

V.A. Trapeznikov Institute of Control Sciences
Academy of Sciences
RUDN University
Tomsk State University
Institute of Information and Communication
Technologies Bulgarian Academy of Sciences
Research and development company
“Information and networking technologies”

**DISTRIBUTED COMPUTER
AND COMMUNICATION NETWORKS:
CONTROL, COMPUTATION,
COMMUNICATIONS
(DCCN-2016)**

**Volume 2
Mathematical Modeling, Simulation
and Control Problems**

**Proceedings
of the Nineteenth International Scientific Conference**

Russia, Moscow, 21–25 November 2016

*Under the general editorship
of D.Sc. V. M. Vishnevskiy and D.Sc. K. E. Samouylov*

**Moscow
2016**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ»
Национальный исследовательский
Томский государственный университет
Институт информационных и телекоммуникационных технологий
БОЛГАРСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
Научно-производственное объединение
«Информационные и сетевые технологии»

**РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ КОМПЬЮТЕРНЫЕ
И ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ СЕТИ:
УПРАВЛЕНИЕ, ВЫЧИСЛЕНИЕ, СВЯЗЬ
(DCCN-2016)**

В трех томах

Том 2

**Математическое моделирование
и задачи управления**

**Материалы
Девятнадцатой международной научной конференции**

Россия, Москва, 21–25 ноября 2016 г.

*Под общей редакцией
д.т.н. В.М. Вишневого и д.т.н. К.Е. Самуйлова*

**Москва
2016**

УДК 004.7:004.4.001:621.391:007(063)

ББК 32.973.202:32.968

Р 24

- Р 24 **Распределенные компьютерные и телекоммуникационные сети: управление, вычисление, связь (DCCN-2016) = Distributed computer and communication networks: control, computation, communications (DCCN-2016)** : материалы Девятнадцатой международной научной конференции, 21–25 нояб. 2016 г. : в 3 т. ; под общ. ред. В. М. Вишневого и К. Е. Самуйлова — М.: РУДН, 2016.
ISBN 978-5-209-07666-7
Т. 2: Математическое моделирование и задачи управления = Mathematical modeling, simulation and control problems. — 300 с. : ил.
ISBN 978-5-209-07668-1 (т. 2)

В научном издании представлены материалы Девятнадцатой международной научной конференции «Распределенные компьютерные и телекоммуникационные сети: управление, вычисление, связь» по следующим направлениям:

- Оптимизация архитектуры компьютерных и телекоммуникационных сетей;
- Управление в компьютерных и телекоммуникационных сетях;
- Оценка производительности и качества обслуживания в беспроводных сетях;
- Аналитическое и имитационное моделирование коммуникационных систем последующих поколений;
- Беспроводные сети 4G/5G и технологии сантиметрового и миллиметрового диапазона радиоволн;
- RFID-технологии и их применение в интеллектуальных транспортных сетях;
- Интернет вещей, носимые устройства, приложения распределенных информационных систем;
- Распределенные системы и системы облачного вычисления, анализ больших данных;
- Вероятностные и статистические модели в информационных системах;
- Теория очередей, теория надежности и их приложения;
- Математическое моделирование высокотехнологичных систем;
- Математическое моделирование и задачи управления.

Сборник материалов конференции предназначен для научных работников и специалистов в области теории и практики построения компьютерных и телекоммуникационных сетей.

Текст воспроизводится в том виде, в котором представлен авторами

Утверждено к печати Программным комитетом конференции

ISBN 978-5-209-07668-1 (т. 2)
ISBN 978-5-209-07666-7

©Коллектив авторов, 2016
©Российский университет дружбы народов, 2016

Contents

Plenary Speakers

- Demidova A. V., Druzhinina O. V., Jacimovic M., Masina O. N.** Synthesis, Stability Analysis and Computer Research of Nondeterministic Models of Population Dynamics 9
- Hnatich M., Gevorkyan M. N., Demidova A. V., Korolkova A. V., Kulyabov D. S., Sevastianov L. A.** Review and testing of pseudo-random number generators and their implementation in OpenModelica 17

Sessional Speakers

- Axyonov S., Zamyatin A. V., Liang J., Kostin K.** Advanced Pattern Recognition and Deep Learning for Colon Polyp Detection. 27
- Bakanov A. S.** The model user interaction with distributed information systems. 35
- Bokova O. V., Kryanev A. V., Sliva D. E.** Mathematical modelling of the formation of effective portfolios in the conditions of uncertainty 39
- Borog V. V., Getmanov V. G., Ivanov I. O., Kryanev A. V., Sidorov R. V.** Allocation of the trends of chaotic time series for physical experimental data 43
- Budochkina S. A., Savchin V. M.** On some algebraic structures associated with the mechanics of infinite-dimensional systems. 46
- Chechkin A. V., Potupkin A. Y., Pirogov M. V.** Intellectual control of collective behavior of robots based on radical modeling 52
- Dashitsyrenov G. D., Lovetskiy K. P., Nikolaev N. E., Sevastianov A. L., Sevastianov L. A.** Thickness profile synthesis of thin-film generalized waveguide luneburg lens by cross-sections method 59
- Druzhinina O. V., Masina O. N., Igonina E. V.** Analysis of controlled dynamic systems on the basis of using of the TS-models and the modified linear matrix inequalities 67
- Fomin M. B.** The cluster method of describing data models of information communication systems constructed on the basis of the multi-dimensional approach 75
- Gevorkyan M. N., Kulyabov D. S., Lovetskiy K. P., Nikolaev N. E., Sevastianov A. L., Sevastianov L. A.** Waveguide Modes of a Planar Gradient Optical Waveguide 84

Gostev I. M. About modelling of metrics for identification form of objects under incomplete input information	92
Gusev A. A., Vinitsky S. I., Chuluunbaatar O., Gerdt V. P., Derbov V. L. Symbolic numerical algorithms and programs for the solution of boundary-value problems of dynamics of few-body quantum systems . . .	100
Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitsky S. I., Derbov V. L. Benchmark calculations of the boundary-value problem for a systems of ODEs of large dimension in the framework of Kantorovich method	109
Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitsky S. I., Hai L. L., Derbov V. L. Algorithms and Programs for Solving Boundary Value Problems for System of Second-Order ODE with Piecewise Constant Potentials	118
Gusev A. A., Chuluunbaatar O., Vinitsky S. I., Hai L. L., Derbov V. L., Krassovitskiy P. M. Asymptotic Form of Parametric Basis Functions for the Model of Quantum Tunnelling of Diatomic Molecules	129
Ivanov V. V., Klimanov S. G., Kryanev A. V. Analysis of chaotic time series	140
Ivanov A. P., Kudinov A. N., Mikheev S. A., Tsvetkov V. P., Tsvetkov I. V. Multifractal Dynamics Model and Instantaneous Cardiac Rhythm Catastrophes	145
Ivanov A. P., Kudinov A. N., Mikheev S. A., Tsvetkov V. P., Tsvetkov I. V. Phase Space of Instantaneous Cardiac Rhythm and Imaging of Big Data on It	153
Karnilovich S. P., Lovetskiy K. P., Sevastianov L. A., Schesnyak E. L. Seismic Systems Based on A.M. Kurzanov's Kinematic Supports	159
Khokhlov N. I., Ivanov A. M., Zhdanov M. S., Petrov I. B., Ryabinkin E. A. Applying OpenCL technology for modelling seismic processes using grid-characteristic methods	165
Kryanev A. V., Lukin G. V., Udumyan D. K., Kryanev A. V., Lukin G. V., Udumyan D. K. The metric analysis for interpolation of the function of many variables in the conditions of an information lack	175
Kryanev A. V., Sinitsin A. E., Sliva D. E. Linear approach for mathematical modelling as a tool for efficient portfolio selection	183
Kulyabov D. S., Lovetskiy K. P., Nikolaev N. E., Sevastianov L. A. Stable Algorithm of Integrating Rapidly Oscillating Functions.	189
Lyubin P. G., Schetinin E. Yu. On a Method of Two-Dimensional Smoothing.	197
Malykh M. D., Nikolaev N. E., Sevastianov L. A. Phase-ray coordinate system corresponding to Maxwell's equations solution	204

Mitin A.V. Efficient parallelization of programs of the Hartree-Fock method, the density functional theory, and the configuration interaction method	212
Muharlyamov R.G. Control of System Dynamics and Constraints Stabilization	220
Nguyen D.T., Fomin M.B., Khachumov V.M. Evaluation of the reconstruction precision of coordinates in modeling tree-dimensional objects using stereo images	233
Rybakov Yu.P. Filtration Flow in Porous Medium: Cylindrical and Radial Geometry.	240
Rybakov Yu.P. Motion of a Small Rigid Spinning Sphere in Shear Flow of Viscous Fluid	245
Rybakov Yu.P., Khryapin K.I., Semenova N.V. Pulsating Flow in Blood Vessel with a Clot	253
Savchin V.M., Budochkina S.A. An operator equation with the second time derivative and Hamiltonian equations	258
Savchin V.M., Budochkina S.A. Computer realization of variational methods for dissipative problems with nonclassical Hamilton's actions	264
Vasilyeva I.I., Gladkikh O.B. Modeling of distribution line form of surface electromagnetic wave in planar waveguide	272
Vinitsky S.I., Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Gózdź A., Derbov V.L. Kantorovich and Galerkin-Type Methods for Modelling Quantum Tunneling of Composite Systems through Barriers	280
Zamyatin A.V., Sarinova A.Zh. Processing the algorithms, compression of hyperspectral images based on aerospace crossband correlation with and without losses	291
Author index	299

Plenary Speakers

UDC 519.21;51-76

Synthesis, Stability Analysis and Computer Research of Nondeterministic Models of Population Dynamics

A. V. Demidova*, O. V. Druzhinina[†],
M. Jacimovic[‡], O. N. Masina[§]

* *Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

[†] *Federal Research Center "Computer Science and Control"
of Russian Academy of Sciences
Vavilov str. 44, building 2, Moscow, 119333, Russia*

[‡] *Department of Mathematics University of Montenegro,
Džordž Washington str., Podgorica, 81000, Montenegro*

[§] *Department of Mathematical Modeling and Computer Technologies
Yelets State University named after Ivan Bunin
Communards str. 28, Yelets, 399770, Russia*

Abstract. Qualitative analysis of three-dimensional deterministic mathematical models of population dynamics of two types is performed: the model which takes into account the competition and diffusion of species and the model of interaction of populations which takes into account mutual interaction between the species. The combination of known methods of synthesis and analysis, and developed method of construction of stochastic self-consistent models is used in the research of these models. Existence conditions of equilibrium states are obtained and the analysis of stability is performed. The corresponding nondeterministic mathematical models are constructed by means of transition from ordinary differential equations to differential inclusions, fuzzy and stochastic differential equations. Using the principle of reduction, which allows us to study stability properties of one type of equations, using stability properties of other types of equations, as a basis, sufficient conditions of stability are obtained. The synthesis of the corresponding stochastic models on the basis of application of the method of construction of stochastic self-consistent models is performed. The structure of these stochastic models is described, Fokker–Planck equations are given, the rules of transition to the stochastic differential equation in the form of Langevin are formulated, and computer simulation is carried out. The obtained results are aimed at the further development of methods of construction and the analysis of nondeterministic mathematical models of natural sciences with carrying out computer experiments.

Keywords: stochastic model, single-step processes, population dynamics, stability, differential equations, principle of a reduction, mutualism, diffusion.

1. Introduction

The stability problem of population dynamics models refers to the actual problems of dynamics of nonlinear systems [1–4]. An effective method for the analysis of stability is the method of Lyapunov

functions [2–6]. A systematic approach to stability research, which considers the stability properties of the models defined by the differential equations of various types from the uniform point of view with application of Lyapunov functions is described in [2, 5, 6]. The specified approach is based on the transition from deterministic to stochastic models and on the principle of reduction of the problem of stability of solutions of differential inclusions to the problem of stability of other types of equations. This approach allows performing a comparative analysis of the qualitative properties of mathematical models in the transition from deterministic description to non-deterministic and justifying the construction and using of the models of one type or another.

In this paper we consider two models of dynamics of populations are considered: the model considering the competition and diffusion of species and the model considering the competition and a mutualism of populations. The deterministic description of each of the models is given by the system of three ordinary nonlinear differential equations. Qualitative research of solutions of the specified models is conducted. On the basis of the principle of reduction the analysis of stability is made.

The two-dimensional models taking into account the symbiosis were researched in [1]. The models of interactions “predator–prey–mutualist” are studied in [7]. The stability of the four-dimensional model of the interaction of two competing species with two symbionts in the deterministic and stochastic cases are researched in [8–10].

We use the method of constructing a self-consistent stochastic models developed in [11, 12]. The synthesis of stochastic models taking into account the competition and diffusion of species, as well as models incorporating competition and mutualism populations is carried out. We describe the structure of stochastic models by means of schemes of interaction of elements and the operator of change the state of the system. With the aid of Fokker–Planck equation we formulate the transition rule to a stochastic differential equation in the form of Langevin. The comparative analysis of deterministic and stochastic models is carried out. For comparative analysis of deterministic and stochastic models we use the method of Lyapunov functions and the theory of stochastic calculation.

2. Qualitative Analysis of the Determined Models

We consider a model described by the system of three ordinary differential equations of the form

$$\begin{aligned}x_1' &= x_1(1 - x_1 - qy_1) + \beta x_2 - \gamma x_1, \\x_2' &= x_2(1 - x_2) + \gamma x_1 - \beta x_2, \\y_1' &= y_1(1 - rx_1 - y_1),\end{aligned}\tag{1}$$

where x_1 and y_1 are densities of populations of the competing species in the first area of the species x and y , x_2 is density of population of the

species x in the second area, $q > 0$ and $r > 0$ are the coefficients of the competition in the first area, β and γ are coefficients of the diffusion of the species between the two areas, while the second area is a refuge and $\beta \neq \gamma$. Model (1) is a generalization of the model considered in [4] in the case when diffusion velocities don't coincide.

Besides, we consider a model described by a system of three ordinary differential equations of the form

$$\begin{aligned} x' &= \delta x \left(1 - \frac{x}{K}\right) - \frac{\eta xy}{1 + mu}, \\ y' &= y \left(-s + \frac{c\eta x}{1 + mu}\right), \\ u' &= \tau u \left(1 - \frac{u}{L_0 + lx}\right), \end{aligned} \quad (2)$$

where x, y, u represent the prey population, the predator population and the mutualist population, respectively, $\tau, L_0, \delta, K, \eta, s, c$ are the positive parameters, l and m are mutualistic constants. Model (2) is a special case of the model considered in [7], and is characterized by logistic type growth of prey populations in the absence of predator and by logistic growth of a population of mutualist. In the absence of the mutualism model (2) represents a classical Lotka–Volterra model.

Four equilibrium states of the model (1) are found: $O(0, 0, 0)$, $A_1(0, 0, 1)$, $A_2(\bar{x}_1, \bar{x}_2, 0)$ and $A_3(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{y}_1)$, as a result of the solution of the corresponding algebraic equations. Coordinates $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{y}_1$ are found by means of Mathematica computing system.

The conditions of existence of nonnegative equilibrium state A_2 and positive equilibrium state A_3 are obtained. In particular, it was discovered that if one of the conditions: $(C_1) 0 < \beta < 1, \gamma > 1 - \beta$, $(C_2) \beta > 1, \gamma > 0$, holds, then model (1) has the nonnegative equilibrium state A_2 . The conditions of existence of positive equilibrium state A_3 are formulated analogically. Estimations of the model parameters carried out and local phase portraits are constructed. Conditions of asymptotic stability of equilibrium state A_3 are obtained on the basis of the method of Lyapunov functions.

The following states of equilibrium are found for the model (2):

$$\begin{aligned} &E_0(0, 0, 0), E_1(0, K, 0), E_2\left(0, \frac{s}{c\eta}, \frac{\delta}{\eta} \left(1 - \frac{s}{c\eta K}\right)\right), \\ &E_3(L_0, 0, 0), E_4(L_0 + lK, K, 0), E_5\left(L_0 + \frac{ls\lambda}{c\eta}, \frac{s\lambda}{c\eta}, \frac{\delta\lambda}{\eta} \left(1 - \frac{s\lambda}{c\eta K}\right)\right), \end{aligned}$$

where $\lambda = c\eta(1 + mL_0)/(c\eta - lms)$. Let us note that all equilibrium states $E_0 - E_5$ exist under condition

$$c\eta K > s(1 + m(L_0 + lK)). \quad (3)$$

If condition (3) and condition $s \geq \tau$ are satisfied, then there exists a unique positive equilibrium of the model (2) and this equilibrium is asymptotically stable [7].

3. Construction and Stability Analysis of the Models of Population Dynamics on the Basis of the Principle of Reduction

From properties of differential inclusion it is possible a transition to the properties of fuzzy differential equations and stochastic differential equations. This transition is based on the principle of reduction of the stability problem for differential inclusions to the stability problem for fuzzy differential equations. The fuzzy equation for each α -level, where $\alpha \in (0, 1]$, is given by the corresponding differential inclusion. The set of all motions of the inclusion generates a multivalued mapping which takes into account the α -level of fuzzy function while this function is the solution of the corresponding fuzzy differential equation.

The model (1) is presented in the form of the vector equation

$$dx/dt = f(x), \quad (4)$$

where $x = (x_1, x_2, y_1)$, $f(x) = (f_1, f_2, f_3) = (x_1(1 - x_1 - qy_1) + \beta x_2 - \gamma x_1, x_2(1 - x_2) + \gamma x_1 - \beta x_2, y_1(1 - rx_1 - y_1))$, $x \in R_+^3 = R_+ \times R_+ \times R_+$, $R_+ = [0, \infty)$, $f : R_+^3 \rightarrow R_+^3$.

The differential inclusion which corresponds to deterministic equation (4) takes the form

$$dx/dt \in F(x), \quad (5)$$

where $F(x) = \{f(x) | \beta \in B, \gamma \in C, q \in Q, r \in R\}$, $B ::= [\beta_1, \beta_2]$, $C ::= [\gamma_1, \gamma_2]$, $Q ::= [q_1, q_2]$, $R ::= [r_1, r_2]$, $F : R_+^3 \rightarrow 2^{R_+^3}$.

The transition from vector equations that describe model (2), to the vector differential inclusion, which takes into account the ecological sense of the model parameters is similarly realized.

The definitions of a Lyapunov function of a closed set $M \subset R_+^3$ on the inclusion (5) and the definition of multivalued derivative $DV(x)$ along the motions of inclusion (5) are given. We prove the theorems of stability, attraction and asymptotic stability on the basis of Lyapunov functions for generalizations of models (1) and (2) to the case of differential inclusions.

By means of subsets of α -level $B_\alpha = \{\beta | \mu_B(\beta) \geq \alpha\}$, $C_\alpha = \{\gamma | \mu_C(\gamma) \geq \alpha\}$, $Q_\alpha = \{q | \mu_Q(q) \geq \alpha\}$ and $R_\alpha = \{r | \mu_R(r) \geq \alpha\}$ where $\alpha \in (0, 1]$, we make the transition from equation (4) to fuzzy differential equation

$$dX/dt = F(X), \quad (6)$$

where $F : Z_+^3 \rightarrow P(R_+^3)$ is the set of all fuzzy subsets of R_+^3 . In terms of subsets of α -level the corresponding to equation (6) the differential

inclusion takes the form $d\varphi/dt \in F_\alpha(\varphi)$, where $\alpha \in (0, 1]$, $F_\alpha(\varphi) = \{f(\varphi(t)) | \beta \in B_\alpha, \gamma \in C_\alpha, q \in Q_\alpha, r \in R_\alpha\}$.

Transition from the vectorial differential inclusion corresponding to model (2) to the corresponding fuzzy differential equation is similarly realized. Definitions of α -stability, α -attraction and asymptotic α -stability, the definition of the Lyapunov function which take into account α -levels, $\alpha \in (0, 1]$, for the model of the form (6) are given. The theorems of stability on the basis of Lyapunov functions are proven.

4. Construction of Stochastic Models of Population Dynamics

By means of the principle of reduction we formulate the stability conditions of stochastic equations which correspond to model (6). It is shown that if the trivial solution of a fuzzy equation is α -stable for every $\alpha \in (0, 1]$, then the trivial solution of the corresponding stochastic equation is stable on probability. If the trivial solution of the fuzzy equation is asymptotically α -stable for any $\alpha \in (0, 1]$, then the trivial solution of the corresponding stochastic equation is asymptotically stable on probability. For model (2) the stability conditions of the corresponding stochastic equations are also obtained.

The construction of stochastic models which corresponds to models (1) and (2), is considered. The schemes of interaction of elements and the operator of change of the system state are given on the basis of application of a method for construction of self-consistent stochastic models [11, 12]. Application of this method allows to obtain the stochastic differential equation in Langevin form with coordination of stochastic and deterministic parts. Consistency is understood in the sense that the stochastics in the constructed stochastic model is associated with the structure of the system, but isn't the description of external perturbations.

The corresponding lines of the scheme of interaction respond to natural reproduction of species in the absence of other factors, to intraspecific and interspecific competition, and to the migration of species between the first and the second areas.

The state of the system can be described by means of $x = (x_1, x_2, y_1)$. Relations for intensities of transitions from the state x to the state $x \pm r^A$ in the unit of the time are given, and equations which correspond to models are written. We present Langeven equations equivalent to Fokker–Planck equations in the form

$$dx = a(x, t)dt + b(x, t)dW,$$

where $x \in R^3$ is the function of a state of the system, and $W \in R^3$ is the standard three-dimensional Brownian motion. It is obtained that the equation in the moments for a stochastic differential equation in the form of Langeven completely coincides with model (1) and this fact can serve for study of deterministic behavior.

Investigation of the stochastic member of a stochastic differential equation in the form of Langevin allows us to studying the influence of introduction of stochastics on the behavior of the studied system. Transition from the vector differential equation corresponding to model (2) to the stochastic differential equation is similarly realized.

Numerical experiments for models (1) and (2) we have made by means of the developed software package for the numerical solving of systems of differential equations by stochastic Runge–Kutta methods. The library is prepared in the Python language with using of Numpy and Scipy modules. Algorithms for generation of trajectories of Wiener process and multipoint distributions, approximation of the multiple stochastic integrals, testing strong and weak convergence of numerical methods and directly numerical algorithms of a stochastic Runge–Kutta method are realized.

Numerical experiment showed that for the deterministic model of population dynamics which takes into account the competition and diffusion of species, the developed software package. gives results which are completely coordinated with analytical conclusions. The following parameters for the numerical experiment concerning the stochastic model of population dynamics which takes into account the competition and diffusion of species were selected: initial values of populations densities $(x_1(0), x_2(0), y_1(0)) = (1.0, 1.0, 0.5)$, parameter values $q = 1.2$, $r = 0.5$, $\gamma = 0.16$, $\beta = 1.44$. The graph (fig.1) shows the trajectory of the average values of 100 realizations with these initial values and parameter values for the time interval $[0, 20]$.

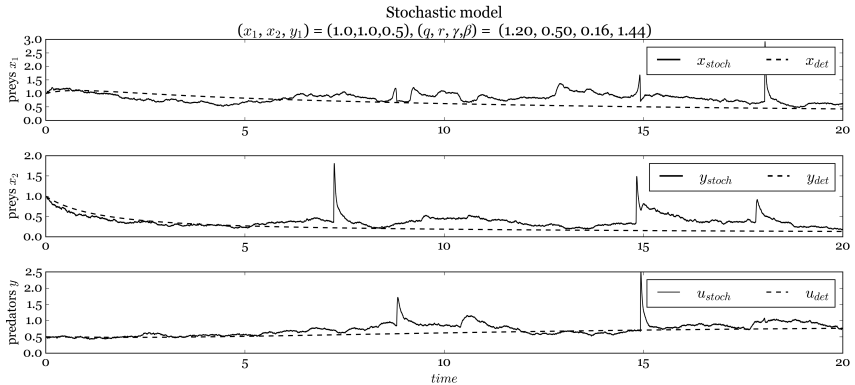


Figure 1. The trajectories of average values for 100 realizations

Number of problems was revealed by the numerical experiment. Runge–Kutta methods used for solution of stochastic differential equations, give enough good results on a short time interval. However, with

increasing the time of the experiment, due to the accumulation of error, the method ceases to work stable. Large bursts of values are visible on the figure. There are several ways to solve this problem. One way may be to find other numerical methods for solving of stochastic differential equations describing the models we studied. The second way consists in transition from solving of stochastic differential equations in the form of specific implementations to the study of the Fokker–Planck equation, the solution of which is a function of the probability distribution.

Besides, as a result of numerical experiment there was a problem of choice of parameters of modeling in which the physical sense of the modelled phenomenon would remain. Thus there was a problem of detection of intervals which save physical sense, and also tracing of change of qualitative behavior depending on a choice of parameters not only by means of numerical modeling, but also by preliminary qualitative analysis of model.

It should be noted that the main results of the numerical analysis of stochastic model “predator–prey–mutualist” are similar to the results of numerical analysis of stochastic models of population dynamics which takes into account the competition and diffusion of species.

5. Conclusions

The developed combined approach to analysis of models of nonlinear dynamics is based on the principle of reduction, and on the construction of self-consistent stochastic models. The method for construction of self-consistent stochastic model allowed us to synthesize the stochastic model which takes into account the competition and the diffusion of species, and the stochastic model which takes into account the mutualism. The principle of reduction allowed us to obtain the conditions of stability with the transition to differential inclusions, fuzzy differential equations and stochastic differential equations. Numerical experiments conducted using the developed software package. show consistency with the analytical results for the studied deterministic models. A number of problems arising in the numerical study of corresponding stochastic models identified, and methods for their solving are indicated. The obtained results can be used for the study of nondeterministic nonlinear dynamic models.

Acknowledgments

The work is partially supported by RFBR grant No 15-07-08795.

References

1. *Bazykin A.D.* Nonlinear dynamics of interacting populations. — Moscow–Izhevsk: Institute of computer science, 2003.

2. *Druzhinina O.V., Masina O.N.* Methods of stability research and controllability of fuzzy and stochastic dynamic systems. — Moscow: Dorodnicyn Computing Center of RAS, 2009.
3. *Demidova A.V., Druzhinina O.V., Masina O.N.* Stability research of models of population dynamics based on the construction of self-consistent stochastic models and principle reduction // Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series "Mathematics. Information Sciences. Physics". — 2015. — No. 3. — P. 18–29.
4. *Zhang Xin-an, Chen L.* The linear and nonlinear diffusion of the competitive Lotka–Volterra model // Nonlinear Analysis. — 2007. — Vol. 66. — P. 2767–2776.
5. *Merenkov Y.N.* Stability-like properties of differential inclusions, fuzzy and stochastic differential equations. — Moscow: PFUR, 2000.
6. *Shestakov A.A.* Generalized direct Lyapunov's method for systems with distributed parameters. — Moscow: URSS, 2007.
7. *Rai B., Freedman H.I., Addicott J.F.* Analysis of three species models of mutualism in predator-prey and competitive systems // Math. Biosci. — 1983. — No. 63. — P. 13–50.
8. *Freedman H.I., Rai B.* Can mutualism alter competitive outcome: a mathematical analysis // Rocky Mountain Math. J — 1995. — Vol. 25. — No. 1. — P. 217–230.
9. *Masina O.N., Shcherbakov A.V.* The model stability analysis of the interaction between two competing species taking into account the symbiosis // Proceedings of the International conference “Systems of control, technical systems: stability, stabilization, ways and methods of research”, dedicated to the 95th anniversary from birthday of Professor A.A. Shestakov (Yelets, 2–3 April 2015). — Yelets: YSU named after Ivan Bunin, 2015. — P. 93–97.
10. *Demidova A.V., Druzhinina O.V., Masina O.N., Shcherbakov A.V.* Synthesis of nonlinear models of population dynamics based on the combination of deterministic and stochastic approaches // Abstracts of the third international scientific conference “Modeling nonlinear processes and systems” (MNPS - 2015) (Moscow, STANKIN, 22–26 June 2015). — Moscow: Janus-K, 2015. — P. 87–88.
11. *Kulyabov D.S., Demidova A.V.* The introduction of an agreed term in the equation of stochastic population model // Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series “Mathematics. Information Sciences. Physics”. — 2012. — No. 3. — P. 69–78.
12. *Demidova A.V.* The equations of population dynamics in the form of stochastic differential equations // Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series “Mathematics. Information Sciences. Physics”. — 2013. — No. 1. — P. 67–76.

УДК 004.94+519.62

Обзор и тестирование генераторов псевдослучайных чисел и их реализация OpenModelica

М. Гнатич^{‡§}, М. Н. Геворкян*, А. В. Демидова*,
А. В. Королькова*, Д. С. Кулябов*[†], Л. А. Севастьянов*[‡]

* *Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо-Маклая, д.6, Москва, Россия, 117198*

† *Лаборатория информационных технологий,
Объединённый институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980*

‡ *Лаборатория теоретической физики,
Объединённый институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980*

§ *Университет Павла Йозефа Шафарика,
Шробарова 2, 041 80 Кошице, Словакия*

Аннотация. Язык компонентно-ориентированного моделирования Modelica применяется для моделирования сложных процессов, задаваемых системой ОДУ. В стандартной библиотеке OpenModelica нет средств для генерации псевдослучайных чисел, что делает невозможным моделирование стохастических процессов. Целью данной статьи является краткий обзор некоторого числа алгоритмов генерации последовательности равномерно распределённых случайных чисел и оценка качества даваемых ими последовательностей, а также описание способов реализации некоторых из этих алгоритмов в системе OpenModelica.

Ключевые слова: псевдослучайные числа, Modelica.

1. Введение

В данной статье рассматривается вопрос генерации равномерных псевдослучайных чисел в среде OpenModelica. OpenModelica является открытой реализацией языка Modelica. Данный язык предназначен для моделирования различных систем и процессов, которые можно представить в виде системы алгебраических или дифференциальных уравнений. На данный момент, однако, в стандартной библиотеке OpenModelica нет средств даже для генерации равномерно распределённых случайных чисел (существует библиотека Noise, претендующая на включение в стандартный набор библиотек [1]).

В статье дается обзор некоторых алгоритмов генерации псевдослучайных чисел. Все алгоритмы реализованы на языке C, а также часть из них непосредственно на языке OpenModelica. С помощью утилиты dieharder проводится тестирование рассмотренных алгоритмов. На основе результатов тестирования выбираются лучшие алгоритмы для

использования. В заключении описываются детали реализации генератора псевдослучайных чисел в среде OpenModelica и даются некоторые рекомендации по использованию псевдослучайных генераторов на практике.

Статья может служить кратким введением в теорию и практику генераторов равномерно распределенных случайных чисел.

2. Обзор алгоритмов генерации последовательности равномерно распределенных псевдослучайных чисел

2.1. Линейный конгруэнтный метод

Линейный конгруэнтный метод был впервые предложен в 1949 году Д. Г. Лехмером (D. H. Lehmer) [2, 3]. Алгоритм задается одной формулой:

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \pmod{m}, \quad n \geq 0,$$

где m — *модуль* (mask) $m > 1$, a — *множитель* (multiplier) ($0 \leq a < m$), c — *приращение* ($0 \leq c < m$), x_0 — начальное значение, *зерно* (seed). Результатом многократного применения данной рекуррентной формулы является *линейная конгруэнтная последовательность* x_1, \dots, x_n . Особый случай $c = 0$ называется *мультипликативным конгруэнтным методом*. Для краткого обозначения данного метода будем использовать аббревиатуру LCG (linear congruential generator).

Числа m , a , c называют «волшебными» или «магическими» так как их значения задаются в коде программы и выбираются исходя из опыта применения генератора. Качество генерируемой последовательности существенно зависит от правильного выбора данных параметров. Последовательность $\{x\}_1^n$ периодична и ее период зависит от числа m , которое поэтому должно быть большим. На практике выбирают m равным машинному слову (для 32-х битной архитектуры — 2^{32} и для 64-х битной — 2^{64}). В [2, 3] рекомендуется выбрать $a = 6364136223846793005$, $c = 1442695040888963407$, $m = 2^{64}$. В статье [4] можно найти объемные таблицы с оптимальными значениями a , b и m .

Квадратичный конгруэнтный метод $x_n = (ax_{n-1}^2 + bx_{n-1} + d) \pmod{m}$ кубический конгруэнтный метод $x_n = (ax_{n-1}^3 + bx_{n-1}^2 + cx_{n-1} + d) \pmod{2^e}$.

В настоящее время линейный конгруэнтный метод представляет по большей части лишь исторический интерес, так как он генерирует сравнительно некачественную псевдослучайную последовательность по сравнению с другими, не менее простыми генераторами.

Авторы реализовали линейный конгруэнтный метод на языке C и сгенерировали с помощью него последовательность из 10^9 чисел. Данная последовательность была протестирована с помощью открытого

набора тестов DieHarder [5]. В результате генератор LCG провалил около половины тестов.

2.2. Метод Фибоначчи с запаздываниями

Развитием LCG генератора можно считать идею использовать для генерации i -го элемента псевдослучайной последовательности не один, а несколько предыдущих элементов. Согласно [2, 3] первый такой генератор был предложен в начале 50-х годов и основывался на формуле:

$$x_{n+1} = (x_n + x_{n-1}) \pmod{m}.$$

Однако на практике он показал себя не лучшим образом. В 1958 году Дж. Ж. Митчелом (G. J. Mitchell) и Д. Ф. Муром (D. Ph. Moore) был изобретен намного лучший генератор

$$x_n = (x_{n-n_a} + x_{n-n_b}) \pmod{m}, \quad n \geq \max(n_a, n_b).$$

Данный генератор получил название генератора Фибоначчи с запаздыванием (LFG, lagged Fibonacci Generator).

Как и в случае LCG генератора, выбор «магических чисел» n_a и n_b сильно влияет на качество генерируемой последовательности. Авторы предложили использовать следующие магические числа n_a и n_b :

$$n_a = 24, n_b = 55.$$

Д. Кнут [2, 3] приводит ряд других значений, начиная от (37, 100) и заканчивая (9739, 23209) Длина периода данного генератора в точности равна $2^{e-1}(2^{55} - 1)$ при выборе $m = 2^e$.

Как видно из алгоритма, для инициализации данного генератора необходимо использовать не одно начальное значение, а последовательность из $\max(n_a, n_b)$ случайных чисел.

В открытой библиотеке GNU Scientific Library (GSL) [6] используется *составной мульти-рекурсивный* генератор, предложенный в статье [7]. Данный генератор является разновидностью LFG.

Еще один метод, предложенный в статье [8] также является разновидностью метода Фибоначчи и определяется формулой:

$$x_n = (a_1 x_{n-1} + a_5 x_{n-5}) \pmod{5},$$

В GSL использованы следующие параметры: $a_1 = 107374182$, $a_2 = 0$, $a_3 = 0$, $a_4 = 0$, $a_5 = 104480$, $m = 2^{31} - 1 = 2147483647$. Период этого генератора равен 10^{46} .

2.3. Инверсный конгруэнтный генератор

Инверсный конгруэнтный метод основан на использовании обратного по модулю числа.

$$x_{i+1} = (ax_i^{-1} + b) \pmod m$$

где a — множитель ($0 \leq a < n$), b — приращение ($0 \leq b < n$), x_0 — начальное значение (seed). Кроме того $\text{НОД}(x_0, m) = 1$ и $\text{НОД}(a, m) = 1$.

Данный генератор превосходит обычный линейный метод, однако сложнее алгоритмически, так как необходимо искать обратные по модулю целые числа, что приводит к медленной скорости генерации чисел. Для вычисления обратного числа обычно применяется расширенный алгоритм Евклида [2, 3, §4.3.2].

2.4. Генераторы с использованием побитовых операций

Большинство генераторов, дающих наиболее качественные псевдослучайные последовательности используют в своих алгоритмах побитовые операции конъюнкции, дизъюнкции, отрицания, исключающей дизъюнкции (xor) и побитовые право/влево.

Вихрь Мерсенна считается одним из лучших псевдослучайных генераторов. Разработан в 1997 году Мацумото и Нишимура [9]. Существуют 32-, 64-, 128-разрядные версии вихря Мерсенна. Свое название алгоритм получил из-за использования простого числа Мерсенна $2^{19937} - 1$. В зависимости от реализации обеспечивается период вплоть до $2^{216091} - 1$. Вихрь Мерсенна используется во многих стандартных библиотеках, например в модуле `random` языка Python 3 [10].

Генераторы `XorShift` дающие качественную псевдослучайную последовательность были разработаны в 2003 году Дж. Марсальей (G. Marsaglia) [11, 12].

Еще одно семейство генераторов — генераторы KISS (Keep It Simple Stupid) — дает не менее качественную последовательность псевдослучайных чисел [13]. Генератор KISS используется в процедуре `random_number()` языка Fortran (компилятор `gfortran` [14])

2.5. Устройства `/dev/random` и `/dev/urandom`

Для создания истинно-случайной последовательности чисел с помощью компьютера, в некоторых Unix системах (в частности GNU/Linux) используется сбор «фонового шума» окружения операционной системы и аппаратного обеспечения. Источником такого случайного шума являются моменты времени между нажатия клавиш пользователем (inter-keyboard timings), различные системные прерывания и другие события, которые удовлетворяют двум требованиям: не

детерминированности и сложной доступности для измерения внешним наблюдателем.

Неопределенность из таких источников собирается драйвером ядра и помещается в «энтропийный пул», который дополнительно перемешивается с помощью алгоритма, похожего на алгоритмы вычисления контрольных сум. Когда случайные байты запрашиваются системным вызовом, они извлекаются из энтропийного пула путем взятия SHA хеша от содержимого пула. Взятие хеша позволяет не показывать внутреннее состояние пула, так как восстановление содержимого по хешу считается вычислительно невыполнимой задачей. Дополнительно извлекающая процедура занижает размер содержимого пула для того, чтобы предотвратить выдачу хеша по всему содержимому и минимизировать теоретическую возможность определения его содержимого. Во вне энтропийный пул доступен в виде символьного псевдоустройства `/dev/random`.

3. Тестирование алгоритмов

Обзор большого числа критериев оценки качества массива псевдослучайных чисел можно найти в третьей главе книги Д. Кнута [2, 3], а также статье [15] одного из ведущих специалистов по генераторам псевдослучайных чисел. Все описанные в нашей статье алгоритмы были реализованы на языке C и протестированы с помощью набора тестов `dieharder`, доступного на официальном сайте автора [5]. Также этот пакет тестов в ходит в состав официальных репозиториев многих дистрибутивов GNU/Linux.

3.1. Описание `dieharder`

Набор тестов `dieharder` реализован в виде утилиты командной строки, которая позволяет тестировать последовательности равномерно распределенных псевдослучайных чисел. Также `dieharder` может использовать любой генератор из библиотеки GSL [6] для генерирования чисел или непосредственного тестирования. `dieharder -l` — показать список доступных тестов, `dieharder -g -l` — показать список доступных генераторов псевдослучайных чисел, каждому генератору присвоено порядковое число, которое надо указать после флага `-g` для включения нужного генератора. 200 `stdin_input_raw` — считывать стандартный входной бинарный поток, 201 `file_input_raw` — считывать файл в бинарном формате, 202 `file_input` — считывать файл в текстовом формате, 500 `/dev/random` — использовать псевдоустройство `/dev/random`, 501 `/dev/urandom` — использовать псевдоустройство `/dev/urandom`. Каждое псевдослучайное число должно располагаться на новой строке, а в первых строках файла необходимо указать: тип чисел (`d` — целые числа двойной точности), количество

чисел в файле и разрядность чисел (32 или 64 бита). Когда такой файл создан можно передать его в `dieharder`

```
dieharder -a -g 202 -f file.in > file.out
```

где флаг `-a` включает все встроенные тесты, а флаг `-f` задает файл для анализа. Результаты тестирования будут сохранены в `file.out`.

3.2. Результаты тестов

Генератор	Провалено	Слабо	Пройдено
LCG	52	6	55
LCG2	51	8	54
LFG	0	2	111
ICG	0	6	107
KISS	0	3	110
jKISS	0	4	109
XorShift	0	4	109
XorShift+	0	2	111
XorShift*	0	2	111
MT	0	2	111
dev/urandom	0	2	111

3.3. Реализация генераторов псевдослучайных чисел.

Одним и ограничением при попытке реализовать генерацию псевдослучайных чисел используя лишь язык Modelica является отсутствие в OpenModelica побитовых логических операторов и операторов сдвига. В связи с этим, те алгоритмы, которые эти операции используют необходимо реализовать на языке C.

На языке Modelica нами были реализованы три генератора: линейный конгруэнтный генератор (LCG), метод Фибоначчи с запаздыванием (LFG) и инверсный конгруэнтный генератор (ICG).

Как показало тестирование с помощью DieHarder, из генераторов, не использующих побитовые операции, наиболее качественную последовательность псевдослучайных чисел дают метод Фибоначчи с запаздыванием и инверсный конгруэнтный генератор. Недостатком LFG генератора является необходимость в минимум 55 начальных значений. Эти начальные значения можно сгенерировать с помощью LCG генератора. ICG генератор требует только одного начального значения, однако его алгоритм сложнее по сравнению с LFG.

Из генераторов, использующих побитовые операции выделяются генераторы `xorshift*`, `xorshift+` и вихрь Мерсенна. Все они дают одинаково качественную последовательность. Алгоритм вихря Мерсенна, однако, намного более громоздок, чем `xorshift*` или

`xorshift+`, поэтому для генерирования больших последовательностей предпочтительней использовать `xorshift*` или `xorshift+`.

4. Заключение

В заключении кратко перечислим основные результаты работы: дан обзор наиболее известных и эффективных генераторов равномерно распределенных псевдослучайных чисел; описана методика тестирования псевдослучайных последовательностей с помощью набора тестов `DieHarder`; все описываемые алгоритмы реализованы в виде С функций или непосредственно на `OpenModelica` и протестированы с помощью `DieHarder`; описаны основные особенности реализации псевдослучайных генераторов на языке `Modelica`; приводится ряд практических рекомендаций по использованию псевдослучайных генераторов.

Благодарности

Работа частично поддержана грантами РФФИ № 14-01-00628, 15-07-08795 и 16-07-00556.

Литература

1. Klöckner A., van der Linden F. L. J., Zimmer D. Noise generation for continuous system simulation // Proceedings of the 10th International Modelica Conference. — Lund; Sweden, 2014. — P. 837–846.
2. Кнут, Дональд Эрвин. Искусство программирования. — 3 изд. — Москва : Вильямс, 2004. — Т. 2.
3. Knuth D. E. The Art of Computer Programming, Volume 2 (3rd Ed.): Seminumerical Algorithms. — Boston, MA, USA : Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1997. — Vol. 2.
4. L'Ecuyer P. Tables of linear congruential generators of different sizes and good lattice structure // Mathematics of Computation. — 1999. — Vol. 68, no. 225. — P. 249–260.
5. Brown R. G., Eddelbuettel D., Bauer D. Dieharder: A Random Number Test Suite. — 2013. — URL: http://www.phy.duke.edu/~rgb/General/rand_rate.php.
6. Galassi M., Gough B., Jungman G. et al. — The GNU Scientific Library Reference Manual, 2015. — URL: <https://www.gnu.org/software/gsl/manual/gsl-ref.pdf>.
7. L'Ecuyer P. Combined multiple recursive random number generators // Operations Research. — 1996. — Vol. 44, no. 5. — P. 816–822.
8. L'Ecuyer P., Blouin F., Couture R. A search for good multiple recursive random number generators // ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation (TOMACS). — 1993. — Vol. 3, no. 2. — P. 87–98.
9. Matsumoto M., Nishimura T. Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator // ACM

- Trans. Model. Comput. Simul. — 1998. — January. — Vol. 8, no. 1. — P. 3–30.
10. gfortran team T. — Python 3.5.1 documentation, 2016. — Mar. — URL: <https://docs.python.org/3/>.
 11. Marsaglia G. Xorshift rngs // Journal of Statistical Software. — 2003. — Vol. 8, no. 1. — P. 1–6.
 12. Panneton F., L'Ecuyer P. On the xorshift random number generators // ACM Trans. Model. Comput. Simul. — 2005. — October. — Vol. 15, no. 4. — P. 346–361.
 13. Rose G. KISS: A Bit Too Simple. — 2011. — URL: <https://eprint.iacr.org/2011/007.pdf>.
 14. gfortran team T. — Using GNU Fortran, 2015. — URL: <https://gcc.gnu.org/onlinedocs/>.
 15. L'Ecuyer P., Simard R. Testu01: A c library for empirical testing of random number generators // ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS). — 2007. — Vol. 33, no. 4. — P. 22.

UDC 004.94+519.62

Review and testing of pseudo-random number generators and their implementation in OpenModelica

M. Hnatic^{‡§}, M. N. Gevorkyan^{*}, A. V. Demidova^{*},
A. V. Korolkova^{*}, D. S. Kulyabov^{*†}, L. A. Sevastianov^{*‡}

^{*} *Department of Applied Probability and Informatics
RUDN University
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

[†] *Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

[‡] *Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

[§] *Pavol Jozef Šafárik University in Košice (UPJŠ),
Šrobárova 2, 041 80 Košice, Slovak Republic*

Component-based modeling language Modelica (OpenModelica is open source implementation) is used for the numerical simulation of complex processes of different nature represented by ODE system. However, in OpenModelica standard library there is no routines for pseudo-random numbers generation, which makes it impossible to use for stochastic modeling processes. The goal of this article is a brief overview of a number of algorithms for generation a sequence of uniformly distributed pseudo random numbers and quality assessment of the sequence given by them, as well as the ways to implement some of these algorithms in OpenModelica system.

Keywords: pseudo-random numbers generation, Modelica.

Sessional Speakers

UDC 004.4

Advanced Pattern Recognition and Deep Learning for Colon Polyp Detection

S. Axyonov^{*‡§}, A. Zamyatin^{*}, J. Liang[†], K. Kostin^{*‡}

** Faculty of Informatics
National Research Tomsk State University
Lenina ave. 36/2, Tomsk, 634050, Russia*

*† Faculty of Biomedical Informatics
Arizona State University
E Shea Blvd, Scottsdale, AZ, 85259, the USA*

*‡ Institute of Cybernetics
National Research Tomsk Polytechnic University
Sovetskaya str. 84/3, Tomsk, 634034, Russia*

*§ Faculty of Control Systems
Tomsk State University of Control Systems and Radio Electronics
Vershinina str. 74, Tomsk, 634034, Russia*

Abstract. The paper presents a computational technique for automatic polyp detection in the colon via a video stream analysis obtained by colonoscopy and processed by computer vision and deep learning algorithms. The most of effective methods detecting polyps in colon is based on intense computation to localize the candidate regions. The research implements frame color contrasting and segmentation procedure analyzing not only color and texture region features but also their locations to make the search faster and more reliable. To estimate the performance of suggested technique we took CVC-ColonDB, the open public access database contains images of colon with different polyps and a set of video files illustrating the colonoscopy process provided by Arizona State University and Arizona clinics in Phoenix, the USA. The obtained model demonstrates the performance of the classification comparable to existing model that is working faster, thus, the first mentioned model allows using the approach to solve the practical tasks in order to reduce morbidity and mortality from colon cancer.

Keywords: colonoscopy, polyp detection, computer vision, segmentation, deep learning.

1. Introduction

Every year more than 700 000 new cases of colorectal cancer are diagnosed in the world [1], particularly in Russia the figure reaches 50 thousand cases and not all cases of the cancer are detected even at the last stage [2]. Due to the late diagnosis of the disease its mortality is as high as 40% within one year from the time of diagnosis of the disease and metastases in the liver are detected almost in 50% of colorectal cancer cases [3]. The physicians use effective screening tests to prevent colon cancer including colonoscopy. It allows testing colon by visual analysis of its inner surface to locate polyps that are abnormal growths of tissue and signals the emergence of cancer. Such analysis has reduced the likelihood of cancer by 30%

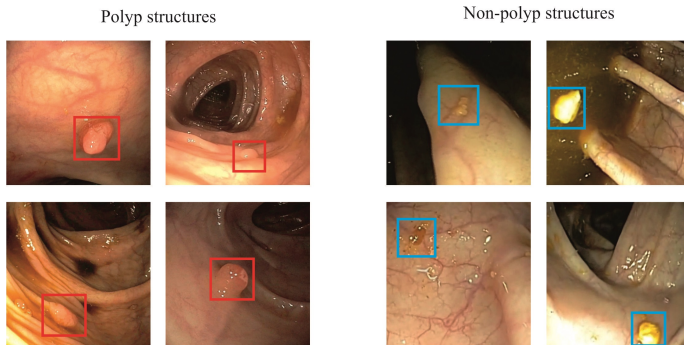


Figure 1. Different polyps variations and visual structures are not polyps

[4]. However, the quality of analysis is based on operator’s experience and skills and therefore it allows possibility of medical errors. Some researches estimate the miss-rates as 25% [5]. Software exploring colon surface to detect polyps seems to help physicians diminish errors.

2. Related research

There are some works analyzing colonoscopy images for detecting polyps, including implementation of texture, color and shape descriptors. Fig. 1 illustrates different polyp and non-polyp structures that show the complexity of detecting based only on one type of image descriptors. The research of Karkanis et al. [6] uses color and texture descriptors that are less effective due to large color variations of polyps, and distance between single-focus camera and polyps. The shape of the most newborn polyps is elliptical and Hwang et al. [7] explored the edges on the colonoscopy process frames to see such elliptical structures. But practically elliptical- and round-shape regions can be obtained for non-polyp structures including light spots, liquid in colon, or anatomical features of colon. Park et al [8] used spatio-temporal features to find the polyps. The method uses some neighboring frames and estimates the difference, generating delayed feedback on the polyps locations. Tajbakhsh et al [9], [10] suggested combining edge detection methods to select a set of possible candidates for classification and neural network remembering edge, texture and color features from the training set. The last research demonstrated very high detection quality but the time of processing is a disadvantage of research. In paper [11] the detecting software needs 2.6 seconds to process a frame from the colonoscopy video.

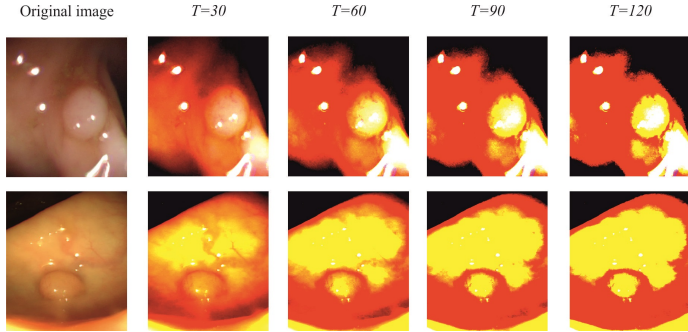


Figure 2. Adjusted frames with different threshold parameter T

3. Proposed technique

We suggested using image contrasting and advanced segmentation to select the possible polyp regions and classify candidates by convolution neural networks to make the processing fast. The proposed contrasting method is based on the threshold parameter T value. The used expression computing the contrast C can be defined as:

$$C = ((100.0 + T)/100.0)^2$$

The formula implemented in adjusting the contrast of pixel's color components [12] is expressed as:

$$I' = \left(\left(\frac{I}{255.0} - 0.5 \right) * C + 0.5 \right) * 255.0$$

In the formula the symbol I' represents the contrast adjusted color components *Blue*, *Red*, and *Green*. I depicts the original color components *Blue*, *Red*, *Green* values prior to being updated. As all the color component values may occur only from 0 to 255 inclusive the modifying algorithm checks if the newly computed components fall within the valid range.

Fig. 2 presents two sets of contrasting images containing polyp regions with different threshold value. The frame modified by the mentioned contrasting is processed by Canny algorithm [13] to eliminate regions with a weak change in intensity gradient and select the pixels corresponding to the most significant change in the direction of the gradient, i.e. edges. The obtained edges are not the features of polyp themselves, as they may separate not only polyp regions from colon but also different colon regions, light spots, or specific intestines features. We suggested using image segmentation KMCC algorithm [14] to localize regions with similar pixels.

Our KMCC algorithm implementation analyzes color features in the La'b' space, texture features, and segment centers spatial distribution. The

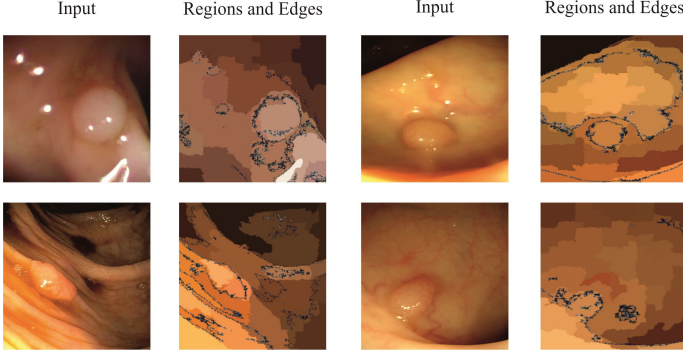


Figure 3. Combining edge maps from contrasted image and KMCC regions for different polyps

color feature vector of pixel $p = [p_x, p_y]$ consists of color components in the CIE $L^*a^*b^*$ space: $I(p_k) = [I_L(p), I_a(p), I_b(p)]$. The texture vector T_p uses Discrete Wavelet Decomposition (DFD) based on the low-pass Haar filter. First of all the algorithm splits the frame into square non-overlapping blocks of dimension f and computes intensity and texture features for each block. For each separated region the algorithm calculates its intensity, texture and spatial centers $\bar{I}_k, \bar{T}_k, \bar{S}_k$ respectively. Additionally it modifies intensity values implementing the following filtering to eliminate intensity fluctuations pronounced:

$$J(p) = I(p), \text{if } \|T(p)\| < T_{th}$$

or

$$J(p) = \frac{1}{f} \sum_{i=1}^2 I(p_i), \text{if } \|T(p)\| \geq T_{th}$$

where $T_{th} = \max(0.65 * T_{max}, 14)$ and T_{max} denotes the $\|T(p)\|$ maximum value in the image. Updated region intensity centers computed by the mentioned filtering are denoted \bar{J}_k . All the pixels are associated with regions using a distance of a pixel p from a region s_k expressed as:

$$D(p, s_k) = \|J(p) - \bar{J}_k\| + \|T(p) - \bar{T}_k\| + \lambda * \frac{\bar{A}}{A_k} \|p - \bar{S}_k\|$$

where A_k is the area of s_k and \bar{A} is the average size of all regions, $\lambda=1$ is a regularization factor, and $\|J(p) - \bar{J}_k\|, \|T(p) - \bar{T}_k\|, \|p - \bar{S}_k\|$ are the Euclidean distances of the intensity, texture and spatial vectors respectively. So the region s_k with the smallest $D(p, s_k)$ includes the p pixel.

