et al. // Journal of International Society of Life Information Science. — 1999. — Vol. 17. — № 1. — P. 129 – 134.
5. Mudaliar A.V. Development of a phantom tissue for blood perfusion measurement and noninvasive blood perfusion estimation in living tissue: PhD Diss. Blacksburg, Virginia Polytechnic Institute and State University, 2007.
6. Chen M. M. Microvascular contributions in tissue heat transfer / M. M. Chen, K. R. Holmes // Annals of the New York Academy of Sciences. — 1980. — Vol. 325. — P. 137 – 150.
7. Pennes Harry H. Analysis of Tissue and Arterial Blood Temperatures in the Resting Human Forearm / Harry H. Pennes // Journal of Applied Physiology. — 1948. — Vol. 1. — № 2. — P. 93 – 122.
8. Minkowycz W. J. Advances in Numerical Heat Transfer: Volume 3 / W. J. Minkowycz, E. M. Sparrow, J.P. Abraham. — Boca Raton: CRC Press, 2009. — 400 p.
9. Иванов К.П. Эффективность теплообмена между тканями и кровью в кровеносных сосудах различного диаметра / К.П. Иванов, Ю.И. Лучаков // Российский физиологический журнал им. И.М. Сеченова. — 1994. — Т. 80. — № 3. — С. 100 – 105.
10. Wulff W. The Energy Conservation Equation for Living Tissues / W. Wulff // IEEE Transactions of Biomedical Engineering. — 1974. — Vol. BME-21. — P. 494 – 495.
11. Klinger H.G. Heat Transfer in Perfused Biological Tissue-1: General Theory / H. G. Klinger // Bulletin of Mathematical Biology. — 1974. — Vol. 36. — P. 403 – 415.
12. Chen M. M. Microvascular contributions in tissue heat transfer / M. M. Chen, K. R. Holmes // Annals of the New York Academy of Sciences. — 1980. — Vol. 325. — P. 137 – 150.
13. Kreith F. The CRC handbook of mechanical engineering / Frank Kreith, D. Yogi Goswami. — Boca Raton: CRC Press, 2005. — 1900 p.
14. Богатов Н.М., Пелипенко О.Н. Анализ теплопереноса в слое биологической ткани с распределенной системой кровеносных сосудов / Н.М. Богатов, О.Н. Пелипенко // Российский физиологический журнал им. И.М. Сеченова. — 2005. — Т. 91. — № 9. — С. 1033 – 1042.
15. Ермакова И.И. Математическое моделирование процессов терморегуляции у человека / И.И. Ермакова. — Итоги науки и техники. ВИНТИ, Физиология человека и животных, 1987. — Т. 33. — 136 с.
16. Драгун В.Л. Вычислительная термография: применение в медицине / В.Л. Драгун, С.А. Филатов. — Мн.: Навука і тэхніка, 1992. — 232 с.
17. Бегун П.И. Биомеханика / П.И. Бегун, Ю.А. Шукейло. — СПб.: Политехника, 2000. — 463 с.
18. Андросова Т.В. Тепловизионные исследования реакций терморегуляторной системы организма / Т.В. Андросова, Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян и др. // В: Современные проблемы физики, биофизики и информационных технологий. — Краснодар: Краснодарский ЦНТИ. — 2010. — С. 7 – 22.
19. Андросова Т.В. Исследование закономерностей температурной регуляции в процессе продолжительного стресса / Т.В. Андросова, Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян и др. // В: Нейроинформатика, её приложения и анализ данных: Материалы XIX Всероссийского семинара, 1 – 3 октября 2011 г. — Красноярск: Сибирский федеральный университет. — 2011. — С. 20 – 24.

ТЕХНОЛОГИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РЕШЕНИЙ, ОПИСЫВАЮЩИХ СТАЦИОНАРНОЕ ТЕЧЕНИЕ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ПЛОСКОМ СЛУЧАЕ

Н.М. Бодунов, Г.В. Дружинин

Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ, bodunov_nm@mail.ru

Решение уравнений Навье-Стокса для несжимаемого течения является одной из главных проблем в области вычислительной гидромеханики [1–3 и др.]. Общего аналитического решения этой системы не получено и для ее решения используются соответствующие численные методы. На практике находят применение различные приближения уравнений Навье-Стокса (например, уравнения пограничного слоя). В результате было получено ограниченное число их точных решений. Поиск новых аналитических решений уравнений Навье-Стокса является актуальной задачей механики жидкости способствующей лучшему пониманию качественных особенностей течений вязкой жидкости. Эти решения позволяют оценить область применимости упрощенных гидродинамических моделей и незаменимы для тестирования соответствующих численных методов.

Выпишем двумерные уравнения Навье-Стокса, которые описывают стационарное течение несжимаемой вязкой жидкости без учета инерционных сил с постоянными свойствами при отсутствии массовых сил [1]:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right); \quad \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right); \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

где ν – кинематический коэффициент вязкости, ρ – плотность среды.

В практических задачах решение системы уравнений (1) должно удовлетворять соответствующим граничным условиям. Например, для вязкой жидкости в качестве граничных условий на неподвижной непроницаемой поверхности принимается требование обращения в нуль вектора скорости (условие прилипания): $u|_{\Gamma} = v|_{\Gamma} = 0$ а также условия на свободной границе.

Система уравнений (1) сводится к безразмерному виду [4,5]:

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{x}} = \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{y}^2}; \quad \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{y}} = \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{y}^2}; \quad \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = 0, \quad (2)$$

где $\bar{u} = \frac{u}{u_*}$, $\bar{v} = \frac{v}{u_*}$, $\bar{x} = \frac{xu_*}{\nu}$, $\bar{y} = \frac{yu_*}{\nu}$, $\bar{P} = \frac{P}{\rho u_*^2}$.

В дальнейшем черточки над безразмерными величинами в выражениях (2) для упрощения опускаем.

Основная трудность интегрирования системы (2) (т.е. определение поля скорости) связана с определением поля давления. Градиент давления составляет часть источникового члена в уравнении количества движения. При этом нет явного уравнения для нахождения давления. При заданном поле давления решение уравнений количества движения не представляет собой сложности. Однако способ нахождения поля давления не очевиден. Отметим ряд подходов, дающих возможность обойти эту проблему. В их числе известны методы, основанные на решении уравнения для вихря. Они привели к возникновению целого ряда методик, основанных на решении уравнений, получаемых при исключении давления из системы определяющих

уравнений (исключение давления из первых двух уравнений системы (2) путем перекрестного дифференцирования каждого уравнения приводит к уравнению переноса вихря). Вместе с введением функции тока для стационарных плоских течений этот метод является основой широко известного метода решения в переменных функция тока – вихрь. Однако этот метод имеет серьезные недостатки. Условие для вихря на стенке задать трудно, и это часто осложняет получение сходящегося решения. Кроме того, давление, которое было исключено из исходной системы уравнений, часто оказывается искомым конечным результатом решения.

В данной работе для решения системы уравнений для плоских стационарных течений в ограниченной области с соответствующими граничными условиями предложен аналитический метод решения, основанный на аппроксимации искомого решения линейной комбинацией базисных функций.

Простой подстановкой можно убедиться, что третьему уравнению системы (2) тождественно удовлетворяет некоторая функция $\psi(x, y)$, если положить

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (3)$$

Дифференцируя первое уравнение системы (2) по y , второе уравнение по x и вычитая второе уравнение из первого, получим после исключения давления дифференциальное уравнение относительно функции $\psi(x, y)$ в области $G = \{x, y : |x| < 1; |y| < 1\}$:

$$\frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} = 0. \quad (4)$$

Воспользовавшись результатами, изложенными в работе [5], найдем полиномиальное решение уравнения (4) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi(x, y) = & A_0 + A_1(c_{01}x + c_{11}y) + A_2[c_{02}(x^2 + y^2) + c_{12}xy] + \\ & + A_3(c_{03}x^3 + c_{13}x^2y + c_{23}xy^2 + c_{33}y^3) + \\ & + A_4\left[c_{04}(x^4 - y^4) + c_{14}x^3y + c_{24}\left(x^2y^2 - \frac{y^4}{3}\right) + c_{34}xy^3\right] + \\ & + A_5\left[c_{05}(x^5 - 5xy^4) + c_{15}\left(x^4y - \frac{y^5}{5}\right) + c_{25}(x^3y^2 - xy^4) + c_{35}\left(x^2y^3 - \frac{y^5}{5}\right)\right] + \\ & + A_6\left[c_{06}(x^6 - 15x^2y^4 + 2y^6) + c_{16}(x^5y - xy^5) + c_{26}\left(x^4y^2 - 2x^2y^4 + \frac{y^6}{5}\right) + \right. \\ & \left. + c_{36}\left(x^3y^3 - \frac{3xy^5}{5}\right)\right] + A_7\left[c_{07}(x^7 - 35x^3y^4 + 14xy^6) + c_{17}\left(x^6y - 3x^2y^5 + \frac{2y^7}{7}\right) + \right. \\ & \left. + c_{27}\left(x^5y^2 - \frac{10x^3y^4}{3} + xy^6\right) + c_{37}\left(x^4y^3 - \frac{6x^2y^5}{5} + \frac{3y^7}{35}\right)\right] + \dots + A_N \Psi_N(c_{0N}, c_{1N}, c_{2N}, c_{3N}). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь A_i – произвольные коэффициенты, подлежащие определению; $c_{0N}, c_{1N}, c_{2N}, c_{3N}$ – произвольные внутренние параметры.

Используя (5) и произведя указанные в (3) действия, получим для продольной и поперечной компоненты скорости потока жидкости следующие выражения:

$$\begin{aligned}
u(x, y) = & A_1 c_{11} + A_2 (2c_{02}y + c_{12}x) + A_3 (c_{13}x^2 + 2c_{23}xy + 3c_{33}y^2) + \\
& + A_4 \left[-4c_{04}y^3 + c_{14}x^3 + 2c_{24} \left(x^2y - \frac{2y^3}{3} \right) + 3c_{34}xy^2 \right] + \\
& + A_5 \left[-20c_{05}xy^3 + c_{15}(x^4 - y^4) + 2c_{25}(x^3y - 2xy^3) + c_{35}(3x^2y^2 - y^4) \right] + \\
& + A_6 \left[12c_{06}(y^5 - 5x^2y^3) + c_{16}(x^5 - 5xy^4) + 2c_{26} \left(x^4y - 4x^2y^3 + \frac{3y^5}{5} \right) + \right. \\
& + 3c_{36}(x^3y^2 - xy^4) \left. \right] + A_7 \left[28c_{07}(3xy^5 - 5x^3y^3) + c_{17}(x^6 - 15x^2y^4 + 2y^6) + \right. \\
& + 2c_{27} \left(x^5y - \frac{20x^3y^3}{3} + 3xy^5 \right) + 3c_{37} \left(x^4y^2 - 2x^2y^4 + \frac{y^6}{5} \right) \left. \right] + \dots + \\
& + A_N u_N(c_{0N}, c_{1N}, c_{2N}, c_{3N}),
\end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}
v(x, y) = & -A_1 c_{01} - A_2 (2c_{02}x + c_{12}y) - A_3 (3c_{03}x^2 + 2c_{13}xy + c_{23}y^2) - \\
& - A_4 \left[4c_{04}x^3 + 3c_{14}x^2y + 2c_{24}xy^2 + c_{34}y^3 \right] - \\
& - A_5 \left[5c_{05}(x^4 - y^4) + 4c_{15}x^3y + c_{25}(3x^2y^2 - y^4) + 2c_{35}xy^3 \right] - \\
& - A_6 \left[6c_{06}(x^5 - 5xy^4) + c_{16}(5x^4y - y^5) + 4c_{26}(x^3y^2 - xy^4) + \right. \\
& + 3c_{36}(x^3y^2 - xy^4) \left. \right] + A_7 \left[28c_{07}(3xy^5 - 5x^3y^3) + c_{17}(x^6 - 15x^2y^4 + 2y^6) + \right. \\
& + c_{27}(5x^4y - 10x^2y^4 + y^6) + 4c_{37} \left(x^3y^3 - \frac{3xy^5}{5} \right) \left. \right] + \dots + A_N v_N(c_{0N}, c_{1N}, c_{2N}, c_{3N}, x, y).
\end{aligned} \tag{7}$$

Для определения распределения давления воспользуемся методикой, изложенной в работе [5]. Для этого подставив выражения (6) и (7) в первые два уравнения системы (2), найдем

$$\frac{\partial P_1}{\partial x} = F_1(x, y), \quad \frac{\partial P_2}{\partial y} = F_2(x, y). \tag{8}$$

Проинтегрировав выражения (8), получим

$$P_1(x, y) = \int F_1(x, y) dx + f_1(y); \quad P_2(x, y) = \int F_2(x, y) dy + f_2(x), \tag{9}$$

где $f_1(y), f_2(x)$ – функции интегрирования; C – константа интегрирования.

За счет соответствующего выбора функций $f_1(y)$ и $f_2(x)$ – после целого ряда преобразований найдем однозначное выражение для давления:

$$\begin{aligned}
P(x, y) = & P_1(x, y) \equiv P_2(x, y) = 2A_3 [(c_{13} + 3c_{33})x - 3(c_{03} + c_{23})y] + \\
& + A_4 \left[-4(6c_{04} + c_{24})xy + 3(c_{14} + c_{34})(x^2 - y^2) \right] + \\
& + A_5 \left[60c_{05} \left(\frac{2y^3}{3} - x^2y \right) xy^3 + 12c_{15} \left(\frac{x^3}{3} - xy^2 \right) - 6c_{25} \left(x^2y - \frac{y^3}{3} \right) + 6c_{35} \left(\frac{x^3}{3} - xy^2 \right) \right] + \\
& + A_6 \left[120c_{06}(xy^3 - x^3y) + 5c_{16}(x^4 - 6x^2y^2 + y^4) + 8c_{26}(xy^3 - x^3y) + \right. \\
& + \frac{3c_{36}}{2}(x^4 - 3x^2y^2 + y^4) \left. \right] + A_7 \left[42c_{07}(-5x^4y + 10x^2y^3 - y^5) + 6c_{17}(x^5 - 10x^3y^2 + 5xy^4) + \right. \\
& + 2c_{27}(-x^4y + 10x^2y^3 - y^5) + 6c_{37} \left(\frac{x^5}{5} - 2x^3y^2 + xy^4 \right) \left. \right] + \dots +
\end{aligned} \tag{10}$$

$$+ A_N p_N(c_{0N}, c_{1N}, c_{2N}, c_{3N}, x, y) + C.$$

Входящие в решения (6), (7) и (10) неизвестные коэффициенты A_α и константа C определяются из соответствующих граничных условий (на границе Γ) методом коллокаций или методом взвешенных невязок [6] при решении конкретной прикладной задачи. Количество коэффициентов A_α зависит от выбора метода решения граничной задачи и оценки точности приближенного решения.

С общих позиций внутренние параметры $c_{0i}, c_{1i}, c_{2i}, c_{3i}$ базисных функций выбираются из следующих соображений: например, параметры подбираются так, чтобы исключить все особенности, связанные с решением разрешающей системы алгебраических уравнений; из условия ортогонализации и нормировки на границе Γ (так как найденное решение тождественно удовлетворяется в области) и др. [4,5]. Полученное новое аналитическое решение (6), (7) и (10) может быть использовано в практических задачах аэро-гидродинамики.

Отметим, что внутренние параметры $c_{0i}, c_{1i}, c_{2i}, c_{3i}$ расширяют класс решений внутри области G . Например, только при выполнении условий

$$c_{33} = -\frac{c_{13}}{3}, c_{23} = -3c_{03}, c_{24} = -6c_{04}, c_{34} = -c_{14}, c_{35} = -2c_{15}, c_{25} = -10c_{05} \text{ и т.д.}$$

решение (6) и (7) будут описывать потенциальное течение ($\Delta u = 0, \Delta v = 0$, где Δ – двумерный оператор Лапласа).

Для данного случая можно получить аналитическое решение системы уравнений Навье-Стокса-Бринкмана [7–9 и др.], которая описывает плоское течение (для малых скоростей, когда не учитываются инерционные силы) несжимаемой вязкой жидкости сквозь пористую среду:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \lambda u; \quad \frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \lambda v; \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (11)$$

где $\lambda = \frac{v^2}{Ku_*^2}$, K – коэффициент проницаемости. Система (11) записана в безразмерном виде.

Первоначально предполагалось, что модель Бринкмана применима только к высокопористым средам, как волокнистой структуры, так и зернистой структуры. Однако в настоящее время доказано, что эта модель удовлетворительно описывает течение вязкой жидкости в пористых средах с широким разбросом значений пористости. Учитывая большую трудоемкость и стоимость технологического эксперимента, проблема математического моделирования процессов пропитки является весьма актуальной.

Выражения для продольной и поперечной компоненты скорости потока жидкости сквозь пористую среду имеют вид

$$u(x, y) = A_1 - A_2 x + 2A_3 xy - \frac{A_4}{3}(x^3 - 3xy^2) + 4A_5(x^3 y - xy^3) - \frac{A_6}{5}(x^5 - 10x^3 y^2 + 5xy^4) + \dots + A_N u_N(x, y), \quad (12)$$

$$v(x, y) = -A_1 + A_2 y + A_3(x^2 - y^2) + A_4\left(x^2 y - \frac{y^3}{3}\right) + A_5(x^4 - 6x^2 y^2 + y^4) +$$

$$+ A_6 \left(x^4 y - 2x^2 y^3 + \frac{y^5}{5} \right) + \dots + A_N v_N(x, y). \quad (13)$$

Используя приведенную выше методику, после ряда преобразований, получим следующее выражение для определения давления:

$$-\frac{1}{\lambda} P(x, y) = A_1(x - y) + \frac{A_2}{2}(y^2 - x^2) + A_3 \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + \frac{A_4}{2} \left(x^2 y^2 - \frac{x^4}{6} - \frac{y^4}{6} \right) + \\ + A_5 \left(x^4 y - 2x^2 y^3 + \frac{y^5}{5} \right) + \frac{A_6}{2} \left(x^4 y^2 - x^2 y^4 - \frac{x^6}{15} + \frac{y^6}{15} \right) + \dots + A_N p_N(x, y) + C. \quad (14)$$

Найденное аналитическое решение (12)–(14) тождественно удовлетворяет системе уравнений (11) и может быть использовано в процессах изготовления деталей из полимерных композиционных материалов (ПКМ) методами трансферного формования, в частности, пропиткой под давлением (RTM). Суть данных технологий заключается в совмещении операций пропитки сухого наполнителя вязким связующим и формования детали [10–11 и др.]. Данные технологии в настоящее время являются альтернативой препрегово-автоклавной технологии изготовления деталей из ПКМ, динамично развиваются и находят все более широкое применение в различных отраслях машиностроения.

Список литературы

1. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя / Г. Шлихтинг. – М.: Наука. 1974. – 711 с.
2. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа / Л.Г. Лойцянский. – М.: Наука. – 1978. – 736 с.
3. Пейре Р., Тейлор Т.Д. Вычислительные методы в задачах механики жидкости / Р.Пейре, Т.Д. Тейлор. – Л.: Гидрометеиздат. – 1986. – 352 с.
4. Дружинин Г.В. Базисные функции в приближенных решениях краевых задач / Г.В. Дружинин, И.М. Закиров, Н.М. Бодунов. – Казань: Изд-во ФЕН. – 2000. – 376 с.
5. Дружинин Г.В. Решение прикладных задач авиационной техники на основе симметрии дифференциальных уравнений в частных производных / Г.В. Дружинин, Н.М. Бодунов. – Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. – 2012. – 288 с.
6. Ращиков В.И. Численные методы решения физических задач / В.И. Ращиков, А.С. Рошаль. – СПб.: Изд-во "Лань". – 2005. – 208 с.
7. Brinkman H.C. On the permeability of media consisting of closely packed porous particles / H.C. Brinkman // Appl. Scient. Res. A 1. – 1947. P.81 – 86.
8. Берд Р. Явление переноса / Р.Берд, В.Стьюарт, Е.Лайтфут. – М.: Химия, 1974. – 688 с.
9. Филиппов А.Н. Течение жидкости внутри цилиндрического капилляра, стенки которого покрыты пористым слоем (гелем) / А.Н.Филиппов, Д.Ю.Ханукаева, С.И.Васин и др. // Коллоидный журнал. – 2013. – Т.75. – №2. С.237 – 249.
10. Нелюб В.А. Применение прямых методов формования при производстве крупногабаритных деталей из стеклопластиков / В.А.Нелюб, Д.В.Гращенков, Д.И.Коган и др. // Химическая технология. 2012. – Т.13. – №12. С.735 – 739.
11. Душин М.И. Особенности изготовления изделий из ПКМ методом пропитки под давлением / М.И.Душин, А.В.Хрульков, Р.Р.Мухаметов и др. // Авиационные материалы и технологии. – 2012. – №1. С.18 – 26.
12. Афанасьев Д.В. Безавтоклавные технологии / Д.В.Афанасьев, М.Ю.Ощепков // Композитный мир. – 2010. – №5. С.28 – 37.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ИЗДЕЛИЙ ИЗ ПКМ МЕТОДОМ ПРОПИТКИ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

П.В. Бреховских, Н.М. Бодунов

Казанский национальный исследовательский технический
университет им. А.Н. Туполева-КАИ, *pav-89@mail.ru*, *bodunov_nm@mail.ru*

В настоящее время большинство крупногабаритных изделий из стеклопластика изготавливают методом инъекционного формования (RTM – Resin Transfer Molding). Данная технология имеет ряд преимуществ по сравнению с широко применяемым методом контактного формования. В частности, снижаются отходы материалов, изделие имеет более точные размеры и более однородное по объему (отсутствуют воздушные включения), снижается время изготовления изделий, что приводит к уменьшению себестоимости [1–4 и др.].

Однако следует отметить недостатки, которые могут возникать в процессе изготовления крупногабаритных изделий: нестабильность значений объемного содержания наполнителя, неравномерное содержание воздушных включений, возможное образование отдельных непропитанных участков или полная остановка процесса пропитки – «запирание» системы [4]. Особое место занимает проблема влияния пристенной зоны на картину течения связующего. Данное явление (названное «пристенным эффектом») и исследованное на примере течения вязкой жидкости через зернистый слой указывает на возрастание скорости фильтрационного потока в пристенной области [5,6].

Для анализа причин возникновения дефектов структуры необходимо иметь представление о процессе пропитки в зависимости от различных параметров процесса. В виду большой трудоемкости и стоимости технологического эксперимента, проблема математического моделирования процессов пропитки является актуальной задачей. Для уточнения модели и качественной оценки картины фронта течения вязкой жидкости в разные моменты времени пропитки методом RTM был проведен технологический эксперимент на установке, реализующей двухмерное течение жидкости в системе и состоящей из оснастки, вакуумной станции, устройства подачи жидкости, соединительных шлангов и измерительных приборов. В матрицу размером $286 \times 107 \times 2,3$ мм помещался пакет наполнителя, определенного количества слоев (от 8 до 12) стеклоткани Т-10. В качестве модельной жидкости использовалось минеральное масло (плотность 900 кг/м^3 и вязкость $0,011 \text{ Па} \cdot \text{с}$), параметры течения которого близки по значениям реальным терморезактивным связующим. Сверху матрица с целью визуального наблюдения закрывалась прозрачной крышкой. Из полости откачивался воздух (до 8 мбар) и под давлением (147 кПа) подавалась жидкость. Для удобства получения информации о геометрии фронта жидкости верхняя часть оснастки была разбита на 14 участков.

Было проведено две серии экспериментов. Первая серия заключалась в пропитке различного количества слоёв ткани номинальной ширины с полостью матрицы, чтобы уменьшить влияние граничной зоны. Вторая серия проводилась с намеренным созданием зазора у обоих краёв пластины с вниманием к геометрии фронта жидкости (соответственно двухсторонний зазор выбирался равным $0,5 \text{ мм}$, 1 мм и 2 мм).

В эксперименте фигурирует безразмерная величина, именуемая коэффициентом наполнения. Она часто используется на практике для оценки степени армирования, показывая, какую часть в объёме композита занимает армирующий материал. Формула

для расчёта коэффициента наполнения в случае армирования тканью или лентой:

$$k = \frac{n_{\text{сл}} \cdot \rho_{\text{пов}}}{\rho_{\text{вол}} \cdot h_{\text{п}}}, \quad (1)$$

где $n_{\text{сл}}$ – число слоёв ткани; $\rho_{\text{пов}}$ – поверхностная плотность ткани [кг/м²]; $\rho_{\text{вол}}$ – плотность волокон [кг/м³]; $h_{\text{п}}$ – толщина пакета слоёв [м].



Рис.1. Зависимость общего времени пропитки от коэффициента наполнения

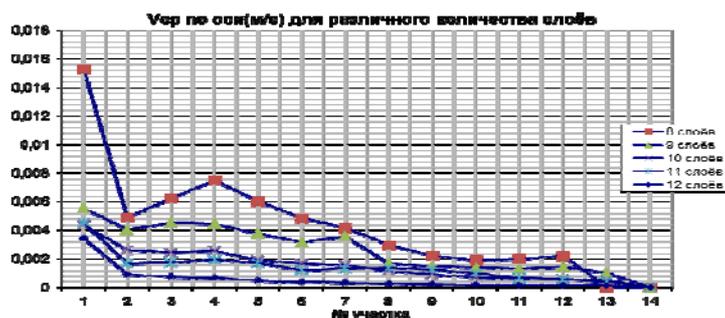


Рис.2. Зависимость средней скорости по оси с 1 по 14-й участок для различных слоёв армирующей ткани

Коэффициент наполнения для фиксированной толщины варьируется различным количеством слоёв. Пористость ϕ выражается через коэффициент наполнения следующим образом: $\phi = 1 - k$. По результатам первой серии экспериментов определялась средняя скорость на каждом участке и общее время пропитки (рис.1, рис.2). Типовые картины фронта течения вязкой жидкости в различные моменты пропитки под давлением показаны на рис.3.



Рис.3. Типовые картины фронта течения вязкой жидкости в различные моменты пропитки под давлением с суммарным зазором по обоим краям пластины 0,5 мм

Из проведённых экспериментов можно сделать следующие выводы: подтверждается существование пристенного эффекта для волокнистой структуры, несмотря на то, что градиент давления задавался только по одной оси, процесс пропитки является плоским и нестационарным.

Численное моделирование процесса RTM проводилось на компьютере на примере пропитки под давлением трех пластин из стеклоткани Т-10 с размерами 286×106.5 мм, 286×106 мм, 286×105 мм соответственно (коэффициент проницаемости ткани K , равный значению $8 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2$ был выбран условно, исходя из стандартной базы; пористость ткани $\phi = 0.496$; давление подачи – 147 кПа, давление отвода – 900 Па) в программном комплексе PAM-RTM компании ESI Group [7]. Виртуальный расчет пропитки композиционных материалов позволяет выбрать наилучшую технологию из нескольких имеющихся, выявить места образования и причины появления дефектов.

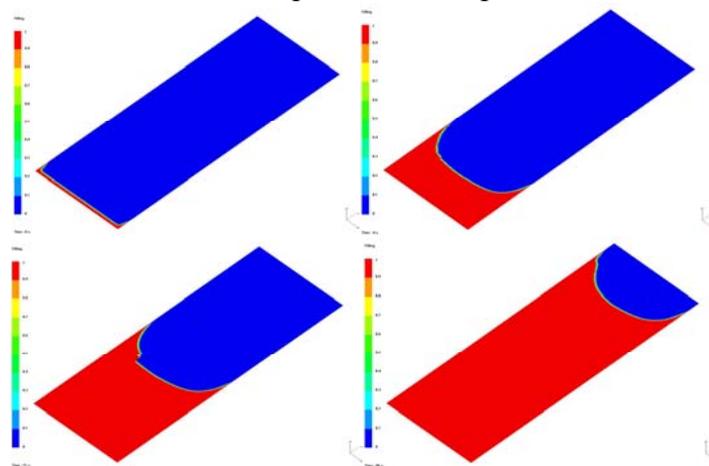


Рис.4. Визуализация процесса пропитки 1-й пластины для различных моментов времени

Расчёт на компьютере проходил в два этапа:

- а) подготовка геометрии к моделированию, создание конечно-элементной сетки;
- б) импорт полученной сетки в PAM-RTM и проведение расчётов.

Подготовка сетки осуществлялась в программном продукте Visual mesh компании ESI Group. Размеры элементов сетки выбирались произвольным образом, так, чтобы получить наглядную картину течения. Пластина разбивалась на элементы одинакового размера. Граничный слой по бокам задавался специальным функционалом программы, позволяющим построить области заданной ширины с более мелкой сеткой.

Стоит отметить, что используемый программный комплекс основан на линейном законе Дарси, который работает только в предположении, что течение стационарное, поэтому хорошего совпадения расчетного времени пропитки с экспериментальными значениями не наблюдалось. Кроме того, числа Рейнольдса для течения, подчиняющегося линейному закону Дарси, очень малы ($Re \ll 1$). Предложены различные формулы для определения числа Re , дающие его разные критические значения $Re_{кр}$, при которых происходит отклонение процесса фильтрации от линейного закона Дарси. Однако, при этом, для одной и той же пористой среды величина $Re_{кр}$ при расчетах по разным эмпирическим формулам может сильно

меняться [8,9].

Расчетные картины фронта течения связующего (рис.4), были вполне приемлемыми с экспериментальными данными, но только в том случае, когда в расчетах в пристенном слое наполнителя проницаемость материала задавалась несколько выше по отношению с ее значением в центре потока.

Программное моделирование процесса RTM было затруднено в виду неизвестности истинной пористости и проницаемости граничных зон, а также случайной их формы и размеров ввиду того, что укладка ткани производилась вручную.

Результаты экспериментальных исследований указывают на необходимость уточнения математической модели процесса пропитки под давлением, которая должна учитывать как нестационарность процесса, так и изменение проницаемости в граничной области.

Единственной физической характеристикой пропитываемого сухого наполнителя в процессе пропитки является его коэффициент проницаемости K , не зависящий от свойств связующего и являющийся геометрической характеристикой пропитываемой основы. Проницаемость представляет собой проводимость пористой среды под влиянием перепада давления и является мерой подачи жидкости через эту среду под действием проталкивающего давления.

Для экспериментального определения значения коэффициента проницаемости K воспользуемся моделью Бринкмана, описывающая течение вязкой жидкости через пористую среду [10,11]. Отметим, что уравнение Бринкмана объединяет как закон Дарси, так и вязкую составляющую.

Рассмотрим слоистое фильтрационное течение вязкой несжимаемой жидкости в канале, ограниченном двумя параллельными плоскими стенками расстояние между которыми равно $2b$. Для случая, когда перепад давления в продольном направлении постоянен ($dp/dx = \text{const}$) одномерное уравнение Бринкмана имеет следующий вид:

$$\frac{dp}{dx} = \mu \frac{d^2u}{dy^2} - \alpha u, \quad (2)$$

где $\frac{dp}{dx} = \frac{p_1 - p_2}{l} = \frac{\Delta p}{l}$; Δp – перепад давления, действующего на жидкость; l – длина пути в направлении пропитки образца; μ – динамическая вязкость; $\alpha = \mu/K$; K – коэффициент проницаемости пористой среды.

Общее решение уравнения (2) запишется в виде

$$u(y) = C_1 e^{\sqrt{\frac{1}{K}}y} + C_2 e^{-\sqrt{\frac{1}{K}}y} - \frac{\Delta p}{l} \frac{K}{\mu}. \quad (3)$$

Здесь C_1, C_2 – константы интегрирования.

Константы интегрирования найдем из граничных условий прилипания на стенках: $u(\pm b) = 0$. В результате решение (3) запишется следующим образом:

$$u(y) = \frac{\Delta p}{l} \frac{K}{\mu} \frac{\left(e^{\sqrt{\frac{1}{K}}b} - e^{-\sqrt{\frac{1}{K}}b} \right)}{\left(e^{2\sqrt{\frac{1}{K}}b} - e^{-2\sqrt{\frac{1}{K}}b} \right)} \left[e^{\sqrt{\frac{1}{K}}y} + e^{-\sqrt{\frac{1}{K}}y} \right] - \frac{\Delta p}{l} \frac{K}{\mu}. \quad (4)$$

Вычисляя секундный объемный расход Q вязкой жидкости, найдем выражение

$$Q = \int_{-b}^b u(y) dy = \frac{\Delta p}{l} \frac{K}{\mu} \left[\frac{2e^{2\sqrt{\frac{1}{K}b}} + 2e^{-2\sqrt{\frac{1}{K}b}} - 4}{\left(e^{2\sqrt{\frac{1}{K}b}} - e^{-2\sqrt{\frac{1}{K}b}} \right) \sqrt{\frac{1}{K}}} - 2b \right], \quad (5)$$

откуда, зная экспериментально величину Q , можно численным способом, например, используя метод итераций [12], определить искомый коэффициент проницаемости K .

Список литературы

1. Нелюб В.А. Применение прямых методов формования при производстве крупногабаритных деталей из стеклопластиков / В.А. Нелюб, Д.В. Гращенков, Д.И. Коган и др. // Химическая технология. – 2012. – Т.13. – №12. С.735 – 739.
2. Афанасьев Д.В. Безавтоклавные технологии / Д.В. Афанасьев, М.Ю. Ощепков // Композитный мир. – 2010. – №5. С.28 – 37.
3. Душин М.И. Особенности изготовления изделий из ПКМ методом пропитки под давлением / М.И. Душин, А.В. Хрульков, Р.Р. Мухаметов и др. // Авиационные материалы и технологии. – 2012. – №1. С.18 – 26.
4. Басов И.Н. Техника переработки пластмасс/ Под ред. И.Н.Басова. М.: Химия. –1985. – 480 с.
5. Милова Д.А. Фильтрационное течение жидкости в пристенной области плоского канала / Д.А. Милова, В.А. Балашов, Б.В. Симонов // Известия ВолгГТУ. – 2010. – №1. С.59 – 61.
6. Пушнов А.С. Расчет средней пористости зернистого слоя / А.С.Пушнов // Химическое и нефтегазовое машиностроение. – 2006. – №1. С.45 – 49.
7. www.esi-group.com, www.esi-russia.ru.
8. Берд Р. Явление переноса / Р. Берд, В. Стьюарт, Е. Лайтфут. – М.: Химия. – 1974. – 688 с.
9. Дульнев Г.Н. Процессы переноса в неоднородных средах / Г.Н.Дульнев, В.В.Новиков. – М.: Энергоатомиздат. – 1991. –224 с.
10. Brinkman Н.С. On the permeability of media consisting of closely packed porous particles / Н.С. Brinkman // Appl. Scient. Res. A 1. – 1947. P.81 – 86.
11. Филиппов А.Н. Течение жидкости внутри цилиндрического капилляра, стенки которого покрыты пористым слоем (гелем) / А.Н.Филиппов, Д.Ю.Ханукаева, С.И.Васин и др. // Коллоидный журнал. – 2013. – Т.75. – №2. С.237 – 249.
12. Амосов А.А. Вычислительные методы для инженеров / А.А. Амосов, Ю.А. Дубинский, Н.В. Копченова. – М.: Высшая школа. – 1994. – 544 с.

МЕТОДЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЯ ЗАБОЛЕВАНИЙ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТОЙ СИСТЕМЫ

С.Е.Головенкин¹, Д.А.Россиев¹, О.Г. Овечкин², Г.В.Матюшин¹, Е.Ю.Пелипецкая¹

¹Красноярский Государственный медицинский университет,
кафедра внутренних болезней № 1, gse2008@mail.ru

²Военный госпиталь в/ч 52630, г.Чита

Разработка математических методов решения медико-биологических задач ведется уже не одну сотню лет. Учеными предложено огромное количество способов проверки гипотез и продукции выводов. В истории разработки этих методов прослеживаются два периода наибольшего интереса теоретиков и практиков. Первый период наблюдался в 60-е годы, когда были разработаны методы анализа, получившие некоторое распространение и вызвавшие волну публикаций. Среди них - анализ Вальда [1], применяющийся до сих пор, матричные алгоритмы, основанные на анализе присутствия или отсутствия признаков [2], методы правдоподобия (анализ частот встречаемости признаков при двух или более заболеваниях [3]), алгоритмы, основанные на логике фазового интервала (состояние выражается в виде совокупности точек в пространстве признаков [4]), вероятностные методы [5]. Довольно широкую популярность приобрели алгоритмы, основанные на поиске клинического прецедента [6]. Общим признаком, объединяющим все эти и другие традиционные методы, несмотря на их разнообразие, является наличие явных алгоритмов принятия решений [7]. Диагностический алгоритм включает в себя совокупность правил, определяющих порядок переработки медицинской информации с целью постановки диагноза. Несмотря на то, что наиболее популярные методы до сих пор активно используются в теоретической биологии и медицине [8], в практической медицине они не нашли широкого применения. Это связано, во-первых, с тем, что методы, ориентированные на обработку групповых данных, слабо применимы к отдельным объектам, а во-вторых, с особенностями самой медико-биологической информации. Решения в медицинских и биологических задачах зависят от огромного количества неодинаковых по значимости факторов. Поэтому, даже если удастся выстроить правила вывода, связывающие условия задачи с решением, метод, как правило, хорошо работает только на той группе объектов, на которой производились исследования. Естественно, создать универсальный алгоритм невозможно, и при использовании метода для другой подобной группы объектов его придется полностью переконструировать практически заново. Многолетние исследования, проводимые с самыми различными явными алгоритмами, показали, что медицинские задачи, имеющие неявный характер, решаются явными методами с точностью и удобством, совершенно недостаточными для широкого практического использования в конкретных задачах диагностики, прогнозирования и принятия решений. Поэтому в настоящее время наблюдается второй всплеск интереса к диагностическим системам. Он направлен на принципиально новое поколение решающих алгоритмов, являющихся неявными и обладающих способностью к самонастройке, которая может осуществляться на минимальном количестве данных. Основной группой таких алгоритмов, развиваемой сейчас наиболее интенсивно, являются нейросетевые методы [9].

Поиски и изучение неявных алгоритмов, позволяющих автоматически накапливать и затем использовать опыт при обучении, продолжаются уже более 100 лет. Однако первые серьезные попытки создания нейронных сетей были сделаны в 40-50-х годах, когда У.Маккалох и У.Питтс выдвинули основные положения теории работы головного мозга. Естественно, что с появлением дешевых ЭВМ произошел резкий скачок в этой области, которая в начале 80-х годов сформировалась в целую науку - нейроинформатику [10].

Неявные задачи медицины и биологии явились идеальным полем для применения нейросетевых технологий, и именно в этой области наблюдается наиболее яркий практический успех нейроинформационных методов.

Наибольший интерес для практического здравоохранения представляют системы для диагностики и дифференциальной диагностики заболеваний. При этом для принятия решений могут использоваться самые разнообразные данные - анамнез, клинический осмотр, результаты лабораторных тестов и сложных функциональных методов. Список областей медицины, в которых начали применяться новые технологии, чрезвычайно обширен и продолжает расти.

В области пульмонологии начаты исследования по применению нейронных сетей для дифференциальной диагностики интерстициальных заболеваний легких [11]. Конструируемая система обучается различать 9 диагнозов по 20 параметрам клинического состояния и данным рентгенографии. Появились работы с применением нейротехнологий для диагностики бронхиальной астмы [12], острой тромбоэмболии легких [13], рака легких [14]. Несколько работ посвящено решению задачи определения оптимальных параметров искусственного дыхания [15, 16]. Нейронные сети обучаются поддерживать оптимальный режим вентиляции легких и работают более гибко, чем системы, основанные на жестком алгоритме.

Одним из наиболее интенсивно развиваемых направлений является применение нейросетей в кардиологии.

В Италии разработана чрезвычайно интересная экспертная система для диагностики и лечения артериальной гипертонии [17]. Система включает в себя три нейросетевых модуля, причем ответы одних являются входными данными для других. В начале исследования больному проводят измерение систолического и диастолического давления каждые полчаса в течение суток. Данные за каждый час усредняются. Таким образом, образуется массив из 48 величин артериального давления (по 24 для систолического и диастолического). После этого первый модуль, состоящий из двух трехслойных нейросетей (в каждой из которых 2 входных, 4 "скрытых" и 24 выходных нейрона), на основании данных о поле и возрасте больного рассчитывает аналогичные "должные" величины и сравнивает их с реальными. Параллельно второй модуль (двухслойная нейросеть с 17 входными и 4 выходными нейронами) на основании клинических данных (симптоматика, анамнез) рассчитывает возможные сочетания гипотензивных лекарственных средств, которые могут быть использованы для лечения данного больного. Данные, снятые с выходов обоих модулей, вместе с клиническими данными подаются на вход последнего, третьего модуля (6-слойная нейросеть). Этот модуль оперирует 4 группами гипотензивных препаратов (диуретики, бетаадреноблокаторы, ингибиторы ангиотензина, блокаторы кальциевых каналов). Цель - назначить суточный (почасовой) график приема больным лекарств каждой (если

требуется) из 4 групп. Поэтому этот модуль имеет 96 выходных нейронов (4 препарата x 24 часа). С каждого выходного нейрона снимается доза, соответствующая одному препарату, назначаемому на данный час суток. Естественно, что в реальной ситуации большинство выходных данных равны нулю. Таким образом, создается оптимальная для пациента схема лечения гипертонии. Нужно отметить, что система учитывает некоторые особенности приема препаратов больными, например, затруднение приема препаратов ночью (назначает ночной прием только в крайних случаях), запрет на назначение мочегонных лекарств на ночь. Отличительной чертой системы является возможность пользователя (врача) передавать нейронной сети свой опыт. Для этого создателями программы предусмотрен специальный блок, который выводит на экран компьютера суточные кривые артериального давления и предлагает врачу ввести в компьютер суточную схему приема гипотензивных препаратов в необходимых, по его мнению, дозах. Введенный пример помещается в базу данных. В любое время можно инициировать доучивание нейронных сетей с новыми примерами.

В работе [18] описывается нейронная сеть для диагностики коронарного атеросклероза на ранних стадиях. Диагноз выставляется на основании таких параметров, как пол, возраст, вес, рост, курительные привычки; данных семейного анамнеза, наличия у обследуемого диабета, показателей систолического и диастолического артериального давления, уровня холестерина и липопротеидов различных классов в крови.

Большое внимание уделяется применению нейросетей для диагностики атеросклероза. Нейросети могут проводить диагностику и определение стадии атеросклероза по рентгенологическим данным [19] и по акустическим сигналам [20].

Проводится комплекс исследований по использованию нейросетей для диагностики инфаркта миокарда [21]. Автор приводит данные по чувствительности (77,7%) и специфичности (97,2%) нейросетевого теста. В работе, кроме того, с помощью нейронной сети устанавливали диагностическую значимость клинических параметров при диагностике инфаркта миокарда.

Нейросети используются терапевтами для диагностики заболеваний печени по лабораторным данным исследования функций печени [22], желчного пузыря [23], диагностики панкреатита [24], изучения характера камней в почках [25].

Актуальная проблема диагностики злокачественных новообразований, возможно, получит новый уровень осмысления с началом применения нейроалгоритмов. Так, в работе [26] показана 80%-я точность ранней диагностики меланом кожи - одного из самых злокачественных новообразований. Наличие скрытых метастазов этого же заболевания определяется с помощью нейросетевой интерпретации данных хроматографии мочи.

Описываются методы диагностики почечных карцином по данным УЗИ [27] и гепатоцеллюлярных карцином по данным ядерной морфометрии [28], ранняя диагностика рака печени по данным рентгенограмм и ультрасонограмм [29], диагностика и прогноз рака простаты [30], диагностика остеопороза и костных образований, а также дифференциальная диагностика злокачественных и доброкачественных костных опухолей [31].

Большое внимание в публикуемых работах уделяется нейросетевой диагностике опухолей молочной железы, представляющих серьезную медико-социальную

проблему. Так, по 9 параметрам анализа крови осуществляется дифференциальная диагностика злокачественных и доброкачественных опухолей молочной железы [32]. Однако, описываемая нейросеть смогла обучиться ставить верный диагноз только у 80% примеров обучающей выборки. Результат тестирования на контрольной выборке - 84% верных диагнозов. Диагностику опухолей молочной железы проводят также по данным УЗИ [33].

Классической проблемой в кардиологии является интерпретация электрокардиограмм, требующая значительного опыта врача. Сотрудники Университета Глазго (Великобритания) ведут исследования по применению нейросетей для ЭКГ-диагностики инфарктов миокарда [34]. Входными данными для сетей являются избранные параметры 12-канальной электрокардиограммы и 12-канальной векторкардиограммы (длины зубцов, расстояния между зубцами). Исследователи обучили огромное количество нейросетей (167 сетей для диагностики инфаркта миокарда передней стенки и 139 сетей для инфаркта нижней стенки) на массиве данных из 360 электрокардиограмм. Обученные сети затем тестировали отдельную выборку с заранее известными ответами (493 случая). Одновременно для получения отдельной серии ответов на тестируемой выборке был использован логический метод (с заранее заданным алгоритмом). Затем сравнивались результаты тестирования выборки лучшими нейросетями и с помощью логического алгоритма. Сравнение показало, что во многих случаях чувствительность и специфичность нейросетевого теста оказались выше, чем у логического метода. Авторы делают справедливый вывод, что в случаях, когда логический алгоритм решения задачи все-таки можно выстроить, разумно комбинировать в экспертных системах оба подхода. Эти же авторы применили нейросети для дифференцировки фибрилляции предсердий от желудочковых и наджелудочковых экстрасистол, возникающих на фоне синусового ритма.

Интерпретация ЭКГ с помощью нейросетей [35] была применена для диагностики злокачественных желудочковых аритмий. Трехслойная сеть с 230 входными синапсами была обучена на 190 пациентов (114 с хронической сердечной недостаточностью и 34 с дилатационной миокардиопатией) различать наличие (у 71 пациента) и отсутствие (у 119 пациентов) желудочковой тахикардии. Результаты тестирования сравнивались с логическим методом интерпретации данных. Показано, что нейросетевой тест обладает большей чувствительностью (73% по сравнению с 70 для логического метода) и специфичностью (83 и 59%). Эти же авторы использовали нейронные сети для интерпретации ЭКГ в диагностике дилатационных кардиомиопатий.

Интересная работа описывает моделирование применения нейросетей для работы электрокардиостимуляторов (искусственных водителей ритма) [36]. Выпускаемые за рубежом электрокардиостимуляторы задают ритм не жестко, а в зависимости от исходного ритма, генерируемого синусовым узлом сердца. Например, если синусовый узел при какой-либо патологии генерирует недостаточное количество импульсов, водитель ритма компенсирует ритм. Таким образом, электрокардиостимулятор представляет собой систему вход→преобразование→выход, где входом является ритм синусового узла, выходом - собственный ритм электрокардиостимулятора, а преобразование осуществляется по заданному логическому алгоритму. Авторы смоделировали замену логического преобразователя

нейронной сетью, так как взаимоотношения между генерацией импульсов в синусовом узле и требуемым ритмом не линейны и применяемые алгоритмы на практике не всегда эффективны. Нейросеть, обученная на 27 здоровых людях в ситуациях с различной физической нагрузкой, показала гораздо лучшую способность задавать ритм, чем логический алгоритм, применяющийся в электрокардиостимуляторе.

Созданы нейросетевые экспертные системы для классификации опухолей молочной железы (определения, доброкачественная опухоль, или злокачественная) по данным маммографии (сканограмма молочной железы) [37]. По данным, которые приводят авторы, точность такого вывода до применения нейросети составляла не более 75%. При тестировании системы, нейросеть, анализирующая сканограмму, давала правильный ответ в 100% случаев. При тестировании изображение, получаемое в результате метода, представляется в виде матрицы точек размером 1024x1024 пиксела с 10-битовой шкалой яркости. Изображение подается на нейросеть, имеющую 2 входных, 80 "скрытых" и 2 выходных нейрона. При этом один из выходных нейронов "отвечает" за доброкачественную опухоль, другой за злокачественную. Диагноз определяется в зависимости от выходного нейрона, выдавшего больший по величине ответ. Столь высокий процент правильности распознавания, возможно, случаен, и объясняется недостаточным количеством примеров, использовавшихся при обучении и тестировании нейросети (по 10 примеров). Однако даже при такой малой обучающей выборке нейросеть выигрывала по сравнению с традиционным методом интерпретации сканограммы.

Несколько работ посвящены нейросетевой обработке лабораторных анализов и тестов. Приводится нейросетевой метод интерпретации лабораторных данных биохимического анализа крови [38]. В работе показаны преимущества нейронных сетей в сравнении с линейным дискриминантным анализом, которым параллельно обрабатывались данные. Описываются обработка нейросетями цитогенетических данных [39] и интерпретация данных иммунного анализа [40].

Особое место среди нейросетевых экспертных систем занимают прогностические модели, применяемые, например, для прогнозирования исходов заболеваний.

В 1990 году американская фирма "Апачи Медикл Системз Инк." установила в реанимационном отделении одной из больниц штата Мичиган экспертную систему "Апачи - III" [41]. Ее цель - прогнозирование исхода заболевания у больных, находящихся в тяжелом состоянии. Для прогноза в компьютер необходимо ввести 27 параметров больного: первичный диагноз, симптомы, степень утраты сознания, наличие или отсутствие СПИД и других заболеваний. После этого система выдает вероятность выживания больного в диапазоне от 0 до 100 процентов. Ценность применения системы заключается в том, что она позволяет очень быстро оценить динамику изменения состояния больного, незаметную "на глаз". Например, можно получить ответ у системы до и после введения какого-либо лекарства, и, сравнив ответы, посмотреть, будет ли наблюдаться эффект от терапии. Без программы же изменение состояния иногда не удастся обнаружить в течение нескольких дней. Тестирование показало, что прогноз, который делает программа, сбывается с точностью 97%, что значительно точнее, чем у лучших врачей. Необходимо отметить, что система была обучена на данных, взятых из историй болезней 17448 пациентов,

лечившихся в 40 больницах штата в 1989 году. Очевидно, что если качество работы системы обеспечивается таким большим объемом выборки, возможности перенастройки системы не слишком велики. Идеология авторов, создавших эту систему, заключается в как можно большем охвате различных примеров и вариантов (сбор данных в 40 больницах), а не в возможности индивидуализации системы к конкретной клинике. Поэтому данная система не способна к подучиванию в процессе работы, опыт "зашит" в нее жестко. Это может быть существенным недостатком при установке программы в регионы, резко отличающиеся по социально-географическим условиям от тех, где проводилось обучение. Кроме того, огромный массив примеров для обучения повышает стоимость программы.

Прогностические нейросетевые модели могут использоваться в демографии и организации здравоохранения. Создана экспертная система, предсказывающая, умрет ли человек (в возрасте 55 лет и старше) в ближайшие 10 лет. Прогноз делается по результатам ответов на 18 вопросов анкеты. В анкету включены такие вопросы, как раса, пол, возраст, вредные привычки, семейное положение, семейный доход. 4 из 18 вопросов выявляют индекс массы тела (body mass index) в различные периоды жизни респондента. Индекс рассчитывается как отношение веса к квадрату роста (индекс более 27 кг/м считается тучностью). Повышенное внимание к этому показателю говорит о его значимости для прогноза жизни.

Развитие нейросетевых методов дает возможность их использования как инструмента научных исследований, с помощью которого можно изучать объекты и явления.

Судя по литературным данным, именно биологические научные исследования являются наиболее развиваемой областью применения нейросетей [42]. В последнее время биологи, знакомые с исследованиями в области нейроинформатики, приходят к выводу, что многие системы в живых организмах работают по принципам, сходным с алгоритмами нейронных сетей (или наоборот, нейронные сети работают по принципу биосистем). Таким образом, можно наблюдать "взаимное стимулирование" научных разработок в биологии и нейроинформатике. В работе [43] эндокринная система человека рассматривается как нейронная сеть из 30 элементов, которые представлены различными гормонами, взаимодействующими друг с другом с помощью прямых и обратных связей. Похожие исследования проводятся для иммунной системы [44]. Японские ученые [45] использовали нейросеть для экспериментов по моделированию нервной системы простых организмов.