After the algorithm connected all pixels with all regions based on their $D(p, s_k)$ distance, the method merges regions with the closest used features implementing the distance rule. The algorithm joins KMCC regions to get finally $M = 40$, the number of required regions. Finally tiny regions are absorbed by their big neighbors. A polyp candidate region includes one or some KMCC regions that are fully or partially surrounded by detected edges. Fig. 3 illustrates some outcomes combining edge maps and KMCC algorithm that are obtained from different colonoscopy frames.

After multiple tests we determine the number of KMCC regions in the polyp is usually one or two. Three KMCC regions inside of polyp are a very rare case. When the algorithm detects such candidate it extracts the square region including mentioned KMCC regions from the given frame and scales it to 32x32 image. As a polyp classifier we used a convolution neural network trained by deep learning methods implemented in [15]. The network is an alternation of two types layers, including convolution and subsampling neurons. Convolution layers are tuned to local-size specific features, such as angles of combinations of lines. The layers located on the higher level combine more simpler features to memorize fragments of objects from the training set. The subsampling layers are used to group closest neurons in the convolution layer that makes classifier less sensitive to small changes and noise. The last classification layer is connected with all the neurons located in the previous layer and it performs the aggregation of all detected features. Because a binary classification (polyp - non-polyp) the final layer comprising only two neurons associated with each decision. After activating the network solution related to the classification neuron with the larger output value is selected.

4. Experiments and results

To estimate the performance of the proposed technique we took 200 training samples of abnormal proliferation of epithelial tissue and 200 images containing no abnormal features, but having distinctive boundaries, fecal matter, specific blood vessels and light patches in colon from the public CVC-ColonDB database. The proposed convolution network was trained deep learning Adadelta [15] algorithm for 25 minutes. Then we tested the software with new 200 32x32 pixel patches scaled from CVC-ColonDB the model demonstrated good quality with AUC=0.92. Then we took some video records of colonoscopy obtained from Arizona State University and Arizona clinics and estimated software performance for candidate region extraction and classification. In research we compared our results obtained with outcomes of some previous researches, including Tajbakhsh et al. [9] [11], Bae et al. [16] and Bernal et al. [17] [18]. Fig. 4 combines all mentioned results as FROC charts presenting the quality of models. Our technique demonstrated the quality that is compared with [9] and worse than [11].

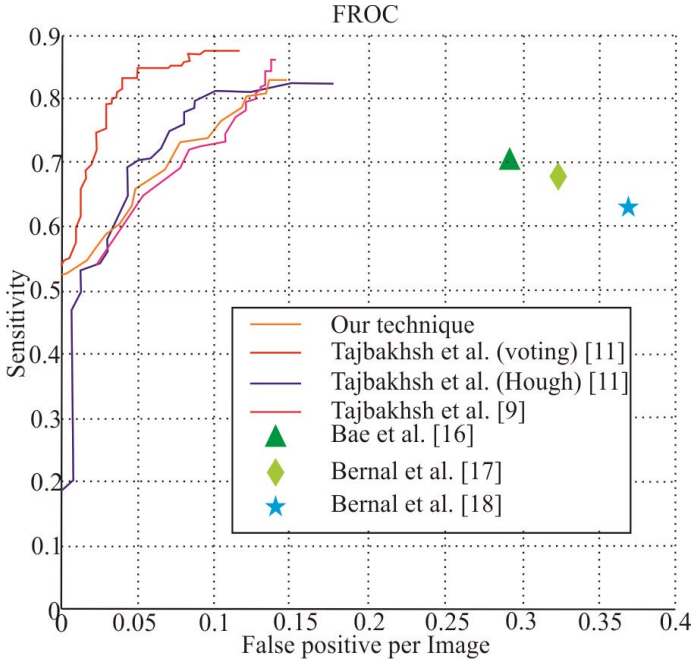


Figure 4. Different polyp detecting models comparison

Although both methods in [11] work better than our approach the proposed technique works faster. So, the model developed in [11] needs 2.6 second to process a frame and our model estimated with 4 Cores Intel Core i7-4700HQ 2,4 GHz proces-sor and 8 Gb RAM for takes 1.2 second per frame.

5. Conclusions

The obtained results demonstrate the combination of KMCC segmentation and contrasting is able to extract the most of polyp colons and the model doesn't need so many intense computational resources as it effectively eliminates the most non-polyp fragments. However the classification performance is still the question in case of unusual polyp forms or the specific polyp location that gets KMCC regions including polyp and neighboring colon tissue. To solve such task we believe the analysis of segmentations from neighboring frames allows observing colon 3D structure. The second aspect of analysis includes the tuning of algorithm settings based on concrete patient, as the current algorithm doesn't take

into account the specific colon features, such as color, texture features, and lightness. However even the proposed technique can be used by operators in their practice.

Acknowledgments

Authors thank the medical staff at the Arizona State University and clinics associated, as well as the Colon-DB research team have provided training samples for classifying model design. The research was partially supported by grants 16-47-700289 and 14-07-00127 of the Russian Fund of Basic Research. The work is performed out of the grant funds in the framework of the Program for competitive growth of National Research Tomsk State University and National Research Tomsk Polytechnic University.

References

1. Colorectal Cancer Prevention - Health Professional Vision. National Cancer Institute. <http://www.cancer.gov/types/colorectal/hp/colorectal-prevention-pdq#section/all> Retrieved 25 June 2016.
2. World Cancer Report 2014. World Health Organization. 2014
3. Russian Colorectal cancer portal <http://www.colorectalcancer.ru/> Retrieved 25 June 2016.
4. *R. L. Siegel, K. D. Miller, and A. Jemal* Cancer statistics, 2015, CA A Cancer J. Clin., vol. 65, no. 1, pp. 5-29, 2015.
5. *A. Leufkens, M. van Oijen, F. Vlegaar, and P. Siersema* Factors influencing the miss rate of polyps in a back-to-back colonoscopy study Endoscopy, vol. 44, no. 05, pp. 470-475, 2012.
6. *S. A. Karkanis, D. K. Iakovidis, D. E. Maroulis, D. A. Karras, and M. Tziavras* Computer-aided tumor detection in endoscopic video using color wavelet features in IEEE Trans. Inf. Technol. Biomed., vol. 7, no. 3, pp. 141-152, Sep. 200
7. *S. Hwang, J. Oh, W. Tavanapong, J. Wong, and P. de Groen* Polyp detection in colonoscopy video using elliptical shape feature in Proc. IEEE Int. Conf. Image Process., 2007, vol. 2, pp. II-465-II-468.
8. *Park, S.Y., Sargent, D., Spofford, L., Vosburgh, K.: A-Rahim, Y.* A colon video analysis framework for polyp detection. in IEEE Trans. Biomed. Eng. 59(5), 2012, pp. 1408-1418
9. *N. Tajbakhsh, S. R. Gurudu, and J. Liang* Automatic polyp detection in colonoscopy videos using an ensemble of convolutional neural networks in Proc. IEEE 12th Int. Symp. Biomed. Imag., 2015, pp. 79-83.
10. *N. Tajbakhsh, S. R. Gurudu, and J. Liang* A comprehensive computer-aided polyp detection system for colonoscopy videos in Information Processing in Medical Imaging. New York: Springer, 2015, pp. 327-338.
11. *N. Tajbakhsh, S.R. Gurudu, J. Liang* Automated Polyp Detection in Colonoscopy Videos Using Shape and Context Information. In IEEE Trans on Med.img. Vol.3. No.2 2016 pp.630-644.

12. *S. Dasiopoulou, E. Spyrou, Y. Kompatsiaris, Y. Avrithus, M.G. Strintzis* Semantic Processing of Color Images In Lukac R., Plataniotis K.N., eds.: Color Image Processing. Methods and Applications CRC Press, 2007 pp.259-284.
13. *S. Azyonov, K. Kostin, D. Lykom* A Texture Fuzzy Classifier Based on the Training Set Clustering by a Self-Organizing Neural Network in Comm. in Comp. and Inf. Sci., Springer vol. 542, pp. 187-195, 2015.
14. *Y. Kompatsiaris and M. G. Strintzis* Spatiotemporal Segmentation and Tracking of Objects for Visualization of Videoconference Image Sequences in IEEE Trans. on Circuits and Systems for Video Technology, vol. 10, no. 8, Dec. 2000.
15. *A. Krizhevsky, I. Sutskever, G.E. Hinton* Image classification with deep convolutional neural networks. In: Advances in Neural Information Processing Systems, 2012, pp. 1097-1105 <https://code.google.com/p/cuda-convnet/> Retrieved 25 June 2016.
16. *S. Bae and K. Yoon* Polyp detection via imbalanced learning and discriminative feature learning in IEEE Trans. Med. Imag., vol. 34, no. 11, Nov. 2015, pp. 2379-2393
17. *J. Bernal, J. Sanchez, and F. Vilarino* Towards automatic polyp detection with a polyp appearance model in Pattern Recognit., vol. 45, no. 9, 2012, pp. 3166-3182.
18. *J. Bernal, J. Sanchez, and F. Vilarino* Impact of image preprocessing methods on polyp localization in colonoscopy frames in Proc. 35th Annu. Int. Conf. IEEE EMBC, 2013, pp. 7350-7354.

УДК 519.876.2

Модель взаимодействия пользователя с распределенными информационными системами

А. С. Баканов

*Институт психологии Российской академии наук,
ул. Ярославская, д.13, Москва, Россия, 129366*

Аннотация. В статье описан подход к разработке модели взаимодействия пользователя с распределенной информационной системой. Система электронного документооборота рассматривается в качестве примера реализации распределенной информационной системы.

Ключевые слова: распределенные информационные системы, системы электронного документооборота, управление.

1. Введение

Распределенные информационные системы предназначены для предоставления пользователям доступа к информационным ресурсам, находящимся на различных удаленных серверах, а также для организации эффективного, совместного использования этих информационных ресурсов человеком [3].

Поэтому интерфейс пользователя является важной составляющей каждой информационной системы. Т.к. распределенная информационная система предназначена для предоставления пользователю информации, следовательно, от того насколько эргономично реализован пользовательский интерфейс информационной системы, зависит, насколько будет эффективно человеко-компьютерное взаимодействие [1]. Эргономичный пользовательский интерфейс обуславливает эффективность информационной системы в решении конкретных задач стоящих перед пользователем, т.е. именно пользовательский интерфейс определяет эффективность использования всей системы в целом.

2. Описание модели взаимодействия

Модель взаимодействия пользователя с распределенной информационной системой, можно представить состоящей из трех уровней: уровень представления или презентационный уровень, уровень организации доступа к данным и уровень управления распределенными данными или информационными ресурсами.

Модель уровня представления описывает взаимодействие пользователя с интерфейсом распределенной информационной системой. На уровне организации доступа к распределенным данным моделируется взаимодействие пользователя с сервером приложений. Модель уровня

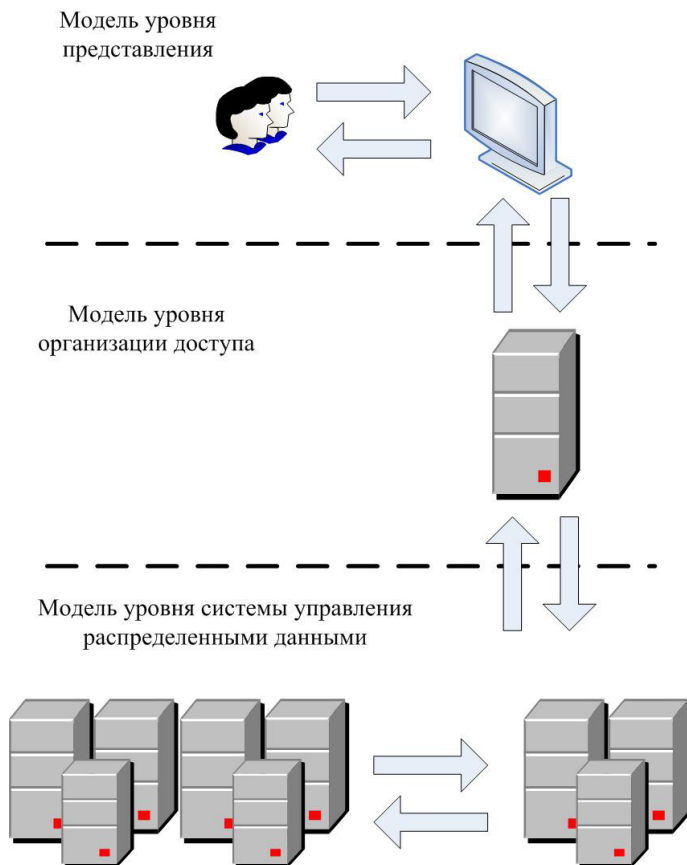


Рис. 1. Уровни модели взаимодействия

системы управления распределенными данными описывает функционирование системы управления распределенными базами данных см. рис. 1.

В качестве объекта моделирования распределенной информационной системы была использована систему электронного документооборота [2]. Моделирование осуществлялось с использованием математического аппарата теории массового обслуживания [4] и теории принятия решений [6]. Основное предназначение систем электронного документооборота - распределение заданий между подразделениями

организации, в соответствие с компетенцией подразделений, для надлежащего выполнения заданий. Распределение заданий осуществляется согласно распределению оперативно поступающих документов, таким образом, систему электронного документооборота можно представить как совокупность правил представления и обработки документов в организации. Особенностью систем электронного документооборота, ориентированных на автоматизацию управленческой деятельности является взаимосвязь способов представления информации необходимой для принятия управленческих решений конкретным человеком – лицом принимающим решения с процессами управления в конкретной организации [2]. Пользователи, осуществляющие взаимодействие с распределенной системой электронного документооборота, должны хорошо представлять общую структуру всей организации и специфику работы отдельных ведомственных подразделений [5], выполнять анализ документов и распределять задания – все это невозможно без эргономичного пользовательского интерфейса распределенной системы электронного документооборота. При моделировании взаимодействия пользователя с распределенной информационной системой, целесообразно использовать совокупность представлений, каждое из которых описывает взаимодействие пользователя под определенным углом зрения. В качестве таких представлений могут применяться: 1) представление использования распределенной информационной системы пользователями; 2) представление функционирования распределенной информационной системы; 3) представление развития распределенной информационной системы. Приоритет того или иного представления, определяется конкретными задачами, стоящими перед разработчиками модели. В рамках настоящего исследования, представление использования являлось определяющим, поскольку любая информационная система оптимально используется только тогда, если она удовлетворяет конкретные потребности пользователей. Приоритет представления применения системы предполагает учет эргономических показателей, таких как, надежность, эффективность, безошибочность, а также эстетичность пользовательского интерфейса.

3. Заключение

Учет эргономических показателей при разработке модели взаимодействия пользователя с распределенной информационной системой позволит достичь высоких показателей качества и надежности деятельности пользователя при взаимодействии с распределенной информационной системой, будет способствовать повышению эффективности взаимодействия с распределенной информационной системой в целях решения конкретных задач, стоящих перед пользователем.

Благодарности

Работа выполнена по заданию ФАНО РФ № 0159-2016-0007.

Литература

1. *Баканов А. С., Зеленова М. Е., Алдашева А. А.* Когнитивный стиль как фактор надежности работы в системе электронного документооборота // Социальные и гуманитарные науки на Дальнем Востоке /Под общ. научной ред. Ю.М. Сердюкова. Хабаровск, Изд-во ДВГУПС, 2015, № 3 (47), С. 61-67.
2. *Баканов А. С., Волчков Д. Б., Баканова Н. Б.* Модель взаимодействия человека с интеллектуальной информационной системой // Электросвязь, 2015, №4, С. 47-49.
3. *Баканова Н. Б.* Использование программно-технических комплексов для повышения эффективности контроля в системах документооборота // «Электросвязь». 2007. № 6. С. 51–53.
4. *Вишневский В. М.* Теоретические основы проектирования компьютерных сетей // - М. Техносфера 2003 с. 512 ISBN: 5-94836-011-3
5. *Гуцыкова С. В.* Технология прогнозирования эффективности деятельности сотрудников: на пути примирения альтернатив // Методы психологического обеспечения профессиональной деятельности и технологии развития ментальных ресурсов человека. Сер. «Фундаментальная психология – практике». Отв. ред. Л.Г. Дикая, А.Л. Журавлев, М.А. Холодная. – М.: “Изд-во Институт психологии РАН” 2014. С. 41 – 61.
6. *Петровский А. Б.* Многокритериальное принятие решений по противоречивыми данным: подход теории множеств. // Информационные технологии и вычислительные системы, 2004, №2, 56-66.

UDC 519.876.2

The model user interaction with distributed information systems

A. S. Bakanov

*Institute of Psychology
of Russian Academy of Sciences
Yaroslavskaia str., 13, Moscow, 129366, Russia*

This article describes an approach to the development of user interaction model with a distributed information system. Electronic Docflow System is considered as an example of the implementation of a distributed information system.

Keywords: distributed information networks, electronic docflow system, control.

УДК 519.864.3

Математическое моделирование формирования эффективных портфелей в условиях неопределенности

О. В. Бокова*, А. В. Крянев*, Д. Е. Слива*

* *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Каширское шоссе 31, Москва, Россия, 115409*

Аннотация. В докладе приведены схемы формирования эффективных инвестиционных портфелей, в том числе в рамках которых, в отличие от классических схем, неопределенность в значениях эффективности может описываться не случайными величинами, а нечеткими числами. Одна из рассмотренных схем позволяет свести задачу формирования эффективных портфелей к задаче нелинейного программирования, которая решается методом итераций. Представлены численные результаты формирования эффективных портфелей.

Ключевые слова: эффективные портфели, неопределенность, нечеткие числа, метод итераций.

1. Введение

Одна из основных задач экономики является распределение ресурсов в условиях, когда эффективность использования ресурсов после их распределения имеет неопределенный характер. В настоящее время для постановки и решения задач формирования эффективных портфелей широко используется несколько схем. Наиболее известными являются постановки Марковица и VaR (Value at Risk)- постановка. В настоящей работе рассматривается также постановка формирования эффективных портфелей, использующая нечеткие числа для описания неопределенности значений эффективности.

2. Математические модели формирования эффективных портфелей

В схеме Г. Марковица роль риска выполняет дисперсия интегральной эффективности (доходности), а роль ожидаемой величины интегральной эффективности её среднее ожидаемое значение. Математическая модель схемы Марковица в простейшей постановке без дополнительных ограничений имеет вид [1,2]:

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= (Wx, x) - \min_x, \\ m_p &= (m, x) - \max_x, \\ \sum_{i=1}^n x_i &= 1, x_i \geq 0, i = 1, \dots, n,\end{aligned}\tag{1}$$

где \vec{x} - вектор долей инвестиционного портфеля; W - ковариационная матрица доходностей R_i ; $\vec{m} = (m_1, \dots, m_n)^T$ - вектор средних ожидаемых значений доходностей $R_i, i = 1, \dots, n$.

Как известно, множество решений двухкритериальной задачи (1) определяется совокупностью решений Парето, которое в теории инвестирования принято называть множеством эффективных портфелей.

Широкое распространение получила также VaR - постановка формирования эффективных портфелей [3–6]:

$$\begin{aligned}\min(p(R(\vec{x}) < R_{risk})), \vec{x} \in X, \\ \max(R_{risk}(\vec{x})), \vec{x} \in X,\end{aligned}\tag{2}$$

где \vec{x} - вектор долей портфеля, R - интегральная эффективность портфеля, $p(R_p(\vec{x}) < R_{risk})$ есть вероятность неравенства $R_p(\vec{x}) < R_{risk}$, X есть множество ограничений на доли портфеля \vec{x} .

VaR-постановка (2) так же, как и схема Марковица (1), имеет два критерия. Первый критерий R_{risk} - правая граница интервала $R(\vec{x}) < R_{risk}$. Второй критерий, который играет роль риска, - вероятность $p(R(\vec{x}) < R_{risk})$.

Ниже для описания неопределенности значений эффективности рассматривается одна из возможных постановок формирования эффективных портфелей, использующая нечеткие числа.

В такой постановке математическая модель формирования эффективных портфелей может иметь следующий вид:

$$\begin{aligned}R_p &= \sum_{i=1}^n x_i \cdot R(x_i) - \max \\ r_p &= \sum_{i=1}^n x_i \cdot r_i(x_i) - \min \\ 0 &\leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, n, \\ \sum_{i=1}^n x_i \cdot V_i &= S,\end{aligned}\tag{3}$$

где R_p - интегральная эффективность портфеля; $R_i(x_i), i = 1, \dots, n$ - ожидаемое значение эффективности для i -го объекта вложения ресурсов; r_p - величина риска уменьшения реализуемого значения интегральной эффективности портфеля; $r_i(x_i), i = 1, \dots, n$ - величина риска уменьшения реализуемого значения эффективности для i -го объекта вложения; $x_i, i = 1, \dots, n$ - доля вложения ресурсов в i -й объект, включенный в рассматриваемые портфели; $V_i, i = 1, \dots, n$ - полный возможный объем вложения в i -й объект; S - суммарный объем ресурсов портфеля ($0 < S < V = \sum_{i=1}^n V_i$).

Задача (3), так же, как и задачи (1) и (2) - двухкритериальная с двумя нелинейными относительно искомым переменных $x_i, i = 1, \dots, n$ критериями R_p и r_p , подлежащими максимизации и минимизации, соответственно.

Величины $R_i(x_i), i = 1, \dots, n$ - ожидаемых значений эффективности и $r_i(x_i), i = 1, \dots, n$ - значений риска уменьшения реализуемых значений эффективности могут определяться на основе оценок экспертов с помощью нечетких чисел.

Для нахождения решений Парето двухкритериальной задачи (3) с двумя нелинейными критериями реализован метод итераций, согласно которому значения $R_i(x_i), i = 1, \dots, n$ и $r_i(x_i), i = 1, \dots, n$ берутся для $x_i, i = 1, \dots, n$ с предыдущего шага. Тем самым, на каждом шаге итераций нелинейная задача (3) сводится к задаче с двумя линейными критериями, решаемой с помощью алгоритма, представленного в [7]. В докладе приведены численные результаты формирования эффективных портфелей в постановке (3).

3. Заключение

В докладе представлена новая постановка задачи формирования эффективных портфелей с двумя нелинейными критериями, значения которых может определяться с помощью экспертных оценок с использованием нечетких чисел. Такая постановка задачи дает возможность учитывать зависимость характеристик возможных неопределенных значений эффективности использования ресурсов от состава формируемых эффективных портфелей.

Литература

1. *Markowitz H. M.* Mean Variance Analysis in Portfolio Choice and Capital Markets. Basil. Blackwell. 1990.
2. *Шарп У. Ф., Александер Г. Дж., Бэйли Д. В.* Инвестиции. М.: Инфра-М, 2001.
3. *Rockafellar R. T., Uryasev S.* Optimization of conditional value-at-risk. J. Risk 2(3), 2000, pp. 21–41.
4. *Lim Churlzu, Sherali Hanif D., Uryasev Stan.* Portfolio optimization by minimizing conditional value-at-risk via nondifferentiable optimization.

- Computational Optimization and Applications, 46(3), 2010, pp. 391 – 415.
5. *Крянев А. В., Лукин Г. В.* О постановке и решении задач оптимизации инвестиционных портфелей. М.:МИФИ, Препринт МИФИ 006-2001, 2001.
 6. *Klimanov S. G., Rostovsky N. S., Sliva D. E., Smirnov D. S., Udumyan D. K., Balashov R. B.* Statement and Solution of the Problems of Effective Investment Portfolios Formation for the Companies in SWU Markets. Applied Mathematical Sciences. Vol. 8, 2014, no. 107, pp. 5329 – 5335.
 7. *Крянев А. В., Черный А. И.* Численные решения оптимизационных задач для математических моделей теории инвестиций. Математическое моделирование, Том 8, №8, 1996, с. 97-103.

UDC 519.864.3

Mathematical modelling of the formation of effective portfolios in the conditions of uncertainty

O. V. Bokova*, A. V. Kryanev*, D. E. Sliva*

* *National Research Nuclear University "MEPhI", Kashirskoe shosse 31, Moscow, Russia, 115409*

The report introduces effective investment portfolio formation schemes, such that risk measure is, unlike classical schemes, not a stochastic variable, but a fuzzy number. One of the schemes depicted allows to convert the portfolio optimization problem to the nonlinear programming problem, which can be solved iteratively. Numerical results of effective portfolio formation are presented.

Keywords: Effective portfolios, uncertainty, fuzzy numbers, iterative methods.

УДК 519.248:53+ 519.216.3

Выделение трендов хаотических временных рядов физических экспериментальных данных

В. В. Борог*, В. Г. Гетманов†, И. О. Иванов*,
А. В. Крянев*, Р. В. Сидоров†

* Кафедра прикладной математики,
Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ,
Каширское ш., д.31, Москва, Россия, 115409

† Геофизический центр РАН,
Молодёжная ул., 3, Москва, 119296

Аннотация. В докладе представлены результаты исследований эффективности современных математических методов обработки временных рядов физических наблюдений в условиях наличия аномальных выбросов. Исследования показали, что рассматриваемые методы обладают свойством робастности и позволяют достаточно эффективно выделять трендовые и аномальные компоненты.

Ключевые слова: математические методы обработки данных, аномальные выбросы, робастность, тренд.

1. Введение

В данном исследовании исследовалась эффективность современных математических методов обработки временных рядов физических наблюдений на примере задачи выделения тренда в данных нейтронного монитора. Сеть нейтронных мониторов – инструмент для исследований космических излучений с энергией > 400 МэВ, позволяющий фиксировать проявления солнечной активности в виде кратковременной генерации солнечных космических лучей высокой энергии (СКЛ). СКЛ вызывают возрастание интенсивности космических лучей в виде непродолжительного «всплеска». Амплитуда всплеска невелика и может быть мало заметна с учетом статистических флуктуаций изменения интенсивности в отдельных точках временных рядов [1, 2].

2. Выделения трендов и аномалий

В задаче выделения тренда сравнивались три метода, один из которых базируется на локальных аппроксимациях [3], второй – на применении робастных кубических сплайнов [4, 5], а третий – на использовании метода спектрально-сингулярного анализа (SSA). Для выделения трендов и аномалий были выбраны синхронные 5-минутные временные ряды нейтронных мониторов с низким геомагнитным порогом, находящихся в разных точках Земли. После удаления трендов проводилось поэлементное произведение рядов остатков, что позволило увеличить отношение сигнал/шум за счет когерентного эффекта, в

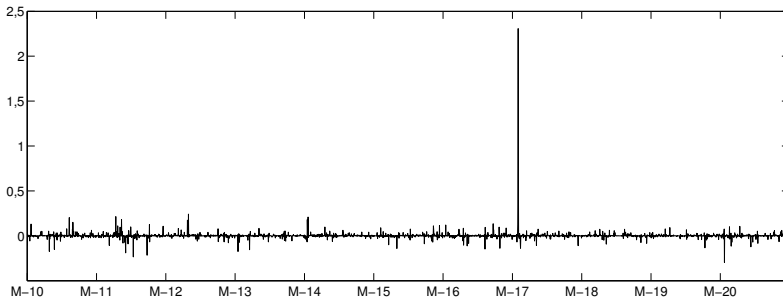


Рис. 1. Произведение остатков после удаления тренда методом SSA

результате чего, те участки временных рядов, где наблюдались СКЛ усиливали друг друга. Данные действия позволили четко увидеть на графике проявление солнечной активности. На рис.1 показан результат работы описанного алгоритма с использованием метода SSA. На графике виден одиночный пик, соответствующий моменту проявления аномальной солнечной активности (т.н. GLE №71 (ground level enhancement) которое было зарегистрировано 17.05.2012 в 03:05 по мировому времени). Такая же картина, в виде одиночного пика, наблюдается при использовании для снятия тренда метода локальных аппроксимационных сплайнов.

При использовании метода робастных кубических сплайнов, в отличие от двух предыдущих, не было получено физически значимых результатов. Отчасти, это может быть связано с его меньшей гибкостью при сглаживании сильнозашумленных, нестационарных рядов.

3. Заключение

В данной работе представлены схемы выделения трендов и аномалий в рядах нейтронов космических лучей. Два метода из трех продемонстрировали результаты, согласующиеся с физическими наблюдениями. Применение этих схем к обработке данных солнечного излучения показало, что с их помощью можно достаточно надежно выделять аномальные изменения интенсивности потока космических лучей, связанные с солнечной активностью.

Литература

1. Белов А. В., Ерошенко Е. А., Гуцина Р. Т., Дорман Л. И., Оленева В.А., Янке В. Г. Вариации космических лучей как инструмент для

- изучения солнечно-земных связей // Электромагнитные и плазменные процессы от недр Солнца до недр Земли: сборник работ, посвященный 75-летию ИЗМИРАН. Под ред. В.Д. Кузнецова. — М.: ИЗМИРАН, 2015. — С. 258–284.
2. *Борог В.В.* Основы мюонной диагностики: Учебное пособие. — М.:МИФИ, 2008. — 160 с.
 3. *Гетманов В. Г., Сидоров Р. В., Дабагян Р. А.* Метод фильтрации сигналов с использованием локальных моделей и функций взвешенного усреднения. — Измерительная техника., 2015. — по. 9. — С. 52–57.
 4. *Крянев А. В., Лукин Г. В., Удумян Д. К.* Метрический анализ и обработка данных. — М.: Наука, Физматлит, 2010.
 5. *Arsevin V.Ya., Kryanev A.V.* Generalized maximum likelihood method and its application for solving ill-posed problems // Ill-Posed Problems in Natural Sciences. A. Tikhonov(Ed.). — Netherland, VSP-BV. 1992

UDC 519.248:53+ 519.216.3

Allocation of the trends of chaotic time series for physical experimental data

V. V. Borog*, V. G. Getmanov[†], I. O. Ivanov*, A. V. Kryanev*, R. V. Sidorov[†]

** Department of Applied Mathematics
National Research Nuclear University MEPhI
Kashirskoe highway, 31, Moscow, 115409, Russia*

*[†] Laboratory of Information Technologies
Geophysical Center of the Russian Academy of Sciences
Molodezhnaya St. 3, Moscow, 119296, Russia*

In the report the results of researches of efficiency of modern mathematical methods of processing of time series of physical supervision in the conditions of presence of abnormal emissions are presented. Researches have shown that considered methods possess robust property and allow to allocate trend and abnormal components effectively enough.

Keywords: mathematical methods of data processing, abnormal emissions, robustness, trend.

УДК 517.93

Об алгебраических структурах, связанных с механикой бесконечномерных систем

С. А. Будочкина, В. М. Савчин

*Кафедра математического анализа и теории функций,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклуто-Маклая, д.6, Москва, Россия, 117198*

Аннотация. Установлена связь (S, T) -произведений, G -коммутаторов, коммутаторов с Ли-допустимыми алгебрами и алгебрами Ли. Выявлена также взаимосвязь указанных алгебраических структур с механикой бесконечномерных систем.

Ключевые слова: коммутатор, G -коммутатор, (S, T) -произведение, Ли-допустимая алгебра, алгебра Ли, генератор симметрии, оператор рекурсии.

1. Введение

Значение алгебраических структур в исследованиях состояния систем различной физической природы известно с давних пор. Так, в квантовой механике наблюдаемые являются самосопряженными операторами в некотором гильбертовом пространстве над полем комплексных чисел. Они образуют линейное пространство, в котором могут быть определены две билинейные операции:

1) йорданово умножение

$$A * B = \frac{1}{2}(AB + BA),$$

2) коммутатор

$$[A, B] = \frac{2\pi i}{h}(AB - BA),$$

где h -постоянная Планка.

Относительно первой операции множество наблюдаемых образует структуру коммутативной неассоциативной алгебры; относительно второй - структуру алгебры Ли. Указанные операции являются квантовыми аналогами обычного умножения и скобки Пуассона в классической механике.

При исследовании движения бесконечномерных систем существенную роль могут играть алгебраические структуры, связанные с уравнениями движения.

В этой связи основной целью работы является изложение достаточно общего подхода к установлению взаимосвязи между уравнениями движения бесконечномерных систем и Ли-допустимыми алгебрами (в том числе алгебрами Ли).

2. Об алгебрах Ли и Ли-допустимых алгебрах

Изложим некоторые сведения об алгебрах Ли и Ли-допустимых алгебрах, которые будут использоваться в дальнейшем.

Определение 1. [1] Алгеброй A называется линейное пространство над полем K , наделенное билинейным произведением $*$, удовлетворяющим для произвольных $a, b, c \in A$ и любом $\lambda \in K$ следующим условиям:

$$\begin{aligned} a * (b + c) &= a * b + a * c, \\ (a + b) * c &= a * c + b * c, \\ (\lambda a) * b &= a * (\lambda b) = \lambda(a * b). \end{aligned}$$

Если дополнительно выполнено (не выполнено) условие ассоциативности

$$[a, b, c] = 0 \quad \forall a, b, c \in A,$$

где $[a, b, c] = a * (b * c) - (a * b) * c$, то A есть ассоциативная (неассоциативная) алгебра.

Определение 2. [1] Алгебра Ли - это алгебра A над полем K , для которой выполняются условия

$$\begin{aligned} a * b + b * a &= 0, \\ a * (b * c) + b * (c * a) + c * (a * b) &= 0 \quad \forall a, b, c \in A. \end{aligned}$$

Определение 3. [1] Любая алгебра A над полем K и с произведением $*$ называется Ли-допустимой алгеброй, если алгеброй Ли является алгебра A , которая есть линейное пространство A над полем K , наделенное билинейным произведением

$$[a, b] = a * b - b * a \quad \forall a, b \in A.$$

Ассоциативная алгебра A есть простейший пример Ли-допустимой алгебры.

Если A - алгебра Ли, то A также является Ли-допустимой алгеброй, так как

$$[a, b] = a * b - b * a = 2a * b \quad \forall a, b \in A.$$

Однако существуют Ли-допустимые алгебры, не являющиеся алгебрами Ли. Таким образом, Ли-допустимая алгебра является обобщением понятия алгебры Ли.

Более подробные сведения об алгебрах Ли и Ли-допустимых алгебрах содержатся в работах [2, 3].

Отметим, что произведение $a * b$ элементов a и b зависит от их конкретной реализации. Различный выбор этих произведений приводит к различным алгебраическим структурам.

Пусть S_1 и S_2 - заданные операторы. Тогда их (S, T) -произведение определяется формулой

$$(S_1 * S_2)(u) \equiv (S_1, S_2)(u) = S'_{1u} S_u S_2(u) - S'_{2u} T_u S_1(u), \quad (1)$$

соответствующий G -коммутатор имеет вид

$$(S_1 * S_2)(u) \equiv [S_1, S_2]_G(u) = S'_{1u} G_u S_2(u) - S'_{2u} G_u S_1(u), \quad (2)$$

откуда при $G_u \equiv I$, где I - тождественный оператор, получаем коммутатор

$$(S_1 * S_2)(u) \equiv [S_1, S_2](u) = S'_{1u} S_2(u) - S'_{2u} S_1(u). \quad (3)$$

Обозначим через $A(U)$ линейное пространство операторов (с обычным определением операций сложения операторов и умножения на действительное число), отображающих U в U .

Отметим, что линейное пространство $A(U)$ является алгеброй над полем \mathbb{R} относительно (S, T) -произведения, G -коммутатора, коммутатора. Будем обозначать эти алгебры $\langle A(U); (S, T) \rangle$, $\langle A(U); G \rangle$, $\langle A(U); I \rangle$ соответственно.

Получим условия, при которых линейное пространство $A(U)$, наделенное (S, T) -произведением, G -коммутатором, коммутатором, образует Ли-допустимую алгебру и алгебру Ли.

Теорема 1. Если линейные операторы $S_u : U \rightarrow U$ и $T_u : U \rightarrow U$ такие, что выполняется условие

$$\tilde{G}'_u(h; \tilde{G}_u v) = \tilde{G}'_u(v; \tilde{G}_u h) \quad \forall h, u, v \in U,$$

где $\tilde{G}_u \equiv S_u + T_u$, то алгебра $\langle A(U); (S, T) \rangle$ является Ли-допустимой алгеброй.

Теорема 2. Если линейный оператор $G_u : U \rightarrow U$ такой, что выполняется условие

$$G'_u(h; G_u v) = G'_u(v; G_u h) \quad \forall h, u, v \in U,$$

то алгебра $\langle A(U); G \rangle$ является алгеброй Ли.

Теорема 3. Алгебра $\langle A(U); I \rangle$ является алгеброй Ли.

3. Симметрии операторного уравнения и связанные с ними алгебраические структуры

Проиллюстрируем связь алгебр Ли и Ли-допустимых алгебр с механикой бесконечномерных систем.

Пусть уравнения движения материальной системы представлены в операторном виде

$$N(u) = 0, \quad u \in D(N), \quad (4)$$

где $N : D(N) \subset U \rightarrow V$ - дифференцируемый по Гато оператор, U, V - линейные нормированные пространства над полем действительных чисел \mathbb{R} , $D(N)$ - область определения оператора N .

В дальнейшем будем следовать обозначениям и терминологии работ [4–6].

Рассмотрим на $D(N)$ бесконечно малое преобразование, определяемое формулой

$$\bar{u} = u + \varepsilon \tilde{S}(u), \quad (5)$$

где $\tilde{S} : D(N) \rightarrow D(N'_u)$ - генератор преобразования, N'_u - производная Гато оператора N в точке $u \in D(N)$.

Определение 4. Преобразование (5) называется симметрией уравнения (4), если для любого достаточно малого ε и любого решения u этого уравнения функция \bar{u} вида (5) также является решением этого уравнения.

В этом случае оператор \tilde{S} называется также генератором симметрии уравнения (4).

Теорема 4. Если S_1, S_2 - генераторы симметрий уравнения (4), S_u, T_u - операторы рекурсии и $\forall u \in D(N)$, $\forall h, v \in D(N'_u)$ выполнено условие

$$N''_u(h; S_u v) = N''_u(v; T_u h),$$

то (S, T) -произведение (1) также является генератором симметрии этого уравнения.

Теорема 5. Если S_1, S_2 - генераторы симметрий уравнения (4), S_u, T_u - операторы рекурсии и $\forall u \in D(N)$, $\forall h, v \in D(N'_u)$ выполнены условия

$$N''_u(h; S_u v) = N''_u(v; T_u h),$$

$$\tilde{G}'_u(h; \tilde{G}_u v) = \tilde{G}'_u(v; \tilde{G}_u h),$$

где $\tilde{G}_u \equiv S_u + T_u$, то генераторы симметрий уравнения (4) образуют Ли-допустимую алгебру относительно (S, T) -произведения (1).

Теорема 6. Если S_1, S_2 - генераторы симметрий уравнения (4), G_u - оператор рекурсии и $\forall u \in D(N)$, $\forall h, v \in D(N'_u)$ выполнено условие

$$N''_u(h; G_u v) = N''_u(v; G_u h),$$

то G -коммутатор (2) также является генератором симметрии этого уравнения.

Теорема 7. Если S_1, S_2 - генераторы симметрий уравнения (4), G_u - оператор рекурсии и $\forall u \in D(N)$, $\forall h, v \in D(N'_u)$ выполнены условия

$$N''_u(h; G_u v) = N''_u(v; G_u h),$$

$$G'_u(h; G_u v) = G'_u(v; G_u h),$$

то генераторы симметрий уравнения (4) образуют алгебру Ли относительно G -коммутатора (2).

Теорема 8. Генераторы симметрий уравнения (4) образуют алгебру Ли относительно коммутатора (3).

4. Выводы

В работе исследованы алгебраические структуры, связанные с механикой бесконечномерных систем. В частности, получены условия, при которых линейное пространство генераторов симметрий заданного операторного уравнения образует Ли-допустимую алгебру и алгебру Ли.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 16-01-00450.

Литература

1. *Савчин В. М.* Математические методы механики бесконечномерных непотенциальных систем. — М.: Изд-во УДН, 1991.
2. *Santilli R. M.* An introduction to Lie-admissible algebras // Suppl. Nuovo Cimento. — 1968. — Vol. 6. — P. 1225–1249.
3. *Santilli R. M.* Mathematical studies on Lie-admissible algebras // Hadronic J. — 1977. — Vol. 1. — P. 574–901.
4. *Савчин В. М., Будочкина С. А.* Симметрии и первые интегралы в механике бесконечномерных систем // Доклады Академии наук. — 2009. — Том 425, № 2. — С. 169–171.
5. *Budochkina S. A.* Symmetries and first integrals of a second order evolutionary operator equation // Eurasian Mathematical Journal. — 2012. — Vol. 3, no 1. — С. 18–28.
6. *Савчин В. М., Будочкина С. А.* О взаимосвязи симметрий функционалов и уравнений // Доклады Академии наук. — 2014. — Том 458, № 2. — С. 148–149.

UDC 517.93

On some algebraic structures associated with the mechanics of infinite-dimensional systems

S. A. Budochkina, V. M. Savchin

*Department of Mathematical Analysis and Theory of Functions
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

We establish connection of (S, T) -products, G -commutators, commutators with some algebraic structures associated with the mechanics of infinite-dimensional systems.

Keywords: commutator, G -commutator, (S, T) -product, Lie-admissible algebra, Lie algebra, generator of a symmetry, recursion operator.

UDC 681.3.07

Intellectual control of collective behavior of robots based on radical modeling

A. V. Chechkin ^{*}, A. Y. Potupkin [†], M. V. Pirogov [‡]

^{*} *Dr., Professor, Department of Mathematics,
Government of Russia Financial University,
Leningradsky pr.49 Moscow, Russia, 101000*

[†] *Dr., Professor,
Peter the Great Military Academy RVSN,
Balashikha, Moscow district, Russia*

[‡] *Dr., a leading expert of the company
Federal State Unitary Enterprise NPO by S.A. Lavochkin,
Khimki, Moscow region, Russia*

Abstract. We describe the approach to a collective behavior of robots management organization based on the excess modeling a wide problem domain robots action. Such modeling is the basis for the creation of intelligent control system with collective behavior of robots unconditional provision of information - system security robots groups.

Keywords: Robots, purposeful system, excess modeling, radical, radical modeling, distributed computer networks, distributed communication networks, intelligent control.

1. Introduction

We consider the purposeful system consisting of robots, where each robot separately is also a purposeful system. With the active state of the robot his private purpose consistent with the overall objective of the team and contributes to the effective work of the team [1]. The achievements of modern purpose oriented systems (PS) are well known. However, along with achievements for PS the excessive use of resources, and numerous conflicts and accidents are common. The role of informatics methods and means constantly increases in the modern word. It is especially increasing in the sphere of creation and support of the PS intended for the solution of tasks in certain subject domains. Such tendency is caused by rapid growth of capabilities of such systems and as a consequence complications in managing such systems. Most common PS has complex tiered hierarchical structure. Such systems consist of a large number of components which are also PS and so that is robots [1]. Thus, the PS can be seen as a team of robots.

This work was partially supported by RFBR grant No 16-29-04326.

2. Information system security of purposeful systems

The key problem of PS is information system security (ISS-problem). This concept was entered by A.V. Chechkin [8]. Concept of ISS includes two parts.

Information part of the ISS - is to create the excess model of general problem area PS, which is “the PS action theater”; ensuring the protection of information of the model and the logical receiving additional information required on the basis of the information available in the problem area of the PS model for the successful solution of staff tasks PS lifecycle; ensuring effective attempts to solve emergency non - staff tasks, development and self-PS on this basis;

The system part of the ISS - is to ensure system integrity and efficient functioning of the system, taking into account all the effects of treatment and solving the tasks in the problem area PS, including avoiding conflicts emerged in the problem area PS and PS development.

ISS requires intellectual management of PS. That means that it is necessary to be able to solve not only staff, but also non-staff tasks, which are the “PS growth points”, modify the PS and PS development.

The modeling of the expanded problem area of PS in the form medium of radicals (multi-tired radical model) is the foundation for the intellectual management. Such modeling is called radical modeling [3]. Intellectual management is based also on idea of radical programming which, in turn, is based on the systematic accounting of the semantics of programs [5].

Radical modeling and radical programming are based on the concept of the medium of radicals by A.V. Chechkin [6-8] and a formalism of schemes of radicals (the universal RADICAL language [2, 9, 10]). This language can be applied in any problem area.

The concept of expanded problem area of PS, i.e. “the robots team action theater” includes the objects which directly belong to the PS and its environment, with their properties and suprasystem connections of such objects. Such objects have significant impact on ISS of PS. Including consideration of the potential resource requirements of PS. Such as information resources and not only material or energy. It is essential for functioning of the developing systems and the description of their behavioral activity.

3. Advantages of radical modeling

3.1. Redundancy of radical model of PS reflects expanded problem area factors influencing ISS of PS. The problem area of PC covers: the robots and another components of the PS and components of that suprasystem within the PS functions; connections between of all components; the service personnel and its communications with PS, as well communication between experts. The problem area includes developers, manufacturers, suppliers of PS; numerous and various documentation of the system in

particular, technical, legal, and financial documentation, various governing and operating documents. All staff tasks of PS (target, touch and certified tasks), and also various methods and solutions of these tasks (including heuristics, algorithms, hard- and software), many other things, and, taking into account possible variability, belong to expanded problem area of PS.

All staff tasks of PS (goal, touch and certified tasks), and also various methods and solutions of these tasks (including heuristics, algorithms, soft- and hardware), many other things, and, taking into account possible variability, belong to expanded problem area of PS.

The objective unity of expanded problem area of PS requires its representation in a unified form of the medium of the radicals (radical model). In such model all information units are expressed in the form of radicals. Therefore such type of excessive modeling is called radical modeling. The radical is any functional system which has two types of states – active and passive [8].

The medium of radicals requires the operating system to activate various parts of the environment. It any point in time the operating system highlights active part of radical model which is called systemquantum. The other part of the model is in passive (switch-off) state and defines potential opportunity of the radical model.

The systemquantum carries out current functions of the life cycle of PS (goal, touch or certified functions).

3.2. Universality of the language of radical modeling of PS for various objects of problem area of PS and various PS. Designs of the universal RADICAL language are as follows. The alphabet is fixed. Names of radicals are constructed from alphabet symbols. Chains of radicals are constructed from the names of radicals and an arrow symbols.

For example, $Name1 \rightarrow abc \rightarrow Name2$; is a chain of radicals. (Here ‘;’ is the end of the chain symbol.)

The scheme of radicals is defined as a set of chains of radicals.

The radical environment, i.e. radical model of PS, is described by the scheme of radicals. Standard radicals — ‘unicums’ (unique objects) and containers are introduced.

Unicums correspond to components of problem area. The names of unicums start with ‘*u*’. Containers correspond to properties and connections of the components. The names of containers start with ‘*c*’. System radicals of $d[1], d[2], \dots$ call the directions in containers. Below is an example symbolical representation of the scheme of radicals:

$$c_b_t \rightarrow d[1] \rightarrow uB; d[2] \rightarrow uT1; d[3] \rightarrow uT2;$$

$$c_exe_source \rightarrow d[1] \rightarrow uA; d[2] \rightarrow uT1;$$

$$c_exe_receiver \rightarrow d[1] \rightarrow uA; d[2] \rightarrow uF;$$

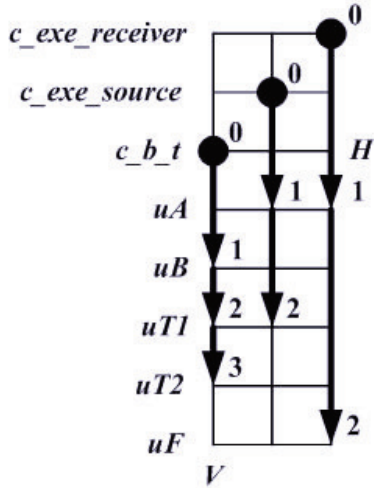


Figure 1. Geometrical representation of the scheme of radicals

Here in the container *c_b_t* unicums B, T1 and T2 are available. It is a database B and its tables T1 and T2. The executable module A and the table T1 which is data source for this module are enclosed in the container *c_exe_source*. The container *c_exe_receiver* contains the executable module A and file F. This file is the receiver of data filled by the working module A. There are various representations of schemes of radicals. In Fig. 1 geometrical (vector) representation of the above scheme of radicals is presented.

On the plain the rectangular system of coordinates is introduced. With horizontal axis H facing right. And vertical axis V facing down. Horizontals correspond to the types of containers and the unicums connected by them. Verticals correspond to examples of containers. Tabular representation of the same scheme of radicals is given in Fig. 2.

Here the fields A, D, E, F are integer, the fields B and C are strings, and primary key is the field A.

Usage of the schemes of radicals can be similarly represented: purposes of PS; resources of all types; conflicts; rules; inquiries; tasks and methods of their decision; all significant components of problem area of any PS, their properties and connections. Such representations both in static and in dynamic state.

In both geometrical and tabular representation of schemes of radicals sections of the radical environment can be formed by removal of certain verticals and horizontals and pasting of the remaining fragments.

The considered types of representations aren't unique.

<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>
-3	<i>c</i>	<i>c_exe_receiver</i>			0
-2	<i>c</i>	<i>c_exe_source</i>		0	
-1	<i>c</i>	<i>c_b_t</i>	0		
1	<i>u</i>	<i>uA</i>		1	1
2	<i>u</i>	<i>uB</i>	1		
3	<i>u</i>	<i>uT1</i>	2	2	
4	<i>u</i>	<i>uT2</i>	3		
5	<i>u</i>	<i>uF</i>			2

Figure 2. Tabular representation of scheme of radicals

They make a basis for the visual and flexible user interface of the radical environment. The considered geometrical and table representations show possibility of application for schemes of radicals of numerous, various powerful tools of the graph theory and databases.

3.3. The standard technology of solving staff tasks of life cycle of PS is based on search of the demanded scheme of radicals. Search is carried out in accordance with the initial and target schemes of a task (dedicated, touch or certified).

3.4. Permanent certification of radical model of PS provides testing of all schemes of radicals, recovery of the damaged schemes and elimination of conflict situation in the model. Certification of all radicals in the library of standard radicals is carried out. All solution methods for the standard tasks and corresponding to them soft- and hardware represented in schemes of radicals and included in radical model of problem area of system are verified.

4. Radical model like tool

The soft- and hardware implemented radical model of PS is an Instrumental tool for Ensuring of Complex Development (IECD) of such PS. This means is intended for creation of new components of PS (including the components relating to soft- and hardware), and also for creation of new connections between components within suprasystem of PS. In the first place - are new soft- and hardware (radical programming).

IECD of PS serves for continuous updating (in touch process) of the data and knowledge of all of the problem area of PS. This means it is accountable for the organization of process of self-training and development of radical model in the mode of "trial and error" at the solution of non-staff tasks of life cycle of PS.

At the same time continuous testing, certification and conflict-free inclusion of information about new objects of problem area in radical model of PS is performed (see above 3.4).

Thereby, within and under control of radical model and by means of activation of the imbedded rules, ultracontainers, development of PS, in particular, creation and development of soft- and hardware is carried out.

The radical model reflects semantics of all soft- and hardware of PS. Such model allows consideration, including, resource requirements of PS and is thereby, moderately (rather) excess system for consideration of PS as locally open and constantly developing system.

These circumstances allow to organize purposeful synthesis of system-quants by activation of part of radicals and to realize purposeful behavior of robots team.

5. Conclusion

Only on the basis of a radical model intellectual control is possible to organize the collective behavior of robots and its development with a constant PS ISS. Radical model of the expanded problem area PS and its radical scheme implemented via soft- and hardware - a way to ensure the intellectualization of the PS and conflict-free solution of goals tasks, sensory and certification tasks of the team of robots, the real way to ensure PS ISS.

The uniform radical model of the expanded problem area PS, IECD of PS, the corresponding schemes of radicals realized by means of soft- and hardware is the most "main thing", without which significant progress in the management of collective robots are now impossible.

There is an ideological predecessor of radical programming in domestic informatics. In the mid-eighties the academician A.P. Ershov has published article about a programming Lexicon [4]. In this article A.P. Ershov has proved need language programming environment.

Lexicon has to contain semantics of all problem area. Also the system has to contain the formal notation for expression of all valid designs which are used at a formulation and the solution of various tasks, and also at synthesis, transformation and verification of programs. The program expressed by means of the Lexicon contains the description of the semantics in the text. The Lexicon is open system. He differs in it from a programming language. Besides, the Lexicon is a developing system of carefully selected designations.

The purposes formulated by A.P. Ershov become achievable by means of radical modeling, schemes of the radicals realized by means of modern soft- and hardware.

This article was briefly considered radical modeling technology and radical programming, their advantages in relation to the team of robots.