Применение нейросетей для исследований в области нейрофизиологии строится на похожих принципах функционирования нейросетей и нервных структур живых организмов. С помощью нейросети осуществлена попытка моделирования простейшей нервной системы [46], ассоциативной памяти [47], глазодвигательной функции [48], функции мочевого пузыря [49].

Сделана попытка применения нейросети для классификации живых организмов [50]: нередко биологам, открывающим новые виды организмов, требуется определить, к какому виду (классу, типу) относится тот или иной представитель флоры или фауны (как правило, это касается микроорганизмов и растений). Система способна работать при отсутствии некоторых входных данных. Это является существенным

преимуществом, так как часто при изучении живых объектов не всегда возможно получить всю необходимую информацию

Таким образом, обзор публикаций, посвященный применению экспертных систем в медицине и биологии позволяет сказать, что математические методы и вычислительная техника уверенно вошли в нашу жизнь и успешно помогают человеку в научных исследованиях и практической деятельности.

Список литературы

1. Вальд А. Последовательный анализ. М.: Физматгиз, 1960.- 76 с.
2. Быховский М.Л., Вишневский А.А., Харнас С.Ш. Вопросы построения диагностического процесса при помощи математических машин // Экспериментальная хирургия и анестезиология.- 1961.- N.4.- С.3-15.
3. Lipkin M. The likelihood concept in differential diagnosis // *Perspect. Biol. Med.*- 1964.- N.7.- P.485-497.
4. Быховский М.Л. Метод фазового интервала в проблеме диагностики // Экспериментальная хирургия и анестезиология.- 1962.- N.2.- С.16-19.
5. Todd B.S., Stamper R., Macpherson P. A probabilistic rule-based expert system // *Int. J. Biomed. Comput.*- 1993.- V.33, N.2.- P.129-148.
6. Артоболевский И.И., Вишневский А.А., Быховский М.Л. Информационно-поисковые системы в медицине // *Машинная диагностика и информационный поиск в медицине.*- М.: Наука, 1969.- С.19-34.
7. Гублер Е.В. Вычислительные методы анализа и распознавания патологических процессов. Л.: Медицина, 1978.- 294 с.
8. Марасанов В.В. Математические модели дифференциальной диагностики заболеваний. Кишинев: Штиинца, 1973.- 62 с.
9. Shufflebarger C.M. What is neural network? // *Ann. Emerg. Med.*- 1992.- V.21, N.12.- P.1461-1462.
10. Stefanuk V.L. Expert systems and its applications // *The lectures of Union's workshop on the main problems of artificial intelligence and intellectual systems. Part 2, Minsk, 1990.*- P.36-55.
11. Asada N., Doi K., MacMahon H. et al. Potential usefulness of an artificial neural networks for differential diagnosis of interstitial lung diseases: pilot study // *Radiology.*- 1990.- V.177, N.3.- P.857-860.
12. Moseholm L., Taudorf E., Frosig A. Pulmonary function changes in asthmatics associated with low-level SO₂ and NO₂ air pollution, weather, and medicine intake. An 8-month prospective study analyzed by neural networks // *Allergy.*- 1993.- V.48, N.5.- P.334-344.
13. Patil S., Henry J.W., Rubenfire M. et al. Neural network in the clinical diagnosis of acute pulmonary embolism // *Chest.*- 1993.- V.104, N.6.- P.1685-1689.
14. Chiou Y.S., Lure Y.M. Hybrid lung nodule detection (HLND) system // *Cancer Lett.*- 1994.- V.77, N.2-3.- P.119-126.
15. Ashutosh K., Lee H., Mohan C.K et al. Prediction criteria for successful weaning from respiratory support: statistical and connectionist analyses // *Crit. Care Med.*- 1992.- V.20, N.9.- P.1295-1301.
16. Snowden S., Brownlee K.G., Smye S.W. et al. An advisory system for artificial ventilation of the newborn utilizing a neural network // *Med. Inf. Lond.*- 1993.- V.18, N.4.- P.367-376.

- 17.Poli R., Cagnoni S., Livi R. et al. A Neural Network Expert System for Diagnosing and Treating Hypertension // Computer.- 1991.- N.3.- P.64-71.
- 18.Bertolucci E., Mariotti R., Biadi O. et al. Two different neural network models for coronary artery disease classification // Eur. Heart J.- 1993.- V.14.- Abstr. Supplement XVth Congress of the European Society of Cardiology, August, 1993.- (348).- P.23.
- 19.Fujita H., Horita K., Endo T. et al. Neural Network Approach to Classification of Benign and Malignant Tumours in Mammograms // Med. Imag. Tech.- 1992.- V.10.- P.126-129.
- 20.Akay M., Welkowitz W. Acoustical detection of coronary occlusions using neural networks // J. Biomed. Eng.- 1993.- V.15, N.6.- P.469-473.
- 21.Baxt W.G. A neural network trained to identify the presence of myocardial infarction bases some decisions on clinical associations that differ from accepted clinical teaching // Med. Decis. Making.- 1994.- V.14, N.3.- P.217-222.
- 22.Okamoto Y., Nakano H., Yoshikawa M. et al. Study on decision support system for the interpretation of laboratory data by an artificial neural network // Rinsho. Byori.- 1994.- V.42, N.2.- P.195-199.
- 23.Rinast E., Linder R., Weiss H.D. Neural network approach for computer-assisted interpretation of ultrasound images of the gallbladder // Eur. J. Radiol.- 1993.- V.17, N.3.- P.175-178.
- 24.Kazmierczak S.C., Catrou P.G., Van-Lente F. Diagnostic accuracy of pancreatic enzymes evaluated by use of multivariate data analysis // Clin. Chem.- 1993.- V.39, N.9.- P.1960-1965.
- 25.Volmer M., Wolthers B.G., Metting H.J. et al. Artificial neural network predictions of urinary calculus compositions analyzed with infrared spectroscopy // Clin. Chem.- 1994.- V.40, N.9.- P.1692-1697.
- 26.Ercal F., Chawla A., Stoeker W.V. et al. Neural network diagnosis of malignant melanoma from color images // IEEE Trans. Biomed. Eng.- 1994.- V.41, N.9.- P.837-845.
- 27.Maclin P.S., Dempsey J., Brooks J. et al. Using neural networks to diagnose cancer // J. Med. Syst.- 1991.- V.15, N.1.- P.11-19.
- 28.Erler B.S., Hsu L., Truong H.M. et al. Image analysis and diagnostic classification of hepatocellular carcinoma using neural networks and multivariate discriminant functions // Lab. Invest.- 1994.- V.71, N.3.- P.446-451.
- 29.Maclin P.S., Dempsey J. How to improve a neural network for early detection of hepatic cancer // Cancer Lett.- 1994.- V.77, N.2-3.- P.95-101.
- 30.Snow P.B., Smith D.S., Catalona W.J. Artificial neural networks in the diagnosis and prognosis of prostate cancer: a pilot study // J. Urol.- 1994.- V.152, N.5.- P.1923-1926.
- 31.Piraino D.W., Amartur S.C., Richmond B.J et al. Segmentation of magnetic resonance images using an artificial neural network // Proc. Annu. Symp. Comput. Appl. Med. Care.- 1991.- P.470-472.
- 32.Astion M.L., Wilding P. Application of neural networks to the interpretation of laboratory data in cancer diagnosis // Clin. Chem.- 1992.- V.38, N.1.- P.34-38.
- 33.Goldberg V., Manduca A., Ewert D.L. et al. Improvement in specificity of ultrasonography for diagnosis of breast tumours by means of artificial intelligence // Med. Phys.- 1992.- V.19, N.6.- P.1475-1481.
- 34.Yang T.-F., Devine B., Macfarlane P.W. Combination of artificial neural networks and deterministic logic in the electrocardiogram diagnosis of inferior myocardial infarction //

- Eur. Heart J.- 1994.- V.15.- Abstr. Supplement XII-th World Congress Cardiology (2408).- P.449.
35. Bortolan G., Willems J.L. Diagnostic ECG classification based on neural networks // J. Electrocardiol.- 1993.- V.26, Suppl.- P.75-79.
 36. Nakajima H., Anbe J., Egoh Y. et al. Evaluation of neural network rate regulation system in dual activity sensor rate adaptive pacer // European Journal of Cardiac Pacing and Electrophysiology.- Abstracts of 9th International Congress, Nice Acropolis - French, Rivera, June 15-18, (228), 1994.- Rivera, 1994.- P.54.
 37. Zhang W., Doi K., Giger M.L. et al. Computerized detection of clustered microcalcifications in digital mammograms using a shift-invariant artificial neural network // Med. Phys.- 1994.- V.21, N.4.- P.517-524.
 38. Reinbnerger G., Weiss G., Werner-Felmayer G. et al. Neural networks as a tool for utilizing laboratory information: comparison with linear discriminant analysis and with classification and regression trees // Proc. Natl. Acad. Sci., USA.- 1991.- V.88, N.24.- P.11426-11430.
 39. Molnar B., Szentirmay Z., Bodo M. et al. Application of multivariate, fuzzy set and neural network analysis in quantitative cytological examinations // Anal. Cell Pathol.- 1993.- V.5, N.3.- P.161-175.
 40. Vertosick F.T., Rehn T. Predicting behavior of an enzyme-linked immunoassay model by using commercially available neural network software // Clin. Chem.- 1993.- V.39, N.12.- P.2478-2482.
 41. Шварц Э., Трис Д. Программы, умеющие думать // Бизнес Уик.- 1992.- N.6.- С.15-18.
 42. Karim M.N., Rivera S.L. Artificial neural networks in bioprocess static estimation // Adv. Biochem. Eng. Biotechnol.- 1992.- N.46.- P.1-33.
 43. Budilova E.V., Teriokhin A.T. Endocrine networks // The RNNS/IEEE Symposium on Neuroinformatics and Neurocomputers, Rostov-on-Don, Russia, October 7-10, 1992.- Rostov/Don, 1992.- V.2.- P.729-737.
 44. Varela F.J., Coutinho A., Dupire B. et al. Cognitive networks: immune, neural and otherwise // Teoretical immunology. Ed. by Perelson A.- Addison Wesley, 1988.- Part 2.- P.359-375.
 45. Yamada S., Nakashima M., Shiono S. Neural Network Model to Simulate Neuronal Responses of Aplysia Gillwithdrawal Reflex // Proceedings of 1993 International Joint Conference on Neural Networks, Nagoya, Japan, October 25-29, 1993.- Nagoya, 1993.- V.1.- P.37-40.
 46. Van Leeuwen J.L. Neural network simulations of the nervous system // Eur. J. Morphol.- 1990.- V.28, N.2-4.- P.139-147.
 47. Carrie J.R. Evaluation of a neyral network model of amnesia in diffuse cerebral atrophy // Br. J. Psychiatry.- 1993.- V.163.- P.217-222.
 48. Doricchi F., Guariglia C., Paolucci S. et al. Disturbances of the rapid eye movements (REMs) of REM sleep in patients with unilateral attentional neglect: clue for the understanding of the functional meaning of REMs // Electroencephalogr. Clin. Neurophysiol.- 1993.- V.87, N.3.- P.105-116.
 49. Bastiaanssen E.H., Vanderschoot J., Van-Leeuwen J.L. Learning procedure in a neural control model for the urinary bladder // Neurourol. Urodyn.- 1993.- V.12, N.3.- P.285-288.
 50. Senna A.L., Junior W.M., Carvallo M.L.B., Siqueira A.M. Neural Networks in Biological Taxonomy // Proceedings of 1993 International Joint Conference on Neural Networks, Nagoya, Japan, October 25-29, 1993.- Nagoya, 1993.- V.1.- P.33-36.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ
КВАЗИОДНОМЕРНЫХ ИЗИНГОВСКИХ МАГНЕТИКОВ С
ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ**

Ж.В. Дударева, Д.В.Спирин, В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет,
Институт естественных наук и математики, кафедра теоретической физики и
информационных технологий в образовании, *dudareva82@gmail.com*

В последнее время в понимании физических процессов происходящих в квазиодномерных системах наметился существенный прогресс. Вместе с тем, изучение кинетики квазиодномерных магнетиков уже в течение многих десятилетий остается актуальной задачей [1–14], поскольку в области фазового перехода кинетические свойства тела могут быть описаны набором критических индексов, определяющих законы изменения различных величин, при приближении к точке перехода, к тому же они измеряются экспериментально [9, 14].

В большинстве экспериментальных и теоретических работ исследовались термодинамические и магнитные свойства квазиодномерных ферромагнетиков, а кинетические особенности данных систем практически не рассматривались. В работе рассчитаны динамические индексы, определяющие зависимость времени релаксации от температуры и размера системы. Учтено влияние энергии взаимодействия вторых, третьих соседей и четырехчастичного взаимодействия, а также температуры на указанные параметры квазиодномерного наномангнетика, при наличии внешнего магнитного поля в ориентационном магнитном фазовом переходе антиферромагнетик→ферромагнетик в рамках обобщенной модели Изинга. Рассматривались периодические граничные условия (ПГУ), т.е. одномерная цепочка замкнута в кольцо. В этом случае, энергия одномерного ферромагнетика в безразмерных единицах [6]:

$$E = \frac{\varepsilon}{|j_1|} = -H \sum_{i=1}^N S_i \pm \left(\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} + S_N S_1 \right) - J_2 \left(\sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} + \sum_{i=1}^2 S_{N-2+i} S_i \right) - J_3 \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} + \sum_{i=1}^3 S_{N-3+i} S_i \right) - J_{1-4} \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+1} S_{i+2} S_{i+3} + S_{N-2} S_{N-1} S_N S_1 + S_{N-1} S_N S_1 S_2 + S_N S_1 S_2 S_3 \right), \quad (1)$$

где E и ε - энергия магнетика в безразмерных и энергетических единицах соответственно, j_1 - энергия взаимодействия между ближайшими соседями, J_2 и J_3 - безразмерные энергии взаимодействия вторых и третьих соседей соответственно, J_{1-4} - безразмерная энергия четырехчастичного взаимодействия, H - безразмерная проекция напряженности внешнего магнитного поля на выбранную ось, N - количество атомов (узлов), i - номер узла, а S_i - некоторая величина, принимающая значение +1 или -1. Если магнитный момент i -го атома сонаправлен с выбранным направлением, то S_i равно +1, если нет, то -1. В данной работе исследуется ферромагнетик, т.е. в формуле (1) перед вторым слагаемым стоит знак «-».

В зависимости от обменных сил одномерный магнетик может находиться как в ферромагнитном состоянии, так в антиферромагнитном или в ферримагнитном

состоянии. Это соответствует нескольким различным фазам. В данной работе полагается, что константа обменного взаимодействия ближайших соседей $J_1 > 0$ и энергия минимальна для спинов, направленных в одну сторону. Система вырождена, т.к. одной энергии соответствует несколько различных конфигураций спинов. Начальное состояние задается антиферромагнитным, с течением времени система переходит в ферромагнитное состояние, то есть происходит неравновесный фазовый переход антиферромагнетик – ферромагнетик. Исследовать данный процесс позволяет метод Монте-Карло [11]. Существует несколько разных алгоритмов реализации метода Монте-Карло. Одним из них является алгоритм Метрополиса [11]. С его помощью можно исследовать различные модели магнетиков.

Помимо понятия конфигурации в алгоритме Метрополиса также используется величина T – относительная температура. Она связана с абсолютной температурой T_{abs} соотношением:

$$T = \frac{kT_{abs}}{J_1}, \quad (2)$$

k – постоянная Больцмана, J_1 – энергии взаимодействия в первой координационной сфере. Чем больше температура, тем переход в новое состояние более вероятен.

При исследовании динамики модели использовался алгоритм Метрополиса. Рассчитана зависимость времени релаксации τ магнетика от заявленных в формуле 1 параметров. Из рис. 1 видно, что время релаксации является возрастающей функцией N .

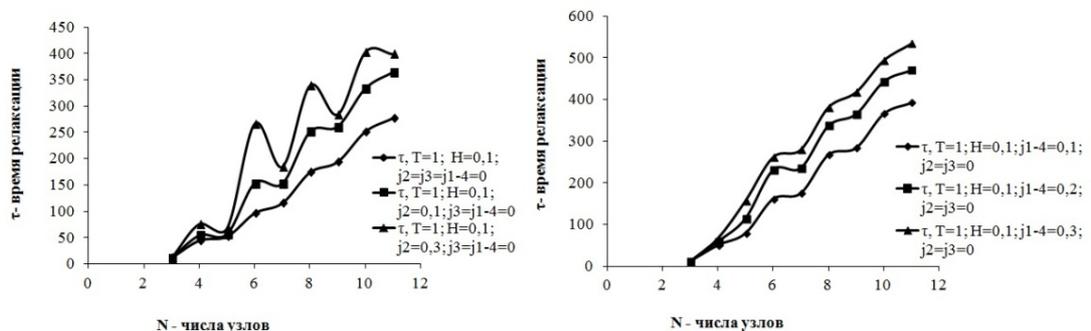


Рис.1. Зависимость времени релаксации τ от числа узлов при изменяющихся значениях а) энергии взаимодействия вторых соседей J_2 . б) четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} . Погрешность расчетов составляет от 3% до 25%.

По графику на рисунке 1, можно проследить, как меняется время релаксации при увеличении энергии взаимодействия вторых соседей, четырехчастичного взаимодействия и размеров системы. С ростом количества узлов N время релаксации значительно увеличивается, причем, чем больше энергии, тем это изменение сильнее. Увеличение энергии взаимодействия вторых соседей, третьих и четырехчастичного взаимодействия также приводит к росту времени достижения системой равновесия.

В критической области время релаксации связано с размером системы через динамический критический индекс z [10]:

$$\tau \propto \xi^z \quad (3)$$

Имея несколько значений времени релаксации τ можно с помощью метода линейной экстраполяции найти значения динамического критического индекса z :

$$z = \frac{\ln\left(\frac{\tau_{i+1}}{\tau_i}\right)}{\ln\left(\frac{N_{i+1}}{N_i}\right)}, \quad (4)$$

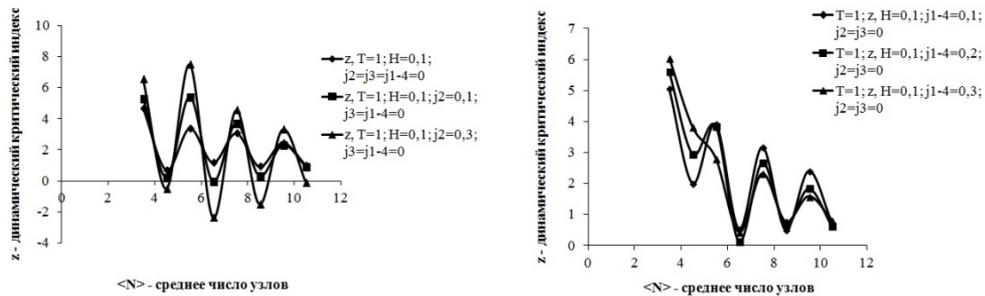


Рис.2. Зависимость динамического критического индекса z от среднего числа узлов системы при изменяющихся значениях а) энергии взаимодействия вторых соседей J_2 . б) четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} . Погрешность расчетов составляет от 26% до 47%.

На рисунке 3 показана зависимость динамического критического индекса z от среднего количества узлов $\langle N \rangle$ при различных энергиях взаимодействия вторых соседей и четырехчастичного взаимодействия. Видим, что зависимость индекса z убывающая функция числа узлов N .

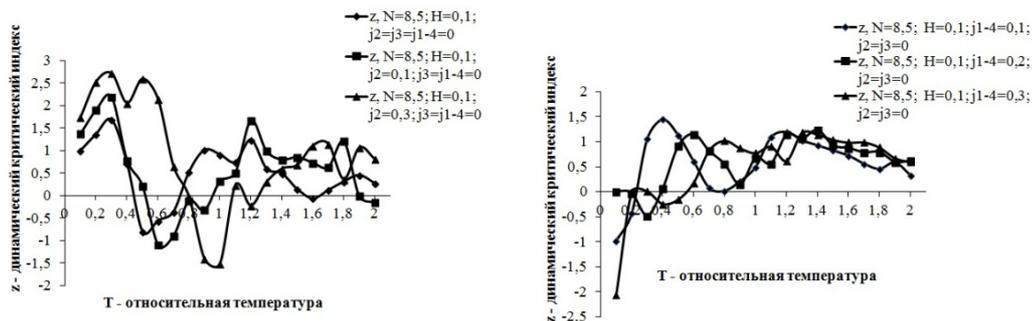


Рис.3. Зависимость динамического критического индекса z от температуры системы при изменяющихся значениях а) энергии взаимодействия вторых соседей J_2 . б) четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} . Погрешность расчетов составляет от 26% до 44%.

Рисунок 3 отображает зависимость динамического критического индекса z от относительной температуры T . Видно, что с ростом температуры критический индекс z убывает. Увеличение энергии взаимодействия вторых, третьих соседей и четырехчастичного взаимодействия приводит к увеличению значений критического индекса z . Вместе с тем, заметим, что значения индекса z в поле $H=0,1$ не превышают 3, это меньше значений без учета внешнего магнитного поля [12].

Кинетический критический индекс Y

Кинетический критический индекс Y характеризует температурную зависимость времени релаксации магнитного перехода антиферромагнетик – ферромагнетик [10]:

$$\tau \propto T^{-Y}, \quad (5)$$

где T – приведенная температура (формула (2)).

Аналогично, имея несколько значений τ , с помощью метода линейной интерполяции мы нашли значения кинетического критического индекса Y .

$$Y = \frac{\ln\left(\frac{\tau_{i+1}}{\tau_i}\right)}{\ln\left(\frac{T_i}{T_{i+1}}\right)}. \quad (6)$$

Рассмотрим влияние температуры на кинетический критический индекс Y .

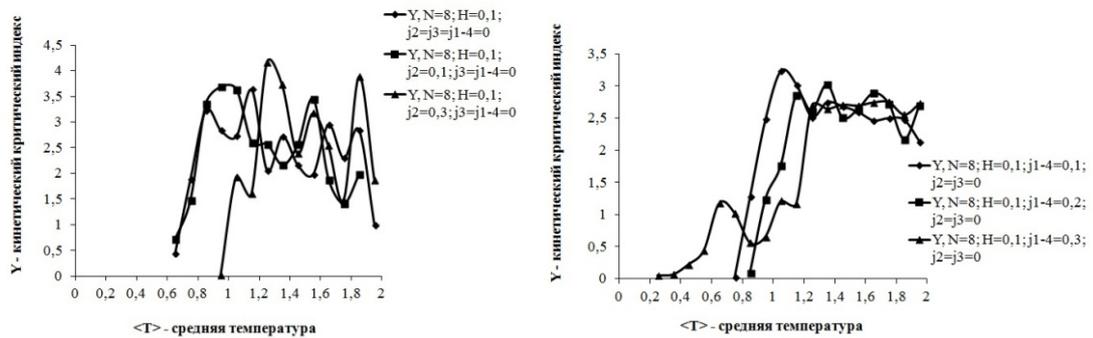


Рис.4. Зависимость кинетический критический индекса Y от температуры при изменяющихся значениях а) энергии взаимодействия вторых соседей J_2 . б) четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} . Погрешность расчетов составляет от 27% до 48%.

С ростом температуры кинетический критический индекс Y растет, рис. 4. Заметим, что в области малых температур, до 0,9, критический индекс Y принимает отрицательные значения, это связано с аномальной зависимостью времени релаксации от температуры (рис. 1). Видно, что для $T < 0,9$ зависимость времени релаксации возрастающая, тогда как теоретически время релаксации при увеличении температуры должно уменьшаться. Наличие аномального диапазона температур, как и в модели «оборванные концы», можно объяснить попаданием системы в метастабильные состояния перед достижением ферромагнитной фазы [5].

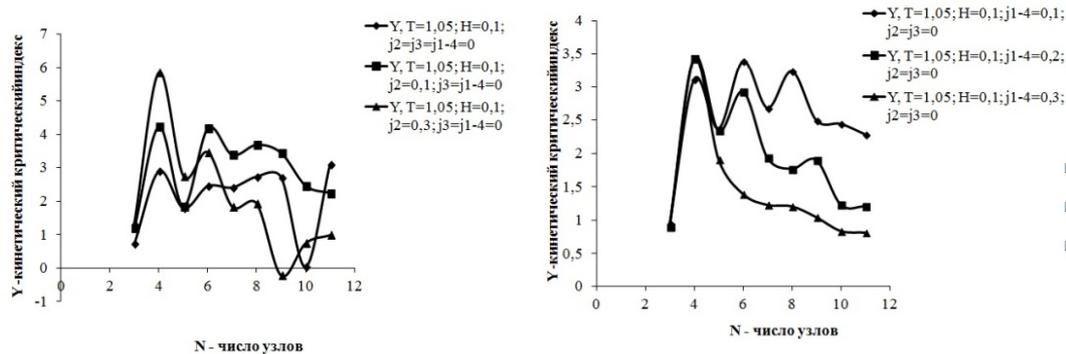


Рис.5. Зависимость кинетического критического индекса Y от числа узлов при изменяющихся значениях а) энергии взаимодействия вторых соседей J_2 . б) четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} . Погрешность расчетов составляет от 31% до 49%.

Из рисунка 5, видно, что при наличии внешнего магнитного поля рост размеров системы приводит к уменьшению критического индекса Y для любого типа взаимодействия. В отсутствии внешнего поля при увеличении количества узлов критический индекс Y возрастает [12]. Кинетический критический индекс Y одномерного изинговского магнетика зависит от типа взаимодействия, числа узлов и температуры. Максимальное значение индекса при напряженности внешнего поля $H = 0,1$ не превышает 6, как и в модели «оборванные концы» [5].

Таким образом, проанализировано поведение времени релаксации, динамического критического индекса z и кинетического критического индекса Y в зависимости от температуры, размеров модели конечного одномерного магнетика при ПГУ, энергии взаимодействия вторых соседей, третьих, четырехчастичного взаимодействия при напряженности внешнего магнитного поля $H = 0,1$.

При исследовании поведения времени релаксации было выявлено, что в области низких температур обнаружена аномальная зависимость характеристик релаксационного процесса. Увеличение энергии взаимодействия вторых соседей, третьих и четырехчастичного взаимодействия также приводит к росту времени достижения системой равновесия.

Значения динамического критического индекса z , превышают 3,5, что больше, чем для трёхмерных макросистем $z = 2$ [13] и в пределах погрешности совпадает с моделью «оборванные концы» [5].

Кинетический критический индекс Y одномерного изинговского магнетика зависит от типа взаимодействия и наличия магнитного поля. С ростом температуры в отсутствие поля кинетический критический индекс Y растет. При наличии поля в области малых температур критический индекс Y принимает отрицательные значения. Тогда как в теории среднего поля $Y = 1$ [13], что говорит о более разнообразном поведении системы.

Список литературы

1. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. 2-е изд. / А.З. Паташинский, В.А. Покровский // — М.: Наука. — 1982. — 382 с.
2. Рубин П.Л. К теории критических флуктуаций / П.Л.Рубин // ЖЭТФ. — 1990. — Т. 97. — №3. — С. 892–900.
3. Удодов В.Н. Фазовые переходы в малых решеточных моделях как аналог переходов в больших системах / В.Н.Удодов, Ю.И.Паскаль, А.И.Потекаев и др. // Металлофизика и новейшие технологии. — 1994. — Т. 16. — №5. — С. 43–51.
4. Спири́н Д.В. Проблема исследования кинетических свойств малого одномерного магнетика / Д.В.Спири́н, В.Н.Удодов // «Пленки 2005». — Материалы международной научной конференции «Тонкие пленки и наноструктуры». — М.: МИРЭА. — 2005. — часть 2. — С. 187–189.
5. Галичина Е.В. Кинетические свойства одномерного изинговского магнетика / Е.В.Галичина, Д.В.Спири́н, В.Н.Удодов // «Физика и химия высокоэнергетических систем». Материалы IV Всероссийской конференции молодых ученых. — Томск: ТМЛ-Пресс. — 2008. — С. 189–192.
6. Удодов В.Н. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах / В.Н.Удодов, А.И.Потекаев, А.А.Попов и др. // ред. В.Н.Удодов. — Абакан: Издательство Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова. — 2008. — 135 с.
7. Спири́н Д.В. Кинетические и равновесные свойства одномерного магнетика / Д.В. Спири́н, В.Н.Удодов, А.И.Потекаев // Ред. журн. «Известия высших учебных заведений. Физика». — Томск. — 2004. — Деп. в ВИНТИ Рег. — № 2059 – В2004 от 27.12.2004. — 12 с.
8. Спири́н Д.В. Кинетические свойства малого одномерного изинговского магнетика / Д.В.Спири́н, В.Н.Удодов, А.И.Потекаев, Н.С.Голосов // Известия высших учебных заведений. Физика. — Томск. — 2005. — Т. 48. — № 4. — С. 65–69.
9. Таратанов Н.А. Исследование состава и строения молибденосодержащих наночастиц в полиэтилене / Н.А.Таратанов, А.В.Козинкин, Г.Ю.Юрков, Т.И.Недосейкина, В.Г.Власенко // Перспективные материалы — М. — 2009. — №5. С. 55–60.
10. Ландау Л.Д. Физическая кинетика: Учеб. пособие: Для вузов в 10 т. Т. X. / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М.: Физматлит, 2002. — 536 с.
11. Методы Монте-Карло в статистической физике / Под ред. К. Биндера. — М.: Мир. — 1982. — 400 с.
12. Дударева Ж.В. Исследование кинетики изинговских квазиодномерных магнетиков при периодических граничных условиях / Ж.В. Дударева, Д.В. Спири́н, В.Н. Удодов // Моделирование неравновесных систем. — Материалы XIV Всероссийского семинара. — Красноярск: СФУ. — 2011. — С. 80–83.
13. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике: Пер. с англ / Р.Бэкстер. — М.: Мир, 1985. — 488 с.
14. Levi B.G. A complex symmetry arises at a spin chain's quantum critical point / B.G.Levi // Physics To day. — 2010. — March. P. 13-15.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ С ТРЕНИЕМ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ РАВНОВЕСИЯ ЛАГРАНЖА

Каганович Б.М, Зароднюк М.С., Якшин С.В.

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН,
thermo@isem.sei.irk.ru, max@isem.sei.irk.ru, s.yakshin@isem.sei.irk.ru

Известное уравнение оптимальной траектории Эйлера–Лагранжа, по мнению самого Эйлера [1], неприменимо в анализе процессов с трением. Попытки классиков физики XIX в. нарушить эйлеровский «запрет» и вывести подобное уравнение, пригодное для моделирования и консервативных, и диссипативных систем, закончились безрезультатно и привели к пониманию необходимости создания статистической механики [2]. Другое классическое уравнение, описывающее равновесное состояние и ставшее в «Аналитической механике» Лагранжа [3] исходным в математическом построении здания ньютоновской механики оказалась более приспособленным к расширению области приложений. Это понятно. Ведь дифференциальные уравнения, к которым относится последнее из сопоставляемых, отличаются большей универсальностью чем используемые для описания траекторий интегральные, часто справедливые лишь в определенных диапазонах значений переменных. Но достаточно строгая оценка применимости дифференциального выражения требует проведения разностороннего физико-математического анализа.

Обоснование «всеобщности» уравнения равновесия механической системы может быть дано исходя из принятой Лагранжем постановки задачи. Все участвующие в изменении состояния силы он разделил на две группы: движущие, стремящиеся максимизировать изменение, и сопротивления, направленные на его минимизацию. Соответственно уравнение равновесия было представлено как равенство нулю дифференциала суммарной работы противоборствующих сил (функции Лагранжа):

$$dL = \sum_j c_j(x) dx_j + \sum_i \lambda_i(\varphi) d\varphi_i = 0, \quad (1)$$

где c , x , λ и φ – движущая сила, координата, сопротивление (множитель Лагранжа) и деформация связи; j – индекс движущих сил и соответствующих координат; i – индекс сопротивлений и деформаций. Поскольку работа движущих сил (первая сумма в левой части (1)) совершается окружением, а работа сопротивлений – моделируемой системой, приведенным равенством описываются процессы, происходящие в изолированной системе, в которой соблюдается второй закон термодинамики. Следовательно, в ней достигаются экстремумы энтропии (S), производящей энтропию теплоты (q) и (затрачиваемой на выделение теплоты энергии. Отсюда становятся ясными допустимость и осуществимость на основе принципов равновесия и экстремальности описания процессов в диссипативных системах.

Конечно, для реализации равновесного экстремального моделирования необратимых процессов требуется соблюдение ряда условий. Прежде всего следует корректно выбирать используемое при решении поставленной задачи пространство переменных. В [4] рассматривался пример исследования зависимостей между термодинамическими свойствами вещества. Как известно при изменении этих свойств вдоль критической изотермы в плоскости давление (P) – объем (V) критическая точка оказывается точкой перегиба. Чтобы описать данный изотермический процесс на основе экстремальной модели следует учесть взаимодействие вещества с окружающей средой (обмен теплотой) и перейти из пространства PV в пространство SP . Буква S в рассматриваемом случае обозначает энтропию изолированной системы, чтобы гарантировать выполнение условий реализуемости надо выводить используемую в

построении модели равновесного состояния функцию Лагранжа непосредственно из уравнения (1) и избегать применения интегральных формул, способ получения которых неизвестен. При выводе этих формул из неавтономных дифференциальных уравнений значение L оказывается зависящим от траектории его достижения, т.е. L не является функцией состояния. Так как в (1) и в соответствующей интегральной функции все члены имеют размерность и смысл работы (энергии) равенство дифференциала нулю позволяет проверить правильность учета всех участвующих в производстве данных работ сил.

Возможность применения уравнения Лагранжа в анализе диссипативных систем была подтверждена работами классиков: Гиббса [5], Больцмана [6], Ландау [7], Вальраса [8] и др. Фундаментальные уравнения Гиббса, используемые им для описания равновесий в термодинамических (гетерогенных) системах, можно рассматривать как обобщение (1). Сам Гиббс во введении к [5] отметил, что выбрал в качестве образца идеи Лагранжа. Эти идеи в его книге получили дальнейшее развитие. Наряду с механическими работами он включил в свои модели работы химических, электрических, термических, трения и других сил, а также превращения энергии из одной формы в другую. Кроме экстремума изолированной системы – $\max S$ Гиббс для «классических условий» взаимодействия с окружающей средой определил виды экстремумов (\max или \min соответствующей функции) в подсистемах. Больцман выявил возможности представления любого случайного процесса в виде марковского процесса без памяти и его описания с помощью функций Ляпунова (конечно, без введения соответствующих терминов). Это следует из принятия им вероятности и энтропии не зависящими от траектории достижения функциями состояний и Н-теоремы, согласно которой существует Н-функция, монотонно убывающая в ходе случайных процессов в направлении своего минимума. Минимуму Н-функции соответствует максимум энтропии. Ландау создал прекрасные образцы равновесных моделей явлений самоорганизации: сверхтекучести, сверхпроводимости, образования звезд, фазовых переходов второго рода и других. Все отмеченные явления он представил в виде процессов, в каждое мгновение которых соблюдается фазовое равновесие между «преобразуемыми объектами»: нормальным и сверхтекучим гелием, нормальным и сверхпроводящим слоями проводника, ядром и оболочкой звезды, фазами вещества. Вальрас согласно собственному объяснению по образцу механики Лагранжа построил здание математической экономики. Равновесие между работами движущих сил и сопротивлений он заменил равновесием между производством товаров и их потреблением. Роль энергии в [8] стали играть деньги. В качестве силы сопротивления (множителя Лагранжа) была выбрана цена товара.

В [3] Лагранж проявил и высочайшее искусство использования возможностей равновесного моделирования. Основной переменной своей книги динамической величине работе для бесконечно малых отрезков времени он приписал свойство локального потенциала, что и позволило рассчитать каждую точку искомой траектории точкой равновесия. Принятие Лагранжем данной предпосылки подсказывает допустимость статических трактовок и других динамических величин, например, теплоты. Равенство нулю дифференциала суммарной работы (или производной от нее) при решении всех ньютоновских задач рассматривалось в [3] как обнаружение точки экстремума, а не точки перегиба. Такая однозначная трактовка отмеченных равенств принималась автором «Аналитической механики» из физических соображений, на которые он опирался еще до открытия второго закона термодинамики. Обошелся Лагранж и без использования «условий Куна–Таккера». Постановки задач, не включающие разрывов графиков движения к точкам экстремумов, можно осуществить,

используя описания воздействий на моделируемую систему, приводящих к возникновению этих разрывов. Описания должны представлять дополнительные члены в уравнении (1), отображающие связанные с воздействиями работы. Такое расширение постановки, видимо, позволит определять экстремум целевой функции (по Лагранжу работы движущих сил), не рассматривая ситуации равенства нулю отдельных переменных при ненулевых значениях производных по ним от функции Лагранжа.

Искусство Лагранжа развил Фурье [9], распространив предложенную в [3] методику на случай разрыва связей при превышении напряжениями в деформируемых элементах допустимых значений. Моделирование данного явления потребовало включения в описания равновесных состояний наряду с равенствами вида (1) неравенств. Известным приемом преобразования этих неравенств в равенства стало включение в них вспомогательных переменных. Их использование и обязательное приведение всех членов в уравнении Лагранжа к одной и той же размерности в ряде случаев может облегчить решение проблем векторной оптимизации. Это достигается использованием как в традиционных методах математического программирования (МП) одной целевой функции, а вместо других – задавать ограничения на максимальные или минимальные значения важных для исследователя величин.

Достоинства использования при моделировании на основе (1) метода множителей, по мнению Лагранжа, заключаются не в совершенствовании вычислительного процесса, а в обеспечении разносторонности физического анализа решаемой задачи. В настоящее время мысль Лагранжа можно дополнить замечанием о пригодности во многих случаях созданного им метода в анализе не только аналитических моделей, но и при использовании математического программирования для решения задач с неподдающимися аналитическими описаниями функциями и ограничениями. В качестве примера такого применения метода множителей рассмотрим задачу технико-экономической оптимизации тепловой сети [4]: выбора схем (расходов воды (x) на задаваемых на избыточной схеме допустимых направлениях прокладки трубопроводов) и зависящих от диаметров труб потерь давления на участках. Понятно, что допустимые диаметры и соответственно потери давления определяются наборами выпускаемых промышленностью труб и представляют дискретные переменные. Если дополнительно предположить, что к моменту проектирования часть участков уже эксплуатируется, то при сохранении их диаметров неизменными в зависящей от них функции денежных затрат (3) возникнут точки разрывов. На рис. а и б представлена графическая интерпретация части рассматриваемой задачи, связанной с оптимизацией диаметров и потерь давления. На рис а изображена условная непрерывная кривая суммарных затрат в сеть в зависимости графиков давления. Точками отмечены ее реализуемые значения определяемые допустимыми значениями искомых переменных. В число отмеченных включены точки разрывов. На рис. б приведен график увеличения затрат на прокладку и эксплуатацию трубопроводов в направлении от конечных потребителей до источника тепла на часть сети, расположенную за рассматриваемой точкой. В отличие от изображенного на рис. а этот график представляет непрерывную неубывающую кривую с отрезками постоянных значений, соответствующих не перекладываемым существующим участкам. Из рисунков ясно, что непрерывность условной и монотонно изменяющихся отрезков реальной кривых позволяют использовать метод множителей (особенности первой и второй производных функций Лагранжа) в анализе физико-математических характеристик решаемой задачи. При совместном рассмотрении задач выбора схем и параметров сетей этот метод уже помог установить выпуклость условных кривых

зависимостей затрат от давлений и вогнутость – от расходов, а также большую пологость первой зависимости вблизи точки экстремума [4, 10].

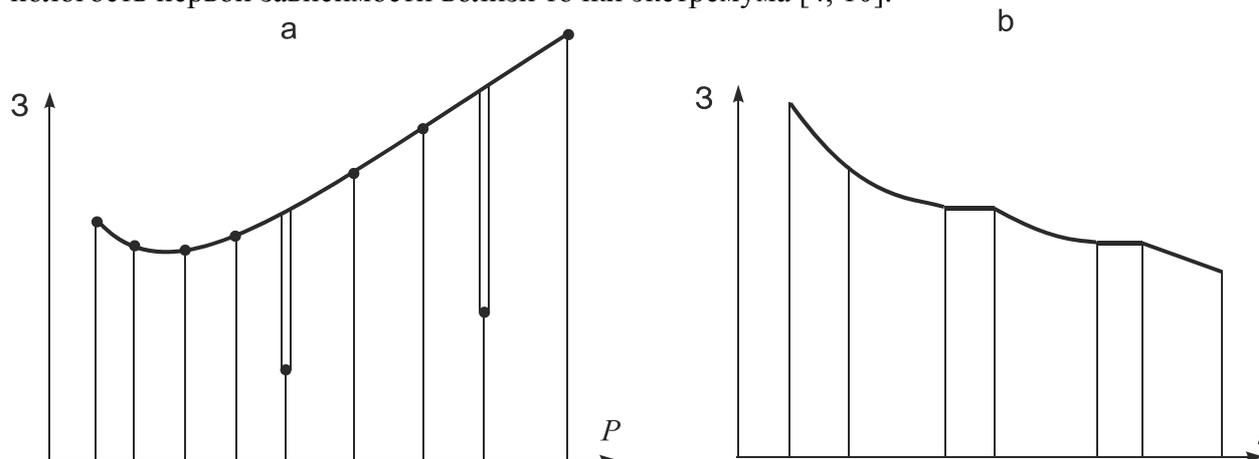


Рис. Зависимость затрат в сеть от графика давлений (а) и изменение затрат при фиксированном графике вдоль сети (б). l – расстояние.

Отмеченные достоинства уравнения равновесия и основанного на нем метода множителей не позволили решить проблему незамкнутости равновесной термодинамики, невыводимости общего уравнения экстремальной траектории, применимого в анализе консервативных систем. В ИСЭМ для ее решения использовался подход, связанный с отказом от вывода «невыводимого» уравнения и переходом к пошаговому принятию решений при построении графиков движения [4, 11]. Шаги предлагалось принимать столь малыми, чтобы стала применимой предпосылка о стационарности движения и выводимости математических связей между закономерностями консервативных и диссипативных систем. Реализация подхода осуществлена на основе совместного применения созданной в ИСЭМ модели экстремальных промежуточных состояний (МЭПС) [4] и метода динамического программирования (ДП) [12]. МЭПС в отличие от традиционных методов классической термодинамики позволяет находить не только точку конечного равновесия, но просматривать все множество термодинамической достижимости и отыскивать на нем частичные равновесия, соответствующие экстремальным значениям интересующих исследователя свойств моделируемой системы. ДП дает возможность последовательно наращивать оптимальные решения. Пошаговый алгоритм фактически свелся к поочередным вычислениям по формуле

$$F_j = \text{extr}(F_{j-1} + F_{j-1,j}), \quad (2)$$

где F – целевая функция; j – индекс шага вычислений. При поиске с помощью МЭПС оптимальных приращений F на каждом шаге использовались уравнение и метод множителей Лагранжа.

Обоснование предложенной методики в [4] проводилось на основе разностороннего теоретического анализа. Для отрезков стационарного движения были раскрыты связи между закономерностями классической механики и равновесной, неравновесной и релятивистской Планка–Эйнштейна термодинамик. Несколько расширена трактовка второго закона термодинамики: показано, что при достижении в изолированной системе общего максимума энтропии при независимости от

температуры проводимых работ производство «термической» энтропии ($S = f(T)$) оказывается минимальным. Выявлены математические связи с принципами равновесия и экстремальности механики тепловых теорем Кирхгофа и Максвелла и теоремы Онсагера–Пригожина. В целом выполненный анализ показал допустимость «консервативного» (на основе уравнения Лагранжа) моделирования стационарных необратимых процессов.

Конечно, принципиальная возможность равновесного моделирования необратимостей не означает легкость решения возникающих конкретных задач. При практическом внедрении предлагаемой методики еще встретится много трудностей. Пока ее удалось проверить на небольшом количестве примеров анализа [4]: реакции изомеризации образования оксидов азота при сжигании угля; нестационарного потокораспределения в многоконтурной гидравлической системе, включающего стадию гидравлического удара; задачи выбора схемы и параметров тепловой сети; воздействия крупной ветроэнергетической установки на протекание физико-химических процессов в атмосфере. Однако надо помнить, что стремительное развитие вычислительной техники и информационных технологий должно способствовать повышению конкурентоспособности основанных на простых и универсальных предположениях равновесных моделей.

Список литературы

1. Эйлер, Л. Диссертация о принципе наименьшего действия с разбором возражений славнейшего проф. Кёнига, выдвинутых против этого принципа // Вариационные принципы механики. / Под ред. Л.С. Полака. – М.: Физматгиз, 1959. – С. 96 – 108.
2. Полак, Л.С. Вариационные принципы механики: Их развитие и применения в физике. – М.: /нижний дом "ЛИБРОКОМ", 2010. – 600 с.
3. Лагранж, Ж. Аналитическая механика. – М. – Л.: ГИТТЛ, 1950. – Т. 1. – 594 с.; Т.2 – 440 с.
4. Каганович, Б.М. Равновесная термодинамика. Проблемы и перспективы. Вторая редакция. – Saarbrücken: LAP Lambert Academic Publishing, 2015 p.
5. Гиббс, Д.В. О равновесии гетерогенных веществ // Термодинамика. Статистическая механика. – М.: Наука, 1982. – С. 61 – 349.
6. Больцман, Л. Молекулярно-кинетическая теория газов. Термодинамика. Статистическая механика // Избр. Тр. – М.: Наука, 1984. – С. 9 – 330.
7. Ландау, Л.Д. Собрание трудов. – М.: Наука, 1969. – Т.1. – 512 с.; Т.2 – 450 с.
8. Вальрас, Л. Элементы чистой политической экономии или теория общественного богатства. – М.: Изограф, 2000. – 448с.
9. Fourier, I.B.J. Memoire sur la statique contenant la demonstration du principe des vitesses virtuelles et la theorie des moments // Oeuvres de Fourier. – Paris, 1890. – Vol. 2. – P. 477 – 522.
10. Виктор Яковлевич Хасилев: Воспоминания о жизни и деятельности. Научное наследие. – Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, ИСЭМ. – Новосибирск: Акад. изд-во «Гео», 2012. – 382 с.
11. Kaganovich, B.M. On the Interrelations Between Kinetics and Thermodynamics as the Theories of Trajectories and States / Keiko A.V., Shamansky V.A., Zarodnyuk M.S. // Chemical Kinetics. – Rijeka: Intech, 2012. – P. 31 – 60.
12. Беллман, Р. Динамическое программирование. – М.: Изд-во иностр. лит., 1960. – 400 с.

COULOMB CLUSTERS IN 3D OPTICAL LATTICES: SUPERCOMPUTER SIMULATION

L.P.Kamenshchikov¹, I.V.Krasnov²

¹Institute of Computational Modeling SB RAS, lpk@icm.krasn.ru

²Institute of Computational Modeling SB RAS, krasn@icm.krasn.ru

Introduction. Ion traps are used for experiments with cold atomic ions for many years. These experiments are important for many fields of physics such as spectroscopy, quantum informatics, metrology, plasma physics and physics of cold collisions. One of the most interesting applications of the ion traps is the formation of cold ionic Coulomb clusters [1,2].

Traditional ion traps use the combination of electrostatic, magneto-static and radio-frequency fields for the ion confinement. A new interesting direction in physics of ion traps is the investigation of the possibilities of using all-optical methods for the ion confinement [3,4]. These methods are of interest due to the fact that they allow one to eliminate undesirable types of ionic motions which are characteristic of traditional traps.

In our previous paper [5], we investigated the possibility of using the rectified gradient force (RcGF) [6-9] for trapping strongly coupled ions. We demonstrated the formation of a long-lived two-ion Coulomb cluster in the cell of a 3D dissipative optical superlattice (OSL) driven by polychromatic rectified optical force [7]. However, the model of the ion confinement in such super-deep potential wells is a strong simplification and is valid only in the approximation of slow ions (SI), i.e. when the capture velocity v_c is considerably higher than the characteristic velocities of the ions $s = \sqrt{T/m}$, where T is the effective ionic temperature (in energy units), m is the ionic mass. The capture velocity determines the region (in the velocity space) where RcGF reaches its maximum values and its velocity dependence can be neglected. Note that T and v_c are the functions of the OSL parameters [5].

But if s is higher than v_c , then the kinetics of the ions in OSL is not even qualitatively described by the SI model and the physical picture of ion trapping in the potential wells (of OSL) which was presented in [5] is completely destroyed. It is necessary to take into account the non-conservative nature of RcGF. In the present report we prove that the non-conservative features of RcGF as well as the nonlinear dependence of the friction and velocity diffusion coefficients (for the ions in OSL) do not destroy the effect of the Coulomb cluster formation, but they considerably affect both its characteristics and the necessary conditions to be satisfied by the OSL parameters for the cluster formation.

Model and numerical method. We consider ions located in a three-dimensional (3D) OSL [7,8]. The ions in OSL are subjected to the rectified radiation forces [6]: trapping force \mathbf{F}^{tr} (i.e. RcGF in our model) and friction force \mathbf{F}^{fr} . We use the dimensionless variables measuring the positions in units of $L = L_x$, time t in units of $m/\hbar k^2$ (L_i is a period of the OSL cell along i -axis, k is the wave number), and velocities in units of $s_0 = \sqrt{T_D/m}$ where $T_D = \hbar\gamma/2$ is the Doppler cooling temperature limit. The dimensional time \tilde{t} is also

calculated for describing the simulation results.

Our study is based on the system of stochastic differential equations which can be written in the following dimensionless form:

$$\frac{dr_{\alpha i}}{dt} = \zeta v_{\alpha i}, \quad \frac{dv_{\alpha i}}{dt} = F_{\alpha i}^{tr} + F_{\alpha i}^{fr} + F_{\alpha i}^{Cl} + F_{\alpha i}^{st}, \quad (1)$$

where $r_{\alpha i} = (\mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{e}_i)$ and $v_{\alpha i} = (\mathbf{v}_{\alpha} \cdot \mathbf{e}_i)$ are the projections of the position \mathbf{r}_{α} and velocity \mathbf{v}_{α} of the center-of-mass of the α -th ion on the i -axis, $\alpha = 1, \dots, N$, N is a number of ions; \mathbf{e}_i denotes the unit basis vectors of the Cartesian coordinate system, $i \in \{x, y, z\}$; $F_{\alpha i}^{\beta} = (\mathbf{F}_{\alpha}^{\beta} \cdot \mathbf{e}_i)$; \mathbf{F}_{α}^{tr} , \mathbf{F}_{α}^{fr} , \mathbf{F}_{α}^{Cl} , \mathbf{F}_{α}^{st} are the trapping, friction, Coulomb, and stochastic forces acting on the α -th ion, respectively; ζ is a constant parameter. Note that a stochastic (random) force \mathbf{F}_{α}^{st} arises due to the quantum fluctuations of the optical forces.