References

1. *Potyupkin A. Yu., Chechkin A.V.* Intellectualization of Complex Technical Systems [In Russian]. Moscow: Military Academy RVSN Press, 2013, 208 p.
2. *Vasenin V.A., Pirogov M.V., Chechkin A.V.* Radical Modeling and Engineering of Complex Software Systems [In Russian] // Software Engineering – 2014. - No 10. P. 3 – 10.
3. *Gubanov A.A., Pirogov M.V., Pleshev N.N., Rozhkov V.V.* Radical Modeling of a Problem Domain of Planning and Control of an Unmanned Spacecraft [In Russian] // Neurocomputers: Development, Application. 2015.
4. *Ershov A.P.* Preliminary Considerations on Programming Lexicon [In Russian] // Selected Works. Novosibirsk: Siberian Branch of RAS Press. 1994. P. 395 - 406
5. *Pirogov M.V.* Radical Programming [In Russian] // Software Engineering – 2013, No 4, P. 2–15.
6. *Soboleva T.S., Chechkin A.V.* Discreet Mathematics. Advanced Course.[In Russian] Moscow: Kurs Press Center, INFRA-M, 2016–278.
7. *Chechkin A.V.* Mathematical Informatics. [In Russian] Moscow: Nauka, 1991. 412 p.
8. *Chechkin A.V.* Providing Information System Safety of a Complex System Based on the medium of Neuroradicals of its problem Domain [In Russian] // Neurocomputers: Development, Application – 2008, No 7, P. 6–11.
9. *Chechkin A.V., Evgrafov A.E., Rozhkov V.V., Loschenkov V.I., Pirogov M.V.* Applications of Radical Schemes for Description of a Problem Domain of an Automated Complex of Planning and Control [In Russian] // Information Measuring and Control Systems. 2009. V. 7. No 3. P. 5–11.
10. *Chechkin A.V., Pirogov M.V.* Intellectual Control of Purposeful Systems on a Base of Radical Modeling [In Russian] // Control on Evolution of Macro Scale Systems MLSD'2014: Conference Proceedings, 180–185. Eds. Vasiliev S.N., Cvirkun A.D. V.A. Trapeznikov Institute of Control Sciences of RAS. – Moscow: ICS RAS Press. 2014.

УДК 517.15, 517.95, 519.62, 535.4, 621.38

Синтез профиля толщины тонкопленочной обобщенной волноводной линзы Люнеберга методом поперечных сечений

Г.Д. Дашицыренов*, К.П. Ловецкий*, Н.Э. Николаев*[†],
А.Л. Севастьянов*, Л.А. Севастьянов*[‡]

* *Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо-Макляя, д.6, Москва, Россия, 117198*

[†] *Кафедра прикладной физики,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо-Макляя, д.6, Москва, Россия, 117198*

[‡] *Лаборатория теоретической физики,
Объединённый институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980*

Аннотация.

В работе Люнеберга предложена модель идеального оптического прибора (в рамках геометрической оптики), впоследствии названного линзой Люнеберга. Позднее классическую линзу Люнеберга включили в семейство идеальных оптических приборов – обобщенных линз Люнеберга. В работе Чернике было показано, что локальное увеличение толщины волноводного слоя приводит к локальному замедлению фазовой скорости распространяющейся волноводной моды. Этот эффект привел к идее изготовления волноводных (двумерных) линз Люнеберга взамен объемных (трехмерных). В работе исследуются многослойные ТОВЛ.

В основе этого метода лежит адиабатическое приближение асимптотического разложения локально-плоских волн, упрощенное двумя дополнениями: 1) в производных адиабатических волноводных мод учитываются только вклады нулевого порядка; 2) вместо касательных плоскостей в точках нерегулярных грани для формулировки граничных условий используются их приближения «горизонтальными проекциями».

Ключевые слова: многослойные интегрально-оптические волноводы, обобщенные линзы Люнеберга, метод поперечных сечений.

1. Введение

Нас интересует класс так называемых многослойных интегрально-оптических волноводов, состоящих из однородных диэлектрических слоев постоянной или переменной толщины. Если толщины слоев постоянны и границы раздела между ними являются параллельными плоскостями, волноводы называются регулярными планарными открытыми. Их теоретическое (аналитическое) описание реализовано

около полувека назад и изложено во многих обзорах и книгах. Систематическое описание численных (компьютерных) моделей регулярных планарных открытых волноводов встречается реже (см., например, [1,2]). Если один или несколько слоев имеют переменную толщину, волновод называется нерегулярным. Класс волноводов с плавным изменением толщины, называется плавно-нерегулярными интегрально-оптическими волноводами. Теория таких волноводов, так называемый метод поперечных сечений, создана Шевченко В.В. и опубликована в [3]. Мы используем частным вариант этого метода для проектирования тонкопленочной обобщенной волноводной линзы Люнеберга [4].

2. Метод поперечных сечений

В методе поперечных сечений распространение поляризованного монохроматического света в плавном диэлектрическом переходе (нерегулярном вдоль оси Oz) между двумя регулярными планарными диэлектрическими волноводами описывается с помощью полного набора мод регулярного волновода сравнения [5,6]. Могут присутствовать моды, бегущие слева направо, и моды, бегущие справа налево. Решения распространяющихся мод в случае регулярного волновода описаны в работах [1,7]. В данной работе нас интересует закон эволюции отдельно взятой моды, эволюция ее дисперсионного соотношения при распространении в плавном переходе. Рассмотрим отдельный вклад направляемой моды с коэффициентом фазового замедления КФЗ β_j :

$$C_j^+(z) \psi_j^+(x; z) \exp \left\{ -ik_0 \int^z \beta_j(z) dz \right\} \quad (1)$$

3. Дисперсионные соотношения для однородных плавных переходов

Задача описания направляемой ТЕ-моды в плавном переходе (в рамках метода поперечных сечений) при каждом z формулируется в виде матричной модели регулярного волновода сравнения. Так что КФЗ $\beta_j(z)$ в зависимости от толщины волноводного слоя $d(z)$ является решением нелинейного алгебраического уравнения (1):

$$\det \left(\hat{M}_4^{TE}(d(z), \beta^j(z)) \right) = 0 \quad (2)$$

Аналогично получается уравнение для КФЗ ТМ-моды.

Хорошо известно, что волноводная дисперсионная зависимость $\beta^j(d(z))$ принимает значения в интервале $\beta^j \in (n_s, n_f)$. Причем, для

каждого корня β^j существует своя критическая толщина (см., например, [1])

$$d_{cr}^j = \frac{\arctg(\gamma_c(n_s)/\chi_f(n_s))}{\chi_f(n_s)} + j\pi,$$

начиная с которой $\beta^j > n_s$. Отметим также, что $\beta^j(d(z)) \xrightarrow{d(z) \rightarrow \infty} n_f$.

Нелинейное трансцендентное алгебраическое уравнение (2) при каждом фиксированном $d > d_{cr}^m > \dots > d_{cr}^1 > d_{cr}^0$ имеет конечное число корней $\beta^0 > \beta^1 > \beta^2 > \dots > \beta^m$. Чтобы устойчивым образом вычислить дисперсионные зависимости $\beta^j(d)$ при $d > d_{cr}^j$, применяем следующую процедуру численного решения уравнения (2).

4. Алгоритм

Вначале задаем параметры волновода и излучения: комплексные числа n_s, n_f, n_c и вещественное число λ . Нормируем переменные длины в единицах λ : $\tilde{x} = x/\lambda, \tilde{d} = d/\lambda$ и $\tilde{k} = 2\pi/\tilde{\lambda} = 2\pi$. В нормированных единицах вычисляем начальную точку каждой дисперсионной кривой, а именно

$$\left(\tilde{d}_{cr}^j\right)^{TE} = \frac{\arctg\left(\tilde{\gamma}_c(n_s)/\tilde{\chi}_f(n_s)\right) + j\pi}{\tilde{\chi}_f(n_s)}, j = 0, \dots, N$$

в которой $\beta^j\left(\tilde{d}_{cr}^j\right) = n_s$.

Начиная с этой начальной точки движемся с наперед заданным малым шагом $\Delta\tilde{d}$ в сторону увеличения толщины волновода. В каждой новой точке \tilde{d}_i матричные элементы матрицы $\hat{M}_4^{TE}\left(\tilde{d}(z), \beta^j\right)$, $\hat{M}_4^{TM}\left(\tilde{d}(z), \beta^j\right)$ являются комплексными числами. Следовательно, и $\det\left(\hat{M}_4^{TE}\left(\tilde{d}(z), \beta^j\right)\right)$, и минимальные по норме собственные значения λ_{\min}^{TE} - комплексные числа. Условие (2) эквивалентно обращению в ноль минимальных собственных значений λ_{\min}^{TE} . Процедура вычисления λ_{\min}^{TE} , проще и экономичнее, чем вычисление определителя $\det\left(\hat{M}_4^{TE}\left(\tilde{d}(z), \beta^j\right)\right)$, поэтому вместо минимизации функционала $F(\beta^j) = \det\left(\hat{M}_4^{TE}\left(\tilde{d}(z), \beta^j\right)\right)$ по $\beta^j \in \mathbb{R}$, мы решаем эквивалентную задачу минимизации функционала $F(\beta) = |\lambda_{\min}(\beta)|$ со штрафом $F_1(\beta^j) = \left|\beta_i^j - \beta_{i-1}^j\right|^2$ для обеспечения непрерывности дисперсионной

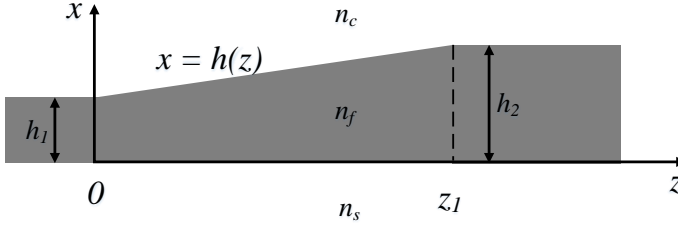


Рис. 1. Схема волновода типа "рупор".

кривой $\beta(d)$ при численной реализации. Весовой коэффициент q выбираем согласованным с величиной шага $\Delta\tilde{d}$, например $q \sim \left| \beta_i^j - \beta_{i-1}^j \right|^{-1}$. И β , и $\lambda_{\min}(\beta)$ - комплексные числа, поэтому в качестве метода минимизации функции многих переменных используем метод деформируемого многогранника Нелдера-Мида.

После построения дисперсионной кривой $\beta^0(d(z))$ вычисляем последовательно $\beta^1(d(z))$, $\beta^2(d(z))$ и т.д. в необходимом для исследования количестве.

Аналогично для ТМ-моды вычисляем

$$\left(\tilde{d}_{cr}^j\right)^{TM} = \frac{\arctg\left(\tilde{\gamma}_c(n_s) n_f^2 / \tilde{\chi}_f(n_s) n_c^2\right) + j\pi}{\tilde{\chi}_f(n_s)}, j = 0, \dots, N$$

И, начиная с точки \tilde{d}_{cr}^0 , строим дисперсионную кривую $\beta_{TM}^0(d(z))$ с помощью аналогичной процедуры минимизации. Далее вычисляем последовательно $\beta_{TM}^1(d(z))$, $\beta_{TM}^2(d(z))$ и т.д. в необходимом количестве до $\beta = n_f$ в случае трехслойного волновода.

5. Дисперсионные соотношения для неоднородных плавных переходов

Задача описания направляемой ТЕ-моды в неоднородном (см. рис1) плавном переходе (в рамках метода поперечных сечений) формулируется при каждом z в виде матричной модели регулярного четырехслойного волновода сравнения. Так что, КФЗ $\beta_j(z)$ в зависимости от толщин основного d и дополнительного $h(z)$ волноводных слоев является решением уравнения (см., например, [1]):

$$\det\left(\hat{M}_6^{TE}(d, h(z), \beta^j(z))\right) = 0. \quad (3)$$

Аналогично выписывается уравнение для КФЗ ТМ-моды:

$$\det \left(\hat{M}_6^{TM} (d, h(z), \beta^j(z)) \right) = 0. \quad (4)$$

Устойчивые численные процедуры решения нелинейных трансцендентных уравнений (3) и (4) содержат по отношению к алгоритму решения уравнения (2) дополнительный сегмент. В случае приближения значения $\beta^j(z)$ к величине n_f возникающая дополнительная неустойчивость алгоритма ликвидируется с помощью введения дополнительного штрафа, позволяющего обойти непосредственное вычисление $\beta^j(z)$ в малой окрестности значения n_f .

6. Тонкопленочная обобщенная волноводная линза Люнеберга

Тонкопленочную обобщенную волноводную линзу Люнеберга проектируем в виде дополнительного утолщения волноводного слоя $h(r)$, обеспечивающего деформацию набежавшей волноводной моды, а значит и фокусировку волнового фронта и семейства локально ортогональных ему лучей посредством сформированного утолщением распределения эффективного коэффициента преломления $n_{eff}(r, f) = n(r, f)$, $r \leq R$ (см., например, [4]), так что распределение эффективного коэффициента фазового замедления моды равно $\beta_{TE}^j(r, f) = \beta_{TE}^j n_{eff}(r, f)$, $r \leq R$ ($\beta_{TM}^j(r, f) = \beta_{TM}^j n_{eff}(r, f)$, $r \leq R$) [4]. Дополнительное утолщение волноводного слоя может быть сформировано как из материала основного волноводного слоя, так и из другого материала с показателем преломления n_l .

Направляемая мода регулярного трехслойного волновода с толщиной волноведущего слоя d/λ обладает коэффициентом фазового замедления β_{TE}^j . При набегании на линзу волноводная мода деформируется дополнительным волноводным слоем, изменяющим толщину от $h(R) = 0$ на краю линзы до $\tilde{h}_{\max} = h(0)$ в ее центре, а затем снова до 0 на противоположном краю линзы. При этом $\beta_{TE}^j(r, f) = \beta_{TE}^j n_{eff}(r, f)$, $r \leq R$ изменяется от $\beta_{TE}^j(d, 0)$ до $\beta_{TE}^j(d, 0) = \beta_{TE}^j n_{eff}(0, f)$. Функции $\beta_{TE}^j(d, h(z))$ и $\beta_{TE}^j(r, f)$ непрерывны, монотонно возрастающие и при $\beta_{TE}^j(0, f) \leq \beta_{TE}^j(d, h(z)) \leq \beta_{TE}^j(R, f)$ уравнение $\beta_{TE}^j(d, h(z)) - \beta_{TE}^j(r, f) = 0$ однозначно разрешимо относительно (см. рис.2) искомого профиля толщины $h_{TE}^j(r)$ (см. рис.2а). Аналогичным образом по $\beta_{TM}^j(d, h(z))$ и $\beta_{TM}^j(r, f) = \beta_{TM}^j n_{eff}(r, f)$, $r \leq R$ мы устанавливаем искомый профиль толщины

$h_{TM}^j(r)$ (см. рис.2б). Профили толщины дополнительного волноводного слоя $h_{TE}^j(r)$ и $h_{TM}^j(r)$ для различных волноводных мод приведены на рис.3.

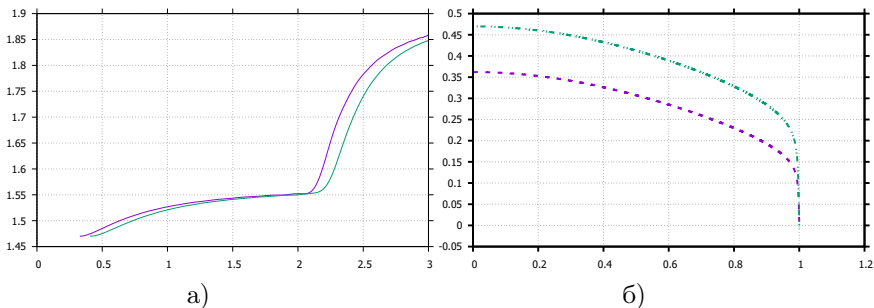


Рис. 2. Дисперсионная зависимость и профиль толщины для нулевых ТЕ- и ТМ-мод.

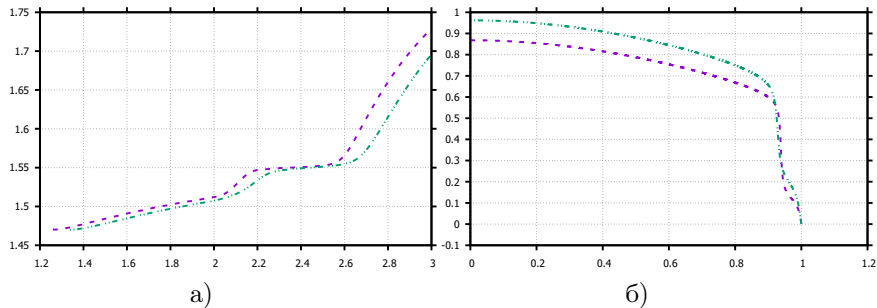


Рис. 3. Дисперсионная зависимость и профиль толщины для первых ТЕ- и ТМ-мод.

7. Заключение

В работе рассмотрены проблемы численной реализации метода волноводов сравнения эволюции выделенной моды в плавном переходе из одного планарного регулярного открытого волновода в другой. В работе используется подход разложения искомого решения по фундаментальным системам решений (ФСР) в слоях и последующего их сшивания на границах.

При однократном решении этих вспомогательных задач не возникает никаких вычислительных проблем. В случае многократного их решения в близких точках перехода дополнительно предъявляется требование близости в соответствующих вычисленных мод. Это требование усложняет используемый вычислительный алгоритм. Далее, если этот переход не является однородным и дополнительный волноводный слой обладает более высоким показателем преломления n_l , чем основной n_f , дисперсионная кривая пересекает уровень $\beta = n_f$. При этом возникает дополнительное вырождение, которое приводит к локальной неустойчивости.

Нами предлагается алгоритм, устойчивый к данной неустойчивости. В рассматриваемом случае в области $\beta > n_f$ у дисперсионных кривых, кроме TE_0 - и TM_0 -, возникают области (нелокальные) аномальной дисперсии. В этих областях, во-первых, возникают численные неустойчивости, во-вторых, происходит критическое сближение различных дисперсионных кривых. Предлагаемый алгоритм является устойчивым к обоим этим явлениям. Работа алгоритма, реализованного в среде Delphi, продемонстрирована на построении отдельных дисперсионных кривых и на построении семейства дисперсионных кривых, демонстрирующих их критическое сближение. В качестве дополнительного результата синтезированы профили толщин дополнительного (нерегулярного по толщине) волноводного слоя, формирующего тонкопленочную обобщенную волноводную линзу Люнеберга.

Благодарности

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ № 14-01-00628, № 15-07-08795 и № 16-07-00556.

Литература

1. *Ayrjan E.A., Egorov A.A., Michuk E.N., Sevastyanov A.L., Sevastianov L.A., Stavtsev A.V.* Representations of guided modes of integrated-optical multilayer thin-film waveguides // Preprint JINR E11-2011-31, Dubna, 2011, 52 P.
2. *Егоров А.А., Ловецкий К.П., Севастьянов А.Л., Севастьянов Л.А.* Интегральная оптика: теория и компьютерное моделирование. Монография. - Москва: РУДН, 2015 г. 330 с.
3. *Шевченко В.В.* Плавные переходы в открытых волноводах (Введение в теорию). - М.: Наука, 1969.
4. *Егоров А.А., Ловецкий К.П., Севастьянов А.Л., Севастьянов Л.А.* Моделирование направляемых (собственных) мод и синтез тонкопленочной обобщенной волноводной линзы Люнеберга в нулевом векторном приближении // Квантовая Электроника, 2010, Т. 40, № 9, С. 830-836.

5. Шевченко В.В. О спектральном разложении по собственным и присоединенным функциям одной несамосопряженной задачи типа Штурма-Лиувилля на всей оси // ДУ, 1979, Т. 15, № 11, С. 2004-2020.
6. Л.А. Севастьянов. Полная система мод открытого планарного волновода. // Тезисы докладов VI Международной научно-технической конференции “Лазеры в науке, технике, медицине”. 1995. Суздаль. – М.: Изд. ИПЭ РАН, 1995, С. 72-76.
7. Lovetskiy K.P., Sevastyanov L.A., Sevastyanov A.L., Mekeko N.M. Integration of highly oscillatory functions // Mathematical Modelling and Geometry, 2014. - Vol. 2, No 3. p. 11-27.

UDC 517.15, 517.95, 519.62, 535.4, 621.38

Thickness profile synthesis of thin-film generalized waveguide luneburg lens by cross-sections method

G. D. Dashitsyrenov*, K. P. Lovetskiy*, N. E. Nikolaev*[†],
A. L. Sevastianov*, L.A. Sevastianov*[‡]

* *Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

[†] *Department of Applied Physics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

[‡] *Laboratory of Theoretical Physics
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

In the work by Luneburg a model of an ideal optical device (in the framework of geometrical optics) was proposed, later called the Luneburg lens. Subsequently the classical Luneburg lens was included in the family of the ideal optical instruments – the generalized Luneburg lens. In the work by Zernike it was shown that a local increase in thickness of the waveguide layer leads to a local decrease of phase velocity of propagating waveguide mode. This effect has led to the idea of manufacturing the waveguide (two-dimensional) Luneburg lens instead of volume (three-dimensional) ones. We investigate the class of multilayered thin-film generalized waveguide lenses.

Numerical studies of such waveguides are conducted by the cross-sections method. This method is based on the adiabatic approximation of the asymptotic expansion of locally plane waves simplified by two additions: 1) in derivatives for adiabatic waveguide modes only the zero-order contributions are taken into account; 2) instead of the tangent planes at the points of irregular boundaries for the formulation of boundary conditions their approximations of “horizontal projections” are used.

Keywords: multi-layered integrated-optical waveguides, generalized Luneburg lens, the cross-sections method.

УДК 517.9

Анализ управляемых динамических систем на основе применения ТС-моделей и модифицированных линейных матричных неравенств

О. В. Дружинина*, О. Н. Масина[†], Е. В. Игонина[‡]

* *Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН,
ул. Вавилова, д. 40, Москва, Россия, 119333*

[†] *Кафедра математического моделирования
и компьютерных технологий,
Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина,
ул. Коммунаров, д. 28, Елец, Россия, 399770*

[‡] *Кафедра прикладной математики и информатики,
Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина,
ул. Коммунаров, д. 28, Елец, Россия, 399770*

Аннотация. Разработан подход к синтезу управления динамическими системами, базирующийся на представлении исходных систем моделями Такаги–Суджено (ТС-моделями) и на применении теорем метода функций Ляпунова и модифицированных линейных матричных неравенств. Рассматриваемая нелинейная модель представлена в виде выпуклой комбинации нескольких линейных систем, гладко связанных между собой посредством функций принадлежности. Для построения стабилизирующего логического регулятора использована процедура динамической параллельной распределенной компенсации. Решение вопроса об устойчивости синтезированной ТС-модели сведено к анализу свойств модифицированных линейных матричных неравенств, полученных на основе достаточных условий асимптотической устойчивости в терминах функций Ляпунова. На примере перевернутого маятника осуществлен синтез управления с переключением. Исследована ТС-модель перевернутого маятника и найдены параметры стабилизирующего ДПРК-регулятора. При проведении вычислительного эксперимента использован алгоритм Лоусона решения систем линейных и квазилинейных дифференциальных уравнений. Выполнен сравнительный анализ качественных и численных результатов моделирования маятниковой системы. Предложенный подход к синтезу управления может быть использован для моделирования управляемых систем в условиях неопределенности.

Ключевые слова: управляемые динамические системы, устойчивость, функция Ляпунова, линейные матричные неравенства, ТС-модель.

1. Введение

Одним из современных подходов к решению задачи синтеза управления объектами в условиях неопределенности является применение систем с переключением, относящихся к классу непрерывно-дискретных систем. Математические модели систем управления с переключением представляют собой модели, в которых непрерывная динамика, порождаемая в каждый момент времени одной из априорно

заданного набора непрерывных систем, перемежается с дискретными операциями, подающими команды либо на мгновенное переключение с одной системы на другую, либо на мгновенную перестройку с заданных текущих координат на другие координаты, либо на то и другое одновременно. Исследование систем с переключением и решение различных задач управления для них позволяет значительно расширять область их практического применения. В [1] рассматриваются задачи достижимости, верификации и синтеза управлений для гибридных систем. Системы с переключением могут быть представлены с помощью кусочно-линейной аппроксимации сложной нелинейной системы дифференциальных уравнений. В [2] изучены вопросы стабилизации многосвязной управляемой манипуляционной системы с использованием кусочно-постоянного управления.

Важной составляющей при построении систем с переключением является соблюдение условия устойчивого их функционирования. Эффективным средством анализа устойчивости и синтеза управлений являются различные модификации метода функций Ляпунова, представленные в работах [3, 4]. В многосвязных системах для управления непрерывным объектом часто используются цифровые регуляторы. Для формирования управления и стабилизации динамических систем в условиях неопределенности целесообразным является применение логических регуляторов. В [5] охарактеризована область использования логических регуляторов, рассмотрены вопросы моделирования и стабилизации динамических систем с логическими регуляторами, дано развитие методов Ляпунова исследования устойчивоподобных свойств указанных систем.

В настоящей работе предложен подход к синтезу управления системы с переключением, базирующийся на использовании логического регулятора и представлении исходной системы моделью Такаги–Суджено (ТС-моделью). Для построения логического регулятора использована процедура динамической параллельно распределенной компенсации (ДПРК). Получены условия устойчивости в виде модифицированных линейных матричных неравенств. На примере системы управления перевернутым маятником осуществлен синтез управления маятниковой системы с переключением. Определены параметры логического ДПРК-регулятора, стабилизирующего перевернутый маятник, и проведен вычислительный эксперимент в компьютерной среде MATLAB. Предлагаемый в настоящей статье подход основан на развитии подхода К. Танаки и Х.О. Ванга [6].

2. Построение и анализ устойчивости переключательной системы управления, описываемой ТС-моделью

В ряде задач управления изучаемые нелинейные системы удобно описывать с помощью ТС-моделей [6]. Универсальность подхода

на основе ТС-моделей заключается в том, что любая гладкая функция (представляющая, например, правую часть дифференциального уравнения) может быть на выпуклом множестве с заданной степенью точности приближена указанной комбинацией. Нечеткие множества и правила логического вывода используются для описания глобальной нелинейной системы в терминах множества локальных линейных систем, гладко связанных между собой посредством функций принадлежности. Таким образом, исходная нелинейная модель представляется (возможно, лишь в некоторой области) в виде выпуклой комбинации нескольких линейных систем. В [5] приведен алгоритм аппроксимации динамической системы ТС-моделью, изучена и показана эффективность использования ТС-моделей при описании динамических систем с логическими регуляторами. Еще одним преимуществом использования перехода к ТС-модели является то, что анализ устойчивости может быть сведен к задачам, решаемым с помощью линейных матричных неравенств, которые обеспечивают требуемые свойства функции Ляпунова и допускают численное решение с помощью вычислительных пакетов.

Переключательная система представляет собой многосвязную управляемую систему, описываемую дифференциальными уравнениями вида [2]

$$x'_i(t) = A_i x_i(t) + B_i u_i(t) + \sum_{j=1, j \neq i}^r A_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad (1)$$

где $x_i \in R^{n_i}$ – вектор состояния, A_i, A_{ij} – постоянные матрицы размерности соответственно $n_i \times n_i$ и $n_i \times n_j$, B_i – матрица-столбец размерности n_i , r – число подсистем модели. Управление u_i зависит от дискретных моментов времени и представляет собой кусочно-постоянную функцию на каждом промежутке времени. В случае, когда управление воздействует только на подсистемы

$$x'_i(t) = A_i x_i(t) + B_i u_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad (2)$$

исходной системы (1), т.е. зависит только от ее состояния в определенный момент времени, то оно выбирается как $u_i = k_i x_i$, где k_i – коэффициенты усиления регулятора.

Предполагается, что рассматриваемая система (1) имеет положение равновесия, и система отсчета выбрана так, что оно соответствует нулевому решению уравнения (1). Кроме того, считаем, что система (1) рассматривается в некоторой области $D \subseteq R^n$, содержащей начало координат (задание указанной области может быть обусловлено, например, физическим смыслом переменных состояния). Пусть

$z(t) = (z_1(t), \dots, z_l(t))$ – векторная величина, значения которой в текущий момент времени зависят от $x(t)$ и описываются нечетким множеством M_{ij} . На множестве M_{ij} определим непрерывные функции

$$w_i(z(t)) = \prod_{j=1}^l M_{ij}(z_j(t)), \quad h_i(z(t)) = \frac{w_i(z(t))}{\sum_{i=1}^r w_i(z(t))},$$

где $M_{ij}(z_j(t))$ – степень принадлежности элемента $z_j(t)$ к множеству M_{ij} . Предположим, что $w_i(t) \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, r$, и $\sum_{i=1}^r w_i(t) > 0 \quad \forall t$. Из предположений следует, что $h_i(t) \geq 0$, где $i = 1, 2, \dots, r$, и $\sum_{i=1}^r h_i(t) = 1 \quad \forall t$.

Рассмотрим систему

$$x'(t) = \sum_{i=1}^r h_i(z(t)) \{A_i x(t) + B_i u(t)\}, \quad (3)$$

которая определяет ТС-модель управляемой системы. На основе принципа универсальной аппроксимации [5] и с учетом существования функций принадлежности $h_i(t)$, модель (2) может быть редуцирована к модели (3).

Для ТС-модели (3) i -е правило, соответствующее функции $h_i(t)$, имеет вид:

Π_i : если $z_1(t)$ есть M_{i1} и ... и $z_l(t)$ есть M_{il} ,

то $x'(t) = A_i x(t) + B_i u(t)$, $y(t) = C_i x(t)$, $i = 1, 2, \dots, r$,

где $y(t) \in R^q$ – вектор выхода, $C_i \in R^{q \times n}$. Предполагается, что исходные переменные не являются функциями от входящих переменных $u(t)$.

Одним из эффективных приемов синтеза управления для ТС-моделей является использование логического регулятора, построенного с помощью процедуры динамической параллельно распределенной компенсации (ДПРК-регулятора) [6]. Процедура ДПРК заключается в том, что каждое правило регулятора строится из соответствующего правила ТС-модели. При этом логический регулятор использует те же нечеткие множества, что и модель в исходных частях, и в расчет берется только локальная эффективность каждого правила.

Правила управления для модели (3) имеют вид

Π_i : если $z_1(t)$ есть M_{i1} и ... и $z_l(t)$ есть M_{il} ,

$$\text{то } u(t) = K_i x(t), i = 1, 2, \dots, r,$$

где K_i – матрица коэффициентов усиления локальной обратной связи. Общий ДПРК-регулятор представляет собой сочетание отдельных линейных регуляторов и задается в виде

$$u = \sum_{i=1}^r h_i K_i x.$$

В работе изучен вопрос о стабилизации переключательной системы. В качестве функции Ляпунова рассмотрена функция вида

$$V(x) = x^T Q x,$$

где P – положительно определенная матрица. Получены условия стабилизируемости модели (3) в виде ограничений на соответствующие матрицы Q , $K_i = M_i Q^{-1}$.

Для синтеза управления на основе модифицированных линейных матричных неравенств предварительно рассмотрена линейная модель, зависящая от параметра p . Получены условия стабилизируемости ТС-модели (3) посредством ДПРК-регулятора, в виде модифицированных линейных матричных неравенств, учитывающих параметр p .

3. Синтез управления маятниковой системы с переключением

Применение описанного подхода к синтезу управления в переключательных системах рассмотрено на примере системы управления перевернутым маятником. Процедура аппроксимации дифференциальной модели перевернутого маятника ТС-моделью приведена в [5]. Показано, что ТС-модель перевернутого маятника может без потери общности при качественном исследовании сводиться к модели с двумя правилами ($r = 2$) вида

$$P_1 : \text{если } x_1(t) \text{ есть } 0, \text{ то } x'(t) = A_1 x(t) + B_1 u(t),$$

$$P_2 : \text{если } x_1(t) \text{ есть } \pm \frac{\pi}{2} (|x_1| < \frac{\pi}{2}), \text{ то } x'(t) = A_2 x(t) + B_2 u(t), \quad (4)$$

где A_1, A_2, B_1, B_2 – матрицы параметров маятника. Задача управления заключается в стабилизации маятника в верхнем вертикальном положении.

Предполагается, что переход с одной подсистемы на другую с учетом начальных условий осуществляется с помощью функций принадлежности h_1 и h_2 , относящихся к классу треугольных. Использование функций h_1 и h_2 треугольного вида обусловлено типом неопределенности в части ЕСЛИ правил модели. Выбор вида функций принадлежности существенно упрощает соответствующие аналитические и

численные расчеты в контексте решаемой задачи. В [5] даны условия устойчивости ТС-модели перевернутого маятника без переключения в виде набора линейных матричных неравенств.

Показано, что ТС-модель маятниковой системы с переключением на основе правил модели (4) примет вид

$$x' = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 h_i(y) h_j(y) \tilde{A}^{ij} x + \sum_{i=1}^r h_i \tilde{B}^i y, \quad u = \sum_{i=1}^r h_i(y) \tilde{C}^i x + \tilde{D} y, \quad (5)$$

где \tilde{A}^{ij} , \tilde{B}^i , \tilde{C}^i , \tilde{D} – матрицы, определенные с учетом модифицированных условий устойчивости и параметров ДПРК-регулятора, полученных в настоящей работе.

Выполнен численный анализ синтезированной ТС-модели (5) в компьютерной среде Matlab с использованием алгоритма Лоусона [5]. Известные численные методы (метод Рунге–Кутты, метод Адамса и др.) не позволяют выполнить для указанных моделей адекватные численные эксперименты. Это обусловлено ограниченной областью устойчивости решений, полученных традиционными численными методами, и быстротой протекания процессов в управляемых системах. Алгоритм Лоусона заключается в преобразовании исходной системы дифференциальных уравнений в систему дифференциальных уравнений относительно новой неизвестной функции с помощью специальной замены. После проведенного преобразования, которое выполняется самой программой, представленной в виде расширения для Matlab, решение полученной системы проводится методом Рунге–Кутты.

В ходе компьютерного моделирования для конкретных начальных условий получены графики угла отклонения и угловой скорости перевернутого маятника. Показана согласованность результатов численного анализа маятниковой системы с переключением, описываемой ТС-моделью (5), с результатами качественного ее исследования.

4. Заключение

Предложенный в настоящей работе подход к синтезу управления системы с переключением базируется на применении логического регулятора и представлении исходной нелинейной системы ТС-моделью. Этот подход направлен на эффективное управление динамическими объектами и процессами при постоянно изменяющихся внешних воздействиях и наличии параметрической неопределенности объекта. Для построения логического регулятора использована процедура динамической параллельно распределенной компенсации. Получены условия устойчивости в виде модифицированных линейных матричных неравенств. На примере системы управления перевернутым маятником осуществлен синтез управления маятниковой системы с переключением и проведен вычислительный эксперимент. Определены параметры

логического ДПРК-регулятора, стабилизирующего перевернутый маятник. Полученные результаты могут быть использованы в задачах устойчивости и стабилизации систем.

Литература

1. *Tochilin P.A., Kurzhanzsky A.B.* To the problem of synthesis of controls in case of uncertainty according to the finite inferences // *Differential equations*. — 2011. — V. 47. No. 11. — P. 1599–1607.
2. *Druzhinina O.V., Kaledina E.A. Shchennikov V.N., Shchennikova E.V.* Stabilizing of the multi-coupling controlled handling system with using of piecewise constant control // *Control systems and information technologies*. — 2014. — No. 4(58). — P. 55–59.
3. *Vasilyev S.N., Kosov A.A.* The analysis of dynamics of hybrid systems by means of the general functions of Lyapunov and multiple homomorphisms // *Automatic and telemechanics*. — 2011. — Is. 6. — P. 27–47.
4. *Ananyevsky I.M.* Synthesis of control of dynamic systems on the basis of a method of Lyapunov functions // *Works of the International conference on the mathematical theory of control and mechanics*. — Moscow: PFUR, 2011. — C. 23–29.
5. *Druzhinina O.V., Igonina E.V., Masina O.N.* Modeling and stabilizing of dynamic systems with logical controllers / *Messages on applied mathematics*. — Moscow: Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS, 2015.
6. *Tanaka K., Wang H.O.* Fuzzy control systems design and analysis: a linear matrix inequality approach. — N.Y.: Wiley, 2001.

UDC 517.9

Analysis of controlled dynamic systems on the basis of using of the TS-models and the modified linear matrix inequalities

O. V. Druzhinina*, O. N. Masina[†], E. V. Igonina[‡]

* *Federal Research Center «Computer Science and Control»
of Russian Academy of Sciences
Vavilov str. 44, building 2, Moscow, 119333, Russia*

[†] *Department of Mathematical Modeling and Computer Technologies
Yelets State University named after Ivan Bunin
Communards str. 28, Yelets, 399770, Russia*

[‡] *Department of Applied Mathematics and Informatics
Yelets State University named after Ivan Bunin*

Communards str. 28, Yelets, 399770, Russia

The approach to synthesis of control of dynamic systems based on representation of the initial systems by the Takagi–Sugeno models (TS-models) and on application of theorems of a Lyapunov functions method and the modified linear matrix inequalities is developed. The considered nonlinear model is presented in the form of a convex combination of several linear systems, smoothly connected among themselves by means of membership functions. For construction of the stabilizing logical controller the procedure of the dynamic parallel distributed compensation (DPDC) consisting that each rule of the controller is built from the corresponding rule of TC-models is used. The solution of stability problem for the synthesized TC-model is reduced to the analysis of properties of the modified linear matrix inequalities obtained by the aid of sufficient conditions of asymptotic stability in terms of Lyapunov functions. On example of the inverted pendulum the synthesis of the control with switching is carried out. The TC-model of the inverted pendulum is researched and parameters of the stabilizing DPDC-controller are set. When carrying out a computational experiment Lawson algorithm for solving of systems of the linear and quasilinear differential equations is used. The specified algorithm is based on transformation of initial system of the differential equations to the system solved by Runge–Kutta numerical method. The comparative analysis of qualitative and numerical results of modeling of pendulum system is performed. Proposed approach to synthesis of control can be used for modeling of controlled systems with switching in the conditions of uncertainty, and also by development of design technologies of dynamic systems of intelligent control.

Keywords: controlled dynamic systems, stability, Lyapunov function, the linear matrix inequalities, TS-model.

УДК 519.689.1

Кластерный метод описания моделей данных инфокоммуникационных систем, построенных на базе многомерного подхода

М. Б. Фомин

*Кафедра информационных технологий,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо-Маклая, д.6, Москва, Россия, 117198*

Аннотация. Моделью данных в инфокоммуникационных системах, построенных на базе многомерного подхода, является многомерный куб данных. В системах с многоаспектным описанием предметной области кубы данных характеризуются большой разреженностью, что затрудняет организацию хранения данных и порождает сложности в процессе анализа информации. Предлагаемый кластерный метод описания структуры многомерного куба данных базируется на исследовании семантики предметной области и помогает организовать эффективный анализ данных. Для измерений, которые являются размерностями многомерного куба, выявляются группы их значений, которые семантически связаны с группами значений других измерений. Построение связей между группами значений разных измерений позволяет выявить в кубе данных кластеры – наборы ячеек, которые обладают сходными свойствами и могут быть описаны единым образом. Кластеры используются в качестве основных элементов модели данных инфокоммуникационной системы.

Ключевые слова: инфокоммуникационная сеть, многомерная модель данных, разреженный куб, множество допустимых сочетаний, кластер сочетаний значений измерений.

1. Введение

Для оперативного анализа большого объема данных используют многомерные информационные системы, построенные на принципах OLAP. Аналитическим пространством в системе такого типа является многомерный куб данных, размерностями которого выступают измерения, соответствующие различным аспектам наблюдаемого явления, для описания которого создается система. В случае многоаспектного анализа большого объема данных, относящихся к одному наблюдаемому явлению, но семантически разнородных, многомерный куб характеризуется высокой разреженностью и неравномерностью заполнения [1]. При этом возникает проблема разработки адекватного способа описания структуры аналитического пространства, использование которого позволило бы эффективно организовать процесс анализа данных. Такой правильный способ должен обеспечивать учет семантики исследуемого наблюдаемого явления.

2. Постановка задачи

Структура аналитического пространства многомерной информационной системы должна отражать свойства тех аспектов исследуемого наблюдаемого явления, которые используются в процессе анализа данных. Каждому такому аспекту соответствует одно из измерений многомерного куба H . Полный набор измерений образует множество $D(H) = \{D^1, D^2, \dots, D^n\}$, где D^i — i -е измерение, $n = \dim(H)$ — размерность многомерного куба. Каждое измерение задается множеством значений измерения $D^i = \{d_{1_i}^i, d_{2_i}^i, \dots, d_{k_i}^i\}$, где i — номер измерения, k_i — количество значений измерения. Значения измерения D^i набираются из множества позиций базового справочника или классификатора, который соответствует тому аспекту наблюдаемого явления, который связан с D^i .

Многомерный куб данных является структурированным набором ячеек. Каждая ячейка c задается сочетанием $c = (d_{i_1}^1, d_{i_2}^2, \dots, d_{i_n}^n)$ значений измерений, по одному значению для каждого из измерений. В случае использования при анализе наблюдаемого явления большого набора разнотипных аспектов, не все возможные сочетания значений измерений задают значимые, то есть соответствующие некоторому факту, ячейки многомерного куба. Этот эффект возникает как следствие семантического несоответствия некоторых значений из разных измерений друг другу и порождает разреженность в кубе.

Сложный характер сочетаемости значений измерений может приводить к ситуации, когда некоторое измерение становится семантически неопределенным в сочетании с набором значений остальных измерений. При описании значимой ячейки многомерного куба, соответствующей описанной ситуации, для задания значения семантически неопределенного измерения будем применять специальное значение «Не используется» [2].

Таким образом, структуру аналитического пространства многомерной информационной системы описывает множество допустимых сочетаний значений измерений, соответствующее множеству значимых ячеек многомерного куба. Для обозначения этого множества будем использовать аббревиатуру «МДС». При формировании сочетаний МДС для задания измерений будем использовать значения, набранные из базовых справочников или классификаторов, соответствующих измерениям, и специальное значение «Не используется».

Задача состоит в том, чтобы разработать формальный подход для описания МДС, позволяющий представить метаданные многомерной информационной системы в компактной форме, отражающей семантику анализируемого наблюдаемого явления.

3. Кластерный подход к описанию аналитического пространства

Для правильного описания структуры аналитического пространства требуется провести семантический анализ сочетаемости значений измерений. Могут существовать закономерности в сочетаемости значений двух и более измерений, определяющие структуру МДС. Но в большинстве случаев правила сочетаемости, определяющие МДС, задаются попарными связями между измерениями. Мы ограничимся рассмотрением такой ситуации.

В качестве иллюстративного примера будем рассматривать структуру аналитического пространства информационной системы, описывающей наблюдаемое явление «Выдача кредитов». Данные показателей системы будем представлять в шести аспектах, соответствующих следующим измерениям: «Время выдачи кредита», «Место выдачи кредита», «Тип заемщика», «Пол заемщика», «Вид деятельности» и «Вид кредита». Первое измерение базируется на данных календаря, выбранных в рассматриваемом временном диапазоне. Второе – на справочнике территориально-административного деления. Остальные измерения зададим следующими значениями:

- Тип заемщика = {«Юр. лицо», «Физ. лицо»};
- Пол заемщика = {«Мужской», «Женский»};
- Вид деятельности = {«Строительство», «Торговля», «Банковская деятельность»};
- Вид кредита = {«Оборотный», «Межбанковский», «Ипотечный», «Потребительский»}.

Источником информации о семантических связях между измерениями является нормативно-методическая документация. Задача аналитика – формализовать эту информацию в виде правил сочетаемости, позволяющих построить МДС. В случае анализа попарных связей правила должны определять, какая пара значений двух измерений может встречаться в сочетаниях МДС, а какие значения одного из измерений несовместимы с другим измерением. Такой подход позволяет выделить во множестве значений измерения группы значений. Группа значений измерения – набор, включающий одно или несколько значений измерения, которые «одинаково» сочетаются со значениями некоторого другого измерения в МДС.

Можно выделить несколько видов связи между измерениями, разделив их на «простые» и «сложные». Простые виды связи:

1. Ассоциация. В паре измерений D^1 и D^2 существует ассоциация, если во множестве значений каждого из них могут быть выделены n групп, $n \geq 2$, и между этими группами может быть установлено взаимно однозначное соответствие, проявляющееся в том, что в сочетаниях из МДС значения D^1 и D^2 могут входить только парами, взятыми из соответствующих друг другу групп значений;

2. Полная ассоциация. В паре измерений D^1 и D^2 существует полная ассоциация, если между значениями этих измерений может быть установлено взаимно однозначное соответствие, проявляющееся в том, что в МДС значения D^1 и D^2 могут входить парами в любых сочетаниях;
3. Зависимость. Между измерениями D^1 и D^2 существует зависимость (D^2 зависит от D^1), если значения D^1 могут быть разделены на две группы значений так, что в случае, если в некоторое сочетание из МДС входит значение из первой группы значений D^1 , то значением D^2 в этом сочетании является допустимое значение, а если в сочетание входит значение из второй группы значений D^1 , то D^2 в этом сочетании принимает значение «Не используется».

В паре измерений могут быть заданы сложные связи, являющиеся комбинацией нескольких простых связей:

1. Ассоциация и зависимость. Между D^1 и D^2 существует ассоциация и зависимость, если в D^2 могут быть выделены n групп, $n \geq 1$, а в $D^1 - (n + 1)$ группа так, что между первыми n группами D^1 и группами D^2 установлена ассоциация, а если в сочетание из МДС входит значение из $(n + 1)$ -й группы значений D^1 , то D^2 в этом сочетании принимает значение «Не используется». При этом значения из $(n + 1)$ -й группы значений D^1 не встречаются в остальных группах этого измерения;
2. Ассоциация и двусторонняя зависимость. Между D^1 и D^2 существует ассоциация и двусторонняя зависимость, если во множестве значений каждого из этих измерений могут быть выделены n групп, $n \geq 2$, так, что если в сочетание из МДС входит значение из первой группы D^1 , то D^2 в этом сочетании принимает значение «Не используется», если в сочетание из МДС входит значение из первой группы D^2 , то D^1 в этом сочетании принимает значение «Не используется», а оставшиеся $(n - 1)$ группа значений измерений D^1 и D^2 образуют ассоциацию. При этом значения из первой группы в D^1 и из первой группы в D^2 не встречаются в остальных группах своих измерений;
3. Двусторонняя зависимость. Между измерениями D^1 и D^2 существует двусторонняя зависимость, если выполняется правило: в случае, когда в сочетание из МДС входит значение из D^1 , то D^2 в этом сочетании принимает значение «Не используется», а когда в сочетание входит значение из D^2 , то D^1 в этом сочетании принимает значение «Не используется».

На рис. 1 представлены диаграммы, содержащие обозначения парных связей между измерениями для случая иллюстративного примера, описанного выше.

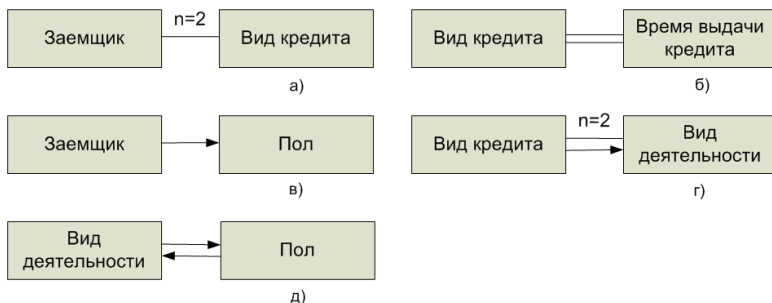


Рис. 1. Виды диаграмм, описывающие попарные связи между измерениями: ассоциация (а), полная ассоциация (б), зависимость (в), ассоциация и зависимость (г), двусторонняя зависимость (д)

Для описания содержания попарных связей между измерениями удобно использовать диаграммы соответствия групп значений измерений. На рис. 2 представлены попарные диаграммы соответствия групп для предложенного иллюстративного примера.

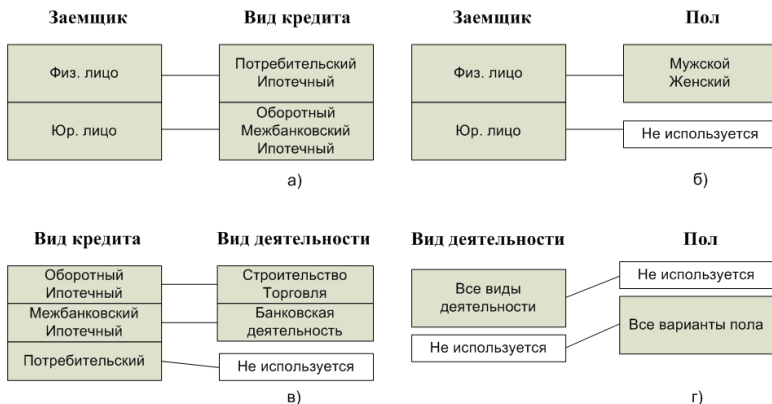


Рис. 2. Парные диаграммы соответствия групп значений измерений: ассоциация (а), зависимость (б), ассоциация и зависимость (в), двусторонняя зависимость (г)

Имея результат анализа попарных связей измерений многомерно-го куба, можно построить диаграмму связности измерений, на которой представлены все измерения и указаны все связи между ними. На базе этой диаграммы может быть построена диаграмма соответствия групп

значений измерений, на которой представлены все группы и установлено соответствие между ними. Эти диаграммы могут быть использованы при формировании МДС аналитического пространства.

В случае если во множестве измерений $D(H)$ можно выделить подмножество (будем называть такое подмножество слоем измерений) $L^i = \{D^{j_1}, D^{j_2}, \dots, D^{j_k}\}$, где j_i – номер измерения в слое, $j = 1, \dots, k$, k – количество измерений в i -м слое, $1 \leq k \leq \dim(H)$, каждое измерение из которого находится в полной ассоциации со всеми измерениями, не входящими в L^i , сочетаемость значений измерений из L^i можно рассматривать независимо от других измерений. Слой измерений – это набор измерений, сочетаемость значений которых в МДС не зависит от того, какие значения в сочетаниях принимают измерения, не входящие в слой. В случае разбиения множества измерений аналитического пространства на слои можно построить диаграмму связности измерений и сформировать множество допустимых сочетаний значений измерений для каждого слоя по отдельности. После этого МДС можно получить декартовым произведением множеств допустимых сочетаний для всех слоев: $\text{МДС}(H) = \text{МДС}(L^1) \times \text{МДС}(L^2) \times \dots \times \text{МДС}(L^m)$, где m – число слоев. В рассматриваемом примере можно выделить три слоя: $L^1 = \{\text{Тип заемщика, Пол заемщика, Вид деятельности, Вид кредита}\}$, $L^2 = \{\text{Время выдачи кредита}\}$ и $L^3 = \{\text{Место выдачи кредита}\}$.

На рис. 3 представлена диаграмма связности измерений для слоя L^1 в иллюстративном примере.

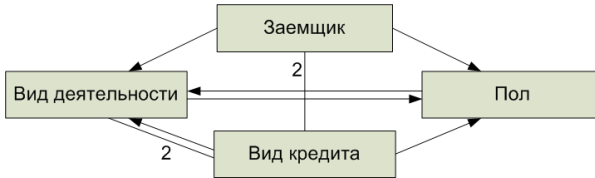


Рис. 3. Диаграмма связности измерений для слоя L^1

Если анализировать некоторое измерение как элемент диаграммы связности слоя, учитывая при этом связи рассматриваемого измерения со всеми остальными измерениями слоя, то имеющиеся в этом измерении группы значений можно преобразовать так, что они будут соответствовать всем связям рассматриваемого измерения одновременно. Новые группы должны лежать на пересечении групп, задающих попарные связи с разными измерениями. Будем называть такую процедуру формирования групп, при помощи которых можно описывать сочетаемость всей совокупности измерений слоя, разбиением групп значений

измерений, описывающих попарные связи. При разбиении групп должны наследоваться связи между измерениями, определяющие сочетаемость значений измерений, выявленные на этапе попарного анализа.

После выполнения разбиения групп в диаграмме связности измерений аналитического пространства (или, в случае разбиения на слои, слоя измерений) в процессе обхода диаграммы вдоль её связей могут быть выявлены цепочки групп значений измерений или, может быть, специальное значение «Не используется» взамен группы, заданных во всех измерениях куба или измерениях слоя, значения из которых сочетаются в МДС по правилу «каждый с каждым». Такие цепочки определяют набор сочетаний, входящих в МДС, которые могут быть получены декартовым произведением групп значений измерений и специального значения «Не используется», если оно присутствует в цепочке. Будем называть такой набор сочетаний кластером сочетаний. Кластер сочетаний – множество сочетаний значений измерений, которое может быть получено при помощи операции декартова произведения, в которой операндами являются группы значений измерений или специальное значение «Не используется», по одному операнду для каждого из измерений, заданных в многомерном кубе или в слое измерений многомерного куба. На рис. 4 представлены кластеры сочетаний, соответствующие диаграмме связности измерений для слоя L^1 из иллюстративного примера.

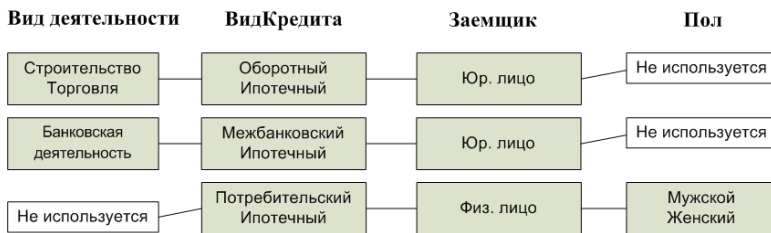


Рис. 4. Кластеры сочетаний для слоя L^1

При отсутствии разбиения множества сочетаний на слои МДС может быть представлено как объединение кластеров, соответствующих диаграмме сочетаемости измерений аналитического пространства. В случае разбиения сочетаний на слои, МДС для каждого слоя должно быть построено как объединение кластеров сочетаний слоя, а МДС значений измерений многомерного куба получено как результат декартова произведения МДС для слоев.

4. Заключение

В случае разработки большой многоаспектной многомерной информационной системы использование кластерного подхода для описания множества допустимых сочетаний значений измерений позволяет с одной стороны обеспечить компактность при задании метаданных, с другой стороны выразить особенности структуры аналитического пространства системы и семантику анализируемого наблюдаемого явления. В основе предлагаемого подхода лежит выявление связей между измерениями, отражающих свойства наблюдаемого явления, и формирование групп значений измерений, элементы которых объединены одинаковым поведением по отношению к этим связям.

Литература

1. *Thomsen E.* OLAP Solution: Building Multidimensional Information System. — Willey Computer Publishing, 2002. — ISBN: 0-471-40030-0.
2. *Висков А.В., Фомин М.Б.* Методы описания допустимых сочетаний реквизитов-признаков при использовании многомерных моделей в инфокоммуникационных системах. // Т-Comm. – Телекоммуникации и Транспорт. — 2012. — № 7. — С. 45–47.

UDC 519.689.1

The cluster method of describing data models of infocommunication systems constructed on the basis of the multi-dimensional approach

M. B. Fomin

*Department of Information Technologies
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

The data model in infocommunication system based on the multi-dimensional approach is a multi-dimensional data cube. Systems with a multi-aspect description of the subject area are characterized by large data cubes with sparseness. It complicates the data storage organization and creates difficulties in the process of data analysis. The proposed clustering method of describing a multi-dimensional data cube structure is based on a study of the semantics of the subject area and helps to organize the effective data analysis. The task is to identify groups of members for the dimension of data cube, which are semantically related to groups of members of other dimensions. The relationship between groups of members of different dimensions allows identifying clusters – sets of cells in data cube that

have similar properties and can be described in a unified way. The clusters are used as basic elements in the infocommunication system data model.

Keywords: infocommunication network, multidimensional data model, set of possible member combinations, sparse cube, cluster of member combinations.

UDC 519.614;517.584

Waveguide Modes of a Planar Gradient Optical Waveguide

M. N. Gevorkyan*, D. S. Kulyabov[†], K. P. Lovetskiy*,
N. E. Nikolaev[‡], A. L. Sevastianov*, L. A. Sevastianov^{*§}

* *Department of Applied Probability and Informatics
RUDN University*

6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, Russia, 117198

[†] *Laboratory of Information Technologies*

Joint Institute for Nuclear Research

6, Joliot-Curie, Dubna, Moscow region, Russia, 141980

[‡] *Department of Applied Physics*

RUDN University

6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, Russia, 117198

[§] *Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics*

Joint Institute for Nuclear Research

6, Joliot-Curie, Dubna, Moscow region, Russia, 141980

Abstract. The mathematical model of light propagation in a planar gradient optical waveguide consists of the Maxwell's equations supplemented by the matter equations and boundary conditions. In the coordinates adapted to the waveguide geometry, the Maxwell's equations are separated into two independent sets for the TE and TM polarizations. For each polarization there are three types of waveguide modes in a regular planar optical waveguide: guided modes, substrate radiation modes, and cover radiation modes. In this work we implement the numerical-analytical calculation of all types of waveguide modes.

For the eigenvalue problem with a piecewise linear-constant potential we used the Airy functions to calculate the cover radiation modes and substrate radiation modes. We took advantage of reducing the initial potential scattering problem (in the case of the continuous spectrum) to the equivalent ones for the Jost functions: the Jost solution from the left for the substrate radiation modes and the Jost solution from the right for the cover radiation modes.

Keywords: waveguide propagation of electromagnetic radiation, equations of waveguide modes of regular waveguide, complete set of modes of a planar waveguide.

1. Introduction

Propagation of monochromatic polarized electromagnetic radiation is described by the vector homogeneous Maxwell's equations [1], the tangential boundary conditions at the interfaces of the waveguide layer with the substrate and the cover, and by asymptotic conditions "at infinity".

In a Cartesian coordinate system associated with the geometry of the waveguide, the Maxwell's equations, after the separation of variables, split into two linearly independent systems with reduced boundary conditions [1, 2].

2. Statement of the problem

As a result the problem of describing the full set of waveguide modes of regular gradient planar optical waveguide is formulated as an eigenvalue problem (for discrete and continuous spectra) and eigenfunction problem (for classical and generalized functions) of essentially self-adjoint ordinary differential operator of the second order [1, 3]:

$$-p(x) \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{p(x)} \frac{d\psi}{dx}(k, x) \right). \quad (1)$$

Here $p(x) = \varepsilon(x)$, $V(x) = -n^2(x)$ is piecewise-continuous (continuous in layers) function, $k^2 = -\beta^2$ is spectral parameter, and

$$\psi_{\text{TE}}(x) = E_y(x), \quad \psi_{\text{TM}}(x) = H_y(x).$$

Let's introduce the auxiliary functions

$$\varphi_{\text{TE}}(x) = \frac{d\psi_{\text{TE}}}{dx}(x), \quad \varphi_{\text{TM}}(x) = \frac{1}{p(x)} \frac{d\psi_{\text{TM}}}{dx}(x).$$

Using these functions we can write down reduced boundary conditions at points of discontinuity of the potential, and therefore of the second derivative of the solution:

$$\begin{aligned} \psi|_{x_1-0} &= \psi|_{x_1+0}, & \psi|_{x_2-0} &= \psi|_{x_2+0}, \\ \varphi|_{x_1-0} &= \varphi|_{x_1+0}, & \varphi|_{x_2-0} &= \varphi|_{x_2+0}. \end{aligned}$$

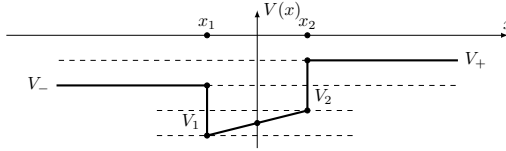
Besides, the asymptotic conditions are satisfied

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} |\psi(x)| \leq C_\psi. \quad (2)$$

The spectrum of operator (1)–(2) consists of [4, 5]:

- a finite number of discrete eigenvalues $k_j = i\kappa_j$: $k_j^2 \in (\min V(x), \min(V_-, V_+))$ and the corresponding classical eigenfunctions (of guided waveguide modes);
- a single continuous spectrum k_- : $k_-^2 \in (V_-, \infty)$ and corresponding generalized eigenfunctions (substrate radiation modes);
- a single continuous spectrum k_+ : $k_+^2 \in (V_+, \infty)$ and corresponding generalized eigenfunctions (cover radiation modes).

For a constructive description of the problem solutions, i.e. eigenfunctions of three types, we shall restrict our consideration to piecewise-linear

Figure 1. $V(x)$

potential:

$$V(x) = \begin{cases} V_-, & \text{when } x < x_1, \\ ax + b, & \text{when } x_1 < x < x_2, \text{ where } a = \frac{V_2 - V_1}{x_2 - x_1}, b = \frac{V_1 x_2 - V_2 x_1}{x_2 - x_1}, \\ V_+, & \text{when } x > x_2. \end{cases}$$

The function $V(x)$ has the view shown on Fig. 1.

3. The solution for the eigenvalues (of the discrete spectrum) and eigenfunctions (classical) problem

The method of solution is the expansion on the sub-intervals of the general solution in terms of the fundamental system of solutions. To the left and to the right there are decreasing exponential functions in the case of real ε_s , ε_c (due to the asymptotic conditions):

$$\begin{aligned} \psi_s(k, x) &= C_s \exp\{\gamma_s(x - x_1)\}, \\ \psi_c(k, x) &= C_c \exp\{-\gamma_c(x - x_2)\}. \end{aligned}$$

In the waveguide layer (with a linear potential in the subdomain) the fundamental system of solutions consists of the functions $Ai(x)$ and $Bi(x)$, such that

$$\psi_f(k, x) = C_1 Ai\left(\frac{a(x - x_2) + b}{(-a)^{2/3}}\right) + C_2 Bi\left(\frac{a(x - x_2) + b}{(-a)^{2/3}}\right).$$

These common solutions in the subdomains form a single particular solution of the problem (1)–(2), therefore, the equalities must be satisfied:

$$\begin{aligned} \psi_s(k, x_1) &= \psi_f(k, x_1), & \Phi_s(k, x_1) &= \Phi_f(k, x_1), \\ \psi_f(k, x_2) &= \psi_c(k, x_2), & \Phi_f(k, x_2) &= \Phi_c(k, x_2). \end{aligned}$$

As a result we obtain a homogeneous system of linear algebraic equations for the indefinite coefficients for the TE modes:

$$C_s = C_1 Ai\left(\frac{-ad + b}{(-a)^{2/3}}\right) + C_2 Bi\left(\frac{-ad + b}{(-a)^{2/3}}\right),$$

$$\begin{aligned}\gamma_s C_s &= -C_1(-a)^{1/3} \frac{dAi}{dx} \left(\frac{-ad+b}{(-a)^{2/3}} \right) - C_2(-a)^{1/3} \frac{dBi}{dx} \left(\frac{-ad+b}{(-a)^{2/3}} \right), \\ C_1 Ai(0) + C_2 Bi(0) &= C_c, \\ -C_1(-a)^{1/3} \frac{dAi}{dx}(0) - C_2(-a)^{1/3} \frac{dBi}{dx}(0) &= -\gamma_c C_c.\end{aligned}$$

The resulting homogeneous system of linear algebraic equations

$$\hat{M}_{TE}(k) \vec{C}(k) = \vec{0}$$

has a non-trivial solution provided that

$$\det \hat{M}_{TE}(k) = 0.$$

Solutions of nonlinear transcendental algebraic equation k_j are substituted in SLAE(x) and then this system is solved with respect to $\vec{C}_j = \vec{C}(k_j)$. The obtained coefficients are substituted in the expressions for the fields. The results of calculations are presented in Fig. 2–3.

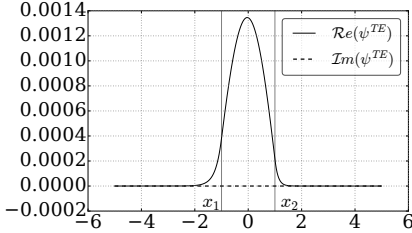


Figure 2. Wave modes TE_1 ,
 $n_c = 1.0$, $n_f = 2.15$, $n_s = 1.515$,
 $\beta^{TE} = 1.6752$, $\beta^{TM} = 1.5955$

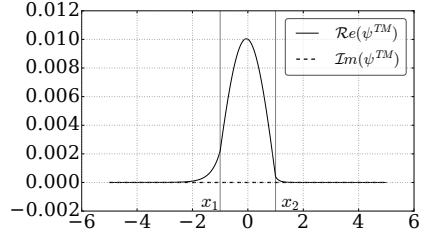


Figure 3. Wave modes TM_1 ,
 $n_c = 1.0$, $n_f = 2.15$, $n_s = 1.515$,
 $\beta^{TE} = 1.6752$, $\beta^{TM} = 1.5955$

4. Calculation of cover radiation modes

Similarly to what was done in [1, 3] for piecewise-constant potentials, let's move from solutions of the problem (1)–(2) satisfying the asymptotic Jost conditions, to the solutions satisfying the “scattering problem” conditions. A one-to-one correspondence between them is set in [1, 3] for the potentials of a more general kind.

So, in the region $(-\infty, x_1)$ the general solutions of equation (1) with constant coefficient V_s are of the form (for TE modes):

$$\psi_c^{TE}(k, x) = T_-^{TE}(k) \exp\{-ip_s(x - x_1)\}.$$

In the region (x_2, ∞) the general solutions of equation (1) have the form

$$\psi_c^{\text{TE}}(k, x) = \exp\{-ip_c(x - x_2)\} + R_-^{\text{TE}}(k) \exp\{ip_c(x - x_2)\}.$$

In the region (a, b) the general solutions of equation (1) have the form (for TE modes):

$$\psi_f(k, x) = C_f^1 Ai\left(\frac{a(x - x_2) + b}{(-a)^{2/3}}\right) + C_f^2 Bi\left(\frac{a(x - x_2) + b}{(-a)^{2/3}}\right).$$

Thus, the solutions (for TE modes) are given by sets of amplitude coefficients $(T_-^{\text{TE}}, C_f^1, C_f^2, R_-^{\text{TE}})^T$, satisfying the system of linear algebraic equations:

$$\begin{aligned} T_-^{\text{TE}}(k) &= C_f^1 Ai\left(\frac{-ad + b}{(-a)^{2/3}}\right) + C_f^2 Bi\left(\frac{-ad + b}{(-a)^{2/3}}\right), \\ -\frac{p_s}{k_0 \mu_s} T_-^{\text{TE}}(k) &= -C_f^1 (-a)^{1/3} \frac{dAi}{dx}\left(\frac{-ad + b}{(-a)^{2/3}}\right) - C_f^2 (-a)^{1/3} \frac{dBi}{dx}\left(\frac{-ad + b}{(-a)^{2/3}}\right), \\ C_f^1 Ai(0) + C_f^2 Bi(0) &= 1 + R_-^{\text{TE}}(k), \\ -C_f^1 (-a)^{1/3} \frac{dAi}{dx}(0) - C_f^2 (-a)^{1/3} \frac{dBi}{dx}(0) &= -\frac{p_c}{k_0 \mu_c} [1 - R_-^{\text{TE}}(k)]. \end{aligned}$$

The resulting SLAE can be rewritten as:

$$\hat{M}^{\text{TE}}(k) (T_-^{\text{TE}}, C_f^1, C_f^2, R_-^{\text{TE}})^T = \left(0, 0, 1, -\frac{p_c}{k_0 \mu_c}\right)^T,$$

so that the solution exists for any $k^2 \in (V_c, \infty)$ and is unique up to a complex factor (Fig. 4-5).

5. Calculation of substrate radiation modes

Solutions have different view for different values of spectral parameter k from the two spectral subregions $k^2 \in (V_s, V_c)$ and $k^2 \in (V_c, \infty)$. But for both regions the solution, as in the case of guided modes, is constructed by matching at the boundaries of the general solutions of equation (1) in the regions of the argument $(-\infty, x_1)$, (x_1, x_2) and (x_2, ∞) .

In the region $(-\infty, x_1)$ the general solutions of equation (1) with a spectral parameter $k^2 \in (V_s, V_c)$ have the form:

$$\psi_s^{\text{TE}}(k, x) = \exp\{ip_s(k)(x - x_1)\} + R_+^{\text{TE}}(k) \exp\{ip_s(k)(x - x_1)\}.$$

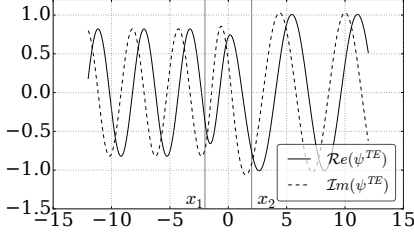


Figure 4. $n_c = 1.0$, $n_f = 1.59$,
 $n_s = 1.515$, $k^2 = 0.250$

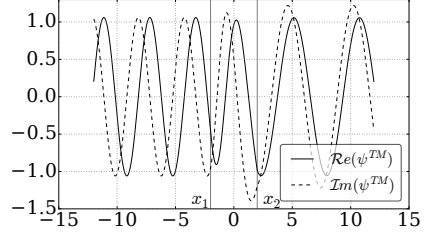


Figure 5. $n_c = 1.0$, $n_f = 1.59$,
 $n_s = 1.515$, $k^2 = 0.250$

In the region (x_1, x_2) the general solutions of equation (1.9) with a spectral parameter $k^2 \in (V_s, V_c)$ have the form:

$$\psi_f(k, x) = C_f^1 Ai\left(\frac{a(x-x_2)+b}{(-a)^{2/3}}\right) + C_f^2 Bi\left(\frac{a(x-x_2)+b}{(-a)^{2/3}}\right).$$

In the region (x_2, ∞) the general solutions of equation (1.9) with a spectral parameter $k^2 \in (V_s, V_c)$ have the form (by virtue of the asymptotic decay at infinity):

$$\psi_s^{\text{TE}}(k, x) = A_c \exp\{-\gamma_c(x-x_2)\}.$$

Thus, the solutions (for TE modes) are given by sets of amplitude coefficients $(R_+^{\text{TE}}, C_f^1, C_f^2, A_c)^T$ satisfying the system of linear algebraic equations:

$$\begin{aligned} 1 + R_+^{\text{TE}}(k) &= C_f^1 Ai\left(\frac{-ad+b}{(-a)^{2/3}}\right) + C_f^2 Bi\left(\frac{-ad+b}{(-a)^{2/3}}\right), \\ \frac{p_s}{k_0\mu_s} [1 - R_+^{\text{TE}}(k)] &= -C_f^1 (-a)^{1/3} \frac{dAi}{dx}\left(\frac{-ad+b}{(-a)^{2/3}}\right) - C_f^2 (-a)^{1/3} \frac{dBi}{dx}\left(\frac{-ad+b}{(-a)^{2/3}}\right), \\ C_f^1 Ai(0) + C_f^2 Bi(0) &= A_c, \\ -C_f^1 (-a)^{1/3} \frac{dAi}{dx}(0) - C_f^2 (-a)^{1/3} \frac{dBi}{dx}(0) &= -\frac{\gamma_c}{ik_0\mu_c} A_c. \end{aligned}$$

The resulting SLAE can be rewritten as:

$$\hat{M}^{\text{TE}}(k)(R_+^{\text{TE}}, C_f^1, C_f^2, A_c)^T = \left(-1, -\frac{p_c}{k_0\mu_s}, 0, 0\right)^T,$$

so that there exists a solution for any $k^2 \in (V_s, V_c)$ and it is unique up to a complex multiplier (Fig. 6-7).

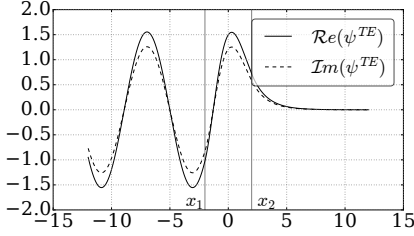


Figure 6. $n_c = 1.0$, $n_f = 1.59$,
 $n_s = 1.515$, $k^2 = -1.648$.

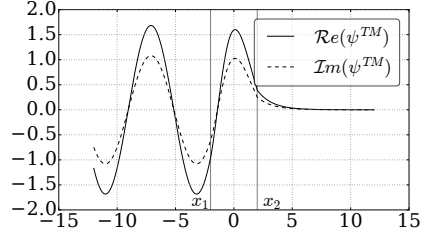


Figure 7. $n_c = 1.0$, $n_f = 1.59$,
 $n_s = 1.515$, $k^2 = -1.648$.

For the spectral parameter k from the region $k^2 \in (V_c, \infty)$, in the coordinate regions $(-\infty, x_1)$ and (x_1, x_2) common solutions have the same form as in the case $k^2 \in (V_s, V_c)$, and in the region (x_2, ∞) , they take the form:

$$\psi_s^{\text{TE}}(k, x) = T_+^{\text{TE}}(k) \exp\{ip_c(k)(x - x_2)\}.$$

Consequently, the second pair of boundary equations at the point $x = x_2$ for TE modes take the form:

$$\begin{aligned} C_f^1 A i(0) + C_f^2 B i(0) &= T_+^{\text{TE}}(k), \\ -C_f^1 (-a)^{1/3} \frac{dA i}{dx}(0) - C_f^2 (-a)^{1/3} \frac{dB i}{dx}(0) &= \frac{p_c(k)}{k_0 \mu_c} T_+^{\text{TE}}(k). \end{aligned}$$

The resulting SLAE can be rewritten as:

$$\hat{M}^{\text{TE}}(k) (R_+^{\text{TE}}, C_f^1, C_f^2, T_+^{\text{TE}})^T = \left(-1, -\frac{p_s}{k_0 \mu_s}, 0, 0 \right)^T,$$

so that there exists a solution for any $k^2 \in (V_c, \infty)$ and it is unique up to a complex multiplier (Fig. 8–9).

6. Conclusion

This paper presents the numerical implementations on a computer of square-integrable eigenfunctions corresponding to discrete spectrum $k_j = i\kappa_j$ for a piecewise-linear potential $V(x)$ (for the gradient waveguide). The present study also shows the numerical implementations on a computer of the cover radiation modes and substrate radiation modes. For modeling these modes, the problems of scattering on the potential $V(x)$ of Jost functions equivalent to the original problem in the case of the continuous spectrum were used: the problems of scattering on the left for the substrate radiation modes and the problems of scattering on the right for the cover radiation modes.

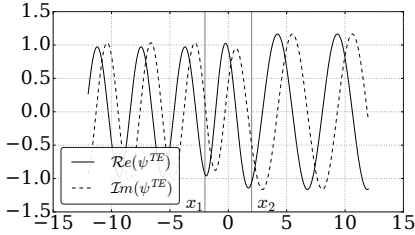


Figure 8. $n_c = 1.0$, $n_f = 1.59$,
 $n_s = 1.515$, $k^2 = 0.500$

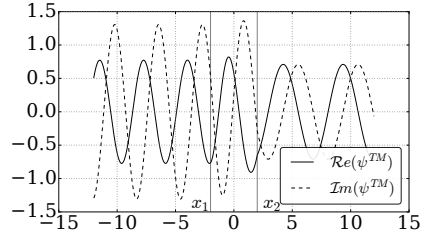


Figure 9. $n_c = 1.0$, $n_f = 1.59$,
 $n_s = 1.515$, $k^2 = 0.500$.

Acknowledgments

The work was partially supported by RFBF grants No 14-01-00628, No 15-07-08795, No 16-07-00556.

References

1. Egorov A. A., Lovetskiy K. P., Sevastyanov A. L., Sevastyanov L. A. Integrated Optics: Theory and computer modeling. Monograph. — Moscow: PFUR, 2015. 330 p.
2. Ayrjan E. A., Egorov A. A., Michuk E. N., Sevastyanov A. L., Sevastyanov L. A., Stavtsev A. V. Representations of guided modes of integrated-optical multilayer thin-film waveguides // Preprint JINR E11-2011-31, Dubna, 2011, 52 p.
3. Gevorkyan M. N., Kulyabov D. S., Lovetskiy K. P., Sevastyanov A. L., Sevastyanov L. A. Waveguide modes of a planar optical waveguide // Mathematical Modelling and Geometry. — 2015. — Vol. 3, no. 1, — P. 43–63.
4. Shevchenko V. V. On the spectral expansion in eigenfunctions and associated functions of a non self-adjoint problem of Sturm-Liouville type on the entire axis // Diff. Equations. — 1979. — Vol. 15. — P. 2004–2020.
5. Sevastyanov L. A. The complete system of modes of open planar waveguide // Proceedings of the VI International Scientific Conference “Lasers in science, technology, and medicine”. 1995. Suzdal. Moscow: Publishing House of IRE, — 1995, — P. 72–76.

УДК 519.92

О моделировании метрик для идентификации формы объектов с неполной входной информацией

И. М. Гостев

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», ул. Мясницкая, д.20, Москва, Россия, 101000

Аннотация. Процесс распознавания формы графических объектов состоит из нескольких этапов. На первом этапе в результате обработки изображений выделяют некоторый набор характерных признаков некоторого объекта. На втором этапе производят идентификацию объекта посредством сравнения этих признаков с признаками эталона. Присутствие шумов на реальных изображениях часто приводит к нарушению количества и значений в наборе таких характерных признаков. В работе рассматриваются методы идентификации, позволяющие идентифицировать форму графических объектов в условиях, когда часть набора характерных признаков объекта относительно эталона отсутствует или искажена шумами. Особенностью предложенных методов является их инвариантность к аффинным преобразованиям формы объекта, а также высокая скорость идентификации, не зависящая от сложности распознаваемого объекта.

Ключевые слова: обработка изображений, распознавание образов, моделирование, метрики.

1. Введение

Решение задач идентификации графических объектов обычно состоит из двух этапов. На первом этапе, обработке изображений, определяют характерные признаки распознаваемого объекта, а - на втором разрабатывают метод, позволяющий по этим признакам производить классификацию объекта по некоторому эталону. Сложность второго этапа процесса идентификации заключается в необходимости оперировать трудно формализуемыми и часто вербально не выражаемыми характеристиками формы графических объектов [1]. В последнее время большое внимание уделяется одному из направлений распознавания, при котором в результате первичной обработки изображения выделяется контур некоторого объекта [2]. Этот контур далее переводится в массив точек, представляющий некоторую замкнутую кривую [3]. В качестве описания такого контура используются значения функции кривизны [4], а характерными признаками здесь считаются угловые точки, принимающие её максимальные значения [5]. Несмотря на множество вариантов решения этой задачи, стабильность её решения отсутствует, так как в реальном изображении всегда присутствуют шумы, которые приводят к искажению кривой и, следовательно, к вариациям значений функции кривизны. А это в свою очередь приводит либо к сглаживанию (удалению) некоторых экстремумов, либо к появлению

новых, не являющихся характерными признаками объекта. Целью настоящей работы является изложение методов дальнейшей формализации характерных признаков объектов и представление методов их идентификации.

2. Этап обработки изображения.

В настоящее время для обработки изображений существуют хорошо изученные методы первичной обработки изображения и получения замкнутых контуров в виде их вербального описания [1], реализованы в широко известном пакете Matlab. Применяя функции из раздела Image Processing для предварительной обработки изображения и выделения контуров, получаем рис. 1, как результат обработки силуэта самолета (слева сверху) с небольшим уровнем шума.

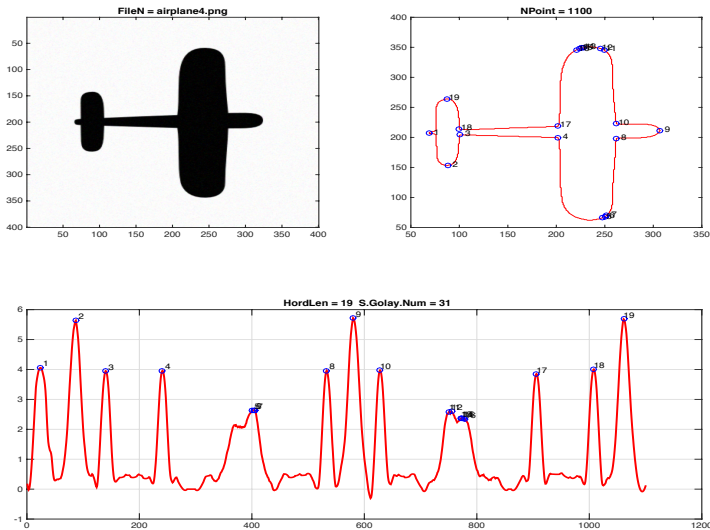


Рис. 1. Силуэт самолёта с наложенными шумами (слева сверху), его полученный контур (справа сверху) с нанесенными точками высокой кривизны и функция кривизны контура (снизу), с точками максимальной кривизны

В нижней части рис. 1 изображена функция кривизны контура объекта, которая используется далее для идентификации его формы в качестве исходных данных. Полученный в результате предварительной обработки изображения контур объекта, состоящий из ($n \gg 1$)

точек $P_1, P_2, P_3, \dots, P_n$, замкнутой параметризированной плоской кривой $\Gamma(t) = (x(t), y(t))$, $1 \leq t \leq n$, используется для получения функции кривизны, методом Arch Height [6], идея которого заключается в вычислении Евклидова расстояния d_i между точкой кривой P_i и хордой как показано на рис. 2, которое пропорционально значению модуля кривизны в этой точке. Результатом продвижения хорды вдоль кон-

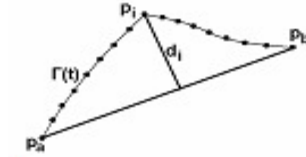


Рис. 2. Фрагмент кривой Γ с точками P_k и хордой (P_i, P_j) .

тура является функция, пропорциональная кривизне данной кривой и изображенная на рис. 1 (внизу). В качестве характерных признаков такой кривой будем использовать массив значений самых больших экстремумов, которые получены с использованием функции `findpeaks` пакета Matlab. Для отсеечения мелких экстремумов используется значение некоторого порога, вычисляемого на основе математического ожидания и дисперсии функции кривизны. В результате этой операции получаем массив точек координат, в которых контур имеет максимальную кривизну, как показано пронумерованными точками на рис. 1.

3. Процесс идентификации

В процессе идентификации объекта необходимо учитывать несколько факторов, влияющих на её качество. А именно, при наличии шумов и изменении масштаба контура, а также его поворота, некоторые экстремальные точки могут изменять своё значение, как в сторону увеличения, так и уменьшения. В первом случае это означает появление новых точек в массиве максимумов, а во втором их отсечение. Таким образом, на реальном изображении, идентификация формы объекта затрудняется из-за вариаций количества точек экстремумов в массивах эталона и текущего объекта.

Для решения проблемы автором был разработан метод идентификации формы объекта независимо от его положения на изображении (сдвиг), количества точек его контура (масштаб) и угла его поворота. Метод аналогичен метрикам геометрической и линейной корреляции [7] и заключается в выполнении следующих операций.

Во-первых, преобразуем координаты массива экстремальных точек из декартовых в полярные, используя в качестве центра координат полярной системы центр тяжести объекта. Во-вторых для построения метрики между объектом и эталоном, введём следующие определения.

Определение 1. Запишем множество точек экстремумов функции эталона $f(t)$ как $G_f = \{a = t_0 < t_1 < \dots < t_l = b\}$, где t_i -углы поворота значений $f(t)$ в полярных координатах. И множество точек идентифицируемого объекта: $G_h = \{c = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_m = d\}$ для функции $h(\tau)$. Пусть количество точек эталона будет больше чем объекта, то есть $l > m$, в противном случае меняем местами объект с эталоном.

Для построения метрики идентификации дополним множество эталона m точками следующим образом: $G_f^* = \{t_0, t_1, \dots, t_l, t_{l+1} = t_1 + t_1 - t_0, \dots, t_{1+m} = t_1 + t_m - t_0\}$. То есть добавим в конец массива его начальный фрагмент из m точек.

Определение 2. Для некоторого набора точек $G = \{a = t_0 < t_1 < \dots < t_n = b\}$ определим его зеркальный набор как $G_z = \{b = y_0 = t_n > y_1 = t_{n-1} > \dots > y_n = t_0 = b\}$

Определение 3. Запишем двумерную функцию разности между функциями f и h :

$$\eta_{i,j} = f(t_{i+j}) - h(\tau_i), \quad j = \overline{0, l-m}, \quad i = \overline{0, m} \quad \tau \in G_h, \quad t \in G_f$$

Определение 4. Запишем дискретную функцию абсолютной ошибки:

$$\delta_j = \frac{1}{m+1} \sum_{i=0}^m |\eta_{i,j}|, \quad j = \overline{0, (l-m)},$$

и дискретную функцию относительной ошибки:

$$\sigma_j = \frac{1}{m+1} \sum_{i=0}^m |\delta_j - \eta_{i,j}|, \quad j = \overline{0, (l-m)}.$$

Определение 5. Запишем функцию распознавания для идентификации кривых при неполных данных на основе корреляции по неполным данным 1 (КНД1) как

$$\lambda_{ND1} = \begin{cases} 1, & (\rho_{ND1} < \varepsilon_{ND1}) \vee (\rho_{ND1}^z < \varepsilon_{ND1}), \\ 0, & (\rho_{ND1} \geq \varepsilon_{ND1}) \wedge (\rho_{ND1}^z \geq \varepsilon_{ND1}) \end{cases} \quad (1)$$

где $\rho_{ND1} = \min_j \delta_j$ метрика корреляции по неполным данным №1, а ρ_{ND1}^z метрика корреляции по неполным данным №1, вычисленная на зеркальном наборе данных и ε_{ND1} - классификационный допуск. Равенство $\lambda_{LK1} = 1$ означает успешную классификацию объекта по отношению к эталону, а значение j соответствует углу поворота объекта относительно эталона.

Определение 6. Запишем функцию распознавания для идентификации кривых при неполных данных на основе корреляции по неполным данным №2 (КНД2) как

$$\lambda_{ND2} = \begin{cases} 1, & (\rho_{ND2} < \varepsilon_{ND2}) \vee (\rho_{ND2}^z < \varepsilon_{ND2}), \\ 0, & (\rho_{ND2} \geq \varepsilon_{ND2}) \wedge (\rho_{ND2}^z \geq \varepsilon_{ND2}) \end{cases}$$

где $\rho_{ND2} = \min_j \sigma_j$ метрика корреляции по неполным данным №2, а ρ_{ND2}^z метрика корреляции по неполным данным №2, вычисленная на зеркальном наборе данных и ε_{ND2} - классификационный допуск. Равенство $\lambda_{ND2} = 1$ означает успешную классификацию объекта по отношению к эталону, а значение j соответствует углу поворота объекта относительно эталона.

Рассмотрим примеры идентификации объектов на основе предложенных методов. Так на рис. 3 изображен объект типа “крест”(слева) и его искаженное изображение (справа). Метрика, вычисленная по формуле (1) для этих объектов равна 0.0796, а для объекта “крест”- силуэта самолёта на рис. 1 - равна 0.24, то есть более чем в три раза больше. Статистические исследования значений метрик показали, что величины метрик между объектами одной формы (эталон-эталон), даже подвергнутыми аффинным преобразованиям, различаются менее чем на 1%. А значения метрик, вычисленные между объектами различной формы (эталон-неэталон) имеют значения в среднем в три раза больше. Устанавливая классификационный допуск в середине интервала между математическими ожиданиями метрик типа эталон-эталон и эталон-неэталон, получим наилучшие результаты распознавания.

4. Обсуждение и заключение

Разработка представленных методов идентификации на основе метрик корреляции по неполным данным преследует несколько целей. Во-первых, представить простой метод идентификации формы объектов, обладающий значительно меньшей трудоемкостью вычислений, по сравнению с методами, основанными на геометрической корреляции [7]. Здесь же необходимо отметить, что предложенные методы практически не зависят от сложности формы идентифицируемых объектов, поскольку допускают изменение “детальности представления” формы объекта за счёт выбора уровня отсечения экстремумов функции кривизны, и тем самым точности представления формы объекта. Во-вторых, в названии рассмотренных метрик заложено свойство, допускающее отсутствие или наличие дополнительных экстремумов возникающих в функции кривизны из-за шумов на входном изображении. Так, например, для фигуры “krestDm2”, показанной на рис.3 и имеющей на два экстремума меньше (два угла искусственно сглажены),

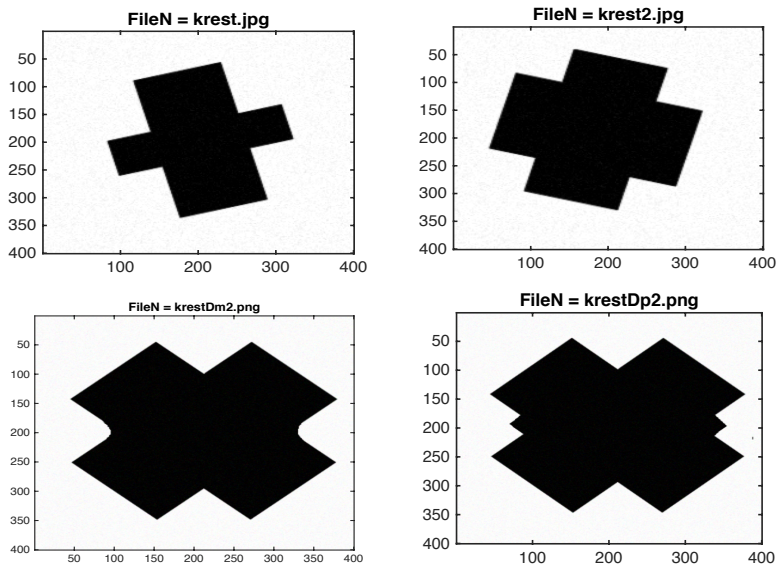


Рис. 3. Объекты “Крест” (слева сверху), “Крест2” (справа сверху), “KrestDm2” (слева снизу) с двумя сглаженными углами и объект “КрестKrestDp2” (справа), с дополнительными углами.

значение метрики между данной фигурой и объектом “крест” увеличилось приблизительно с 0.05 до 0.06, что составляет менее 1%. Повторно вычисленное значение метрики между одинаковыми объектами, но с искусственно введёнными искажениями, например как на рис. 3, где слева на рисунке объект с двумя сглаженными углами и отсутствующими точками экстремумов, а справа, наоборот с дополнительными углами, показало, что значение метрики КНД1 между этими фигурами практически не изменилось и разность не превышает 0.5-1%, что позволяет устойчиво сравнивать форму искаженных объектов. В третьих, проведённые исследования показывают, что данные метрики хорошо работают для различных групп преобразований идентифицируемых объектов, значительно перекрывающих аффинные. Так, например, объекты, представленные на рис. 3 сверху только неформально можно отнести к объектам одинаковой формы, так не существует группы преобразований, трансформирующих один из этих объектов в другой. Тем не менее, при использовании метрик КНД1 и КНД2 они будут отнесены к одному классу, аналогично классификации формы объектов выполняемой человеком. Предложенные метрики находятся

на начальном этапе своего изучения, но уже первые результаты исследований показывают их высокую чувствительность и устойчивость к воздействию шумов. Кроме того, они имеют значительно меньшую вычислительную трудоёмкость по сравнению с аналогичными метриками [7]. Всё это позволяет рекомендовать их к применению в широком диапазоне устройств компьютерного зрения и робототехники.

Благодарности

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-07-00556.

Литература

1. Pavlidis T. Algorithms for Graphics and Image Processing. — Springer, 1982.
2. Debled-Rennesson I., Feschet F., Rouyer-Degli J. Optimal blurred segments decomposition of noisy shapes in linear time. // Computers & Graphics. — 2006. — Vol. 30, no. 1. — P. 30–36.
3. Sobel I. Neighborhood coding of binary images for fast contour following and general binary array processing // Computer graphics and image processing. — 1978. — Vol. 8, no. 1. — P. 127–135.
4. Hermann S., Klette R. A comparative study on 2d curvature estimators. // ICCTA. — IEEE Computer Society, 2007. — P. 584–589.
5. Harris C., Stephens M. A combined corner and edge detector // Proceedings of the 4th Alvey Vision Conference. — 1988. — P. 147–151.
6. Lin Y., Dou J., Wang H. Contour shape description based on an arch height function. // Pattern Recognition. — 1992. — Vol. 25, no. 1. — P. 17–23.
7. Gostev I. On the identification of unclosed curves // Pattern recognition and image analysis. — 2013. — Vol. 23, no. 2. — P. 217–225.

UDC 519.92

About modelling of metrics for identification form of objects under incomplete input information

I. M. Gostev

*National Research University Higher School of Economics,
20 Myasnitskaya Ulitsa, Moscow, Russia, 101000*

Process of recognition of the shape of graphic objects consists of several stages. At the first stage as a result of processing images receive some set of characteristic feature of some object. At the second stage make identification of object by means of comparison of these feature with sample. Presence of noise on real

images often leads to fault of quantity and values in a set of such characteristic feature. In article methods of the identification are considered, allowing identifying the shape of graphic objects in conditions when the part of a set of characteristic feature of object concerning the sample is absent or is deformed by noise. Feature of the presented methods is their invariance to affine transformations of the shape of object, and also high speed of identification, not dependent on complexity of recognized object.

Keywords: image processing, pattern recognition, modelling, metrics.

UDC 519.632.4

Symbolic numerical algorithms and programs for the solution of boundary-value problems of dynamics of few-body quantum systems

A. A. Gusev*, S. I. Vinitzky*[†], O. Chuluunbaatar*,
V. P. Gerdt*, V. L. Derbov[‡]

* *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

[†] *RUDN University, Moscow, Russia*

[‡] *Saratov State University, Saratov, Russia*

Abstract. Symbolic numerical algorithms and problem-oriented complex of programs for the solution of boundary-value problems of dynamics of few-body and low dimensional quantum systems available from Program Library JINRLIB and Computer Physics Communications Program Library are described. Applications to photoionization and a laser and stimulated recombination of atoms and molecules in magneto-optical traps, channeling and tunneling of ions and clusters, near-surface diffusion of molecules, photoabsorption under the electronic and impurity conditions inherent in semiconductor nanostructures are presented.

Keywords: Symbolic numerical algorithms, problem-oriented complex of programs, boundary-value problems, few-body quantum systems, low dimensional quantum systems.

1. Introduction

Creation of symbolic numerical algorithms and a problem-oriented complex of programs for the solution of the boundary-value problems describing dynamics of few-body quantum systems are important problem in development of methods, algorithms and the software for computer modeling of dynamics in low-dimensional physical systems and the analysis of experimental data. Relevance of the presented researches is caused by needs of the Russian and international scientific programs and projects on studying of physical processes for few-body quantum systems: photoionization and a laser and stimulated recombination of atoms and molecules in magneto-optical traps, channeling and tunneling of ions and clusters, near-surface diffusion of molecules, photoabsorption under the electronic and impurity conditions inherent in semiconductor nanostructures.

In a series of works [1–26] the symbolical and numerical algorithms and problem-oriented complexes of programs implementing efficient computing schemes for the numerical solution of boundary-value multidimensional problems of the Schrödinger type in a finite domain of multidimensional configuration space are presented. They are based on the method proposed by L.V. Kantorovich in 1933 [30] for the numerical solution of boundary-value two-dimensional problems of elliptic type by reducing them to a system of the ordinary differential equations (ODEs). The essence of the

method consists in decomposing the required solution over the basic functions of one variable, which are continuously depending on the second variable as a parameter [31], whereas in commonly used projective methods of solving two-dimensional boundary problems the basic functions depend on one variable only [31,32]. It is known that if the domain of definition of the desired solution can be divided into subdomains or has a complex-shaped boundary, the compound basic functions with nonlinear variation parameters that allows for the features of the solution sought for are commonly used [31,32]. For example, application Kantorovich method to the solution of Maxwell's equations in an integrated optical waveguide with an irregular change of parameters along two horizontal directions is given in [34]. Using analytic calculations, a system of differential equations for the coefficient Kantorovich functions using computer algebra system Maple was derived.

The Kantorovich method (KM) can be considered as a generalization of the variation approach [33] in which the modified compound basic functions additionally depending on the second variable as a parameter are applied. Therefore, the KM occupies an intermediate position between the exact solution of the problem and other variational and projective methods [29], and allows the implementation of an economic algorithm for calculating the one-parametrical basic functions, allowing for the solution features and boundary conditions of the initial problem. Moreover, the KM offers an opportunity to construct the optimal asymptotic expansion of solutions of a multichannel scattering problem, necessary for transferring the asymptotic boundary conditions to the boundary of the finite domain in the form of third-kind conditions, using the asymptotic methods (AM) implemented in symbolic and numeric algorithms. As the basic functions for the MK numerical solution of Schrödinger-type multidimensional boundary problems, describing the dynamics in low-dimensional few-body quantum systems, the eigenfunctions of the so-called fast subsystem operator, a part of the original operator of the system, were used. The expansion of the required solution over the set of basic functions depending on the slow variable as a parameter makes an essence of the adiabatic method, widely used in various fields of physics [35]. As a result of projecting on the set of such basic functions, the initial multidimensional boundary problem is reduced either to a bound-state problem, or to a multichannel scattering problem for the set of second-order ODE with respect to the slow variable. The matrix elements of real-valued variable coefficients (MVPK) of this set of equations are expressed in terms of the integrals, containing basic functions and/or their first derivatives with respect to the parameter. The analytic expressions for the asymptotes of the MVPK of self-adjoint second-order ODE set and the asymptotes of the required regular and irregular matrix solutions, necessary for reducing the problem to a finite interval, are calculated using the AM implemented in the symbolic and numerical algorithms. Therefore, the MK solution of the original boundary-value problem is divided into a sequence of several boundary problems, optimally discretized using the finite element method (FEM).

Thus, it is necessary to develop efficient stable computing schemes, economic symbolic and numeric algorithms, and problem-oriented complex of programs, implementing them for solving this class of problems.

2. Algorithms and programs

In the series of works presented by the authors [1–26] within KM, FEM and AM effective variation and projective schemes and symbolical and numerical algorithms are developed for solving the Schrödinger-type multidimensional boundary problems with uniform boundary conditions numerically with the required accuracy, and for analyzing the dynamics in few-body quantum systems.

The problem-oriented complex of programs [1–8] for the numerical analysis of various processes in few-body quantum systems has been developed. The following complex of programs which is of interest for a wide range of users is transferred to Program Libraries of the Computer Physics Communication Journal and JINR [27, 28]:

KANTBP [1] - the program for solving a bound-state problem and a multichannel scattering problem for self-adjoint second-order ODE systems with real-valued variable coefficients and uniform boundary conditions (of the first and the second kind at large and small values of the independent variable and the third kind at large values of the independent variable). The program is written in Fortran.

KANTBP 2.0 [2] - the new version of the KANTBP program. In this version the option is added for solving a continuous-spectrum problem with the uniform boundary conditions of the third kind at large and small values of the independent variable. The program is written in the Fortran language.

KANTBP 3.0 [3] - the new version of the KANTBP 2.0 program. In this version of the program the option is added for the solving the continuous-spectrum problem with uniform boundary conditions of the third kind at large absolute values of the independent variable and for calculating the square matrixes of reflection and transmission amplitudes (the complex arithmetics is used). The program is written in Fortran.

KANTBP 4M [4] - the new version of the KANTBP 3.0 program, the FEM based on the algorithm using interpolation Hermite polynomials [5], is implemented in the Maple computer algebra system. In this version of the program the option is added for solving a continuous-spectrum problem for systems of ODEs with continuous or piecewise-continuous real or complex valued coefficients and with uniform boundary conditions of the third kind at large absolute values of the independent variable and calculating the square and rectangular matrixes of reflection and transmission amplitudes, respectively, i.e. the number of open channels for the incident wave in the scattering problem can be different at the left-hand and the right-hand side and metastable states with complex energy (the complex arithmetic is used).

ODPEVP [6] the program calculates a set of eigenvalues and eigenfunctions of the single-parameter self-adjoint Sturm-Liouville problem with uniform boundary conditions (of the first, second, and third kind), and integrals of products of eigenfunctions and/or their first derivatives in the parameter, the MVPK elements of self-adjoint of the second-order ODE systems. The ODPEVP program is used also as the subroutine in the KANTBP programs, aimed at the solution of the bound state problems and multichannel scattering problems for self-adjoint systems of the second-order ODE. The program is written in Fortran.

POTHEA [7] - the program for calculating eigenvalues, surface eigenfunctions and their first derivatives in the parameter of the parametrical self-adjoint two-dimensional elliptic differential equation with Dirichlet and/or Neumann's uniform conditions in a finite two-dimensional domain with the prescribed accuracy. The program calculates also the potential matrix elements, the integrals of the products of surface functions and/or their first derivatives in the parameter. The eigenvalues depending on the parameter and the matrix elements calculated with the POTHEA program were used as the MVPK elements of the self-adjoint second-order ODE systems describing the dynamics of a helium atom, for which by means of the KANTBP programs the bound-state problem and multichannel scattering problems were solved. The program is written in Fortran.

POTHMF [8] - the program for solving the single-parameter eigenvalue problem for angular oblate spheroidal functions, and calculating the first derivative in the parameter for the eigenfunctions and the integrals of products of eigenfunctions and their first derivatives in the parameter. The eigenvalues depending on the parameter and the matrix elements calculated with the POTHMF program were used as the MVPK elements of the self-adjoint second-order ODE system, for which by means of the KANTBP programs the bound-state problem and the multichannel scattering problem were solved, describing the dynamics of a hydrogen atom in magnetic field. The POTHMF program calculates also the dipole matrix elements necessary for calculation of optical transitions between the states of discrete and continuous spectra. Necessary analytical expressions for the asymptotes of MVPK of the ODE self-adjoint system and asymptotes of the required regular and irregular matrix solutions were calculated by means of symbolic and numeric algorithms implemented in the MAPLE computer algebra system and used in the presented subroutines. The program is written in Fortran.

3. Applications

The complex of the KANTBP [1-3], ODPEVP [6], POTHEA [7] and POTHMF [8] programs allows the solution of boundary problems for the 2D and 3D partial differential equation of the elliptic type within the KM with discretizing the sequence of boundary problems using the FEM with the set accuracy. The following numbers of user addresses for these

programs were officially registered before April 1, 2015, in the Program Library of the Computer Physics Communication Journal: KANTBP - 218, KANTBP 2.0 - 286, KANTBP 3.0 - 26, POTHMF - 195, ODPEVP - 134, POTHEA - 27. The efficiency of the developed methods, algorithms and the complex of programs KANTBP [1–5], ODPEVP [6], POTHEA [7] and POTHMF [8] was confirmed by the results of the theoretical and numerical analysis of an error of solutions of boundary problems and the results of modeling of a number of physical processes in few-body and low-dimensional quantum systems. The most important results are:

1. Within the frameworks of FEM the theoretical estimates are proved for the approximation error of the first derivative with respect to the parameter for the eigenvalues and eigenfunctions of a boundary-value problem, and for the integrals products of eigenfunctions and/or their first parameter derivatives, i.e., for the MVPK elements of self-adjoint systems of the second-order ODE [6, 7].

2. The model of the resonant photoionization mechanism and laser-stimulated recombination of hydrogen atom in a uniform magnetic field is numerically studied. The effects of resonant transmission and total reflection of oppositely charged particles in uniform magnetic field are predicted for the first time [9–11]. The analysis of highly-excited Rydberg states radiation decay rates of a hydrogen atom in a magnetic field is carried out [12].

3. The numerical analysis of the model of axial channeling of the similarly charged particles in the effective oscillator potential of a crystal is performed. The nonmonotonic behavior is revealed in the dependence of the enhancement coefficient of the nuclear reaction rate upon the energy of collision, caused by the effect of full reflection of channeled ions predicted for the first time [13, 14].

4. Cluster tunneling through repulsive barriers is studied using symbolic-numeric computation techniques. The model of the cluster consists either of a pair of particles (ions), or of several identical particles, coupled by pair short-range oscillator-type potentials. Nonmonotonic behavior of transmission and reflection coefficients as functions of the collision energy, the number of particles and the symmetry type of the cluster state is revealed. It is shown that the resonant transmission of a cluster through barriers (the quantum transparency effect) with characteristic increase in the probability density of states in the vicinity of the local minima of the potential energy depending on transversal variables is caused by the formation of metastable states of the cluster, interacting with the barriers [15–19].

5. Within the frameworks of the effective mass approximation, the spectral and optical characteristics of electron and impurity states in axially symmetric models of semiconductor quantum wells, quantum wires and quantum dots in external fields, as well as the Zeeman and Stark quantum-dimensional effects, are studied using symbolic-numeric calculations [20–24].

6. The quantum transparency effect is analyzed in the model of quantum diffusion of beryllium diatomic molecules on copper surface. The reference calculation was carried out for beryllium molecules with Morse potential. The parameters of the barrier Gaussian potential were fitted to the experimental data on the quantum diffusion of hydrogen atoms on copper surface. It is shown that the quantum transparency of barriers increases the thermal quantum tunneling rate constants and decreases the energy of activation of the compound molecular system at low temperatures below the potential barrier energy [25, 26].

Acknowledgments

The work was partially supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 14-01-00420) and the Bogolyubov-Infeld program of JINR.

References

1. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Abrashkevich A.G., Amaya-Tapia A., Kaschiev M.S., Larsen S.Y. and Vinitzky S.I.*, KANTBP: A program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach, *Comput. Phys. Commun.* 177, pp. 649-675 (2007).
2. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitzky S.I., Abrashkevich A.G.*, KANTBP 2.0: New version of a program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach, *Comput. Phys. Commun.* 179, pp. 685-693 (2008).
3. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I. and Abrashkevich A.G.*, KANTBP 3.0: New version of a program for computing energy levels, reflection and transmission matrices, and corresponding wave functions in the coupled-channel adiabatic approach, *Comput. Phys. Commun.* 185, pp. 3341-3343 (2014).
4. *Gusev A.A., Hai L.L., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I.*, Program KANTBP 4M for solving boundary-value problems for systems of ordinary differential equations of the second order, 2015 – <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m>
5. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Gózdź A., Hai L.L., Rostovtsev V.A.*, Symbolic-numerical solution of boundary-value problems with self-adjoint second-order differential equation using the finite element method with interpolation Hermite polynomials, *Lect. Notes in Comp. Sci.* 8660, pp. 138-154 (2014).
6. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitzky S.I. and Abrashkevich A.G.*, ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem, *Comput. Phys. Commun.* 181, pp. 1358-1375 (2009).

7. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I. and Abrashkevich A.G.*, POTHEA: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed 2D elliptic partial differential equation, *Comput. Phys. Commun.* 185, pp. 2636-2654 (2014).
8. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A., Vinitzky S.I., Abrashkevich A.G., Kaschiev M.S. and Serov V.V.*, POTHMF: A program for computing potential curves and matrix elements of the coupled adiabatic radial equations for a hydrogen-like atom in a homogeneous magnetic field, *Comput. Phys. Commun.* 178, pp. 301-330 (2008).
9. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Derbov V.L., Kaschiev M.S., Mardoyan L.G., Serov V.V., Tupikova T.V. and Vinitzky S.I.*, Adiabatic representation for a hydrogen atom photoionization in an uniform magnetic field, *Phys. Atom. Nucl.*, 71, pp. 844-852 (2008).
10. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Melnikov L.A. and Serov V.V.*, Photoionization and recombination of a hydrogen atom in a magnetic field, *Phys. Rev. A* 77, pp. 034702-1-4 (2008).
11. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Derbov V.L., M.S. Kaschiev, L.A. Melnikov, V.V.Serov and Vinitzky S.I.*, Calculation of a hydrogen atom photoionization in a strong magnetic field by using the angular oblate spheroidal functions, *J. Phys. A* 40, pp. 11485-11524 (2007).
12. *Gusev A., Vinitzky S., Chuluunbaatar O., Gerdt V., Hai L.L. and Rostovtsev V.A.*, Symbolic-numerical calculations of high $|m|$ Rydberg states and decay rates in strong magnetic fields, *Lect. Notes in Comp. Sci.* 7442, pp. 155-171 (2012).
13. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Derbov V.L., Krassovitskiy P.M. and Vinitzky S.I.*, Channeling problem for charged particles produced by confining environment, *Phys. Atom. Nucl.* 72, pp. 768-778 (2009).
14. *Krassovitskiy P.M., Vinitzky S.I., Gusev A.A. and Chuluunbaatar O.*, The cross section of reaction of two charged particles in a channel of a crystal, *Bull. of the Russian Academy of Sci.: Physics.* 73, pp. 222-224 (2009).
15. *Gusev A., Vinitzky S., Chuluunbaatar O., Rostovtsev V.A., Hai L.L., Derbov V. and Krassovitskiy P.*, Symbolic-numerical algorithm for generating cluster eigenfunctions: tunneling of clusters through repulsive barriers, *Lect. Notes in Comp. Sci.* 8136, pp. 427-442 (2013).
16. *Gusev A.A., Vinitzky S.I., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A.*, Symbolic-numerical algorithms to solve the quantum tunneling problem for a coupled pair of ions, *Lect. Notes in Comp. Sci.* 6885, pp. 175-191 (2011).
17. *Gusev A.A., Vinitzky S.I., Chuluunbaatar O., Derbov V.L., Gózdź A., and Krassovitskiy P.M.*, Metastable states of a composite system tunneling through repulsive barriers. *Theoretical and Mathematical Physics — 2016 — Vol. 186 — P. 21-40.*
18. *Gusev A.A., Vinitzky S.I., Chuluunbaatar O., Gózdź A., Derbov V.L.,*

- Resonance tunnelling of clusters through repulsive barriers, *Physica Scripta* 89, pp. 054011-1-7 (2014).
19. *Gusev A.A., Vinitzky S.I., Chuluunbaatar O., Hai L.L., Derbov V.L. and P.M. Krassovitskiy*, Resonant tunneling of the few bound particles through repulsive barriers, *Phys. Atom. Nucl.* 77, pp. 389-413 (2014).
 20. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Dvoyan K.G., E.M. Kazaryan, Sarkisyan H.A., Derbov V.L., Klombotskaya A.S. and Serov V.V.*, Adiabatic description of nonspherical quantum dot models, *Physics of Atomic Nuclei* 75 pp. 1210-1226 (2012).
 21. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Serov V.V.*, Symbolic-numeric algorithms for computer analysis of spheroidal quantum dot models, *Lect. Notes in Comp. Sci.* 6244, pp. 106-122 (2010).
 22. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Kazaryan E.M., Kostanyan A.A. and Sarkisyan H.A.*, Adiabatic approach to the problem of a quantum well with a hydrogen-like impurity, *Phys. Atom. Nucl.* 73, pp. 331-338 (2010).
 23. *Vinitzky S.I., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Gusev A.A., and Rostovtsev V.A.*, Symbolic-numerical algorithms for solving parabolic quantum well problem with hydrogen-like impurity, *Lect. Notes in Comp. Sci.* 5743, pp. 334-349 (2009).
 24. *Gusev A.A., Hai L.L., Vinitzky S.I., Chuluunbaatar O., Derbov V.L., Klombotskaya A.S., Dvoyan K.G. and Sarkisyan H.A.*, Analytical and numerical calculations of spectral and optical characteristics of spheroidal quantum dots, *Phys. Atom. Nucl.* 76, pp. 1033-1055 (2013).
 25. *Vinitzky S.I., Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Hai L.L., Derbov V.L., Krassovitskiy P.M., Gózdź A.*, Symbolic numerical algorithm for solving quantum tunneling problem of a diatomic molecule through repulsive barriers, *Lect. Notes in Comp. Sci.* 8660, pp. 472-490 (2014).
 26. *Vinitzky S., Gusev A., Chuluunbaatar O., Hai L.L., Derbov V., Krassovitskiy P.M.*, Models of quantum tunneling of a diatomic molecule affected by laser pulses through repulsive barriers, *Proc. SPIE* 9031, pp. 90311D (2014).
 27. Computer Physics Communications Program Library <http://cpc.cs.qub.ac.uk/>
 28. Program library "JINRLIB": <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/indexe.php>
 29. *Kantorovich L.V. and Krylov V.I.*, Approximate methods of higher analysis. — New York, Interscience Publishers, 1958.
 30. *Kantorovic L.* Sur une methode directe de la solution approximative du probleme du minimum d'une integrale double *Bulletin de l'Academie des Sciences de l'URSS. Classe des sciences mathematiques et na*, no. 5, pp. 647-652 (1933).
 31. *Vlasova Z.A.* On the method of reduction to ordinary differential equations *Trudy Mat. Inst. Steklov.* 53, pp. 16-36 (1959).
 32. *Sevastyanov L.A., Egorov A.A.* Theoretical analysis of the waveguide

- propagation of electromagnetic waves in dielectric smoothly-irregular integrated structures, *Optics and Spectroscopy* 105, pp. 576–584 (2008).
33. *Elsgolts L.* *Differential Equations and the Calculus of Variations.* — Mir Publishers, Moscow, 1977.
 34. *Sevastyanov A.L., Sevastianov L.A., Tyutyunnik A.A.* , Analytical calculations of derivation partial differential equations for coefficient Kantorovich functions, *Matem. Mod.* 27:7 , pp. 103–110 (2015).
 35. *Migdal A.B. and Krainov V.* *Approximation Methods in Quantum Mechanics.* — W. A. Benjamin, Inc., 1969.

УДК 519.632.4

Решение краевых задач для систем ОДУ большой размерности: эталонные расчеты в рамках метода Канторовича

А. А. Гусев*, О. Чулуунбаатар*,
С. И. Веницкий*[†], В. Л. Дербов[‡]

* *Объединённый институт ядерных исследований, г. Дубна*

[†] *Российский университет дружбы народов, г. Москва*

[‡] *Саратовский государственный университет, г. Саратов*

Аннотация. Представлены эталонные расчеты краевой задачи для систем ОДУ второго порядка большой размерности с помощью программы KANTBP с использованием метода конечных элементов. На практике, для решения краевых задач с далекодействующими потенциалами и большого числа открытых каналов необходимо решать краевые задачи для систем дифференциальных уравнений большой размерности, которые также требуют изучения сходимости и устойчивости алгоритмов и программ. С этой целью в данной работе решена задача на собственные значения для эллиптического дифференциального уравнения в двумерной области с граничными условиями Дирихле. Решение ищется в виде разложения Канторовича по параметрическим базисными функциями одной из независимых переменных, при этом вторая независимая переменная рассматривается как параметр. Базисные функции вычисляются в аналитическом виде как решения вспомогательной параметрической задачи Штурма-Лиувилля для ОДУ второго порядка. В результате, двумерная задача сводится к краевой задаче для самосопряженной системы ОДУ второго порядка относительно второй независимой переменной. Дискретизация задачи выполнена в рамках метода конечных элементов. Эффективность, устойчивость и сходимость вычислительной схемы продемонстрирована эталонными расчетами для треугольной мембраны с вырожденным спектром.

Ключевые слова: Тестовые расчеты, краевая задача, системы ОДУ большой размерности, метода Канторовича.

1. Введение

Решение квантовой задачи туннелирования или расчеты спектральных и оптических свойств электронных состояний в аксиально-симметричных квантовых точек и гелиеподобных атомов (система двух электронов в кулоновском поле) сводится к решению краевых задач (КЗ) для эллиптических дифференциальных уравнений с неразделяющимися переменными в конечной области [1–3]. Один из способов решения этих задач реализуется в виде набора программ ODPEVP-ROTNEA-KANTBP [4–6] на основе метода Канторовича (МК), который обеспечивает редукцию исходной задачи к краевой задаче для

систем ОДУ [7] с последующей дискретизацией методом конечных элементов (МКЭ) [8]. На практике для решения задач с далекодействующими потенциалами и большим числом открытых каналов возникает необходимость решения краевых задач для систем дифференциальных уравнений большой размерности, требующих дополнительного исследования сходимости и устойчивости применяемых алгоритмов и программ.

Тестирование алгоритмов и программ решения краевых задач для систем ОДУ большой размерности, реализующих МК и МКЭ, на примере точно-решаемых двумерных КЗ является целью настоящей работы. Представлена вычислительная схема решения задачи на собственные значения для эллиптического дифференциального уравнения в двумерной конечной области с граничными условиями Дирихле. Решение ищется в виде разложения Канторовича по базисным функциям одной из независимых переменных и со второй переменной, трактуемой как параметр. Базисные функции вычисляются как решения параметрической задачи на собственные значения для ОДУ второго порядка. Далее, исходная задача сводится к КЗ для системы самосопряженных ОДУ второго порядка по второй независимой переменной. Дискретизация КЗ осуществляется с применением МКЭ с интерполяционными полиномами Эрмита [9], которая используется для формулировки обобщенной алгебраической задачи на собственных значений для матриц большой размерности. Показана эффективность программы КАНТВР для решения краевой задачи для систем большого числа ОДУ в тестовых расчетах для точно решаемой задачи на собственные значения треугольной мембраны с вырожденным спектром.

2. Метод Канторовича – приведение к системам ОДУ

Рассмотрим КЗ для эллиптического уравнения в двумерной области $\Omega(x_f, x_s) \subset \mathbf{R}^2$:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_s^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} + V(x_f, x_s) - E\right) \Psi(x_f, x_s) = 0, \quad (1)$$

где $V(x_f, x_s)$ – вещественные функции и $\Psi(x_f, x_s)$ подчиняются условиям Дирихле на границе $\partial\Omega(x_f, x_s)$ области $\Omega(x_f, x_s)$

$$\Psi(x_f, x_s) \Big|_{(x_f, x_s) \in \partial\Omega(x_f, x_s)} = 0. \quad (2)$$

Решения $\Psi(x_f, x_s) \in W_2^2(\Omega)$ КЗ (1)–(2) ищется в виде разложения Канторовича [7]

$$\Psi_i(x_f, x_s) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \Phi_j(x_f; x_s) \chi_{ji}(x_s), \quad (3)$$

по набору собственных функций КЗ

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_f} + V(x_f, x_s) - \epsilon_j(x_s)\right) \Phi(x_f; x_s) = 0, \quad (4)$$

на интервале $x_f \in (x_f^{\min}(x_s), x_f^{\max}(x_s)) = \Omega_{x_f}(x_s)$ с переменными границами, зависящими от переменной $x_s \in \Omega_{x_s}$, как от параметра. Собственные функции $\Phi(x_f; x_s)$ подчиняются условию Дирихле

$$\Phi_j(x_f^{\min}(x_s); x_s) = 0, \quad \Phi_j(x_f^{\max}(x_s); x_s) = 0 \quad (5)$$

в граничных точках $\{x_f^{\min}(x_s), x_f^{\max}(x_s)\} = \partial\Omega_{x_f}(x_s)$, интервала $\Omega_{x_f}(x_s)$.

Собственные функции удовлетворяют условию нормировки на интервале $x_f \in \Omega_{x_f}(x_s)$:

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \int_{x_f^{\min}(x_s)}^{x_f^{\max}(x_s)} \Phi_i(x_f; x_s) \Phi_j(x_f; x_s) dx_f = \delta_{ij}, \quad (6)$$

где $\epsilon_1(x_s) < \dots < \epsilon_{j_{\max}}(x_s) < \dots$ набор вещественных собственных значений.

Подстановка разложения (3) в уравнение (1) с использованием (5) и (6) приводит к самосопряженной системе ОДУ второго порядка относительно искомых вектор-функций $\chi^{(i)}(x_s, E) \equiv \chi^{(i)}(x_s) = (\chi_1^{(i)}(x_s), \dots, \chi_{j_{\max}}^{(i)}(x_s))^T$:

$$\left(-\mathbf{I} \frac{d^2}{dx_s^2} + \mathbf{U}(x_s) - 2E\mathbf{I} + \frac{d\mathbf{Q}(x_s)}{dx_s} + \mathbf{Q}(x_s) \frac{d}{dx_s}\right) \chi^{(i)}(x_s) = 0. \quad (7)$$

Здесь $\mathbf{U}(x_s)$ и $\mathbf{Q}(x_s)$ – матрицы размерностью $j_{\max} \times j_{\max}$

$$U_{ij}(x_s) = \epsilon_i(x_s) \delta_{ij} + H_{ij}(x_s),$$

$$H_{ij}(x_s) = H_{ji}(x_s) = \int_{x_f^{\min}(x_s)}^{x_f^{\max}(x_s)} \frac{\partial \Phi_i(x_f; x_s)}{\partial x_s} \frac{\partial \Phi_j(x_f; x_s)}{\partial x_s} dx_f, \quad (8)$$

$$Q_{ij}(x_s) = -Q_{ji}(x_s) = - \int_{x_f^{\min}(x_s)}^{x_f^{\max}(x_s)} \Phi_i(x_f; x_s) \frac{\partial \Phi_j(x_f; x_s)}{\partial x_s} dx_f.$$

Собственные функции $\chi^{(p)}(x_s)$ дискретного спектра $E : E_1 < E_2 < \dots < E_v < \dots$ подчиняются граничным условиям

$$\chi^{(p)}(x_s^t) = 0, \quad x_s^t = x_s^{\min}, x_s^{\max} \quad (9)$$

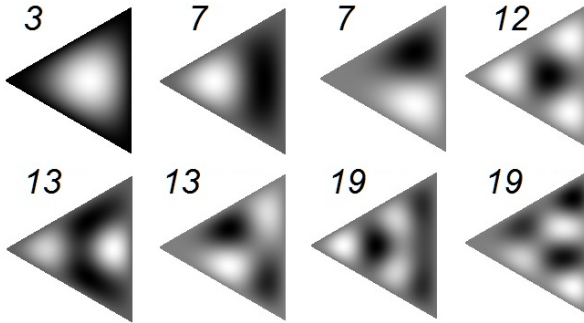


Рис. 1. Собственные функции $\Psi(x, y)$ связанных состояний двумерной КЗ (11), (12), составленной из компонент $\chi_j^{(i)}(x_s)$ собственных функций КЗ для системы ОДУ (7)–(10), и параметрических базисных функций $\Phi_i(x_f; x_s)$, заданных в аналитическом виде (13).

и условию ортонормировки

$$\int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} (\chi^{(i)}(x_s))^T \chi^{(j)}(x_s) dx_s = \delta_{ij}. \quad (10)$$

3. Пример: треугольная мембрана

В качестве тестового примера рассмотрим краевую задачу для треугольной мембраны

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_s^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} - E \right) \Psi(x_f, x_s) = 0 \quad (11)$$

с краевыми условиями Дирихле на границе $\partial\Omega(x, y)$ области $\Omega(x_f, x_s)$:

$$\Psi((x_f, x_s) \in \partial\Omega(x_f, x_s)) = 0. \quad (12)$$

В рассматриваемом случае параметрические собственные функции $\Phi_i(x_f; x_s)$ КЗ (4)–(6) и потенциальные кривые $\epsilon_i(x_s)$ вычисляются аналитически

$$\epsilon_i(x_s) = \frac{\pi^2 i^2}{(x_f^{\max}(x_s) - x_f^{\min}(x_s))^2}, \quad \Phi_i(x_f; x_s) = \frac{\sqrt{2} \sin\left(\frac{\pi i (x_f - x_f^{\min}(x_s))}{x_f^{\max}(x_s) - x_f^{\min}(x_s)}\right)}{\sqrt{x_f^{\max}(x_s) - x_f^{\min}(x_s)}}. \quad (13)$$

Выполняя интегрирование с базисными функциями (13) также вычисляются аналитически эффективные потенциалы (8):

$$Q_{ij}(x_s) = -\frac{2ij}{i^2 - j^2} \frac{\left((-1)^{i+j} \frac{dx_f^{\max}(x_s)}{dx_s} - \frac{dx_f^{\min}(x_s)}{dx_s}\right)}{x_f^{\max}(x_s) - x_f^{\min}(x_s)}, \quad j \neq i,$$

$$H_{ij}(x_s) = -\frac{4ij(i^2 + j^2)}{(i^2 - j^2)^2} \frac{\left((-1)^{i+j} \frac{dx_f^{\max}(x_s)}{dx_s} - \frac{dx_f^{\min}(x_s)}{dx_s}\right) \left(\frac{dx_f^{\max}(x_s)}{dx_s} - \frac{dx_f^{\min}(x_s)}{dx_s}\right)}{(x_f^{\max}(x_s) - x_f^{\min}(x_s))^2},$$

$$H_{ii}(x_s) = \frac{\pi^2 i^2}{3} \frac{\left(\frac{dx_f^{\max}(x_s)}{dx_s}\right)^2 + \left(\frac{dx_f^{\min}(x_s)}{dx_s}\right) \left(\frac{dx_f^{\max}(x_s)}{dx_s}\right) + \left(\frac{dx_f^{\min}(x_s)}{dx_s}\right)^2}{(x_f^{\max}(x_s) - x_f^{\min}(x_s))^2} + \frac{1}{4} \frac{\left(\frac{dx_f^{\max}(x_s)}{dx_s} - \frac{dx_f^{\min}(x_s)}{dx_s}\right)^2}{(x_f^{\max}(x_s) - x_f^{\min}(x_s))^2}.$$

В симметричном случае $x_f^{\max}(x_s) = -x_f^{\min}(x_s)$ система ОДУ (7) разделяется на две подсистемы из которых определяются чётные (с нечётными индексами j и i) и нечётные решения (с чётными индексами j и i).

В качестве области выберем равносторонний треугольник со стороной $4\pi/3$, для которого собственные значения $E_i = \mu^2 + \nu^2 + \mu\nu = 3, 7, 7, 12, 13, 13, 19, 19, 21, 21, 27, \dots$, где $\mu, \nu = 1, 2, \dots$ – целые числа [10]. При этом рассмотрим два выбора быстрой x_f и медленной x_s переменных:

1, x_f параллельна стороне треугольника, а x_s перпендикулярна ей:

$$x_f^{\max}(x_s) = 2\pi/3 - x_s/\sqrt{3}, \quad x_f^{\min}(x_s) = -2\pi/3 + x_s/\sqrt{3},$$

$$x_s^{\min} = 0, \quad x_s^{\max} = 2\pi/\sqrt{3}.$$

2, x_s параллельна стороне треугольника, а x_f перпендикулярна ей:

$$x_f^{\max}(x_s) = 2\pi/\sqrt{3} - \sqrt{3}|x_s|, \quad x_f^{\min}(x_s) = 0,$$

$$x_s^{\min} = -2\pi/3, \quad x_s^{\max} = 2\pi/3.$$

В обоих случаях учитывая свойства симметрии равностороннего треугольника, мы применяем МКЭ на сетке $\Omega_{x_s} = (0(2)3v/4(2)v)$, $v = x_s^{\max} - 0.002$, где число конечных элементов на каждом подинтервале указано в круглых скобках, с интерполяционными полиномами

Таблица 1

Зависимости погрешностей $\delta E_i^\sigma = E_i^{\sigma;\text{calc}} - E_i^\sigma$, $\sigma = e, o$, собственных значений от числа j_{\max} чётных (е) и нечётных (о) базисных функций.

j_{\max}	δE_1^e	δE_2^e	δE_3^e	δE_4^e	δE_{10}^e	δE_1^o	δE_2^o	δE_7^o
	case 1							
6	1.36(-4)	5.44(-4)	2.45(-3)	1.29(-3)	2.32(-2)	6.67(-4)	2.59(-3)	2.47(-2)
13	1.37(-5)	5.41(-5)	2.35(-4)	1.22(-4)	2.02(-3)	7.44(-5)	2.85(-4)	2.35(-3)
28	1.39(-6)	5.49(-6)	2.37(-5)	1.22(-5)	1.99(-4)	7.98(-6)	3.05(-5)	2.44(-4)
60	1.42(-7)	5.62(-7)	2.42(-6)	1.25(-6)	2.03(-5)	8.41(-7)	3.21(-6)	2.56(-5)
130	1.41(-8)	5.56(-8)	2.39(-7)	1.23(-7)	2.01(-6)	8.42(-8)	3.22(-7)	2.56(-6)
280	1.43(-9)	5.54(-9)	2.41(-8)	1.24(-8)	2.05(-7)	8.56(-9)	3.26(-8)	2.59(-7)
	case 2							
6	8.69(-4)	8.21(-3)	1.83(-2)	2.43(-2)	0.95	1.13(-3)	8.79(-3)	4.84(-2)
13	1.01(-4)	8.93(-4)	1.79(-3)	2.33(-3)	3.57(-2)	1.34(-4)	9.97(-4)	3.10(-3)
28	1.13(-5)	9.82(-5)	1.93(-4)	2.52(-4)	3.48(-3)	1.50(-5)	1.10(-4)	3.27(-4)
60	1.21(-6)	1.05(-5)	2.07(-5)	2.70(-5)	3.65(-4)	1.62(-6)	1.18(-5)	3.48(-5)
130	1.24(-7)	1.07(-6)	2.10(-6)	2.73(-6)	3.68(-5)	1.64(-7)	1.20(-6)	3.52(-6)
280	1.29(-8)	1.09(-7)	2.13(-7)	2.78(-7)	3.74(-6)	1.68(-8)	1.22(-7)	3.58(-7)
exact	$E_1^e=3$	$E_2^e=7$	$E_3^e=12$	$E_4^e=13$	$E_{10}^e=37$	$E_1^o=7$	$E_2^o=13$	$E_7^o=37$

Лагранжа $p' = 12$ -го порядка, что обеспечивает точность $O(h^{p'+1})$ собственных функций и $O(h^{2p'})$ собственных значений, где $h = 3v/8$ — максимальная длина элемента [8].

Численные расчеты задачи на собственные значения (7)–(9) были выполнены используя до $j_{\max} = 280$ уравнений с помощью новой версии программы KANTBP4, реализованной на языке Fortran. На рис. 1 представлены типичные примеры профилей собственных функций, соответствующих как невырожденным, так и двукратно вырожденным уровням с собственными значениями $E_2^e = E_1^o = 7$, $E_4^e = E_2^o = 13$, и $E_5^e = E_3^o = 19$.

Как показано в таблице 1 достигнута точность вычисления $\delta E_i^\sigma = E_i^\sigma - E_i$ порядка 10^{-8} для собственных значений. Как видно из таблицы, что скорость сходимости Канторовича разложения (3) порядка j_{\max}^{-3} , что соответствует теоретическим оценкам, полученных по теории возмущений. Такая же сходимость имеет место как при решении двумерной эллиптической задачи для квадратной мембраны [11], так и при решении параметрической двумерной задачи для атома гелия [5].

При $j_{\max} = 6, 60$ и 280 размерности симметричных матриц масс и жесткости $((12 \cdot 4 + 1)j_{\max} \times (12 \cdot 4 + 1)j_{\max})$ равны 294×294 , 2940×2940 ,

13720×13720 , с полушириной лент $((12 \cdot 2 + 1)j_{\max})$ равной 150, 1500 и 7000, соответственно, время вычисления на языке Fortran-77 на PC Intel Core i5 3.33GHz, 4Gb, 64 bit Windows 7 составило около 1 секунды, 15 и 455 секунд.

4. Заключение

Дана оценка скорости сходимости разложения Канторовича (3) порядка j_{\max}^{-3} в тестовых расчетах для точно решаемой задачи на собственные значения для треугольной мембраны с вырожденным спектром. Продемонстрирована эффективность (зависимость времени расчёта набора собственных значений и собственных функций от размерности матриц масс и жесткости) и стабильность (увеличение точности вычисления собственных значений и собственных функций с увеличением числа ОДУ и, соответственно, размерности матриц масс и жесткости) программы KANTBP, реализующей МКЭ, при решении краевой задачи для систем большого числа ОДУ второго порядка с переменными коэффициентами, заданными в аналитическом виде. Предлагаемую эталонную модель можно использовать для тестирования алгоритмов и программ решения КЗ для систем большого числа ОДУ второго порядка, или обобщенных алгебраических задач на собственные значения с симметричными матрицами больших размерностей.

Благодарности

Работа поддержана РФФИ (грант 14-01-00420).

Литература

1. Gusev A.A., Vinitzky S.I., Chuluunbaatar O., Derbov V.L., Gózdź A., and Krassovitskiy P.M., Metastable states of a composite system tunneling through repulsive barriers. Theoretical and Mathematical Physics — 2016 — Vol. 186 — P. 21–40.
2. Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Serov V.V., Symbolic-numeric algorithms for computer analysis of spheroidal quantum dot models. Lecture Notes in Computer Science — 2010 — Vol. 6244 — P. 106–122.
3. Vinitzky S.I., Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Derbov V.L., Zotkina A.S. On calculations of two-electron atoms in spheroidal coordinates mapping on hypersphere Proc. SPIE — 2016 — Vol. 9917 — P. 99172Z.
4. Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Abrashkevich A.G., ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem. Comput. Phys. Commun. — 2009 — Vol. 181 — P. 1358–1375.

5. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Abrashkevich A.G.*, POTHEA: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjoint 2D elliptic partial differential equation, *Comput. Phys. Commun.* — 2014 — Vol. 185 — P. 2636–2654.
6. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitzky S.I., Abrashkevich A.G.* KANTBP 2.0: New version of a program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach, *Comput. Phys. Commun.* — 2008 — Vol. 179 — P. 685–693.
7. *Kantorovich L.V., Krylov V.I.*, *Approximate Methods of Higher Analysis*. Wiley, New York, 1964.
8. *Strang G., Fix G.J.*, *An Analysis of the Finite Element Method*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New York, 1973.
9. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Derbov V.L., Gozdz A., Hai L.L., Rostovtsev V.A.*, Symbolic-numerical solution of boundary-value problems with self-adjoint second-order differential equation using the finite element method with interpolation Hermite polynomials, *Lecture Notes in Computer Science* — 2014 — Vol. 8660 — P. 138–154.
10. *Pockels F.* Über die partielle Differential-Gleichung $\Delta u + k^2 u = 0$ und deren auftreten in der mathematischen physik. Leipzig, B. G. Teubner, 1891.
11. *Gusev A.A., Hai L.L., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I., Derbov V.L.* Solution of boundary-value problems using Kantorovich method, *EPJ Web of Conferences* — 2016 — Vol. 108 — P. 02026.

UDC 519.632.4

Benchmark calculations of the boundary-value problem for a systems of ODEs of large dimension in the framework of Kantorovich method

A. A. Gusev*, **O. Chuluunbaatar***, **S. I. Vinitzky*[†]**,
V. L. Derbov[‡]

* *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

[†] *RUDN University, Moscow, Russia*

[‡] *Saratov State University, Saratov, Russia*

We propose benchmark calculations of the boundary-value problem for a systems of ODEs of large dimension with help of KANTBP program using a finite element method. In practice, for solving problems with the long-range potential and a large number of open channels there is a need for solving boundary value problems of the large-scale systems of differential equations that require further investigation of convergence and stability of the algorithms and programs. With this aim we solve here the eigenvalue problem for an elliptic differential equation in a two-dimensional domain with Dirichlet boundary conditions. The solution

is sought in the form of Kantorovich expansion over the basis functions of one of the independent variables with the second variable treated as a parameter. The basis functions are calculated in an analytical form as solutions of the parametric Sturm-Liouville problem for an ordinary second-order differential equation. As a result, the two-dimensional problem is reduced to a boundary-value problem for a set of self-adjoint second-order ODEs for functions of the second independent variable. The discrete formulation of the problem is implemented using the finite element method. The efficiency, stability and convergence of the calculation scheme is shown by benchmark calculations for a triangle membrane with a degenerate spectrum.

Keywords: Benchmark calculations, boundary-value problem, large-scale systems of ODEs, Kantorovich method.

УДК 519.632.4

Алгоритмы и программы решения краевых задач для системы ОДУ второго порядка с кусочно-постоянными потенциалами

А. А. Гусев*, О. Чулуунбаатар*, С. И. Виницкий*[†],
Л. Л. Хай*, В. Л. Дербов[‡]

* *Объединённый институт ядерных исследований, г. Дубна*

[†] *Российский университет дружбы народов, г. Москва*

[‡] *Саратовский государственный университет, г. Саратов*

Аннотация. Представлены алгоритмы решения многоканальной задачи рассеяния и задачи на собственные значения волноводного типа для системы ОДУ второго порядка с кусочно-постоянными коэффициентами на оси, реализованные в виде программ системе Maple. Дано сравнение результатов, полученных решением краевой задачи методом сшивки фундаментальных решений системы ОДУ в точках разрыва потенциалов и методом конечных элементов.

Ключевые слова: Многоканальная задача рассеяния, задача на собственные значения, система обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка.

1. Введение

Краевые задачи для систем N обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка волноводного типа

$$\left(-\mathbf{I} \frac{d^2}{dz^2} + \mathbf{V}(z) - E\mathbf{I}\right) \Phi(z) = 0, \quad \Phi(z) = (\Phi_1(z), \dots, \Phi_N(z))^T, \quad (1)$$

с матрицей кусочно-постоянных потенциалов $\mathbf{V}(z) = \{V_{ji}(z)\}$, $i, j = 1, \dots, N$:

$$V_{ji}(z) = \{V_{ji;1}, z \leq z_1, V_{ji;2}, z \leq z_2, \dots, V_{ji;k-1}, z \leq z_{k-1}, V_{ji;k}, z > z_{k-1}\} \quad (2)$$

возникают, например, при математическом моделировании квантоворазмерных наноструктур и оптических многослойных систем [1]. С другой стороны они используются как тестовые примеры для алгоритмов и программ, реализующих метод конечных элементов [2]. В данной работе представлены алгоритмы решения двух типов краевых задач: задача на связанные (и/или метастабильные) состояния и многоканальная задача рассеяния. Представлены два способа решения: метод конечных элементов и сшивка фундаментальных решений.

2. Алгоритм шивки фундаментальных решений

Шаг 1. На каждом из подынтервалов $z \in (z_{m-1}, z_m)$, $m = 1, \dots, k$, система N ОДУ (1) есть система ОДУ с постоянными коэффициентами

$$\left(-\mathbf{I} \frac{d^2}{dz^2} + \mathbf{V}_m - E \mathbf{I}\right) \Phi_m(z) = 0,$$

которая имеет общее решение, явно зависящее от спектрального параметра E

$$\Phi_m(z) = \sum_{i=1}^N \left(C_{(2m-2)N+i} F_i^{(m)}(E, -z) \Psi_i^{(m)} + C_{(2m-1)N+i} F_i^{(m)}(E, z) \Psi_i^{(m)} \right).$$

Здесь $F_i^{(m)}(E, z) = \exp(\sqrt{\lambda_i^{(m)} - Ez})$, C_{2mN+i} – неизвестные коэффициенты, $\lambda_i^{(m)}$ и $\Psi_i^{(m)} = \{\Psi_{1i}^{(m)}, \dots, \Psi_{Ni}^{(m)}\}^T$ – решения алгебраической задачи на собственные значения $\mathbf{V}_m \Psi_i^{(m)} = \lambda_i^{(m)} \Psi_i^{(m)}$, которые вычисляются численно и для симметричной матрицы \mathbf{V}_m собственные вектора $\Psi_i^{(m)}$ подчиняются условию ортогональности и нормировки $(\Psi_i^{(m)})^T \Psi_j^{(m)} = \delta_{ij}$.

Шаг 2.1. Для связанных состояний $E < E_{\max} = \min(\lambda_1^{(1)}, \dots, \lambda_N^{(1)}, \lambda_1^{(k)}, \dots, \lambda_N^{(k)})$ асимптотические условия при $z \rightarrow \pm\infty$ описывают экспоненциально убывающие решения

$$\Phi_*(z \rightarrow -\infty) = \sum_{i=1}^N C_{N+i} \exp(\sqrt{\lambda_i^{(1)} - Ez}) \Psi_i^{(1)}, \quad (3)$$

$$\Phi_*(z \rightarrow +\infty) = \sum_{i=1}^N C_{(2k-2)N+i} \exp(-\sqrt{\lambda_i^{(k)} - Ez}) \Psi_i^{(k)}.$$

Шаг 2.2. Для метастабильных состояний $E^M = \Re E^M + i \Im E^M$, $\Im E^M < 0$ асимптотические условия при $z \rightarrow \infty$ в открытых каналах, описывающие уходящие волны, в закрытых каналах экспоненциально убывающие решения

$$\Phi_*(z \rightarrow -\infty) = \sum_{i=1}^N \Psi_i^{(1)} \begin{cases} C_{N+i} \exp(\sqrt{\lambda_i^{(1)} - E^M z}) & \Re E^M < \lambda_i^{(1)} \\ C_i \exp(-\imath \sqrt{E^M - \lambda_i^{(1)}} z), & \Re E^M > \lambda_i^{(1)} \end{cases} \quad (4)$$

$$\Phi_*(z \rightarrow +\infty) = \sum_{i=1}^N \Psi_i^{(k)} \begin{cases} C_{(2k-2)N+i} \exp(-\sqrt{\lambda_i^{(k)} - E^M z}) & \Re E^M < \lambda_i^{(k)} \\ C_{(2k-1)N+i} \exp(\imath \sqrt{E^M - \lambda_i^{(k)}} z), & \Re E^M > \lambda_i^{(k)} \end{cases}$$

Шаг 2.3. Для многоканальной задачи рассеяния (при фиксированной энергии $E \equiv \Re E$) вычисляется искомая матрица решений $\Phi(z)$ с асимптотикой “падающая волна + уходящие волны” (см. рис. 1а)

$$\Phi_{\rightarrow}(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z)\mathbf{T}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z)\mathbf{T}_{\rightarrow}^c, & z > 0, \\ \mathbf{X}_{\min}^{(\rightarrow)}(z) + \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z)\mathbf{R}_{\rightarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z)\mathbf{R}_{\rightarrow}^c, & z < 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$\Phi_{\leftarrow}(z \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \mathbf{X}_{\max}^{(\leftarrow)}(z) + \mathbf{X}_{\max}^{(\rightarrow)}(z)\mathbf{R}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\max}^{(c)}(z)\mathbf{R}_{\leftarrow}^c, & z > 0, \\ \mathbf{X}_{\min}^{(\leftarrow)}(z)\mathbf{T}_{\leftarrow} + \mathbf{X}_{\min}^{(c)}(z)\mathbf{T}_{\leftarrow}^c, & z < 0. \end{cases} \quad (6)$$

искомые \mathbf{R}_{\rightarrow} и \mathbf{R}_{\leftarrow} квадратные матрицы амплитуд отражения размерности $N_o^L \times N_o^L$ и $N_o^R \times N_o^R$ и \mathbf{T}_{\rightarrow} и \mathbf{T}_{\leftarrow} прямоугольные матрицы амплитуд прохождения размерности $N_o^R \times N_o^L$ и $N_o^L \times N_o^R$, где N_o^L и N_o^R число открытых каналов в асимптотических областях. При этом вычисляется искомая матрица рассеяния \mathbf{S} размерностью $N_o \times N_o$:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\rightarrow} & \mathbf{T}_{\leftarrow} \\ \mathbf{T}_{\rightarrow} & \mathbf{R}_{\leftarrow} \end{pmatrix},$$

унитарная и симметричная для вещественных эффективных потенциалов.

Запишем в явном виде выражения (5) – (6)

$$\Phi_{i_o^L}^{(\rightarrow)}(z \rightarrow -\infty) = \sum_{i=1}^N \Psi_i^{(1)} \begin{cases} \frac{\exp(i\sqrt{E^M - \lambda_i^{(1)}}z)}{\sqrt[4]{E^M - \lambda_i^{(1)}}} \delta_{ii_o^L} & \\ + R_{ii_o^L} \frac{\exp(-i\sqrt{E^M - \lambda_i^{(1)}}z)}{\sqrt[4]{E^M - \lambda_i^{(1)}}} & E > \lambda_i^{(1)} \\ R_{ii_o^L}^c \exp(\sqrt{\lambda_i^{(1)} - E^M}z), & E \leq \lambda_i^{(1)} \end{cases}$$

$$\Phi_{i_o^L}^{(\rightarrow)}(z \rightarrow +\infty) = \sum_{i=1}^N \Psi_i^{(k)} \begin{cases} T_{ii_o^L} \frac{\exp(i\sqrt{E^M - \lambda_i^{(k)}}z)}{\sqrt[4]{E^M - \lambda_i^{(k)}}} & E > \lambda_i^{(k)} \\ T_{ii_o^L}^c \exp(-\sqrt{\lambda_i^{(k)} - E^M}z), & E \leq \lambda_i^{(k)} \end{cases}$$

$$\Phi_{i_o^R}^{(\leftarrow)}(z \rightarrow -\infty) = \sum_{i=1}^N \Psi_i^{(1)} \begin{cases} T_{ii_o^R} \frac{-\exp(i\sqrt{E^M - \lambda_i^{(1)}}z)}{\sqrt[4]{E^M - \lambda_i^{(1)}}} & E > \lambda_i^{(1)} \\ T_{ii_o^R}^c \exp(\sqrt{\lambda_i^{(1)} - E^M}z), & E \leq \lambda_i^{(1)} \end{cases}$$

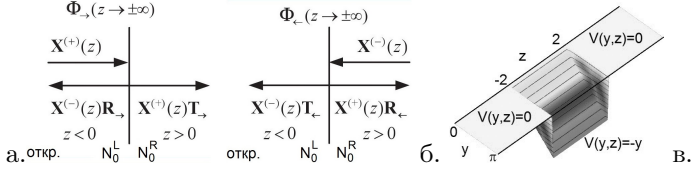


Рис. 1. а-б. асимптотические решения: “падающая волна + уходящие волны”, соответственно слева и справа . в. Двумерный потенциал

$$\Phi_{i_o^R}^{(\leftarrow)}(z \rightarrow +\infty) = \sum_{i=1}^N \Psi_i^{(k)} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\exp(-i \sqrt{E^M - \lambda_i^{(k)}} z)}{\sqrt[4]{E^M - \lambda_i^{(k)}}} \delta_{ii_o^R} & E > \lambda_i^{(k)} \\ + R_{ii_o^R} \frac{\exp(i \sqrt{E^M - \lambda_i^{(k)}} z)}{\sqrt[4]{E^M - \lambda_i^{(k)}}} & \\ R_{ii_o^R}^c \exp(-\sqrt{\lambda_i^{(k)} - E^M} z), & E \leq \lambda_i^{(k)} \end{array} \right.$$

Шаг 3. Из условия непрерывности решений и их производных в точках разрыва $z = z_{m-1}, m = 2, \dots, k$ потенциалов (2),

$$\lim_{z \rightarrow z_{m-1}} \Phi_{m-1}(z) - \Phi_m(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow z_{m-1}} \frac{\Phi_{m-1}(z)}{dz} - \frac{\Phi_m(z)}{dz} = 0, \quad m = 2, \dots, k.$$

Шаг 3.1 В случае многоканальной задачи рассеяния для волны, падающей слева (см. рис. 1а), для каждого значения $i_o^L = 1, \dots, N_o^L$ следует система $2N(k-1)$ неоднородных линейных уравнений (9) с $2N(k-1)$ неизвестными, $C_{2N+1;s}, \dots, C_{2N(k-1);s}$, и $R_{ii_o^L}, i = 1..N_o^L, R_{ii_o^L}^c, i = 1 + N_o^L, \dots, N, T_{ii_o^L}, i = 1..N_o^R, T_{ii_o^L}^c, i = 1 + N_o^R, \dots, N$:

$$\sum_{i=1}^N \left(\left(\bar{X}_i^{(1)}(E, \imath z_1) \delta_{ii_o^L} + \left\{ \begin{array}{ll} R_{ii_o^L} \bar{X}_i^{(1)}(E, -\imath z_1) & E > \lambda_i^{(k)} \\ R_{ii_o^L}^c F_i^{(1)}(E, z_1), & E \leq \lambda_i^{(k)} \end{array} \right\} \right) \Psi_i^{(1)} - C_{2N+i} F_i^{(2)}(E, -z_1) \Psi_i^{(2)} - C_{3N+i} F_i^{(2)}(E, z_1) \Psi_i^{(2)} \right) = 0,$$

$$\sum_{i=1}^N \left(C_{(2m-4)N+i} F_i^{(m-1)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} + C_{(2m-3)N+i} F_i^{(m-1)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} - C_{(2m-2)N+i} F_i^{(m)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} - C_{(2m-1)N+i} F_i^{(m)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} \right) = 0,$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^N \left(C_{(2k-4)N+i} F_i^{(k-1)}(E, -z_{k-1}) \Psi_i^{(k-1)} + C_{(2k-3)N+i} F_i^{(k-1)}(E, z_{k-1}) \Psi_i^{(k-1)} \right. \\
& \quad \left. - \left\{ \begin{array}{ll} T_{ii_o^L} \bar{X}_i^{(k)}(E, \nu z_{k-1}) & E > \lambda_i^{(k)} \\ T_{ii_o^L}^c F_i^{(k)}(E, -z_{k-1}), & E \leq \lambda_i^{(k)} \end{array} \right\} \Psi_i^{(k)} \right) = 0, \\
& \sum_{i=1}^N \left(\left(\bar{X}_i^{(1)}(E, \nu z_1) \delta_{ii_o^L} + \left\{ \begin{array}{ll} R_{ii_o^L} \bar{X}_i^{(1)}(E, -\nu z_1) & E > \lambda_i^{(k)} \\ R_{ii_o^L}^c G_i^{(1)}(E, z_1), & E \leq \lambda_i^{(k)} \end{array} \right\} \right) \Psi_i^{(1)} \right. \\
& \quad \left. - C_{2N+i} G_i^{(2)}(E, -z_1) \Psi_i^{(2)} - C_{3N+i} G_i^{(2)}(E, z_1) \Psi_i^{(2)} \right) = 0, \\
& \sum_{i=1}^N \left(C_{(2m-4)N+i} G_i^{(m-1)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} + C_{(2m-3)N+i} G_i^{(m-1)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} \right. \\
& \quad \left. - C_{(2m-2)N+i} G_i^{(m)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} - C_{(2m-1)N+i} G_i^{(m)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} \right) = 0, \\
& \sum_{i=1}^N \left(C_{(2k-4)N+i} G_i^{(k-1)}(E, -z_{k-1}) \Psi_i^{(k-1)} + C_{(2k-3)N+i} G_i^{(k-1)}(E, z_{k-1}) \Psi_i^{(k-1)} \right. \\
& \quad \left. - \left\{ \begin{array}{ll} T_{ii_o^L} \bar{X}_i^{(k)}(E, \nu z_{k-1}) & E > \lambda_i^{(k)} \\ T_{ii_o^L}^c G_i^{(k)}(E, -z_{k-1}), & E \leq \lambda_i^{(k)} \end{array} \right\} \Psi_i^{(k)} \right) = 0,
\end{aligned}$$

где использованы обозначения

$$\begin{aligned}
G_i^{(m)}(E, \pm z_m) &= \pm \sqrt{\lambda_i^{(m)} - E} F_i^{(m)}(E, \pm z_m), \quad m = 3, \dots, k-1, \\
\bar{X}_i^{(m)}(E, \pm i z_m) &= F_i^{(m)}(E, \pm i z_m) / \sqrt[4]{E - \lambda_i^{(m)}}, \quad m = 1, k, \\
\bar{\bar{X}}_i^{(m)}(E, \pm i z_m) &= F_i^{(m)}(E, \pm i z_m) \sqrt[4]{E - \lambda_i^{(m)}}, \quad m = 1, k.
\end{aligned} \tag{8}$$

В случае многоканальной задачи рассеяния для волны, падающей справа (см. рис. 16), для каждого значения $i_o^R = 1, \dots, N_o^R$ следует система $2N(k-1)$ неоднородных линейных уравнений (9) с $2N(k-1)$ неизвестными, $C_{2N+1;s}, \dots, C_{2N(k-1);s}$, и $R_{ii_o^R}, i = 1..N_o^R, R_{ii_o^R}^c, i = 1 + N_o^R, \dots, N, T_{ii_o^R}, i = 1..N_o^L, T_{ii_o^R}^c, i = 1 + N_o^L, \dots, N$:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^N \left(+ \left\{ \begin{array}{ll} T_{ii_o^R} \bar{X}_i^{(1)}(E, -\nu z_1) & E > \lambda_i^{(1)} \\ T_{ii_o^R}^c F_i^{(1)}(E, z_1), & E \leq \lambda_i^{(1)} \end{array} \right\} \Psi_i^{(1)} \right. \\
& \quad \left. - C_{2N+i} F_i^{(2)}(E, -z_1) \Psi_i^{(2)} - C_{3N+i} F_i^{(2)}(E, z_1) \Psi_i^{(2)} \right) = 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^N \left(C_{(2m-4)N+i} F_i^{(m-1)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} + C_{(2m-3)N+i} F_i^{(m-1)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} \right. \\
& \quad \left. - C_{(2m-2)N+i} F_i^{(m)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} - C_{(2m-1)N+i} F_i^{(m)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} \right) = 0, \\
& \sum_{i=1}^N \left(C_{(2k-4)N+i} F_i^{(k-1)}(E, -z_{k-1}) \Psi_i^{(k-1)} + C_{(2k-3)N+i} F_i^{(k-1)}(E, z_{k-1}) \Psi_i^{(k-1)} \right. \\
& \quad \left. - \left\{ \begin{array}{ll} R_{ii^R} \bar{X}_i^{(k)}(E, \imath z_{k-1}) & E > \lambda_i^{(k)} \\ R_{ii^R}^c F_i^{(k)}(E, -z_{k-1}), & E \leq \lambda_i^{(k)} \end{array} \right\} \Psi_i^{(k)} - \bar{X}_i^{(k)}(E, \imath z_{k-1}) \delta_{ii^R} \right) = 0, \\
& \quad \sum_{i=1}^N \left(+ \left\{ \begin{array}{ll} T_{ii^R} \bar{X}_i^{(1)}(E, -\imath z_1) & E > \lambda_i^{(1)} \\ T_{ii^R}^c G_i^{(1)}(E, z_1), & E \leq \lambda_i^{(1)} \end{array} \right\} \Psi_i^{(1)} \right. \\
& \quad \left. - C_{2N+i} G_i^{(2)}(E, -z_1) \Psi_i^{(2)} - C_{3N+i} G_i^{(2)}(E, z_1) \Psi_i^{(2)} \right) = 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^N \left(C_{(2m-4)N+i} G_i^{(m-1)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} + C_{(2m-3)N+i} G_i^{(m-1)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} \right. \\
& \quad \left. - C_{(2m-2)N+i} G_i^{(m)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} - C_{(2m-1)N+i} G_i^{(m)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} \right) = 0, \\
& \sum_{i=1}^N \left(C_{(2k-4)N+i} G_i^{(k-1)}(E, -z_{k-1}) \Psi_i^{(k-1)} + C_{(2k-3)N+i} G_i^{(k-1)}(E, z_{k-1}) \Psi_i^{(k-1)} \right. \\
& \quad \left. - \left\{ \begin{array}{ll} R_{ii^R} \bar{X}_i^{(k)}(E, \imath z_{k-1}) & E > \lambda_i^{(k)} \\ R_{ii^R}^c G_i^{(k)}(E, -z_{k-1}), & E \leq \lambda_i^{(k)} \end{array} \right\} \Psi_i^{(k)} - \bar{X}_i^{(k)}(E, \imath z_{k-1}) \delta_{ii^R} \right) = 0,
\end{aligned}$$

где использованы обозначения из (8).

Шаг 3.2 или **Шаг 3.3** для задачи на связанные или метастабильные состояния с учетом условия нормировки следует нелинейная система $2N(k-1) + 1$ уравнений с $2N(k-1) + 1$ неизвестными.

$$\begin{aligned}
& l \sum_{i=1}^N \left(C_{(2m-4)N+i} F_i^{(m-1)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} + \right. \\
& \quad \left. + C_{(2m-3)N+i} F_i^{(m-1)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} - \right. \\
& \quad \left. - C_{(2m-2)N+i} F_i^{(m)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} - C_{(2m-1)N+i} F_i^{(m)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} \right) = 0,
\end{aligned} \tag{9}$$

$$l \sum_{i=1}^N \left(C_{(2m-4)N+i} G_i^{(m-1)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} + \right.$$

$$+ C_{(2m-3)N+i} G_i^{(m-1)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m-1)} - \\ - C_{(2m-2)N+i} G_i^{(m)}(E, -z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} - C_{(2m-1)N+i} G_i^{(m)}(E, z_{m-1}) \Psi_i^{(m)} = 0,$$

где $G_i^{(m)}(E, \pm z_m) = \pm \sqrt{\lambda_i^{(m)} - E} F_i^{(m)}(E, \pm z_m)$, $m = 2, \dots, k$.

Шаг 3.2 Из условия экспоненциального убывания собственных функций связанных состояний (3), при $z \rightarrow \pm\infty$ возникает ограничение на собственные значения

$$E < E_{\max} = \min(\lambda_1^{(1)}, \dots, \lambda_N^{(1)}, \lambda_1^{(k)}, \dots, \lambda_N^{(k)}) \quad (10)$$

и к системе уравнений (9) добавляются дополнительные условия

$$C_1 = 0, \dots, C_N = 0, \quad C_{(2k-1)N+1} = 0, \dots, C_{2kN} = 0 \quad (11)$$

Ограничение снизу на параметр E

$$E > E_{\min} = \min(\lambda_1^{(2)}, \dots, \lambda_N^{(2)}, \dots, \lambda_1^{(k-1)}, \dots, \lambda_N^{(k-1)}) \quad (12)$$

следует из условия ограниченности самосопряженного оператора, соответствующего задаче (1)–(2) на внутренних подынтервалах $z \in (z_{m-1}, z_m)$, где m пробегает значения $m = 2, \dots, k-1$.

Шаг 3.3 Для метастабильных состояний к системе уравнений (9) вместо (11) добавляются дополнительные условия

$$\left\{ \begin{array}{l} C_i = 0 \quad \Re E^M < \lambda_i^{(1)} \\ C_{N+i} = 0 \quad \Re E^M \geq \lambda_i^{(1)} \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} C_{N(2k-1)i} = 0 \quad \Re E^M < \lambda_i^{(k)} \\ C_{N(2k-2)i} = 0 \quad \Re E^M \geq \lambda_i^{(k)} \end{array} \right\}, \\ i = 1, 2, \dots, N,$$

которые следуют из асимптотических условий (4).

Шаг 4. Записывая систему уравнений (9) в матричном виде

$$\mathbf{M}(E) = 0$$

и вычисляя определитель $\det \mathbf{M}(E)$ полученной матрицы, имеем секулярное уравнение для спектрального параметра E ,

$$\det \mathbf{M}(E) = 0 \quad (13)$$

Заметим, что определитель матрицы $\det \mathbf{M}(E)$ в аналитическом виде как функцию от неизвестного спектрального параметра E можно вычислить в системе Maple за разумное время, только для малого числа

подынтервалов k и малого числа уравнений N , $kN < 19$, например, при $N=3$, $k=4$ одно раскрытие детерминанта матрицы размерности 24×24 занимает больше 3600 секунд, а построение матрицы $\mathbf{M}(E)$ и вычисление её определителя при одном значении E примерно 0.6 секунды. Поэтому определитель матрицы $\det \mathbf{M}(E)$ вычисляем численно на подходящей сетке значений E : $E_{\min}, \dots, E_{\max}$ из интервала $E_{\min} < E < E_{\max}$, где граничные значения E_{\min} и E_{\max} даются формулами (10) и (12). Один из возможных способов построения подходящей сетки реализуется следующим алгоритмом. В выражении (9) экспоненты заменяются их усеченными разложениями в окрестности выбранного значения E_0 - полиномами от степени Q с числовыми коэффициентами

$$\exp(\pm \sqrt{\lambda_i^{(m)} - Ez}) = \exp(\pm \sqrt{\lambda_i^{(m)} - E_0 z}) \mp \frac{\exp(\pm \sqrt{\lambda_i^{(m)} - E_0 z})}{2\sqrt{\lambda_i^{(m)} - E_0}} \Delta E + \dots, \quad (14)$$

где $\Delta E = E - E_0$. Подставляя полученные выражения в детерминант $\det \mathbf{M}(E)$ получаем полином от переменной ΔE степени $2N(k-1)Q$, который опять обрезаем до степени Q , т.е.

$$\det \mathbf{M}(E) = \det \mathbf{M}(E_0) + a_1(\Delta E) + \dots + a_Q(\Delta E)^Q. \quad (15)$$

Отсюда следует ограничение на шаг сетки $\Delta E_{\max} < |\varepsilon \det \mathbf{M}(E_0) / a_Q|^{1/Q}$, где $\varepsilon > 0$ наперед заданное число - точность разложения определителя $\det \mathbf{M}(E)$ в ряд. Это же разложение используется для уточнения корней уравнения (13), вычисленных каким-либо методом. Отметим, что в окрестности особых точек $E = \lambda_i^{(m)}$, $i = 1, \dots, N$, $m = 2, \dots, k-1$, для которых подкоренные выражения в показателях экспонент, содержащихся в (14) обращаются в ноль, область сходимости разложений (14) и (15) невелика. В этом случае вместо (14) используется разложение

$$\exp(\pm \sqrt{\lambda_i^{(m)} - Ez}) = 1 + z\sqrt{\lambda_i^{(m)} - E} + \frac{1}{2}z^2(\lambda_i^{(m)} - E).$$

После вычисления набора решений E_1, \dots, E_t уравнения (13), т.е. всех значений спектрального параметра E , при которых $\det \mathbf{F}(E)$ обращается в ноль из интервала для каждого E_s , $s = 1, \dots, t$ получаем вырожденную алгебраическую систему уравнений (9) линейную и однородную относительно неизвестных коэффициентов $C_{1;s}, \dots, C_{2Nk;s}$. Для вычисления искомых собственных векторов $\mathbf{C}_s = (C_{1;s}, \dots, C_{2Nk;s})^T$ добавляем дополнительное условие, например, $C_{2N+1;s} + \dots + C_{2N(k-2);s} = 1$. В результате полученная для каждого E_s , $s = 1, \dots, t$ неоднородная система алгебраических уравнений имеет единственное решение

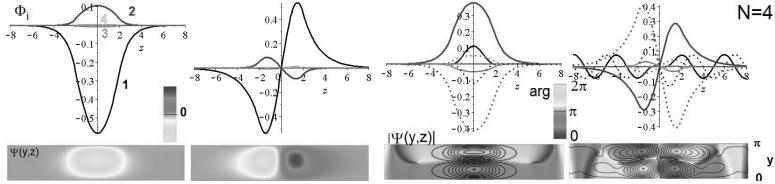


Рис. 2. Собственные функции $\Psi(y, z)$ связанных и метастабильных состояний двумерной краевой задачи и компоненты собственных функций $\Phi_j(z)$ (мнимые части даны пунктирными линиями) соответствующей системы ОДУ

$\hat{C}_s = (\hat{C}_{1;s}, \dots, \hat{C}_{2Nk;s})^T$, подставляя, которое в левую часть условия нормировки получаем выражения для нормировочных коэффициентов B_s^2 , $s = 1, \dots, t$:

$$\sum_{m=1}^k \sum_{i=1}^N \int_{z_{m-1}}^{z_m} dz \left| \hat{C}_{(2m-2)N+i;s} F_i^{(m)}(E, -z) \Psi_i^{(m)} + \hat{C}_{(2m-1)N+i} F_i^{(m)}(E, z) \right|^2 = B_s^2.$$

В результате вычисляем искомые коэффициенты C_s : $C_{i;s} = \hat{C}_{i;s}/B_s$, $i = 1, \dots, 2Nk$, $s = 1, \dots, t$, обеспечивающие выполнение условия нормировки (1) искомых собственных функций

$$\Phi_s(z) = \{ \Phi_s^{(1)}(z), z \leq z_1, \Phi_s^{(2)}, z \leq z_2, \dots, \Phi_s^{(k-1)}, z \leq z_{k-1}, \Phi_s^{(k)}, z > z_{k-1} \}.$$

3. Задачи на связанные и метастабильные состояния

В качестве примера, рассмотрим задачу на связанные и метастабильные состояния для уравнения Шредингера в двумерной области $\Omega_{yz} = \{y \in (0, \pi), z \in (-\infty, +\infty)\}$, с кусочно-непрерывным потенциалом $V(y, z) = \{-y, |z| < 2; 0, |z| \geq 2\}$, представленным на Рис. 16. Решение ищем в виде разложения $\Psi(y, z) = \sum_i B_i(y) \Phi_i(z)$ по набору базисных функций $B_i(y) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \sin(iy)$, что приводит к системе ОДУ (1) с матрицей эффективных потенциалов (2)

$$V_{ij} = \{i^2 \delta_{ij}, z \leq -2; i^2 \delta_{ij} - \int_0^\pi y \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \sin(iy) \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \sin(jy) dy, z \leq 2; i^2 \delta_{ij}, z > 2\}.$$

Эта задача имеет два связанных и набор метастабильных состояний. Собственные значения были вычислены при $N = 4$ с помощью алгоритма, реализующего метод сшивки фундаментальных решений в

системе Maple: $E_1 = -0.357678006157$, $E_2 = 0.497673092637$ и $E_1^M = 2.767982443939 - i0.000009778719$, $E_2^M = 3.59902052643 - i0.02021392350$, соответствующие собственные функции представлены на Рис. 2. Данные значения использовались для тестирования алгоритма и программы KANTBP 4M, реализующих метод конечных элементов (МКЭ) в системе Maple [2]. Расчёты МКЭ выполнялись с эрмитовыми элементами седьмого порядка ($p'=7$, $p=3$, $\kappa^{\max}=2$) на конечноэлементной сетке $\Omega_z = \{-8(4) - 2(4)2(4)8\}$, где в скобках указано число элементов. Расчёты связанных состояний с условиями Неймана и Дирихле дают нижнюю и верхнюю оценки $\delta E_i = |E_i - E_i^{(\text{МКЭ})}|$ с точностью $\delta E_1 \approx 2.5 \cdot 10^{-7}$ и $\delta E_2 \approx 1.1 \cdot 10^{-4}$. Результаты расчетов собственных значений связанных и метастабильных состояний и элементов матриц амплитуд отражения и прохождения многоканальной задачи рассеяния, полученные сшивкой фундаментальных решений и МКЭ на сетке $\Omega'_z = \{-2(4)2\}$ с граничными условиями третьего рода и асимптотиками решений **шага 2**, совпадают с точностью порядка 10^{-10} .