The explicit expressions for the optical forces can be derived in the framework of the Wigner-density matrix formalism [7] by using the standard techniques of the quasi-classical theory of light pressure force and the kinetic theory of rectified radiation force [9]. We obtained the following explicit expressions:

$$F_{\alpha i}^{tr} = -\zeta \frac{\partial U_i(r_{\alpha i}, v_{\alpha i})}{\partial r_{\alpha i}}, \quad U_i(r, v) = -\frac{\cos(2\pi p_i r)}{p_i} (W_0 L(v/v_{c0}) + W_1 L(v/v_{c1})),$$

$$F_{\alpha i}^{fr} = \left(-\kappa_i(r_{\alpha i}, v_{\alpha i}) - \frac{\partial D(v_{\alpha i})}{2v_{\alpha i} \partial v_{\alpha i}} \right) v_{\alpha i}, \quad F_{\alpha i}^{st} = \sqrt{2D(v_{\alpha i})} \circ \Gamma_{\alpha i}(t), \quad (2)$$

where $L(u) = 1/(1+u^2)$ is the Lorentzian function; $\kappa_i(r, v) = \kappa(v)(b - \cos(2\pi p_i r))/(1+b)$ are the friction coefficients, $\kappa(v) = \kappa_0 L(v/v_{c0}) + \kappa_1 L(v/v_{c1})$; $D(v) = D_s + D_R(v)$ is the velocity diffusion coefficient, $D_R(v) = D_0 L(v/v_{c0}) + D_1 L(v/v_{c1})$; $b, W_0, W_1, p_i, v_{c0}, v_{c1}, \kappa_0, \kappa_1, D_s, D_0, D_1$ are the physical and geometrical constants; $\Gamma_{\alpha i}(t)$ are the Gaussian white noises with the zero averages $\langle \Gamma_{\alpha i}(t) \rangle = 0$ and correlators $\langle \Gamma_{\alpha i}(t) \Gamma_{\alpha' i'}(t') \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{ii'} \delta(t-t')$.

The force \mathbf{F}_{α}^{Cl} can be expressed via the dimensionless Coulomb energy $U^{Cl}(r) = e^2 / (4\pi\epsilon_0 r L T_D)$ of the ions separated by the distance r in the following way

$$\mathbf{F}_{\alpha}^{Cl} = -\zeta \sum_{\alpha' \neq \alpha} \frac{\partial U^{Cl}(|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\alpha'}|)}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}.$$

The main differences between the mathematical model (1) and the model in Ref. [5] are due to the multiplicative characteristic of noises (since the diffusion coefficient in (2) depends on the velocity), non-conservative property of the trapping force field, and nonlinear dependence of the friction coefficients on the velocity.

The system of basic equations (1) has a stochastic type since in the right part of the system there are random functions $F_{\alpha i}^{st}$, therefore the solution of this system, $r_{\alpha i}$ and $v_{\alpha i}$, gives random functions, too. For the numerical solution of these equations we employ the generalization of the well-known Verlet-algorithm for stochastic equations. The Monte Carlo method is used to evaluate both the average of this solution and the average for different

functions from the solution (the size of the cluster, kinetic energy, temperature, etc.). Due to the slow convergence of the Monte Carlo method, the volume of independent samples N_r can be very large. We set different values of N_r (from 2^{15} to 2^{20}) in different variants. The number of time steps reached $\sim 8 \cdot 10^7$. Use was made of 128-512 processing cores and the run time reached 24 hours. We used the uniform random number generator from [11]. To implement parallel computing the DVM-system developed in Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS was used. The calculations were carried out using the MVS-100K supercomputer at the Joint Supercomputer Center of RAS.

Numerical simulations. In our simulations the Coulomb cluster formation in a single OSL cell is investigated with the focus on the study of physical situations where it is necessary to take into account the nonlinear dependence of optical forces on the ion velocity.

In the numerical calculations presented below in Figs. 1-2 we set $N = 2$, $L = 3.7$ mm, $\zeta = 2 \cdot 10^{-4}$, $b = 10$, $W_0 = 52.4$, $W_1 = 30.8$, $p_x = 1$, $p_y = p_z = 1.8$, $v_{c0} = 0.865$, $v_{c1} = 29.4$, $\kappa_0 = 0.44$, $\kappa_1 = 7.6 \cdot 10^{-4}$, $D_s = 0.02$, $D_0 = 0.18$, $D_1 = 1.2 \cdot 10^{-3}$.

Such constants correspond to the $F_b = 1 \rightarrow F_a = 0$ transition in the $^{171}\text{Yb}^+$ ion, which is used for laser cooling of ions in many spectroscopic experiments [10]. It should be noted that the lattice period L in our simulations was chosen so that the probability of the ion trajectories escaping to the neighbouring cells due to the quantum fluctuations of optical forces was much lower than one percent. Such a constraint allows one to observe the dynamics of the cluster formation in a single cell of OSL in the “pure form”, i.e. without taking into account the effect of the ions escaping into the neighboring cells.

An example of simulations is shown in Figs. 1-2, demonstrating the formation of the two-ion Coulomb clusters in the cuboid OSL cell. A view of trajectories (averaged over 64 independent samples) of two ions with the presence of the white noise are shown in Fig. 1. One can see from Fig. 2 that the ion trajectories converge to the attractor points 1 and 2. Moreover, the cluster parameters and the fluctuation magnitudes depend only on the OSL parameters and ion characteristics. However, the dynamics of the transition into the cluster state depends considerably on the initial conditions. Note the initial nearly straight-line segments of both trajectories in Figs. 1-2 are due to the deceleration effect of fast ions by the friction forces with the initial velocities $v_0 = \sqrt{u(0)^2 + v(0)^2 + w(0)^2} \approx 10.1 > v_{c0}$.

In this report some other aspects of deceleration and cooling of ions are also considered in details. The process of the cluster formation (Fig. 2) is preceded by a fast process of deep cooling of ions. Moreover, with fast ions with the initial velocities $v_0 > v_{c0}$ this process includes the stage of the ion deceleration down to mean velocities, $\langle v \rangle \sim v_{c0}$. At this deceleration stage with the time t_0 a fast ion moving along the nearly straight-line segment, is predominantly subjected only to the friction force. The effect of the trapping force on the ion motion is very small at $t < t_0$. We also calculate mean kinetic energy, temperature, lifetime of the cluster and other characteristics of cooling, trapping and formation Coulomb clusters.

Our simulations prove that non-conservative rectified radiation forces are able to form and confine two-ion and three-ion cold ion Coulomb clusters. The case is considered where the dispersion of ionic velocities (due to quantum fluctuations of optical forces) is of the order

or larger than the width of optical forces velocity profile v_c and, therefore, the approximation of slow ions [5] is invalid. The consequences of the nonlinear dependence of optical forces on the ion velocity and the multiplicative nature of the force fluctuations are strongly non-Maxwellian characteristics of the velocity distribution of the ions in OSL.

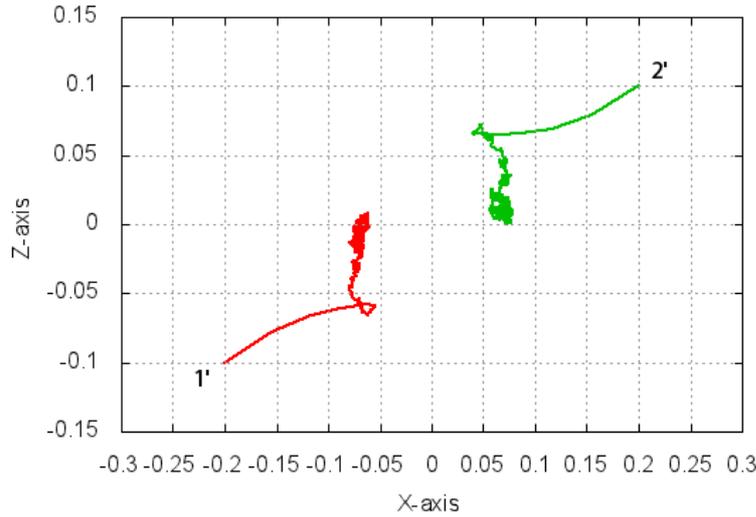


Fig.1. A picture of mean stochastic trajectories (averaged over 64 independent samples) of two ions in the cuboid optical superlattice: projection on the plane XOZ. The points 1',2' are the initial positions. The initial dimensionless velocities are $u_1 = 9$, $v_1 = 0$, $w_1 = 4.5$, $u_2 = -9$, $v_2 = 0$, $w_2 = -4.5$. The time varies in the interval $0 \leq \tilde{t} \leq 1.2$ sec.

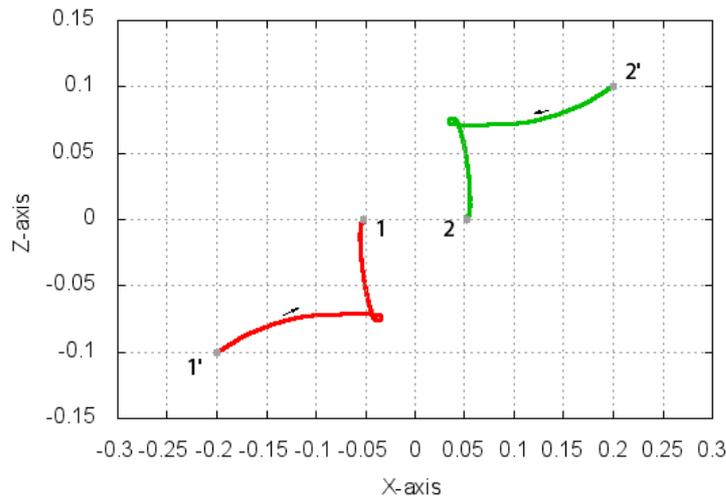


Fig.2. Formation of the two-ion cluster (points 1, 2): projections of the mean ion trajectories (averaged over 2^{17} independent samples) on the plane XOZ. The points 1',2' are the initial positions. The initial velocities and the time interval are the same as in Fig.1.

References

- [1] Zs G., Horvath K., Thompson R. C., Knight P. L. Fundamental physics with trapped ions // *Contemporary Physics*, 38, 25-48 (1997).
- [2] Wineland D. J., Bergquist J. C., Itano W. M., Bollinger J. J., Manney C. H. Atomic Ion Coulomb Clusters in an Ion Trap // *Phys. Rev. Lett.*, 59, 2935-2938 (1997).
- [3] Schneider C., Enderlein M., Huber T., Schaetz T. Optical trapping of an ion // *Nature Photonics*, 4, 772-775 (2010).
- [4] Nieminen T. A. Optical Manipulation: Trapping ions // *Nature Photonics*, 4, 737-738 (2010).
- [5] Krasnov I. V., Kamenshchikov L. P. All-optical trapping of strongly coupled ions // *Optics Communications*, 312, 192-198 (2014).
- [6] Kazantsev A. P., Krasnov I. V. Rectification effect of a radiation force // *J. Opt. Soc. Am. B*6, 2140-2148 (1989).
- [7] Krasnov I. V. Three-dimensional localization of atoms in the polychromatic optical superlattice // *Physics Letters*, A375, 2471-2478 (2011).
- [8] Krasnov I. V. All-optical confinement of ultracold plasma with resonant ions // *Physics Letters*, A373, 2291-2297 (2009).
- [9] Krasnov I. V. Effect of rectifying the radiative force and kinetics of atoms in strong bi-chromatic fields // *Laser Physics*, 4, 906-921 (1994).
- [9] [10] Tamm C., Engelke D., Buhner V. Spectroscopy of the electric-quadrupole transition // *Phys. Rev.*, A61, 053405 (2000).
- [10] [11] Mikhailov G.A., Marchenko M. A. Parallel realization of statistical simulation and random number generators // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 17, 113-124 (2002).

АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА ДАННЫХ СЕЙСМИЧЕСКОЙ ТОМОГРАФИИ

М.А. Курако¹, К.В. Симонов²

¹Сибирский федеральный университет,

Институт космических и информационных технологий, *mkurako@gmail.com*

²Институт вычислительного моделирования СО РАН, *simonovkv@icm.krasn.ru*

Введение

В настоящее время современные вычислительные технологии позволяют обеспечивать производство, передачу и хранение больших объемов данных в самых разнообразных сферах деятельности человека (медицина, астрономия, сейсмология, метеорология, управление воздушным движением, интернет-трафик, аудио и видео приложения, цифровые коммуникации и т.д.). Эти данные требуют эффективной обработки и анализа с целью получения (добычи) новой информации и знаний. Кроме того, важно не только обеспечить адекватность методик обработки различных типов данных, но и возможность анализа точности методов обработки для более глубокого изучения основных структур в данных.

Исследование посвящено адаптации быстрых алгоритмов обработки и анализа пространственных данных сейсмической томографии для изучения особенностей сложных геоструктур. Отдельным вопросом здесь является описание комплекса алгоритмов для определения фрагментов изображения, имеющих анизотропные характеристики или разрывы (такие как края объектов или кривые линии на изображении), поскольку традиционные методы обработки данных, как правило, нечувствительны к подобного рода характеристикам.

В течение последних двадцати лет предложены различные методы обработки анизотропных объектов на изображении, такие как направленные вейвлеты, комплексные вейвлеты, контурлеты, кёрвлеты и т. п. В последние годы предложен иной подход к анализу анизотропных составляющих на основе шиарлет-преобразования [1-14]. В отличие от вейвлетов или кёрвлетов, шиарлеты строятся в классе аффинных систем, а также обладают возможностью определения направленности благодаря дополнительно введённому параметру – параметру сдвига. В свою очередь, шиарлеты обладают набором характеристик, выгодно выделяющих их на фоне остальных методов обработки изображений: конечное число порождающих функций, оптимальное представление анизотропных характеристик анализируемых данных, быстрая алгоритмическая реализация, единый подход к разложению непрерывных и дискретных данных.

Основными из приложений дискретного шиарлет-преобразования являются алгоритмы решения задач шумоподавления, выделения краёв на изображениях, разделения изображений на объекты различной природы (морфологический анализ) и улучшения качества изображений. Имеющиеся подходы к анализу изображений могут быть перенесены в пространство больших размерностей, а также оказаться полезными для решения задач в области обработки данных геомониторинга сложных геоструктур.

Вычислительная методика обработки пространственных данных на основе быстрых алгоритмов дискретного шпурлет-преобразования

Цель исследования – разработка вычислительной технологии применения дискретного шпурлет-преобразования (ДШП) для обработки пространственных данных сейсмической томографии сложных геоструктур. Основные задачи: разделение объектов на изображениях, шумоподавление и выделение контуров изучаемого геобъекта.

Исходя из теоретических и методических представлений о ДШП [1-14], рассмотрим модификацию метода геометрического анализа визуальных данных, позволяющую решать широкий класс задач обработки сложных изображений сейсмической томографии. При этом в рамках специализированной информационно-вычислительной системы на основе четырех алгоритмов шпурлет-преобразования решаются задачи разделения точек и кривых на изображениях, выделения контуров, шумоподавления и визуализации данных.

Предлагается вычислительная методика решения указанных задач, состоящая из нескольких этапов: подготовительный этап, когда исходное изображение разбивается на расчетные шаблоны и выбирается последовательность расчетных процедур для оптимального решения конкретной задачи; этап настройки алгоритмического обеспечения, выбор значений параметров для вычисления шпурлет-преобразования; этап обработки исходных изображений для различных расчетных условий в зависимости от поставленной задачи; анализ получаемых расчетных изображений; контрастирование и интерпретация полученных изображений.

Выбор непосредственно вычислительной процедуры, в зависимости от поставленной задачи предлагается на основе применения алгоритмов А, В, С и D, которые определяются следующим образом: А – алгоритм FFST [7]; В – алгоритм Shearlet Toolbox [11]; С – алгоритм ShearLab [12, 13]; D – алгоритм TGVSHCS [14] (аналог алгоритма А).

Для сравнения алгоритмов в качестве количественного показателя оценки эффективности использовалось среднее время работы указанных алгоритмов. Алгоритмы были протестированы на изображениях различного размера, яркости и контрастности. Показано, что с помощью алгоритма С расчеты выполняются быстрее, чем на основе алгоритма А на изображениях больших размерностей, в то время как алгоритм А имеет незначительное преимущество по времени выполнения на изображениях небольшого размера.

Решение основных задач сейсмической томографии сложных геоструктур

С применением указанных алгоритмов анализировались изображения для ряда изучаемых геоструктур на основе данных сейсмической томографии. В частности, проводились исследования указанных данных для различных условий яркости и контрастности. При исследовании возможностей шумоподавления выполнялись оценки исходных изображений и изображений с наложением гауссового шума.

Геометрическое разделение визуальных данных. В соответствии с проведенным сравнительным исследованием указанных быстрых алгоритмов ДШП предлагается для решения задачи геометрического разделения визуальных данных геоэкологического мониторинга применять алгоритм С.

Выделение контуров объектов на изображении. Рассмотрим задачу выделения контуров объектов на изображении. Анализ алгоритма A показал, что контуры объектов можно получить как алгебраическую сумму коэффициентов шварлет-преобразования при фиксированном значении параметра масштаба и всевозможных значениях параметров сдвига и направления. В связи с этим предлагается использовать эту особенность при решении задачи:

$$f_{cont} = \sum_{k=0}^{k_{max}} \sum_{m=0}^{m_{max}} sh_{\psi}(f(j^*, k, m)),$$

где sh_{ψ} ставит в соответствие исследуемой функции f коэффициенты $sh_{\psi}(f(j^*, k, m))$, полученные для последнего (максимального) масштаба j^* , поворотов k и сдвигов m , где k_{max} – количество поворотов, m_{max} – количество смещений.

Результаты решения этой задачи с помощью модифицированного алгоритма FFST (алгоритм A) показаны на рисунке 1 на различных данных геомониторинга изучаемой геосреды. Модифицированный алгоритм предлагается применять для выделения контуров искомого сложного геобъекта.

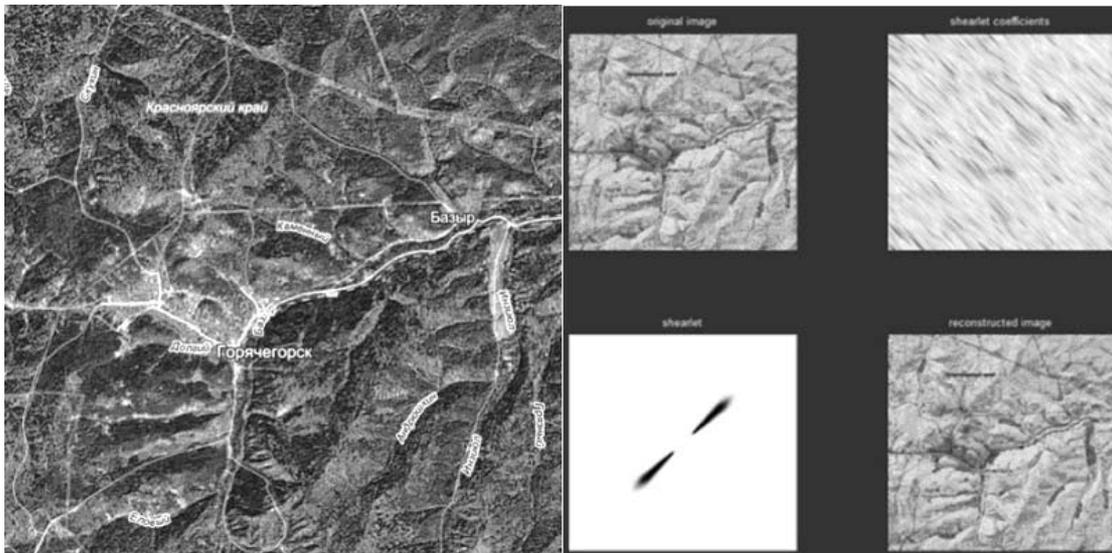


Рис.1. Решение задачи выделения линейных особенностей на основе алгоритма A : слева - исходное изображение; справа - результат обработки (слева направо и сверху вниз - исходное инвертированное изображение, поле шварлет-коэффициентов при фиксированном направлении, материнский шварлет, восстановленное изображение)

Сравнительный анализ алгоритмов для решения задачи шумоподавления. В рамках специализированной информационно-вычислительной системы и разработанной вычислительной методики выполнен сравнительный анализ алгоритмов ДШП для решения базовых прикладных задач фильтрации визуальных данных и шумоподавления на изображениях.

Для решения задачи шумоподавления выполнено исследование алгоритмов B , C и D на изображениях различных геоструктур. Исследовались особенности работы алгоритмов для различных условий яркости и контрастности изображений, проводились оценки для

изображений с наложением гауссового шума. На рисунках 2-3 приведены результаты решения задачи шумоподавления.

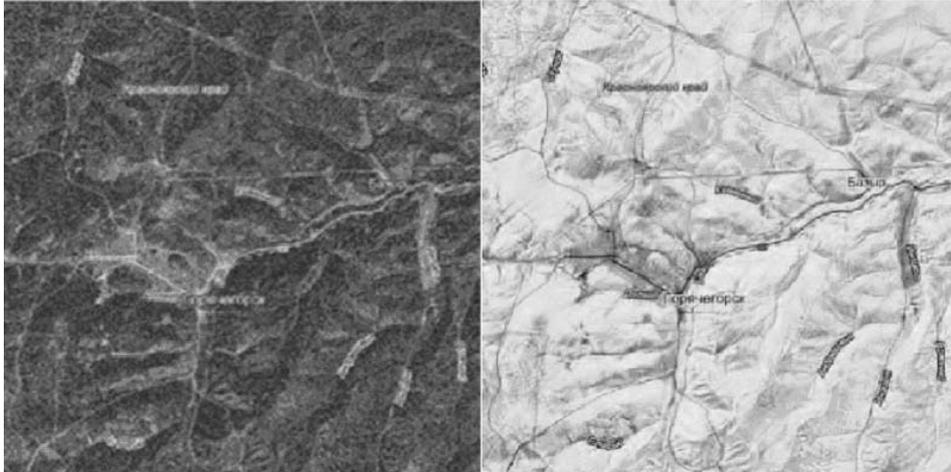


Рис.2. Слева - исходное зашумленное изображение, справа - результат применения алгоритма *B* (изображение инвертировано)

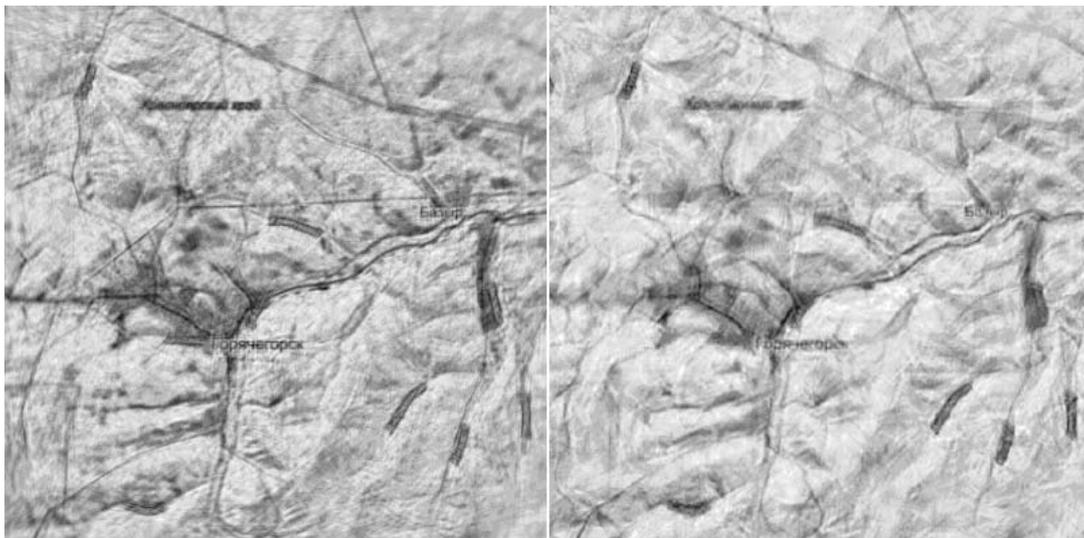


Рис.3. Результат применения алгоритмов *C* (слева) и *D* (справа). Оба изображения инвертированы

В результате показано, что действие алгоритма *B* эффективнее по сравнению с алгоритмом *C* для всех наборов изображений. В тоже время алгоритм *C* превосходит алгоритм *B* по быстродействию.

Заключение

Шиарлет-преобразование является новым методом многомерного анализа пространственных данных. Этот метод отличается возможностью определения анизотропной составляющей в анализируемых данных, что может быть практически применимым для различных задач обработки изображений сложных геобъектов.

Идея шиарлет-преобразования опирается на существующую методику вейвлет-анализа и является её естественным расширением. Так, параметрами шиарлет-преобразования являются не только сдвиг и масштаб, но и направление. Благодаря

вытянутости шиарлетов вдоль некоторого направления, зависящего от параметров, становится возможным анализ анизотропных объектов на изображении.

В итоге, решение задачи выделения контуров объектов на изображении предлагается выполнять с помощью модифицированного алгоритма *A*, который сравним по точности с классическими алгоритмами Собела и Превитта.

Для решения задачи шумоподавления наиболее эффективен алгоритм *B*. Показано, что с помощью алгоритма *C* расчеты выполняются быстрее.

Список литературы

1. Donoho D. L. Geometric separation using a wavelet-shearlet dictionary / Donoho D. L., Kutyniok G. — SampTA'09 (Marseille, France, 2009), Proc., 2009.
2. Easley G. R. Directional Multiscale Processing of Images Using Wavelets with Composite Dilations / Easley G. R., Labate D., Vishal P. M. // Journal of mathematical imaging and vision. — 2014. — Volume 48. — Issue 1. — 13-34 pp.
3. Guo K. Sparse multidimensional representations using anisotropic dilation and shear operators / Guo K., Kutyniok G., Labate D. — Wavelets and Splines (Athens, GA, 2005), Nashboro Press, Nashville, TN, 2006, 189-201.
4. Guo K. Optimally Sparse Multidimensional Representation using Shearlets / Guo K., Labate D. // SIAM J Math. Anal. — 2007. — Volume 39. — 298-318 pp.
5. Guo K. Optimally sparse 3D approximations using shearlet representations / Guo K., Labate D. // Electronic Research Announcements in Mathematical Sciences. — 2010. — Volume 17. — 126-138 pp.
6. Guo K. Edge analysis and identification using the Continuous Shearlet Transform / Guo K., Labate D., W.-Q. Lim // Appl. Comput. Harmon. Anal. — 2009. — Volume 27. — 24-46 pp.
7. Hauser S. Fast Finite Shearlet Transform. — Режим доступа: <http://www.mathematik.uni-kl.de/fileadmin/image/haeuser/software/FFST.zip>.
8. Kutyniok G. Construction of regular and irregular shearlet frames. / Kutyniok G., Labate D. // J. Wavelet Theory and Appl. — 2007. — Volume 1. — 1-10 pp.
9. Kutyniok G. Introduction to shearlets. In Shearlets. Multiscale analysis for multivariate data / Kutyniok G., Labate D. — Boston, MA: Birkhauser, 2012. — 1-38 pp.
10. Kutyniok G. From wavelets to shearlets and back again / Kutyniok G., Sauer T. — In Approximation theory XII. Proceedings of the 12th international conference, Brentwood, TN: Nashboro Press, 2008. — 201-209 pp.
11. Labate D. Sparse directional image representations using the discrete shearlet transform / Labate D., Easley G., Lim W. // Applied Computational Harmonic Analysis. — 2008. — Volume 25. — 25-46 pp.
12. Labate D. Sparse multidimensional representation using shearlets / Labate D., Lim W.-Q., Kutyniok G., Weiss G. — Wavelets XI (San Diego, CA, 2005), SPIE Proc. 5914, SPIE, Bellingham, WA, 2005. — 254-262 pp.
13. Lim W.-Q. The discrete shearlet transform: a new directional transform and compactly supported shearlet frames // IEEE Trans. Imag. Proc. — 2010. — Volume 19. — 1166-1180 pp.
14. Zhuang X. University of Osnabrueck. ShearLab A rationally designed digital shearlet transform. [сайт] — Режим доступа: <http://shearlab.org/>.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИЛИВНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ В ГЕОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

А.Н. Мацулев^{1,3}, К.В. Симонов^{2,3}

¹Институт химии и химической технологии СО РАН, matsulev@icct.ru

²Институт вычислительного моделирования СО РАН, simonovkv@icm.krasn.ru

³Сибирский федеральный университет

Введение

Исходя из общих, известных в современной сейсмологии методологических положений о возможности прогноза землетрясений (Касахара, Садовский, Соболев и др.), в настоящее время успешно анализируется развитие во времени энергетических процессов подготовки сильных землетрясений для выделенных очаговых зон [13]. Первоначальным эталоном для обоснования разрабатываемого подхода к анализу сейсмических процессов послужило известное Алтайское землетрясение 27 сентября 2003 г. с $M \approx 7.3$. Землетрясение ощущалось на значительной территории и проявилось в виде сотрясений 3-4 балла на расстоянии 800 км от эпицентра в г. Красноярске. На основе изучения этих данных выявлены и сформулированы прогностические признаки для интерпретации на условных «сейсмограммах» этапов процесса подготовки сильнейшего землетрясения [13]. Для анализа катастрофического землетрясения в районе Центральных Курил (15.11.2006) будет показана возможность применения этой схемы для выделения и представления энергетических (магнитудных) признаков подготовки основного землетрясения. Показаны возможности применения концепции барицентра при изучении геодинамических процессов подготовки сильных землетрясений для выделенных очаговых областей. Выполнен также обзор исследований о связи особенностей сейсмичности с приливами для различных пространственно-временных масштабов.

1. Выделение и анализ приливных землетрясений

После разрушительного Лиссабонского землетрясения И. Кант обратил внимание на связь землетрясений с приливными силами. Согласно его гипотезе, энергия, передаваемая твердой оболочке Земли приливными воздействиями Луны и Солнца, должна накапливаться в породах до некоторых пороговых значений и затем сбрасываться (разряжаться) в виде землетрясений различной силы. В дальнейшем многие ученые обращались к проблеме влияния приливных сил на сейсмический режим. В настоящее время геофизики и сейсмологи проявляют большой интерес к поиску скрытых периодичностей в квазистохастическом процессе возникновения землетрясений [1, 4, 7-10, 14-17]. В работах [3, 11-12] на примерах анализа сейсмической активности на Камчатке показана возможность выделения так называемых приливных землетрясений. Предложена методика выделения пространственных зон, в которых в течение некоторого интервала времени (перед сильным землетрясением) слабая сейсмичность коррелирует с земными приливами. Показано, что в области очага землетрясения существуют зоны, в пределах которых время возникновения слабых ($K \geq 8.5$) землетрясений соответствует определенным фазам земных приливов на протяжении нескольких лет перед основным событием.

Суть методики состоит в следующем: на момент каждого землетрясения t_j рассчитываются значения фаз основных волн приливного гравитационного потенциала $\{\varphi_i(t_j)\}$, где i – тип приливной волны. К основным волнам относятся O_1 (лунная главная, период $T = 25.82$ час.), K_1 (лунно-солнечная деклинационная, $T = 23.93$ час.), P_1

(солнечная главная, $T=24.07$ час.), Q_1 (лунная большая эллиптическая, $T = 26.87$ час.), M_2 (лунная главная, $T = 12.42$ час.), S_2 (солнечная главная, $T = 12.82$ час.), N_2 (лунная большая эллиптическая, $T = 12.66$ час.). При сканировании пространства выявляются зоны, в которых наблюдается статистически значимое отличие распределения приливных фаз для землетрясений, попавших в эти зоны, от равномерного распределения. Для оценки этого эффекта используется распределение Мизеса, описываемое функцией:

$$f(\varphi) = \exp[K \cdot \cos(\varphi - \varphi_0)] / [2\pi J_0(K)],$$

где K – концентрация, φ – фаза приливной волны, имеющая среднее значение φ_0 , $J_0(K)$ – функция Бесселя.

Распределение Мизеса является базовым при рассмотрении угловых величин (к которым относятся фазы волн), подобно распределению Гаусса при распределении случайной величины на прямой. При этом концентрация K характеризует разброс единичных значений выборки относительно среднего направления: чем выше K , тем меньше разброс, при $K = 0$ распределение является равномерным. Для оценки значимости полученных параметров распределения Мизеса применен критерий Рэля. Далее рассматриваются зоны землетрясений, для которых значения концентрации K превышают критическое значение K , по уровню значимости $\alpha = 0.01$.

Для оценки значимости выявленных зон использовалось статистическое моделирование (метод Монте-Карло) – выделение аналогичных зон из случайного каталога. При этом случайный каталог формировался следующим образом: координаты землетрясений оставались реальными, а время рассчитывалось исходя из экспоненциального распределения временных интервалов между землетрясениями, что соответствует пуассоновскому процессу. Из случайного времени землетрясения следует случайная фаза приливной волны на момент этого землетрясения. Обязательным условием является соответствие модельного каталога реальному в пространственно-энергетическом аспекте: количество и энергия землетрясений модельного каталога тождественны реальному. К такому случайному каталогу применяется весь описанный выше комплекс процедур. При выборе параметра, по которому следует проводить сравнение между результатами обработки реального и случайного каталога, предпочтение отдано количеству землетрясений n , формирующих единичную аномалию. Проведение расчетов по достаточно большому числу случайных каталогов позволяет построить функцию $F_{rand}(n)$, связанную с функцией распределения, и выводы о надежности результатов базируются на совместном анализе функции $F_{rand}(n)$ и аналогичной функции того же параметра, полученной для реальных каталогов, – $F_{real}(n)$.

В итоге, предполагается существование как относительно непродолжительных во времени (несколько лет) зон, где проявляются приливные свойства землетрясений, так и долгоживущих (авторы определяют их как фоновые). По имеющимся в наличии данным, т.е. результатам детальных сейсмологических наблюдений на Камчатке с 1962 г., имеется возможность обнаружить аномалии, существующие в течение 40 лет. Если как причину существования первого типа аномалий можно рассматривать временные вариации напряженного состояния среды, в частности, в области подготовки сильного землетрясения, то фоновые зоны, возможно, связаны с его региональными особенностями. Для обнаружения фоновых зон «приливных» землетрясений использован каталог 1965–2004 гг., ограниченный по глубине сверху $h = 30$ км и очищенный от афтершоков. Размер выделенных зон сравним с размерами очага.

2. Особенности пространственно-временных распределений сильнейших землетрясений

В исследованиях [2, 5-6] приведены результаты изучения особенностей пространственно-временных распределений сильнейших землетрясений, а также представлена физическая аргументация, проясняющая природу отмеченных особенностей изучаемого сейсмического процесса. Анализ материалов электронного каталога землетрясений NEIC (около 200 000 событий) показал, что количество землетрясений распределено по широтным интервалам вполне закономерным образом. В районе полюсов планеты землетрясения практически не происходят, в высоких широтах их количество весьма невелико, а по мере приближения к экватору резко возрастает. Суммарная энергия землетрясений изменяется по широтным поясам в целом аналогичным образом. На гистограммах отмечаются два локальных максимума в низких широтах: в районе $35-40^\circ$ с.ш. и вблизи 10° ю.ш. В районе экватора отчетливо виден неглубокий локальный минимум.

Предлагается, что действие приливных сил и возмущений, вызываемых прецессией и качанием полюса, следует считать главными факторами, определяющими характер распределения количества землетрясений по широте. Выделение периодичности в переключении сейсмической активности во времени между северным и южным полушариями планеты следует рассматривать как подтверждение существования экваториальной плоскости симметрии в проявлениях сейсмического режима. Природа этого явления может объясняться воздействием длиннопериодной составляющей солнечного прилива на твердое внутреннее ядро, перемещение которого в плоскости эклиптики с периодами в 6-7 и 18,6 лет приводит к малым смещениям центра Земли из одного полушария в другое и определенным изменениям в сейсмическом режиме.

Чрезвычайно важным результатом проведенных исследований представляется обнаружение границы раздела между глубокими землетрясениями, распределенными равномерно на внутригодовой временной шкале, и неглубокими (до 80 км), распределение которых по месяцам является неравномерным с вероятностью 0,99. Этот факт свидетельствует о том, что в подготовке и реализации неглубоких землетрясений существенная роль принадлежит внешним периодическим воздействиям, а глубокие очаги на эти воздействия не реагируют.

Физический сценарий развития событий, поддерживающих сейсмический процесс, по мнению авторов, может быть представлен следующим образом. Земля вместе с Луной в процессе своего движения по эклиптике входит, постепенно ускоряясь, в зону возрастания приливного воздействия Солнца. Рост приливных сил приводит к росту напряжений и накоплению поврежденностей в верхней части литосферы. Периодические повторения такого процесса ведут к эффективному аккумулярованию механической энергии в готовящихся очагах и проявлению периодических изменений в сейсмической активности. Роль вариаций угловой скорости вращения Земли остается пока недостаточно ясной, однако резкая смена ускорения на замедление в ноябре-декабре и плавное существенное замедление вращения планеты в апреле должны, очевидно, сказываться соответственно на внутригодовых изменениях сейсмического режима.

3. Сравнительный анализ данных геомониторинга для выделенной очаговой области в районе Центральных Курил

Выполнен сравнительный анализ процесса подготовки сильного землетрясения (район Центральных Курил, 15.11.2006) для выделенной очаговой области с динамикой барицентра и другими глобальными геофизическими факторами. Расчеты координат

барицентра выполнены на основе численных эфемерид DE405/LE405 созданных в Лаборатории реактивного движения (JPL) Калифорнийского технологического института США: (ssd.jpl.nasa.gov). Приведена вычислительная методика расчета координат положения барицентра и результаты анализа данных геомониторинга.

В районе Центральных Курил 15 ноября 2006 г в 11:14 UTC произошло сильнейшее цунамигенное землетрясение с магнитудой $M_w=8.3$. Эпицентр землетрясения располагался на континентальном склоне Курило-Камчатского глубоководного желоба, примерно в 90 км к юго-востоку от о-ва Симушир. Землетрясение вызвало трансокеанское цунами, проявившееся по всему Тихому океану, включая побережье Японии, Гавайских островов, Аляски, Канады, Перу, Чили, Новой Зеландии и западное побережье США. Это цунами (как и землетрясение) не привело к человеческим жертвам, однако по характеру проявления в масштабах всего тихоокеанского региона, и по удаленности от очага населенных пунктов, пострадавших от пришедших волн, в частности, Кресент-Сити, Калифорния, расположенный в 6600 км от эпицентра землетрясения, это цунами явилось сильнейшим событием такого рода, наблюдавшимся в Тихом океане за последние 40 лет после катастрофического Аляскинского цунами 28 марта 1964 г.

Следует подчеркнуть, что ноябрьское Курильское цунами 2006 г (Симуширское) было одним из первых сильных цунами в Тихом океане, произошедшим в «инструментальную эру», и оно с высокой точностью зарегистрировано многочисленными цифровыми береговыми мареографами, а также глубоководными станциями ДАРТ (США), расположенными в открытой части океана. Это цунами произошло менее чем через два года после катастрофического землетрясения и цунами 26 декабря 2004 г в Индийском океане, вызвавшего беспрецедентные разрушения и человеческие жертвы, и, как следствие, способствовавшего резкой активизации исследований в области цунами. Высокая вероятность подобного события в районе Средних Курил в ближайшей перспективе была предварительно выявлена, район предполагаемого землетрясения был исследован, а различные сценарии формирования и распространения волн цунами были промоделированы. Таким образом, возможно впервые в практике изучения цунами, событие начало исследоваться еще до того, как оно фактически произошло.

Спустя два месяца, 13 января 2007 г, в районе Центральных Курил зарегистрировано второе землетрясение (Второе Симуширское землетрясение), имевшее близкую магнитуду ($M_w = 8.1$). Эпицентр его главного толчка располагался на океанической стороне Курило-Камчатского желоба примерно в 100 км к востоку от эпицентра землетрясения 15 ноября 2006 г. в пределах океанической литосферной плиты. Несмотря на близость очаговых зон и несомненную связанность этих двух событий, по своим сейсмическим параметрам второе землетрясение существенно отличалось от первого. Землетрясение 13.01.2007 также вызвало транс-тихоокеанское цунами, зарегистрированное на Курилах, в Японии, на Гавайских и Алеутских островах, а также на побережье Аляски, Британской Колумбии, Орегона, Калифорнии, Перу и Чили. Однако отличия в характере сейсмического очага привели к существенным отличиям в параметрах возбужденных волн цунами, в частности в знаке первой волны, распространявшейся в открытый океан: положительной для цунами 2006 г и отрицательной для цунами 2007 г.

Таким образом, на основе «энергетических» представлений об очаговой области [13] предлагается алгоритмическая схема для описания динамики сейсмического процесса в период подготовки и реализации сильного землетрясения. Алгоритмическая схема предназначена для осуществления прогноза ожидаемого землетрясения и

основана на анализе пространственно-временной последовательности сейсмических событий. Алгоритмическая схема на первом этапе включает выделение области подготовки сильного землетрясения. Критерием для такого выделения служат признаки, характеризующие общий повышенный фон значений ряда предвестников, которые регистрируются на основе организованной в исследуемой области системы комплексного геомониторинга. В частности, результаты сейсмического контроля определенной сеймотектонической структуры, которая характеризуется повышенным сейсмическим режимом, могут служить основанием для начала специального анализа данных для целей прогноза ожидаемого землетрясения.

Далее, выполняется разделение регистрируемых сейсмических событий в анализируемой пространственно-временной последовательности на высокоэнергетические и низкоэнергетические уровни, характеризующие состояние изучаемой среды и определяющие условия возникновения сильного землетрясения. В результате выделяется сейсмоактивная очаговая область L (сейсмическая система), характеризующая определенный объем среды V , который включает землетрясения наблюдаемой последовательности в диапазоне магнитуд: $M_{min} < M < M_{max}$.

При этом сейсмические события в интервале $M_{min} < M < M^*$ определяют особенности сейсмического процесса (землетрясения-индикаторы), а магнитуды в интервале $M^* < M < M_{max}$ – представляют прогнозируемые сильные землетрясения, где M^* – некоторая пороговая магнитуда. В период наблюдений над реальным процессом возможно выделение отдельных частей $Li(Vi)$ исследуемой области $L(V)$, которые представляют сегменты основного активного разлома или зоны, генерирующие сильные землетрясения. Эти сегменты можно считать относительно однородными сеймотектоническими зонами с однотипными характеристиками землетрясений. В качестве характерного временного интервала изучаемого сейсмического процесса рассматриваются периоды между двумя сильными землетрясениями $T_k = t_k - t_{k-1}$. Количественное описание сейсмического процесса в течение временного интервала T_k – это установление закономерностей в последовательности землетрясений $M_{min} < M(t) < M^*$ для целей прогноза с определенной точностью параметров сильного землетрясения: времени возникновения сильного землетрясения t_k и магнитуды $M(t_k) > M^*$.

Разработанная алгоритмическая схема применяется к данным о землетрясениях в районе Центральных Курил. При рассмотрении процесса в этой области выделяются 2 сейсмоактивные очаговые зоны радиусом 200 км. В рассматриваемой сейсмической системе наблюдаются землетрясения с магнитудами в интервале $3 < M < 8.2$. Все сейсмические события также отображаются на энергетических диаграммах. В итоге, в ходе наблюдения сейсмического процесса в районе Центральных Курил построено 2 энергетических клина, предшествующих 2 крупным землетрясениям 15.11.06 и 13.01.07 с магнитудой $M=8.2$. Выполнен сравнительный анализ данных геомониторинга сейсмического процесса очаговой области в районе Центральных Курил для различных очаговых зон (15.11.2006 г. и 13.01.2007 г.) с динамикой барицентра и другими глобальными геофизическими факторами.

Заключение

Показано, что перед сильным землетрясением состояние среды изменяется, это проявляется в локальной изменчивости ее тензочувствительности и избирательности отклика на приливное воздействие.

Выполнен сравнительный анализ процесса подготовки катастрофических землетрясений в районе Центральных Курил с динамикой барицентра и другими внешними глобальными геофизическими факторами.

Список литературы

1. Авсюк Ю.Н., Худзинский Л.Л., Суворова И.И. Связь сейсмичности Земли с приливным воздействием Луны и Солнца // Вычислит. сейсмология. – 2002. – Вып. 33. – С. 311–336.
2. Володичев Н.Н., Подорольский А.Н., Левин Б.В., Подорольский Вл.А. Корреляция появления крупных серий землетрясений со временем фаз новолуния и полнолуния // Вулканология и сейсмология. – 2001. – № 1. – С. 60-67.
3. Гордеев Е.И., Салтыков В.А., Сеницын В.И., Чебров В.Н. К вопросу о связи высокочастотного сейсмического шума с лунно-солнечными приливами // Докл. АН. – 1995. – Т. 340. – № 3. – С. 386—388.
4. Гусев А.А., Петухин А.Г. О возможной синхронизации сильных землетрясений 18,6-летним циклом, его долями и кратными // Вулканология и сейсмология. – 1997. – № 3. – С. 64-79.
5. Левин Б.В., Сасорова Е.В., Журавлев С.А. Внутригодовая повторяемость активизации сейсмического процесса для Тихоокеанского региона // Докл. АН. – 2005. – Т. 403. – № 4. – С. 1–7.
6. Левин Б.В., Сасорова Е.В. Обнаружение неслучайной компоненты в распределении землетрясений между северным и южным полушариями Земли: наблюдения и моделирование // Докл. АН. – 2005. – Т. 401. – № 1. – С. 84-88.
7. Любушин А.А. (мл.), Писаренко В.Ф. Выделение периодичностей в сейсмическом режиме // Вулканология и сейсмология. – 1998. – № 1. – С. 62–76.
8. Мельхиор П. Земные приливы. – М.: Мир, 1968. – 482 с.
9. Николаев В.А. Пространственно-временные особенности связи сильных землетрясений с приливными фазами. Наведенная сейсмичность. – М.: Наука, 1994. – 240 с.
10. Рыкунов Л.Н., Смирнов В.Б. Вариации сейсмичности под действием лунно-солнечных приливных деформаций // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1985. – № 1. – С. 97-103.
11. Салтыков В.А., Иванов В.В., Кугаенко Ю.А. Воздействие земных приливов на сейсмичность перед землетрясением 13 ноября 1993 года $M = 7,0$ (Камчатка) // Физика Земли. 2004. – № 7. – С. 25–34.
12. Салтыков В.А. О воздействии земных приливов на сейсмические процессы // Проблемы сейсмичности Дальнего Востока / под ред. Викулина А.В. Петропавловск-Камчатский, 2000. – С. 12–21.
13. Сибгатулин В.Г., Симонов К.В., Перетокин С.А. Оценка сейсмической опасности юга Центральной Сибири. – Красноярск: КНЦ, 2004. – 192 с.
14. Тюпкин Ю.С. Модулирование слабой сейсмичности приливными деформациями перед сильными землетрясениями // Вулканология и сейсмология. – 2002. – № 3. – С. 3-10.
15. Уильямс Дж. Е. Приливные ритмы: ключ к истории вращения Земли и эволюции лунной орбиты // J. Phys. Earth. – 1990.
16. Фридман А.М., Клименко А.В., Поляченко Е.В., Фридман М.В. О связи глобальной сейсмической активности Земли с особенностями ее вращения // Вулканология и сейсмология. – 2005. – № 1. – С. 67–74.
17. Tanaka S., Ohtake M., Sato H. Evidence for tidal triggering of earthquakes as revealed from statistical analysis of global data // Journal of Geophysical Res. V. Solid Earth. – 2002. – V. 107. – N 10.

НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗЛИЧИЙ СЕКРЕЦИИ У ДЕТЕЙ СЕВЕРА И СИБИРИ С ЯЗВЕННОЙ БОЛЕЗНЬЮ ЖЕЛУДКА И ДВЕНАДЦАТИПЕРСТНОЙ КИШКИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИНТЕНСИВНОСТИ ДУАДЕНОГАСТРАЛЬНОГО РЕФЛЮКСА

Т.В. Петровская, Л.А. Жуков, А.В. Хомич, Н.В. Решетникова

ГУ медицинских проблем Севера СО РАМН,
Сибирский Государственный Технологический Университет,
Краевое УПК, г. Красноярск,
sibstu2006@rambler.ru

Нами впервые проведена исследовательская работа по использованию и внедрению в гастроэнтерологию разработанных новых нейросетевых методов для обработки показателей фракционного желудочного содержимого.

Впервые осуществляется поиск и построение эффективных нейросетевых моделей для решения поставленных задач по изучению функционального состояния секреторной функции желудка у больных детей Заполярья и Сибири при ЯБ, ЯБДПК и дуоденогастральном рефлюксе (АГР).

В отечественной и зарубежной литературе материалов по данной теме нет.

Цель работы: с помощью нейронной сети установить диагностическую значимость параметров секреторной функции для диагностики ЯБ, ДГР у больных детей, выявить особенности клинических проявлений синдрома дуоденогастрального рефлюкса.

Алгоритмы обучения нейронных сетей, реализованные в нейроимитаторе, традиционно разделяют на две большие группы: с учителем (для задач с известным полем ответа); без учителя (задачи классификации или таксономии). В данной работе использовались обе группы алгоритмов.

Петровской Т.В. была создана база данных из 475 примеров исследованных детей (Сибирь - г. Красноярск, Заполярье – Таймыр, г.Норильск и г. Дудинка). Измерения проводились по 29 показателям фракционного желудочного зондирования (тощаксовая, базальная, стимулированная гистамином и ферментативная пробы), с использованием MS Excel 7. Также учитывалась область проживания больного и выставленный диагноз. Используемые показатели приведены в Таблице 1.

Таблица 1

Структура файла базы данных входных параметров

Обозначение	Показатели X	Единицы измерения
V ₁	объем тощаксовой порции	Мл
V ₂	общая HCl тощаксовой порции	м*экв/г
V ₃	свободная HCl тощаксовой порции	м*экв/г

V ₄ , V ₇ , V ₁₀ , V ₁₃	объем базальной секреции 1-4 порции	Мл
V ₅ , V ₈ , V ₁₁ , V ₁₄	общая HCl базальной секреции 1-4 порции	м*экв/г
V ₆ , V ₉ , V ₁₂ , V ₁₅	свободная HCl базальной секреции 1-4 порции	м*экв/г
V ₁₆ , V ₁₉ , V ₂₂ , V ₂₅	объем стимулированной секреции 1-4 порции	мл
V ₁₇ , V ₂₀ , V ₂₃ , V ₂₆	общая HCl стимул. секреции 1-4 порции	м*экв/г
V ₁₈ , V ₂₁ , V ₂₄ , V ₂₇	свободная HCl стимул. секреции 1-4 порции	м*экв/г
P ₁ 28	пепсин базальной секреции	мг %
P ₂ 29	пепсин стимулированной секреции	мг %
S 30	область проживания больного (+1 – Сибирь и Крайний Север, -1 – Красноярск и прилегающие районы)	
J 31	признаки наличия у больного язвы желудка и двенадцатиперстной кишки	
GD 32	признаки наличия у больного гастроудодуоденита	
DGR 33	признаки наличия у больного дуоденогастрального рефлюкса	

Цель исследования первого этапа

Целью исследования явилось построение и анализ нейросетевых моделей (2,3,4,5) прогноза показателей фракционного желудочного зондирования для установления диагностической значимости параметров при ЯБ, ЯБДПК и дуоденогастральном рефлюксе.

Методика исследования

Все значения показателей предварительно были приведены к диапазону [-1. +1]. Для каждой порции желудочной секреции автоматически конструировалась и обучалась нейронная сеть [2, 3, 6], предсказывающая значение общей и свободной HCl. Был проведен регрессионный и корреляционный анализ [8]. Результаты регрессионного и корреляционного анализа сравнивались с результатами нейросетевого анализа.

Используемые программные и аппаратные средства

Для синтеза нейросетевой модели использовался нейроимитатор BuilderBrains 1.0 под управлением ОС MS Windows NT. В качестве аппаратной платформы использовался кластер из трех персональных компьютеров с процессором Intel Celeron 1500 Мгц и 256 Мб оперативной памяти.

Анализ результатов нейросетевого моделирования

Моделирование показало, наиболее успешно удалось спрогнозировать показатели V6, V9, V11, V12, V15, V17, V20, V21, V23, V24, V26, V27. Коэффициенты корреляции между прогнозируемым и фактическим значением показателей представлены в таблице 2.

Таблица 2

Коэффициенты корреляции между прогнозируемым и фактическим значением

Прогнозируемый показатель	V6	V9	V11	V12	V15	V17	V20	V21	V24	V26	V27
Нейросетевая модель	0.91	0.85	0.88	0.80	0.94	0.80	0.92	0.82	0.90	0.90	0.82
Линейная модель	0.86	0.85	0.94	0.87	0.84	0.78	0.54	0.52	0.80	0.80	0.80

Как видно из таблицы 2, только для показателей V11 и V12 линейная модель незначительно точнее нейросетевой модели. Для показателей V15, V20, V21, V24 и V26 нейросетевая модель значительно точнее линейной модели. Анализ влияния показателей на прогноз показал, что для подтверждения диагноза язвенной болезни наибольшую значимость имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя V26. Для подтверждения диагноза дуоденогастрального рефлюкса наибольшую значимость имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя V6.

Линейный регрессионный анализ.

Для показателей приведенных в таблице 2 были построены линейные регрессионные модели представленные ниже.

$$V6=0.438*V3+0.3643*V9+0.1038*V15-0.0058*GD-0.0004*DGR-0.0004$$

$$V9=0.0108*V5+0.4334*V6+0.5232*V12+0.0244*V27+0.0013*S+0.0012*J+0.0008$$

$$V11=0.1872*V6+0.8178*V8+0.1233*V15-0.0311*V23+0.0017$$

$$V12=0.291*V8+0.5138*V15+0.0648*V18+0.073*V27+0.0023$$

$$V15=0.8714*V12+0.0897*V23-0.0004*V27-0.0029$$

$$V17=0.2995*V8+0.2366*V20+0.3025*V21+0.1204*V26-0.1429*V27-0.001$$

$$V20=0.2929*V2-0.1254*V3+0.0973*V5+0.4129*V8+0.0013$$

$$V21=0.5038*V15-0.0089*J+0.0117*GD-0.009*DGR-0.0115$$

$$V24=0.1164*V6+0.2544*V14+0.5666*V18+0.0006$$

$$V26=0.633*V23-0.0096*S+0.0014*J-0.0016*GD-0.0056*DGR-0.0095$$

$$V27=-0.2813*V8+0.4634*V9+0.7916*V23-0.0037*J-0.003*GD-0.0045*DGR-0.0072$$

Проведем сравнение оценок информативности показателей, полученных в ходе нейросетевого и корреляционного анализа. В качестве оценок информативности корреляционного анализа брались коэффициенты корреляции, взятые по модулю и умноженные на 100. Ниже в виде диаграмм приводятся оценки информативности нейросетевого и корреляционного анализа для наиболее надежных прогностических моделей.

Показано установление наибольшей диагностической значимости показателя

V6 с помощью нейронной сети для подтверждения диагноза дуоденогастрального рефлюкса DGR и его интенсивности при язвенной болезни.

Таблица 3.
Оценки информативности показателей для прогнозирования V6

	V3	V9	V15	GD	DGR
Нейросетевой анализ	8	24	4	11	30
Корреляционный анализ	76	75	60	5	1

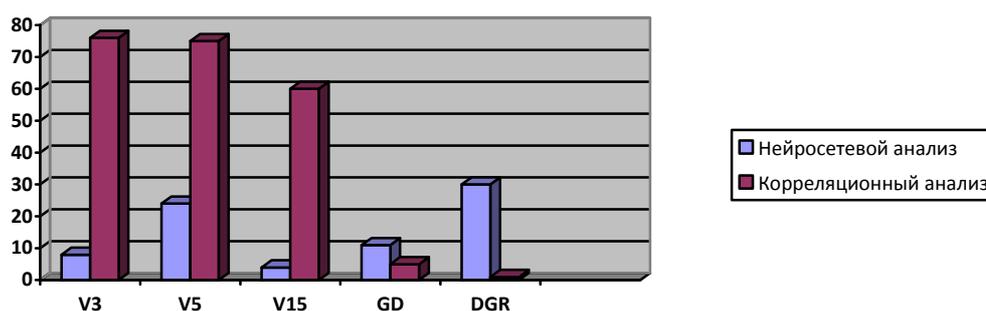


Диаграмма 1. Оценки информативности показателей при прогнозировании V6

Диаграмма показывает, что нейросетевой анализ существенно расходится с корреляционным анализом в оценке информативности V3, V9, V15 и DGR. Если в нейросетевом анализе информативность V9 заметно выше информативности V3 и V15, то в корреляционном анализе такое различие менее заметно. Вероятно, влияние V9 на прогноз имеет нелинейную составляющую. При нейросетевом анализе наибольшую информативность имеет факт наличия у больного DGR. При корреляционном анализе этот факт признается неинформативным. Это может быть объяснено тем, что влияние наличия у больного DGR на его показатель V6 носит существенно нелинейный характер.

Для иллюстрации приводим выборочные примеры разницы в состоянии секреторной функции желудка в зависимости от локализации язвы в желудке и ДПК.

1 пример. Состояние секреторной функции желудка у детей Заполярья, страдающих ЯБДПК. Группа больных с ЯБДПК J V26.

Таблица 4

Наибольшую значимость для подтверждения диагноза язвы имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя J V26.

Прогнозируемый показатель	V26
Показатели, используемые для прогноза V26	V23,S,J, GD, DGR
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V26	0,90

Степень влияния показателей на результат прогноза V26 по 100 бальной шкале

Таблица 5

Оценки информативности показателей для проведения V26

	V23	S	J	GD	DGR
Нейросетевой анализ	37	5	26	15	11
Корреляционный анализ	80	2	1	4	7

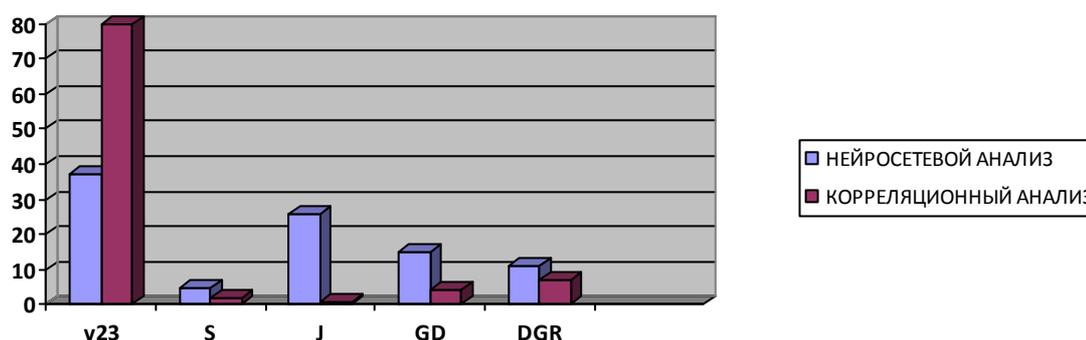


Диаграмма 2. Оценка информативности показателей для прогнозирования V26

Наибольшая информативность для прогноза V26 как в нейросетевом, так и в корреляционном анализе отдается показателю V23. Но остальные признаки корреляционный анализ определяет как неинформативные. Нейросетевой анализ оценивает признаки наличия у исследуемого J, GD и DGR как заметно влияющие на V26. Это связано с нелинейным характером влияния признака наличия J, GD и DGR на прогноз V26.

2 пример. Состояние секреторной функции у детей Сибири при ЯБДПК. J V27.

Прогнозируемый показатель	V27
Показатели, используемые для прогноза V27	V8, V9, V23, J, GD, DGR
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V27	0,82

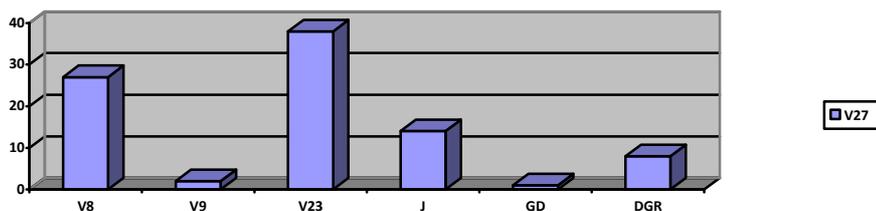


Диаграмма 3. Степень влияния показателей на результат прогноза V27 по 100 бальной шкале

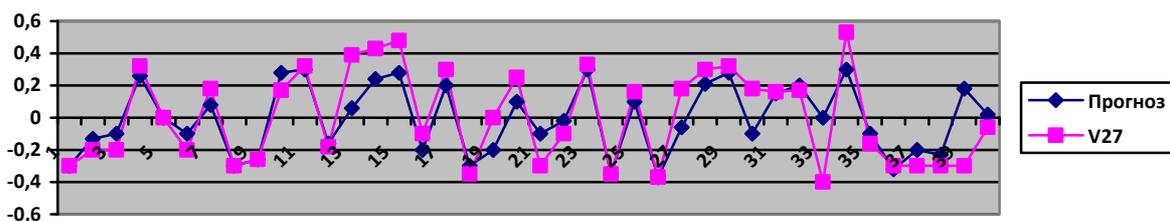


Рис.1. Примеры прогноза и фактических значений V27.

Таблица 6
Оценка информативности показателей при прогнозировании V27
Свободная НСІ стимулированной секреции, 4 порция

	V 8	V 9	V 23	J	GD	DGR
Нейросетевой анализ	27	2	38	14	1	8
Корреляционный анализ	49	51	78	1	4	6

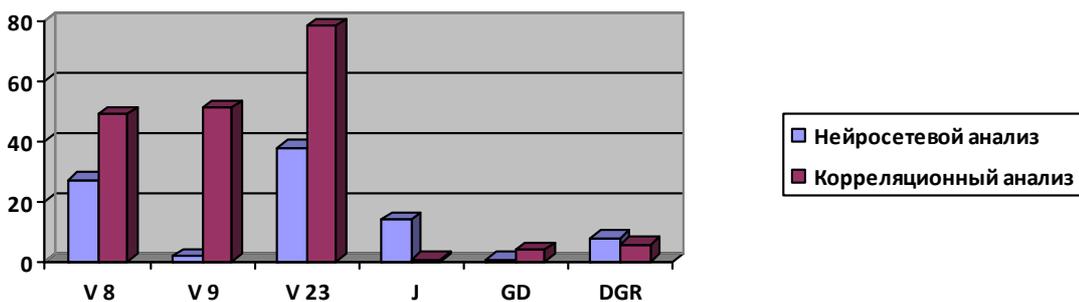


Диаграмма 4. Оценка информативности при прогнозировании V27

Наибольшая информативность для прогноза V27 как нейросетевом, так и в корреляционном анализе отдается показателю V 23.

Признаки наличия у испытуемого J и DGR корреляционный анализ оценил как не влияющие на прогноз V27. Однако нейросетевой анализ учел нелинейность их влияния на прогноз и дал им заметную оценку информативности.

3 пример. Группа больных с ЯБЖ, проживающих в Заполярье

Прогнозируемый показатель	V3
Показатели, используемые для прогноза V3	V5, V17, V26, GD, DGR
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V3	0,65

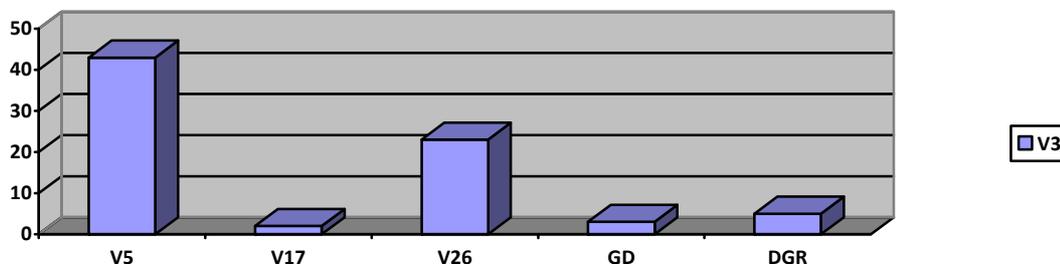


Диаграмма 5. Степень влияния показателей на результат прогноза V3 по 100 бальной шкале

4 пример. Группа больных с ЯБЖ, проживающих в Сибири

Прогнозируемый показатель	V5
Показатели, используемые для прогноза V5	V2, V8, S, J, DGR
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V5	0,71

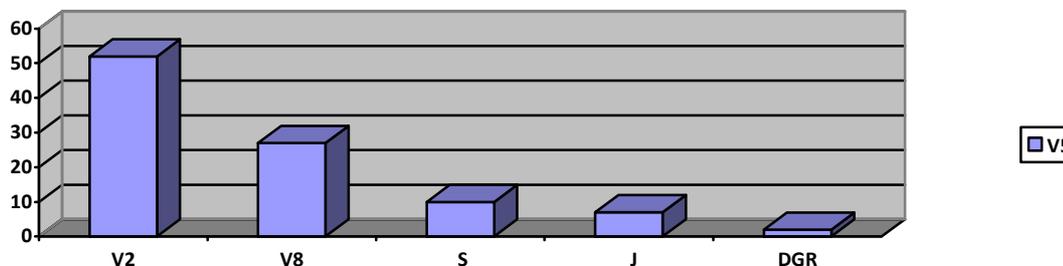


Диаграмма 6. Степень влияния показателей на результат прогноза V5 по 100 бальной шкале

Сопоставление и анализ результатов нейросетевой обработки 3-ей и 4-ой групп, также показывает тяжесть клинической картины и напряженность секреторной функции желудка у больных с ЯБДПК. J V3 в сравнении с больными V 5 с ЯБЖ в Сибири, указывает на различие в секреции в зависимости от выраженности ДГР.

Проведено сопоставление и анализ применения нейронных сетей для обработки результатов фракционного желудочного содержимого у больных с ЯБЖ и ЯБДПК с целью выявления различий в состоянии секреции в зависимости от выраженности ДГР установлены закономерности для каждой группы больных Заполярья и Сибири.

Язвенная болезнь характеризуется различной интенсивностью желудочной секреции в зависимости от локализации язвы, интенсивности ДГР. Эти различия проявляются на всех этапах секреторного цикла.

При локализации язвы в двенадцатиперстной кишке и выраженности ДГР желудочная секреция носит непрерывный характер и высокую кислотность. В порции натощак отмечается гиперсекреция и повышенная кислотность. При язвенной болезни двенадцатиперстной кишки общая кислотность увеличивается за счет выделения свободной соляной кислоты.

При желудочной локализации язвы (ЯБЖ) усиление кислотообразования в межпищеварительном периоде выявляется вдвое или втрое реже.

У больных дуоденальной язвой базальное и стимулирующее кислотообразование увеличено по сравнению с нормой в 4-5 раз у больных Севера и в 2-3 раза у сибиряков, в то время как при ЯБЖ в среднем оно незначительно отличается от нормы.

Особенностью секреторных нарушений при дуоденальной язве является высокая базальная и стимулированная гистамином гиперацидность у 79% обследованных мигрантов, у 75% детей выявлялась декомпенсация ощелачивания в антральном отделе и у 83% -определялся дуоденогастральный рефлюкс (ДГР). Интенсивность кислотопродукции у всех больных были значительно выше, чем при язвах желудка. Особенно возрастает интенсивность дуоденогастрального рефлюкса при обострениях язвенной болезни двенадцатиперстной кишки.

Секреторная функция желудка при язвенной болезни двенадцатиперстной кишки исследована у 24 больных сибиряков и у 20 северян. Больные разделены на группы – с неосложненной и осложненной язвой. В первой группе осложнения наблюдались у 25 % больных (подтверждено данными ФГС): деформации -14,3% и стенозы привратника – 5,7%, рубцовая деформация этой зоны с моторно-эвакуаторными нарушениями. Кроме того, выявлены множественные язвы, рубцовые язвы, рубцовые деформации луковицы двенадцатиперстной кишки.

Таким образом, при язвенной болезни двенадцатиперстной кишки имеют место различные нарушения секреторной функции желудка, связанные с моторикой и эвакуацией. У многих больных с гиперацидностью наблюдалась интенсивность кислотообразования значительно повышенная, субкомпенсация ощелачивания антрального отдела, выраженный ДГР.

Доказано, что использованные разработанные нами новые нейросетевые методы дополняют помощь в дифференциальной диагностике, как чувствительные и специфические тесты с целью предотвращения осложнений, рецидивов и обострения язвенных болезней. Поэтому, проведенная научно-исследовательская работа позволяет рекомендовать и использовать в гастроэнтерологии методы нейронных систем.

Список литературы

1. Горбань А.Н., Россиев Д.А. Нейронные сети на персональных компьютерах. Н.: Наука, 1996 г.
2. Гилев С.Е., Горбань П.Н., Миркес ЕМ., Коченов Д.А., Россиев Д.А. Определение значимости обучаемых параметров для принятия нейронной сетью решения об ответе// Нейроинформатика и нейрокомпьютеры: Тезисы докладов рабочего семинара, Красноярск, КГТУ, 1993 г., с.8.
3. Царегородцев В.Г. Производство полуэмпирических знаний из таблиц данных с помощью обучаемых искусственных нейронных сетей // Методы нейроинформатики. – Красноярск. Издательство КГТУ, 1998.
4. Россиев Д.А. Медицинская нейроинформатика // Нейроинформатика. Новосибирск: Наука, 1998 г. – 296с. С.137-211
5. Россиев Д.А. Самообучающиеся нейросетевые экспертные системы в медицине: теория, методология, инструментарий внедрение: Дисс.докт.мед.наук.- Красноярск, 1995 г. – 379 с.
6. Петровская Т.В., Орлова Е.П., Хомич А.В., Решетникова Н.В., Жуков Л.А. Нейросетевое изучение состояния секреторной функции желудка в детском возрасте с гастродуоденитами и язвенной болезнью в экологических условиях Сибири и Крайнего Севера // Красноярск. 2003 г. 23 с. Рукопись деп. в ВИНТИ 05.12.03 № 2113-В2003.
7. Петровская Т.В., Товбис Е.М. Нейросетевое исследование внутрижелудочной рН-метрии секреторной функции желудка у детей с гастродуоденитом, язвенной болезнью желудка, эрозивными гастритами в условиях Крайнего Севера и Сибири//Нейроинформатика, ее приложения и анализ данных: материалы XVI Всероссийского семинара. Красноярск; КГТУ, 2008, - с 102-106.
8. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – 9-е изд., стер. _М.: Высшая школа, 2003, 479 с.
9. Волосников Д.К. –Педиатрия, 1983, № 10, с.51-52.
10. Hinder R., Fimmel C., Pace F.e.a//Z. Gastroent. – 1983.V.21.-P.21-26.
11. Саакян А.Г., Шварц В.Я., Щадига Л.В. Макарова Л.А.// Клин.мед.-1978.-№11.- с.42-47.
12. Денисов М.Ю. Болезни органов пищеварения у детей и подростков. – Ростов п/Д.: Феникс, 2005. -608 с.

**НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИАГНОСТИКИ И ПРОГНОЗА
ПОКАЗАТЕЛЕЙ ФУНКЦИОННОГО ЖЕЛУДОЧНОГО СОДЕРЖИМОГО
У ДЕТЕЙ С ГАСТРОДУОДЕНАЛЬНОЙ ПАТОЛОГИЕЙ
В УСЛОВИЯХ ЗАПОЛЯРЬЯ И СИБИРИ**

Т.В. Петровская, Л.А. Жуков, А.В.Хомич

ГУ медицинских проблем Севера СО РАМН,
Сибирский Государственный Технологический Университет,
Краевое УПК г. Красноярск, *supremum76@rambler.ru*

Петровской Т.В. были созданы несколько баз данных. Для примера первая база состояла из 475 примеров исследованных детей Сибири: г. Красноярск, Заполярье-Таймыр: г.г. Норильска и Дудинка по 29 показателям фракционного желудочного зондирования (тощаковая, базальная, стимулированная гистамином и ферментативная пробы) с использованием MS Excel 7.

Алгоритмы обучения нейронных сетей, реализованные в нейроимитаторе, традиционно разделяют на две большие группы: с учителем (для задач с известным полем ответа); без учителя (задачи классификации или таксономии). В данной работе использовались обе группы алгоритмов.

Результаты клинических и лабораторных исследований на ЭВМ в электронных таблицах Excel 7, Microsoft Graph-5.

Исследовалась секреторная кислотообразующая и протеолитическая функция желудка у 6-групп детей с гастродуоденальной патологией в условиях Крайнего Севера и Сибири: гастродуоденит; язвенная болезнь желудка и двенадцатиперстной кишки; эрозивные гастриты.

Методика исследования

Все значения показателей предварительно были приведены к диапазону [-1, +1]. Для каждой порции желудочной секреции автоматически конструировалась и обучалась гетерогенная иерархическая нейронная сеть, предсказывающая значения общей и свободной HCl.

Анализ информативности показателей проводился только по автоматически отобранному показателю. Был проведен регрессивный и корреляционный анализ. Результаты регрессивного и корреляционного анализа сравнивались с результатами нейросетевого анализа.

Используемые программные и аппаратные средства

Для синтеза нейросетевой модели использовался нейроимитатор BuilderBrains 1.0 под управлением ОС MS Windows NT. В качестве вспомогательного программного средства использовался MS Excel 2000. В качестве аппаратной платформы использовался кластер из трех персональных компьютеров с процессором Intel Celeron 1500 Мгц и 256 Мб оперативной памяти.

Цель работы:

Целью исследования явилось построение и анализ нейросетевых моделей диагностики и прогноза показателей фракционного желудочного зондирования. Для выявления параметров с наибольшей значимостью подтвержденных установленный диагноз гастродуоденального заболевания у больных, проживающих в экологических условиях Крайнего Севера и Сибири.

Анализ результатов нейросетевого моделирования

Моделирование показало, наиболее успешно удалось спрогнозировать показатели V6, V9, V11, V12, V15, V17, V20, V21, V23, V24, V26, V27. Коэффициенты корреляции между прогнозируемым и фактическим значением показателей представлены в таблице 1.

Анализ влияния показателей на прогноз показал, что для подтверждения диагноза гастродуоденита наибольшую значимость имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя **V21** и **V23**. Для подтверждения диагноза дуоденогастрального рефлюкса наибольшую значимость имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя **V6**.

Таблица 1

Коэффициенты корреляции между прогнозируемым и фактическим значением

Прогнозируемый показатель	V6	V9	V11	V12	V15	V17	V20	V21	V24	V26	V27
Нейросетевая модель	0.91	0.85	0.88	0.80	0.94	0.80	0.92	0.82	0.90	0.90	0.82
Линейная модель	0.86	0.85	0.94	0.87	0.84	0.78	0.54	0.52	0.80	0.80	0.80

Коэффициенты диагностической значимости нормированы в диапазоне [0,100].

Для иллюстрации приводим три примера; анализа нейросетевого моделирования показателей секреции фракционного желудочного зондирования, подтверждающих диагнозы язвенной болезни – J V26; гастродуоденита GD V21, V23; дуоденогастрального рефлюкса DGR V6.

1 пример. Наибольшую значимость для подтверждения диагноза язвы имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя – J V26.

Прогнозируемый показатель	V26
Показатели, используемые для прогноза V26	V23,S,J, GD, DGR
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V26	0,90

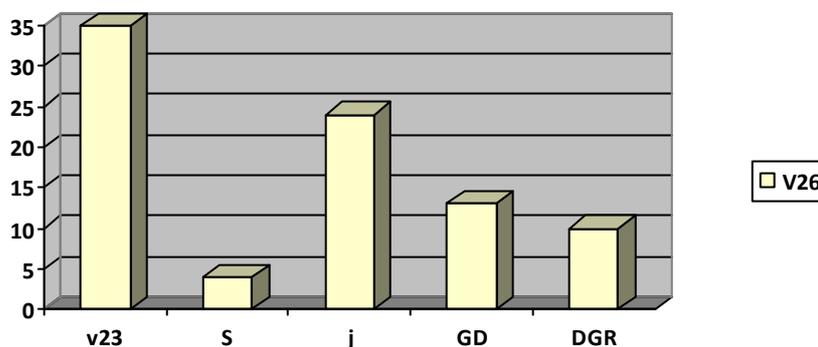


Диаграмма 1. Степень влияния показателей на результат прогноза V26 по 100 бальной шкале

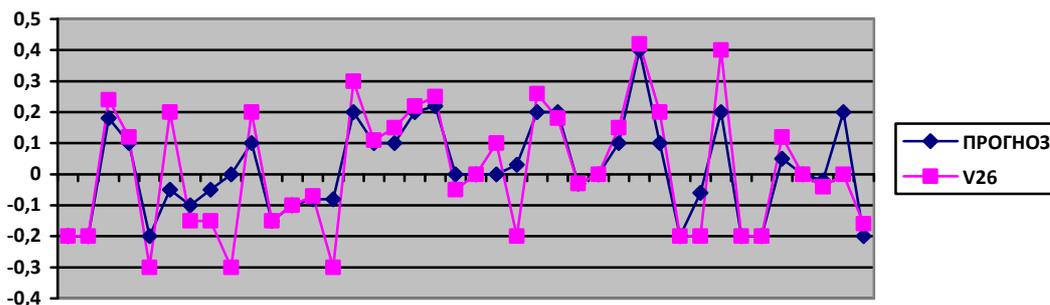


Рис.1. Примеры прогноза и фактических значений V26

Таблица 2
Оценки информативности показателей для проведения V26

	V23	S	J	GD	DGR
Нейросетевой анализ	37	5	26	15	11
Корреляционный анализ	80	2	1	4	7

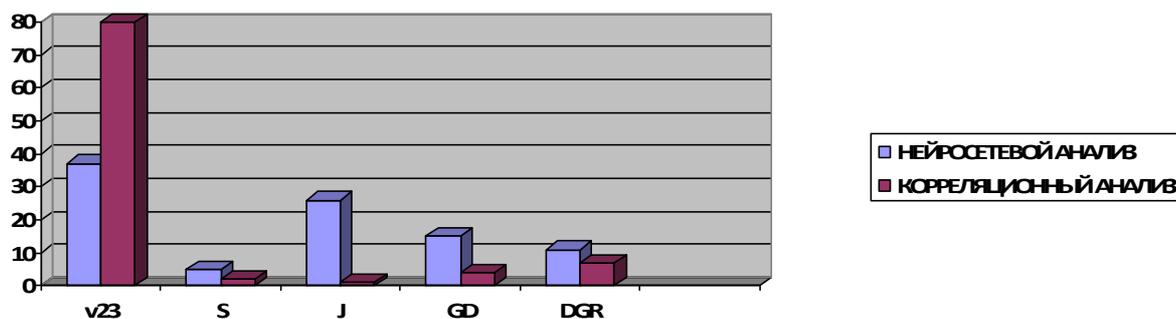


Диаграмма 2. Оценка информативности показателей для прогнозирования V26

Наибольшая информативность для прогноза V26 как в нейросетевом, так и в корреляционном анализе отдается показателю V23. Но остальные признаки корреляционный анализ определяет как неинформативные. Нейросетевой анализ оценивает признаки наличия у исследуемого J, GD и DGR как заметно влияющие на V26. Это связано с нелинейным характером влияния признака наличия J, GD и DGR на прогноз V26.

2 пример. Для подтверждения диагноза гастроудоденита: наибольшую значимость имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя GD V21 и V23.

Для подтверждения диагноза V21

Прогнозируемый показатель	V21
Показатели, используемые для прогноза V21	V15, J, GD, DGR
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V21	0,82

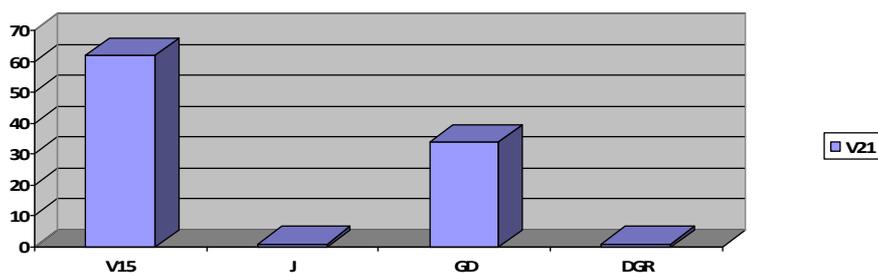


Диаграмма 3. Степень влияния показателей на результат прогноза V21 по 100 бальной шкале

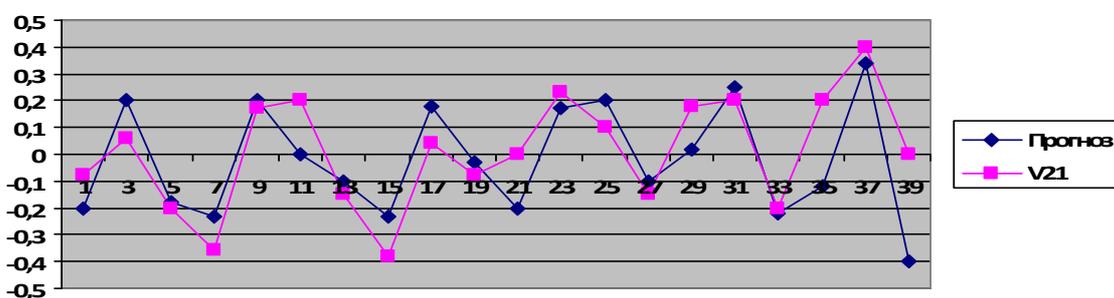


Рис. 2. Примеры прогноза и фактических значений V21 Таблица 3

- Оценки информативности показателей для проведения V21

	V15	J	GD	DGR
Нейросетевой анализ	62	1	34	1
Корреляционный анализ	51	0	5	5

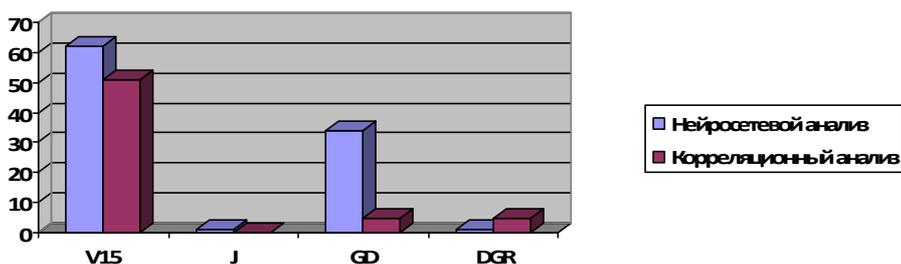


Диаграмма 4. Оценки информативности показателей прогнозировании

И нейросетевой, и корреляционный анализ выделяют показатель V15 как наиболее значимый для прогноза V21. Это можно объяснить тем, что влияние V 15 на V21 носит линейный характер. Корреляционный анализ оценил признак наличия у больного GD как незначимый для прогноза. Нейросетевой анализ оценил этот признак, как значимый. Это может объясниться нелинейным характером влияния этого признака на V21.

3 пример. Для подтверждения диагноза дуоденогастрального рефлюкса наибольшую значимость имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя DGR V6.

Установление наибольшей диагностической значимости показателя V6 с помощью нейронной сети для подтверждения диагноза дуоденогастрального рефлюкса DGR.

Прогнозируемый показатель	V6
Показатели, используемые для прогноза V6	V3, V9, V15, GD, DGR
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V6	0,91

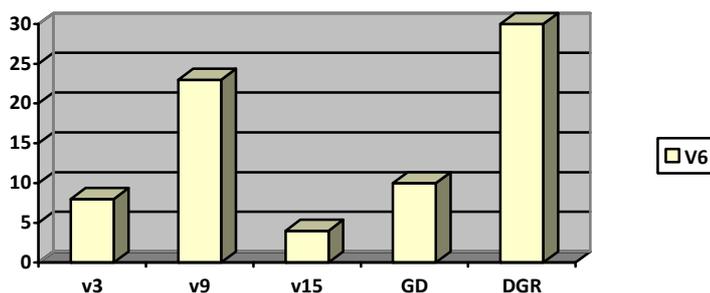


Диаграмма 5. Степень влияния показателей на результат прогноза V6 по 100 бальной шкале

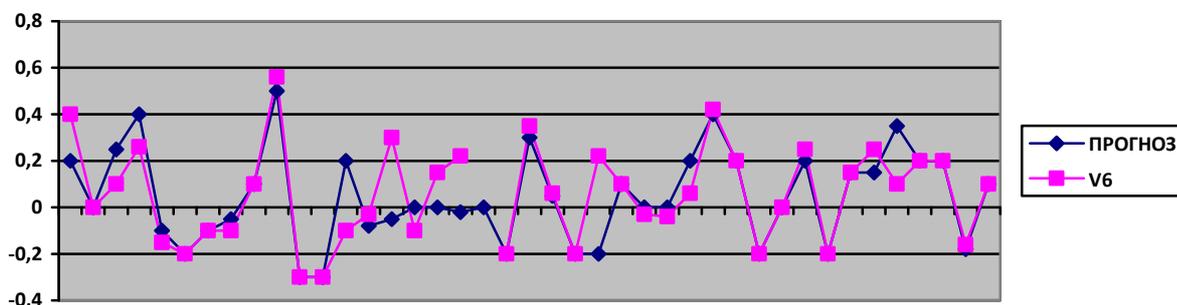


Рис. 3. Примеры прогноза и фактических значений V6

Таблица 4
Оценки информативности показателей для проведения V6

	V3	V9	V15	GD	DGR
Нейросетевой анализ	8	24	4	11	30
Корреляционный анализ	76	75	60	5	1

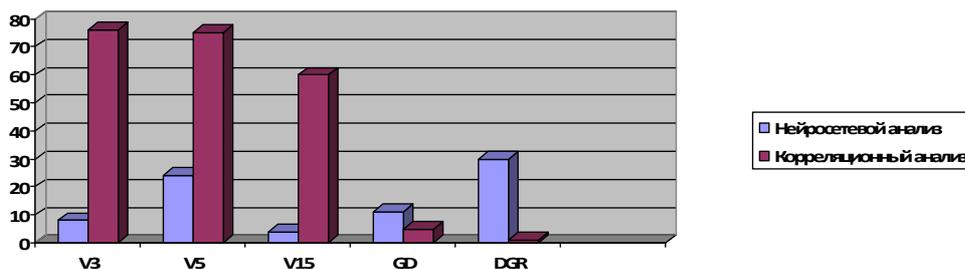


Диаграмма показывает, что нейросетевой анализ существенно расходится с корреляционным анализом в оценке информативности V3, V9, V15 и DGR. При нейросетевом анализе наибольшую информативность имеет факт наличия у испытуемого DGR. При корреляционном анализе этот факт признается неинформативным. Это может быть объяснено тем, что влияние наличия у больного DGR на его показатель V6 носит существенно нелинейный характер.

Из таблиц, графиков, диаграмм видно, что нейросетевое моделирование выявило наивысшую значимость показателя V 26 для подтверждения диагноза ЯБ; показателя V21 для подтверждения диагноза гастродуоденита; показателя V6 для подтверждения диагноза дуоденогастрального рефлюкса.

Итак, нейросетевое моделирование – новый дополнительный, чувствительный диагностический и прогностический тест – обработка гастроэнтерологических параметров, способный устанавливать и подтверждать диагноз, повышать качество и эффективность комплексной патогенетической терапии, обеспечить полную информативность в процессе клинической динамики. О характере основного, сочетанного и сопутствующего заболевания у больных с ГД, ЯБ, ЭГ, ДГР дает возможность спрогнозировать исход болезни, проведение профилактических, диспансерных и реабилитационных мероприятий, поэтому проведенная научно-исследовательская работа позволяет рекомендовать использование новых методов нейросетевой обработки полученных результатов в детской и взрослой гастроэнтерологии.

Список литературы

1. Горбань А.Н., Россиев Д.А. Нейронные сети на персональных компьютерах. Н.: Наука, 1996 г.
2. Гилев С.Е., Горбань П.Н., Миркес ЕМ., Коченов Д.А., Россиев Д.А. Определение значимости обучаемых параметров для принятия нейронной сетью решения об ответе// Нейроинформатика и нейрокомпьютеры: Тезисы докладов рабочего семинара, Красноярск, КГТУ, 1993 г., с.8.
3. Царегородцев В.Г. Производство полуэмпирических знаний из таблиц данных с помощью обучаемых искусственных нейронных сетей // Методы нейроинформатики. – Красноярск. Издательство КГТУ, 1998.
4. Россиев Д.А. Медицинская нейроинформатика // Нейроинформатика. Новосибирск: Наука, 1998 г. – 296с. С.137-211
5. Россиев Д.А. Самообучающиеся нейросетевые экспертные системы в медицине: теория, методология, инструментарий внедрение: Дисс.докт.мед.наук.- Красноярск, 1995 г. – 379 с.
6. Петровская Т.В., Товбис Е.М. Нейросетевое исследование внутрижелудочной рН-метрии секреторной функции желудка у детей с гастродуоденитом, язвенной болезнью желудка, эрозивными гастритами в условиях Крайнего Севера и Сибири//Нейроинформатика, ее приложения и анализ данных: материалы XVI Всероссийского семинара. Красноярск; КГТУ, 2008, - с 102-106.
7. Петровская Т.В., Орлова Е.П., Хомич А.В., Решетникова Н.В., Жуков Л.А. Нейросетевое изучение состояния секреторной функции желудка в детском возрасте с гастродуоденитами и язвенной болезнью в экологических условиях Сибири и Крайнего Севера // Красноярск. 2003 г. 23 с Рукопись деп. в ВИНТИ 05,12,03 № 2113-В2003.
8. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – 9-е изд.,стер._М.: Высшая школа, 2003, 479 с.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ НЕЙРОСЕТЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОКАЗАТЕЛЕЙ СЕКРЕТОРНОЙ ФУНКЦИИ ЖЕЛУДКА, СОЧЕТАННОЙ ГАСТРОДУОДЕНАЛЬНОЙ ПАТОЛОГИИ У ДЕТЕЙ В УСЛОВИЯХ СИБИРИ И ЗАПОЛЯРЬЯ

Т.В. Петровская, Л.А. Жуков, А.В. Хомич

ГУ медицинских проблем Севера СО РАМН г. Красноярск,
Сибирский Государственный технологический университет,
Кафедра ИТ г.Красноярск
Краевое УПК, г. Красноярск, sibstu2006@rambler.ru

Нами впервые проведена исследовательская работа нейросетевого моделирования гастроэнтерологических больных с учетом клинко-эндоскопической характеристики сочетанной патологии и предпринята попытка возможной интерпретации. В отечественной и зарубежной литературе данных по этой проблеме нет.

Впервые осуществляется поиск и построение эффективных нейросетевых моделей для решения поставленных задач по изучению функционального состояния секреторной функции желудка у больных детей Крайнего севера и Сибири при гастродуоденитах, язвенной болезни и эрозивных гастритах в комплексе клинко-лабораторно-инструментальных и эндоскопических исследований.

Цель исследования

Целью исследования явилось построение и анализ нейросетевых моделей [2, 3, 4, 5] прогноза показателей фракционного желудочного зондирования для установления диагностической значимости параметров при сочетанной патологии.

Алгоритмы обучения нейронных сетей, реализованные в нейроимитаторе, традиционно разделяют на две большие группы: с учителем (для задач с известным полем ответа); без учителя (задачи классификации или таксономии). В данной работе использовались обе группы алгоритмов.

Петровской Т.В. была создана база данных из 475 примеров исследованных детей (Сибирь - г. Красноярск, Заполярье – Таймыр, г.Норильск и г. Дудинка). Измерения проводились по 29 показателям фракционного желудочного зондирования (тощаксовая, базальная, стимулированная гистамином и ферментативная пробы), с использованием MS Excel 7. Также учитывалась область проживания больного и выставленный диагноз. Используемые показатели приведены в Таблице 1.

Таблица 1

Структура файла базы данных входных параметров

Обозначение	Показатели X	Единицы измерения
V ₁	объем тощаксовой порции	Мл
V ₂	общая НСI тощаксовой порции	м*экв/г
V ₃	свободная НСI тощаксовой порции	м*экв/г
V ₄ , V ₇ , V ₁₀	объем базальной секреции 1-4 порции	Мл

V ₁₃		
V ₅ , V ₈ , V ₁₁ , V ₁₄	общая HCl базальной секреции 1-4 порции	м*экв/г
V ₆ , V ₉ , V ₁₂ , V ₁₅	свободная HCl базальной секреции 1-4 порции	м*экв/г
V ₁₆ , V ₁₉ , V ₂₂ , V ₂₅	объем стимулированной секреции 1-4 порции	мл
V ₁₇ , V ₂₀ , V ₂₃ , V ₂₆	общая HCl стимул. секреции 1-4 порции	м*экв/г
V ₁₈ , V ₂₁ , V ₂₄ , V ₂₇	свободная HCl стимул. секреции 1-4 порции	м*экв/г
P ₁ 28	пепсин базальной секреции	мг %
P ₂ 29	пепсин стимулированной секреции	мг %
S 30	область проживания больного (+1 – Сибирь и Крайний Север, -1 – Красноярск и прилегающие районы)	
J 31	признаки наличия у больного язвы желудка и двенадцатиперстной кишки	
GD 32	признаки наличия у больного гастродуоденита	
DGR 33	признаки наличия у больного дуоденогастрального рефлюкса	

Методика исследования

Все значения показателей предварительно были приведены к диапазону [-1. +1]. Для каждой порции желудочной секреции автоматически конструировалась и обучалась нейронная сеть [2, 3, 5, 6, 7], предсказывающая значение общей и свободной HCl. Был проведен регрессионный и корреляционный анализ [8]. Результаты регрессионного и корреляционного анализа сравнивались с результатами нейросетевого анализа.

Используемые программные и аппаратные средства

Для синтеза нейросетевой модели использовался нейроимитатор BuilderBrains 1.0 под управлением ОС MS Windows NT. В качестве аппаратной платформы использовался кластер из трех персональных компьютеров с процессором Intel Celeron 1500 Мгц и 256 Мб оперативной памяти.

Практическая значимость

Нейросетевая модель настроена на прогнозирование в условиях типичного протекания болезни. Несоответствие прогноза и снятых показаний может служить индикатором аномального протекания заболевания, наличие сопутствующего заболвания или ошибочности выставленного диагноза. Также на основе анализа оценки информативности показателей фракционного желудочного зондирования можно выявить показатели с наибольшим диагностическим значением.

Анализ результатов нейросетевого моделирования

Моделирование показало, наиболее успешно удалось спрогнозировать показатели V6, V9, V11, V12, V15, V17, V20, V21, V23, V24, V26, V27. Коэффициенты корреляции между прогнозируемым и фактическим значением показателей представлены в таблице 2. Анализ влияния показателей на прогноз показал, что для подтверждения диагноза язвы имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя V26. Для подтверждения диагноза гастродуоденита наибольшую значимость имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя V21 и V23. Для подтверждения диагноза дуоденогастрального рефлюкса наибольшую значимость имеет степень совпадения прогноза и фактического значения показателя V6.

Таблица 2

Коэффициенты корреляции между прогнозируемым и фактическим значением

Прогнозируемый показатель	V6	V9	V11	V12	V15	V17	V20	V21	V24	V26	V27
Нейросетевая модель	0.91	0.85	0.88	0.80	0.94	0.80	0.92	0.82	0.90	0.90	0.82
Линейная модель	0.86	0.85	0.94	0.87	0.84	0.78	0.54	0.52	0.80	0.80	0.80

Как видно из таблицы 2, только для показателей V11 и V12 линейная модель незначительно точнее нейросетевой модели. Для показателей V15, V20, V21, V24 и V26 нейросетевая модель значительно точнее линейной модели. В основном явное преимущество нейросетевой модели наблюдается для показателей стимулированной секреции. Это можно объяснить тем, что при стимуляции кислотообразующие функции желудка имеют более нелинейный характер поведения.

Линейный регрессивный анализ.

Для показателей приведенных в таблице 2 были построены линейные регрессионные модели представленные ниже.

$$V6=0.438*V3+0.3643*V9+0.1038*V15-0.0058*GD-0.0004*DGR-0.0004$$

$$V9=0.0108*V5+0.4334*V6+0.5232*V12+0.0244*V27+0.0013*S+0.0012*J+0.0008$$

$$V11=0.1872*V6+0.8178*V8+0.1233*V15-0.0311*V23+0.0017$$

$$V12=0.291*V8+0.5138*V15+0.0648*V18+0.073*V27+0.0023$$

$$V15=0.8714*V12+0.0897*V23-0.0004*V27-0.0029$$

$$V17=0.2995*V8+0.2366*V20+0.3025*V21+0.1204*V26-0.1429*V27-0.001$$

$$V20=0.2929*V2-0.1254*V3+0.0973*V5+0.4129*V8+0.0013$$

$$V21=0.5038*V15-0.0089*J+0.0117*GD-0.009*DGR-0.0115$$

$$V24=0.1164*V6+0.2544*V14+0.5666*V18+0.0006$$

$$V26=0.633*V23-0.0096*S+0.0014*J-0.0016*GD-0.0056*DGR-0.0095$$

$$V27=-0.2813*V8+0.4634*V9+0.7916*V23-0.0037*J-0.003*GD-0.0045*DGR-0.0072$$

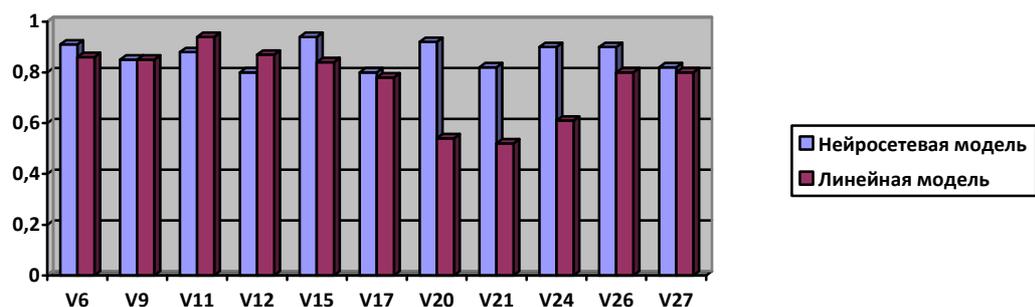


Диаграмма 1. Коэффициенты корреляции между прогнозируемым и фактическим значением показателя для линейной и нейросетевой модели.

	V6	V9	V11	V12	V15	V17	V20	V21	V24	V26	V27
Нейросетевая модель	0,91	0,84	0,87	0,80	0,80	0,92	0,82	0,80	0,90	0,82	0,80
Линейная модель	0,86	0,85	0,94	0,87	0,84	0,79	0,55	0,52	0,61	0,80	0,80

Как видно из диаграммы только для показателей V11 и V12 линейная модель незначительно точнее, чем нейросетевая модель. Для показателей V15, V20, V21, V24 и V26 нейросетевая модель значительно точнее линейной модели. В основном явное преимущество нейросетевой модели наблюдается для показателей стимулированной секреции. Это можно объяснить тем, что при стимуляции кислотообразующие функции желудка имеют более нелинейный характер поведения.

Таким образом, результаты исследования фракционного желудочного зондирования больных показали, что из всех полученных нейросетевых моделей наиболее точные модели получены для прогноза следующих параметров:

- V6 (свободная НС1 базальной секреции порции 1)
- V9 (свободная НС1 базальной секреции порций 2)
- V11 (общая НС1 базальной секреции порций 3)
- V12 (свободная НС1 базальной секреции порций 3)
- V15 (свободная НС1 базальной секреции порций 4)
- V17 (общая НС1 стимулированной секреции порции 1)
- V20 (общая НС1 стимулированной секреции порций 2)
- V21 (свободная НС1 стимулированной секреции порций 2)
- V24 (свободная НС1 стимулированной секреции 3 порций)
- V26 (общая НС1 стимулированной секреции порций 4)
- V27 (свободная НС1 стимулированной секреции порций 4)

Нейросетевой анализ выявил нелинейный характер зависимости между показателями кислотообразующей функции желудка. Определено, что наибольшую диагностическую значимость имеют следующие показатели:

- V8 (общая НС1 базальной секреции порций 2)
- V12 (свободная НС1 базальной секреции порций 3)
- V15 (свободная НС1 базальной секреции порций 4)
- V23 (общая НС1 стимулированной секреции порций 3)

Исследования показали, что оценка информативности показателей зависит от рассматриваемой группы больных, из чего можно заключить, что нейросетевые модели выражают закономерности для каждой группы пациентов.

Целью следующего исследования явилось построение нейросетевых моделей для анализа диагностической значимости. Степень влияния показателей на результат прогноза сочетанной патологии по 100 бальной шкале.

Для иллюстрации приводим примеры установленных диагнозов и прогноза.

Сравнение результатов нейросетевого и корреляционного анализа

Проведем сравнение оценок информативности показателей, полученных в ходе нейросетевого и корреляционного анализа. В качестве оценок информативности корреляционного анализа брались коэффициенты корреляции, взятые по модулю и умноженные на 100. Ниже в виде диаграмм приводятся оценки информативности нейросетевого и корреляционного анализа для наиболее надежных прогностических моделей.

1 пример. Установление диагноза ЯБДПК V26, с помощью нейросетевого моделирования

Таблица 3

Прогнозируемый показатель	V26
Показатели, используемые для прогноза V26	V23, S, J, GD, DGR
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V26	0,90

Степень влияния показателей на результат прогноза V21 по 100 бальной шкале

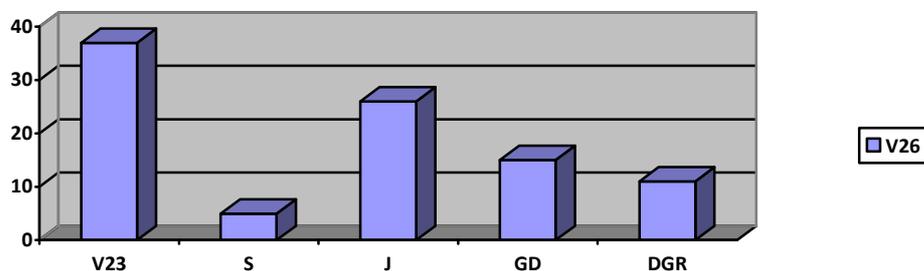


График указывает на определенную нозологию сопутствующей сочетанной патологии у больного. ЯБ: Гастродуоденит V23, V15, ДГР.

Таблица 4

Оценка информативности показателей для проведения V26

	V23	S	J	GD	DGR
Нейросетевой анализ	37	5	26	15	11
Корреляционный анализ	80	2	1	4	7

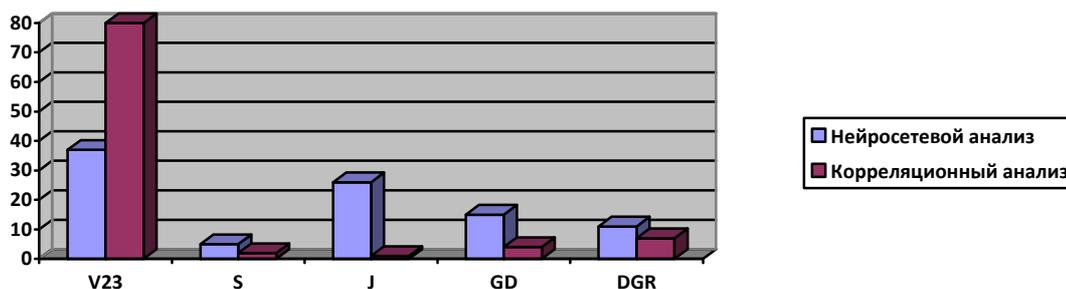


Диаграмма 2. Оценки информативности показателей для прогнозирования V26

Наибольшая информативность для прогноза V26 как в нейросетевом, так и в корреляционном анализе отдается показателю V23. Но остальные признаки корреляционный анализ определяет как неинформативные. Нейросетевой анализ оценивает признаки наличия у испытуемого J, GD и DGR как заметно влияющие на V26. Это связано с нелинейным характером влияния признака наличия J, GD и DGR на прогноз V26.

Диаграмма 1 показывает, что нейросетевой анализ позволил определить степень тяжести язвенной болезни гастродуоденитом, дуоденогастральным рефлюксом.

Пример 2. Состояние секреторной функции желудка у детей Заполярья с язвенной болезнью желудка (ЯБЖ) J V9.