4. Заключение

Предложенные алгоритмы и программы могут быть применены для решения краевых задач для систем N ОДУ второго порядка волноводного типа с матрицей кусочно-постоянных потенциалов, возникающих в области математического моделирования многослойных оптических систем и квантово-размерных наноструктур.

Благодарности

Работа поддержана РФФИ (грант 14-01-00420).

Литература

1. *Gevorkyan M.N., Kulyabov D.S., Lovetskiy K.P., Sevastyanov A.L. and Sevastyanov L.A.* Waveguide modes of a planar optical waveguide, *Mathematical Modelling and Geometry* Volume 3, No 1, p. 43–63 (2015).
2. *Гусев А.А., Хай Л.Л., Чулуунбаатар О., Виницкий С.И.*, Программа KANTBP 4M решения краевых задач для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, 2015 – <http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m>.

UDC 519.632.4

Algorithms and Programs for Solving Boundary Value Problems for System of Second-Order ODE with Piecewise Constant Potentials

A. A. Gusev^{*}, O. Chuluunbaatar^{*}, S. I. Vinitisky^{*†}, L. L. Hai^{*},
V. L. Derbov[‡]

^{*} *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

[†] *RUDN University, Moscow, Russia*

[‡] *Saratov State University, Saratov, Russia*

The algorithms and programs, implemented in Maple, for solving the multi-channel scattering and eigenvalue problems of the waveguide type for system of the second order ODEs with piecewise constant coefficients on the axis are presented. A comparison of the results obtained by the solving the boundary value problem using matching method of fundamental solutions of the system of ODEs in the points of a discontinuities of potentials and the finite element method is given.

Keywords: Multichannel scattering problem, eigenvalue problem, system of second order ordinary differential equations.

UDC 519.632.4

Asymptotic Form of Parametric Basis Functions for the Model of Quantum Tunnelling of Diatomic Molecules

A. A. Gusev^{*}, O. Chuluunbaatar^{*}, S. I. Vinitsky^{*1}, L. L. Hai^{*},
V. L. Derbov², P. M. Krassovitskiy[§]

^{*} *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

¹ *RUDN University, Moscow, Russia*

² *Saratov State University, Saratov, Russia*

[§] *Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan.*

Abstract. The mathematical model of quantum tunnelling of diatomic molecules through repulsive barriers is formulated in the s-wave approximation. The 2D boundary-value problem in polar coordinates is reduced to a 1D one by means of Kantorovich expansion over the set of parametric basis functions. The algorithm for calculating the asymptotic form of the parametric basis functions at large values of the parameter (radial variable) is presented. The solution is sought by matching the numerical solution in one of the subintervals with the analytical solution in the adjacent one. The efficiency of the algorithm is shown by comparison of the calculated solutions with those of the parametric eigenvalue problem obtained by applying the finite element method in the entire domain of definition at large values of the parameter.

Keywords: parametric Sturm–Liouville problem, second-order ODE.

1. Introduction

The studies of tunnelling of bound particles through repulsive barriers revealed the effect of resonance quantum transparency of the barrier: when the cluster size is comparable with the spatial width of the barrier, one can observe enhanced barrier transparency, the mechanism of which is analogous to the mechanism of blooming of optical systems. At present this effect and its possible applications is a subject of extensive studies in different physical fields, e.g., the quantum diffusion of molecules [1].

The formulation of the model of quantum tunnelling of a diatomic molecule through Gaussian barriers in the s-wave approximation is given in the form of 2D boundary-value problems in the Cartesian and polar coordinates [2]. Using different solutions of auxiliary boundary-value problems with respect to the transverse variable, or the angular variable with parametric dependence upon the radial variable as basis functions, the boundary-value problem is reduced to a system of coupled ordinary differential equations of the second order. In the Cartesian coordinates the effective potentials decrease exponentially (below the dissociation threshold) and in the polar coordinates they decrease as inverse powers of the independent variable. Therefore, in the latter case it is necessary to calculate the asymptotic expansions of matrix elements and fundamental solutions of the system of coupled ordinary second order differential equations

(ODEs). For their calculation it is necessary to develop symbolic-numeric algorithms, implemented in the Maple computer algebra system [3].

The paper presents the algorithms for calculating the asymptotes of parametric basis functions in polar coordinates at large values of the parameter (radial variable), required for the calculation of the asymptotic expansions of the effective potentials and of fundamental solutions of system of ODEs.

2. Setting of the problem

Consider a 2D model of two identical particles, coupled via the pair potential $\tilde{V}(x_2 - x_1) = \tilde{V}(x_1 - x_2)$ and interacting with the external short-range barrier potentials $\tilde{V}^b(x_1)$ and $\tilde{V}^b(x_2)$. Performing the change of variables $x = \frac{x_2 - x_1}{\sqrt{2}}$, $y = \frac{x_2 + x_1}{\sqrt{2}}$, $y \in (-\infty, \infty)$, $x \in (-\infty, \infty)$, we arrive at the Schrödinger equation for the wave function $\Psi(x, y)$ in the s-wave approximation (in reduced units)

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{V}(x, y) - \tilde{E} \right) \Psi(y, x) = 0, \quad (1)$$

where the potential function,

$$\tilde{V}(x, y) = \tilde{V}(x) + \tilde{V}^b\left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right) + \tilde{V}^b\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}\right), \quad \tilde{V}(x \rightarrow \infty) = 0,$$

is symmetric with respect to the straight line $x = 0$ (i.e., $x_1 = x_2$), which allows one to consider the solutions of the problem in the half-plane $x \geq 0$. Using the Dirichlet or Neumann boundary condition at $x = 0$ allows one to obtain the solutions, symmetric and antisymmetric with respect to the permutation of two particles. If the pair potential possesses a high maximum in the vicinity of the pair collision point, then the solution of the problem in the vicinity of $x = 0$ is exponentially small and can be considered in the half-plane $x \geq x_{\min}$. In this case setting the Neumann or Dirichlet boundary condition at x_{\min} gives only a minor contribution to the solution. The equation, describing the molecular subsystem, has the form

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V}(x) - \tilde{\varepsilon} \right) \phi(x) = 0. \quad (2)$$

We assume that the molecular subsystem has the discrete spectrum, consisting of a finite number n of bound states with the eigenfunctions $\phi_j(x)$, $j = 1, n$ and eigenvalues $\tilde{\varepsilon}_j = -|\tilde{\varepsilon}_j|$, and the continuous spectrum of eigenvalues $\tilde{\varepsilon} > 0$ with the corresponding eigenfunctions $\phi_{\tilde{\varepsilon}}(x)$. As a rule, the solution of the discrete spectrum problem for Eq. (2) can be found only numerically.

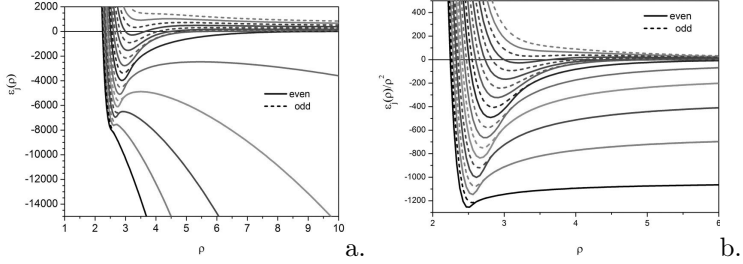


Figure 1. Potential curves — eigenvalues (in K, $1\text{K}=0.18\text{\AA}^{-2}$) depending upon the parameter ρ (in \AA): a. $\varepsilon_j(\rho)$ and b. $\tilde{\varepsilon}_j = \varepsilon_j(\rho)/\rho^2$

The proposed algorithm is illustrated by the example of the molecular interaction approximated by the Morse potential [1, 2]

$$\tilde{V}(x) = D\{\exp[-2(x - \hat{x}_{eq})\alpha] - 2\exp[-(x - \hat{x}_{eq})\alpha]\}. \quad (3)$$

with the parameter values $\alpha := 2.96812\text{\AA}^{-1}$, $\hat{x}_{eq} = 2.47\text{\AA}$ and $D = 236.510\text{\AA}^{-2}$. To solve the discrete spectrum problem we used the finite element method of the seventh order with Hermitian interpolation polynomials with the node multiplicity 2 [4]. On the grid $\{x_0, \dots, x_i, \dots, x_n\}$ the values not only of the function, but also of its derivatives were calculated [5]:

$$\phi_{j;i}^{0;hx} = \phi_j^h(x_i), \quad \phi_{j;i}^{1;hx} = \left. \frac{\phi_j^h(x)}{dx} \right|_{x=x_i},$$

3. Reduction of the boundary-value problem using the Kantorovich method

Using the change of variables $x = \rho \sin \varphi$, $y = \rho \cos \varphi$, we rewrite Eq. (1) in polar coordinates (ρ, φ) , $\Omega_{\rho, \varphi} = (\rho \in (0, \infty), \varphi \in [0, \pi])$

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(\rho \sin \varphi) + V^b(\rho, \varphi) - E \right) \Psi(\rho, \varphi) = 0, \quad (4)$$

$$V^b(\rho, \varphi) = V^b\left(\rho \frac{\sin(\varphi + \pi/4)}{\sqrt{2}}\right) + V^b\left(\rho \frac{\sin(\varphi - \pi/4)}{\sqrt{2}}\right).$$

The solution of Eq. (4) is sought in the form of Kantorovich expansion

$$\Psi_{i_o}(\rho, \varphi) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \phi_j(\varphi; \rho) \chi_{j i_o}(\rho).$$

Here $\chi_{ji_o}(\rho)$ are unknown functions and the orthogonal normalised basis functions $\phi_j(\varphi; \rho)$ in the interval $\varphi \in [0, \pi]$ are defined as eigenfunctions, corresponding to the eigenvalues (see Fig. 1a) of the Sturm-Liouville problem for the equation (see Fig. 2a)

$$\left(-\frac{d^2}{d\varphi^2} + \rho^2 V(\rho \sin \varphi) - \varepsilon_j(\rho)\right) \phi_j(\varphi; \rho) = 0, \quad \int_0^\pi d\varphi \phi_i(\varphi; \rho) \phi_j(\varphi; \rho) = \delta_{ij}. \quad (5)$$

The solutions symmetric with respect to the permutation of two particles satisfy the Neumann boundary condition at $\varphi = 0$ and $\varphi = \pi$,

$$\left. \frac{\phi_j(\varphi; \rho)}{d\varphi} \right|_{\varphi=0} = \left. \frac{\phi_j(\varphi; \rho)}{d\varphi} \right|_{\varphi=\pi} = 0,$$

while the antisymmetric ones satisfy the Dirichlet boundary condition

$$\phi_j(0; \rho) = \phi_j(\pi; \rho) = 0.$$

If the pair potential possesses a high peak in the vicinity of the pair collision point, then the solution of the problem (4) will be considered in the half-plane $\Omega_{\rho, \varphi} = (\rho \in (\rho_{\min}, \infty), \varphi \in [\varphi_{\min}(\rho), \pi - \varphi_{\min}(\rho)])$ with the Neumann or Dirichlet boundary condition.

Since the potential of the boundary-value problem (5) is symmetric with respect to $\varphi = \pi/2$, the even $\phi_j(\varphi; \rho) = \phi_j(\pi - \varphi; \rho)$ and odd $\phi_j(\varphi; \rho) = -\phi_j(\pi - \varphi; \rho)$ solutions, satisfying the Neumann boundary condition

$$\left. \frac{\phi_j(\varphi; \rho)}{d\varphi} \right|_{\varphi=\pi/2} = 0,$$

and the Dirichlet boundary condition

$$\phi_j(\pi/2; \rho) = 0,$$

respectively, will be considered separately in the interval $\varphi \in [\varphi_{\min}(\rho), \pi/2]$.

The system of coupled self-adjoint equations in the Kantorovich form has the form

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{\varepsilon_i(\rho)}{\rho^2} - E\right] \chi_{ii_o}(\rho) + \sum_{j=1}^{j_{\max}} W_{ij}(\rho) \chi_{ji_o}(\rho) = 0,$$

$$W_{ij}(\rho) = V_{ij}^b(\rho) + H_{ji}(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho Q_{ji}(\rho) + Q_{ji}(\rho) \frac{d}{d\rho},$$

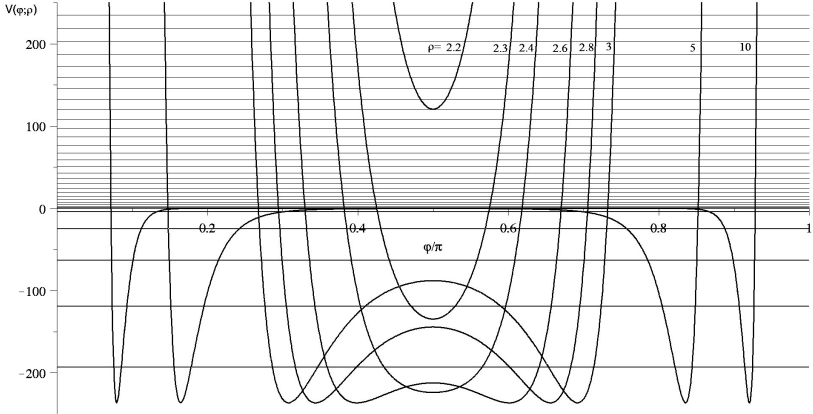


Figure 2. Cross-sections of Morse potential $V(\rho\varphi)$ in polar coordinates at $\rho=2.2, 2.3, 2.4, 2.6, 2.8, 3, 5, 10$. The horizontal lines show the eigenvalues $\varepsilon(\rho)/\rho^2$ at $\rho = 10$.

The potential curves (terms) $\varepsilon_j(\rho)$ and the effective potentials $Q_{ij}(\rho) = -Q_{ji}(\rho)$, $H_{ij}(\rho) = H_{ji}(\rho)$ and $V_{ij}^b(\rho)$ are given by the integrals

$$Q_{ij}(\rho) = - \int_0^\pi d\varphi \phi_i(\varphi; \rho) \frac{d\phi_j(\varphi; \rho)}{d\rho}, H_{ij}(\rho) = \int_0^\pi d\varphi \frac{d\phi_i(\varphi; \rho)}{d\rho} \frac{d\phi_j(\varphi; \rho)}{d\rho}, \quad (6)$$

$$V_{ij}^b(\rho) = \int_0^\pi d\varphi \phi_i(\varphi; \rho) \left(V^b(\rho \frac{\sin(\varphi + \pi/4)}{\sqrt{2}}) + V^b(\rho \frac{\sin(\varphi - \pi/4)}{\sqrt{2}}) \right) \phi_j(\varphi; \rho).$$

4. Asymptotes of the parametric basis functions at $\rho \rightarrow \infty$

In polar coordinates at large ρ the width of the potential well decreases with the growth of ρ (see Fig. 2). This fact allows linearization of the argument $\rho \sin \varphi - \hat{x}_{eq} \rightarrow \rho(\varphi - \arcsin(\hat{x}_{eq}/\rho))$ at $|x - \hat{x}_{eq}|/\rho \ll 1$ in the expression for the potential function $V(\rho \sin \varphi)$ and reformulation of Eq. (5) in the interval $\varphi = (0, \pi/2)$ as

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \rho^2 V(\rho\varphi) - \varepsilon_j(\rho) \right) \phi_j(\varphi; \rho) = 0. \quad (7)$$

By the change of variables $x = \rho\varphi$ this equation is reduced to Eq. (2). The eigenfunctions of the discrete spectrum $\varepsilon_j(\rho) < 0$ are known to be localised in the potential well and exponentially small beyond it. Therefore

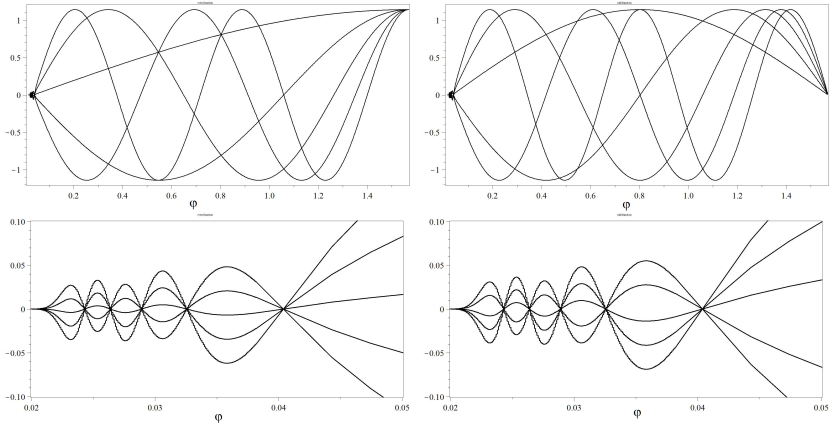


Figure 3. Eigenfunctions $\phi_j(\varphi; \rho)$ corresponding to eigenvalues $\varepsilon_j(\rho) \geq 0$ of the pseudostates $j = n + 1 = 6, \dots, 10$ at $\rho = 100$: even (left-hand panel), odd (right-hand panel). Enlarged plots in the interval $\varphi \in [0.02, 0.05]$ near the Morse potential minimum point (bottom panels). The nodes shift towards $\varphi = 0$ with the growth of their number.

the solutions of the boundary-value problem for Eq. (7) are determined from the solutions of the boundary-values problem for Eq. (2)

$$\varepsilon_j(\rho) = \rho^2 \tilde{\varepsilon}_j, \quad \phi_j(\varphi = x/\rho; \rho) = \sqrt{\rho} \phi_j(x).$$

If the solution of the boundary-value problem was earlier found in Cartesian coordinates on the grid $\{x_0, \dots, x_i, \dots\}$, then the solution in polar coordinates on the grid $\{\varphi_0 = x_0/\rho, \dots, \varphi_i = x_i/\rho, \dots\}$ is recalculated using the formulae

$$\phi_{j;i}^{0;h\varphi}(\rho) = \phi_j^h(\varphi_i; \rho) = \sqrt{\rho} \phi_{j;i}^{0;hx}, \quad \phi_{j;i}^{1;h\varphi}(\rho) = \left. \frac{\phi_j^h(\varphi; \rho)}{d\varphi} \right|_{\varphi=\varphi_i} = \rho \sqrt{\rho} \phi_{j;i}^{0;hx}.$$

The analysis shows that, in contrast to the eigenfunctions of the discrete spectrum, the eigenfunctions of pseudostates $\varepsilon_j(\rho) \geq 0$ are not localised in the potential well. The $(n - 1)$ -th node is at the boundary of the potential well (see Fig. 3). From this fact the estimate of the eigenvalues for pseudostates $\varepsilon_j(\rho) \approx (j - n)^2$ follows, i.e., the eigenvalue of the corresponding boundary problems in Cartesian coordinates, $\tilde{\varepsilon}_j = \varepsilon_j(\rho)/\rho^2$, will be a small quantity (see Fig. 1b). Then the numerical values of the function $B(\varphi_i; \rho) = B(x_i)$ and its derivative $B'(\varphi_i; \rho) = \rho B'(x_i)$ on the specified grid $\Omega_\varphi = \{\varphi_1 = \varphi_0, \dots, \varphi_i = x_i/\rho, \dots, \varphi_N = \varphi_\varepsilon\}$ in the polar

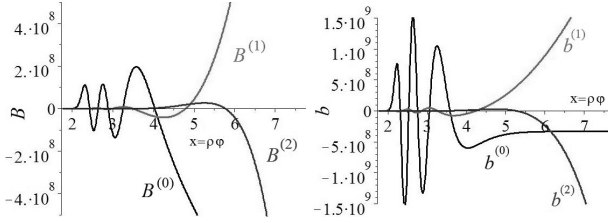


Figure 4. Expansion coefficients $B_i^{(k)}$ and $b_i^{(k)}$, $k=0, 1, 2$, calculated at the nodes x_i .

system of coordinates are determined via the values of the function $B(x_i)$ and its derivative $B'(x_i)$ on the grid $\Omega_x = \{x_1 = x_0, \dots, x_i, \dots, x_N = x_\varepsilon\}$, found using the Runge-Kutta method, in which the third power and the higher ones are neglected $\tilde{\varepsilon}$.

$$B_j(x_i) = B_i^{(0)} + B_i^{(1)}\varepsilon_n + B_i^{(2)}\varepsilon_n^2, \quad B'_j(x_i) = b_i^{(0)} + b_i^{(1)}\varepsilon_n + b_i^{(2)}\varepsilon_n^2, \quad (8)$$

The expansion coefficients $B_i^{(k)}$ and $b_i^{(k)}$, $k = 0, 1, 2$, calculated at the grid nodes x_i for the potential (3) are presented in Fig. 4. From the figure one can see that in the vicinity of the potential well the corrections to the eigenfunctions are small, and at $x > 6$ they become essential, the coefficient $b_i^{(0)}$, the derivative of the wave function with $E = 0$, becomes constant for $x > 5.5$. From these observations the condition for choosing x_ε follows.

The interval $\varphi_0 \leq \varphi \leq \pi/2$ is divided into two subintervals by the point $\varphi_\varepsilon = x_\varepsilon/\rho$: $\varphi_0 < \varphi \leq \varphi_\varepsilon$ and $\pi/2 > \varphi > \varphi_\varepsilon$. In the calculations the point x_ε was chosen from the condition $|V(x > x_\varepsilon)| < eps$, where eps is a preassigned number, and the left-hand boundary of the interval $\varphi_0 = 0$. In the case of a high barrier, at the pair collision point, when the eigenfunctions in its vicinity are close to zero, the left boundary of the interval changes, $\varphi_0 = x_0/\rho > 0$.

The eigenfunctions $\phi_j(\varphi; \rho)$ are calculated in the form

$$\phi_j(\varphi; \rho) = \begin{cases} A_j(\rho)B_j(\varphi; \rho), & \varphi_0 \leq \varphi \leq \varphi_\varepsilon, \\ C_j(\rho)\sqrt{\frac{2}{\pi}} \begin{cases} \cos \\ \sin \end{cases} (\sqrt{\varepsilon_j(\rho)}(\varphi - \pi/2)), & \varphi_\varepsilon < \varphi \leq \pi/2, \end{cases} \quad (9)$$

$$2 \int_{\varphi_0}^{\pi/2} d\varphi (\phi_n(\varphi; \rho))^2 \equiv 2 \int_{\varphi_0}^{\varphi_\varepsilon} d\varphi (A_n(\rho)B_n(\varphi; \rho))^2$$

$$+2 \int_{\varphi_\varepsilon}^{\pi/2} d\varphi \left(C_n(\rho) \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left\{ \begin{matrix} \cos \\ \sin \end{matrix} \right\} (\sqrt{\varepsilon_n(\rho)}(\varphi - \pi/2)) \right)^2 = 1.$$

Here $A_j(\rho)$ and $C_j(\rho)$ are the normalisation factors, and $B(\varphi; \rho)$ is determined from the numerical solution $B(x)$ in Cartesian coordinates using the transformation $\varphi = x/\rho$.

Using the conditions of continuity for the eigenfunctions and its derivative,

$$\phi_n(\varphi_\varepsilon - 0; \rho) = \phi_n(\varphi_\varepsilon + 0; \rho), \quad \frac{d\phi_n}{d\varphi}(\varphi_\varepsilon - 0; \rho) = \frac{d\phi_n}{d\varphi}(\varphi_\varepsilon + 0; \rho)$$

we get the equation for the eigenvalue $\varepsilon_n(\rho)$:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tan(\sqrt{\varepsilon_n(\rho)}(\varphi_\varepsilon - \pi/2)) & \text{even } n \\ -\cot(\sqrt{\varepsilon_n(\rho)}(\varphi_\varepsilon - \pi/2)) & \text{odd } n \end{array} \right\} - \frac{\sqrt{\varepsilon_n(\rho)}}{R} = 0, \quad (10)$$

$$R = \frac{B'_n(\varphi_\varepsilon; \rho)}{B_n(\varphi_\varepsilon; \rho)} = \frac{\rho B'_n(x_\varepsilon)}{B_n(x_\varepsilon)}.$$

The solution $\varepsilon_n(\rho)$ ($\varepsilon_n = \varepsilon_n(\rho)/\rho^2$) of the derived equation is sought in the form of a power series

$$\varepsilon_n(\rho) = n^2 + \varepsilon_n^{(1)}/\rho + \varepsilon_n^{(2)}/\rho^2, \quad (11)$$

$$\sqrt{\varepsilon_n(\rho)} = n + \varepsilon_n^{(1)}/(2n\rho) + \varepsilon_n^{(2)}/(2n\rho^2) - (\varepsilon_n^{(1)})^3/(8n^3\rho^2).$$

Substitute (8) into (10), and then substitute (11) into the resulting equation. Expanding both sides of the equation in inverse powers of ρ and neglecting the terms, containing the third and higher powers of $1/\rho$, we arrive at the system of linear equations, from which the expansion coefficients $\varepsilon_n^{(1)}$ and $\varepsilon_n^{(2)}$, and then the coefficients $A_n(\rho)$ and $C_n(\rho)$ are determined

$$A_n(\rho) = C_n(\rho) \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left\{ \begin{matrix} \cos \\ \sin \end{matrix} \right\} (\sqrt{\varepsilon_n(\rho)}(\varphi_\varepsilon - \pi/2))/B(\varphi_\varepsilon; \rho).$$

$$2C_n(\rho)^2 \left[\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left\{ \begin{matrix} \cos \\ \sin \end{matrix} \right\} (\sqrt{\varepsilon_n(\rho)}(\varphi_\varepsilon - \pi/2))/B_n(\varphi_\varepsilon; \rho) \right)^2 \int_{\varphi_0}^{\varphi_\varepsilon} d\varphi B_n(\varphi; \rho)^2 + \int_{\varphi_\varepsilon}^{\pi/2} d\varphi \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left\{ \begin{matrix} \cos \\ \sin \end{matrix} \right\} (\sqrt{\varepsilon_n(\rho)}(\varphi - \pi/2)) \right)^2 \right] = 1.$$

Table 1

Convergence of the expansion of $\varepsilon_n(\rho)$ at $\rho = 50$ and comparison with numerical results

n^2	1.00000000	4.00000000	9.00000000	16.00000000
$+\varepsilon_n^{(1)}/\rho$	1.09010413	4.36041653	9.81093720	17.44166614
$+\varepsilon_n^{(2)}/\rho^2$	1.09619320	4.38477280	9.86573880	17.53909120
NUM	1.09614800	4.38462804	9.86554769	17.53908477

Since the values of the function $B_n(\varphi; \rho)$ and its derivative $B'_n(\varphi; \rho)$ on the grid Ω_φ are known, for the calculation of the first integral we use the quadrature formula of the Newton-Cotes type. The second integral is calculated analytically using the expansion (11). Thus, for the eigenfunction (9)

$$\phi_n(\varphi; \rho) = \begin{cases} A_n(\rho)B_n(\varphi; \rho), & \varphi_0(\rho) \leq \varphi \leq \varphi_\varepsilon(\rho), \\ B_n(\rho)\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left\{ \begin{matrix} \cos \\ \sin \end{matrix} \right\} (\sqrt{\varepsilon_n(\rho)}(\varphi - \pi/2)), & \varphi_\varepsilon(\rho) < \varphi \leq \pi/2, \end{cases}$$

$$2 \int_{\varphi_0}^{\pi/2} d\varphi (\phi_n(\varphi; \rho))^2 = 1.$$

we have the analytical expression in the interval $\varphi_\varepsilon(\rho) < \varphi \leq \pi/2$, and the explicit dependence of its values upon the parameter ρ on the grid Ω_φ .

For the considered potential (3) we have asymptotes of potential curves at $n = j - n_0$:

$$\varepsilon_n(\rho) \frac{1}{\rho^2} = n^2 \frac{1}{\rho^2} + 4.50520671n^2 \frac{1}{\rho^3} + 15.22266564n^2 \frac{1}{\rho^4} + O(1/\rho^5).$$

The results of the calculation of eigenvalues and the comparison with the numerical solution obtained by means of the program ODPEVP [3] is presented in Table 1. The described algorithm is implemented in the Maple system. The asymptotic expansions, obtained using it at $\rho = 50$, coincide with the numerical solution using the finite element method to 4-5 significant digits for the eigenvalues and to 3-4 significant digits for the eigenfunctions. Asymptotes of the effective potentials (6) have of the form between states $n_1 = i - n_0$ and $n_2 = j - n_0$ of same parity at $n_0 = 5$, $i, j = 6, \dots$:

$$Q_{n_1 n_2}(\rho) = 2.266 \frac{n_2 n_1}{(n_1^2 - n_2^2)} \frac{1}{\rho^2} + 5.136 \frac{n_2 n_1}{(n_1^2 - n_2^2)} \frac{1}{\rho^3} + O\left(\frac{1}{\rho^4}\right),$$

$$H_{n_1 n_2}(\rho) = 10.272 \frac{n_2 n_1 (n_1^2 + n_2^2)}{(n_1^2 - n_2^2)^2} \frac{1}{\rho^4} + \\ + 68.205 \frac{n_2 n_1 ((n_1^2 - n_2^2)^2 + 0.682(n_1^2 + n_2^2))}{(n_1^2 - n_2^2)^2} \frac{1}{\rho^5} + O\left(\frac{1}{\rho^6}\right),$$

$$H_{n_1 n_1}(\rho) = (0.642 + 2.112n_1^2) \frac{1}{\rho^4} + (2.910 - 10.032n_1^2) \frac{1}{\rho^5} + O\left(\frac{1}{\rho^6}\right).$$

5. Conclusions

The model for quantum tunneling of a diatomic molecule through repulsive barrier is formulated as a 2D boundary-value problem for the Schrödinger equation. This problem is reduced using the Kantorovich or Galerkin-type expansions to the boundary-value problem for a set of second-order ordinary differential equations with third-type boundary conditions. The symbolic-numerical algorithms implemented in Maple of evaluation of asymptotic expansions of eigensolutions of parametric BVP and effective potentials $W_{ij}(\rho)$ by inverse powers of ρ and asymptotes of fundamental solutions of the system of second order ODEs at large value of ρ in polar coordinates are elaborated. The proposed approach can be applied to the analysis of quantum transparency effect, quantum diffusion of molecules Be_2 and the Efimov effect [6] in $\text{Be}+\text{Be}_2$ scattering.

Acknowledgments

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant No. 14-01-00420) and the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (Grant No. 0333/GF4).

References

1. *P.M. Krassovitskiy P.M., Pen'kov F.M.* Contribution of resonance tunneling of molecule to physical observables. // Journal of Physics B — 2014 — Vol. 47. — p. 225210.
2. *Gusev A.A., Hai L.L.* Algorithm for Solving the Two-Dimensional Boundary Value Problem for Model of Quantum Tunneling of a Diatomic Molecule Through Repulsive Barriers // Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series "Mathematics. Information Sciences. Physics" — 2015 — no 1— C. 15–36.
3. *Vimitsky S.I., Gusev A.A., Chuluunbaatar O., et al* Symbolic numerical algorithm for solving quantum tunneling problem of a diatomic molecule through repulsive barriers, //Lecture Notes in Computer Science 2014 — Vol. 8660 — pp. 472–490.

-
4. *Gusev A.A., Hai L.L., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I.* , Programme KANTBP 4M for solving boundary problems for a system of ordinary differential equations of the second order, 2015 – JINRLIB.
 5. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitzky S.I. and Abrashkevich A.G.*, ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem. // *Comput. Phys. Commun.* 2009 — Vol. 181 — pp. 1358-1375.
 6. *Efimov V.N.*, Weakly-Bound States of Three Resonantly-Interacting Particles. // *Soviet J. Nucl. Phys.* 1971 — Vol. 12 — pp. 589-595.

УДК 519.246.8 + 519.216.3

Анализ хаотических временных рядов

В. В. Иванов*[†], С. Г. Климанов*, А. В. Крянев*

** Лаборатория информационных технологий,
Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980*

*[†] Кафедра прикладной математики,
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Каширское шоссе 31, Москва, Россия, 115409*

Аннотация. В докладе рассматривается задача прогнозирования хаотических временных рядов, с предварительным выделением трендов. Выделение трендов на основе робастных схем может осуществляться с помощью робастных полиномов, робастных сплайнов или робастных схем метрического анализа. Представлены примеры, показывающие эффективность предложенных схем прогнозирования. Применение представленных схем прогнозирования позволяет увеличить точность прогнозируемых значений исследуемых временных рядов.

Ключевые слова: хаотические временные ряды, выделение трендов, робастность, прогнозирование, точность.

1. Введение

Задачи прогнозирования исследуемых динамических процессов ставятся во многих областях естественных и гуманитарных наук особенно их приложений, включая технические направления, экономику и многие другие. В монографиях [1, 2] представлены различные методы для решения задач прогнозирования динамических процессов. В докладе приведены схемы, использованные для прогнозирования хаотических временных рядов, основанные на выделении трендов с дальнейшим учетом дополнительных экспертных прогнозов.

Представленные схемы прогнозирования предусматривают наличие аномальных выбросов. В докладе представлены разработанные нами устойчивые к аномальным выбросам робастные схемы прогнозирования. Робастность этих схем обусловлена использованием робастных схем оценивания [2–6].

2. Выделение трендов из хаотических временных рядов

Для решения задач устойчивого выделения из хаотических временных рядов трендов и хаотических компонент рассматриваются методы, которые позволяют выделить часть хаотической компоненты, обусловленной большими выбросами. Это обеспечивает большую устойчивость и точность выделения тренда.

Для выделения тренда $y_{tr}(t_k)$, $k = 1, \dots, n$ временного ряда нами рассматривается представление

$$y(t_k) = y_{tr}(t_k) + y_{an}(t_k) + y_{ch}(t_k), \quad (1)$$

где $y_{an}(t_k)$, $y_{ch}(t_k)$ - аномальная и хаотическая компоненты исходного временного ряда $y(t_k)$.

Тренд $y_{tr}(t)$ отражает глобальное изменение временного ряда из-за влияния достаточно долговременных факторов или причин, определяющих основное направление изменений временного ряда. Последнее обстоятельство обеспечивает возможность прогноза временных рядов, рассматривая вместо исходного временного ряда выделенный тренд.

2.1. Робастное выделение трендов

Одни из эффективных схем выделения трендов временных рядов основаны на использовании робастных линейных или кубических сплайнов [1, 2].

Робастный сплайн является решением экстремальной задачи на минимум целевой функции

$$J_\alpha = \sum_{k=1}^n \rho\left(\frac{x_k - S_k}{\sigma_k}\right) + \alpha \sum_{k=1}^n R(S_k),$$

где $\rho(s)$ - робастная функция; $R(S_k)$ - сглаживающая функция, $\alpha > 0$ - параметр сглаживания, $S_k = S_\alpha(t_k) = y_{tr}(t_k)$ - искомые значения робастного линейного сплайна.

Для нахождения искомого вектора $\vec{S} = (S_1, \dots, S_n)^T$ используются итерационные процедуры [1, 2].

После выделения тренда и аномальной компоненты хаотическая компонента находится согласно равенству

$$y_{ch}(t_k) = y(t_k) - (y_{tr}(t_k) + y_{an}(t_k)).$$

Хаотическая компонента $y_{ch}(t_k)$ представляет собой хаотический стационарный дискретный процесс.

2.2. Прогнозирование хаотических временных рядов с учетом экспертных прогнозов

Схема прогнозирования хаотических временных рядов, основана на выделении регулярной компоненты и учете априорных экспертных прогнозов. Представленная схема прогнозирования использует априорные экспертные прогнозы в виде совокупности пар

$$\{y_{\text{exp}}(t_k), \sigma_k, k = n + 1, \dots, n + L\},$$

где $y_{\text{exp}}(t_k)$ - экспертный прогноз значения исследуемого временного ряда на будущую дату t_k ; σ_k - средне квадратичное отклонение погрешности экспертного прогноза; L - горизонт прогнозирования [2, 7].

Прогнозирование основано на выделении из хаотической временной последовательности

$$y(t_{n-l}), y(t_{n-l+1}), \dots, y(t_n), y_{\text{exp}}(t_{n+1}), \dots, y_{\text{exp}}(t_{n+L})$$

тренда с помощью робастных сплайнов.

Горизонт l учитываемых реализованных значений исследуемого временной последовательности выбирается согласованно с значением параметра сглаживания α и горизонтом прогнозирования L . Для выбора подходящих значений уровня сглаживания и параметра l можно использовать схему на основе минимизации функционала невязки между прогнозируемыми и реализованными значениями временного ряда.

Прогнозируемые значения $y_{\text{for}}(t_{n+i}), i = 1, \dots, L$ равны значениям $y_{\text{reg}}(t_{n+i})$ регулярной компоненты $y_{\text{reg}}(t)$, выделенной с помощью описанной выше схемы.

На рисунке 1 представлен результат прогнозирования на два временных шага вперед, полученный на основе выделения тренда, хаотической и аномальной компонент из исходного хаотического временного ряда (толстая линия — исходный временной ряд, тонкая линия — прогнозные значения). Видно, что даже в условиях присутствия хаотической и аномальной компонент обеспечивается достаточно высокий уровень точности прогноза. Выделение регулярных и хаотических компонент производилось с помощью робастной схемы, использующей сглаживающие линейные сплайны.

3. Заключение

Представленные в докладе схемы робастного прогнозирования обладают вычислительной устойчивостью и устойчивостью по отношению к наличию аномальных выбросов в реализованных значениях исследуемого хаотического временного ряда. С помощью этих схем выделяются все три компонента представления (1), что обеспечивает возможность исследования аномальных ситуаций при рассмотрении временных процессов различной природы.

Разработанные нами схемы выделения трендов $y_{\text{tr}}(t_k)$ удовлетворяют следующим условиям: 1. устойчивостью к присутствию краткосрочных аномальных выбросов; 2. возможностью использования широкого класса моделей трендов; 3. наличием эффективных и устойчивых численных методов, реализующих предлагаемую схему выделения трендов.

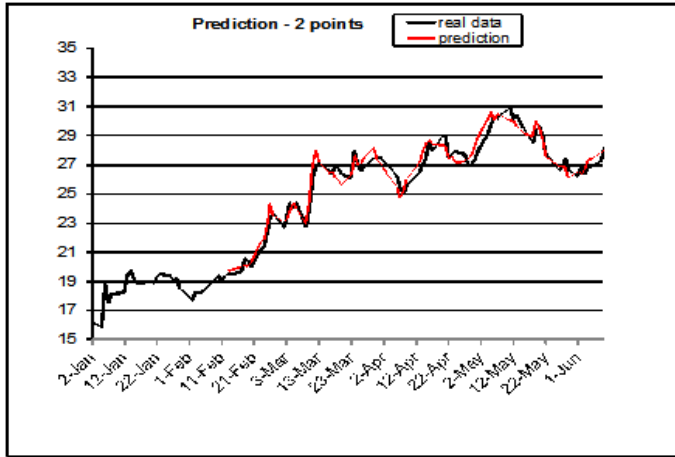


Рис. 1. Результаты прогнозирования хаотического временного ряда

Применение представленных в настоящей работе схем показали, что эти схемы дают возможность прогнозировать значения хаотических временных рядов с высокой точностью даже при наличии аномальных выбросов.

Литература

1. Крянев А.В., Лукин Г.В. Математические методы обработки неопределенных данных. М.: Физматлит, 2006.
2. Крянев А.В., Лукин Г.В., Улумян Д.К. Метрический анализ и обработка данных. М.: Физматлит, 2012.
3. Хьюбер П.Ж. Робастность в статистике. М.: Мир, 1983.
4. Hampel F.R., Ronchetti E.M., Rousseeuw P.J., Stahel W.A. Robust Statistics. The Approach Based on Influence Functions. John Wiley & Sons, 1985.
5. Arsenin V.Ya., Kryanev A.V. and Tsipko-Sitnikov M.V. Application of Robust Methods for Ill-Posed Problems Solving // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. 1989. V.29. №5. P.653-661.
6. Antoniou I., Akritas P., Burak D.A., Ivanov V.V., Kryanev A.V., Lukin G.V. Robust Methods for Stock Market Data Analysis // Physica A. 2004. V. 336, P.538-548.
7. Крянев А.В., Иванов В.В., Лукин Г.В., Улумян Д.К., Климанов

С.Г. Математические методы и алгоритмы прогнозирования временных процессов на основе выделения детерминированных компонент // Вестник Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». 2013. Т. 2. №2 С. 176-182.

UDC 519.246.8 + 519.216.3

DCCN-2016 Conference Thesis Template

V. V. Ivanov*[†], S. G. Klimanov*, A. V. Kryanev*

* *Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

[†] *Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

In the report the problem of forecasting of chaotic time series, with preliminary allocation of trends is considered. Allocation of trends on the basis robust schemes can be carried out with the help robust polynomials, robust splines or robust schemes of the metric analysis. The examples showing efficiency of offered schemes of forecasting are presented. Application of the presented schemes of forecasting allows to increase accuracy of predicted values of investigated time series.

Keywords: chaotic time series, allocation of trends, robustness, forecasting, accuracy.

UDC 51.76, 510.676, 519.7

Multifractal Dynamics Model and Instantaneous Cardiac Rhythm Catastrophes

A. P. Ivanov*, A. N. Kudinov[†], S. A. Mikheev[†],
V. P. Tsvetkov[†], I. V. Tsvetkov[†]

* *Tver Regional Cardiology Health Center
Russia, 170041, Tver, 19 Komsomolsky avenue*

[†] *Tver State University
Russia, 170100, Tver, 33 Zhelyabova str., TSU*

Abstract. The report presents the issues of Holter recording-based studies of instantaneous cardiac rhythm (ICR) jumps in a multifractal dynamics (MFD) mathematical model. In the model, ICR jumps represent catastrophes a flag of which is represented by an ICR fractal dimension value. The ICR jumps in the MFD model take place when the ICR fractal dimension D reaches the bifurcation point i.e. have a bifurcational nature.

Keywords: Multifractal Dynamics Model, Instantaneous Cardiac Rhythm, Fractal dimension, Catastrophes.

1. Introduction

The Introduction serves as the body of the paper. It begins with a broad statement of the problem under investigation and then proceeds to narrow the focus to the specific hypothesis or hypotheses of the study. The purpose of this section is to introduce the reader to the overall issue/problem that is being tested and to provide justification for the hypothesis or hypotheses. In order to accomplish these tasks, the author needs to review past research on the same topic, discussing their findings.

2. Main section

The modern cardiology is characterized by apparent increase in cardiovascular events in patients. One of adverse clinical course factors is a high risk of formation of complications which are often of fatal nature and expressed by a sudden cardiac death (SCD).

The findings over the past twenty years give evidence of presence of a true relationship between the autonomic regulation of cardiovascular system and the mortality from cardiovascular diseases including SCD [1, 2]. By now, the basic conception of prediction of risks of formation of fatal cardiovascular complications is considered to be a cardiac rhythm variability (CRV) analysis.

The relevance of cardiac rhythm study is closely related to a necessity for detection of new adverse cardiovascular event markers. One of alternate solutions of this problem is creation of new mathematical and computer

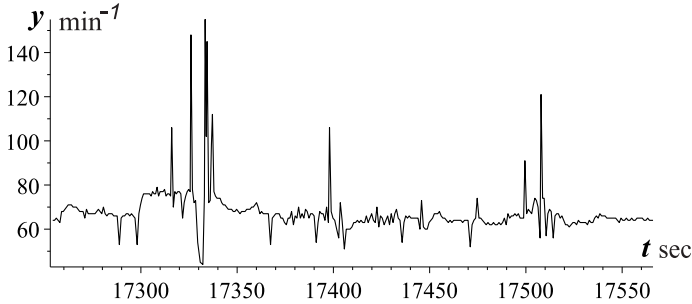


Figure 1. ICR curve

aided instantaneous cardiac rhythm (ICR) analysis in the multifractal dynamics (MFD) model based on the Holter recording (HR) technique [3–8]. These methods allow for prediction of possible cardiovascular catastrophes.

The ICR indicator is described by the time function $y(t)$ introduced and detailed in the paper [3]. When we average the $y(t)$ over the period of one minute we will obtain a standard cardiac rhythm value which is used in medical practice.

Fig. 1 shows the ICR values (y)-time (t) function.

The paper [3] demonstrates that the ICR jumps in the MFD model are of bifurcational nature and take place when the ICR fractal dimension D reaches the bifurcation point D_b .

According to the MFD model [5], let us divide the multifractal process dynamics on the interval of interest T_i (hereafter index i will be dropped) into two components using a piecewise linear trend concept:

$$y(t) = \bar{y}(t) + \tilde{y}(t) = KX(D)(t - t_0) + \tilde{y}(t),$$

where \bar{y} - a piecewise linear trend, $\tilde{y}(t)$ - oscillation about the piecewise linear trend, K - a dimension factor which we take equal to $10^3 \text{ min}^{-1}\text{sec}^{-1}$. The ICR fractal dimension D is completely defined by the function $\tilde{y}(t)$.

The value of X_p for single ICR jumps we evaluate according to the formula:

$$X_p = \frac{y_p - y_0}{\tau_p/2},$$

where y_p - a value of ICR in the peak point, y_0 - a value of ICR in the beginning of peak, and τ_p - a peak width.

Then MFD model parameters D_0 , D_k , B_0 and η can be defined from the equation system:

$$X_i - A^{-1}(D_i, D_0, D_k)\eta = 0, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$A(D) = (D_0 - D)^{-1} (D_0 - D_k)^{-1} A_1(D), \quad (1)$$

$$A_1(D) = \Theta(D_0 - D)(D_0 - D_k) + \Theta(D - D_0)(D - D_k),$$

$$B_0 = 4\eta X_p^{-3}, \quad D_b = D_k + (D_0 - D_k) \left(1 - \frac{1}{6\sqrt[3]{2}} X_p^3 n^{-5/3}\right)^{-1},$$

where $\Theta(x)$ - Heaviside function equal to 1 if $x \geq 0$ and equal to 0 if $x < 0$.

In the numerical calculation we use the following analytic representation $\Theta(x)$:

$$\Theta(x) = \frac{1}{1 + e^{-x/\varepsilon}}, \quad \varepsilon \ll 1.$$

Then

$$A_1(D_b, D_0, D_k) = \frac{D_0 - D_k}{1 + e^{(D - D_0)/\varepsilon}} + \frac{D - D_k}{1 + e^{(D_0 - D)/\varepsilon}}.$$

We modify the equation system (1) into

$$X_i - A_1^{-1}(D_i, D_0, D_k)(D_0 - D_i)(D_0 - D_k)\eta = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2)$$

$$B_0 = 4\eta X_p^{-3}, \quad D_b = D_k + (D_0 - D_k) \left(1 - \frac{1}{6\sqrt[3]{2}} X_p^3 n^{-5/3}\right)^{-1}, \quad \varepsilon = 10^{-4}.$$

The real variability of external factors effecting on the ICR indicator is defined by parameter η and does not allow to consider this parameter as a strictly constant one over all three observation periods. Moreover, the equation system (2) will not always be a system of simultaneous equations on all three time intervals if $\eta = \text{const}$. We shall consider η to be presented in each of periods i in the form of the constant part η_0 and the variable part $\Delta\eta_i$, in other words $\eta = \eta_0 + \Delta\eta_i$, $|\Delta\eta_i| \ll |\eta_0|$. As is evident, due to variability of $\Delta\eta_i$, the system (2) will always possess an accurate solution. It follows from the formula (4) below according to which these values are to be determined.

Therefore we solve the problem in two stages. First, we solve the equation system:

$$f_i = X_i - A_1^{-1}(D_i, D_0, D_k)(D_0 - D_i)(D_0 - D_k)\eta = 0 \quad (3)$$

To minimize the deficiency of $u = \sqrt{f_1^2 + f_2^2 + f_3^2}$ we find the approximate solution (3) for D_0, D_k, η_0 . With their help we find $\Delta\eta_i$ by the formula:

$$\Delta\eta_i = \frac{A_1(D_i, D_0, D_k) X_i}{(D_0 - D_i)(D_0 - D_k)} - \eta_0 \quad (4)$$

To solve (3), we enter new variables $x_1 = D_0, x_2 = D_k, x_3 = \eta_0$ and act in an iterative manner using a gradient descent method. The result is as follows:

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} - \lambda_n \left(\frac{\partial}{\partial x_i^{(n)}} u \left(x_j^{(n)} \right) \right), \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (5)$$

where λ_n – an iteration process step.

The first approximation $x_i^{(0)}$ shall be chosen after x_i value and f_i functions analysis.

In order to implement the diagram (5) we created and implemented the Maple program designed to stop the iteration process if $u^{(n+1)} - u^{(n)} > 0$, $u^{(n)} = u \left(x_i^{(n)} \right)$.

Within the study we processed data resulted from Holter monitoring of patients of the Tver Regional Cardiology Health Center. We show detailed data evaluation results of one of the patients over different observation time points. The total monitoring time was 23 hours. We used ICR data on the observation interval of 160 seconds on which ICR jumps took place. The observation interval initial time was drawn at random on the monitoring interval.

The plot of function $y(t)$ with a piecewise linear trend before and after the ICR jump area is given in Fig. 2

The ICR observation data and MFD model calculation data are given in Table 1.

Table 1.

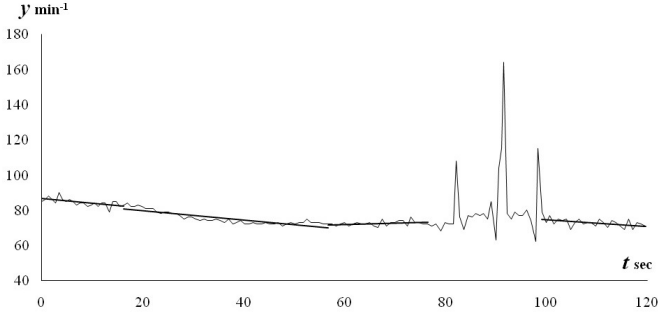


Figure 2. Plot of ICR against time

i	1	2	3	P	4
D_i	1.936	1.324	1.673		1.887
X_i	$-0.239 \cdot 10^{-3}$	$-0.253 \cdot 10^{-3}$	$0.040 \cdot 10^{-3}$		
X_p				$90.900 \cdot 10^{-3}$	
τ_p				2.220 sec	
D_0	1.635				
D_k	1.784				
η_0	$-0.810 \cdot 10^{-3}$				
D_b	1.774				
B_0	-4.347				
$\delta\eta_1$	$1.600 \cdot 10^{-18}$				
$\delta\eta_2$	$9.000 \cdot 10^{-16}$				
$\delta\eta_3$	$3.765 \cdot 10^{-15}$				

The data from Table 1 allow to examine the dynamics of function $h = D - D_0$ which describes the ICR piecewise linear trend rate variability. This plot is shown in Fig 3.

The function h has an oscillatory pattern with rectangular wave attenuation on the first half of the time interval. On the second half of the time interval, the function bears a stepwise pattern with a rise in amplitude. This fact can be indicative of occurrence of jumps in the beginning of the second half of the ICR jump interval.