Таблица 5

Прогнозируемый показатель	V9
Показатели, используемые для прогноза V9	V5, V6, V 12, V27, S, J
Корреляция между прогнозируемым и фактическим значением V9	0,85

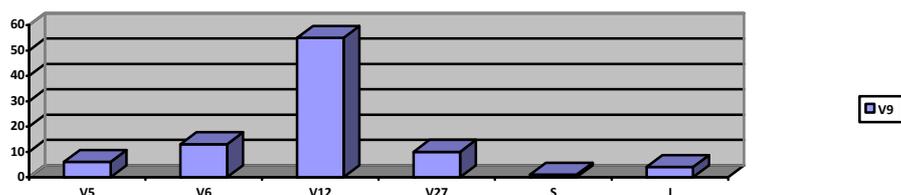


Диаграмма 3. Степень влияния показателей на результат прогноза V9 по 100 бальной шкале

На диаграмме выявлены назологии гастродуоденальной патологии: язвы V5, V27, эрозия V12, дуоденогастральный рефлюкс V6.

Таблица 6.

Оценки информативности показателей для проведения V9

	V5	V6	V12	V27	S	J
Нейросетевой анализ	6	13	55	10	1	4
Корреляционный анализ	69	75	78	5	2	7

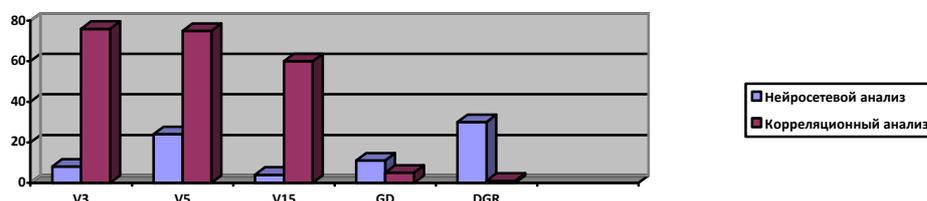


Диаграмма 4. Оценки информативности показателей для прогнозирования V9

Диаграмма 4 показывает, что нейросетевой анализ существенно расходится с корреляционным анализом в оценке информативности V5, V6, и V27. Нейросетевой анализ наибольшую информативность назначает для V12, а в корреляционном анализе V5, V6, V12 и V27 практически имеют одинаковую оценку информативности. Это может быть объяснено тем, что влияние V12 на прогноз V9 имеет существенную нелинейную составляющую.

Диаграмма 1 показывает, что нейросетевой анализ дает возможность открыть активность эрозивно-язвенного процесса каждой назологии (множественные язвы желудка V5, V27, эрозии V12) способствующие формированию гастродуоденальной патологии у коренного и пришлого школьного и подросткового контингента, у детей Заполярья, Севера и Сибири.

Результаты обобщенного, сравнительного анализа с использованием нейронных сетей позволили установить информационную значимость клинико-лабораторно-инструментальных параметров, сопоставить с результатами клинико-эндоскопической картины, выявить значительные нарушения в состоянии кислото-секреторно-ферментативной функции желудка при основном заболевании, сочетанной и сопутствующей патологии всей гастроэнтерологической системы в условиях Крайнего Севера и Сибири.

Выводы. Результаты данного нейросетевого исследования еще раз подтверждают несомненное преимущество нейронных сетей, как наиболее чувствительных диагностических и прогностических методов, указывающих на тяжесть течения и исход патологического процесса любой нозологии, важным подспорьем клинико-эндоскопического диагноза, позволяющего более эффективно, качественно и целенаправленно проводить патогенетическую комплексную терапию, реабилитационные и диспансерно-профилактические мероприятия для предотвращения рецидивов и обострений.

Заключение:

Получены новые результаты исследования с помощью ИНС. Проведенное сопоставление и анализ использования нейросетевых систем для обработки результатов фракционного желудочного содержимого у больных с язвенной болезнью желудка и двенадцатиперстной кишки позволили установить закономерности для каждой группы больных Сибири и Заполярья, детей коренного и пришлого населения и доказать, что исследование нейросетевых методов имеет особое значение, т.к. устанавливает наибольшую и наименьшую диагностическую и прогностическую значимость, в каждой исследуемой порции (тощачовой, базальной, стимулированной гистамином) пробе, ферментативной активности. Сопоставление результатов нейросетевого анализа оценок информативности и степени влияния показателей на результат прогноза выявляет нозологии сочетанной патологии.

С помощью нейросетевой обработки устанавливается значимость параметров тощачовой, базальной и стимулированной секреции, в каждом конкретном случае определяется степень тяжести процесса, количество нозологий сочетанной патологии.

Нейросетевое моделирование показателей состояния секреторной функции желудка выдает быстрое, четкое, дополнительное использование методов нейросетевого моделирования в гастроэнтерологической службе, что позволит получить эффективную информацию результатов фракционного зондирования. В целом клинико- лабораторно-эндоскопическое обследование больных обеспечит более качественный, динамический контроль за предпринятым лечением, за развитием патологического процесса у больных детей, прогнозированием обострений, рецидивов профилактических мероприятий с целью предотвращения осложнений

Список литературы

1. Горбань А.Н., Россиев Д.А. Нейронные сети на персональных компьютерах. Н.: Наука, 1996 г.
2. Царегородцев В.Г. Извлечение знаний из обучаемых нейронных сетей.// Нейроинформатика и ее приложения: Тезисы доклада 7 Всероссийского Семинара. Красноярск. Издательство КГТУ, 1999, с 150-151
3. Царегородцев В.Г. Производство полуэмперических знаний с помощью обучаемых искусственных нейронных сетей // Методы нейроинформатики – Красноярск: Издательство КГТУ, 1998.
4. Гилев С.Е., Горбань П.Н., Миркес ЕМ., Коченов Д.А., Россиев Д.А. Определение значимости обучаемых параметров для принятия нейронной сетью решения об ответе// Нейроинформатика и нейрокомпьютеры: Тезисы докладов рабочего семинара, Красноярск, КГТУ, 1993 г., с.8.
5. Россиев Д.А. Медицинская нейроинформатика // Нейроинформатика.Новосибирск: Наука, 1998 г. – 296с. С.137-211
6. Россиев Д.А. Самообучающиеся нейросетевые экспертные системы в медицине: теория, методология, инструментарий внедрение: Дисс.докт.мед.наук.- Красноярск, 1995 г. – 379 с.
7. Россиев Д.А., Головенкин С.Е., Назаров Б.В. и др. Определение информативности медицинских параметров с помощью нейронной сети // Диагностика, информатика и метрология, 1994: Тез.науч.-тех.конф., С-Петербург, 28-30 июня 1994 г. – СПб., 1994.- С.348
8. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – 9-е изд.,стер._М.: Высшая школа, 2003, 479 с.
9. Петровская Т.В., Орлова Е.П., Хомич А.В., Решетникова Н.В., Жуков Л.А.
10. Нейросетевое изучение состояния секреторной функции желудка в детском возрасте с гастродуоденитами и язвенной болезнью в экологических условиях Сибири и Крайнего Севера // Красноярск. 2003 г. 23 с Рукопись деп. в ВИНТИ 05,12,03 № 2113-В2003.

КВАЗИКРИСТАЛЛЫ И ИХ МОДЕЛИ. АТОМАРНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ, ЭНТРОПИЙНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Д.А. Полянский, П.Л. Титов, А.Н. Михалюк

Дальневосточный федеральный университет,
каф. физики низкоразмерных структур, *polyanskiy.da@dvfu.ru*

В 1985 году был получен сплав $Al_{86}Mn_{14}$, образец которого, подвергнутый специальному методу быстрого охлаждения, рассеивал пучок электронов так, что образовывалась ярко выраженная дифракционная картина с симметрией пятого порядка в расположении дифракционных пиков. Открытие квазикристаллов поставило перед физикой твёрдого тела, кристаллографией и материаловедением ряд вопросов – как квазикристаллы могут расти с совершенным квазипериодическим порядком, какова природа дальнего порядка в квазикристаллах, каковы их физические свойства и т.д. Нами была предпринята попытка объединить физический подход к изучению квазикристаллов (непосредственное получение и экспериментальное изучение) и математический (решение задачи построения аperiodического покрытия из минимального множества плиток) и установить связь между абстрактными плитками и миром реальных атомов.

Первоначально для исследования были выбраны квартетная Q-мозаика и пентасимметричная мозаика Пенроуза. Исследуемые мозаики имеют алфавит $[2q \times 2p]$, то есть состоят из двух типов элементов - $2q$ (ромб и квадрат для Q-мозаики, два ромба для мозаики Пенроуза), между которыми возможно два типа контактов - $2p$ (рёберный и точечный). В этом состоит первое топологическое отличие данных квазикристаллических паркетов от классических решёток, которые имеют только один пространственный элемент, с помощью которого и идёт замощение пространства паркетом соответствующей симметрии

Различные паркетки можно представить не только как совокупность ячеек сетки, но и как систему вершинных координат. На кристаллографических паркетах присутствует только один тип вершинной координаты с характерной ветвистостью, коррелирующей с симметрией паркета. Для Q-паркета порядок вершинных координат колеблется от 3 до 8, для паркета Пенроуза – от 3 до 7. Для Q-паркета распределение вершинных координат оказалось экспоненциальным, с медианой, приходящейся на координату с порядком $r=4$. Для паркета Пенроуза координатная статистика весьма нетривиальна, содержит глобальную моду на координату $r=5$ при общем ниспадающем характере. Усреднённая тенденция подчиняется гиперболической статистике Ципфа – Парето – Мандельброта с показателем $\gamma \sim 1.5$.

Для дальнейшего исследования от каждого паркета было построено отображение в квазистохастические древесные графы Кейли (ДК). За центр принимается одна из ячеек, далее идёт построение по координатным сферам.

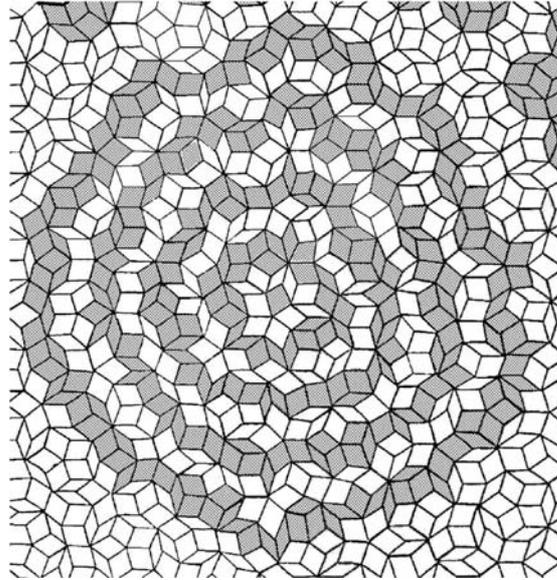


Рис.1. Координационные сферы на примере классического паркета Пенроуза.
На полученных деревьях строятся перечисляющие полиномы.

$$T_i(x) = \sum_{k=0}^{\eta} T_i^k(x^k) x_i^k$$

$T_i^k(x^k)$ – количество кустов ветвистости k на i -иерархии.

В дальнейшем они переводятся в вероятностную форму.

$$t_i(x) = \frac{T_i(x)}{\sum_{k=0}^{\eta} T_i^k(x^k)}$$

Наличие вероятностной формы позволяет определить, в частности, энтропийные характеристики, и изучать их перколяцию по уровням ДК. За основную характеристику принимается энтропия Вайда (H_v).

$$H_v[t_i(x^k)] = \sum_k t_i(x^k) [1 - t_i(x^k)]$$

$$\lim H_v[t_i(x^k)] \rightarrow 1$$

Определяя коэффициент структурированности η , можно судить о степени разупорядочения структуры.

$$\eta = 1 - \frac{\overline{H}_v}{H_{\max}}$$

Для обоих исследуемых паркетов место определенное, причём весьма значительный, средний энтропийный инвариант, вокруг которого происходят квазипериодические флуктуации значения энтропийного функционала. Для мозаики Пенроуза для обоих ДК значение энтропийного инварианта получился одинаковым, $H_v=0.8$. В случае Q-мозаики для дерева, стартующего от квадрата, первая

координационная сфера которого содержит 8 элементов (кратное симметрии паркета), $H_V=0.8$. Для дерева, стартующего от ромба (10 элементов в КС), $H_V=0.83$.

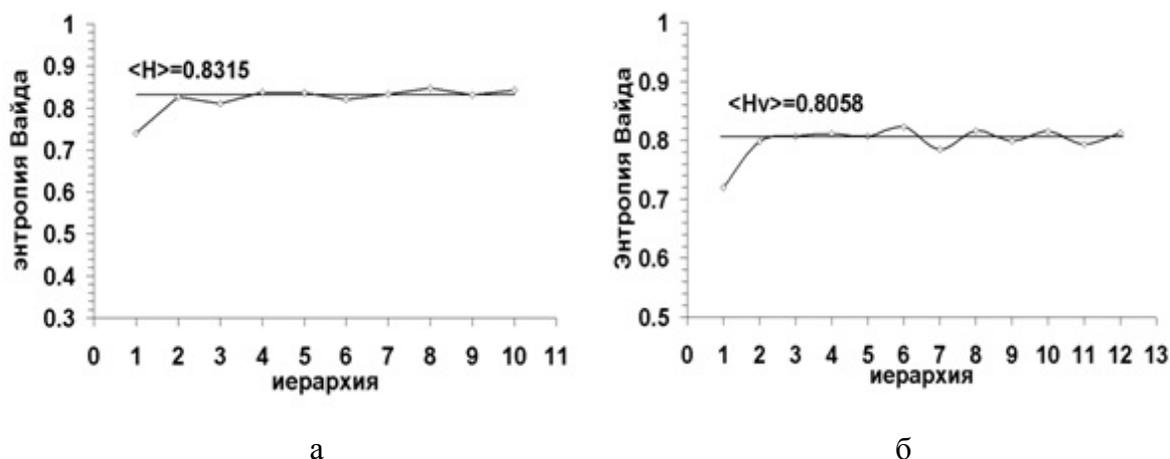


Рис.2. Перколяция энтропии Вайда по координационным сферам для Q-паркета (а) и классического паркета Пенроуза (б).

Для дальнейшего изучения была выбрано покрытие Пенроуза как более совершенное. Был предложен новый, блочный, подход к замощению плоскости покрытием квазикристаллической симметрии, за счет декагонов двух типов (звездчатого и дорзального), с наложением по одному или нескольким ромбам. Эти декагоны являются третьим уровнем алфавита паркета Пенроуза. Первым уровнем являются два «золотых» треугольника, вторым – два «золотых» ромба.

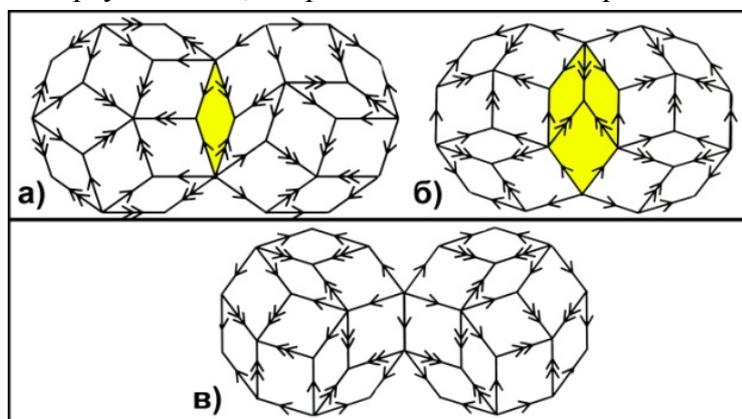


Рис.3. Варианты наложения декагонов при замощении плоскости.

В результате получается бездефектное покрытие по типу Пенроуза на уровне ромбов. Процедура синтеза такого покрытия является нерекурсивной, но в случае применения блочного замощения она становится эвристической, управляемой конечным набором правил. Более того, построенное таким методом покрытие является более структурированным, коэфф. упорядочения по сравнению со стандартным покрытием Пенроуза возрастает с 12% до 18%. Кроме этого, если рассматривать морфогенетический рост покрытия на уровне декагонов на 6-й координационной сфере можно выделить уподобленный топологический фазовый переход со сменой

симметрии с 5 на 10, что в какой-то мере аналогично фазовым переходам второго рода в теории Ландау. Там в общем случае переход связан с ограничением симметрии, симметрия высокотемпературной фазы включает в себя и симметрию более упорядоченной, низкотемпературной фазы. Вопрос же о введении какого-то аналога параметра порядка в теории Ландау для данного случая остаётся пока открытым.

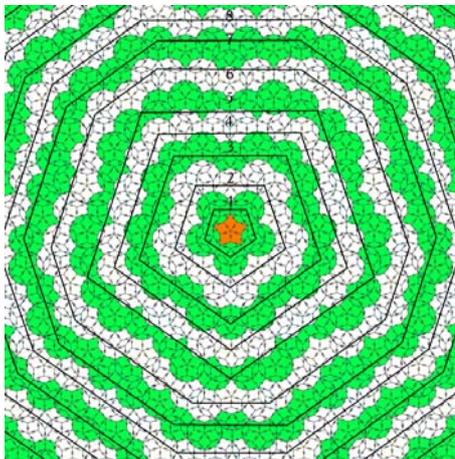


Рис.4. Топологический фазовый переход 5-10.

Также в аналитической форме установлено точное расположение атомов в квази-элементарной ячейке, аналитически описана её радиальная и тангенциальная атомная структура.

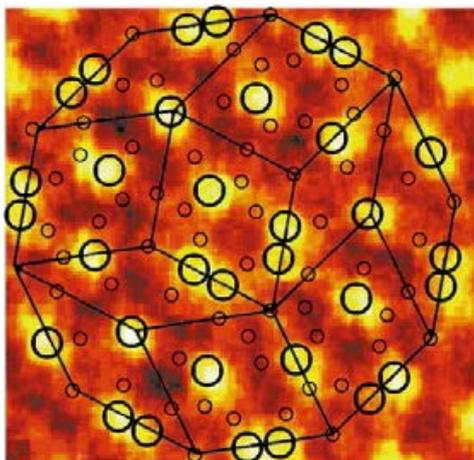


Рис.5. STEM-изображение 2 nm декагонального кластера $\text{Al}_{72}\text{Ni}_{20}\text{Co}_8$ с атомной декорацией и наложенной модели дорзального декагона.

После рассмотрения атомной структуры со STEM-изображений сплава Al-Ni-Co, для установления точного положения атомов был порожден ряд решёток посредством метода дефляции, и для узлов решётки на разных шагах было установлено соответствие с положениями соответствующих атомов, а так же определены координационные числа, или степени ветвистости узлов, в которые попадают атомы Al, Ni и Co.

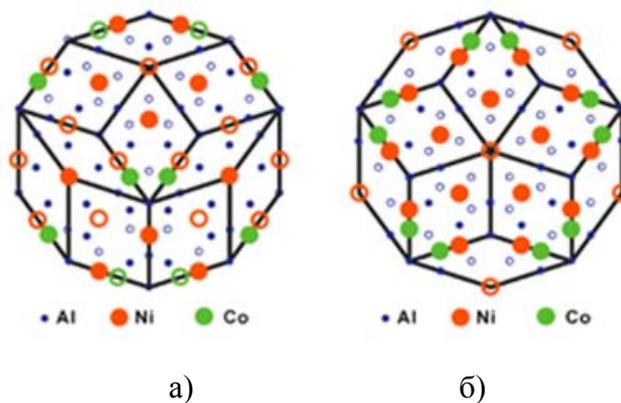


Рис.6. Модели атомной структуры дорзального (а) и звёздчатого декагонов (б).

На 7-й итерации все атомы Ni, и Co попали в пятую симметрию решётки. Атомы Al на 7-й итерации примерно наполовину выпадают на пятую симметрию. Для атомов Al была составлена дополнительная 8-я итерация, в результате которой все атомы предыдущего уровня, не попавшие в пентасимметричные узлы, попали в них.

Анализ в тангенциальном приближении показал, что модель атомной декорации квази-элементарной ячейки имеет пять радиальных атомных поясов, расположенных друг от друга в точности на расстояниях, пропорциональных шагу дефляции. Все атомы переходных металлов расположены строго на основных поясах нулевой, первой, второй и четвёртой ступенях дефляции, а оставшиеся атомы Al - на четырёх промежуточных поясах.

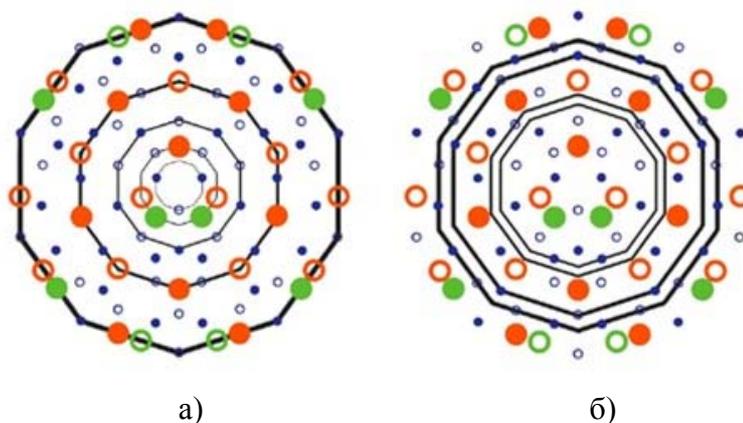


Рис.7. Основные (а) и промежуточные (б) атомные пояса.

Если принять сторону «золотого» ромба за 1, то радиусы основных атомных поясов составят 1.168, 1, 0.618, 0.382, 0.236.

В дальнейшем были определены координаты в Евклидовой метрике. В декагональной решётке ребро декагона принимается за единицу расстояния, центром системы координат является барицентр декагона. Декагональная решётка имеет пять направлений эквивалентности, соответствующих углам 18, 90, 162, 234, 306 градусов. При переходе к декартовой системе координат было получено, что существует 19 абсцисс и 33 ординаты, пересечения которых друг с другом и 9 радиальными поясами определяют положения атомов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ШКАЛЫ СКОРОСТИ ГУМИФИКАЦИИ И ШКАЛЫ ГЛУБИНЫ В КONTИНУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ТРАНСФОРМАЦИИ ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ПОЧВЫ¹

А.А.Почекутов¹, С.И.Барцев^{1,2}

¹Институт биофизики СО РАН, a-a-po@mail.ru,

²Сибирский федеральный университет,

Институт фундаментальной биологии и биотехнологии, bartsev@yandex.ru

Органическое вещество почвы (ОВП) — сложный объект. Оно состоит из большого количества разнообразных химических соединений, сильно различающихся по химическим и кинетическим свойствам, постоянно подвергающихся сложным многостадийным превращениям. Точные формулы большинства соединений, количество стадий превращения, точные значения скоростей их трансформации не известны, но известна общая направленность этого процесса — превращение вещества из малоустойчивого к трансформации в более устойчивое, при одновременном разложении части вещества до CO₂, покидающего почву. Поэтому в модели трансформации ОВП необходимо отразить, по меньшей мере, два одновременных процесса — гумификацию части ОВП, то есть трансформацию в более устойчивые формы, и минерализацию части ОВП, то есть разложение почвенной органики до CO₂.

Один из подходов к математическому описанию многостадийного процесса трансформации ОВП основан на использовании некоторой континуальной шкалы, отражающей устойчивость органического вещества к трансформации. Многостадийный процесс трансформации ОВП описывается как перемещение вещества по этой шкале. Есть разные варианты этого подхода с использованием различных шкал. Это может быть некоторая абстрактная шкала разложимости [4], или шкала качества субстрата, отражающая доступность ОВП для почвенных микроорганизмов-разлагателей [2], или шкала глубины нахождения ОВП в почвенном профиле [6].

Нами было предложено использование скорости гумификации вещества, h , в качестве континуальной шкалы, отражающей устойчивость ОВП к трансформации. В предложенной нами модели трансформации ОВП величина h служит шкалой и мерой гумифицированности вещества, а многостадийный процесс его трансформации описывается как замедляющееся перемещение вещества вдоль шкалы h , сопровождающееся минерализацией части вещества, скорость которой зависит от h . Перемещение ОВП идёт в сторону уменьшения значений h , что отражает повышение устойчивости вещества к дальнейшей трансформации, происходящее в процессе гумификации [3]. Использование таких, самых простых и общих представлений о характере процессов трансформации органического вещества в почве, без детализации их внутренних механизмов, позволило получить простую модель динамики ОВП.

Общее уравнение модели имеет вид:

$$\frac{\partial C(h,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial h}(v(h)C(h,t)) = -k(h)C(h,t) + D(h,t), \quad (1)$$

где $C(h,t)$ — распределение запасов ОВП по скоростям гумификации, т.е. количество ОВП, имеющего в момент времени t скорость гумификации в пределах от h до $h + dh$,

¹ Работа поддержана грантом РФФИ № 15-41-04300 и Программой фундаментальных исследований Президиума РАН "Поисковые фундаментальные научные исследования в интересах развития Арктической зоны Российской Федерации" Проект № 12

равно $C(h,t)dh$; $v(h)$ — скорость перемещения вещества по шкале, $k(h)$ — коэффициент скорости минерализации; $D(h,t)$ — распределение темпов поступления опада по его начальным скоростям гумификации.

В [3] показано, что непосредственным следствием выбора h в качестве шкалы является связь между h и $v(h)$ в виде:

$$v(h) = -\frac{dh}{dt} = h^2. \quad (2)$$

Поскольку все органические вещества и почвы, и опада различаются в модели только по своим значениям h , опад может быть представлен в виде суммы его компонентов, $D(h,t) = \sum_i D_i(h,t)$. Тогда уравнение (1) может быть выписано для продуктов трансформации каждого компонента опада в отдельности:

$$\frac{\partial C_i(h,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial h} (h^2 C_i(h,t)) = -k(h)C_i(h,t) + D_i(h,t), \quad (3)$$

а общее распределение всего ОВП будет суммой его решений: $C(h,t) = \sum_i C_i(h,t)$.

Если (например, для экосистем, существующих длительное время в постоянных условиях), опад может описываться среднегодовыми количествами поступления его компонентов D_{oi} , каждый из которых имеет начальную скорость гумификации h_{oi} , то

$$D(h) = \sum_i D_{oi} \delta(h - h_{oi}), \quad (4)$$

где δ — дельта-функция Дирака, а индекс i нумерует компоненты опада.

Решение уравнения (3) при задании опада в форме (4) имеет вид:

$$C_i(h,t) = \frac{D_{oi}}{h^2} \exp(X(h) - X(h_{oi})) (f_i(t - 1/h) - \theta(h - h_{oi})), \quad (5)$$

где $X(h) = \int \frac{k(h)}{h^2} dh$, θ — функция-ступенька Хевисайда, а функции f_i определяются из граничных условий. При условии, что правее h_{oi} на шкале h никогда нет продуктов трансформации i -того компонента опада и что до момента $t = 0$ никакого органического вещества нет ни в какой точке шкалы (начало формирования почвы), $f_i(t - 1/h) = \theta(t - 1/h + 1/h_{oi})$.

Для задания вида функции $k(h)$ использовалось сравнение рассчитанных по уравнению модели запасов ОВП в стационарном состоянии с запасами ОВП, наблюдаемыми в почвах различных экосистем. Простейший вид $k(h)$, при котором получено совпадение расчетных стационарных запасов ОВП с литературными данными о количестве ОВП в почвах различных экосистем,

$$k(h) = bh^p, \quad (6)$$

где b и p — константы, разные для разных экосистем. Их значения подбирались такими, чтобы расчетное количество ОВП совпало с наблюдаемым в почве этой экосистемы при наблюдаемых в этой экосистеме значениях параметров опада D_{oi} и h_{oi} [3].

Стационарное решение уравнения (5) с учетом (6) имеет вид:

$$C_i(h) = \frac{D_{oi}}{h^2} \exp\left(\frac{b}{p-1} (h^{p-1} - h_{oi}^{p-1})\right) (1 - \theta(h - h_{oi})). \quad (7)$$

Значения h_{0i} могут быть пересчитаны из имеющихся в литературе значений k_{0i} по вытекающей из (6) формуле $h_{0i} = \sqrt[p]{k_{0i}/b}$. Кривая распределения (7) показана на Рис.1А. Количество ОВП в стационарном состоянии вычисляется по формуле:

$$S = \sum_i \int_0^{h_{0i}} C_i(h) dh .$$

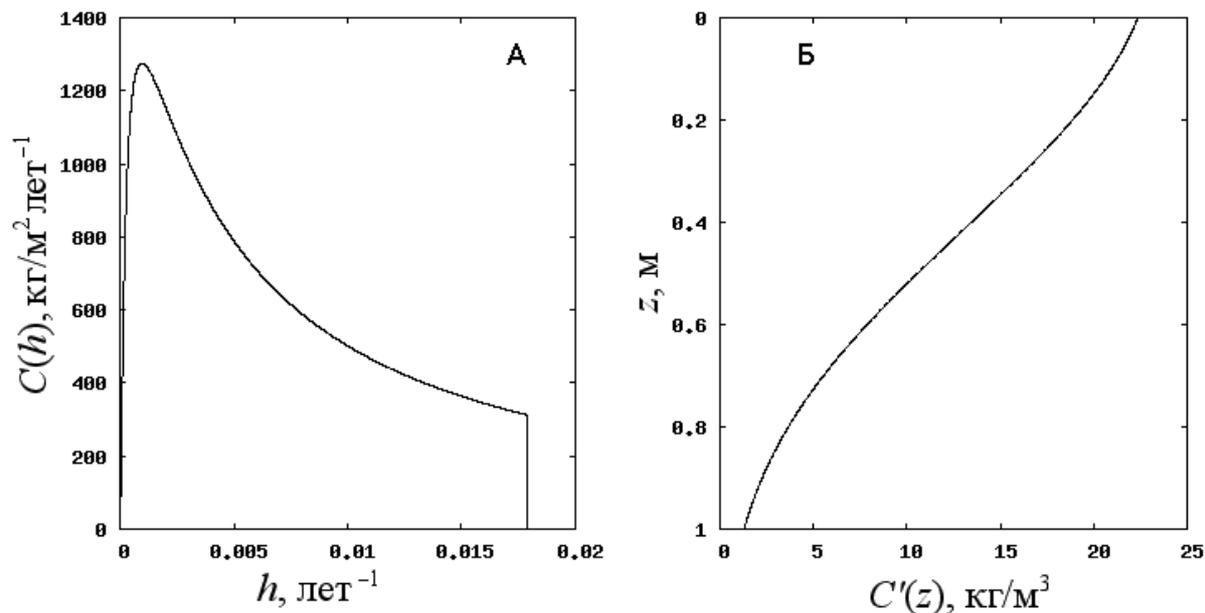


Рис.1. Соответствующие друг другу стационарные распределения ОВП, сформированные из одного компонента опада. Параметры модели: $a = 0.25, b = 0.5, p = 0.9$. Параметры опада: $D = 0.1$ кг/м² в год, $k_0 = 0.02$ лет⁻¹. А) Распределение ОВП по скоростям его гумификации, Б) Распределение ОВП по глубине.

Следует отметить, что подбор значений b и p , обеспечивающих совпадение теоретически рассчитанного значения стационарных запасов ОВП с наблюдаемыми запасами, служит лишь для подтверждения способности уравнения модели описывать реальные запасы ОВП. Определить значения b и p , соответствующие кривой распределения ОВП в реальной экосистеме, таким способом не представляется возможным, поскольку пара значений b и p , дающая при одних и тех же параметрах опада одну и ту же величину S , не единственна. Можно подобрать много разных пар значений b и p , которые при одних и тех же, соответствующих наблюдениям в данной экосистеме, параметрах опада, обеспечат совпадение расчётного значения S с наблюдаемым в этой системе количеством органического вещества в почве. [1]

Поэтому для определения значений b и p необходимо сравнение теоретической кривой распределения ОВП с наблюдаемым распределением. Величина h является достаточно абстрактной величиной, отработанной методики её непосредственного экспериментального измерения в настоящее время нет. Альтернативой прямым экспериментальным измерениям распределения ОВП по h могут служить экспериментальные измерения распределения ОВП по некоторой

другой шкале, если между распределениями ОВП по этим двум шкалам удастся установить взаимнооднозначное соответствие.

Так как экспериментальное определение количества органического вещества на разных глубинах в толще почвенного профиля не представляет больших трудностей, такой альтернативной шкалой может быть глубина. Для использования этой шкалы и соотнесения распределения ОВП по h с распределением ОВП по глубине z , предлагаемая модель должна быть модифицирована так, чтобы учесть в ней вертикальное перемещение органического вещества происходящее одновременно с гумификацией и минерализацией.

Предполагая в качестве основного механизма вертикального транспорта ОВП перенос органических веществ с жидкостью, логично предположить, что усложнение структуры молекул в процессе гумификации повышает как их устойчивость к трансформации, так и устойчивость их связей с минеральной основой почвы. Таким образом, скорость вертикального переноса ОВП, w , должна зависеть от h . Предположим простейший вид этой зависимости:

$$w(h) = -\frac{dh}{dz} = ah . \quad (8)$$

Здесь a – некоторый коэффициент пропорциональности. Ось z направлена вертикально вниз, точка $z = 0$ находится на поверхности почвы.

Общее уравнение модели (3), с учётом вертикального транспорта ОВП, будет иметь вид:

$$\frac{\partial C_i(h, z, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial h} (h^2 C_i(h, z, t)) - ah \frac{\partial C_i(h, z, t)}{\partial z} = -k(h) C_i(h, z, t) + D_i(h, z, t) . \quad (9)$$

Однако, если можно установить взаимнооднозначную связь между шкалами h и z , нет необходимости решать это уравнение непосредственно, чтобы получить формулу вертикального распределения ОВП. В этом случае распределение ОВП по h , вида (5) или (7) может быть преобразовано в соответствующее ему распределение ОВП по z и обратно.

Это возможно, если считать, что опад поступает только на поверхность почвы и каждый его компонент имеет начальную скорость гумификации h_{0i} . Тогда из (2) и (8) следует уравнение

$$\frac{dh}{dz} = -\frac{h}{a} , \quad (10)$$

решение которого, полученное при условии $h(z=0) = h_{0i}$, выражает взаимнооднозначную связь между h и z в виде некоторой функции $h_i(z)$, индивидуальной для каждого из компонентов опада.

Для двух распределений ОВП по двум разным, но взаимнооднозначно связанным друг с другом шкалам, таким, как в данном случае z и h , должно выполняться равенство:

$$C'_i(z) dz = -C_i(h(z)) dh , \quad (11)$$

означающее, что на любом микроинтервале одной шкалы и соответствующем ему микроинтервале другой шкалы содержится одно и то же количество вещества. Знак минус здесь присутствует потому, что направлению от больших значений h к меньшим соответствует направление от меньших значений z к большим, и, таким образом, дифференциалы dz и dh имеют противоположный знак.

Следовательно, переход от распределения по одной шкале к эквивалентному распределению по другой шкале определяется формулой:

$$C'_i(z) = J \cdot C_i(h_i(z)) , \quad (12)$$

где $J \equiv -\frac{dh}{dz} = \frac{h}{a}$ – якобиан перехода от шкалы h к шкале z .

Считая, в простейшем случае, a положительной константой, получим решение уравнения (10) в виде:

$$h_i(z) = h_{0i} \exp(-z/a) . \quad (13)$$

Подставляя (7) в (12) и выражая $h_i(z)$ в виде (13), получим стационарное распределение ОВП по глубине z :

$$C'_i(z) = \frac{D_{0i}}{ah_{0i}} \exp\left(\frac{z}{a}\right) \cdot \exp\left(\frac{bh_0^{p-1}}{p-1} \left(\exp\left(-\frac{z}{a}(p-1)\right) - 1\right)\right) . \quad (14)$$

Кривая распределения (14) показана на Рис.1Б.

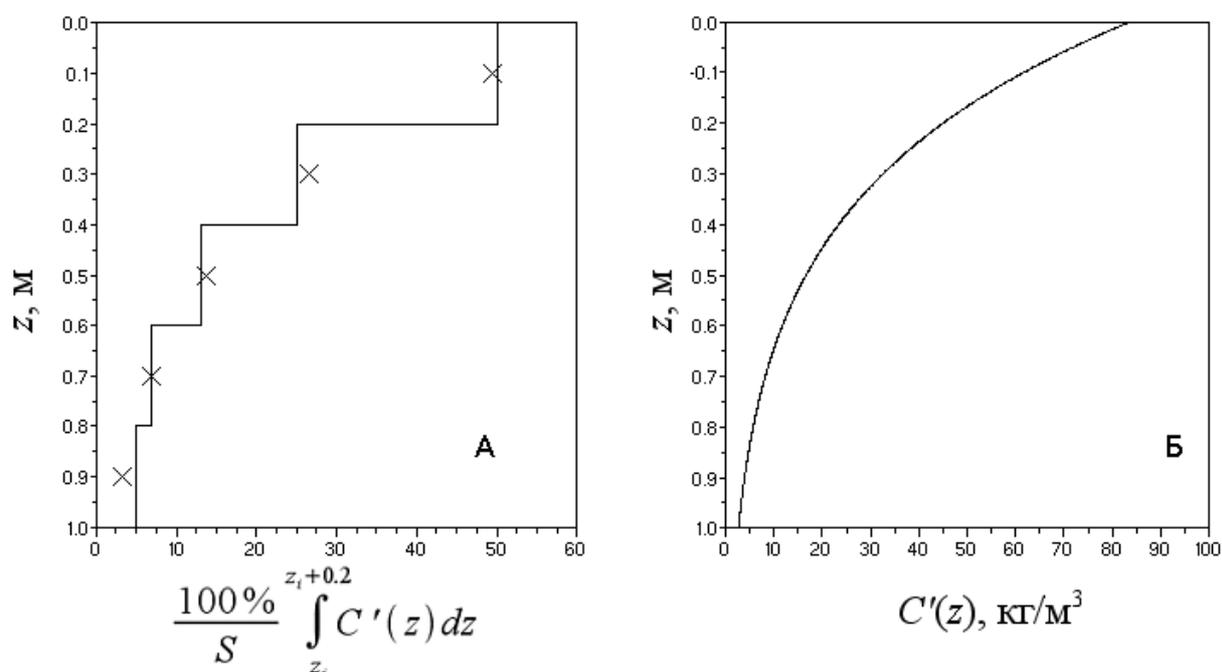


Рис.2. Вертикальное распределение ОВП, соответствующее натурным данным для бореальных лесов. А) Экспериментальные оценки запасов ОВП в 20-см слоях почвы в процентном отношении к общему количеству ОВП в верхнем метровом слое показаны вертикальными линиями столбчатой диаграммы, наиболее близкие к ним теоретические оценки этой же величины показаны крестиками. Наилучшее совпадение теоретических и экспериментальных значений достигнуто при значениях параметров $a = 0.36$, $b = 1.65$, $p = 0.95$ Б) Кривая вертикального распределения ОВП, рассчитанная при этих значениях параметров.

Для сравнения теоретической кривой распределения (14) с натурными данными и определения значений параметров a , b , p , дающих наилучшее совпадение теоретических расчётов и с экспериментальными измерениями использованы данные о запасах ОВП на разных глубинах в почве бореальных лесов из работы [5]. Усреднённые по большому количеству измерений оценки запасов ОВП в 20-см слоях

на различных глубинах, выраженные в процентном отношении к общему количеству ОВП в верхнем 1-м слое почвы, взятые из Таблицы 4 статьи [5], показаны на Рис.2А в виде столбчатой диаграммы. Соответствующие им теоретические расчётные значения,

вычисленные как $\frac{100\%}{S} \int_{z_i}^{z_i + 0.2} C'(z) dz$ при значениях a , b , p , дающих минимум суммы

квадрата разностей расчётных и натуральных значений, показаны на Рис.2А в виде крестиков. Кривая $C'(z)$, рассчитанная при этих значениях a , b , p , показана на Рис.2Б. Расчёт кривой $C'(z)$ производился с теми же значениями параметров опада, которые использовались в тестовых вычислениях в [3], т.е. опад в расчётах был представлен как сумма двух компонент с параметрами $D_{01} = 0.13$ кгС/(м²год), $k_{01} = 0.018$ лет⁻¹ и $D_{01} = 0.11$ кгС/(м²год), $k_{01} = 0.17$ лет⁻¹ [7,8]. При этом подбор a , b , p производился с таким ограничением, чтобы общее количество ОВП, S , было равно 14.1 кг/м², (в соответствии с ранее использованным в [3] значением), причём не менее 95% этого количества находилось в верхнем метровом слое почвы. Выбор значений a , b , p , обеспечивающих наилучшее совпадение расчётных и натуральных данных в этом случае однозначен.

Таким образом сравнение экспериментальных измерений распределения ОВП по глубине с теоретически рассчитанным распределением позволяет, при заданных параметрах опада, однозначно определить параметры предлагаемой модели трансформации ОВП и, тем самым, форму кривой как распределения ОВП по скоростям гумификации h , так и по глубине z .

Список литературы

1. Барцев С.И. Способ определения параметров феноменологической континуальной модели трансформации органического вещества почвы / С.И. Барцев, А.А. Почекутов // Сибирский лесной журнал. — 2015. — №.3. С.115 – 121.
2. Ågren G.I. Theoretical Ecosystem Ecology: Understanding Element Cycles / G.I. Ågren, E. Bosatta. — Cambridge University Press, New York, USA, 1998. — P.17 – 107.
3. Bartsev S.I., A continual model of soil organic matter transformations based on a scale of transformation rate / S.I. Bartsev, A.A. Pochekutov // Ecological Modelling. — 2015. — V.302. P.25 – 28.
4. Carpenter S.R. Decay of heterogenous detritus: a general model / S.R. Carpenter // Journal of Theoretical Biology. — 1981. — V.89. P.539 – 547.
5. Jobbágy E.G. The vertical distribution of soil organic carbon and its relation to climate and vegetation / E.G. Jobbágy, R.B. Jackson // Ecological Applications. — 2000. — V.10. — № 2. P.423 – 436.
6. Nakane K. A mathematical model of the behavior and vertical distribution of organic carbon in forest soils / K. Nakane, K. Shinozaki // Japanese Journal of Ecology. — 1978. — V.28. P.111 – 122.
7. Vedrova E. F. Carbon pools and fluxes of 25-year old coniferous and deciduous stands in Middle Siberia / E.F. Vedrova // Water, Air and Soil Pollution. — 1995. — V.82. P.239 – 246.
8. Vedrova E. F. Biochemistry of carbon and nitrogen in the siberian afforestation experiment / E.F. Vedrova // In: Tree Species Effects on Soils: Implications for Global Change. Eds. D.Binkley, O.Menyailo, — Dordrecht: Kluwer Academic Publishers. — 2005. — P. 281–290.

ВЫДЕЛЕНИЕ ИНФОРМАТИВНЫХ ПРИЗНАКОВ НА ОСНОВЕ МУРАВЬИНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ ИММУНОСЕТЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НОВЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Самигулина Г.А., Масимканова Ж.А.

Институт информационных и вычислительных технологий КН МОН РК,

galinasamigulina@mail.ru

В прикладных задачах распознавания образов и прогнозирования большое значение имеет описание поведения системы на основе набора признаков. Одним из главных этапов процесса извлечения информации из большого объема накопленных данных является этап предварительной обработки исходных данных, который включает в себя выделение информативных признаков. Использование малоинформативных признаков снижает эффективность процесса классификации [1]. Модели, построенные на основе этих признаков, приводят к повышению сложности вычислений, снижению адекватности модели и уменьшают вероятность принятия правильных решений [2]. В связи с этим, возникает необходимость отбора признаков, для которых количество ошибок классификации будет минимальным. Исключая малоинформативные признаки система может работать значительно быстрее и продуктивнее. Поэтому поиск наиболее информативного набора признаков является актуальным для широкого круга прикладных задач.

В настоящее время известны различные методы для решения данной задачи: нейронные сети, нечеткая логика, эволюционные (генетические) алгоритмы, алгоритмы роевого интеллекта, метод главных компонент (РСА) и др. Среди всех методов отбора информативных признаков (ИП) хорошо известными являются эволюционные и муравьиные алгоритмы.

Подходы искусственного интеллекта используют методику эвристического или случайного поиска для снижения вычислительной сложности, однако при этом уменьшается уровень оптимальности отобранного набора. К методам стохастического поиска относятся методы интеллектуальной оптимизации [3], которые моделируют поведение живых существ, характеризующихся коллективным интеллектом. К этим методам относятся подходы муравьиных, пчелиных колоний, методы оптимизации роя частиц (на основе стаи птиц и рыб), алгоритм оптимизации на основе моделирования перемещения бактерий. Также используются эволюционные методы, основанные на идее эволюции с помощью естественного отбора, которые работают с множеством признаков и позволяют анализировать пространство поиска значительно быстрее по сравнению с другими методами.

Существует много публикаций по данной тематике. В исследовании [4] описывается оценка информативного признакового пространства для системы обнаружения вторжений с помощью трех алгоритмов: жадного, генетического и муравьиного. В статье [5] предлагается новый подход отбора признаков, основанный на интеграции генетического алгоритма и метода роя частиц. В публикации [6] для решения задачи формирования набора ИП рассмотрено совмещение алгоритма муравьиной колонии с другими классификаторами и нечеткими методами. В работе [7] описывается адаптивная система управления на основе подхода муравьиных колоний для улучшения точности решения и исключения преждевременной сходимости. В статье [8] проводится сравнительный анализ задачи отбора ИП в категоризации текста на основе муравьиного и генетического алгоритма. В работе [9] предлагается новый компьютерный молекулярный дизайн (САВО) для разработки растворителей на основе

алгоритма эффективной оптимизаций колонии муравьев (EACO).

При построении интеллектуальной технологии иммунносетевого моделирования лекарств с заданными свойствами также используются алгоритмы для выделения информативных признаков (дескрипторов) [10]. Применение виртуального скрининга и моделирования связи между структурой соединений и их активностью (QSAR-Quantitative Structure Activity Relationships) позволяют значительно сократить временные и финансовые затраты на отбор соединений – кандидатов для новых лекарственных препаратов [11, 12]. При выделении информативных дескрипторов в процессе построения оптимальной иммунносетевой модели используется мультиалгоритмический подход [13]. Данный подход позволяет решать задачу отбора признаков одновременно разными методами искусственного интеллекта, что дает возможность выделять наилучшие входные параметры для решения задачи распознавания образов.

Постановка задачи формулируется следующим образом: необходимо решить задачу выделения информативных признаков с использованием муравьиного алгоритма для компьютерного молекулярного дизайна новых лекарственных препаратов с заданными свойствами на основе иммунносетевого моделирования на примере антисептических препаратов (сульфаниламидов).

Алгоритм муравьиной колонии представляет собой итеративный метод случайного поиска, основанный на моделировании поведения муравьев в процессе решения оптимизационных задач. В решении задачи выбора информативных признаков набор признаков представлен в виде графа, узлы которого являются признаками [1]. В начале алгоритма задается количество признаков, и каждый муравей из колонии устанавливается в какую-то начальную точку. Следующий признак выбирается в зависимости от качества феромона на ребре. На каждом шаге происходит испарение феромона и при каждой итерации выбирается набор признаков с минимальной ошибкой. Алгоритм завершается только тогда, когда пройдено требуемое количество итераций. Количество феромона пропорционально проценту ошибок, полученному при классификации объектов по признаку. В данном подходе предполагается, что существует какой-то оптимальный набор признаков, на котором классификаторы дают минимальный процент ошибок и подграф, на гранях которого будет максимальное количество феромона, а на гранях, соединяющих неинформативные признаки феромона должно быть минимальное количество. На рисунке 1 приведена схема выделения набора информативных признаков на основе муравьиного алгоритма.

При поиске наиболее значимого набора признаков используются критерии:

- показатели эффективности классификации или прогнозирования по моделям, синтезированным на основе оцениваемых комбинаций признаков;
- фильтрующие критерии, позволяющие оценить информативность набора признаков. К фильтрующим критериям, используемым для оценивания признаков, могут быть отнесены: множественный коэффициент корреляции, коэффициент корреляции Пирсона, дисперсионное отношение, коэффициент связи, информационный критерий, энтропия набора признаков, критерий, основанный на статистическом подходе [14].

Имеются программные комплексы на основе муравьиных колоний, которые используются во многих приложениях: GUI Ant-Miner (<http://gui-ant-miner.soft112.com/>) для классификации, ACOTSP (<https://github.com/>) для решения задачи коммивояжера, AntNet (<http://antnetalgorithm.blogspot.com/>) для маршрутизации в сети, MAX-MIN Ant System для бинарного квадратичного программирования, AntMiner+ (<http://www.antminerplus.com/>) и др.

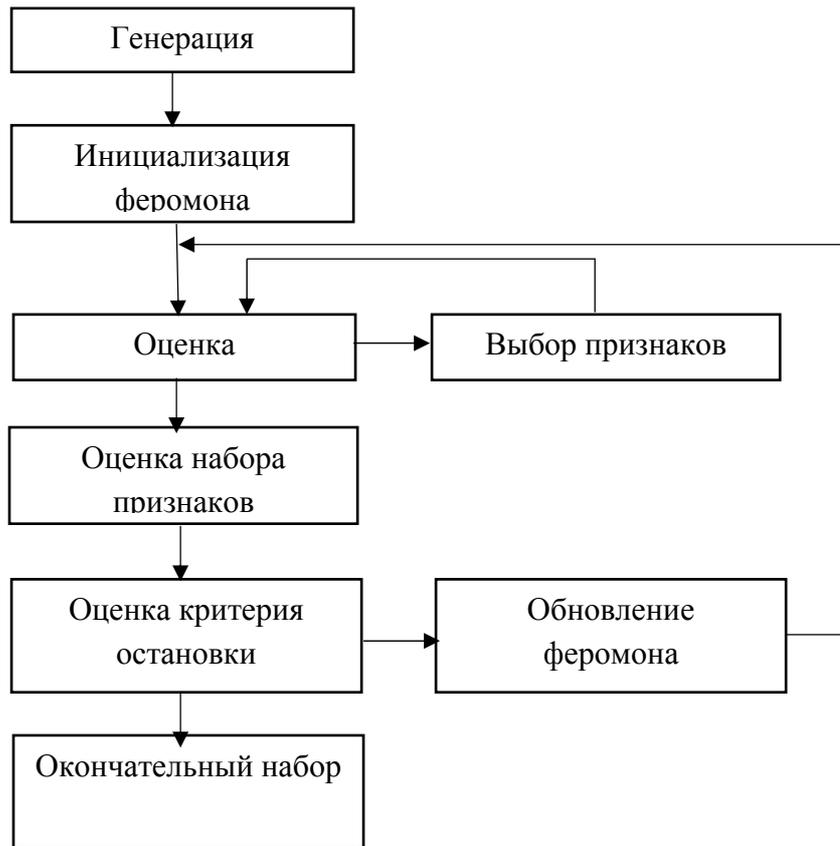


Рис.1. Выделение ИП на основе муравьиного алгоритма

Таким образом, в муравьином алгоритме процесс решения задачи характеризуется меньшей вычислительной сложностью, чем у методов полного перебора и алгоритм обеспечивает требуемую точность решения. Основной особенностью рассматриваемого метода является то, что в процессе работы мера приоритетности каждого узла изменяется и выясняется относительная важность каждого из информативных признаков. В процессе решения, достигая более детального изучения пространства поиска, растет точность прогнозирования. Алгоритм работает лучше, чем другие оптимизации для TSP (Traveling Salesman Problem) (нейронные сети, генетические алгоритмы), где задача состоит из большого количества узлов. В сравнение с генетическими алгоритмами муравьиный алгоритм опирается на память всей колонии вместо памяти только о предыдущем поколении.

Недостатками являются трудный теоретический анализ в результате последовательности случайных решений и изменение распределения вероятностей при итерациях. При применении дополнительных методов (локальный поиск) время сходимости не определяется и зависит от настроечных параметров, которые подбираются только исходя из экспериментов [15]. Алгоритм, используя критерий оценивания индивидуальной информативности признаков, не учитывает совместное влияние всего набора на результат.

На рисунке 2 приведена схема выделения набора ИП с использованием различных программных комплексов. Для нейронных сетей применяются NEUROHELL, NEUROPRO; для муравьиных колоний - ANT-MINER, GUI ANT-

MINER; для генетических алгоритмов – GENEHUNTER, AUTO2FIT; для метода главных компонент - SPSS, STATGRAPHICS.

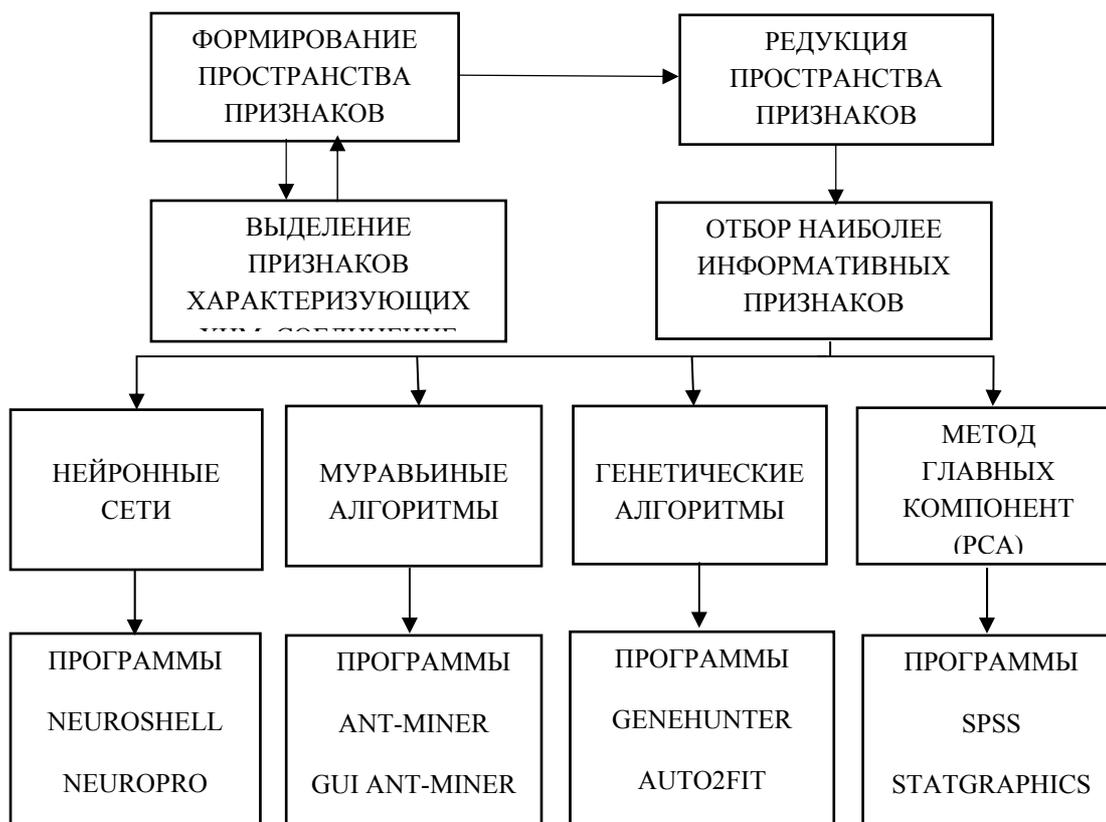


Рис.2. Выделение набора ИП

Описанный муравьиный алгоритм для отбора информативного набора данных, позволяет сократить сложность вычислений и повысить точность классификации. По сравнению с другими методами данный алгоритм находит близкие к оптимальному решения за меньшее время при этом показывает наилучшие результаты. Преимуществом использования алгоритма является оценивание индивидуальной информативности признаков и детальное изучение признакового пространства.

Работа проводится по грантам «Компьютерный молекулярный дизайн лекарственных препаратов на основе иммунносетевого моделирования» (2015-2017 гг.) и «Разработка информационной технологии, алгоритмов и программно-аппаратного обеспечения для интеллектуальных систем управления сложными объектами в условиях параметрической неопределенности» (2015-2017 гг.) в Институте информационных и вычислительных технологий КН МОН РК.

Список литературы

1. Олейник А.А., Субботин С.А. Мультиагентный метод с непрямой связью между агентами для выделения информативных признаков // Искусственный интеллект. — 2009. — № 4. — С.75-82.
2. Самигулина Г.А., Абденова А.М., Масимканова Ж.А. Применение подходов искусственного интеллекта для решения задачи выделения информативных признаков // Материалы 11-й Международной Азиатской школы-семинар «Проблемы оптимизации сложных систем». — 2015. — С. 567-572.

3. Олейник Ан.А., Олейник Ал.А., Субботин С.А. Агентные технологии для отбора информативных признаков // Кибернетика и системный анализ. — 2012. — № 2. — С. 113-125.
4. Мещеряков Р.В., Ходашинский И.А., Гусакова Е.Н. Оценка информативного признакового пространства для системы обнаружения вторжений // Известия Южного федерального университета. — 2013. — №12(149). — С. 57-63.
5. Ghamisi P., Benediktsson J.A. Feature selection based on hybridization of genetic algorithm and particle swarm optimization // Geoscience and remote sensing letters, IEEE. — 2014. — Vol. 12, Issue 2. — P. 309-313.
6. Ходашинский И.А., Гусакова Е.Н. Формирование информативного признакового пространства с помощью алгоритма муравьиной колонии // Труды Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Научная сессия ТУСУР–2013». — Томск, 2013. — С. 31-34.
7. Liu Y., Wang G., Chen H., Zhao Z., Zhu X., Liu Z. An adaptive fuzzy ant colony optimization for feature selection // Journal of Computational Information Systems. — 2011. — Vol. 7. — P. 1206-1213.
8. Mehdi Hosseinzadeh Aghdam, Nasser Ghasem-Aghaee, Mohammad Ahsan Basiri. Text feature selection using ant colony optimization // Expert System with Applications. — 2009. — № 36. — С. 6843-6853.
9. Gebreslassie B.H., Diwekar U.M. Efficient ant colony optimization for computer aided molecular design: Case study solvent selection problem // Computers & chemical engineering. — 2015. — Vol.78. — P. 1-9.
10. Самигулина Г.А., Самигулина З.И., Вуйцик В., Крак Ю.В. Прогнозирование зависимости «структура – свойство» новых органических соединений на основе искусственных иммунных систем // Проблемы управления и информатики. — Киев, 2015. — № 2. — С.81-88.
11. Samigulina G.A., Abdenova A.M., Masimkanova Zh. A. Development of QSAR methods based on artificial intelligence approaches // Proc. of the 13th International conference information technologies and management. — Riga: Information Systems Management Institute, 2015. — P.83.
12. Зефирова Н.С., Палюлин В.А. Компьютерный дизайн лекарственных веществ // Тезисы докладов научно-практической конференций «Вычисления с использованием графических процессоров в молекулярной биологии и биоинформатике». — М.: МГУ им. М.В. Ломоносова. — 2010. — С. 7-8.
13. Самигулина Г.А., Самигулина З.И. Построение оптимальной иммуносетевой модели для прогнозирования свойств неизвестных лекарственных соединений на основе мультиалгоритмического подхода // Проблемы информатики. — 2013. — №2. — С. 21-29.
14. Олейник А.А., Субботин С.А. Выделение набора информативных признаков на основе эволюционного поиска с кластеризацией // Искусственный интеллект. — 2008. — №4. — С.704-711.
15. Штовба С.Д. Муравьиные алгоритмы // Математика в приложениях. — 2003. — №4. — С. 70-75.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОБЛЕМАТИКИ ПОДВЕШИВАНИЯ ТЯГОВОГО ЭЛЕКТРОДВИГАТЕЛЯ В ЭЛЕКТРОВОЗЕ

В.П.Сизиков¹, В.И. Разумов²

¹Омский государственный университет путей сообщения, *v_p_sizikov@mail.ru*

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, *razumovvi@omsu.ru*

1. Введение. Данная работа даёт пример применения ДИС-технологии, которой присущи одновременно качества системной методологии, языка программирования на уровне оболочки экспертных систем и аппарата имитационного моделирования. ДИС-технология позволяет быстро получать на качественном уровне то, что обычно требует долгих исследований, проведения затратных и экологически вредных экспериментов. В данной работе проводится системный анализ проблематики подвешивания тягового электродвигателя (ТЭД) в электровозе.

Среди проблем, с которыми сталкиваются специалисты, применяющие аппарат традиционной физики, в том числе, механики, имеется, как минимум, две ключевых. Во-первых, формулы физики, тем более механики приходится применять в предположении уже завершённой и достаточно детальной качественной проработки, когда модель по существу уже готова к практической реализации, и надо лишь согласовать или оптимизировать в ней значения серии параметров. Но всегда ли осуществляемая перед этим качественная проработка эффективна, чтобы подготовленная ею модель была надёжной, в том числе, допускающей коррекцию на уровне замены в ней элементов? Во-вторых, как ни велико многообразие готовых формул физики, почти все конкретные задачи требуют сложного, часто недостаточно проработанного, синтеза этих формул. Нередко это бывает невозможно осуществить без дополнительных гипотез, а то и физических экспериментов. Приходится выстраивать многоэтапные, растянутые на долгие времена, выводы формул, которые рискуют потерять актуальность, как только появится возможность для замены в системе хотя бы одного элемента.

Обращаясь к проблематике подвешивания ТЭД, следует отметить, что разработка надёжной и устойчивой, в частности, к износу системы непосредственным образом не учитывает важнейший фактор износа материала – температуру. Для этого просто нет подходящих формул.

ДИС-технология позволяет преодолеть отмеченные трудности. В ней разработан математический аппарат, который, во-первых, богат для описания разнообразных физических явлений, во-вторых, ориентирован на язык алгоритмов и имитационные эксперименты, в-третьих, результаты его применения не исключают, а дополняют работы, выполненные в русле традиционной для отрасли методологии.

2. Подход к системному анализу на базе ДИС-технологии. Напомним, что ДИС-технология есть сформированный на базе теории динамических информационных систем (ДИС, ТДИС) [1–4] аппарат математического моделирования, которому внутренне присущи качества языка программирования по организации и осуществлению имитаций. А рабочий объект ДИС-технологии есть ДИС как оргграф с двумя типами рёбер (ведущими, контролирующими) и процессом информационного

функционирования (ПИФ) на нём как процессом перераспределения между его вершинами двух типов ресурса (актива, пассива) в последовательности из актов трёх типов: A_c – акт сбора актива в пассив по контролирующим рёбрам ДИС; A_t – акт трансформации пассива в актив в некоторых вершинах ДИС; A_d – акт перераспределения актива по ведущим рёбрам ДИС.

Обычно при решении прикладных задач структура модели в ранге ДИС оказывается предопределённой. Но иногда приходится начинать практически с нуля, и тогда на помощь приходит номологическая база [5], дополняемая при необходимости Инсейфингом [6]. Определившись с ДИС на структурном уровне, предстоит далее определяться с её функциональными параметрами. Однако эти параметры, в отличие от структурных, допускают численные вариации, выводя на задачи мониторинга. При этом каждому набору значений функциональных параметров сопоставляется ПИФ ДИС, поведение графика которого выступает как режим и этим задаёт определённую классификацию режимов. Ориентиры исходят от изображения для каждой вершины ДИС двух графиков изменения в ней актива и пассива. Для более тонких и весьма важных оценок производится обращение к аддитивным составляющим ПИФ ДИС, представляющим 8 основных типов движения из ДИС-фазового пространства [3]. Здесь для каждой вершины ДИС приводится уже не одна полоса из двух графиков, а 4 полосы по два графика на каждой. Следует принимать во внимание, что движение здесь рассматривается как внутренний, а не внешний атрибут системы, в нём сочетаются сразу кинетический и потенциальный аспекты, включая напряжения, ёмкости. Проведение экспериментов с вариациями значений функциональных параметров позволяет по графикам ПИФ и типов движений ДИС определиться с выбором благоприятных по тем или иным соображениям таких значений или с доказательством их отсутствия.

Таков порядок проведения системного анализа с серией соответствующих выводов из его результатов. Осуществим это по проблематике с подвешиванием ТЭД.

3. Модель процесса-системы с подвешенным ТЭД. Опорно-осевое подвешивание ТЭД электровоза 2ЭС6 с основными габаритными размерами включает элементы [7]: ТЭД; поводок подвески ТЭД; вал якоря ТЭД; колёсная пара; рама тележки; головки поводка с сайлентблоками; кронштейн для крепления ТЭД к поводку. Подвеска должна обеспечивать снижение динамических воздействий на колёсно-моторный блок при трогании с места и прохождении колёсной парой неровностей пути.

Связь ТЭД с рамой тележки – маятниковая. Подвешивание ТЭД к раме тележки осуществлено через поводок, имеющий на концах две головки с резиновыми или полиуретановыми сайлентблоками. Клинообразные концы осей шарниров (сайлентблоков) устанавливаются в приваренном к раме тележки и в закреплённом шестью болтами на остовах ТЭД кронштейнах, в которых они крепятся каждый двумя болтами, зафиксированными стопорными шайбами. В качестве страховки от падения ТЭД на рельсовый путь при обрыве поводка служат специальные приливы на остовах ТЭД и среднем бруске рамы тележки [7].

Для оценки эксплуатационной надёжности элементов подвешивания ТЭД выполним анализ напряжённого состояния материала поводка в процессе циклического

нагрузки при движении по стыковому рельсовому пути. Однако обратимся при этом не к традиционной механике, а к ДИС-технологии. При этом надо выявить характерную для такой эксплуатации процесс-систему. Так, согласно описанным данным, происходит перераспределение нагрузки по циклу: ось колёсной пары \rightarrow ось вала якоря ТЭД \rightarrow поводок подвески ТЭД \rightarrow ось колёсной пары. Это и даёт модель процесса-системы в ранге ПИФ триады. Пусть указанные данные соответствуют обозначению цикла $v_0 \rightarrow v_1 \rightarrow v_2 \rightarrow v_0$ в триаде с вершинами v_0, v_1, v_2 .

Для запуска ПИФ триады надо задать начальное распределение активов r_i и пассивов q_i по вершинам v_i и определиться с тем, как меняются от компонента к компоненту ПИФ уровни трансформации λ_i пассива в актив в вершинах v_i и относительные проводимости $f_c(v_j, v_i), f_d(v_i, v_j)$ каждой имеющейся в триаде контролирующей и ведущей связи, проводящей ресурс от v_i к v_j ($i, j=0, 1, 2$). Из простоты считаем, что общий объём ресурса в триаде равен 1 – условной единице. Так, ввиду взаимодействия, проводимости связей определяются текущим образом из соотношений: $f_d(v_i, v_j) = a_{ij}(r_j + q_j), f_c(v_j, v_i) = b_{ij}(r_j + q_j)$, где $0 \leq a_{ij} \leq 1, 0 \leq b_{ij} \leq 1$ – постоянные взаимодействия, определяемые по формулам $a_{ij} = (a_i a_j)^{0.5}, b_{ij} = (b_i b_j)^{0.5}$, где, в свою очередь, $0 \leq a_i \leq 1, 0 \leq b_i \leq 1$ – постоянные мотиваций взаимодействия в каждой вершине v_i ($i, j=0, 1, 2$). Для выявления автономных качеств системы все a_i, b_i и $0 \leq \lambda_i \leq 1$ считаются неизменными в конкретном ПИФ. Кроме того, режим, на который выходит ПИФ триады, лишь в исключительных случаях зависит от начального распределения активов r_i и пассивов q_i , т.е. их можно задать практически любыми, дающими в общей сумме 1.

Итак, в общем случае имеем 9 свободных параметров λ_i, a_i, b_i ($i=0, 1, 2$), и важно определяться, как от их значений зависит режим ПИФ триады. Попытаемся выяснить, какие режимы ПИФ вполне благоприятны в задаче с подвеской ТЭД.

Прежде всего, должны быть сведены к минимуму нагрузки в поводке подвески ТЭД v_2 . Нагрузка как силовой показатель выражается величиной вакуумной ёмкости как одного из типов движения в ДИС-технологии. Эта величина в свою очередь диктуется значением параметра λ_2 , т.е. должно быть $\lambda_2 \approx 0$. Кроме того, с учётом инерционности, должно быть $\lambda_0 > \lambda_1 > 0$. Далее, в поводке v_2 нежелательно выделение тепла. Уместно потребовать, чтобы показатель теплового движения в v_2 был как можно меньше и хотя бы сопоставим при этом с теми, что окажутся в v_0 и v_1 . Показания остальных типов движения не столь важны, так как будут укладываться в чередующиеся повороты поводка подвески, отражаясь в кручении, напряжения которого уже учтены в показаниях вакуумной ёмкости.

Итак, приступим к экспериментам.

4. Мониторинг режимов процесса-системы с подвешенным ТЭД. Для начала примем $\lambda_0=0,6, \lambda_1=0,3, \lambda_2=0,01, a_i=b_i=1$ ($i=0, 1, 2$). Соответствующая программа выдаёт график режима ПИФ: на верхнем рисунке 1 в верхней полосе ряды 1 и 2 отражают изменения, соответственно, актива и пассива в вершине v_0 , в средней полосе – в вершине v_1 , в нижней полосе – в вершине v_2 . Для каждой вершины последовательно добавляются показатели 8 типов движения в ней: на каждом нижнем рисунке 1 в верхней полосе ряды 1 и 2 отражают, соответственно, равномерное прямолинейное движение и вакуумную ёмкость, во второй полосе – механическое и вращательное

(поворот) движения, в третьей полосе – импульсы напряжения и тепловое движение, в четвёртой полосе – вращательное (вокруг оси) движение и теплоёмкость.

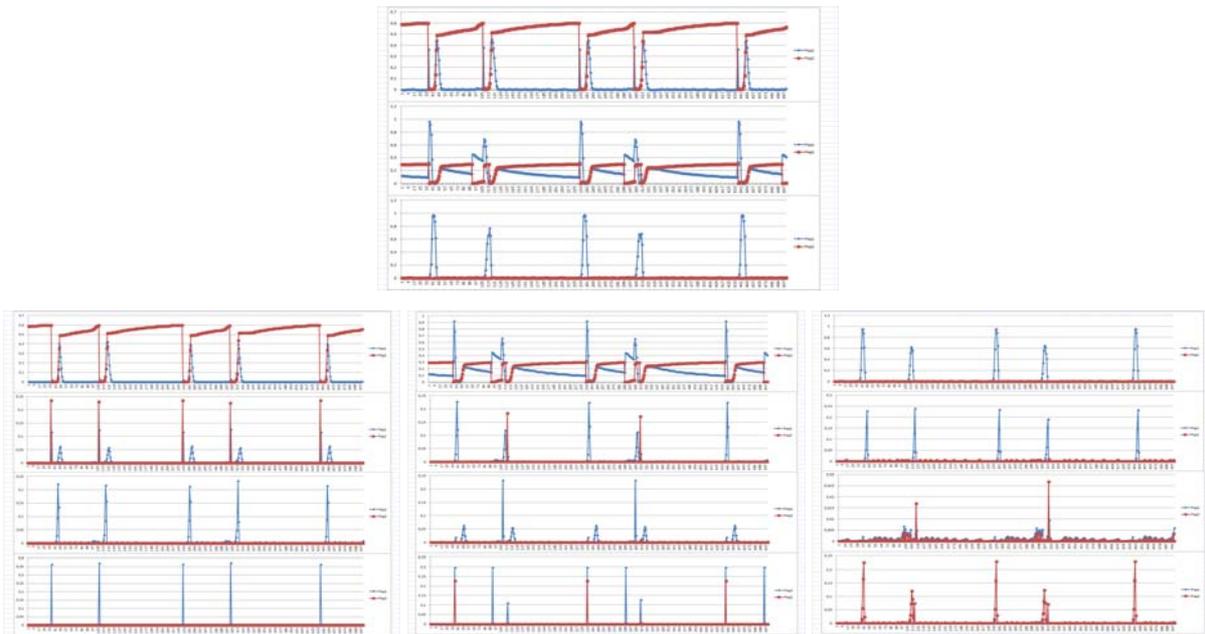


Рис. 1. Исходный режим с подвешенным ТЭД и типы движения при нём.

Присматриваясь к показаниям теплового движения, замечаем, что в вершине v_2 , отвечающей за поводок подвески ТЭД, они существенно больше, чем в v_0 и v_1 . Более конкретно, выдаваемые программой средние значения показателей тепла в вершинах v_0 , v_1 , v_2 составляют, соответственно, 10^{-5} , $4,3 \cdot 10^{-5}$, $3 \cdot 10^{-4}$ от условной единицы, т.е. поводок на порядок горячее и оси якоря самого ТЭД, и оси колёсной пары. Впрочем, эти цифры ещё и довольно велики, последняя из них составляет почти 1% от максимально возможной величины в $1/27$ от условной единицы.

Попытки заметно улучшить ситуацию за счёт перемен параметров λ_i ($i=0,1,2$) оказываются бесполезными, так как не изменяют существенно в вершине v_2 среднюю величину поступающего в неё пассива как сумму силовых и тепловых проявлений. Чтобы последняя величина убавилась, необходимо уменьшать значения параметров a_i , b_i ($i=0,1,2$). Но уменьшение их всех вместе ведёт просто к замедлению ПИФ, что на практике соответствует замедлению движения электровоза, и то, что новые показатели движения меньше исходных, вовсе не значит улучшения надёжности поводка подвески ТЭД. Так что обязательно надо хотя бы одно из значений параметров a_i , b_i ($i=0,1,2$) оставлять =1, а также при их перемене следует заботиться, чтобы характерная величина «периода» у ПИФ была не больше, чем в исходном варианте на рисунке 1.

Так как в идеале при $a_i=0$ тепловое движение в вершине v_i должно быть =0, то начнём с уменьшения параметров a_i ($i=0,1,2$). Но оказывается, что убывание теплового движения в вершине v_i происходит на порядки медленнее значения a_i . На рисунке 2 приведён вариант, в котором $\lambda_0=0,6$, $\lambda_1=0,3$, $\lambda_2=0,01$, все $a_i=0,01$ и все $b_i=1$. При этом средние значения показателей тепла в вершинах v_0 , v_1 , v_2 составляют, соответственно,

$6,8 \cdot 10^{-6}$, $2,5 \cdot 10^{-6}$, $6,3 \cdot 10^{-5}$ от условной единицы, т.е. показатель у поводка убыл менее чем в 5 раз, оставив поводок на порядок горячее осей якоря ТЭД и колёсной пары.

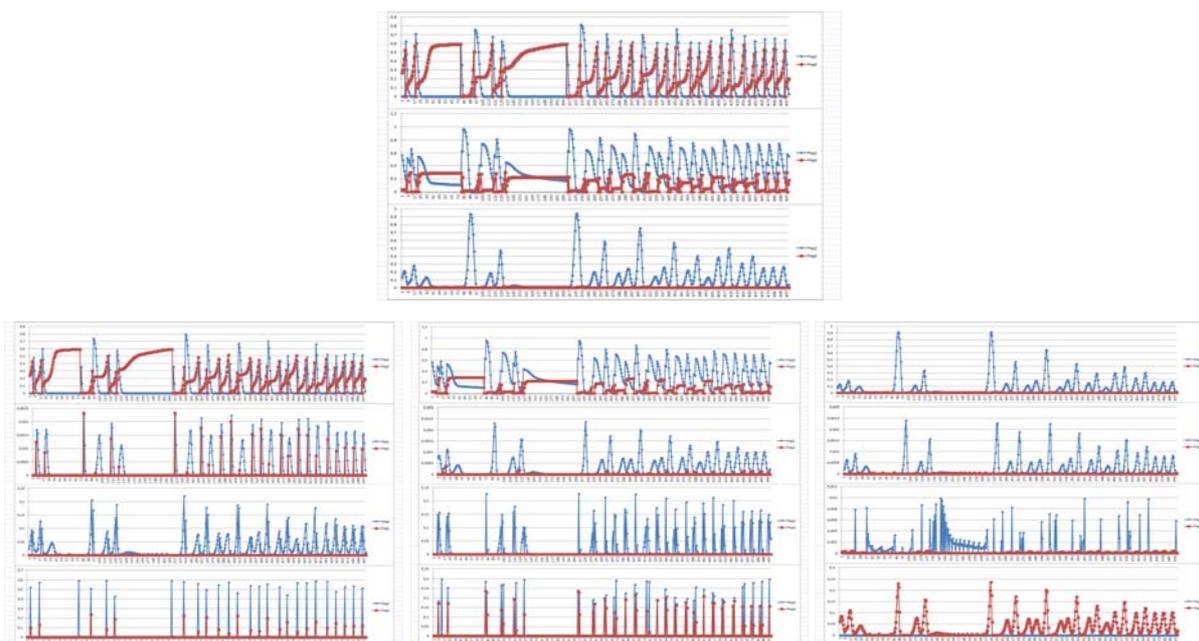


Рис. 2. Режим при высокой вязкости материалов и типы движения при нём.

Правда, у нового результата есть преимущество в том, что существенно сократилась величина характерного «периода» ПИФ, участились встряски поводка, и, значит, повысилась оценка его надёжности. Но объявился и недостаток, состоящий в том, что даже при значениях $a_i=0,01 \ll b_i=1$ материал вершины v_i должен представлять почти как цельный кристалл. Требовать этого от всех материалов электровоза, особенно от поводка подвески ТЭД, вряд ли уместно. Значит, стоит попробовать уменьшить значение хотя бы одного из параметров b_i ($i=0,1,2$), прежде всего b_2 . И на рисунке 3 приведён вариант, в котором $\lambda_0=0,6$, $\lambda_1=0,3$, $\lambda_2=0,01$, все $a_i=0,1$, $b_0=b_1=1$ и $b_2=0,013$. При этом характерный «период» ПИФ остался примерно величиной в 100 его компонентов, как у исходного варианта, а средние показатели тепла в вершинах v_0 , v_1 , v_2 составили, соответственно, $5,7 \cdot 10^{-7}$, $1,4 \cdot 10^{-5}$, $1,7 \cdot 10^{-5}$ от условной единицы. Результат оказался явно лучше исходного, причём в поводке и оси колёсной пары улучшение составило более чем на порядок, превзойдя предыдущий результат, где все $a_i=0,01 < 0,1$. Тепло в поводке почти сравнялось с теплом у оси якоря ТЭД. Однако теперь материалам в v_0 , v_1 не обязательно быть кристаллами, а материал в v_2 , где $a_2=0,1 > b_2=0,013$, подобен резине.

В принципе, показатели тепла можно убавлять и далее на порядки, уменьшая значения всех a_i и b_2 . Однако это будет налагать уже серьёзные требования к материалам, из которых изготовлены части v_0 , v_1 , v_2 . У первых двух материал скоро должен выступать кристаллом, буквально алмазным при $a_i \approx 0$, а у третьей, наоборот, материал скоро должен оказаться буквально воздушным, и подвесить с его помощью ТЭД вряд ли получится. Или всё-таки можно на примере пневматического устройства,

тем более что режим ПИФ при этом становится более выровненным, снимая тревоги за безопасность работы системы?

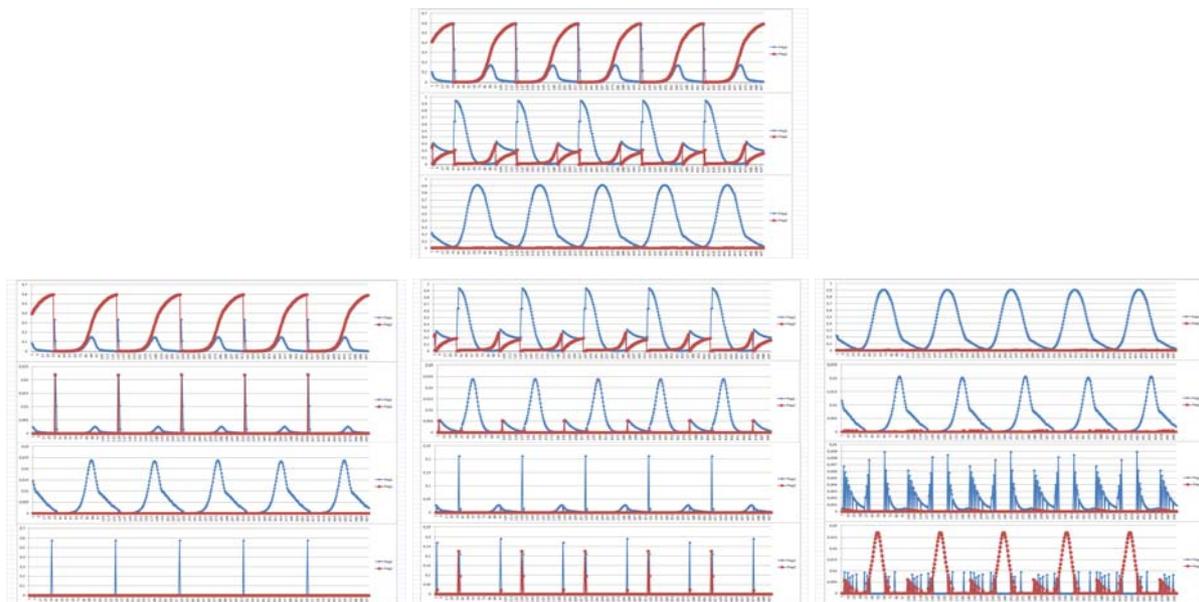


Рис. 3. Режим при малой вязкости материала поводка и типы движения при этом.

6. Заключение. Итак, с применением ДИС-технологии проведён системный анализ простейшей модели в ранге триады, выражающей взаимодействие основных элементов в проблематике подвешивания ТЭД в электровозе: ось колёсной пары, ось вала якоря ТЭД, поводок подвески ТЭД. За основу приняты условия малости силовых и тепловых проявлений в поводке подвески ТЭД. Исходя из этого, выявлена пара основных вариантов организации поводка, включая особенности его рабочего материала. Примеры этих вариантов представлены на рисунках 2 и 3. При этом вариант на рисунке 3 оказывается более предпочтительным не только по малости силовых и тепловых проявлений в поводке, но и по выровненному характеру функционирования системы.

Похоже, пока на практике предпочтение отдаётся варианту, приведённому на рисунке 2, с уменьшением значений a_i , не меняя b_i ($i=0,1,2$). Ситуация останавливается на использовании материалов в ранге стали. Одной из главных причин этого является отсутствие надёжных подходов к учёту тепловых эффектов в системе, по стали всё-таки есть некие данные об её усталости в эксплуатации. А ведь, в принципе, согласно данным на рисунке 3, не исключены и другие варианты организации поводка.

В интересах приближения полученных математических результатов к практике уместно предположить, что оптимальное согласование в механической системе из трёх элементов: ось колёсной пары, ось вала якоря ТЭД, поводок подвески ТЭД, достигается по мере привлечения в систему пневматических или (и) вакуумных устройств. Это соответствует усилению варианта, приведённого на рисунке 3. Выровненный характер режима ПИФ при этом позволяет сгладить опасения за возможные избыточные

напряжения и нарушения безопасности при использовании пневматических или (и) вакуумных устройств.

Продолжение серий имитационных экспериментов в русле ДИС-технологии уместно проводить в параллели с экспериментами с конструкционными материалами. Таким образом, предложенный здесь подход позволяет дополнить, но не заменить, использование инструментов физики, в том числе механики для расчетов распределения сил в системе, в оценке, например, такого важного фактора как усталость материала. Однако эти инструменты актуально применять уже после того, как осуществлена достаточно надёжная качественная проработка системы в отношении её элементов, например, с помощью ДИС-технологии.

Список литературы

1. Разумов В.И. Основы теории динамических информационных систем / В.И. Разумов, В.П. Сизиков. – Омск: ОмГУ, 2005. – 212 с.; То же [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.omsu.ru/file.php?id=4264>.
2. Разумов В.И. Информационные основы синтеза систем. В 3 ч. Ч. I. Информационные основы системы знаний / В.И. Разумов, В.П. Сизиков. – Омск: ОмГУ, 2007. – 266 с.; То же [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.omsu.ru/file.php?id=2594>.
3. Разумов В.И. Информационные основы синтеза систем. В 3 ч. Ч. II. Информационные основы синтеза / В.И. Разумов, В.П. Сизиков. – Омск: ОмГУ, 2008. – 340 с.; То же [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.omsu.ru/file.php?id=4265>.
4. Разумов В.И. Информационные основы синтеза систем. В 3 ч. Ч. III. Информационные основы имитации / В.И. Разумов, В.П. Сизиков. – Омск: ОмГУ, 2010. – 640 с.; То же [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.omsu.ru/file.php?id=6759> (part1); <http://www.omsu.ru/file.php?id=6760> (part2).
5. Разумов В.И. Приложения информационных основ синтеза систем: ДИС-развёртки и парадигма закона. Монография / В.И. Разумов, В.П. Сизиков. – Электронное издание № 33934. – № гос. регистр. 0321304636, ФГУП НТЦ «Информрегистр». – Омск. 2014.
6. Дусь Ю.П. Инсейфинг как новая интеллектуальная коммуникация в управлении / Ю.П. Дусь, В.И. Разумов, Л.И. Рыженко, В.П. Сизиков // Вестник УрФУ. Серия экономика и управление. – 2014. – № 4.
7. Электровоз грузовой постоянного тока 2ЭС6 с коллекторными тяговыми электродвигателями. Руководство по эксплуатации. Часть 6. Механическая часть. – 2ЭС6.00.000.00 РЭ5 / ООО «Уральские локомотивы». – Екатеринбург, 2011.

ВЛИЯНИЕ РЕФЛЕКСИВНОГО ПОВЕДЕНИЯ НА ДИНАМИКУ ЧИСЛЕННОСТИ ОДНОВИДОВОЙ ПОПУЛЯЦИИ ГЛОБАЛЬНО ИНФОРМИРОВАННЫХ ОСОБЕЙ

М.Ю. Сенашова, М.Г. Садовский
Институт вычислительного моделирования СО РАН, *msen@icm.krasn.ru*,
msad@icm.krasn.ru

Введение

Модели динамики биологических популяций являются одним из ключевых инструментов современной экологии, биофизики биологических сообществ, популяционной биологии. Особый интерес представляют модели пространственно распределенных сообществ с миграциями. Мы будем рассматривать модели динамики на основе принципа эволюционной оптимальности [1–4], в которых перемещения особей носят целенаправленный характер и должны максимизировать средний по пространству коэффициент размножения (КР). Будем предполагать, что особи глобально информированы и могут реализовывать рефлексивную стратегию перемещения из станции в станцию. Глобальная информированность означает, что особям известна вся информация о состоянии окружающей среды в месте их пребывания, а также в станции эмиграции, информация о численностях субпопуляций в обеих станциях и цена перемещения (т.е., затраты на перемещение из станции в станцию, выраженные в долях КР). Выясним, оказывает ли влияние рефлексивное поведение особей на численность популяции. Для этого сравним динамику численности для модели глобально информированных особей без рефлексивного поведения и динамику численности для модели глобально информированных особей с рефлексивным поведением. Рассмотрим так же два варианта размножения. Первый вариант – считается, что все особи, не зависимо от информированности, относятся к одному виду. Второй вариант – особи разной информированности будут рассматриваться как подвиды исходного вида.

Модель глобально информированных особей без рефлексивного поведения

Будем рассматривать сообщество, состоящее из одного вида, особи в котором распределены по двум станциям. Ситуацией миграции будем считать перемещение особей из одной станции в другую. Все остальные перемещения внутри станций, в реальной ситуации неизбежные, миграцией считаться не будут. Будем рассматривать динамику в дискретном времени.

Пусть динамика сообщества в каждой из станций (в отсутствие миграции) описывается уравнением Ферхюльста:

$$\begin{aligned} N_{t+I} &= N_t \cdot (a - bN_t) \\ M_{t+I} &= M_t \cdot (c - dN_t) \end{aligned} \quad (1)$$

где N_t (M_t) – численность особей в момент времени t в I (соответственно, во II станции); a и c описывают плодовитость, b и d описывают плотностно зависимые факторы саморегуляции. Функции, стоящие в скобках, будем называть коэффициентами размножения (КР) соответственно в первой и второй станции.

Определим условия миграции. Миграция из станции в станцию происходит в том и только том случае, когда условия существования в станции иммиграции оказываются лучше, чем в станции пребывания, с учетом цены перемещения p . Величина

p ($0 < p \leq 1$) описывает вероятность перемещения из станции в станцию без ущерба для дальнейшего размножения.

Условие наличия миграции из станции I в станцию II (соответственно из II в I):
 $a - bN_t < p(c - dM_t)$ ($c - dM_t < p(a - bN_t)$, соответственно). (2)

Перемещается такое количество особей Δ , которое обращает неравенство (2) в равенство. Очевидно, что $\Delta \leq N_t$ (либо $\Delta \leq M_t$). Если на шаге t миграция происходит, то Δ определяется одним из двух соотношений:

$$\bar{\Delta} = \min\left(N_t, \frac{a - bN_t + pc - pdM_t}{b + p^2d}\right), \text{ либо } \bar{\Delta} = \min\left(M_t, \frac{c - dM_t + pa - pbN_t}{d + p^2b}\right). \quad (3)$$

Модель (1-3) необратима по времени: операция, соответствующая акту миграции, является проектированием. Отметим, что в данной модели миграционный поток однонаправлен. Встречных потоков миграции быть не может.

Еще раз коротко опишем, как работает модель. На каждом шаге времени t проверяются условия возникновения миграции, вычисляется величина миграционного потока Δ и происходит перераспределение особей по станциям. Вычисляются новые численности \tilde{N}_t и \tilde{M}_t по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \tilde{N}_t = N_t - \Delta, & \quad I \rightarrow II \text{ или } \tilde{N}_t = N_t + p\Delta, \\ \tilde{M}_t = M_t + p\Delta, & \quad \tilde{M}_t = M_t - \Delta, \quad II \rightarrow I. \end{aligned} \quad (4)$$

Для полученных численностей \tilde{N}_t и \tilde{M}_t вычисляются численности на шаге $t+1$ по формуле (1).

Модель глобально информированных особей с рефлексивным поведением

Перейдем теперь к описанию модели с рефлексивным поведением. Под рефлексивным поведением мы будем понимать такое, при котором одна из сторон конфликта (или взаимодействия) предугадывает или прогнозирует поведение противоположной стороны. Базовые подходы к описанию и моделированию такого поведения были разработаны В.А. Лефевром [5].

Будем предполагать, что популяция у нас делится на два подвида: рефлексизирующих особей R_t и нерефлексизирующих особей NR_t , которые могут быть распределены по обеим станциям. Считаем, что на начальном шаге по времени каждый из подвидов занимает свою станцию, например $N_0 = NR_0^I$, $M_0 = R_0^{II}$. На следующих шагах по времени численности в станциях являются суммой численностей рефлексизирующих и нерефлексизирующих особей: $NR_t^I + R_t^I$ и $NR_t^{II} + R_t^{II}$. Модель при этом меняется следующим образом. Проверяются условия наличия миграции для общих численностей в станциях:

$$\begin{aligned} a - b(NR_t^I + R_t^I) < p(c - d(NR_t^{II} + R_t^{II})) \\ c - d(NR_t^{II} + R_t^{II}) < p(a - b(NR_t^I + R_t^I)). \end{aligned} \quad \text{или}$$

Если какое-то из условий выполнено, определяется величина миграционного потока Δ и происходит миграция нерефлексизирующих особей. В случае, если миграционный поток по величине больше, чем численность нерефлексизирующих особей в данной станции, то величина миграционного потока приравнивается к количеству таких особей в станции. После этого вычисляются численности \widetilde{NR}_t^I и \widetilde{NR}_t^{II} :

$$\begin{aligned} \widetilde{NR}_t^I &= NR_t^I + p\Delta; \widetilde{NR}_t^{II} = NR_t^{II} - \Delta \quad II \rightarrow I \\ \widetilde{NR}_t^I &= NR_t^I - \Delta; \widetilde{NR}_t^{II} = NR_t^{II} + p\Delta \quad I \rightarrow II, \end{aligned} \quad \text{или}$$

которые сложатся в результате миграции неререфлексирующих особей на данном шаге. Для этих численностей снова проверяются условия существования миграции:

$$\begin{aligned} a-b(\widetilde{NR}_t^I + R_t^I) &< p(c-d(\widetilde{NR}_t^{II} + R_t^{II})) \\ c-d(\widetilde{NR}_t^{II} + R_t^{II}) &< p(a-b(\widetilde{NR}_t^I + R_t^I)). \end{aligned} \quad \text{или}$$

В случае если какое-то из условий выполняется, вычисляется величина миграционного потока Δ для рефлексирующих особей и происходит перераспределение по станциям уже этих особей, то есть вычисляются новые численности \widetilde{R}_t^I и \widetilde{R}_t^{II} :

$$\begin{aligned} \widetilde{R}_t^I &= R_t^I + p\Delta; \widetilde{R}_t^{II} = R_t^{II} - \Delta \quad II \rightarrow I \\ \widetilde{R}_t^I &= R_t^I - \Delta; \widetilde{R}_t^{II} = R_t^{II} + p\Delta \quad I \rightarrow II. \end{aligned} \quad \text{или}$$

Численности на шаге $t+1$ вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} NR_{t+1}^I &= \widetilde{NR}_t^I \left(a-b \left(\widetilde{NR}_t^I + \widetilde{R}_t^I \right) \right), \quad R_{t+1}^I = \widetilde{R}_t^I \left(a-b \left(\widetilde{NR}_t^I + \widetilde{R}_t^I \right) \right); \\ NR_{t+1}^{II} &= \widetilde{NR}_t^{II} \left(a-b \left(\widetilde{NR}_t^{II} + \widetilde{R}_t^{II} \right) \right), \quad R_{t+1}^{II} = \widetilde{R}_t^{II} \left(a-b \left(\widetilde{NR}_t^{II} + \widetilde{R}_t^{II} \right) \right). \end{aligned}$$

То есть численности неререфлексирующих и рефлексирующих особей на шаге $t+1$ зависят от общей численности особей в станциях.

Мы также рассматриваем случай, когда рефлексирующие и неререфлексирующие особи при размножении представляют собой отдельные подвиды. В этом случае численности на шаге $t+1$ вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \widetilde{NR}_{t+1}^I &= \widetilde{NR}_t^I \left(a-b \widetilde{NR}_t^I \right), \quad \widetilde{R}_{t+1}^I = \widetilde{R}_t^I \left(a-b \widetilde{R}_t^I \right); \\ \widetilde{NR}_{t+1}^{II} &= \widetilde{NR}_t^{II} \left(a-b \left(\widetilde{NR}_t^{II} + \widetilde{R}_t^{II} \right) \right), \quad \widetilde{R}_{t+1}^{II} = \widetilde{R}_t^{II} \left(a-b \left(\widetilde{NR}_t^{II} + \widetilde{R}_t^{II} \right) \right). \end{aligned}$$

Численные эксперименты

Для сравнения динамики численностей рефлексирующих и неререфлексирующих особей были проведены численные эксперименты. Проводилось сканирование области параметров для следующих значений: a и c изменялись от 2 до 10 с шагом 0,16, b и d изменялись от 0.0001 до 0.0005 с шагом 0.000008, p изменялось от 0,1 до 1 с шагом 0,1. Для каждого набора параметров количество шагов по времени равнялось 1000 и начальные численности в каждой из станций равнялись 1000 особей.

Для каждого значения цены перемещения p перебирались 50^4 наборов параметров a, b, c, d и вычислялись суммарные средние численности по обеим станциям за 1000 шагов по времени. Вычислялись следующие суммарные численности: N – средняя суммарная численность по двум станциям для модели без рефлексивного поведения особей, NR – средняя суммарная численность по двум станциям для модели с рефлексивным поведением, NRO – средняя суммарная численность по двум станциям при условии, что рефлексирующие и неререфлексирующие особи размножаются как отдельные подвиды. Для каждого набора параметров вычислялся максимум среди этих численностей. Для каждого значения p вычислялись: SN – количество максимальных

значений для модели без рефлексии, SNR – количество максимальных значений для модели с рефлексией и $SNRO$ – количество максимальных значений для модели с рефлексией и размножением как отдельные подвиды. Таким образом, мы выясняли, какая стратегия поведения особей дает им преимущество по численности для каждого набора параметров. В случае, когда для набора параметров все три средние суммарные численности были равны, вычислялось $SRavn$ - количество совпавших средних суммарных численностей. В случае, когда совпали не все три, а две из средних численностей, вычислялось SS – количество таких случаев. В таблице 1 показано процентное соотношение SN , SNR , $SNRO$, $SRavn$ и SS к общему количеству наборов параметров (5^4 наборов) для каждого значения.

Таблица 1.

p	SN , %	SNR , %	$SNRO$, %	$SRavn$, %	SS , %
0.1	8.80934	13.8686	71.5804	5.64206	0.0996
0.2	3.43894	16.6697	74.4578	5.31491	0.118576
0.3	1.80178	21.8464	71.6109	4.61678	0.12416
0.4	1.35586	27.7823	66.7888	3.9427	0.130352
0.5	1.50704	29.9224	65.0931	3.33198	0.145536
0.6	1.89078	27.5213	68.1184	2.29227	0.177216
0.7	2.36827	23.7701	72.1693	1.49742	0.194912
0.8	2.32942	19.2125	77.5926	0.687136	0.178272
0.9	2.33538	16.1955	81.0601	0.195728	0.213248
1	1.74896	19.9887	78.0033	0.040256	0.218848

Как видно из таблицы, наиболее эффективным с точки зрения средней численности является рефлексивное поведение, когда рефлексивные и нерефлексивные особи размножаются как отдельные подвиды. Следующим по эффективности можно считать рефлексивное поведение особей, когда рефлексивные и нерефлексивные особи рассматриваются как один вид. Поведение при отсутствии рефлексии является наименее эффективным. Отметим также, что процент наборов параметров, при которых средние численности при различном поведении совпадают, монотонно убывает при росте параметра p .

Список литературы

1. Горбань А.Н. Системы с наследованием и эффекты отбора. // Эволюционное моделирование и кинетика. – Новосибирск: Наука, 1992. – С. 40–71.
2. Горбань А.Н., Садовский М. Г. Оптимальные стратегии пространственного распределения: эффект Олли. // Журн. общ. биологии. – 1989. – Т. 50, № 1. – С. 16–21.
3. Садовский М.Г. Математическое моделирование в биологии и химии. Эволюционный подход. – Новосибирск: Наука, 1992. – С. 36–67.
4. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Куршакова К.А. Простейшая модель пространственного поведения особей, реализующих рефлексивные стратегии. // Журнал общей биологии. – 2009. – Т. 70, № 2. – С. 99–109.
5. Lefebvre V. A. The law of self-reflexion // Reflexive Processes and Control. 2002. V. 1, № 2, p. 361–391.

КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА И ЭВОЛЮЦИЯ

Сомсиков В.М.

Национальный центр космических исследований и технологий, Институт
ионосферы, vmsoms@rambler.ru

Создание и развитие теории, позволяющей изучать процессы возникновения и эволюции систем – одна из основных задач физики. Без ее решения невозможно построить физическую картину мира. Пока эта задача решается эмпирическим путем. Одной из ключевых причин здесь можно назвать отсутствие возможности описания эволюции в рамках канонических формализмов классической механики [1]. К примеру, в соответствии с формализмами классической механики, динамика систем обратима. Но в природе все процессы необратимы. Это одно из самых серьезных противоречий между современной картиной мира и реальностью [1-5]. Попытки разрешить его, не привлекая чуждые детерминизму классической механике идеи, начиная от Больцмана и до последнего времени, не дали желаемого результата. Поэтому сегодня термодинамика, статистическая физика не имеют под собой фундаментальной базы и являются эмпирическими науками [6,7].

Проблемы классической механики порождают проблемы квантовой механики [5,8]. Сегодня количество проблем, обусловленных запаздыванием темпов развития фундаментальных знаний относительно эмпирических, достигло критического значения. Именно поэтому современная картина мира скорее напоминает лоскутное одеяло, сотканное из практически несвязанных физических дисциплин, а не «дерево», как должно было бы быть. Здесь в этой связи мы затронем только одну проблему необратимости. Не решив вопроса об описании необратимых процессов в рамках классической механики невозможно приступить к развитию теории эволюции [1,2].

Общепринятое объяснение механизма необратимости в своей основе опирается на свойство экспоненциальной неустойчивости гамильтоновых систем и гипотезу о существовании в них флуктуаций [3]. Суть объяснения заключается в следующем. Теорема Пуанкаре об обратимости гамильтоновых систем утверждает, что существует хотя и очень большое, но конечное время, в течение которого система вновь пройдет сколь угодно близко около исходной точки фазового пространства. Но если усреднить по сколь угодно малой окрестности точки фазового пространства, в которой находится система, то из-за экспоненциальной неустойчивости она уже не вернется в исходное состояние. Такому усреднению эквивалентны сколь угодно малые флуктуации в системе. Гипотеза о существовании в природных системах флуктуаций является достаточным условием для необратимости экспоненциально неустойчивых по Ляпунову гамильтоновых систем. Но эта гипотеза чужда детерминизму классической механике. Более того, если бы без нее было невозможно обоснование необратимости, то это означало бы существование ограничения нашего познания мира.

Анализ огромного числа попыток найти объяснение проблемы необратимости еще в прошлом веке привел к мысли, что в рамках канонических формализмов классической механики у нее нет решения. Было сделано заключение, что классическая механика либо неполна, либо формализмы классической механики требуют расширения, например, путем снятия некоторых ограничений, при которых они строились [1].

Оказалось, что если учесть структурность реальных тел и отказаться от гипотезы о голономности связей, используемой при построении формализмов классической механики, то в рамках законов Ньютона существует объяснение необратимости [11-15]. Это связано с тем, что именно благодаря наличию у систем структуры, они обладают внутренней энергией, которая изменяется за счет работы внешних сил. При этом

необратимость связана с нелинейной трансформацией энергии движения тела в его внутреннюю энергию. То есть, в основе механики должно лежать уравнение движения системы, а не материальной точки (МТ). При этом необходимо исходить из того, что движение тел определяется принципом дуализма симметрии (ПДС). **Суть ПДС в том, что характер динамики и эволюции систем определяется как симметриями пространства, так и симметриями системы.** Отсюда для структурированного тела инвариантной величиной является сумма энергии движения и внутренней энергии. Нарушение симметрии времени означает разрушение инварианта трансляционной группы симметрии, в результате перехода энергии движения во внутреннюю энергию при сохранении их суммарной величины.

Любое тело представимо совокупностью равновесных подсистем. В качестве таких подсистем удобно взять равновесную структурированную частицу (СЧ), состоящую из достаточно большого числа потенциально взаимодействующих МТ. Опираясь на ПДС можно найти уравнение движения СЧ, используя законы Ньютона для МТ. Это позволит определить уравнение движения тела с учетом диссипации.

Ниже поясним, как выводится уравнение движения СЧ, почему механика СЧ необратима. Рассмотрим, как строить механику неравновесных систем (НС). Объясним, как и почему гипотеза о голономности связей, используемая при выводе уравнения Лагранжа, исключает возможность описания необратимой динамики.

Вывод уравнения движения СЧ

В соответствие с ПДС энергия СЧ является суммой энергий движения СЧ в поле внешних сил и внутренней энергии, определяемой взаимодействием всех МТ. Энергия движения СЧ состоит из кинетической энергии движения ее центра масс (ЦМ) и той составляющей энергии внешнего поля, которая определяет потенциальную энергию движения ЦМ СЧ. Внутренняя энергия СЧ равна сумме кинетических энергий движения МТ относительно ЦМ, потенциальных энергий их взаимодействия.