Let us carry out a brief analysis of MFD model ICR parameters given in Table 1.

The ICR fractal dimension variation range turned out to be large enough: from 1.324 to 1.936. This fact is indicative of the high degree

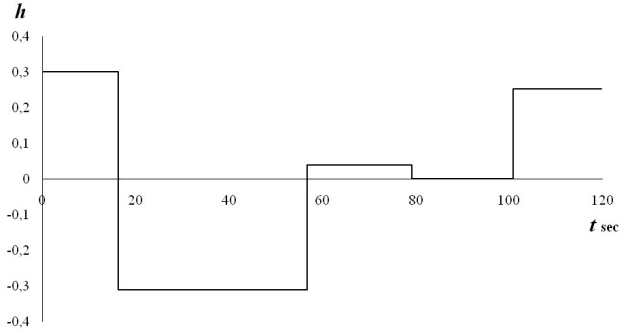


Figure 3. Plot of function h

of ICR behavior variability for the patient under study on different time intervals. If the fractal dimension value range varies within 1.200 – 1.300, the ICR indicator behaves quite deterministically, and if the fractal dimension value range varies within 1.800 – 1.900, the ICR indicator behaves extremely randomly. As for the fractal dimension equilibrium value D_0 , it turned to be equal to 1.635.

The value of η turned to be equal to $-0.810 \cdot 10^{-3}$. A negative value of η is indicative of decrease of the ICR value under the influence of external factors on the given time interval.

One can see from the tables that the shift of bifurcation point from the critical point is equal to 0.010. In our situation, the value of $D_k = 1.784$ is situated well over the Gaussian value of fractal dimension of $D = 1.500$.

Carrying out evaluation of ICR jump rate in the patient under study is of doubtless interest. To do this we drawn up a software program recording ICR jumps with $X_p > 2 \cdot 10^{-2}$. At that the time interval of 1.6 hours on which the jump frequency ν_p was minimal and equal to 228.500 hr^{-1} as well as the interval of 7 hours with a minimal value of ν_p equal to 19.700 hr^{-1} were identified. The average jump frequency on the entire observation interval ν_p turned out to be equal to 67.500 hr^{-1} .

As for the relationship between the values of D_b calculated within the MFD model framework with occurrence of jumps, we came to the following conclusion based on the analysis of our data: the inequation $D_{i_{min}} < D_b < D_{i_{max}}$ takes place.

The values of B_0 which define the jump value of X_p turned out to be equal to -4.347 i.e. of the order of unity.

Let us compare the obtained MDF model ICR parameters with the cardiovascular system state of the patient under study found out with the help of standard cardiological approaches.

We show the main patienthood characteristics. Age: 65 years old. Predominant diagnosis: arterial hypertension. Clinical manifestation - arterial tension buildup. Holter monitoring was prescribed in response to the complains of irregularity of cardiac rhythm. In the absence of ischaemic alterations, the ECG revealed various rhythm disturbances in the form of ventricular and supraventricular extrasystoles which allowed to assign the patient to sudden cardiac death risk group 4a by Ryan classification (high risk). This risk group is characterized by high frequency of ventricular monomorphic extrasystoles (15 per hour at rated frequency of less than 6 per hour) and auricular extrasystoles (28 per hour at rated frequency of less than 6 per hour) as well as pair and group ectopic beats of heart recorded. This fact characterizes the possibility of progress of fatal ventricular arrhythmia.

The carried out cardiac rhythm variability analysis revealed the essential predominance of sympathetic nervous system activity which is an additional factor of adverse cardiovascular event formation risk.

One more risk factor is significant prolongation of Q-T interval and its dispersion recorded over 42% of monitoring time.

These factors can be interpreted as warnings of fatal arrhythmic events in patients with arterial hypertension which should be considered as resulted from left ventricle weight gain (left ventricular hypertrophy).

In whole, the MFD model ICR parameters correspond to this diagnosis. Thus, the high fractal dimension ICR values reaching 1.936 are indicative of the high degree randomness of cardiac rhythm which is in line with the diagnosis. It also follows from the mode of behavior of the plot of function h . The average ICR frequency of 67.500 hr^{-1} is coherent with a high frequency of ventricular monomorphic extrasystoles and supraventricular extrasystoles as well as with recording of pair and group ectopic beats of heart. The sudden cardiac death risk of group 4a by Ryan (high risk) can be well founded by a minor difference between parameters D_b and D_0 .

3. Conclusions

The relevance of cardiac rhythm study is closely related to a necessity for detection of new adverse cardiovascular event markers. One of alternate solutions of this problem is creation of new mathematical and computer aided instantaneous cardiac rhythm (ICR) analysis in the multifractal dynamics (MFD) model based on the Holter recording (HR) technique. These methods allow for prediction of possible cardiovascular catastrophes.

References

1. Task Force of the European Society of Cardiology and the North American Society of Pacing and Electrophysiology. Heart rate variability: Standards of measurement, physiological interpretation and clinical use // *Circulation*, 1996, Vol. 93, p.1043-1065.

2. *Priori S.G., Aliot E., Blomstrom-Lundqvist C. et al.* Force on sudden cardiac death of the European Society of Cardiology // *Eur Heart J* 2001, Vol.22, No.16, p.1374-1450.
3. *Kudinov A.N., Lebedev D.IU., Tsvetkov V.P., Tsvetkov I.V.* Matematicheskaia model multi-fraktalnoi dinamiki i analiz serdechnykh ritmov // *Matematicheskoe modelirovanie*, 2014, t.26, no 10, s.127-136.
4. *Ivanov A.P., Kudinov A.N., Lebedev D.IU., Tsvetkov V.P., Tsvetkov I.V.* Analiz mgnovenного serdechnogo ritma v modeli multifraktalnoi dinamiki na osnove holterovskogo monitorirovaniia. // *Matematicheskoe modelirovanie*, 2015, t.27, no 4, s.16-30.
5. *Kudinov A.N., Tsvetkov V.P., Tsvetkov I.V.* Catastrophes in the multifractal dynamics of social-economic systems. // *Russian Journal of Mathematical Physics*, 2011, Vol. 18, No. 2, p.149-155.
6. *Kudinov A.N., Lebedev D.IU., Ivanov A.P., V.N. Ryzikov, Tsvetkov V.P., Tsvetkov I.V.* Samopodobie skaterogrammy mgnovenного serdechnogo ritma // *Vestnik Tverskogo Universiteta. Ser. Prikladnaia matematika*, 2014, no 3, s. 105-114.
7. *Kudinov A.N., Lebedev D.IU., Tsvetkov V.P., Tsvetkov I.V.* Mathematical model of the multifractal dynamics and analysis of heart rates // *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2015, Vol. 7, No. 3, p. 214-221.
8. *Kudinov A.N., Lebedev D.IU., V.N. Ryzikov, Tsvetkov V.P., Tsvetkov I.V., Ivanov A.P.* Samopodobie I fraktalnaia razmernost skaterogrammy mgnovenного serdechnogo ritma // *Naukoemkie tehnologii*, 2015, no 5, s. 57-63.

UDC 51.76, 510.676, 519.7

Phase Space of Instantaneous Cardiac Rhythm and Imaging of Big Data on It

A. P. Ivanov*, A. N. Kudinov[†], S. A. Mikheev[†],
V. P. Tsvetkov[†], I. V. Tsvetkov[†]

* *Tver Regional Cardiology Health Center
Russia, 170041, Tver, 19 Komsomolsky avenue*

[†] *Tver State University
Russia, 170100, Tver, 33 Zhelyabova str., TSU*

Abstract. By now, the basic conception of evaluation and prediction of risks of formation of fatal cardiovascular complications is considered to be a cardiac rhythm variability (CRV) analysis. One of the upcoming CRV research trends is an instantaneous cardiac rhythm (ICR) analysis. The Holter recording (HR) technique allows obtaining ICR data within several days. Within 24 hours of HR a data set consisting of about 150000 data points can be obtained. In the papers [1, 2] the CRV function, $y(t)$, which most adequately reflects the cardiovascular system dynamics was introduced. Together with the $y(t)$, it is possible to implement a function characterizing an ICR change rate; let us call it IRCR (instantaneous rate of cardiac rhythm) function, $v(t)$. The functions $y(t)$ and $v(t)$ contain complete information on ICR behavior on the time interval of interest.

Keywords: Phase Space, Extended phase space, Instantaneous Cardiac Rhythm, Big Data.

1. Introduction

The Introduction serves as the body of the paper. It begins with a broad statement of the problem under investigation and then proceeds to narrow the focus to the specific hypothesis or hypotheses of the study. The purpose of this section is to introduce the reader to the overall issue/problem that is being tested and to provide justification for the hypothesis or hypotheses. In order to accomplish these tasks, the author needs to review past research on the same topic, discussing their findings.

2. Main section

By now, the basic conception of evaluation and prediction of risks of formation of fatal cardiovascular complications is considered to be a cardiac rhythm variability (CRV) analysis. One of the upcoming CRV research trends is an instantaneous cardiac rhythm (ICR) analysis. The Holter recording (HR) technique allows obtaining ICR data within several days. Within 24 hours of HR a data set consisting of about 150000 data points can be obtained. In the papers [1, 2] the CRV function, $y(t)$, which most adequately reflects the cardiovascular system dynamics was introduced.

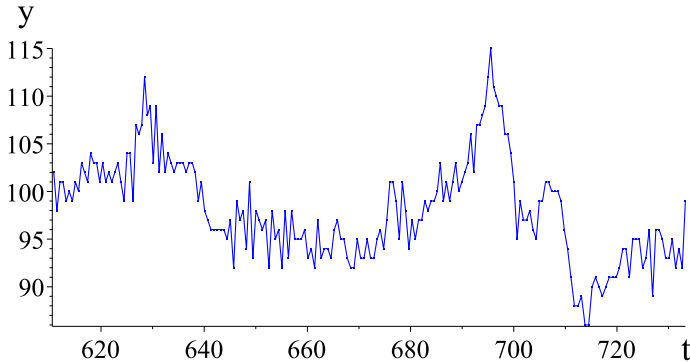


Figure 1. Plot of $y(t)$ function

Together with the $y(t)$, it is possible to implement a function characterizing an ICR change rate; let us call it IRCR (instantaneous rate of cardiac rhythm) function, $v(t)$. The functions $y(t)$ and $v(t)$ contain complete information on ICR pattern on the time interval of interest. The numerical values of functions $y(t)$ and $v(t)$ provided hereafter are in units of min^{-1} and $\text{min}^{-1}\text{sec}^{-1}$, correspondingly.

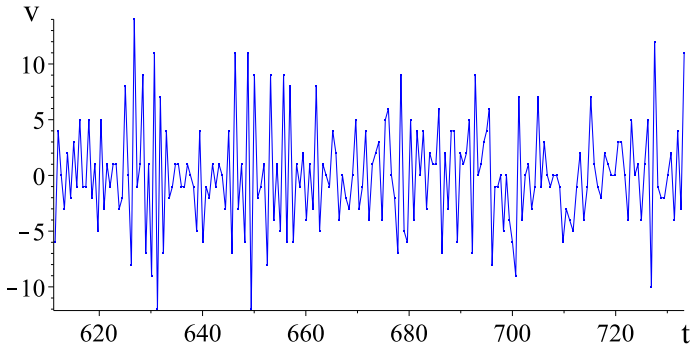
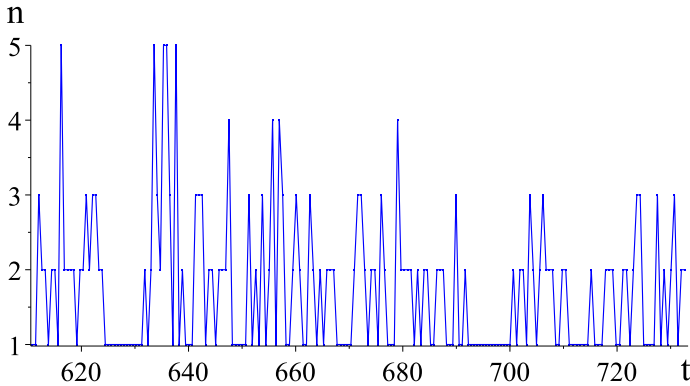
A set of points in R^2 with orthogonal coordinates $y(t)$ and $v(t)$ form a phase space (PS) of ICR. The functions $y(t)$ and $v(t)$ determine a phase trajectory (PT) and every its point determines a CRV and, consequently is referred to as a phase point (PP).

Together with the PS of ICR, the report uses an extended phase space (EPS) of ICR which represents a set of points in R^3 with orthogonal coordinates $(y(t), v(t), n(t))$. The function $n(t)$ describes a number of PP passages through the $(y(t), v(t))$ point. In this case, the PP in the PS represents the projection of the PP in the EPS on the (y, v) plane.

We cite the certain type of the functions $y(t)$, $v(t)$, $n(t)$ as well as EPS and PS of ICR of one of the patients of the Tver Regional Cardiology Health Center. We take the HR duration which is short enough and equal to 632 sec. With essentially major HR time intervals, the figures for the EPS and the PS of ICR will not be detailed.

The EPS of ICR of the patient of interest is shown in Fig. 4.

From Fig. 4 we can see that the PP in the EPS describes a complex geometric configuration. The PP condensation point corresponds to the peak in Fig. 4 and has coordinates $y_m = 96$, $v_m = -1$. The PP passes through this point 17 times during the HR time. In the neighborhood of this ICR point of the patient of interest we can see the maximum time. It is reasonable to call the cardiac rate of 96 min^{-1} as an intrinsic heart rate of the patient.

Figure 2. Plot of $v(t)$ functionFigure 3. Plot of $n(t)$ function

The projection of Fig. 4 on the yv plane gives the PS of ICR shown in Fig. 5.

The red lines in Fig. 5 separate the PS into three areas. The internal area can be reasonably referred to as a normal instantaneous cardiac rhythm area where $-10 \leq v \leq 10$. The normal rhythm boundary $|v| = 10$ is chosen according to the amount of change of v and separates high value zone $|v| \gg 1$ and low value zone $|v| \sim 1$. Two other PS areas can be reasonably referred to as an ICR jump (catastrophe) area. From Fig. 5 we can see that the ICR of the patient of interest has only 25 jumps over the observation period of 632 sec.

In Fig. 6 we cite a projection of EPS on the yn plane.

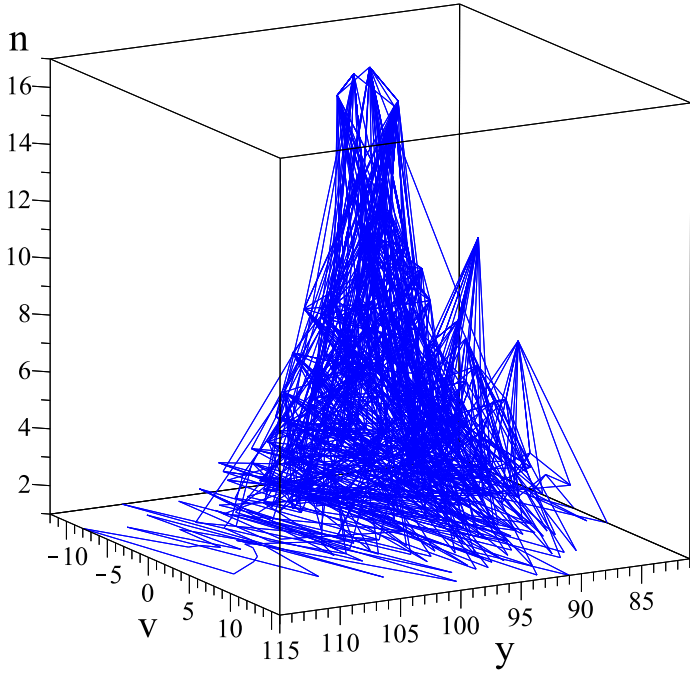


Figure 4

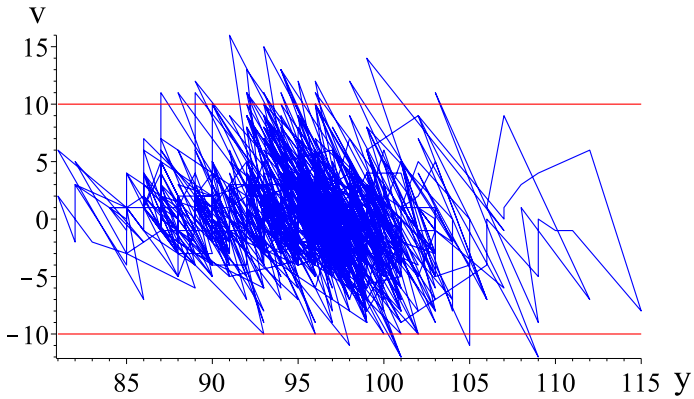


Figure 5

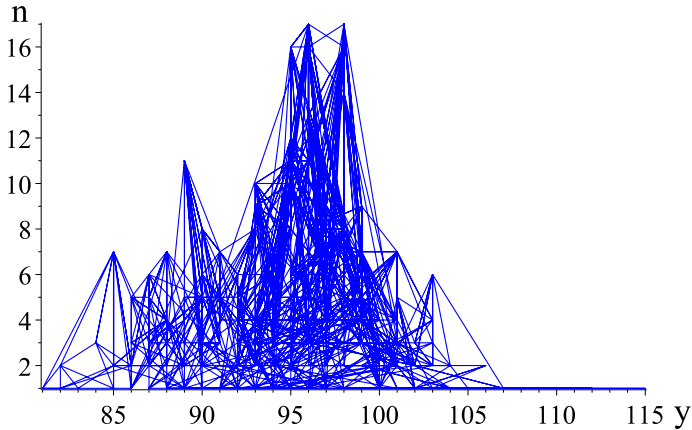


Figure 6

From this figure we can see that besides the PP condensation peak, the ICR has 5 more other condensation points but with approximately half a number of PP passages through these points. The heart rates in these points will be both 5 min^{-1} , 7 min^{-1} greater and 6 min^{-1} , 8 min^{-1} , and 11 min^{-1} less than ym . This is indicative of a reasonably optimal degree of ICR variability of the patient of interest, which is in turn indicative of a good state of his/her cardiovascular system.

As for the ICR change rates $v(t)$, the corresponding data can be obtained from the projection of the PP in the EPS on the ym plane shown in Fig. 7.

Fig. 7 demonstrates a complex pattern of $v(t)$ deviation from the mean value $v \approx 0$, whereby the cardiac rhythm is the most stable. We can see that the IRCR deviates from zero much more symmetrically than the ICR. This is indicative of uniformity of rates of ICR rise and decrease. To our opinion, this is one more evidence of a good state of cardiovascular system of the patient.

3. Conclusions

The research we have conducted is indicative of a true complex mode of behavior of the functions $y(t)$ and $v(t)$ characterizing the ICR state. We have demonstrated with specific reference the efficiency of study of these functions based on imaging of mass data on ICR with the use of EPS.

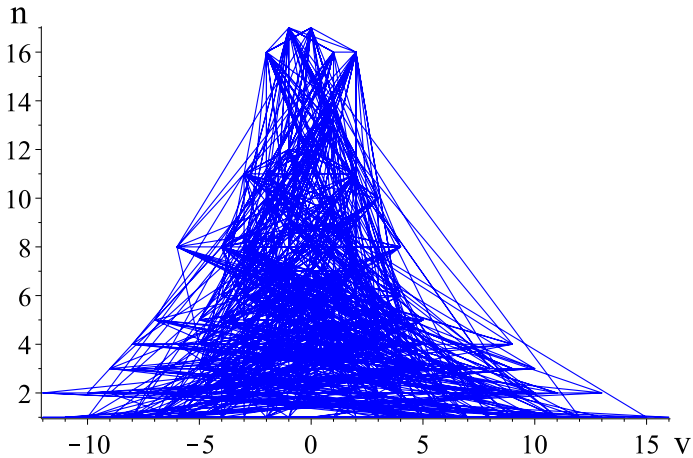


Figure 7

References

1. *Kudinov A.N., Lebedev D.IU., Tsvetkov V.P., Tsvetkov I.V.* Matematicheskaja model multi-fraktalnoi dinamiki i analiz serdechnykh ritmov // *Matematicheskoe modelirovanie*, 2014, t.26, no 10, s.127-136.
2. *Ivanov A.P., Kudinov A.N., Lebedev D.IU., Tsvetkov V.P., Tsvetkov I.V.* Analiz mgnovenennogo serdechnogo ritma v modeli multifraktalnoi dinamiki na osnove holterovskogo monitorirovaniia. // *Matematicheskoe modelirovanie*, 2015, t.27, no 4, s.16-30.

УДК 519.6; 699.841

Сейсмоизоляция зданий на основе кинематических опор Курзанова А.М.

С. П. Карнилович, К. П. Ловецкий,
Л. А. Севастьянов, Е. Л. Щесняк

*Российский университет дружбы народов
ул. Миклухо-Маклая 6, 117198 Москва, Россия*

Аннотация. Рассматривается конструкция опор Курзанова А.М., позволяющая гасить энергию колебаний сейсмических волн при землетрясениях. Здание опирается на опоры, которые имеют геометрию правильных цилиндров. При возникновении горизонтальных колебаний грунта опоры отклоняются на небольшой угол ψ . При этом их центр тяжести приподнимается и стремится возвратиться в исходное положение под действием двух сил на каждую опору: веса здания, равномерно распределенного на каждую опору, и веса самой опоры. Первая сила приложена к высшей точке опоры, вторая — к центру тяжести опоры, так что на опору действуют вращательные моменты двух сил.

Следует отметить, это при очень сильных колебаниях грунта центр тяжести может сдвинуться по горизонтали за пределы точки вращения опоры. В этом случае опоры начнут опрокидываться. Мы ограничимся рассмотрением таких отклонений, когда вращательные моменты сил тяжести все еще стремятся вернуть опоры в исходное состояние равновесия.

Ключевые слова: энергия колебаний сейсмических волн при землетрясениях, конструкция опор Курзанова, гашение энергии землетрясения.

1. Введение

Величина энергии, переданной на здание, зависит от соотношения спектров сейсмического воздействия и собственных колебаний здания. Чем ближе пики спектров, тем больше, при прочих равных условиях, энергия, передаваемая зданию. Эта энергия в основном поглощается за счет неупругих деформаций конструкции. Исходя из вышесказанного можно определить две основные задачи сейсмоизоляции:

1) развести спектры и тем самым уменьшить количество энергии, передаваемой на здание и

2) обеспечить поглощение оставшейся энергии при помощи специальных мероприятий.

В работах, посвященных детерминированному анализу динамики сооружений, т.е. определению характера изменения во времени перемещений системы под действием сейсмической нагрузки (сильно осциллирующей и нерегулярной) [1] изучаются различные конструкции опор здания (сооружения), направленные на эффективное демпфирование энергии пространственного движения здания, вызванного землетрясением. Среди них можно выделить наиболее удачные решения

Курзанова А.М. и Черепинского Ю.П. [2]. В данной работе мы рассмотрим подробно устройство и функционирование опор Курзанова, хорошо зарекомендовавших себя в экспериментальных исследованиях [3]. Предпринимаемое нами теоретическое изучение функционирования опор Курзанова направлено на математическое моделирование их поведения и последующий выбор параметров модели опор с целью решения обеих вышеуказанных задач сейсмоизоляции.

2. Математическая модель функционирования опор Курзанова

Рассматривается конструкция опор Курзанова А.М., позволяющая гасить энергию колебаний сейсмических волн при землетрясениях. Здание весом Mg опирается на n опор, каждая из которых имеет вес mg . Опоры имеют геометрию правильных цилиндров высоты h и диаметра основания a . При возникновении горизонтальных колебаний грунта опоры отклоняются на угол ψ . При этом их центр тяжести приподнимается и стремится возвратиться в исходное положение под действием двух сил на каждую опору: веса здания, равномерно распределенного на каждую опору, и веса самой опоры. Первая сила приложена к высшей точке опоры (см. рис. 1), вторая – к центру тяжести опоры (см. рис. 2), так что на опору действуют вращательные моменты двух сил.

Следует отметить, что при очень сильных колебаниях грунта центр тяжести может сдвинуться по горизонтали за пределы точки вращения опоры, т.е. $\varphi > \alpha$, где α – угол между диагональю опоры и ее высотой. В этом случае опоры начнут опрокидываться. Между углами, изображенными на рис. 1 и рис. 2, выполняются соотношения $\alpha = \varphi + \psi$.

Мы ограничимся рассмотрением таких отклонений, когда вращательные моменты сил тяжести все еще стремятся вернуть опоры в исходное состояние равновесия, то есть будем рассматривать случай, когда $\varphi < \alpha$. В этих случаях $\alpha = \varphi + \psi$, где ψ – угол отклонения дна опоры от горизонтали, при этом опоры совершают нелинейные колебания.

Возвращающая сила веса здания вычисляется как

$$F_M = -\frac{Mg}{n} \sin \varphi.$$

Расстояние от точки приложения силы F_M до оси вращения равно $L_M = 2l = \sqrt{a^2 + h^2}$. Вращающий момент силы вычисляется по формуле $F_M \cdot L_M = -\frac{Mg}{n} \sqrt{a^2 + h^2} \sin \varphi$

Возвращающая сила веса опоры вычисляется как $F_m = mg \sin \varphi$. Расстояние от точки приложения силы F_m до оси вращения равно l . Вращающий момент силы вычисляется по формуле $F_m \cdot l$. Момент

инерции опоры равен $J = ml^2$. Уравнение движения физического маятника имеет вид

$$F_m \cdot l + F_M \cdot L_M = -J\ddot{\varphi}$$

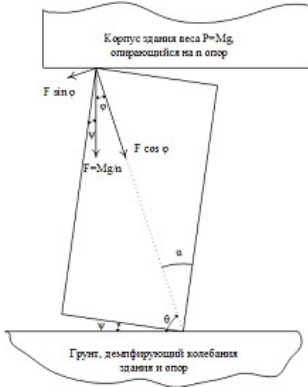


Рис. 1. Вращательная сила, порожденная давлением здания на опоры

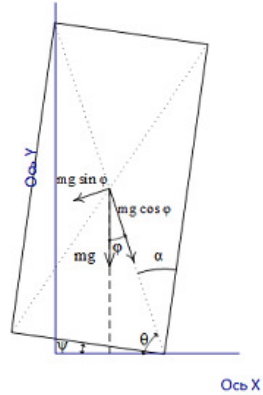


Рис. 2. Вращательная сила, порожденная весом опоры

С учетом явного вида возвращающих сил получаем соотношение

$$mgl \sin \varphi + \frac{2Mg}{n} l \sin \varphi = -ml^2 \ddot{\varphi},$$

которое приводится к дифференциальному уравнению Лагранжа, описывающему динамику движения опор после сейсмического толчка, выведшего всю систему из состояния равновесия:

$$-\ddot{\varphi} = \left(\frac{g}{l} + \frac{2Mg}{nml} \right) \sin \varphi = \frac{g}{l} \left(1 + \frac{2M}{nm} \right) \sin \varphi$$

В случае малых колебаний, то есть при $\psi < \alpha$, получим

$$\ddot{\psi} - \left(1 + \frac{2M}{nm} \right) \frac{g}{l} \sin(\alpha - \psi) = 0 \tag{1}$$

Полученное уравнение (1) – это уравнение свободных (не возмущенных продолжающимся сейсмическим воздействием) колебаний.

С учетом тригонометрической формулы $\sin(\alpha - \psi) = \sin(\alpha) \cos(\psi) - \cos(\alpha) \sin(\psi)$ и без учета веса здания из уравнения (1) следует уравнение колебания самих опор.

$$\ddot{\psi} + \frac{g}{l} [\sin(\alpha) \cos(\psi) - \cos(\alpha) \sin(\psi)] = 0, \tag{2}$$

которое отличается от уравнения [2, ур. (5)], приведенного в статье [2].

В случае очень малых углов отклонения от вертикали $\varphi \ll 1$, когда $\cos \varphi \approx 1$ в первом приближении уравнение (2) принимает достаточно простой вид

$$\ddot{\psi} + \frac{g}{l} \cos(\alpha) \sin(\psi) = 0$$

совпадающий с уравнением [2, ур. (5)], приведенного в статье [2].

3. Анализ математической модели функционирования опор Курзанова

Модель (1) является нелинейной консервативной динамической системой. Следует рассмотреть переход через положение равновесия, а также фазовый портрет модели с учетом этого перехода.

Движение опор и корпуса здания в процессе этих нелинейных колебаний можно рассматривать как колебания связанных физических маятников. При этом связь маятников не является консервативной, а содержит фактор, пропорциональный трению качения опор об основание корпуса здания. Причем радиус качения зависит от угла ψ : чем больше угол, тем меньше радиус, а значит тем больше сила трения между n опорами и основанием здания.

Далее, при таких возвратно-колебательных движениях системы опоры периодически давят на неупругий грунт. Реакцию грунта на это периодическое давление можно описать колебаниями осциллятора (скорее линейного, чем нелинейного) с затуханием.

И разумеется вся эта объединенная система, включая реакцию грунта, движется под действием сейсмического сильно осциллирующего и нерегулярного возмущения, порожденного землетрясением.

Только в результате совместного рассмотрения всех указанных факторов и можно рассчитывать на адекватное описание детеминированной динамики здания под действием сейсмического возмущения от землетрясения.

4. Заключение

Основная задача детерминированного анализа динамики сооружений – определение характера изменения во времени перемещений системы под действием заданной переменной нагрузки (сильно осциллирующей и нерегулярной). Другие параметры динамической реакции сооружения вычисляются исходя из полученных распределений перемещений. Математические выражения, определяющие динамические перемещения, называются уравнениями движения сооружений.

Анализ полученного в работе уравнения позволяет отстроить собственные частоты свободных колебаний системы здания на опорах за счет варьирования веса здания и количества опор. Детальный анализ

этой отстройке требует рассмотрения вынужденных колебаний под действием внешних сил горизонтальных сейсмических колебаний.

Благодарности

Авторы благодарны проф. Галишниковой В.В. за плодотворные обсуждения.

Работа частично поддержана грантами РФФИ № 14-01-00628, № 15-07-08795 и № 16-07-00556.

Литература

1. Харланов В. Л. Детерминированный анализ металлических каркасов на динамические нагрузки высокой интенсивности : монография / ВолгГАСУ, 2006. — 134 с.
2. Авидон Г. Э., Кармина Е. А. Особенности колебаний зданий зданий с сейсмоизолирующими фундаментами А.М. Курзанова и Ю.Д. Херепинского // Сейсмостойкое строительство. Безопасность сооружений. — 2008. — №1. — С. 42–44.
3. Курзанов А. М. Современное состояние нормированного расчета сооружений на сейсмическую нагрузку // Пром. и гражд. стр-во. — 2009. — № 11. — С. 52–53.

UDC 519.6; 699.841

Seismic Systems Based on A.M. Kurzanov's Kinematic Supports

S. P. Karnilovich, K. P. Lovetskiy, L. A. Sevastianov,
E. L. Schesnyak

*Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, 117198 Moscow, Russia*

We consider the construction of supports named after A.M. Kurzanov, which allows damping vibration energy of seismic waves during earthquakes. The building is based on supports, which have the correct geometry of the cylinder. In the event of horizontal ground vibrations supports deflect by an angle ψ . At the same time their center of gravity raises and tends to return its original position under the action of the two forces on each support: weight of building uniformly allocated to each support, and the weight of the support itself. The first force is applied to the highest point of the support, the second – to the center of gravity of the support, so that the rotational moment is the sum moments of the two forces.

It should be noted that at very high ground vibrations the center of gravity can move horizontally beyond the support point of rotation. In this case, the

support will tip over. We confine ourselves to such deviations when rotational moments of gravity still seeking to return the support to its original state of equilibrium.

Keywords: vibration energy of seismic waves during earthquakes, Kurzanov's supports design, damping earthquake energy.

УДК 519.63

Применение технологии OpenCL для моделирования сейсмических процессов сеточно-характеристическим методом

Н. И. Хохлов*, А. М. Иванов*, М. С. Жданов*[†],
И. Б. Петров*, Е. А. Рябинкин*

** Лаборатория прикладной вычислительной геофизики,
Московский физико-технический институт,
Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9.,
Россия, 141701*

*† Университет штата Юта,
201 Presidents Circle Room 201 SLC, UT 84112, USA*

Аннотация. В работе рассматривается применение технологии OpenCL для решения задач сейсмологии на GPU. Решается двумерная задача линейной теории упругости с использованием сеточно-характеристического метода. Решение поставленной задачи было протестировано для ряда устройств от NVIDIA и AMD. Тесты были произведены как для вычислений одинарной точности, так и для вычислений двойной точности. Использовались устройства серий NVIDIA GeForce, NVIDIA Tesla и AMD Radeon. Исследование показало, что реализация алгоритма с использованием технологии OpenCL незначительно уступает CUDA реализации на устройствах NVIDIA.

Ключевые слова: OpenCL, CUDA, GPU, вычислительная сейсмология, сеточно-характеристический метод, труды конференции.

1. Введение

Использование графических устройств для разного рода вычислений активно применяется в наши дни. При этом ключевую роль играет эффективность, как самих графических ускорителей, так и программного обеспечения, которое задействует их. В работе рассматривается применение технологии OpenCL для решения задач сейсмологии на GPU. Решается двумерная задача линейной теории упругости с использованием сеточно-характеристического метода.

В некоторых работах производится решение различных задач сейсмологии, которые сводятся к решению гиперболических систем уравнений, на GPU. В работе [1] описывается реализация численного метода ADER-DG с использованием технологии CUDA. В других работах изучается реализация WENO схем на GPU [2]. Исследуется ускорение при решении гиперболических систем уравнений на структурированных сетках на GPU по сравнению с CPU [3].

К решению гиперболических систем уравнений сводятся и другие задачи. В работе [4] производятся вычисления на GPU с повышенной точностью – до 60 знаков после запятой. Авторы [8, 9] получили прирост производительности при решении уравнений мелкой воды.

Моделируются магнитогидродинамические процессы на графических устройствах [5]. Авторами [10] на графических устройствах реализуется разрывный метод Галеркина и детально описывается его профилирование. Тот же метод был реализован на нескольких GPU в работе [11] при этом получено ускорение в 28.3 раза на GPU кластере по сравнению с CPU кластером. В работе [12] также сравнивается ускорение на кластере GPU по сравнению с CPU кластером, в вычислениях методом спектральных элементов распространения сейсмических волн.

Помимо этого технология CUDA применяется для решения других задач. Показывается влияние большого количества операций ввода-вывода на производительность алгоритма [13]. Сравнивается производительность GPU и CPU [14–17]. При этом делаются попытки снизить энергопотребление графическими устройствами во время вычислений [18]

В данной работе используется сеточно-характеристический метод, который хорошо зарекомендовал себя для задач сейсмологии, в которых требуется численное решение гиперболических систем уравнений. Данный метод хорошо поддается распараллеливанию, поскольку используется явный метод и большие расчетные сетки.

Ранее алгоритм уже был распараллелен используя технологии MPI, OpenMP и CUDA. В данной работе алгоритм был реализован с использованием технологии OpenCL. Для тестирования были использованы устройства от NVIDIA и AMD. На GPU NVIDIA результаты работы OpenCL реализации сравнивались с такой же реализацией на CUDA. От NVIDIA использовались устройства GeForce и Tesla, в том числе и последние модели Tesla k80 и Tesla k40m. От AMD использовались GPU серий Radeon HD и Radeon R9. Были рассмотрены различия в эффективности реализации с одинарной точностью и с двойной точностью. В качестве устройства для тестирования последовательной реализации использовался CPU Intel Xeon E5-2697.

2. Основная часть

2.1. Математическая модель и численные методы

Сформулируем основные уравнения линейной динамической теории упругости, которым подчиняется состояние бесконечно малого объема линейно-упругой среды. Рассмотрим нестационарные уравнения теории упругости для случая трех переменных, в некоторой ортонормированной системе координат (x_1, x_2, x_3) :

$$\begin{aligned} \rho \dot{v}_i &= \nabla_j \sigma_{ij}, \\ \dot{\sigma}_{ij} &= q_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} + F_{ij}, \end{aligned} \quad (1)$$

здесь ρ – плотность среды, v_i – компоненты вектора скорости смещения, σ_{ij} и ϵ_{ij} – компоненты тензоров напряжений Коши и деформации,

∇_j – ковариантная производная по j -й координате, F_{ij} – добавочная правая часть. Вид компонент тензора четвертого порядка q_{ijkl} определяется реологией среды. Для линейно-упругого случая они имеют вид:

$$q_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}).$$

В этом соотношении, которое обобщает закон Гука, λ и μ – параметры Ламе, а δ_{ij} – символ Кронекера.

Первая строка в системе уравнений (1) представляет три уравнения движения, вторая – шесть реологических соотношений. Вектор искомых функций, состоящий из 9-ти компонент имеет вид:

$$\mathbf{u} = \{v_1, v_2, v_3, \sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{22}, \sigma_{23}, \sigma_{33}\}^T.$$

Тогда перечисленные модели твердого тела допускают запись системы уравнений (1) динамики деформируемого твердого тела в матричном виде [20]:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \sum_{j=1}^3 \mathbf{A}_j \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j},$$

где \mathbf{A}_j – матрицы размера 9×9 .

Для численного моделирования задач динамики деформируемого твердого тела широко применяется сеточно-характеристический метод [19]. Вначале применяется метод расщепления по пространственным координатам, в результате чего имеем три одномерных системы:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{A}_j \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j}, \quad j = 1, 2, 3. \quad (2)$$

Каждая из этих систем является гиперболической и обладает полным набором собственных векторов с действительными собственными значениями, поэтому каждую из систем можно переписать в виде:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \Omega_j^{-1} \Lambda_j \Omega_j \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j},$$

где матрица Ω_j – матрица составленная из собственных векторов, Λ_j – диагональная матрица, элементами которой являются собственные значения. Для всех координат матрица Λ имеет вид:

$$\Lambda = \text{diag}\{c_p, -c_p, c_s, -c_s, c_s, -c_s, 0, 0, 0\},$$

где $c_p = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ – продольная скорость звука в среде, $c_s = \sqrt{\mu/\rho}$ – поперечная скорость звука.

После замены переменных $\nu = \Omega \mathbf{u}$ каждая из систем (2) распадается на девять независимых скалярных уравнений переноса (индекс j далее опускается, где это возможно):

$$\frac{\partial \nu}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial \nu}{\partial x} = 0.$$

Одномерные уравнения переноса решаются с помощью метода характеристик, либо обычными конечно-разностными схемами.

После того, как все компоненты ν перенесены, восстанавливается само решение:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \Omega^{-1} \nu^{n+1}.$$

В данной работе использовались сеточно-характеристические монотонные разностные схемы, принцип построения которых описан в [19]. В программе реализованы схемы от второго до четвертого порядка точности, большинство расчетов проводилось используя схему 4-го порядка точности. Приведем ее для численного решения одномерного линейного уравнения переноса $u_t + au_x = 0$, $a > 0$, $\sigma = a\tau/h$, τ – шаг по времени, h – шаг по координате:

$$\begin{aligned} u_m^{n+1} &= u_m^n - \sigma(\Delta_1 - \sigma(\Delta_2 - \sigma(\Delta_3 - \sigma\Delta_4))), \\ \Delta_1 &= \frac{1}{24}(-2u_{m+2}^n + 16u_{m+1}^n - 16u_{m-1}^n + 2u_{m-2}^n), \\ \Delta_2 &= \frac{1}{24}(-u_{m+2}^n + 16u_{m+1}^n - 30u_m^n + 16u_{m-1}^n - u_{m-2}^n), \\ \Delta_3 &= \frac{1}{24}(2u_{m+2}^n - 4u_{m+1}^n + 4u_m^n - 2u_{m-2}^n), \\ \Delta_4 &= \frac{1}{24}(u_{m+2}^n - 4u_{m+1}^n + 6u_m^n - 4u_{m-1}^n + u_{m-2}^n). \end{aligned}$$

Кроме того, используется сеточно-характеристический критерий монотонности [19], опирающийся на характеристическое свойство точного решения.

2.2. Программная реализация

За основу для реализации алгоритма на графических ускорителях была взята оптимизированная для выполнения на центральном процессоре версия данной программы. Оптимизациям была подвергнута наиболее затратная в вычислительном плане часть алгоритма. Рассмотрим особенности реализации на примере двухмерной версии программы. Используется расщепление по пространственным координатам, для пересчета всей сетки требовалось два шага: по оси X и по оси Y. При этом было вычислено количество арифметических операций с плавающей точкой, требуемое для пересчета одного узла сетки за два шага – 190 Флопс. Таким образом, зная количество узлов сетки, количество шагов по времени, можно было определить теоретически потребляемое алгоритмом количество ГФлопс. Далее, зная количество потоковых

процессоров в графическом ускорителе, их тактовую частоту и число FMA (fused multiply-add) устройств в одном процессоре, была вычислена пиковая производительность для каждого GPU. Реальные тесты алгоритма на графических устройствах показали меньшие значения производительности. Процент от пиковой производительности алгоритмов измерялся как соотношение между этими двумя значениями – теоретически требуемым количеством Флопс для пересчета сетки и реально потребленным количеством Флопс.

В первоначальном варианте, алгоритм был перенесен на выполнение на графических ускорителях с использованием технологии CUDA. Последовательный алгоритм для центральных процессоров был подвигнут ряду доработок для лучшей работы на графических устройствах. Данные в сетке можно хранить двумя способами: в виде массива структур и в виде структуры массивов. Под структурой в данном случае подразумевается вектор \mathbf{u} , состоящий из 5 компонент (в двухмерной случае). В версии программы для CPU значения хранились в виде массива структур, то есть данные определенного узла лежат в памяти последовательно. В версии для графических устройств была применена структура хранения в виде структуры массивов. После этого обращения к глобальной памяти стали последовательными (coalesced), что привело к повышению производительности.

При работе на графических картах важно подобрать размеры блоков так, чтобы устройством было постоянно загружено, то есть, чтобы не было частично не занятых потоковых процессоров. Также важно было выбрать размеры блоков кратные размерам warp'ов, так как внутри warp'a осуществляется последовательный доступ к памяти. Другая причина – потоки одного warp'a способны выполнять код одновременно над разными участками памяти, если нет ветвлений. Размеры блоков таким образом, чтобы удовлетворить указанным выше требованиям и минимизировать количество узлов, для которых требуются обмены памятью между блоками. В шаге по X для пересчета каждого узла расчетной сетки требуются значения в двух смежных узлах по оси X, а в шаге по оси Y – требуется два смежных узла по оси Y. Поэтому следовало подобрать размеры блоков так, чтобы количество узлов, для которых требуются значения в смежных блоках, было можно меньшим. Это необходимо было сделать, так как для узлов смежных блоков требуется выделение дополнительной памяти в области общей памяти блока.

Данный алгоритм затем был перенесен на технологию OpenCL.

2.3. Тестирование

Рассматривалась двумерная тестовая задача с количеством узлов 4096×4096 . Осуществлялось 6500 шагов по времени. В каждом узле сетки хранилось по 5 переменных с плавающей точкой. Все вычисления производились как с одинарной (SP), так и с двойной (DP)

Таблица 1

Характеристики тестируемых графических карт

Графическое устройство	Потоковые процессоры	Тактовая частота, МГц	ГФлопс (SP)	SP:DP	ГФлопс (DP)
GeForce GTX 780	2304	863	3977	24	166
GeForce GTX 780 Ti	2880	876	5046	24	210
GeForce GTX 980	2048	1126	4612	32	144
Tesla M2070	448	1150	1030	2	515
Tesla K40m	2880	745	4291	3	1430
Tesla K80	2496	562	2806	1.5	1870
Radeon HD 7950	1792	800	2867	4	717
Radeon R9 290	2560	947	4849	8	606

точностью. Размер сетки в памяти – 320 Мбайт для вычислений с одинарной точностью и 640 Мбайт для вычислений с двойной точностью. Если количество потоковых процессоров (ядер CUDA) – C , частота – F , то количество GFLOPS для одинарной точности – $2CF$, где 2 стоит по причине того, что за такт может выполняться 2 операции FMA(fused multiply-add). Для различных архитектур процессоров известно сколько в них содержится блоков(unit'ов) одинарной точности и двойной точности. В столбце SP:DP – их отношение. Из этого можно вычислить количество GFLOPS для двойной точности.

На рисунках 1 и 2 приведены графики ускорения работы программы по сравнению с однопоточной версией программы для CPU для одинарной и двойной точности соответственно.

2.4. Пример работы программы

Тестовая модель изображена на рис. 3. Размеры области даны в километрах. На нижней и боковых границах устанавливалось неотражающее граничное условие, на верхней – свободная граница. В качестве

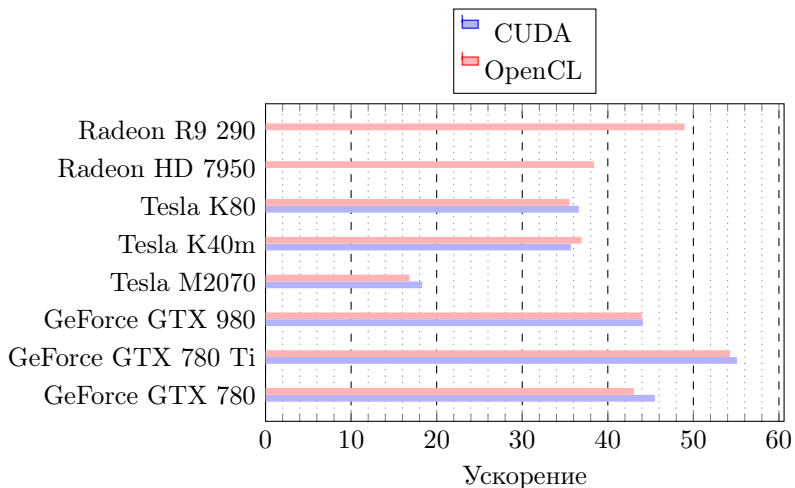


Рис. 1. Ускорение на GPU по сравнению с одним ядром CPU, одинарная точность

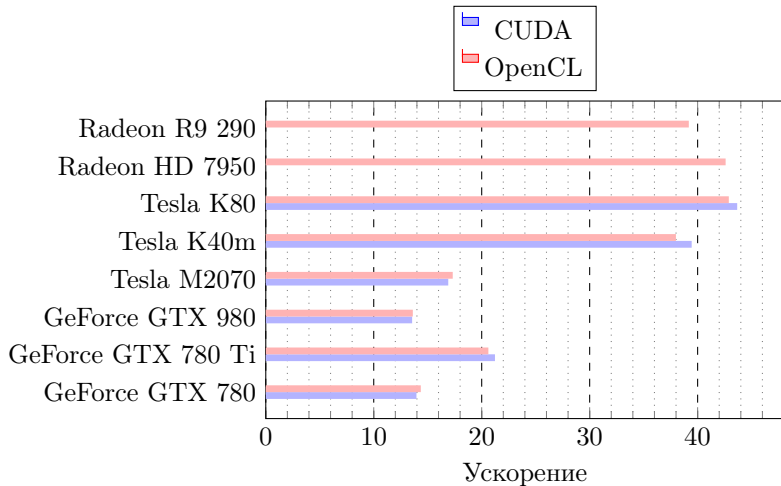


Рис. 2. Ускорение на GPU по сравнению с одним ядром CPU, двойная точность

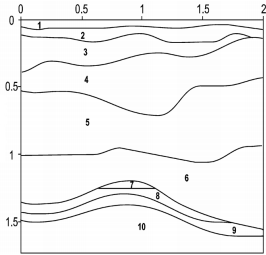


Рис. 3. Геологическая модель антиклинальной ловушки [7]

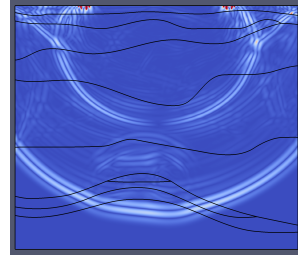


Рис. 4. Результат расчета – волновая картина в момент времени $t = 0.38$ с

источника возмущения использовалась вертикальная сила, приложенная к площадке с 925.7 м по 974.1 м на дневной поверхности, амплитуда которой описывалась импульсом Рикера частоты 40 Гц. Результаты расчета представлены на рис. 4.

3. Заключение

В работе было показано, как были задействованы возможности графических устройств, для решения задач сеймики сеточно-характеристическим методом. Были описаны методы, которые позволили достигнуть наибольшей производительности указанного алгоритма при вычислениях на GPU. Рассмотрен вопрос эффективного задействования памяти графического ускорителя как в случае использования одного GPU, так и в случае использования нескольких графических устройств. Максимальное полученное ускорение по сравнению с CPU на одном графическом устройстве – в 55 раз на GeForce GTX 780 Ti в вычислениях с одинарной точностью и в 44 раза на Tesla K80 в вычислениях с двойной точностью.

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-37-20673.

Литература

1. Castro C.E., Behrens J., Pelties C. CUDA-C implementation of the ADER-DG method for linear hyperbolic PDEs // Geoscientific Model Development Discussions. 2013. Vol. 80, No. 3. P. 3743–3786

2. Esfahanian V., Darian H.M., Gohari S.I. Assessment of WENO schemes for numerical simulation of some hyperbolic equations using GPU // *Computers & Fluids*. 2013. Vol. 6. P. 260–268
3. Rostrup S., De Sterck H. Parallel hyperbolic PDE simulation on clusters: Cell versus GPU // *Computer Physics Communications*. 2010. Vol. 181, No. 12. P. 2164–179
4. Khanna G. High-Precision Numerical Simulations on a CUDA GPU: Kerr Black Hole Tails // *Journal of Scientific Computing*. 2013. Vol. 56, No. 2. P. 366–380
5. Wong H.C., Wong U.H., Feng X., Tang Z. Efficient magnetohydrodynamic simulations on graphics processing units with CUDA // *Computer Physics Communications*. 2011. Vol. 182, No. 10. P. 2132–2160
6. LeVeque R. J. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge university press, 2002. 588 p.
7. Jose M. Review Article: Seismic modeling // *Geophysics*. 2002. Vol. 67, No. 4. P. 1304–1325.
8. Gallardo J.M., Ortega S., de la Asuncion M., Mantas J.M. Two-dimensional compact third-order polynomial reconstructions. solving nonconservative hyperbolic systems using gpus // *Journal of Scientific Computing*. 2011. Vol. 48, No. 1–3. P. 141–163.
9. Castro M. J., Ortega S., de la Asuncion M., Mantas J. M., Gallardo J. M. GPU computing for shallow water flow simulation based on finite volume schemes // *Comptes Rendus Mecanique*. 2011. Vol. 339, No. 2–3. P. 165–184.
10. Fuhry M., Giuliani A., Krivodonova L. Discontinuous galerkin methods on graphics processing units for nonlinear hyperbolic conservation laws // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2014. Vol. 76, No. 12. P. 982–1003.
11. Mu D., Chen P., Wang L. Accelerating the discontinuous galerkin method for seismic wave propagation simulations using multiple gpus with cuda and mpi // *Earthquake Science*. 2013. Vol. 26, No. 6. P. 377–393.
12. Komatitsch D. Fluid-solid coupling on a cluster of GPU graphics cards for seismic wave propagation // *Comptes Rendus Mecanique*. 2011. vol. 339, No. 2–3. P. 125–135.
13. Mielikainen J., Huang B., Huang H., Goldberg M. Improved gpu/cuda based parallel weather and research forecast (wrf) single moment 5-class (wsm5) cloud microphysics // *Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*. 2012. Vol. 5. P. 1256–1265.
14. Nickolls J., Buck I., Garland M., Skadron K. Scalable parallel programming with cuda // *Queue*. 2008. Vol. 6. P. 40–53.
15. Priimak D. Finite difference numerical method for the superlattice boltzmann transport equation and case comparison of cpu(c) and gpu(cuda) implementations // *Journal of Computational Physics*. 2014. Vol. 278. P. 182–192.

16. Tuttafesta M., Dangola A., Laricchiuta A., Minelli P., Capitelli M., Colonna G. GPU and multi-core based reaction ensemble monte carlo method for non- ideal thermodynamic systems // Computer Physics Communications. 2014. Vol. 185, No. 2. P. 540–549.
17. Ferroni F., Tarleton E., Fitzgerald S. GPU accelerated dislocation dynamics // Journal of Computational Physics. 2014. Vol. 272. P. 619–628.
18. Tamascelli D., Dambrosio F. S., Conte R., Ceotto M. GPU Accelerated Semiclassical Initial Value Representation Molecular Dynamics // ArXiv e-prints. 2013.
19. Холодов, А.С., Холодов, Я.А. О критериях монотонности разностных схем для уравнений гиперболического типа. // Журнал выч. математики и мат. физики. 2006. Т. 46, № 9, С. 1560–1588.
20. Петров, И.Б., Холодов, А. С. Численное исследование некоторых динамических задач механики деформируемого твердого тела сеточно-характеристическим методом. // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1984. Т. 5, № 24, С. 722–739.

UDC 519.63

Applying OpenCL technology for modelling seismic processes using grid-characteristic methods

N. I. Khokhlov*, A. M. Ivanov*, M. S. Zhdanov*[†],
I. B. Petrov*, E. A. Ryabinkin*

* *Moscow Institute of Physics and Technology (State University)
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow Region, 141700, Russian Federation*

[†] *The University of Utah
201 Presidents Circle Room 201 SLC, UT 84112, USA*

The paper deals with the use of OpenCL technology to solve seismic problems on the GPU. We solve the problem of two-dimensional linear elasticity with grid-characteristic method. Software implementation was originally optimized to run on the CPU. After that it was re-written to run on graphics devices using OpenCL technology. The solution of this problem has been tested for the range of NVIDIA and AMD devices. Tests were performed for both single-precision and double-precision calculations. We used devices of series: NVIDIA GeForce, NVIDIA Tesla, and AMD Radeon. The study showed that the implementation of the algorithm using OpenCL slightly inferior CUDA implementation on the NVIDIA devices. For single-precision calculations we got speedup compared with single CPU core up to 54 times on the GeForce GTX 780 Ti, it was consumed 450 GFlops to solve the problem. Double-precision calculations speedup reached up to 43 times on the device Tesla K80, it was consumed 135 GFlops. The maximum percentage of peak performance, which was reached on the device, is 14

Keywords: OpenCL, CUDA, GPU, grid-characteristic method, seismic, conference proceedings.

UDC 519.652

The metric analysis for interpolation of the function of many variables in the conditions of an information lack

A. V. Kryanev*, G. V. Lukin*, D. K. Udumyan*^{†‡}

* *National Research Nuclear University "MEPhI",
Kashirskoe shosse 31, Moscow, Russia, 115409*

[†] *Department of Applied Probability and Informatics,
RUDN University (Peoples' Friendship University of Russia),
6 Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russia*

[‡] *Department of Mathematics,
The College of Arts & Sciences at the University of Miami,
1320 South Dixie Highway 1320, Coral Gables, FL 33146*

Abstract. In report the ill-posed problems in view arising at the solution of applied problems by means of the metric analysis are considered. Examples of such problems are problems of interpolation, filtration and forecasting of values of functions of one and many variables claimed at the solution of applied problems physicists, technicians, economy and other areas of researches.

Keywords: interpolation, ill-posed problems, metric analysis.

1. Introduction

The problem of interpolation is one of primary objectives in mathematics, not to mention its broad-ranging applications in practical problem solving. Approaches to solving interpolation problems of one-variable functions have been proposed since the times of Lagrange and Newton. To date, sufficiently complete results are obtained for different interpolation methods, including an analysis of interpolation errors and the convergence of interpolation values to the exact values [1,2]. The classical scheme involves representing the interpolated function in a form of an expansion to basis functions. Thus, in Lagrange's scheme the basic functions are monomials. However, the Lagrange interpolation provides the uniform convergence of interpolation polynomials to the function only for a certain class of smooth functions, for example, for the class of entire functions. The reason for this divergence is the discontinuity of derivatives. As an alternative to Lagrange's scheme, the scheme of spline-interpolation has been developed. Spline-interpolation allows to localize the contagion of angular points and provides the uniform convergence for any continuous function [2]. The scheme of representation of functions in the form of linear combinations of basic functions, including polynomials and spline-approximations, simply, can be generalized on multivariate functions, but such schemes are efficient only for functions of two, at maximum three variables. For functions of a variables more than three there are no effective general schemes of interpolation. Only crude approximation schemes of local linear interpolation

are in use. These schemes require a large number of data, and even in a presence of a large quantity of data often do not provide the necessary accuracy. An example of such schemes is the neural networks, which allow to interpolate functions of one or many variables [3]. In this report a universal approach for solving problems of multidimensional interpolation without holding fixed the species of functional connection of the function to its arguments is presented. This approach takes into account only the information on the mutual arrangement of the point at which we retrieve the value of function and the interpolation nodes $\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_n$ as well as the values of function $Y_i, i = 1, \dots, n$ at interpolation nodes and can be put to use even in the case of an insufficiency of initial information.

2. Interpolation scheme of the metric analysis

We consider the problems associated with functionality:

$$Y = F(\vec{X}),$$

where the function $F(\vec{X})$ is unknown, and we aim to retrieve its value at point \vec{X}^* using the function values $Y_i, i = 1, \dots, n$ at interpolation nodes $\vec{X}_i = (X_{i1}, \dots, X_{im})^T, i = 1, \dots, n$.

In accordance with the scheme of the metrical analysis we form a matrix W of metric uncertainty for the point \vec{X}^* on a set of points $X \vec{X}_i = (X_{i1}, \dots, X_{im})^T, i = 1, \dots, n$. [4]

$$W = \begin{pmatrix} \rho^2(\vec{X}_1, \vec{X}^*) & (\vec{X}_1, \vec{X}_2) & \dots & (\vec{X}_1, \vec{X}_n) \\ (\vec{X}_2, \vec{X}_1) & \rho^2(\vec{X}_2, \vec{X}^*) & & (\vec{X}_2, \vec{X}_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (\vec{X}_n, \vec{X}_1) & (\vec{X}_n, \vec{X}_2) & \dots & \rho^2(\vec{X}_n, \vec{X}^*) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

where $\rho^2(\vec{X}_i, \vec{X}^*) = \sum_{k=1}^m \nu_k \cdot (X_{ik} - X_k^*)^2$, $(\vec{X}_i, \vec{X}_j) = \sum_{k=1}^m \nu_k \cdot (X_{ik} - X_k^*) \cdot (X_{jk} - X_k^*)$, ν_k determine the function's degree of tolerance with respect to its arguments. Remark. When solving applied problems it is necessary to normalize all argument values \vec{X} to an identical interval before generating a matrix of metric uncertainty. This can be achieved, for instance, by means of linear replacement of each variable $X_i, i = 1, \dots, n$ by its increment in an interval $[0, 1]$. According to (1) W is a symmetric non-negative matrix. It is further assumed that the matrix is positive definite. The interpolation formula for the retrieved value Y^* at the point \vec{X}^* has the form:

$$Y^* = \sum_{i=1}^n z_i \cdot Y_i,$$

where the interpolation weights $z_i, i = 1, \dots, n$ as expected for the interpolated formulas satisfy to normalization condition $\sum_{i=1}^n z_i = 1$ We define the numerical characteristic $\sigma_{mu}^2(Y^*)$ of metrical uncertainty of the retrieved value Y^* at the point \vec{X}^* by the equality:

$$\sigma_{mu}^2(Y^*) = (W\vec{z}, \vec{z}),$$

where $\vec{z} = (z_1, \dots, z_n)^T$. We pose the problem of selecting interpolation weight values $z_i, i = 1, \dots, n$, that satisfy the normalization condition $\sum_{i=1}^n z_i = 1$, for which the numerical value of the uncertainty is minimal:

$$\begin{cases} (W\vec{z}, \vec{z}) - \min \vec{z} \\ (\vec{z}, \vec{1}) = 1, \vec{1} = (1, \dots, 1)^T. \end{cases} \quad (2)$$

The problem (2) is solved by Lagrange method. The required vector \vec{z}^* and interpolated value Y^* are given by equalities:

$$\vec{z}^* = \frac{W^{-1}\vec{1}}{(W^{-1}\vec{1}, \vec{1})}, Y^* = \frac{(W^{-1}\vec{1}, \vec{Y})}{(W^{-1}\vec{1}, \vec{1})}, \vec{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T,$$

where W^{-1} is the inverse matrix. The approach to interpolating multivariate functions named metric analysis allows to consider various levels of tolerance of function with respect to changes of its arguments' values by means of the coefficients $\nu_j, j = 1, \dots, m$. To find the coefficients ν_j we consecutively exclude function arguments and trace the values of changes of function at exclusions, as have been proposed earlier [4]. In the present work two new approaches to calculating the coefficients $\nu_j, j = 1, \dots, m$, based on comparing the values of "correlation rates" to the rates of function variance with regard to its arguments are presented. The first scheme of definition of metric scales $\nu_j, j = 1, \dots, m$ is based on calculating the "correlation rates" from the realized values of required function and then normalizing according to formulas

$$\nu_j = \frac{|r_j|}{\sum_{j=1}^m |r_j|}, j = 1, \dots, m,$$

where

$$r_j = \frac{\text{cov}(Y, X_j)}{\sigma(Y) \cdot \sigma(X_j)}, j = 1, \dots, m,$$

$$\text{cov}(Y, X_j) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (Y_k - \bar{Y})(X_{kj} - \bar{X}_j), j = 1, \dots, m,$$

$$\sigma^2(Y) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (Y_k - \bar{Y})^2,$$

$$\sigma^2(X_j) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (X_{kj} - \bar{X}_j)^2, j = 1, \dots, m,$$

$$\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Y_k, \bar{X}_j = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_{kj}, j = 1, \dots, m.$$

The second scheme of defining the metric coefficients $\nu_j, j = 1, \dots, m$ is based on calculating weight multipliers $\nu_j, j = 1, \dots, m$ of the linear regression model based on the realized values of the relevant function:

$$Y = u_0 + \sum_{j=1}^m u_j \cdot X_j + \epsilon.$$

According to the method of the least squares (MLS), estimations of parameters $\vec{u} = (u_1, \dots, u_m)^T$ of model are given by equality:

$$\vec{u} = K_{\vec{X}}^{-1} \text{cov}(Y, \vec{X}),$$

where the elements of covariance matrix $K_{\vec{X}}$ are defined by equalities:

$$\text{cov}(X_i, X_j) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (X_{ki} - \bar{X}_i) \cdot (X_{kj} - \bar{X}_j),$$

and the vector components $\text{cov}(Y, \vec{X}) = (\text{cov}(Y, X_1), \dots, \text{cov}(Y, X_m))^T$ are calculated from equalities:

$$\text{cov}(Y, X_j) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (Y_k - \bar{Y}) \cdot (X_{kj} - \bar{X}_j),$$

Then values of metric coefficients on the realized values of required function are calculated under formulas:

$$w_j = \frac{|u_j|}{\sum_{j=1}^m |u_j|} \cdot m, j = 1, \dots, m.$$

In the case of strong correlation within a share of arguments $\vec{X}_i = (X_{i1}, \dots, X_{im})^T, i = 1, \dots, n$ and, thereby, a case of matrix singularity or ill-conditioning of matrix $K_{\vec{X}}$ it is necessary to conduct a regularization, replacing matrix $K_{\vec{X}}$ by a regularized matrix, for example, by matrix $K_{\vec{X}, \alpha} = K_{\vec{X}} + \alpha \cdot \text{diag}(K_{11}, \dots, K_{mm}), \alpha \geq 0$, where $K_{ij}, i, j = 1, \dots, m$ are the elements of matrix $K_{\vec{X}}$. Let's consider the problem of smoothing and restoration of functional dependence $Y = F(X_1, \dots, X_n) = F(\vec{X})$ in the presence of chaotic deviations from exact values. The values of function $Y_i = F(\vec{X}_i), i = 1, \dots, n$ are given with errors at the nodes $\vec{X}_i = (X_{i1}, \dots, X_{im})^T, i = 1, \dots, n$. We assume that the matrix of metric uncertainty W is singular. For every node \vec{X}^* we aim to find the smoothing value Y^* in the form of

$$Y^* = \sum_{i=1}^n z_i \cdot Y_i = (\vec{z}, \vec{Y}),$$

where the vector of weights \vec{z} is the solution of the following problem of minimization of the total uncertainty:

$$(W\vec{z}, \vec{z}) + \alpha \cdot (K_{\vec{Y}}\vec{z}, \vec{z}) - \min \vec{z}, \quad (\vec{z}, \vec{1}) = 1, \quad (3)$$

where α is the smoothing parameter.

While the expression $(W\vec{z}, \vec{z})$ is responsible for metric uncertainty, the expression $(K_{\vec{Y}}\vec{z}, \vec{z})$ is responsible for stochastic uncertainty. The problem (3) can be solved using the Lagrange's function. The smoothed value at the point \vec{X}^* is given by the equality:

$$Y_{sm}^* = \frac{((W + \alpha \cdot K_{\vec{Y}})^{-1}\vec{1}, \vec{Y})}{((W + \alpha \cdot K_{\vec{Y}})^{-1}\vec{1}, \vec{1})}.$$

when $\alpha \rightarrow +\infty$, the smoothed value Y_{sm}^* at any node \vec{X}^* is

$$Y^* = \sum_{i=1}^n z_i \cdot Y_i = (\vec{z}, \vec{Y}),$$

Numerical results of interpolation of functions of many variables by means of schemes of the metric analysis are presented on fig. 1, 2 and in table 1. In figures 1, 2 dark blue, green and red lines are schedules of initial function, noisy functions and retrieved by means of the metric analysis of functions accordingly. Function considered is

$$Y^* = \sum_{i=1}^n z_i \cdot Y_i = (\vec{z}, \vec{Y}),$$

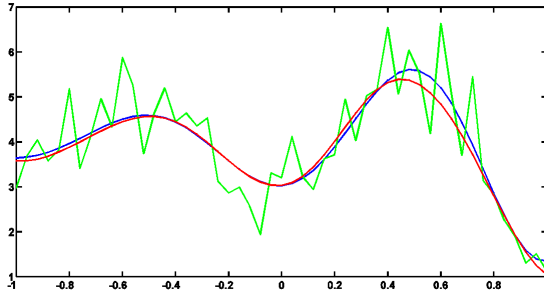


Figure 1. Interpolation results

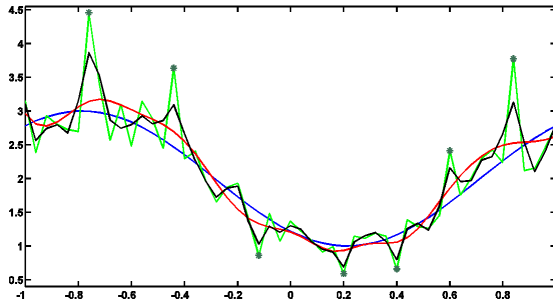


Figure 2. Smoothing results

where $\vec{x} = (x_1, \dots, x_5)^T$, $0 \leq x_i \leq 1$, $i = 1, \dots, 5$, V is a (5×5) symmetric matrix. The results of interpolating X_1, \dots, X_n while $n = 20$ are presented in table 1.

3. Conclusions

The numerical results of implementing the presented approaches to interpolation based on metric analysis have demonstrated that metric analysis is a tool for retrieving the values of multivariate functions even in the case of a little number of interpolation nodes (even when the number of interpolation nodes is less than the number of arguments). In the report new schemes and algorithms for smoothing and restoration of functional values based on the metric analysis were presented. These schemes and

Numerical results

Table 1

\vec{X}					Y	Result of interpolation
0.3210	0.6604	0.1332	0.2217	0.7252	20.99	20.67
0.5536	0.9723	0.8545	0.1759	0.5116	37.00	36.34
0.7910	0.9280	0.1469	0.1180	0.007696	11.48	13.00
0.8445	0.9716	0.1673	0.5628	0.9920	52.78	52.09
0.5111	0.1521	0.0883	0.8863	0.9684	33.33	35.65
0.5060	0.4818	0.7105	0.4053	0.8512	39.96	39.02
0.1462	0.4970	0.5390	0.8821	0.9541	43.71	43.74
0.2640	0.0875	0.6904	0.1256	0.6399	17.26	15.52
0.3095	0.1707	0.7593	0.9395	0.7266	39.98	40.53
0.7409	0.02982	0.4092	0.01672	0.8803	20.66	21.50
0.2377	0.8600	0.8781	0.2668	0.05134	19.52	19.30
0.7078	0.04781	0.6390	0.3765	0.7470	30.04	30.08
0.8857	0.7058	0.3656	0.1155	0.7787	33.72	34.14
0.5480	0.5923	0.5340	0.9722	0.2310	34.40	34.69
0.7977	0.2799	0.01847	0.9505	0.4345	27.43	28.66
0.8280	0.5974	0.9576	0.07910	0.4444	32.21	32.25
0.7173	0.6044	0.7468	0.7145	0.5428	46.57	44.86
0.5938	0.03581	0.1608	0.6756	0.5257	20.26	19.71
0.7413	0.6747	0.8660	0.03228	0.2544	23.74	24.03

algorithms have demonstrated a high accuracy of smoothing and retrieving the values of functions of one or many variables.

Acknowledgments

The reported study was funded within the Agreement No 02.a03.21.0008 dated 24.04.2016 between the Ministry of Education and Science of the Russian Federation and RUDN University.

References

1. *Watson G. A.* Approximation Theory and Numerical Methods. - John Wiley, 1980.
2. *de Boor C.* A Practical Guide to Splines (Revised Edition). - Springer, 2001.
3. *Haykin S.* Neural networks: A Comprehensive Foundation. - Prentice Hall, 1999.
4. *Kryanev A. V., Lukin G. V., Udumyan D. K.* Metric analysis and applications, Numerical Methods and Programming. Advanced Computing Scientific Journal, (2009), v. 10, - P. 408-414.
5. *Kryanev A. V., Lukin G. V.* Mathematical methods of the uncertain data processing // Ed. Science, Moscow, 2006 (in Russian).
6. *Kryanev A. V., Lukin G. V., Udumyan D. K.* Metric analysis and the uncertain data processing // Mathematical modelling, Vol. 8, 1996, no. 8, p. 97-103.
7. *Kryanev A. V., Udumyan D. K., Lukin G. V., Ivanov V. V.*, Metric analysis approach for interpolation and forecasting of time processes. Mathematical modelling, Vol. 8, 2014, no. 22, p. 1053-1060.
8. *Kryanev A. V., Udumyan D. K.* Metric analysis, properties and applications as a tool for interpolation // Int. Journal of Mathematical Analysis, Vol. 8, 2014, no. 45, P. 2221-2228.

UDC 519.864.3

Linear approach for mathematical modelling as a tool for efficient portfolio selection

A. V. Kryanev, A. E. Sinitsin, D. E. Sliva

*National Research Nuclear University "MEPhI",
Kashirskoe shosse 31, Moscow, Russia, 115409*

Abstract. This report introduces two approaches to the efficient portfolio selection problem, wherein the criteria and the constraints are linear with respect to control variables. The first approach consists of unconditioned optimization of the average expected efficiency value of a portfolio without imposing any additional constraints on the structure of selected portfolio. For this scheme the problem of effective portfolio formation is reduced to two linear programming problems, solving these for an efficient frontier may be effectively accomplished in closed form. The second scheme considers an additional set of group constraints, which can also be reduced to the problem of finding the Pareto fronts of two linear programming problems.

Keywords: efficient portfolio, linear formulation, Pareto frontier, linear programming problem.

1. Introduction

One of the primary goals of economical science is the distribution of resources under conditions when the future efficiency of use of resources after they have been allocated is uncertain. Currently there are a number of approaches to setting up and solving problems of effective portfolio selection. The most widely used are the setting up proposed by Markowitz and the problem statement implementing the "Value at Risk" technique. The present work also addresses the statement of effective portfolio selection problem that uses fuzzy numbers to determine the uncertainty in efficiency values.

2. Mathematical models of formation of effective portfolios

The main objective of portfolio optimization is to maximize the aggregated efficiency (return) of investing or allocating the available resources. However, under the conditions of uncertainty in true efficiency values, the portfolio optimization problem should take into account the risk of realization of unacceptably small values of efficiency. Currently the approach to statement and the solution of problems of formation of investment portfolios, proposed by Markowitz, in which the efficiency values are treated as random variables, and the variance values are considered to account for risk measures for both individual assets and a portfolio as a whole, is generally used. The other criterion characterizing the investment portfolio selected

via the Markowitz's scheme is the average expected value m_p (mathematical expectation) of return of portfolio R_p . Thus, the Markowitz's scheme belongs to a class of double criteria problems in which one of criteria (m_p) is aimed at maximizing the average expected value of efficiency of a portfolio, and the second (an efficiency variance σ_p^2) is aimed at minimizing. The mathematical model of the Markowitz's scheme without additional constraints can be defined as follows [1,2]:

$$\begin{aligned} \sigma_p^2 &= (W\vec{x}, \vec{x}) - \min \\ m_p &= (\vec{m}, \vec{x}) - \max \\ \sum_{i=1}^n x_i &= 1, x_i \geq 0, i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (1)$$

where \vec{x} is a vector of shares of an investment portfolio; W is the covariance matrix of efficiency values R_i ; $\vec{m} = (m_1, \dots, m_n)^T$ is a vector of average expected values of asset efficiency. Let's consider statement with both of Markowitz's criteria whilst short-selling or selling assets on credit is allowed. Mathematically the borrowed resources correspond to negative values of shares $x_i, i = 1, \dots, n$.

Hence, the mathematical model of effective portfolio selection problem with both Markowitz's criteria and without additional restrictions that includes short-selling opportunities becomes:

$$\begin{aligned} \sigma_p^2 &= (W\vec{x}, \vec{x}) - \min \\ m_p &= (\vec{m}, \vec{x}) - \max \\ \sum_{i=1}^n x_i &= 1. \end{aligned} \quad (2)$$

Unlike Markowitz's problem, the short-selling statement does not require conditions $x_i \geq 0, i = 1, \dots, n$ to be satisfied. To find the Pareto set of solutions to the double criterion problem (2) that corresponds to the set of effective portfolios in short-selling statement, as a preliminary we seek to solve the single criterion problem of minimizing σ_p^2 :

$$\begin{aligned} \sigma_p^2 &= (W\vec{x}, \vec{x}) - \min \\ \sum_{i=1}^n x_i &= 1. \end{aligned} \quad (3)$$

The solution of the problem (3) is given by the equality:

$$\vec{x}^* = \frac{W^{-1}\vec{1}}{(W^{-1}\vec{1}, \vec{1})}$$

where $\vec{1} = (1, \dots, 1)^T$.

The problem of finding all of Pareto's solutions of the problem (2) is further reduced to the parametric class of single criterion problems concerning parameter m_p :

$$\begin{aligned} \sigma_p^2 &= (W\vec{x}, \vec{x}) - \min \\ (\vec{m}, \vec{x}) &= m_p \geq m_p^*, \\ \sum_{i=1}^n x_i &= 1. \end{aligned} \tag{4}$$

where $m_p^* = (\vec{m}, \vec{x}^*)$. The entire set of Pareto's solutions of problem (2) as the solutions of a problem (4) is given by equality:

$$\vec{x} = W^{-1} \cdot A^T \cdot (A \cdot W^{-1} \cdot A^T)^{-1} \cdot \vec{f}, \tag{5}$$

where $A = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ m_1 & \dots & m_n \end{bmatrix}$ is a $(2 \times n)$ matrix, $\vec{f} = (1, m_p)^T$, $m_p \geq m_p^* = (\vec{m}, \vec{x}^*)$. Vector equality (5) with regard to the components of vector \vec{x} will become:

$$x_i = a_i + b_i \cdot m_p, i = 1, \dots, n, \tag{6}$$

where $\sum_{i=1}^n a_i = 1, \sum_{i=1}^n b_i = 0$.

Equalities (5) and (6) define the apparent functional dependence of the vector \vec{x} components with regard to parameter m_p and, thereby, allow to calculate the structure of the effective portfolio set for any values m_p using the formula (6) without solving anew problem (4). Fig. 1 illustrates an exemplificative result of numerical computation of the effective portfolios presented on a plane of the criteria m_p and σ_p .

In the statements of the effective portfolio selection under conditions of uncertainty problems presented above the values of return of developing the distributed resources were treated as random variables. Recently to characterise the uncertainty in random variables they have been treated as fuzzy numbers with invoking the fuzzy set framework [4].

In the present report proposes the mathematical model and the solution on its basis of problems of optimum distribution of resources, wherein the uncertainty in efficiency of resource development is characterised by fuzzy numbers rather than by random variables. One of the problem statements considered allows to reduce the effective portfolio selection problem

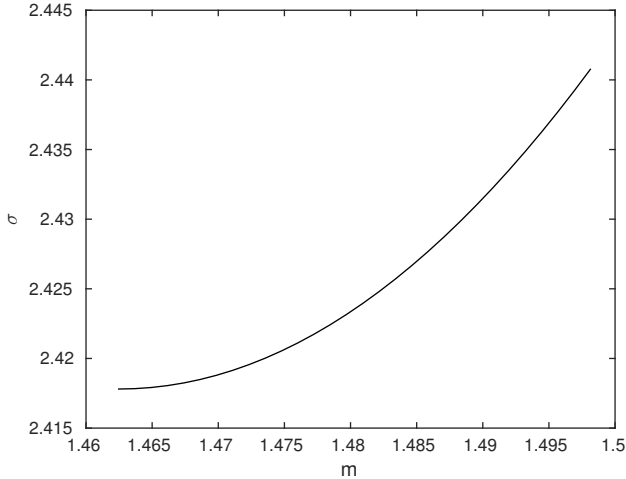


Figure 1. Efficient frontier

to a linear programming problem. This gives the opportunity to apply an effective algorithm of finding numerically the set of Pareto solutions corresponding to solutions of the optimum distribution of resources problems. Below one of the possible portfolio optimization problem statements that implements the fuzzy set framework is considered [5]. In this problem statement the mathematical model of formation of effective portfolios, which takes into account a set of constraints can be specified as follows:

$$\begin{aligned}
 R_p &= \sum_{i=1}^n x_i \cdot R_i - \max \\
 r_p &= \sum_{i=1}^n x_i \cdot r_i - \min \\
 \alpha_j &\leq x_{j_1} + \dots + x_{j_{n_j}} \leq \beta_j, j = 1, \dots, m, \\
 0 &\leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, n, \\
 \sum_{i=1}^n x_i \cdot V_i &= S,
 \end{aligned} \tag{7}$$

where R_p is the cumulative portfolio efficiency; $R_i, i = 1, \dots, n$ is the expected value of return for i -th asset; r_p is the risk value of the decrease in

actualized value of the cumulative portfolio; $r_i, i = 1, \dots, n$ is the risk value for the decrease in realized values of efficiency for i -th asset; $x_i, i = 1, \dots, n$ are the shares of resources invested in i -th asset included in portfolios under consideration; $V_i, i = 1, \dots, n$ is the maximal possible volume that can be invested in i -th object; S - total volume of resources of a portfolio ($0 < S < V = \sum_{i=1}^n V_i$); m - number of groups.

Problem (7), also as well as problems (10), (2) is a double criterion problem with regard to control variables $x_i, i = 1, \dots, n$ with two linear criteria R_p and r_p , aimed at maximization and minimization accordingly.

Values $R_i, i = 1, \dots, n$ of the expected values of return and $r_i, i = 1, \dots, n$ - risk measures of decrease in actualized values of return can be ascertained on the basis of expert estimations by means of fuzzy numbers.

To find the set of Pareto solutions it is necessary to find the solutions of two single criterion problems (8) and (9):

$$\begin{aligned} R_p &= \sum_{i=1}^n x_i \cdot R_i - \max \\ \alpha_j &\leq x_{j_1} + \dots + x_{j_{n_j}} \leq \beta_j, j = 1, \dots, m, \\ 0 &\leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, n, \\ &\sum_{i=1}^n x_i \cdot V_i = S, \end{aligned} \quad (8)$$

and

$$\begin{aligned} r_p &= \sum_{i=1}^n x_i \cdot r_i - \min \\ \alpha_j &\leq x_{j_1} + \dots + x_{j_{n_j}} \leq \beta_j, j = 1, \dots, m, \\ 0 &\leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, n, \\ &\sum_{i=1}^n x_i \cdot V_i = S, \end{aligned} \quad (9)$$

(8) and (9) are linear programming problems, both have the unique solutions \vec{x}_1^* and \vec{x}_2^* , accordingly ($x_1^* = (x_{11}^*, \dots, x_{1n}^*)^T$, $x_2^* = (x_{21}^*, \dots, x_{2n}^*)^T$). The entire set of Pareto solutions of problem (7) is defined by equality:

$$\vec{x}^*(\alpha) = \alpha \cdot \vec{x}_1^* + (1 - \alpha) \cdot \vec{x}_2^*, \quad (10)$$

where $\alpha \in [0, 1]$.

By varying the numerical values of the priority parameter α , the individual effective portfolio structures can be computed. In particular, at $\alpha = 1$ we attain the structure of the effective portfolio of a company that corresponds to the maximum expected value of efficiency, and at $\alpha = 0$ we attain the structure of the effective portfolio of the company that corresponds to the minimum value of risk. The numerical solutions of the linear programming problems (8), (9) can be carried out by means of an effective method of solving the linear programming problems of the considered class [6]. In the report numerical results of effective portfolio formation under the problem statement (7) are adduced.

3. Conclusions

In the report statements and solutions of effective portfolio problems are presented. For statements that allow short-selling the solutions are attained in closed form in the analytical kind. This allows to calculate the structure of effective portfolios without solving anew the parent criterion problem. Statement with double linear criteria, wherein the criteria can be defined by means of fuzzy numbers, is presented. The proposed problem statement allows to account for the relation between the possible uncertain future efficiency values of resource development in the case of absence of preliminary statistics on return actualization, based entirely on the use of expert estimations.

References

1. *Markowitz H. M.* Mean Variance Analysis in Portfolio Choice and Capital Markets. - Basil Blackwell, 1990.
2. *Sharpe W. F., Alexander G. J., Bailey J. W.* Investments. - Infra-M, 2001.
3. *Kryanev A. V., Lukin G. V.* On formulation and solutions of investment portfolio optimization problems. - MEPhI, Preprint MEPhI 006-2001, 2001.
4. *Orlov A. I.* Non-numeric statistics. - MZ-Press, 2004.
5. *Klimanov S. G., Rostovsky N. S., Sliva D. E., Smirnov D. S., Udumyan D. K., Balashov R. B.* Statement and Solution of the Problems of Effective Investment Portfolios Formation for the Companies in SWU Markets // Applied Mathematical Sciences. - Vol. 8, 2014, no. 107. - P. 5329–5335.
6. *Kryanev A. V., Cherny A. I.* Numerical solution of the optimizing problems for mathematical models of the theory of investments. Mathematical modelling, Vol. 8, 1996, no. 8, pp. 97-103.

UDC 519.614;517.584

Stable Algorithm of Integrating Rapidly Oscillating Functions

D. S. Kulyabov*, K. P. Lovetskiy*,
N. E. Nikolaev†, L. A. Sevastianov*

* *Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia
6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, Russia, 117198*

† *Department of Applied Physics
Peoples' Friendship University of Russia
6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, Russia, 117198*

Abstract. The work describes the new regularized algorithm for computing integrals of rapidly oscillating functions allowing effectively and accurately determine the required value in the presence of stationary points. In the case where the phase function has stationary points (its derivative vanishes on the interval of integration), the calculation of the corresponding integral is still a sufficiently difficult task even for the Levin method due to the degeneracy of the resulting system of linear equations. The basic idea of regularization, described in the article, is the simultaneous modification of the amplitude and phase functions, which does not change the integrand, but eliminates the degeneracy of the phase function on the interval of integration. The regularized algorithm presented in the work is based on the Levin collocation method and describes the stable method of integration of rapidly oscillating functions at the presence of stationary points. Performance and high accuracy of the algorithms are illustrated by various examples.

Keywords: regularization, integration of rapidly oscillating functions, Levin collocation method, Chebyshev differentiation matrix, stable methods for solving systems of linear algebraic equations.

1. Introduction

Let us consider the method for the evaluation of the oscillatory integral

$$I = \int_a^b f(x)e^{i\omega g(x)} dx \equiv \int_a^b F(x)dx, \quad (1)$$

assuming that the constant of oscillations $\omega \gg 1$ is a “large” value; and in the domain of integration the amplitude $f(x)$ and phase $g(x)$ are sufficiently smooth functions.

The integrals of this type can be effectively calculated using the following methods: the method of steepest descent [1]; for integrands with linear phase Filon method [2] and in general case the Levin method [3–5] are often used.

The Levin method of collocations [5] is suitable for finding the oscillatory integrals with more complex amplitude and phase functions. It

consists in moving on to finding the antiderivative $p(x)$ of the integrand satisfying the condition

$$\frac{d}{dx} \left[p(x)e^{i\omega g(x)} \right] = f(x)e^{i\omega g(x)}. \quad (2)$$

Knowing the function $p(x)$ on the interval of integration (or more precisely, at the end points of this interval), one can calculate the value of the integral of the oscillating function by the formula

$$I[f] = \int_a^b f e^{i\omega g} dx = \int_a^b \frac{d}{dx} [p e^{i\omega g}] dx = p(b)e^{i\omega g(b)} - p(a)e^{i\omega g(a)}. \quad (3)$$

In the collocation method the problem of calculating the integral is replaced by the “equivalent” problem of finding the values of the function antiderivative at two points at the ends of the integration interval $[a, b]$, allowing to calculate the value of the integral $I[f]$ by the formula (3). (Note that the method does not use the boundary conditions for the solution of the problem (2), because any particular solution allows to calculate the value of the definite integral.)

Thus, the problem of the approximate calculation of the integral (1) from rapidly oscillating function can be reduced to solving the equation (2) using the method of collocations after expanding $p(x)$ in terms of the Chebyshev polynomials. By an appropriate choice of the approximation points, i.e. their location within the range of integration and their number, it is possible to improve the accuracy of the solution.

2. Approximation of a (sought antiderivative) function by the Chebyshev polynomials. Differentiation matrix

Among many basis systems of polynomials used to approximate functions on finite intervals the Chebyshev polynomials of the first kind have proven well for practical calculations. We consider the Chebyshev polynomials of the first kind as basis functions and assume that the interval of integration is $[a, b] = [-1, 1]$. Suppose that we know the values of a polynomial of the n -th degree at $(n + 1)$ points x_0, \dots, x_n . Then these values define the polynomial uniquely and hence uniquely determine the values $p'(x) = dp(x)/dx$ of its derivatives at these points. Furthermore, the value of the derivative at every point can be represented as a linear combination of values of the polynomial at these points. This dependence can be written in matrix form as [6]:

$$\begin{pmatrix} p'(x_0) \\ \vdots \\ p'(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{0,0} & \cdots & d_{0,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n,0} & \cdots & d_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(x_0) \\ \vdots \\ p(x_n) \end{pmatrix}. \quad (4)$$

The matrix $D = \{d_{j,k}\}$ is called the differentiation matrix in the physical space.

If the basis functions are the Chebyshev polynomials of the first kind, and grid points are the Gauss-Lobatto nodes

$$x_j = \cos \frac{j\pi}{N}, \quad j = 0, \dots, N,$$

then matrix is called the *Chebyshev differentiation matrix* in physical space.

Improvement of the algorithm for computing the elements of differentiation matrix can be achieved through the use of its antisymmetry property:

$$D_{ij} = -D_{n-i, n-j}, \quad i = n/2 + 1, \dots, n.$$

Approximation of the function by the Chebyshev polynomials of the first kind is remarkable by the fact that it allows to easily calculate the coefficients of the function derivative in the expansion in terms of the same polynomials. Thus, if $p(x) = \sum_{k=0}^n a_k T_k(x)$, then the coefficients b_k , $k = 0, \dots, n$ of the derivative of the function $p(x)$

$$\frac{d}{dx} \left(\sum_{k=0}^n a_k T_k(x) \right) = \sum_{k=0}^n b_k T_k(x)$$

can be calculated using recurrent relations $T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x)$, $k = 2, 3, \dots$, together with the initial conditions $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$, as the solution of the system of linear algebraic equations [7]:

$$Aa = b. \tag{5}$$

3. Relation between the differentiation matrices in the frequency and physical spaces

Let us write down the expression for the derivative of a function, approximated by the Chebyshev polynomials in the physical space:

$$\begin{pmatrix} p'(x_0) \\ \vdots \\ p'(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{0,0} & \cdots & d_{0,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n,0} & \cdots & d_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(x_0) \\ \vdots \\ p(x_n) \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Taking into account that in the frequency space the vector $p(x)$ can be represented as

$$\begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \dots \\ p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{0,0} & T_{1,0} & T_{2,0} & \vdots & T_{n,0} \\ T_{0,1} & T_{1,1} & T_{2,1} & \vdots & T_{n,1} \\ T_{0,2} & T_{1,2} & T_{2,2} & \vdots & T_{n,2} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ T_{0,n} & T_{1,n} & T_{2,n} & \vdots & T_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix},$$

and the derivative in the frequency space is calculated in accordance with the expression

$$\begin{bmatrix} p'_0 \\ p'_1 \\ p'_2 \\ \dots \\ p'_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{0,0} & T_{1,0} & T_{2,0} & \vdots & T_{n,0} \\ T_{0,1} & T_{1,1} & T_{2,1} & \vdots & T_{n,1} \\ T_{0,2} & T_{1,2} & T_{2,2} & \vdots & T_{n,2} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ T_{0,n} & T_{1,n} & T_{2,n} & \vdots & T_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & \dots \\ & 0 & 4 & 0 & \dots \\ & & 0 & 6 & \dots \\ & & & \ddots & \dots \\ 0 & & & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix},$$

then from the equation (6) it follows

$$TA = DT,$$

where T is matrix with elements $T_{i,j} = T_i(x_j)$.

4. The method of quadratures

In the case where the integration is set on the interval $x \in [a, b]$, then the transition to a standard domain $[-1, 1]$ of the Chebyshev polynomials of the first kind can be carried out by the change of variables $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$, $t \in [-1, 1]$. The derivative of the required function is calculated by the formula

$$p'(x) = \frac{2}{b-a} p'(t). \tag{7}$$

According to the introduced linear transformation the Gauss-Lobatto nodes $t_j = \cos\left(\frac{j\pi}{n}\right)$ in the original coordinates have the form

$$x_j = \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{j\pi}{n}\right) + \frac{b+a}{2}, \quad j = 0, 1, \dots, n.$$

Vectors of the functions values and their derivatives at the Gauss-Lobatto nodes are calculated by the formulas

$$\begin{aligned} p &= [p(x_0), p(x_1), \dots, p(x_n)]^T, \\ p' &= [p'(x_0), p'(x_1), \dots, p'(x_n)]^T, \\ g' &= [g'(x_0), g'(x_1), \dots, g'(x_n)]^T, \\ f &= [f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)]^T. \end{aligned}$$

Obviously, in accordance with the definition of the Chebyshev differentiation matrix, we can write p' in vector-matrix form of (7) taking into account (4):

$$p' = \frac{2}{b-a} Dp$$

and the system of equations in the method of collocations can now be written as

$$\frac{2}{b-a} Dp + i \cdot \text{diag}(\omega g') p = f,$$

or

$$(D + i\Lambda) p = \lambda f, \quad (8)$$

where $\lambda = (b-a)/2$, $\Lambda = \text{diag}(\lambda \omega g'(x_0), \lambda \omega g'(x_1), \dots, \lambda \omega g'(x_n))$ is diagonal matrix. The solution of the system (8) contains $p(b)$ and $p(a)$, whereas the required integral is calculated using the formula (3).

Let us write down the equation (8) in the case of finding a solution in frequency space, taking into account that $D = TAT^{-1}$, and $p = Ta$:

$$\frac{2}{b-a} TAT^{-1}Ta + i \cdot \text{diag}(\omega g')Ta = f,$$

or

$$TAa + i \cdot \Lambda Ta = \lambda f, \quad (9)$$

Here, in order to reduce formulas the following designations are used: $T_{i,j} = T_i(x_j)$ and $\lambda_i = \lambda \omega g'(x_i)$. The solution to this system of linear algebraic equations for the expansion coefficients $a = (a_0, a_1, \dots, a_n)$ over the basis functions allows to determine the approximate value of the integral using the equation (3).

Equation (9) is still valid for an arbitrary set of different grid points. From this equation it follows that the matrix of the system becomes singular only when at least one of the values $g'(x_k) = 0$, $k = 0, \dots, n$ becomes zero.

The method of quadrature described above is well studied [1, 5, 7, 8] and works well in cases where the phase function has no stationary points. However, in the case where the phase function has stationary points (its derivative vanishes at the interval of integration), the system (9) can be

degenerate and calculating corresponding integral becomes ill-posed problem.

For solving this ill-posed problem, various methods are proposed [1, 5, 8–11], but their practical use is rather difficult.

5. Regularization of numerical integration method for rapidly oscillating functions

In order to avoid the singularity of the matrix $TA + i\lambda \cdot \text{diag}(\omega g')$ of the system (9), we modify the integrand, multiplying and dividing it by the same function $\exp(iCx)$, where C is a complex number. Then the integral (1) takes the form

$$\int_a^b f(x)e^{-iCx}e^{i(Cx+\omega g(x))}dx. \quad (10)$$

The exponential function $\exp(iCx)$ is continuous, therefore the value of the integral for such a replacement will not change.

Introducing the notations $\tilde{f}(x) = f(x)e^{-iCx}$ and $\tilde{g}(x) = Cx + \omega g(x)$, we get a new equation for the coefficients, similar to the equation (3):

$$[TA + i\tilde{g}T]a = \tilde{f}, \quad (11)$$

The required value of the integral (10) is then calculated by the formula

$$I[f] = \int_a^b \tilde{f}e^{i\tilde{g}}dx = \int_a^b \frac{d}{dx} [\tilde{p}e^{i\tilde{g}}] dx = \tilde{p}(b)e^{i\tilde{g}(b)} - \tilde{p}(a)e^{i\tilde{g}(a)},$$

where $\tilde{p}(x) = \sum_{k=0}^n \tilde{a}_k T_k(x)$.

The solution of the system (11) with respect to the coefficients of the solution expansion in terms of the Chebyshev polynomials makes it easy to calculate the values $\tilde{p}(a)$ and $\tilde{p}(b)$:

$$\begin{aligned} \tilde{p}(a) &= \sum_{j=0}^n a_j, \\ \tilde{p}(b) &= \sum_{j=0}^n (-1)^j a_j. \end{aligned}$$

Thus, the use of the regularization method¹ (the replacement of the integrand with the aim to solve the ill-posed problem) and the transition to the solution of the modified problem of integration allows to consistently calculate integrals of rapidly oscillating functions, including those with phase functions having stationary points.

¹Regularization in statistics, machine learning, theory of inverse problems is method of adding some further information to the statement of the problem with the aim to solve the ill-posed problem or prevent retraining.

Choosing the constant C in (11) in such a way that the inequality $Re(C) > -\omega |g'(x)|$, $x \in [a, b]$ is true, allows to ensure all diagonal elements of the matrix of the linear algebraic equations system (11) being nonzero, and guarantees the existence and uniqueness of the system solution.

Ensuring sustainability is much more difficult due to the structure of the system (11), in which the elements with maximum absolute values are concentrated in the far right column of the matrix — see formula (5).

However, using this regularization method allows to improve the properties of the system (taking into account the number of approximation points), and to increase (in absolute value) the diagonal elements by choosing constant C , thus ensuring the predominance of the leading elements on the diagonal.

Conclusion

The article describes the new regularized algorithm for computing integrals of rapidly oscillating functions allowing effectively and accurately determine the required value in the presence of stationary points. In the case where the phase function has stationary points (its derivative vanishes on the interval of integration) the calculation of the corresponding integral is still a sufficiently difficult task even for the Levin method due to the degeneracy of the resulting system of linear equations. The basic idea of regularization, described in the article, is the simultaneous modification of the amplitude and phase functions, which does not change the integrand, but eliminates the degeneracy of the phase function in the interval of integration. Practically, this means a transition from calculating $\int_a^b f(x)e^{i\omega g(x)}dx$ to the integration of the new integrand $\int_a^b f(x)e^{-iCx}e^{i(Cx+\omega g(x))}dx$, where the constant C is chosen from the condition $|C + \omega g'(x)| \neq 0$, $x \in [a, b]$.

The numerical examples in the article show significant increase in integration accuracy when using regularization even in the absence of the stationary points. Properties of linear algebraic system are improved with increasing (by selecting constant C) of the diagonal elements of the matrix, providing the predominance of the leading elements on the diagonal.

A similar approach can be extended to the integrals in infinite limits using other (non-Chebyshev functions of the first kind) basis functions.

Acknowledgments

The work was partially supported by RFBF grants No 14-01-00628, No 15-07-08795, No 16-07-00556.

References

1. S. Olver, D. Huybrechs, *Highly Oscillatory Problems: Computation, Theory and Applications*, chapter 2: Highly oscillatory quadrature, Cambridge Univ. Press, 2008.
2. L. N. G. Filon, On a quadrature formula for trigonometric integrals, *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, Vol. 49, p. 38–47, 1928.
3. D. Levin, Fast integration of rapidly oscillatory functions, *J. Comput. Appl. Maths.*, Vol. 67, p. 95–101, 1996. W475W9921
4. G. A. Evans, J. R. Webster, A comparison of some methods for the evaluation of highly oscillatory integrals, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 112, p. 55–69, 1999.
5. J. Li, X. Wang, T. Wang, S. Xiao, An improved Levin quadrature method for highly oscillatory integrals, *Appl. Numer. Math.*, no 60, p. 833–842., 2010.
6. J. C. Mason, D. C. Handscomb, *Chebyshev Polynomials*, Chapman and Hall/CRC, 2002-09-17, p. 360.
7. K. P. Lovetskiy, L. A. Sevastyanov, A. L. Sevastyanov, N. M. Mekeko, Integration of highly oscillatory functions, *Mathematical Modelling and Geometry*, Vol. 3, no 3, pp. 11-24, 2014.
8. S. Xiang, Efficient quadrature for highly oscillatory integrals involving critical points, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2006.
9. A. Iserles, S. P. Nørsett, Efficient quadrature of highly oscillatory integrals using derivatives, *Proc. Roy. Soc. A.*, Vol. 461, no 2057, p. 1383–1399, 2005.
10. A. Iserles, On the numerical quadrature of highly-oscillatory integrals I: Fourier transforms, *IMA J. Num. Anal.*, V. 24, pp. 1110-1123, 2004.
11. S. P. Nørsett, A. Iserles, Quadrature methods for multivariate highly oscillatory integrals using derivatives, *Math. Comp.*, no 75, p. 1233–1258, 2006.

UDC 519.234

On a Method of Two-Dimensional Smoothing

P. G. Lyubin, E. Yu. Schetinin

*Department of Applied Mathematics
Moscow State Technology University "STANKIN"
3a, Vadkovsky lane, Moscow, Russia, 119136*

Abstract. Regression analysis has the task of finding a functional relationship between the observed values the studied process. The raw data is the realization of a random variable, it is therefore considered dependent on the expectation. This problem can be solved by "smoothing" the raw data. Smoothing is the process of removing the noise and insignificant fragments while preserving the most important properties of the data structure. It is similar to finding the expectation of data. Data smoothing usually attained by parametric and nonparametric regression. The nonparametric regression requires a prior knowledge of the regression equation form. However, most of the investigated data can't be parameterized simply. From this point of view, nonparametric and semiparametric regression represent the best approach to smoothing data. The aim of the research is development and implementation of the fast smoothing algorithm of two-dimensional data. To achieve this aim, previous works in this area have been analyzed and own approach has been developed, improving the previous ones. As a result, this paper presents the algorithm that quickly and with minimal memory consumption cleanses the data from the "noise" and "insignificant" parts. To confirm "efficiency" of the algorithm were carried out comparisons with other generally accepted approaches on simulated and real data. The results of these comparisons are also shown in the paper.

Keywords: nonparametric regression, two-dimensional estimation, penalized splines, smoothing splines, cross-validation, discrete cosine transform.

1. Problem statement

Raw data of real processes are noisy and need "smoothing" before analyse. Smoothing is attempt to filter "noise" or "insignificant" fragments while preserving the most important properties of data structure. Consider the following model

$$y = \hat{y} + \varepsilon$$

where ε - Gaussian white noise. There are supposed that function \hat{y} should be smooth, i.e. has continuous derivatives up to some order. Data smoothing is usually carried out by a parametric or nonparametric regression. In the case of parametric regression, it requires some a priori knowledge of regression equation form, which must well described original process. However, most of the observed data is impossible to parameterize and function $f(x)$ can't be determined analytically. From this point of view, nonparametric and semiparametric regression is the best approach to solving the problem (1). One of the classical methods for smoothing data is

the use of various modifications least squares with penalty. It was first introduced in 1920 [1] and it has been extensively studied ever since 1990 [2]. This technique consists in minimize some functional that balances between “approximation” and “smoothness” of estimation and it has follow form

$$F(\hat{y}) = RSS + \lambda \cdot P(\hat{y}) = \|\hat{y} - y\|^2 + \lambda \cdot P(\hat{y}),$$

where $\|\cdot\|$ - Euclidean norm. The parameter λ is a real positive number controlling the smoothness of solutions: smoothness of \hat{y} growing when parameter increases. The regression is called smoothing spline [1, 3, 4], when the penalty function written like square integral of p -order derivatives of \hat{y} . Apart from this, simple and effective approach to solving problem (1) is squared form of penalty function [5]:

$$P(\hat{y}) = \|D\hat{y}\|^2$$

where D - tridiagonal matrix as

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

This paper is a continuation of the authors research reviewed in papers [6, 7]. Additionally, some main ideas gleaned from the articles [8, 9].

2. One-dimensional smoothing

Suppose $\{x_i\}_{1 \leq i \leq n}$ is equally spaced points and response function follows

$$y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$$

where $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$. Let \hat{y} is an estimate of $f(x_i)$. After minimization (1) we have

$$\hat{y} = H(\lambda) \cdot y,$$

where $H(\lambda) = (I + \lambda \cdot D^T D)^{-1}$ is a projection matrix and λ is smoothing parameter. Smoothing parameter selecting by minimization of following equation

$$GCV(\lambda) = \frac{RSS(\lambda)/n}{(1 - Tr(H(\lambda))/n)^2}.$$

This approach is called as method of cross-validation. Matrix D has some special properties if observations is equidistant. That's possible to simplify the calculation GCV , because matrix D can explain UTU^T , where matrix U is unitary and it is a discrete cosine transformation [9]. Then RSS can be rewritten as follows:

$$\begin{aligned} RSS &= \|\hat{y} - y\|^2 = \|H(\lambda) \cdot y - y\|^2 \\ &= \|((I + \lambda \cdot D^T D)^{-1} - I) \cdot y\|^2 \\ &= \|(U \cdot (I + \lambda \cdot \Gamma^2)^{-1} - I) \cdot U^T \cdot y\|^2 \\ &= \sum_i \left(\frac{1}{1 + \lambda \gamma_i^2} - 1 \right)^2 \cdot DCT_i^2(y). \end{aligned}$$

In this case, (2) can be rewritten in more convenient for computing form

$$GCV(\lambda) = \frac{n \cdot \sum_i \left(\frac{1}{1 + \lambda \gamma_i^2} - 1 \right)^2 \cdot DCT_i^2(y)}{\left(n - \sum_i \left(\frac{1}{1 + \lambda \gamma_i^2} \right)^2 \right)}.$$

3. Two-dimensional smoothing

Suppose $\{(x_{1,i}, x_{2,j})\}_{1 \leq i \leq n_1, 1 \leq j \leq n_2}$ is uniform grid and response function follows

$$y_{i,j} = f(x_{1,i}, x_{2,j}) + \varepsilon_{i,j}$$

where $\varepsilon_{i,j} \sim N(0, \sigma^2)$. In this case, values of response function can represent like matrix Y , where element of i -th row and j -th column is value $y_{i,j}$. Then the smoothed values will be denoted by \hat{Y} . Introduce the operation vec , which represents matrix in column vector form. Then $vec(\hat{Y})$ can be written:

$$vec(\hat{Y}) = (H_{x_2} \otimes H_{x_1}) \cdot vec(Y) = H_{x_2, x_1} \cdot vec(Y),$$

where H_{x_1}, H_{x_2} - projection matrix for corresponding dimension. Obviously, the projection matrix has follow form

$$H_{x_i} = (I_{n_i} + \lambda_i D_{n_i}^T D_{n_i})^{-1}, \quad i = 1, 2.$$

Applying the approach and properties of the tensor product [10], expression (3) can be simplified as follows:

$$\begin{aligned} \hat{y} &= (H_{x_2} \otimes H_{x_1}) \cdot y \\ &= (I_{n_2} + \lambda_2 D_{n_2}^T D_{n_2})^{-1} \otimes (I_{n_1} + \lambda_1 D_{n_1}^T D_{n_1})^{-1} \cdot y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= U_{x_2} \cdot \left(\frac{1}{1 + \lambda_2 \gamma_{x_2}^2} \right) \cdot U_{x_2}^T \otimes U_{x_1} \cdot \left(\frac{1}{1 + \lambda_1 \gamma_{x_1}^2} \right) \cdot U_{x_1}^T \cdot y \\
&= U_{x_2} \otimes U_{x_1} \cdot \left(\frac{1}{1 + \lambda_1 \gamma_{x_1}^2} \right) \otimes \left(\frac{1}{1 + \lambda_2 \gamma_{x_2}^2} \right) \cdot U_{x_2}^T \otimes U_{x_1}^T \cdot y \\
&= U_{x_2, x_1} \cdot \Gamma_{x_2, x_1} \cdot U_{x_2, x_1}^T \cdot y
\end{aligned}$$

To automatically search for the best values λ_1 and λ_2 , we use a cross-validation adapted for two-dimensional case:

$$GCV(\lambda_1, \lambda_2) = \frac{RSS/n}{(1 - Tr(H_{x_2, x_1})/n^2)}.$$

Properties of tensor product of matrices [10] denotes $Tr(H_{x_2, x_1}) = \sum \frac{1}{1 + \lambda_1 \gamma_{x_1}^2} \cdot \sum \frac{1}{1 + \lambda_2 \gamma_{x_2}^2}$. Obviously, main consuming place of the estimation is a calculation RSS , because it requires evaluation of \hat{y} for all combinations λ_1 and λ_2 . This calculation can be simplified:

$$\begin{aligned}
RSS &= \|\hat{y} - y\|^2 = \|H_{x_2, x_1} \cdot y - y\|^2 = \|(H_{x_2, x_1} - I_n) \cdot y\|^2 \\
&= \|U_{x_2, x_1} \cdot (\Gamma_{x_2, x_1} - I_n) \cdot U_{x_2, x_1}^T \cdot y\|^2 \\
&= (U_{x_2, x_1} \cdot (\Gamma_{x_2, x_1} - I_n) \cdot U_{x_2, x_1}^T \cdot y)^T \cdot (U_{x_2, x_1} \cdot (\Gamma_{x_2, x_1} - I_n) \cdot U_{x_2, x_1}^T \cdot y) \\
&= (DCT_2 \cdot y)^T \cdot (\Gamma_{x_2, x_1} - I_n)^2 \cdot DCT_2 \cdot y \\
&= \sum (\gamma_{x_2, x_1} - 1)^2 \cdot (DCT_2 \cdot y)^2,
\end{aligned}$$

where DCT_2 - is a two-dimensional discrete cosine transform. From the simplified equation shows the transformation must evaluate one times and result change with values γ_{x_2, x_1} depending values λ_1 and λ_2 . This approach implemented in R. To demonstrate the advantages of considered approach performed numerical experiments: with model and real data.

4. Experiments

Model data: To illustrate the effectiveness of the algorithm, sample data have been modeled from function $\sin(2\pi(x_1 - 0.5)^3) \cdot \cos(4\pi x_2)$ with noise - random values from normal distribution of $N