Чтобы представить полную энергию СЧ в виде суммы энергии движения и внутренней энергии, ее следует записать в независимых микро и макропеременных. Микропеременные определяют движение МТ относительно ЦМ СЧ, а макропеременные определяют движение ЦМ СЧ. Энергия СЧ в дуальном представлении имеет вид [14]:

$$E_N = E_N^{ins} + E_N^s = T_N^{tr} + E_N^{ins} + U^{env}, \quad (1)$$

где $T_N^{tr} = M_N V_N^2 / 2$; $M_N = mN$; m - массы МТ, принятые здесь равными единице; N - число МТ в СЧ; $R_N = (\sum_{i=1}^N r_i) / N$, $V_N = \dot{R}_N$ - координаты и скорости ЦМ системы; $r_i = R_N + \tilde{r}_i$, $v_i = V_N + \tilde{v}_i$ - координаты и скорости МТ в лабораторной системе координат; \tilde{v}_i, \tilde{r}_i , - скорости и координаты i -й МТ относительно ЦМ; $E_N^{ins} = T_N^{ins} + U_N$; $T_N^{ins} = \sum_{i=1}^N m \tilde{v}_i^2 / 2$ - кинетическая часть внутренней энергии тела; $U_N(r_{ij}) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U_{ij}(r_{ij})$ потенциальная энергия взаимодействий МТ, $r_{ij} = r_i - r_j$ расстояние между i и j МТ; U^{env} - потенциальная энергия внешнего поля, в общем случае зависящая от микро и макропеременных. Потенциальная энергия внешнего поля дает вклад в изменение, как внутренней энергии, так и энергии движения. Члены, определяющие внешнее поле сил, нелинейные и переменные в них не разделяются. **Закон сохранения энергии системы формулируется так: вдоль траектории движения системы сохраняется сумма энергии движения и внутренней энергии.**

Дифференцируя (1) по времени, получим [15]:

$$V_N M_N \dot{V}_N + \dot{E}_N^{ins} = -V_N F^{env} - \Phi^{env}, \quad (2)$$

где $\dot{E}_N^{ins} = \sum_{i=1}^N \tilde{v}_i (m \dot{v}_i + F(\tilde{r}_i))$; $F(\tilde{r}_i)$ - сила, действующая на i -ю МТ; $F^{env} = \sum_{i=1}^N F_i^{env}(R_N, \tilde{r}_i)$; $\Phi^{env} = \sum_{i=1}^N \tilde{v}_i F_i^{env}(R_N, \tilde{r}_i)$; $F_i^{env} = \partial U^{env} / \partial \tilde{r}_i$.

Первый член в правой части (2) определяет изменение энергии движения ЦМ СЧ, а второй член - изменение внутренней энергии СЧ. Член Φ^{env} равен нулю, если внешняя сила однородна. Это следует из того, что $\sum_{i=1}^N \tilde{v}_i = 0$. Т.е в однородном поле внешних сил внутренняя энергия не изменяется. Из (2) находим уравнение движения СЧ [14, 15]:

$$M_N \dot{V}_N = -F^{env} + \alpha_N V_N, \quad (3)$$

где $\alpha_N = (\Phi^{env} + \dot{E}_N^{ins}) / V_N^2$ - коэффициент, определяющий изменение внутренней энергии.

Первый член в правой части (3) это потенциальная сила, приложенная к ЦМ и меняющая кинетическую энергию СЧ. Второй член нелинейный. Он зависит как от микро, так и от макропеременных и обуславливает изменение внутренней энергии СЧ.

Так как в приближении локального термодинамического равновесия НС представляют собой совокупность перемещающихся относительно друг друга взаимодействующих СЧ, то для описания динамики НС вместо уравнений движения для МТ, следует использовать уравнение движения СЧ.

Необратимость трансформации энергии движения СЧ во внутреннюю энергию, позволяет ввести понятие энтропии. Определим ее как относительное изменение внутренней энергии СЧ. Эта энтропия следует из уравнения движения СЧ. Поэтому она названа динамической энтропией (Д-энтропия). Д-энтропия определяется следующей формулой [15]:

$$\Delta S^d = \sum_{L=1}^R \left\{ N_L \sum_{k=1}^{N_L} \left[\sum_s F_{ks}^L v_k dt \right] / E_L \right\} \quad (4)$$

E_L - внутренняя энергия L -СЧ; N_L - число частиц в L -СЧ; $L=1,2,3 \dots R$ - количество СЧ; s - внешние МТ, взаимодействующие с k -й МТ L -СЧ; F_{ks}^L - сила, действующая на k -ю МТ СЧ со стороны s -ой МТ другой СЧ; v_k - скорость k -й МТ.

Из (4) следует, что замкнутая НС приходит в равновесие, когда вся энергия относительных движений СЧ перейдет в их внутреннюю энергию. Этот вывод находится в полном соответствии и со статистической природой установления равновесия [8].

Подчеркнем, что понятие Д-энтропии применимо и для малого количества частиц в системе. В этом случае она может быть отрицательной [11]. Но для большого количества МТ она переходит в энтропию Клаузиуса [6]. Это подтверждается численным моделированием [16]. Согласно модельным экспериментам Д-энтропия для количества МТ $N \leq 64$ может быть как положительной, так и отрицательной. При $N \geq 64$, изменение внутренней энергии могут быть только положительными. Это означает, что при $N \geq 64$ динамика системы необратима. Поэтому число $N \geq 64$ является критическим числом системы.

В замкнутой НС трансформация энергии относительных движений подсистем в их внутреннюю энергию определяется членами второго и более высокого порядка малости. В тоже время, обратная трансформация определяется членами удвоенного порядка малости относительно членов, определяющих прямую трансформацию. Это математическое обоснование природы установления равновесия.

О гипотезе голономности связей в классической механике

Классическая механика, построенная на основе законов Ньютона для МТ, обладает достаточно широкой универсальностью благодаря тому, что любое тело можно задать системой потенциально взаимодействующих МТ. Поэтому законы движения тел следуют из законов движения МТ.

Уравнение движения СЧ, как и уравнение Лагранжа, строится, отталкиваясь от уравнения движения Ньютона для МТ. Но уравнение движения СЧ строится на основе выражения энергии для системы МТ, а уравнение Лагранжа выводится на основе принципа Даламбера при условии выполнения гипотезы о голономности связей [9,10]. Симметрия уравнения движения СЧ принципиально отличается от симметрии уравнения Лагранжа. Причина такого отличия обусловлена тем, что гипотеза о голономности связей исключает возможность учета нелинейной трансформации энергии движения систем в их внутреннюю энергию [9,15]. Это подтверждается на примере прохождения осциллятора через потенциальный барьер [11]. Осциллятор имеет энергию движения и внутреннюю энергию. Эти два типа энергии задаются в независимых микро и макропеременных. Микропеременные описывают энергию колебания осциллятора, а макропеременные определяют движение его ЦМ. При прохождении осциллятора через потенциальный барьер в уравнении его движения появляются зависящие от макро и микропеременных нелинейные члены. В зависимости от фазы, они обуславливают либо увеличение, либо уменьшение кинетической энергии осциллятора во время прохождения области барьера. Если их вклад в изменение кинетической энергии МТ достаточно большой, так, что имеет место условие $T_i = m_i v_i^2 / 2 \geq U_b$, где T_i - кинетическая энергия i -й МТ, находящейся в области барьера, а U_b - высота потенциального барьера, то осциллятор пройдет барьер, даже если его начальная энергия движения ЦМ будет ниже высоты барьера.

Заключение

1. Так как все тела обладают структурой, их уравнения движения определяются дуализмом симметрии: симметрией тела и симметрией пространства. Дуализм симметрии приводит к нарушению симметрии времени при движении системы в неоднородном пространстве.
2. Движение тела определяется в пространстве независимых микро и макропеременных. Микропеременные задают внутреннюю энергию, а макропеременные определяют энергию движения системы. Т.е. динамика тел отображается в дуальном фазовом пространстве из независимых подпространств микро и макро переменных.
3. Разделение энергии на внутреннюю энергию и энергию движения приводит к возможности учета диссипации. Она связана с нелинейной трансформацией энергии движения тела в его внутреннюю энергию и возникает при движении тел в неоднородных полях сил. Это соответствует нарушению симметрии времени.
4. Отличие между необратимым уравнением движения тела и обратимым уравнением Лагранжа не является противоречивым, поскольку уравнение Лагранжа получено при условии выполнения гипотезы о голономности связей. А эта гипотеза при наличии нелинейной трансформации энергии движения во внутреннюю энергию, не выполняется.
5. В механике СЧ появляется понятие Д-энтропии, как отношение изменения внутренних энергий за счет энергии движения, к величине внутренней энергии. Для малого числа частиц Д-энтропия может быть как положительной, так и отрицательной.

Для СЧ Д-энтропия соответствует второму закону термодинамики и совпадает с энтропией Клаузиуса.

6. Формализм механики СЧ строится аналогично каноническому формализму классической механики, но только вместо уравнения движения Ньютона для МТ используется уравнение движения СЧ.

7. Формирование структур невозможно без диссипативных процессов. Но диссипация невозможна для бесструктурных тел. Отсюда следует бесконечная делимость вещества. То есть, то, что вещество представляет собой иерархию систем, является следствием законов Ньютона и иерархии фундаментальных сил природы.

Список литературы

- 1 Пригожин И. От существующего к возникающему/ М. Наука. 1980, - 342 с.
- 2 Гинзбург В.Л. О сверхпроводимости и сверхтекучести (что мне удалось сделать, а что не удалось), а также о «физическом минимуме» на начало XXI века // УФН, Нобелевская лекция. – 2004. – Т. 174, № 11. – С. 1240-1255.
- 3 Заславский Г.М. Стохастичность динамических систем. М. Наука, 1984, - 273 с.
- 4 Пуанкаре А. Современное состояние математической физики и ее перспективы. УФН. Т.113, вып. 4 1974. - с. 663-677.
- 5 Кадомцев Б.Б. Необратимость классическая и квантовая. УФН. 1995.165, №8. - с. 895-973.
- 6 Румер Ю.Б.,Рывкин М.Ш. Термодинамика,Стат.Физ. и Кинематика. М, Наука, 1977 - 532с.
- 7 Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М. 1976.583 с.
- 8 Гринштейн Дж. Зайонц А. Квантовый вызов. Современные исследования оснований квантовой механики. Долгопрудный. Интеллект, 2012, - 432 с.
- 9 Голдстейн Г. Классическая механика. М. 1975. -416с.
- 10 Lanczos C. The variation principles of mechanics. University of Toronto press. 1962.- 408 p.
- 11 Somsikov V.M., Denisena V.I. Peculiarities of passage of an oscillator through a potential barrier. Russian Physics Journal, September 2013, Volume 56, 4, - p. 463-472.
- 12 Somsikov V.M. The equilibration of an hard-disks system. IJBC.2004.V14. 11.- p. 4027-4033;
- 13 Somsikov V.M. Thermodynamics and classical mechanics, Journal of physics: Conference series. 23, 2005, - p.7-16.
- 14 Somsikov V.M. The restrictions of classical mechanics in the description of dynamics of nonequilibrium systems and the way to get rid of them. New Adv. in Phys. Vol. 2. No 2. September. 2008. - p. 125-140.
- 15 Сомсиков В.М.От механики Ньютона к физике эволюции. Монография. Алматы.2014. - 272с.
- 16 Somsikov V.M., Andreyev A.B., Mokhnatkin A.I. Relation between classical mechanics and physics of condensed medium International Journal of Physical Sciences. Vol. 10(3), p. 112-122.

ВЫДЕЛЕНИЕ ОБУЧАЮЩИХ ВЫБОРОК ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

С.А. Субботин¹

¹Запорожский национальный технический университет, subbotin@zntu.edu.ua

Введение

Для принятия решений в диагностике необходимо обладать диагностической моделью. На практике, как правило, из-за отсутствия или недостатка экспертных знаний построение диагностических моделей предполагает использование экспериментальных наблюдений за состоянием диагностируемого объекта, в процессе которого с помощью методов искусственного интеллекта осуществляется извлечение знаний из данных.

Искусственные нейронные сети [1] являются наиболее широко применяемым классом методов искусственного интеллекта при построении моделей по прецедентам. Методы обучения нейросетей [1, 2], как правило, характеризуются высокой итеративностью, а также значительными затратами времени на обучение нейросетей при большой размерности обучающих данных. В таких случаях применение нейросетевых технологий оказывается затруднительным. Это вызывает необходимость сокращения объема данных, используемых при обучении нейромоделей.

Целью данной работы являлась разработка метода, позволяющего сократить время обучения нейросетей при построении модели по большому объему прецедентов за счет разбиения исходной выборки большого объема на обучающую и тестовую выборки, обеспечивая минимизацию объема обучающей выборки и её топологическую репрезентативность относительно исходной выборки.

Пусть мы имеем исходную выборку $X = \langle x, y \rangle$ – набор S прецедентов о зависимости $y(x)$, $x = \{x^s\}$, $y = \{y^s\}$, $s = 1, 2, \dots, S$, характеризующихся набором N входных признаков $\{x_j\}$, $j = 1, 2, \dots, N$, где j – номер признака, и выходным признаком y . Каждый s -й прецедент представим как $\langle x^s, y^s \rangle$, $x^s = \{x_j^s\}$, где x_j^s – значение j -го входного, а y^s – значение выходного признака для s -го прецедента (экземпляра) выборки, $y^s \in \{1, 2, \dots, K\}$, где K – число классов, $K > 1$. Тогда задача синтеза нейросетевой модели зависимости $y(x)$ будет заключаться в определении такой структуры $F()$ и значений параметров w нейронной сети, при которых будет удовлетворен критерий качества модели $f(F(), w, \langle x, y \rangle) \rightarrow opt$, где opt – условное обозначение оптимума [1]. Обычно критерий качества обучения нейросетей определяют как:

$$\bar{E} = 0,5 \sum_{s=1}^S (y^s - F(w, x^s))^2 \rightarrow \min \text{ либо } E = \frac{100\%}{S} \sum_{s=1}^S |y^s - F(w, x^s)| \rightarrow \min.$$

В случае, когда исходная выборка имеет большую размерность, перед построением нейромодели необходимо решить задачу выделения обучающей выборки меньшего объема (дано: $\langle x, y \rangle$, надо: $\langle x', y' \rangle$, $x' \subset \{x^s\}$, $y' = \{y^s | x^s \in x'\}$, $S' = |y'|$, $S' < S$, $f(\langle x', y' \rangle, \langle x, y \rangle) \rightarrow opt$, где x' – набор входных признаков в обучающей выборке, y' –

выходной признак в обучающей выборке, S' – объем сформированной обучающей выборки).

Для оценки качества сформированной выборки возможно использовать широкий набор предложенных показателей [3–5]. Однако их расчет требует существенных затрат вычислительных ресурсов, поэтому для упрощения расчетов данную задачу можно рассматривать в конструктивистской постановке (дано: $\langle x, y \rangle$, надо: $\langle x', y' \rangle$, $x' \subseteq \{x^s\}$, $y' = \{y^s | x^s \in x'\}$, $S' = |y'|$, $S' < S$).

2. Методы извлечения выборок

Методы извлечения выборок [6–12] выделяют:

– вероятностные [6–8, 12] – предполагают случайное извлечение набора экземпляров из исходной выборки, причём каждый экземпляр исходной выборки имеет ненулевую вероятность, которая может быть точно определена, быть включенным в формируемую выборку. Достоинствами данных методов являются их относительная простота и возможность оценки ошибки выборки, а недостатками – то, что они не гарантируют, что сформированная выборка малого объёма будет хорошо отображать свойства исходной выборки, а также не будет избыточной и не будет искусственно упрощать задачу;

– детерминированные [6, 9–11] – предполагают извлечение экземпляров на основе предположений об их полезности (информативности), при этом некоторые экземпляры могут не быть выбраны или вероятность их выбора не может быть точно определена; они, как правило, основаны на кластерном анализе и стремятся обеспечить топологическое подобие исходной выборке. Недостатком данных методов является невозможность оценивания ошибки сформированных выборок. Достоинством детерминированных методов является то, что они могут выявить наиболее значимые для решения задачи построения диагностической модели прецеденты, которые также могут быть использованы для инициализации распознающих моделей и ускорения процесса обучения. Поэтому для достижения цели, поставленной в работе, в качестве базиса для формирования выборок предлагается выбрать детерминированные методы.

Однако следует отметить, что детерминированные методы, основанные на кластерном анализе, являются сложно применимыми для выборок большого объема, поскольку предполагают расчет расстояний между всеми экземплярами и манипуляции с матрицей расстояний. Следовательно, для повышения скорости обработки данных необходимо сократить объем вычислений за счет исключения необходимости расчета расстояний, что также позволит сократить требования к памяти ЭВМ.

Для того чтобы при ограниченном объеме оперативной памяти ЭВМ обеспечить обработку исходной выборки большой размерности предлагается осуществлять поэкземплярную обработку исходной выборки, загружая в память только один текущий экземпляр на каждой итерации. При этом заменять N -мерное представление экземпляра на одномерное посредством отображения его координат на обобщённую ось с использованием хэширующего преобразования, сохраняющего топологию исходного пространства признаков в синтезируемом одномерном пространстве.

Для экономии, как ресурсов памяти, так и вычислительных ресурсов предлагается вместо расчета расстояний между всеми экземплярами целесообразно оперировать только расстояниями между текущим рассматриваемым экземпляром и сформированными центрами кластеров, причем в одномерном пространстве хэш-кодов.

Для сокращения влияния человеческого фактора на результаты формирования выборки число эталонов предлагается не задавать, а определять автоматически, начиная с одного и наращивая по мере необходимости.

Обозначим: $c_*^q(k)$ – k -й хэш-эталон q -го класса, $C_*^{y^s}$ – набор хэш-эталонов k -го класса, k^q – указатель числа эталонов q -го класса, $Realmax$ – максимальное вещественное число, представимое в разрядной сетке ЭВМ. С учетом изложенных выше идей, предложенный метод может быть представлен следующим образом.

Этап инициализации. Установить: $s=1$, $C_*^{y^s} = \emptyset$, $k^q=0$, $q = 1, \dots, K$.

Этап хэширующего преобразования. Если $s < S$, тогда считать с внешнего носителя памяти очередной экземпляр выборки x^s в оперативную память. Определить на основе значений признаков экземпляра x^s его хэш x_*^s , используя одно из преобразований, предложенных в [13], в противном случае – перейти к этапу разбиения выборки.

Этап формирования набора хэш-эталонов (хэшей центров кластеров). Если в наборе хэш-эталонов для класса y^s нет ни одного эталона, т.е. $C_*^{y^s} = \emptyset$ и $k^{y^s} = 0$, тогда записать хэш текущего экземпляра как эталон в набор хэш-эталонов для класса y^s по формуле (1):

$$k^{y^s} = k^{y^s} + 1, c_*^{y^s}(k^{y^s}) = x_*^s, C_*^{y^s} = C_*^{y^s} \cup c_*^{y^s}(k^{y^s}), \quad (1)$$

записать номер текущего экземпляра s в набор номеров экземпляров класса y^s :

$Ind(y^s, k^{y^s}) = s$, после чего найти расстояние от нового хэш-эталона до существующих хэш-эталонов всех кластеров всех классов по формуле (2):

$$d(c_*^{y^s}(k^{y^s}), c_*^{y^s}(k)) = d(c_*^{y^s}(k), c_*^{y^s}(k^{y^s})) = |c_*^{y^s}(k^{y^s}) - c_*^{y^s}(k)|, k=1, \dots, |C_*^q|, q=1, \dots, K, \quad (2)$$

установить: $d(c_*^{y^s}(k^{y^s}), c_*^{y^s}(k^{y^s})) = Realmax$ и перейти к этапу обработки нового экземпляра.

В случае если набор хэш-эталонов непустой ($C_*^{y^s} \neq \emptyset$), тогда определить расстояния от хэша x_*^s рассматриваемого экземпляра x^s до хэш-эталонов всех кластеров данного класса:

$d(x_*^s, c_*^{y^s}(k)) = |x_*^s - c_*^{y^s}(k)|, k=1, \dots, |C_*^{y^s}|$, затем найти среди имеющихся в наборе хэш-эталонов кластеров класса y^s , номер ближайшего хэш-эталона к хэшу x_*^s рассматриваемого экземпляра x^s : $i^* = \arg \min_k \{d(x_*^s, c_*^{y^s}(k))\}, k=1, \dots, |C_*^{y^s}|$,

после чего если $d(x_*^s, c_*^{y^s}(i^*)) < d(c_*^{y^s}(i^*), c_*^q(p)), q=1, \dots, K, p=1, \dots, |C_*^q|$, тогда пропустить s -й экземпляр и перейти к этапу обработки нового экземпляра, в

противном случае – добавить новый хэш-эталон на основе s -го экземпляра по формуле (1), записать номер текущего экземпляра s в набор номеров экземпляров класса y^s :

$Ind(y^s, k^{y^s}) = s$, после чего найти расстояние от нового хэш-эталона до существующих хэш-эталонов всех кластеров всех классов по формуле (2), установить: $d(c_*^{y^s}(k^{y^s}), c_*^{y^s}(k^{y^s})) = Realmax$ и перейти к этапу обработки нового экземпляра.

Этап обработки нового экземпляра. Установить $s = s + 1$, перейти к этапу хэширующего преобразования.

Этап разбиения выборки. Все экземпляры, исходной выборки, на основе которых сформированы хэш-эталоны кластеров, занести в обучающую выборку $X_{об.}$, а остальные – в тестовую выборку $X_{тест.}$:

$$X_{об.} = \{ \langle x^s, y^s \rangle \mid Ind(y^s, k^{y^s}) = s, s = 1, \dots, S, k = 1, \dots, |C_*^{y^s}| \}, \quad X_{тест.} = X \setminus X_{об.}$$

Предложенный метод позволяет загружать в оперативную память полное признаковое описание только одного текущего экземпляра и не требует расчета матрицы расстояний между экземплярами, заменяя их расстояниями от рассматриваемого экземпляра до одномерных хэш-эталонов, что позволяет существенным образом снизить требования к ресурсам оперативной памяти и осуществлять обработку выборок очень большого размера.

3. Эксперименты и результаты

Для проверки работоспособности предложенного метода он был программно реализован. Разработанное математическое обеспечение использовалось для проведения экспериментов по решению задачи индивидуального прогнозирования состояния здоровья больного гипертонической болезнью по результатам экспериментально полученных наблюдений за состоянием здоровья пациента и погодными условиями.

Исходная выборка данных была получена в г. Запорожье (Украина) и содержала наблюдения, где каждый экземпляр представлял собой набор данных, характеризующих состояние пациента в определенную часть дня. В качестве временных характеристик использовались дата, код дня недели, время (час) наблюдения, код части дня (0 – утро, 1 – вечер). В качестве объективных клинико-лабораторных показателей использовались наблюдаемое артериальное давление (систолическое и диастолическое, мм. рт. ст.), пульс, сведения о приёме лекарств (Амло, Эгилек, Берлиприл). В качестве субъективных показателей использовались характеристики самочувствия (наличие экстрасистолы, наличие боли в голове, наличие боли в затылке, наличие пульсации, наличие боли в левом боку, наличие боли в области сердца, нехватка воздуха, наличие боли в животе, общая слабость). В качестве метеорологических характеристик [14] использовались (температура воздуха ($^{\circ}C$), атмосферное давление (мм. рт. ст.), тип облачности (0 – нет, 1 – малая, 2 – облачно, 3 – пасмурно), наличие грозы, направление ветра (0 – штиль, 1 – северный, 2 – северо-восточный, 3 – восточный, 4 – юго-восточный, 5 – южный, 6 – юго-западный, 7 – западный, 8 – северо-западный), скорость ветра (м/с), данные солнечной активности

(Mg II индекс [15]). Полученные наблюдения методом "окон" были использованы для получения выборки для решения задачи качественного прогнозирования состояния пациента на ближайшую вторую половину суток по данным предыдущих наблюдений: в качестве входных признаков использовались данные за предыдущие (утро и вечер) и текущие сутки (утро), а в качестве выхода – состояние пациента вечером в текущие сутки (0 – нормальное, 1 – ухудшение состояния, сопровождающееся повышением артериального давления).

Сформированная выборка использовалась для формирования обучающей и контрольной выборок на основе предложенного метода, а также ряда известных методов формирования выборок.

После чего для каждой из сформированных выборок строились прогнозирующие модели на основе трехслойных нейронных сетей прямого распространения сигнала. Каждая нейронная сеть содержала на входе $N = 3 \times 26 = 78$ признаков, число нейронов входного слоя – 10, число нейронов среднего слоя – 5, число нейронов выходного слоя – 1. Все нейроны использовали весовую (дискриминантную) функцию взвешенная сумма, а функцию активации – тангенциальный сигмоид.

Перед подачей на входы сети сигналы нормировались по формуле: $x_j^s = (x_j^s - x_j^{\min}) / (x_j^{\max} - x_j^{\min})$, где x_j^{\max} – максимальное значение j -го признака, x_j^{\min} – минимальное значение j -го признака.

Обучение нейросетей осуществлялось на основе метода Левенберга-Марквардта [1, 2].

Результаты проведенных экспериментов представлены в табл. 1. Здесь обозначены: t – время, затраченное на формирование выборки, $t_{об.}$ – время, затраченное на обучение, M – объем использованной оперативной памяти, $E_{об.}$ – ошибка обученной нейромодели при распознавании обучающей выборки, $E_{расп.}$ – ошибка обученной нейромодели при распознавании тестовой выборки.

Таблица

Результаты экспериментов

Метод формирования выборки	S'/S	t , сек.	M , Мб	$E_{об.}$, %	$t_{об.}$, сек.	$E_{расп.}$, %
Случайный отбор (без загрузки всей исходной выборки в память)	0,5	1,35	1,62	0	1768,6	2,01
	0,25	0,68	0,81	0	936,6	4,14
	0,1	0,27	0,38	0	373,2	7,42
	0,05	0,14	0,16	0	191,3	12,97
Кластер-анализ	0,26	690,37	101,34	0	920,4	0,41
Предложенный метод	0,21	93,62	0,79	0	912,5	0,49

Как видно из таблицы, предложенный метод позволяет существенно сократить объем обучающей выборки, обеспечивая при этом высокую точность как обучения, так и распознавания (качественного прогнозирования).

Разработанный метод не требует многократных проходов по выборке, ограничиваясь всего тремя просмотрами. Причем, если заранее известны граничные значения признаков, то число просмотров выборки можно сократить до двух. При этом метод хранит в оперативной памяти только один текущий экземпляр и набор сформированных одномерных эталонов, который минимизирован по объему. Это позволяет существенно снизить затраты как вычислительных ресурсов, так и ресурсов памяти.

Предложенный метод формирования выборок по сравнению с методом на основе случайного отбора [6] обеспечивает существенно большую точность прогнозирования, сокращая при этом время обучения. Однако предложенный метод требует больших затрат времени на формирование выборки, чем метод случайного отбора [6].

По сравнению с методом формирования выборок на основе кластер-анализа [9] предложенный метод обеспечивает сопоставимую точность прогнозирования, сокращая при этом время формирования выборки. Однако предложенный метод требует существенно меньших затрат времени и ресурсов памяти при формировании выборки, чем метод на основе кластер-анализа [9].

Также, в отличие от методов на основе случайного отбора и кластер-анализа, предложенный метод автоматически определяет размер формируемых обучающей и тестовой выборок, не требуя участия человека.

Недостатком предложенного метода является то, что он требует задания преобразования на обобщенную ось и зависит от его требований к вычислительным ресурсам.

Эффективность применения разработанного метода будет тем выше, чем больше признаков будет характеризовать исходный набор данных и чем больше будет экземпляров в исходной выборке данных. При небольшом объеме исходной выборки эффект от применения разработанного метода будет незначительным.

В работе решена задача формирования обучающих выборок для автоматизации построения нейросетевых моделей по прецедентам.

Научная новизна результатов, полученных в статье, состоит в том, что впервые предложен метод формирования выборок, который, автоматически выделяет из исходной выборки обучающую и тестовую выборки, не требуя загрузки всей исходной выборки в память ЭВМ, осуществляя поэкземплярную обработку исходной выборки с хэширующим преобразованием на одномерную ось, формирует эталоны кластеров на обобщенной оси, минимизируя их число, что позволяет повысить скорость формирования выборок, снизить требования к вычислительным ресурсам и памяти ЭВМ и обеспечить приемлемый уровень точности синтезируемых моделей.

Практическая значимость полученных результатов заключается в том, что разработано программное обеспечение, реализующее предложенный метод, на основе которого решена практическая задача построения модели принятия решений для индивидуального прогнозирования состояния пациента, больного гипертонией.

Перспективы дальнейших исследований состоят в том, чтобы определить эффективные по времени и затратам памяти хэширующие преобразования экземпляров

выборки, сохраняющие топологию классов в пространстве признаков, исследовать предложенный метод на более широком классе задач количественного и качественного прогнозирования и распознавания образов.

Список литературы

1. Субботін С. О. Нейронні мережі : навчальний посібник / С. О. Субботін, А. О. Олійник ; під заг. ред. проф. С. О. Субботіна. – Запоріжжя : ЗНТУ, 2014. – 132 с.
2. Computational intelligence: a methodological introduction / [R. Kruse, C. Borgelt, F. Klawonn et. al.]. – London: Springer-Verlag, 2013. – 488 p.
3. Олешко Д. Н. Построение качественной обучающей выборки для прогнозирующих нейросетевых моделей / Д. Н. Олешко, В. А. Крисилов, А. А. Блажко // Штучний інтелект. – 2004. – № 3. – С. 567–573.
4. Subbotin S. A. The training set quality measures for neural network learning / S. A. Subbotin // Optical memory and neural networks (information optics). – 2010. – Vol. 19. – № 2. – P. 126–139.
5. Субботин С. А. Критерии индивидуальной информативности и методы отбора экземпляров для построения диагностических и распознающих моделей / С.А. Субботин // Біоніка інтелекту. – 2010. – № 1. – С. 38–42.
6. Encyclopedia of survey research methods / ed. P. J. Lavrakas. – Thousand Oaks: Sage Publications, 2008. – Vol. 1–2. – 968 p.
7. Hansen M.H. Sample survey methods and theory / M. H. Hansen, W. N. Hartz, W. G. Madow. – Vol. 1 : Methods and applications. – New York: John Wiley & Sons, 1953. – 638 p.
8. Кокрен У. Методы выборочного исследования / У. Кокрен ; пер. с англ. И. М. Сониной ; под ред. А. Г. Волкова, Н. К. Дружинина. – М.: Статистика, 1976. – 440 с.
9. Multivariate analysis, design of experiments, and survey sampling / ed. S. Ghosh. – New York: Marcel Dekker Inc., 1999. – 698 p.
10. Smith G. A deterministic approach to partitioning neural network training data for the classification problem : dissertation ... doctor of philosophy in business / Smith Gregory. – Blacksburg: Virginia Polytechnic Institute & State University, 2006. – 110 p.
11. Bernard H. R. Social research methods: qualitative and quantitative approaches / H. R. Bernard. – Thousand Oaks: Sage Publications, 2006. – 784 p.
12. Chaudhuri A. Survey sampling theory and methods / A. Chaudhuri, H. Stenger. – New York: Chapman & Hall, 2005. – 416 p.
13. Subbotin S. A. Methods and characteristics of locality-preserving transformations in the problems of computational intelligence / S. A. Subbotin // Радіоелектроніка, інформатика, управління. – 2014. – № 1. – С. 120–128.
14. Дневник погоды [Электронный ресурс]. – Москва: ООО «НПЦ «Мэп Мейкер», 2014. – Режим доступа: <http://www.gismeteo.ru/diary/5093>
15. Weber M. Observations of Solar Activity (Mg II Index) by GOME, SCIAMACHY, and GOME-2 [Electronic resource]. – Bremen: University of Bremen, 2014. – Access mode: <http://www.iup.uni-bremen.de/gome/gomemgii.html>

ДИНАМИЧЕСКАЯ МАСШТАБНАЯ ИНВАРИАНТНОСТЬ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф.Катанова,
Институт естественных наук и математики, каф. теоретической физики и
информационных технологий в образовании, udodov@khsu.ru

1. Введение

Критические показатели (индексы) и гипотеза подобия (скейлинга, масштабной инвариантности) лежат в основе современной теории критических явлений и фазовых переходов (ФП) [1-14]. Статическая гипотеза подобия была сформулирована около 50 лет назад [1-3], несколько позже появилась гипотеза динамической масштабной инвариантности [1, 4]. Оказывается, возможно получить некоторые соотношения между динамическими и статическими (термодинамическими) критическими индексами путем распространения на кинетические явления гипотезы масштабной инвариантности, сформулированной сначала для термодинамических свойств [4]. В классических работах считалось, что критическая температура положительна. Однако в последние десятилетия значительное внимание привлекали так называемые квантовые ФП [5, 6, 8, 9], для которых температура ФП $T_C = 0$. Например, это возможно для переходов в сверхпроводящее состояние [7]. Ранее было показано, что равенство $T_C = 0$ приводит к новым следствиям из гипотезы статического скейлинга [12]. Данная работа посвящена исследованию вопроса о том, как изменяются следствия гипотезы динамической масштабной инвариантности при равенстве нулю температуры ФП или при критической температуре, стремящейся к нулю.

II. Гипотеза динамического скейлинга. Однокомпонентный параметр порядка

Сначала разберем простейший случай однокомпонентного параметра порядка [4, 1969 г.]. Для времени релаксации параметра порядка τ вводятся два кинетических индекса y и z

$$\tau \propto (-\varepsilon)^{-y}, \quad \varepsilon \rightarrow -0, \quad k = 0, \quad y > 0, \quad (1)$$

где $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число, λ – длина волны,

$$\varepsilon = T - T_C, \quad (2)$$

$$\tau \propto k^{-z}, \quad \varepsilon = 0, \quad z > 0. \quad (3)$$

Предполагается, что гипотеза динамического скейлинга (динамической масштабной инвариантности) имеет вид [4]

$$\tau = |\varepsilon|^{-y} f(k\xi), \quad \varepsilon \rightarrow 0, \quad (4)$$

где ξ – корреляционная длина. Здесь $f(x) = f(k\xi)$ – функция одного аргумента, причем

$$f(0) = \text{const} > 0. \quad (5)$$

Заметим, что равенство (1) из (4) получается автоматически, а для выполнения (3) относительно функции f должны быть сделаны определенные предположения [4].

Пусть при $x \rightarrow +\infty$

$$f(x) \rightarrow x^B, \quad x \rightarrow +\infty. \quad (6)$$

B - пока неизвестная константа. В пределе ($\nu > 0$)

$$T \rightarrow T_C - 0, \quad (-\varepsilon) \rightarrow 0, \quad \xi \propto (-\varepsilon)^{-\nu} \rightarrow +\infty, \quad (7)$$

следовательно, при $k > 0$

$$k\xi = x \rightarrow +\infty. \quad (8)$$

Подставляя (6) и (8) в (4) найдем ($-\varepsilon = |\varepsilon|$)

$$\tau = |\varepsilon|^{-y} (k\xi)^B = |\varepsilon|^{-y} k^B \xi^B \propto |\varepsilon|^{-y} k^B (|\varepsilon|^{-\nu})^B = k^B |\varepsilon|^{-y-\nu B}, \quad (9)$$

однако, при $\varepsilon \rightarrow 0$ должно выполняться выражение (3), откуда следует

$$k^B |\varepsilon|^{-y-\nu B} \propto k^{-z}, \quad (10)$$

что означает

$$B = -z. \quad (11)$$

Кроме того, при $\varepsilon \rightarrow 0$ выражение $|\varepsilon|^{-y-\nu B} = |\varepsilon|^{-y+\nu z}$ должно оставаться конечным, что возможно только, если

$$-y + \nu z = 0,$$

или

$$y = \nu z, \quad (12)$$

это равенство считается прямым следствием гипотезы динамического скейлинга [4].

Если критическая температура равна нулю $T_C = 0$, то

$$\varepsilon = T - T_C = T \quad (13)$$

и в формуле (12) ничего не должно измениться. Теперь найдем индексы в рамках теории Ландау-Халатникова [4].

Индекс ν в теории фазовых переходов (ФП) Ландау для ФП 2-го рода равен [1, 3]

$$\nu = \frac{1}{2}. \quad (14)$$

Уравнение Ландау-Халатникова для слабо неравновесных состояний имеет вид [4]

$$\frac{d\eta}{dt} = -\gamma_1 \frac{\partial F}{\partial \eta}. \quad (15)$$

γ_1 - некоторая положительная константа, F - свободная энергия, t - время, η - однокомпонентный параметр порядка. Решение ищем в форме

$$\eta = \eta_0(T) + \varphi(t, r), \quad (16)$$

где t - время, η_0 - равновесный параметр порядка для однородной системы. В линейном приближении теории ФП Ландау (15) переписется в виде

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\gamma_1 (A_2 \varphi - h - \nabla^2 \varphi), \quad (17)$$

где h - напряженность внешнего поля, ∇^2 - оператор Лапласа, для упорядоченной фазы

$$A_2 = -2A, \quad (18)$$

где A - коэффициент разложения свободной энергии в теории Ландау ФП 2-го рода для однородной системы [3]

$$F = (A/2)\eta^2 + \frac{b}{4}\eta^4 - h\eta, \quad (19)$$

$$A = (T - T_C) = \varepsilon. \quad (20)$$

Переходим к Фурье-компонентам [4]

$$\varphi(t, r) = \sum_k \varphi_k(t) e^{ikr}. \quad (21)$$

Вводим для краткости обозначение Фурье-компоненты

$$\varphi_k(t) = u. \quad (22)$$

Для нулевого поля подставим (21) в (17), сокращая на экспоненту и учитывая, что

$$\nabla^2 \varphi = \sum u e^{ikr} (ik)^2, \quad (23)$$

найдем

$$\frac{du}{dt} = -A_3 u, \quad (24)$$

где

$$A_3 = A_2 + k^2. \quad (25)$$

Решение (24) имеет вид

$$u = \varphi_k = u_0 e^{-A_3 t}, \quad (26)$$

где A_3 имеет смысл обратного времени релаксации

$$A_3 = (\tau_k)^{-1}. \quad (27)$$

Если волновое число k равно нулю (система однородна) то (см. (1))

$$\tau_0 = (A_2)^{-1} \propto \varepsilon^{-1} \propto \varepsilon^{-y}, \quad (28)$$

следовательно, в обычной теории Ландау-Халатникова ФП 2-го рода кинетический индекс y равен [4]

$$y = 1. \quad (29)$$

Если критическая температура равна нулю $T_C = 0$, то этот результат не изменится.

Пусть теперь $T = T_C$, $\varepsilon = 0$, $k > 0$, тогда из (25) и (27) получим (см. (3))

$$\tau_k = k^{-2} \propto k^{-z}. \quad (30)$$

Таким образом, индекс z для однокомпонентного параметра порядка в теории Ландау-Халатникова равен [4]

$$z = 2, \quad (31)$$

это остается верным и при нулевой критической температуре. Подставляя (14), (29) и (31) в (12), найдем, что гипотеза динамического скейлинга выполняется.

Новые результаты могут получиться для нетрадиционных вариантов теории ФП Ландау. Основное свойство коэффициента A в разложении (19) заключается в следующем: A меняет знак в точке ФП при изменении температуры [3], однако этого можно добиться при выборе (в отличие от (20) [3])

$$A = \varepsilon^3, \quad \varepsilon = T - T_C. \quad (32)$$

Как можно показать, тогда будет наблюдаться ФП 6-го рода по П. Эренфесту (если $T_C > 0$). Оказывается, формулы (18) и (25) остаются справедливыми, но значение индекса y изменится

$$y = 3 .$$

Этот результат верен как при $T_c > 0$, так и при $T_c = 0$. Экспериментально подобное значение индекса, видимо, не наблюдалось.

III. Новые следствия гипотезы динамического подобию при нулевой критической температуре для многокомпонентного параметра порядка

Рассмотрим теперь системы, в которых параметр порядка имеет несколько компонент η_i , но эффективный гамильтониан зависит (в однородной системе) только от суммы их квадратов [4]. Другими словами, если рассматривать η_i как вектор, то эффективный гамильтониан не зависит от его направления [4]. Примером является чисто обменный ферромагнетик, энергия которого не зависит от направления вектора намагниченности, который является параметром порядка [4]. Другой пример – жидкий гелий-4, у которого роль параметра порядка играет волновая функция конденсата [4]

$$\eta = (n_0)^{1/2} e^{i\phi} . \quad (33)$$

Эта комплексная функция представляет собой совокупность двух независимых величин (вещественная и мнимая части), но энергия однородной жидкости зависит только от квадрата модуля [4]

$$|\eta|^2 = n_0 ,$$

где n_0 – плотность конденсата. Специфические свойства «вырожденных» систем обусловлены существованием в их колебательном спектре мягкой моды, связанной с колебаниями направления вектора параметра порядка; частота этих колебаний обращается в нуль в точке ФП [4].

Рассмотрим жидкий гелий-4 [4]. В этом случае мягкой модой является второй звук, который впервые предсказал (теоретически) Л.Д. Ландау. Вблизи точки перехода он представляет собой совместные колебания сверхтекучей скорости и энтропии. Колебания этой скорости означают колебания фазы конденсатной волновой функции [4]. Закон дисперсии этих колебаний [4]

$$\omega = u_2 k , \quad (34)$$

$$u_2 = \left(\frac{TS^2 \rho_s}{C_p \rho_n} \right)^{1/2} , \quad (35)$$

u_2 – скорость второго звука, S – энтропия, C_p – теплоемкость единицы объема жидкости, ρ_s (ρ_n) – плотность сверхпроводящей (нормальной) компоненты. При приближении к точке перехода $T \rightarrow T_c$ плотность ρ_s стремится к нулю по закону [4, 15] (теоретически получено Джозефсоном в 1966 г., согласуется с экспериментом)

$$\rho_s \propto (T_\lambda - T)^{\frac{2-\alpha}{3}} , \quad (36)$$

где α – критический индекс теплоемкости [1-4]:

$$C_p \propto |T_\lambda - T|^{-\alpha} . \quad (36)$$

Закон стремления к нулю скорости u_2 зависит от знака индекса α . Если $\alpha > 0$, так что

$$C_p \rightarrow +\infty , \quad (37)$$

то [4]

$$u_2 \propto (T_\lambda - T)^{(1+\alpha)/3}, \quad \alpha > 0. \quad (38)$$

Если же $\alpha < 0$, то теплоемкость стремится к конечному пределу (критический индекс определяет лишь особую часть теплоемкости близко к точке ФП [4]), тогда из формулы (35) получим

$$u_2 \propto (T_\lambda - T)^{(2-\alpha)/6}, \quad \alpha < 0, \quad T_C = T_\lambda > 0. \quad (39)$$

Далее ограничимся случаем $\alpha < 0$, что соответствует жидкому гелию-4, для которого [4, 15]

$$\alpha \approx -(0,025 \pm 0,005) < 0. \quad (40)$$

Согласно более новым данным [16] $\alpha \approx -0,012 < 0$. Этот эксперимент выполнен в космосе в невесомости, поскольку гравитационное поле сдвигает критическую температуру и искажает измеренное значение индекса.

Применим теперь гипотезу динамической масштабной инвариантности, согласно которой вблизи точки ФП закон дисперсии должен иметь форму [4]

$$\omega = k^z f(k\xi), \quad (41)$$

что можно переписать в виде

$$\omega = k^z f(k\varepsilon^{-\nu}) = k^z f\left[(k\varepsilon^{-\nu})^{\frac{1}{\nu}}\right] = k^z f_1\left(\frac{\varepsilon}{k^{\nu-1}}\right). \quad (42)$$

Это верно при

$$k\xi = \frac{2\pi\xi}{\lambda} \ll 1, \quad (43)$$

длина волны должна быть велика по сравнению с корреляционной длиной ξ , иначе теряют применимость макроскопические уравнения [4].

Рассмотрим область упорядоченной фазы $T < T_C$, $\varepsilon = T - T_C < 0$. Требование, чтобы при $k\xi \ll 1$ закон дисперсии был линеен по k означает, что если $k \rightarrow 0$, тогда аргумент функции f_1 стремится к минус бесконечности и при этом функция f_1 является степенной

$$\omega = k^z f_1\left(\frac{\varepsilon}{k^{\nu-1}}\right) \propto k^z \left(\frac{\varepsilon}{k^{\nu-1}}\right)^{B_1} \propto k^1. \quad (44)$$

Отсюда можно показать, что

$$B_1 = \nu(z - 1). \quad (45)$$

Подставляя (45) в (44) и используя (39) получим [4]

$$\nu(z - 1) = (2 - \alpha)/6, \quad T_C > 0. \quad (46)$$

Известна формула, следующая из гипотезы статического скейлинга [1-3]

$$2 - \alpha = d\nu, \quad (47)$$

где d – размерность пространства. Из последних двух формул следует [4]

$$(z - 1) = d/6 \quad (48)$$

или

$$z = 1 + d/6, \quad (49)$$

что для трехмерного пространства дает [4]

$$z = \frac{3}{2}. \quad (50)$$

Известно, что в смеси жидких He^3 и He^4 критическая температура может стремиться к нулю [15]. В этом случае выражение (47), следовательно, и (46) меняют свой вид [12]

$$vd = 1 + S_I - \alpha = r, \quad (51)$$

где S_I – функция имеет форму [12 - 14]

$$S_I = \left(\frac{T_C}{T} \right)^n, \quad T > T_C = T_\lambda. \quad (52)$$

Здесь n – положительная константа, которая может быть найдена из сопоставления с экспериментом или из микроскопической теории, или путем компьютерного моделирования. r в формуле (51) – род ФП в смысле Бакстера [2, 12]. Подставляя (51) в (46) приходим к новому результату

$$\nu(z-1) = \frac{r}{6} = (1 + S_I - \alpha)/6, \quad T_C = T_\lambda \geq 0, \quad (53)$$

который верен при любом значении критической температуры и описывает переход $T_\lambda \rightarrow 0$. Новизна ситуации заключается в том, что критический индекс z зависит от температуры и T_λ . Если $T_\lambda = 0, T > 0$, что возможно для смеси жидких He^3 и He^4 , то S_I -функция равна нулю и формула (53) примет вид

$$\nu(z-1) = \frac{r}{6} = (1 - \alpha)/6, \quad T_C = T_\lambda = 0, \quad (T > 0). \quad (54)$$

Формула (53) является интерполяционной. Полученный результат, разумеется, нуждается в осмыслении и экспериментальной проверке.

IV. Заключение

Показано, что большинство следствий гипотезы динамической масштабной инвариантности (динамического скейлинга) справедливы как при положительной критической температуре T_C , так и при $T_C \rightarrow 0$. Если критическая температура равна нулю, то соотношения динамического скейлинга, содержащие критический индекс теплоемкости, меняют свой вид (нарушаются). Однако это не говорит о нарушении гипотезы скейлинга. Предложена новая интерполяционная формула для индекса z , справедливая для фазовых переходов (ФП) с многокомпонентным параметром порядка η_i (когда свободная энергия зависит только от модуля $|\eta_i|$) при изменении температуры как при $T_C > 0$, так и при $T_C = 0$. Эта интерполяционная формула, в принципе, верна для любой размерности пространства, однако реальный объект для проверки – смесь жидких He^3 и He^4 при температурах, близких к абсолютному нулю.

Кроме того, проверка полученных результатов, видимо, возможна для многих квантовых ФП [6] при $T_C \rightarrow 0$, например, для сверхпроводников или для ферромагнетика $Ce_{2.15}Pd_{1.95}In_{0.9}$ [8], а также путем численных расчетов на моделях. Выяснение подробной связи новой интерполяционной формулы для кинетического индекса z и квантовых фазовых переходов – дело будущих исследований.

Список литературы

1. Stanley H.E. Introduction to phase transitions and critical phenomena / H.E.Stanley. — Clarendon press, Oxford, 1971. — 308 p.
2. Baxter R.J. Exactly Solved Models In Statistical Mechanics / R.J.Baxter. — Academic press, London, New York, Sydney, Tokyo, Toronto, 1982. — 502 p.
3. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1. 4-е изд. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1995. — 608 с.
4. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика. / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М., Наука, 1979. — 528 с.
5. Rechester A.B. Contribution to the theory of second-order phase transitions at low temperatures / A.B.Rechester // Soviet physics JETP. — 1971. — Т.33. — № 2. С.782 – 796.
6. Sachdev S. Quantum phase transitions / S.Sachdev. — Yale University, New Haven, USA, 1999.
7. Abrikosov A.A. Fundamentals of the Theory of Metals / A.A.Abrikosov. — Amsterdam, North-Holland, 1988.
8. Sereni J.G. Searching for a Quantum Critical Point in Rh doped ferromagnetic $Ce_{2.15}Pd_{1.95}In_{0.9}$ / J.G.Sereni, M.Giovannini, M.Gomez Berisso, A.Saccone // Journal of Physics: Conference Series. — 2012. — Т.391. — С.012062.
9. Cano A. Low-temperature structural phase transitions: phonon-like and relaxation order-parameter dynamics / A.Cano, A.P.Levanyuk // Phys. rev. B. — 2004. — Т.70. — С.064104.
10. Udodov V. Heat capacity and new classification of phase transitions of fractional order: Ising model/V.Udodov// Bulletin of the APS. March Meeting. — 2013. — V.58. — № 1. — C17. C.00003.
11. Удодов В.Н. Характер фазового перехода в одномерной традиционной модели Изинга и переходы дробного рода / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 12 Всерос. семинара. Ред.В.В.Слабко. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2009. — С.175 – 180.
12. Удодов В.Н. Гипотеза подобия при низких температурах. / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 17 Всерос. семинара. Ред.М.Г.Садовского. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2014.
13. Удодов В.Н. Новая классификация фазовых переходов и кроссовер при низких температурах с изменением рода перехода на единицу / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 15 Всерос. семинара. Ред.В.В.Слабко. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2012. — С. 204 – 209.
14. Udodov V. Violating of the Essam-Fisher and Rushbrooke Relationships at Low Temperatures/ V.Udodov// World Journal of Condensed Matter Physics. — 2015. — Т.5. — №2. — С. 55-59. <http://dx.doi.org/10.4236/wjcmp.2015.52008>
15. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
16. Погорелов А.А. О критических индексах для λ -перехода в жидком гелии / А.А.Погорелов, И.М.Суслов // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — Т.86. — Вып.1. — С. 41-47.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНОМЕРНОЙ СМЕШАННОЙ ЗАДАЧИ ПЕРКОЛЯЦИИ

М.Г.Усатова, В.Н.Удодов, Р.А.Козлитин

Хакасский государственный университет,
Институт естественных наук и математики,
каф. теоретической физики и информационных технологий в образовании

Низкоразмерные системы активно изучаются теоретиками и экспериментаторами на протяжении длительного времени [1-9]. В последнее время представляют значительный интерес одномерные перколяционные сети, состоящие из наноразмерных объектов, такие как нанотрубки, нанопроволки и одномерные магнетики [3-7]. Компьютерное моделирование перколяции в одномерных системах представляет интерес для изучения свойств наносистем и для конструирования новых материалов.

Классические задачи теории перколяции - задача узлов и задача связей. Для одномерных перколяционных систем задачей узлов занимались Е.О. Шпигальская и Д.В. Спириин [5, 6], задачей связей – М.А. Буреева [7, 8]. Смешанная задача является обобщением задачи узлов и связей, протекание в данной задаче может быть как по узлам, так и по связям [3]. Обобщение позволяет как узлам, так и связям быть занятыми случайным образом с заданной вероятностью.

В данной работе рассматривалась одномерная цепочка с оборванными концами при произвольном радиусе протекания, на которой моделировалась смешанная задача. Протекания определялось по целым узлам и связям. Узлы и связи бывают целыми и блокированными, целые узлы, связанные целыми связями, образуют кластер. Когда такой кластер соединяет противоположные стороны системы, то говорят, что в системе возникает перколяция (протекание). Протекания в исходной цепочке не будет, если не будут связаны между собой один из первых R и хотя бы один из последних R узлов. В этом случае число R назовем радиусом протекания. Например, если протекание может быть только по первым или вторым соседним узлам, то радиус протекания R равен двум.

Математически данную модель удобно представлять с помощью неориентированного графа и матрицы смежности [3,8]. Матрицей смежности вершин [3,8] неориентированного графа называется квадратная матрица порядка n (n – число вершин графа), элементы которой задаются следующим образом:

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i\text{-тая и } j\text{-тая вершины смежны,} \\ 0, & \text{если } i\text{-тая и } j\text{-тая вершины не смежны.} \end{cases}$$

В одномерной задаче теории перколяции смежность i -ой и j -ой вершин означает существование целой связи между i -м и j -м узлами цепочки.

$$\begin{array}{c} 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \\ \left(\begin{array}{ccccccc} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right) \end{array}$$

Рис. 1. Матрица смежности графа, соответствующего цепочке из семи узлов при радиусе протекания $R = 2$, у которой все связи целые.

Для того, чтобы заполнить матрицу смежности, был создан вспомогательный массив V размером $N \times N$, элементами которого являются случайные числа, равномерно распределенные от нуля до единицы. Элементы матрицы смежности $q[i, j]$ получаются по следующему правилу. Фиксируем вероятность найти целую связь p_b . Возьмем элемент матрицы с координатами i и j , при этом $i \neq j$. Если $V(i, j) \leq p_b$, то $q[i, j]=1$. В противном случае $q[i, j]=0$. В первом случае узлы цепочки с координатами i и j соединены целой связью, во втором – заблокированы.

Для маркировки связей и узлов использовался оригинальный алгоритм, основанный на алгоритме Хошена-Копельмана [3]. На языке математики маркировка кластеров соответствует разбиению графа на подграфы. Данный алгоритм предназначен для определения наличия протекания в цепочке и состоит в следующем.

1. Вводим метку k и присваиваем ей начальное значение $k = 2$, фиксируя R и N ;
2. Находим элемент матрицы смежности $q[i, j]=1$, при условии, что $b[i]$ и $b[j]$ узлы целые и присваиваем ему значение k ;
3. В i -й и j -й строках, а также в i -м и j -м столбцах всем единичным элементам матрицы (массива) $q[i, j]=1$ присваиваем текущее значение k , при условии что узлы i и j целые. Если $q[i, j]=0$, то элемент матрицы остается неизменным;
4. Просматриваем все элементы матрицы (массива) и для каждого элемента $q[i, j]=k$ выполняем шаг 3;
5. Увеличиваем значение метки k на единицу и возвращаемся к шагу 2, пока в матрице не останется единичных элементов;
6. Присваиваем узлам цепочки метку связи $b[i]=q[i, i+rr]$, при условии, что целые узлы соединены целой связью, где целое число rr меняется от 1 до R .

Вероятность заполнения узлов менялась от 0 с шагом 0.001 до тех пор, пока не возникнет протекание. Количество шагов Монте-Карло бралось в расчете 10000 шагов на один узел. В модели фиксировалась вероятность возникновения целой связи и определялся порог протекания по узлам по формуле:

$$x_c = \frac{n_1}{n}, \quad (1)$$

где n_1 – количество целых узлов на конечной решетке (количество элементов массива, равных 1); n – количество всех узлов в данной задаче (количество всех элементов массива).

Были построены критические кривые для конечных систем для N от 10 до 100 и для различных радиусов протекания от $R = 2$ до $R = 5$ (рис.2). С увеличением радиуса протекания критическая кривая порога протекания опускается вниз. В данной модели, доля целых связей характеризует степень беспорядка и при ее изменении меняются значения порога протекания.

В конечной системе порог протекания меняется от образца к образцу, то есть является величиной случайной. Однако, значения, которые принимает эта случайная величина, с подавляющей вероятностью попадают в некоторую область с шириной $\delta(N)$, которая называется критической областью и соответствует среднему квадратичному отклонению порога протекания от своего среднего значения. В работе Эфроса [4] показано, что для системы конечного размера среднее квадратичное

уклонение порога протекания и критический индекс корреляционной длины ν связаны соотношением:

$$\delta(N) \sim N^{-\frac{1}{d\nu}}, \quad (2)$$

где d – размерность пространства (в нашем случае $d=1$).

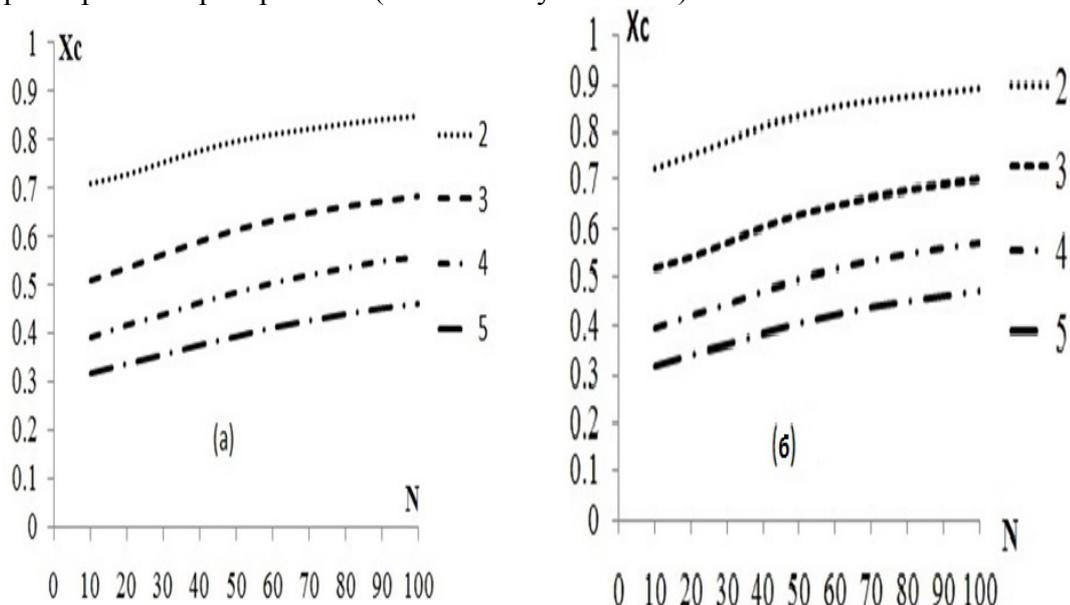


Рис. 2. Критическая кривая порога протекания, для разных вероятностей образования связи и радиусов протекания, в зависимости от размеров системы: а) $tsv = 1$; б) $tsv = 0.9$; 1) $R = 2$; 2) $R = 3$; 3) $R = 4$; 4) $R = 5$. Погрешность вычислений 3%–12%.

Перепишем (2) в следующем виде

$$\delta(N) = \frac{C}{N^\nu}, \quad (3)$$

где C - численный коэффициент. Предполагая, что $C > 0$ прологарифмируем (3)

$$\ln \delta(N) = \ln C - \frac{1}{\nu} \ln N. \quad (4)$$

Обозначим $y = \ln \delta(N)$, $B = \ln C$, $k = -\frac{1}{\nu}$, $x = \ln N$. Запишем равенство (4) в виде $y = kx + B$, таким образом, получили линейную зависимость. С помощью метода наименьших квадратов решаем задачу оценки коэффициентов линейной регрессии и находим значения ν и C .

Таким образом, рассмотрена одномерная модель смешанной задачи перколяции, построены критические кривые для конечных систем для N от 10 до 100 и для различных радиусов протекания от $R=2$ до $R=5$. В результате компьютерного моделирования зависимости среднеквадратичного отклонения порога протекания от размеров системы был определен критический индекс корреляционной длины ν (рис.3). С увеличением радиуса протекания критический индекс ν растет, принимая значения в диапазоне от 2 до 6, что существенно больше, чем для обычных двумерных и трехмерных задач. В теории фазовых переходов Ландау (теория среднего поля) $\nu = 0,5$ [9], в других моделях для $d = 2$ индекс $\nu = 1,33$, для $d = 3$ индекс $\nu = 0,83$ [3].

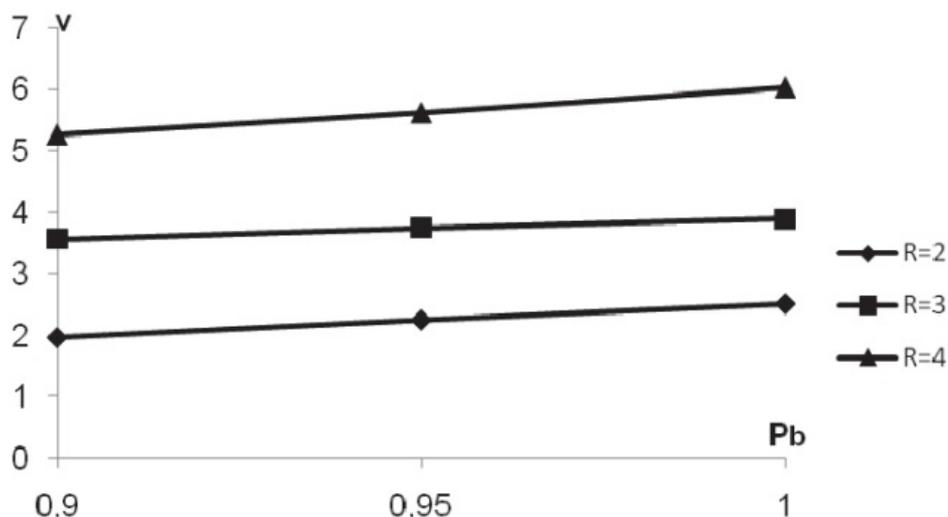


Рис. 3. Зависимость критического индекса корреляционной длины ν от доли целых связей цепочки p_b и радиуса протекания R . Погрешность вычислений 3%–12%.

Список литературы

1. Hicks Jeremy. Resistivity in percolation networks of one-dimensional elements with a length distribution/ Jeremy Hicks, Behnam Ashkan, Ant Ural. // Phys.RevE.79.012102, P.1–4.
2. Козлитин Р.А. Критический индекс теплоемкости в смешанной задаче для одномерных систем/ Р.А.Козлитин, В.Н.Удодов, М.Г.Усатова // Моделирование неравновесных систем - 2012: Материалы IV пятнадцатого всероссийского семинара (5-7 октября 2012 года). — Красноярск: ИВМ СО РАН, 2012. — С. 79–82.
3. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы / Ю.Ю.Тарасевич. — М.: Едиториал УРСС, 2002. — 112 с.
4. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка / А.Л.Эфрос. — М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. — 167 с.
5. Шпигальская Е.О. Статические критические индексы для одномерной перколяции / Е.О.Шпигальская, Д.В.Спирин // V Всесибирский конгресс женщин-математиков (в день рождения С.В. Ковалевской) (Материалы конференции). — Красноярск: РИО СФУ. — 2008. — С. 374 – 378.
6. Спирин Д.В. Немагнитные примеси и перколяционные эффекты в одномерном изинговском магнетике / Д.В.Спирин, В.Н.Удодов, А.И.Потекаев // Известия вузов. Физика. — 2009. — № 9/2. — С. 145–150.
7. Буреева М.А. Задача связей в одномерной теории перколяции для конечных систем/ М.А.Буреева, Т.В.Волкова, В.Н.Удодов, А.И.Потекаев // Известия вузов. Физика. — 2010. — № 2. — С. 33–39.
8. Буреева М.А. Моделирование задачи связей одномерной теории перколяции на неориентированном графе. / М.А.Буреева, В.Н.Удодов // Математическое моделирование. — 2012, том 24, номер 11. — С. 72–82.
9. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика. Ч. I. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. — 616 с.

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ВЕРОЯТНОСТИ ПОДДЕРЖКИ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Р.А. Чиженкова

Институт биофизики клетки РАН, *chizhenkova@mail.ru*

Несомненно, что развитие фундаментальной науки является гарантом не только процветания существующей цивилизации, но и существования всей ноосферы [4, 6]. В наших работах уже предпринимался анализ состояния науки в современном мире, в том числе и в России [9-14]. В середине XX века ведущие страны мира, чтобы упрочить свое лидирующее положение, стали рассматривать поддержку науки как непосредственную государственную задачу [5, 7].

В России государственная поддержка фундаментальной науки началась в 1992 г. с организации Российского Фонда Фундаментальных исследований (РФФИ). Становление этого Фонда представлено в ряде статей [1, 2]. К 20-летию юбилею РФФИ был выпущен специальный выпуск журнала "Вестник РФФИ" [3], в котором рассмотрены основные моменты истории создания Фонда, его задачи и некоторые успехи его деятельности. Однако до сих пор так не был проведен подробный анализ научных направлений, поддержанных Фондом, что послужило причиной появления наших библиометрических работ [13].

РФФИ оказывает реальную поддержку научным коллективам и отдельным ученым в проведении исследований. При этом данный вид поддержки сочетается с финансовой помощью при публикации получаемых результатов. Настоящие исследования посвящены библиометрическому анализу вероятности поддержки РФФИ издательских научных проектов в течение 20-летнего периода его деятельности (1993-2012 гг.).

Представленные здесь сведения основываются на данных, опубликованных в Информационных бюллетенях (ИБ) РФФИ, выходящих раз в год и освещающих итоги прошедшего конкурса.

Для каждого года составлялась обширная таблица с учетом суммарных данных, видов конкурсов, а также чисел поданных заявок и выделенных грантов. При этом вычислялась процентная вероятность поддержки проектов. Затем, во-первых, проводили объединение результатов по анализируемым рубрикам за весь временной период. Во-вторых, по всему полученному материалу изучали динамику величин по годам. В-третьих, вычисляли статистическую значимость различия величин, принадлежавших к разным рубрикам. Для статистического анализа использовали сравнение двух выборочных долей вариант. Кроме того, был применен корреляционный анализ.

Общее число поддержанных РФФИ проектов за 20-летний период его деятельности согласно данным, представленным в ИБ, было весьма внушительно - 74241. Издательские проекты самостоятельно рассматривались в РФФИ с 1995 г. В 1993 и 1994 гг. они представляли единую рубрику в ИБ совместно с инициативными проектами. На основании официальных сведений, приводимых в ИБ РФФИ, мы попытались выделить поддержанные издательские проекты из общего перечня грантов и в эти годы.

Число поддержанных издательских проектов за указанный временной интервал деятельности РФФИ равнялось - 4605. Поддержанных издательских проектов, по сравнению с инициативными, было относительно невелико, но их финансирование

осуществлялось регулярно, как и последних. Динамика чисел поддержанных издательских проектов в течение рассматриваемого временного периода приведена в табл.1. Это динамика нами в некоторой мере была уже описана [12], но данный материал здесь желателен для построения общей картины поддержки представляемых проектов.

Таблица 1

Динамика чисел поддержанных издательских проектов в течение 20 лет

Годы	Число проектов	% от суммы за 20 лет	Сравнение со средним (<i>U</i>)
1993	16	0.35	<u>15.98</u>
1994	68	1.48	<u>8.93</u>
1995	304	6.60	<u>3.31</u>
1996	273	5.93	1.97
1997	246	5.34	0.77
1998	323	7.01	<u>4.08</u>
1999	179	3.89	<u>2.59</u>
2000	224	4.86	0.34
2001	240	5.21	0.43
2002	265	5.75	1.63
2003	232	5.04	0.10
2004	214	4.65	0.82
2005	232	5.04	0.10
2006	237	5.15	0.34
2007	255	5.54	1.15
2008	296	6.43	<u>2.98</u>
2009	393	8.53	<u>6.81</u>
2010	255	5.54	1.15
2011	199	4.32	1.54
2012	154	3.34	<u>3.98</u>
Сумма	4605	100.00	
Среднее	230.25	5.00	

Примечания: достоверные различия при $p < 0,01$ подчеркнуты.

Как следует из табл. 1, среднее число выделенных грантов для издательских проектов на один год равнялось 230.25. Диапазон колебаний составлял от 16 в 1993 г до 393 в 2009 г. грантов, т.е. достигал 24.56 раз. Наблюдалась сложная волнообразная динамика чисел поддержанных проектов. Наибольшие числа проектов были поддержаны в 1995, 1998, 2008 и в 2009 г.; наименьшие - в 1993, 1994, 1999 и 2012 г..

Следующим этапом библиометрического анализа являлось рассмотрение количественных показателей подаваемых заявок по издательским проектам. К сожалению,

числа поданных заявок по издательским проектам в ИБ приведены без учета 1993-1997 гг., а также 1999 и 2001 гг., т.е. в течение 13 лет, на которые приходилось 3279 соответствующих грантов. Общее число поданных заявок по издательским проектам за указанный период составляло 7068. Динамика чисел подаваемых в год заявок по издательским проектам продемонстрирована в табл. 2.

Таблица 2

Динамика чисел поданных заявок по издательским проектам в течение рассматриваемого периода

Годы	Число проектов	% от суммы за 20 лет	Сравнение со средним (<i>U</i>)
1993			
1994			
1995			
1996			
1997			
1998	848	12.00	<u>8.62</u>
1999			
2000	452	6.40	<u>2.97</u>
2001			
2002	484	6.85	1.90
2003	524	7.41	0.65
2004	435	6.15	<u>3.63</u>
2005	463	6.55	<u>2.62</u>
2006	491	6.95	1.66
2007	456	6.45	<u>2.85</u>
2008	526	7.44	0.54
2009	711	10.06	<u>4.93</u>
2010	681	9.63	<u>4.10</u>
2011	594	8.40	1.55
2012	403	5.70	<u>4.76</u>
Сумма	7068	100	
Среднее	543.69	7.69	

Примечания: как у табл. 1..

Табл. 2 показывает, что среднее число поданных заявок в год равнялось 543.69. Наблюдалась существенная неравномерность распределения чисел поданных заявок по годам от 403 в 2012 г. до 848 в 1998 г., т.е. в 1.95 раз. Выраженный пик числа поданных заявок в 1998 г. соответствовал 12.00 % от их общего числа за 13-летний период. Второй пик приходился на 2009-2010 гг. равнялся 9.63-10.06% от общего числа. Наименьшее число заявок было в 2012 г., что представляло 5.70 % от общего числа.

Полученные сведения относительно количественных показателей выделенных грантов и подаваемых заявок по издательским научным проектам дали возможность

оценить вероятность их поддержки. Установлено, что в течение рассматриваемого временного периода было поддержано 46.39% поданных заявок по издательским проектам. Динамика их конкретных величин приведена в табл. 3.

Таблица 3
Динамика процентных чисел поддержанных издательских научных проектов в течение рассматриваемого периода

Годы	Число заявок	Число грантов	% поддержанны х	Сравнение со средним (<i>U</i>)
1993				
1994				
1995				
1996				
1997				
1998	848	323	38.09	<u>4.65</u>
1999				
2000	452	224	49.56	1.30
2001				
2002	484	265	54.75	<u>3.55</u>
2003	524	232	44.28	0.95
2004	435	214	49.20	1.13
2005	463	232	50.11	1.54
2006	491	237	48.27	0.79
2007	456	255	55.92	<u>3.93</u>
2008	526	296	56.27	<u>4.36</u>
2009	711	393	55.27	<u>4.50</u>
2010	681	255	37.45	<u>4.54</u>
2011	594	199	33.50	<u>6.20</u>
2012	403	154	38.21	<u>3.24</u>
Сумма	7068	3279	46.39	
Среднее	543.69	252.23		

Примечания: как у табл. 1.

Из табл. 3 видно, что годовые процентные числа поддержанных заявок колебались от 33.50% в 2011 г. до 56.27% в 2008 г. Их разность была 22,77%, что весьма велико, поскольку составляло половину от общей величины (46.39%). При этом наименее благоприятными годами для выделения грантов следует признать самые последние годы (2010-2012 гг.), а также первый год с представленными в ИБ сведениями относительно поданных заявок (1998 г.). Наиболее благоприятными являлись 2002 г. и 2007-2009 гг.

Дополнительно был проеден корреляционный анализ соотношения чисел подаваемых заявок и выделяемых грантов. При этом была выявлена их положительная корреляционная взаимосвязь ($r = 0.69$; $p = 0.01$), что свидетельствует о значительной

роли общего состояния внутренней возможности поддержки научных проектов РФФИ.

Таким образом, создание РФФИ явилось своевременным мероприятием при организации правительственных и общественных структур нашего молодого государства. Деятельность РФФИ необходима для поддержки развития отечественной фундаментальной науки, хотя пока и недостаточна. В 2012 г. на Общем собрании Российской академии наук В.В. Путин дал высокую оценку работе Фонда и сказал о намерении правительства увеличить его ресурсное наполнение в ближайшие годы [8].

Список литературы

1. Алфимов М.В. Российский фонд фундаментальных исследований: десять лет служения российской науке // Вестник РФФИ. - 2002. - № 1(27). - С. 5-39
2. Алфимов М.В., Минин В.А., Либкинд А.Н. Страна наука - РФФИ // Вестник РФФИ. - 2000. - № 2(20). - С. 5-29.
3. Вестник РФФИ 20 лет: Специальный выпуск. - 2012.
4. Ефремов Ю.Н. Зачем нужна наука миру и России // Вестник РФФИ. - 2000. - № 1(19). - С. 40-43.
5. Коннов В.И. Самоуправление на "передовой": становление национального научного фонда США // Вестник РФФИ. - 2007. - №4(54). - С. 10-15.
6. Лебедев С.А. Праксиология науки // Вопросы философии. - 2012. - №4. - С. 52-63.
7. Обама Б. Выступление в Национальной академии наук 27-ого апреля 2009 г. // В защиту науки. Бюл. № 6. Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2009. - С. 185-198.
8. Путин В.В. Выступление на Общем собрании Российской академии наук 22 мая 2012 // В защиту науки. Бюл. № 11. Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2012. - С. 7-14..
9. Чиженкова Р.А. Наука в современном мире // Актуальные проблемы социальной философии / ред. Э.В. Гирусов. - М., 1998. - С. 111-112.
10. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ нейрофизиологических аспектов действия неионизирующей радиации / Р.А. Чиженкова, А.А. Сафрошкина, Н.А. Слащева, В.Ю. Чернухин // Успехи современной биологии. - 2004. - Т. 124. - № 5. - С. 472-479.
11. Чиженкова Р.А. Динамика нейрофизиологических исследований действия неионизирующей радиации во второй половине XX-ого века. М.: Издат. дом Акад. Естествознания, 2012. - 88 с.
12. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ научных проектов по разным видам конкурсов, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований // В: Моделирование неравновесных систем: Материалы XVII Всероссийского семинара / Ред. М.Г. Садовский. - Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. - 2014. - С. 174-178.
13. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований. Библиометрический анализ поддержки научных проектов. Germany: Palmarium Academic Publishing, 2015. - 88 с.
14. Chizhenkova R.A. Bibliometrical review of neurophysiological investigation of action of non-ionized radiation in second half of the XXth century // Biophysics. - 2005. - Supplement. - № 1(50). - P. 163-172.

**ВОЗДЕЙСТВИЕ СТОЯЧЕЙ ВОЛНЫ
НА НЕРАВНОВЕСНУЮ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКУЮ СИСТЕМУ
С ИСТОЧНИКОМ ЭНЕРГИИ**

О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль

Гомельский государственный технический университет, *shablovsky-on@yandex.ru*

Введение. Теплофизические аспекты проблемы формирования периодических структур при взрывной кристаллизации аморфных пленок [1,2] рассмотрены в работах [3, 4]. Установлено, что в среде, обладающей локально-неравновесными свойствами, пространственно-периодические структуры (полосы, ячейки, решетки и др.) образуются под влиянием конкуренции между температурными областями с тепловыделением и теплоотдачей. Примером такой конкуренции является выделение кристаллизационного тепла на фазовой границе и теплоотдача в подложку, на которую напылена аморфная пленка. Важным параметром процесса служит температура $T = T_0$ при которой тепловыделение и теплоотдача уравниваются, т.е. взрывная кристаллизация прекращается. В данной работе рассматриваются локально-неравновесные свойства динамического внешнего воздействия на уже сформировавшиеся тепловые структуры. Изучаемая теплофизическая система содержит следующие элементы: 1) среда, обладающая локально-неравновесными тепловыми свойствами; 2) знакопеременный объемный источник энергии $q_v = q_v^1(T - T_0)$, $q_v^1 > 0$, $q_v^1, T_0 - \text{const}$; 3) внешний по отношению к среде источник энергии W , действующий на линии $x = 0$ и возбуждающий стоячую волну. Рассматриваем интересный в практическом отношении случай, когда вне линии $x = 0$ двумерное температурное поле среды (материала) представляет собой в исходном состоянии стационарную пространственно-периодическую структуру. Цели исследования: 1) проанализировать локально-неравновесные процессы воздействия стоячей волны на материал; 2) изучить морфологические свойства поля изотерм.

Релаксационная модель Максвелла переноса тепла [5] в плоском двумерном случае имеет вид:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = q_v \quad (1)$$

$$q_x + \gamma \frac{\partial q_x}{\partial t} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y + \gamma \frac{\partial q_y}{\partial t} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y}, \quad \lambda, c, \gamma - \text{const.} \quad (2)$$

Производство энтропии подсчитываем по формулам [5, 6]:

$$\sigma = \sigma_i + \sigma_e, \quad (3)$$

$$\sigma_i = \frac{q_x^2 + q_y^2}{\lambda T^2}, \quad \sigma_e = \frac{q_v}{\Theta}, \quad \frac{1}{\Theta} = \frac{1}{T} \left(1 + \frac{\gamma(q_x^2 + q_y^2)}{\lambda c T^2} \right).$$

где σ_i - производство энтропии за счет внутренних необратимых процессов, σ_e - производство энтропии за счет энергообмена с внешней средой; $\mathbf{q}(q_x, q_y)$ - вектор

удельного теплового потока. Остальные обозначения такие: T - температура; Θ - неравновесная температура; c - объемная теплоемкость; λ - коэффициент теплопроводности; x, y - прямоугольные декартовы координаты; t - время; q_v - мощность внутренних источников тепла.

Систему уравнений теплопереноса (1), (2) преобразуем к одному гиперболическому уравнению

$$c \left(\frac{\partial \tau}{\partial t} + \gamma \frac{\partial^2 \tau}{\partial t^2} \right) = \lambda \left(\frac{\partial^2 \tau}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tau}{\partial y^2} \right) + q_v + \gamma \frac{\partial q_v}{\partial t}, \quad (4)$$

где $\tau = T - T_0$ есть отклонение температуры от ее равновесного значения T_0 .

Возбуждение стоячей волны в пространственно-периодическом тепловом поле на основе параболического уравнения теплопроводности рассмотрено в [7]. Для локально-неравновесной среды в работе [8] изучены тепловые режимы, при которых существуют стоячие волны температуры и теплового потока.

Для размерных и безразмерных уравнений применяем одинаковую форму записи, полагая

$$\lambda \rightarrow \bar{\lambda} \lambda', c \rightarrow \bar{c} c', \gamma \rightarrow \gamma', q_v \rightarrow \bar{q}_v q'_v, T \rightarrow T', \sigma \rightarrow \sigma', \\ q_x \rightarrow q'_x, q_y \rightarrow q'_y, t \rightarrow t', x \rightarrow x', y \rightarrow y',$$

где штрихом отмечены безразмерные величины. Безразмерные комплексы

$$\bar{\lambda} = \frac{\lambda_b T_b}{x_b q_b}, \quad \bar{c} = \frac{c_b T_b x_b}{t_b q_b}, \quad \bar{q}_v = (q_v)_b \frac{x_b}{q_b}$$

составлены из масштабов величин (они отмечены индексом b), применяемых для обезразмеривания: $c = c' c_b$, $\lambda = \lambda' \lambda_b$, $\gamma = \gamma' t_b$, $T = T' T_b$, $\sigma = \sigma' \sigma_b$, $q_x = q'_x q_b$, $q_y = q'_y q_b$,

$$q_v = q'_v (q_v)_b, \quad x = x' x_b, \quad y = y' y_b, \quad t = t' t_b, \quad q_b = \lambda_b T_b / x_b, \quad (q_v)_b = \lambda_b T_b / x_b^2, \quad \sigma_b = q_b^2 / (\lambda_b T_b^2).$$

Все вычисления выполнены в безразмерных переменных при $\bar{\lambda} = 1$, $\bar{c} = 1$, $\bar{q}_v = 1$, $\lambda' = 1$, $c' = 1$. Далее штрих над безразмерными величинами не пишем.

Стоячая волна в неравновесном тепловом поле. Решение уравнения (4) представим в виде

$$\tau(x, y, t) = \tau_s(x, y) + \tau_{nst}(x, y, t), \quad (5)$$

где $\tau_s(x, y)$ - стационарная часть решения, относящаяся к установившейся во времени ($t \rightarrow \infty$) температуре; $\tau_{nst}(x, y, t)$ - нестационарное решение, учитывающее время релаксации теплового потока и определяющее волновые свойства температурного поля. В качестве примера стационарной периодической структуры берем семейство прямоугольников:

$$\tau_s(x, y) = D \cos(h_1 x) \sin(h_2 y), \quad (6) \\ h_1^2 + h_2^2 = q_v^1 / \lambda; \quad h_1, h_2, D - \text{const.}$$

Эти прямоугольники образованы линиями $h_1 x = 2\pi n_0 \pm (\pi/2)$, $h_2 y + \beta = \pi n_0$, где $n_0 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - любое целое число. Очевидно, что в частном случае $h_1 = 0$ решение (6) дает зависимость

$$\tau_s(x, y) = D \sin(h_2 y), \quad (7)$$

и нейтральная изотерма $T = T_0$ образует семейство полос $h_2 y = \pi n_0$. Полосчатую структуру (7) рассматриваем как отдельный вариант, потому что он важен в практическом отношении и заключает в себе многие существенные свойства изучаемого процесса.

Нестационарная составляющая температуры представляется выражением

$$\tau_{nst}(x, y, t) = A(x, t) \sin(hy), \quad h \equiv \text{const}, \quad (8)$$

где $A(x, t)$ должна удовлетворять уравнению

$$(c - \gamma q_v^1) \frac{\partial A}{\partial t} + c\gamma \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \lambda \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + A(q_v^1 - \lambda h^2)$$

Строим решение

$$A(x, t) = A_1 \exp(-rx) [\sin(\omega t - kx) + B_1 \cos(\omega t - kx)], \quad (9)$$

где A_1, B_1 - произвольные постоянные, и находим

$$\omega^2 = \frac{1}{c\gamma} [\lambda(k^2 - r^2) + \lambda h^2 - q_v^1], \quad k = \frac{\omega(c - \gamma q_v^1)}{2\lambda r}. \quad (10)$$

Не нарушая качественных свойств решения (9), примем далее, что $q_v^1 = \lambda h^2$. Таким образом, частота колебаний по времени равна

$$\omega = 2\lambda r^2 / [(c - \gamma q_v^1)^2 - 4\lambda r^2 c\gamma]^{1/2},$$

причем параметры процесса должны удовлетворять неравенству:

$$(c - \gamma q_v^1)^2 > 4\lambda r^2 c\gamma. \quad (11)$$

Физическая интерпретация решения (5), (8) состоит в следующем. Температурное поле располагается в двух областях. Область-1 это правая полуплоскость $x \geq 0, r > 0$. Область-2 это левая полуплоскость $x \leq 0, r < 0$. Линию $x = 0$ принимаем за разрыв теплового поля, на котором действует внешний для данной среды источник энергии W . На таком разрыве должно быть выполнено динамическое условие совместности [6], являющееся следствием интегрального закона сохранения энергии:

$$W = q_x^{(1)} - q_x^{(2)},$$

где W – поверхностная плотность распределения на разрыве притока энергии; q_x – нормальная к разрыву составляющие вектора теплового потока. По мере удаления от сильного разрыва получаем $x \rightarrow \pm\infty, \tau_{nst} \rightarrow 0$.

В классе решений (5), (8) компоненты вектора теплового потока $\mathbf{q}(q_x, q_y)$ такие

$$q_x = -\lambda \frac{\partial \tau_s}{\partial x} + q_x^{nst}, \quad q_y = -\lambda \frac{\partial \tau_s}{\partial y} + q_y^{nst},$$

где q_x^{nst}, q_y^{nst} соответствуют нестационарной части решения (5) и определяются законом Максвелла (2). Отсюда получаем

$$q_x^{nst} \Big|_{x=0, t \rightarrow \infty} = \frac{\lambda A_1 \sin(hy)}{(\omega^2 \gamma^2 + 1)} [D_1 \cos(\omega t) + D_2 \sin(\omega t)] \quad (12)$$

$$D_1 = (k - \gamma r \omega)^{-1} [(k - \gamma r \omega)^2 + (r + \gamma k \omega)^2], \quad D_2 = r + \gamma k \omega - B_1 (k - \gamma r \omega);$$

$$q_y^{nst} \Big|_{x=0, t \rightarrow \infty} = -\lambda A_1 A_2 h \frac{\cos(hy)}{(\omega^2 \gamma^2 + 1)} \sin(\omega t + \delta), \quad (13)$$

$$A_2 = (C_1^2 + C_2^2)^{1/2}, \quad \tan \delta = C_1 / C_2, \quad C_1 = B_1 - \gamma \omega, \quad C_2 = 1 + \gamma \omega B_1.$$

Эти выражения характеризуют установившиеся во времени ($t \rightarrow \infty, \exp(-t/\gamma) \rightarrow 0$) колебания теплового потока при $x = 0$. Далее для более выразительной записи волновой части решения возьмем частное значение константы B_1 , а именно: $B_1 = (r + \gamma k \omega) / (k - \gamma r \omega)$. Тогда формулы (12), (13) представляют две встречные волны:

$$q_x^{nst} \Big|_{x=0} = \frac{\lambda A_1 [(k - \gamma r \omega)^2 + (r + \gamma k \omega)^2]}{2(\omega^2 \gamma^2 + 1)(k - \gamma r \omega)} [\sin(hy + \omega t) + \sin(hy - \omega t)] \quad (14)$$

$$q_y^{nst} \Big|_{x=0} = \frac{\lambda A_1 A_2 h}{2(\omega^2 \gamma^2 + 1)} [\sin(hy - \omega t - \delta) - \sin(hy + \omega t + \delta)] \quad (15)$$

Видим, что существует сдвиг δ фазы колебаний продольного q_y^{nst} и поперечного q_x^{nst} к разрыву тепловых потоков: $\tan \delta = r / k$.

На основе оценки (11) запишем для параметра затухания r следующее выражение: $r^2 = \varepsilon^2 (c - \gamma q_v^1)^2 / (4\lambda c \gamma)$, где ε^2 - свободный параметр из интервала (0,1). Отсюда следует, что

$$\omega^2 = (4\lambda^2 r^4) / [(1 - \varepsilon^2)(c - \gamma q_v^1)^2]. \quad (16)$$

Скорость распространения тепловых возмущений есть $w = (\lambda / c \gamma)^{1/2}$. Квадраты тепловых чисел Маха, соответствующих осям x и y , равны $M_x = v_x^2 / w^2$, $M_y = v_y^2 / w^2$, где $v_x^2 = \omega^2 / k^2$, $v_y^2 = \omega^2 / h^2$. Отсюда находим, применяя (10) и (16): $M_x^2 = \varepsilon^2$, $0 < \varepsilon^2 < 1$. Значит, вдоль оси x , ортогональной сильному разрыву, процесс «дозвуковой». На разрыве $x = 0$ для стоячей волны (14), (15) получаем

$$M_y^2 = [\varepsilon^4 (1 - \bar{\gamma})^2] / [4\bar{\gamma} (1 - \varepsilon^2)], \quad (17)$$

где $\bar{\gamma} = \gamma q_v^1 / c$ - безразмерный параметр неравновесности системы «среда – источник энергии». На основе формулы (16) безразмерную частоту возбуждающих колебаний можно записать так:

$$\bar{\omega} = \omega \gamma, \quad \bar{\omega}^2 = [\varepsilon^4 (1 - \bar{\gamma})^2] / [4(1 - \varepsilon^2)],$$

и тогда находим, что

$$M_y^2 = \bar{\omega}^2 / \bar{\gamma}. \quad (18)$$

Волновой процесс вдоль линии сильного разрыва «сверхзвуковой», если $M_y^2 > 1$:

$$[\varepsilon^4/(1-\varepsilon^2)] > [4\bar{\gamma}/(1-\bar{\gamma})^2]$$

Такая ситуация наблюдается, в частности, если $\varepsilon^2 = 1 - 0, \bar{\gamma} = +0$. Это означает, что вдоль оси x процесс околосвуковой: число M_x^2 находится в левой окрестности единицы, а неравновесность выражена слабо. Волновой процесс вдоль сильного разрыва дозвуковой, если $0 < M_y^2 < 1$. Это выполнено, например, если $\varepsilon^2 = +0, \bar{\gamma} = 1 \pm 0$, т.е. имеем отчетливо выраженную неравновесность системы, а число M_x^2 находится в правой окрестности нуля.

Таким образом, в данном двумерном процессе величина M_y^2 , см. (17) и (18), мультипликативным образом зависит от двух факторов: 1) от характера возбуждения колебаний вдоль оси x - количественной характеристикой здесь служит дробь $\varepsilon^4/(1-\varepsilon^2)$; 2) от степени неравновесности системы, т.е. от величины $(1-\bar{\gamma})^2/\bar{\gamma}$.

Морфологические свойства поля изотерм. Типичные изображения поля изотерм для «прямоугольников» вида (6) представлены на рис. 1. Данные изотермы построены в правой полуплоскости $x \geq 0$ при $t = \pi/(2\omega)$, что соответствует одной четверти периода колебаний по времени. Важным параметром задачи является безразмерная частота внешнего теплового воздействия $\Omega = \omega c/q_0^1$; ясно, что $\Omega\bar{\gamma} = \bar{\omega}$. Основным элементом полученных периодических структур является нейтральная изотерма $\tau = 0$. Обращает на себя внимание «шахматный» порядок расположения изотерм. Динамические закономерности воздействия стоячей волны на «прямоугольники» существенным образом зависят от количественного соотношения между частотой Ω и параметром неравновесности $\bar{\gamma}$, см. рис. 1.

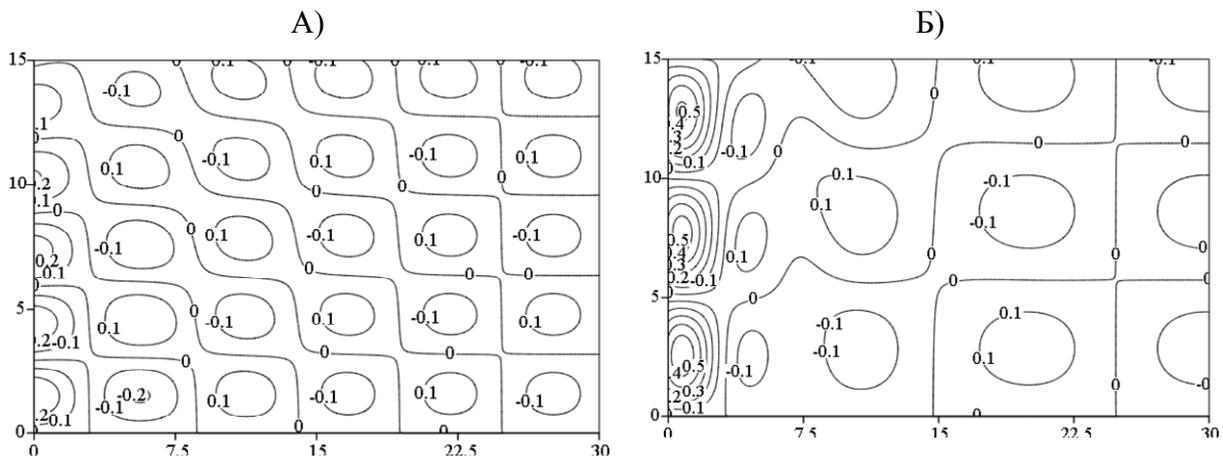


Рис. 1. Типичное промежуточное состояние $[t = \pi/(2\omega)]$ линий изотерм

при воздействии стоячей волны на стационарное тепловое поле

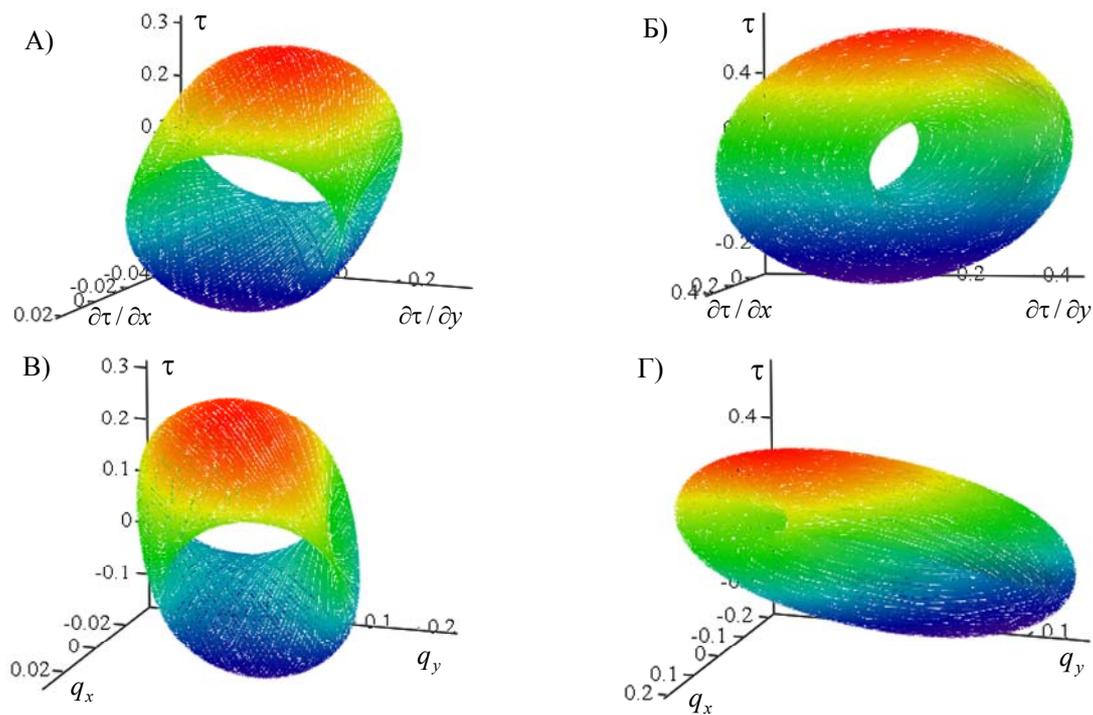


Рис. 2. Фазовый портрет теплофизической системы

На рисунках 1 и 2 левый столбец относятся к низкочастотному ($0 < \Omega < 1$) воздействию, правый столбец – к высокочастотному ($\Omega > 1$). Представленные графики получены при следующих значениях входных параметров: левый столбец - $r = 0,1425$; $\bar{\omega} = 0,4335$; $k = -0,4564$; $\Omega = 0,3335$; $\varepsilon = 0,95$; $\bar{\gamma} = 1,3$; правый столбец - $r = 0,285$; $\bar{\omega} = 0,8671$; $k = 0,9127$; $\Omega = 2,1677$; $\varepsilon = 0,95$; $\bar{\gamma} = 0,4$. Фазовые портреты изученных теплофизических систем построены двумя способами: 1) в пространстве «температура – градиенты температуры» $(\partial\tau/\partial x, \partial\tau/\partial y, \tau)_{x=0, y=y_j}$; 2) в пространстве «температура – тепловой поток» $(q_x, q_y, \tau)_{x=0, y=y_j}$. Индексом j отмечены значения функций при $x = 0$ на волне $y_j = (\omega t)/h$, $t \geq 0$. Расчеты показали, что для этих пространств фазовые портреты обладают одинаковыми качественными свойствами. Фазовая траектория – незамкнутая линия, располагающаяся на тороидальной поверхности, если отношение частот h_1/h_2 [см. (6)] есть число иррациональное или трансцендентное.

Заключение. Изучены локально-неравновесные процессы волнового воздействия на материал, стационарное тепловое состояние которого определяется периодическими структурами типа «прямоугольники» (6) и «полосы» (7). Обнаружен мультипликативный характер взаимного влияния двух факторов: характера возбуждения колебаний и степени неравновесности системы «среда – источник энергии». Построен трехмерный фазовый портрет этой теплофизической системы.

Список литературы

1. Александров Л.Н. Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок / Л.Н. Александров. — Новосибирск: Наука, 1985. — 224 с.
2. Grigoropoulos C. Explosive crystallization in the presence of melting / C. Grigoropoulos [et. al.] // *Physical Review B*. — 2006. — Vol. 73. P. 184125-1 – 184125-15.
3. Шабловский О.Н. Формирование периодических тепловых структур при взрывной кристаллизации аморфных пленок / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // *Тепловые процессы в технике*. — 2009. — № 5. С. 178 – 182.
4. Шабловский О. Н. Неравновесные тепловые структуры в средах с источниками энергии / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль Гомель: ГГТУ им. П.О. Сухого, — 2013. 208 с.
5. Жоу, Д., Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х. Касас – Баскес, Дж. Лебон. — Москва – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. — 528 с.
6. Седов Л.И. Механика сплошной среды / Л.И. Седов. — М.: Наука, 1973. — Т.1. 536 с.
7. Шабловский О.Н. Возбуждение стоячей волны в пространственно-периодическом тепловом поле / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // *Тепловые процессы в технике*. — 2015. — № 5. С. 222 – 226.
8. Шабловский О.Н. Стоячие волны и вынужденные тепловые колебания в локально-неравновесной среде с источником энергии / О.Н. Шабловский // *Вестник Московского государственного технологического университета «Станкин»*. — 2012. — № 3 (22). С. 115 – 119.

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Барцев Сергей Игоревич	660036 Красноярск, Академгородок, Институт Биофизики СО РАН E-mail: bartsev@yandex.ru	83
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	3
Бодунов Николай Михайлович	420111, г. Казань, ул.К.Маркса, д.10, КГТУ-КАИ, кафедра ПЛА, (843) 236-52-42, 231-03-25, 231-03-16 E-mail: bodunov_nm@mail.ru	8, 13
Бреховских Павел Валентинович	420111, г. Казань, ул.К.Маркса, д.10, КГТУ-КАИ, кафедра ПЛА, (843) 236-52-42, 231-03-25, 231-03-16 E-mail: pav-89@mail.ru	13
Воллошин Михаил Анатольевич	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: voloshin.ma@gmail.com	3
Головенкин Сергей Евгеньевич	660022, г.Красноярск, ул.П.Железняка, 1, Красноярская Государственная медицинская академия E-mail: gse2008@mail.ru	18
Дружинин Георгий Владимирович	420111, г. Казань, ул.К.Маркса, д.10, КГТУ-КАИ, кафедра ПЛА, (843) 236-52-42, 231-03-25, 231-03-16 E-mail: druzhinin.1944@mail.ru	8
Дударева Жанна Владимировна	655017, Абакан, пр. Ленина, 90, ХГУ им. Н.Ф. Катанова, E-mail: dudareva82@gmail.com	27
Жуков Леонид Александрович	Сибирский Государственный Технологический Университет E-mail: sibstu2006@rambler.ru	54, 63, 69
Зароднюк Максим Сергеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: max@isem.sei.irk.ru	33
Каганович Борис Моисеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: thermo@isem.sei.irk.ru	33
Каменщиков Леонид Петрович	Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок E-mail: lpk@icm.krasn.ru	38
Краснов Игорь Васильевич	Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок E-mail: krasn@icm.krasn.ru	38

Кроль Дмитрий Григорьевич	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, т. +375-(232)-47-91-62, ф. +375-(232)-47-91-65 E-mail: shablovsky-on@yandex.ru	133
Козлитин Роман Анатольевич	655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163 E-mail: kran80@mail.ru	124
Курако Михаил Александрович	660074, г. Красноярск, Сибирский федеральный университет, Институт космических и информационных технологий, т. 8-923-285-67-12 E-mail: mkurako@gmail.com	43
МасимкановаЖазира Ауезбекқызы	050010, Республика Казахстан, г. Алматы, ул. Пушкина, 125, Институт информационных и вычислительных технологий E-mail: masimkanovazh@gmail.com	89
Матюшин Геннадий Васильевич	660022, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, д. 1, Красноярский государственный медицинский университет имени профессора В.Ф.Войно-Ясенецкого E-mail: medinfo@krasgmu.ru	18
Мацулев Александр Николаевич	660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 24, Институт химии и химической технологии СО РАН E-mail: matsulev@icct.ru	48
Михалюк Алексей Николаевич	690950, Суханова 8, Дальневосточный федеральный университет E-mail: mih-alexey@yandex.ru	78
Овечкин О.Г.	Военный госпиталь в/ч 52630, г.Чита	18
Пелипецкая Елена Юрьевна	660022, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, д. 1, Красноярский государственный медицинский университет имени профессора В.Ф.Войно-Ясенецкого E-mail: medinfo@krasgmu.ru	18
Петровская Т.В.	660022, Россия, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, 3г, НИИ медицинских проблем Севера СО РАМН	54, 63, 69
Полянский Дмитрий Александрович	690950, Суханова 8, Дальневосточный федеральный университет E-mail: polyanskiy.da@dvfu.ru	78
Почкутов Алексей Александрович	660036 Красноярск,Академгородок, Институт Биофизики СО РАН E-mail: a-a-po@mail.ru	83
Разумов Владимир Ильич	Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Россия, 644077, Омск, проспект Мира 55-а E-mail: razumov@omsu.ru	94

Решетникова Н.В.	Краевое УПК, г. Красноярск	54
Россиев Дмитрий Анатольевич	660022, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, д. 1, Красноярский государственный медицинский университет имени профессора В.Ф.Войно- Ясенецкого E-mail: medinfo@krasgmu.ru	18
Садовский Михаил Георгиевич	Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок E-mail: msad@icm.krasn.ru	101
Самигулина Галина Ахметовна	050010, Республика Казахстан, г. Алматы, ул. Пушкина, 125, Институт информационных и вычислительных технологий E-mail: galinasamigulina@mail.ru	89
Сенашова Мария Юрьевна	Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок E-mail: msen@icm.krasn.ru	101
Сизиков Виктор Петрович	Омский государственный университет путей сообщения, 644046, Россия, г. Омск, пр. Маркса, 35. Т./ф.: (3812) 31-42-19. E-mail: v_p_sizikov@mail.ru	94
Симонов Константин Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: simonovkv@icm.krasn	43, 48
Синицын Алексей Сергеевич	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: Nj_1@inbox.ru	3
Сомсиков Вячеслав Михайлович	050020, Республика Казахстан, г. Алматы, Каменское плато, Институт ионосферы E-mail: vmsoms@rambler.ru	105
Спирин Дмитрий Владимирович	655000, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова E-mail: udodovv@hotmail.com	27
Субботин Сергей Александрович	Запорожский национальный технический университет, Украина, 69063, Запорожье, ул. Жуковского, 64, т.: +38-(097) 355-61-55 E-mail: subbotin.csit@gmail.com	110
Титов Павел Леонидович	690950, Суханова 8, Дальневосточный федеральный университет E-mail: T-P-L@inbox.ru	78
Удодов Владимир Николаевич	655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163 E-mail: udodovv@hotmail.com	27, 117, 124
Усатова Марина Геннадьевна	655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163 E-mail: Usatovamarina555@yandex.ru	124

Хомич А.В.	Сибирский Государственный Технологический Университет E-mail: sibstu2006@rambler.ru	54, 63, 69
Чиженкова Рогнеда Александровна	Институт биофизики клетки РАН, г. Пущино Московской области, 142290, Тел.: (4967)739-196 E-mail: chizhenkova@mail.ru	128
Шабловский Олег Никифорович	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, т. +375- (232)-47-91-62, ф. +375-(232)-47-91-65 E-mail: shablovsky-on@yandex.ru	133
Якшин Сергей Владимирович	64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: s.yakshin@sei.irk.ru	33

Научное издание

Моделирование неравновесных систем–2015

Материалы XVIII Всероссийского семинара 2 – 4 октября 2015 г.

Редактор М.Г. Садовский
Компьютерная верстка: М.Ю. Сенашова

Подписано в печать «6» сентября 2015 г. Формат 60 × 90/8. (А4)
Бумага офсетная. Печать плоская.
Усл. печ. л. 13,56. Уч.-изд. л. 13,81.
Тираж 100 экз. Заказ 16

Институт вычислительного моделирования СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок, 50, стр. 44
Тел/факс (391) 2907476
<http://icm.krasn.ru>

Отпечатано в типографии ИВМ СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок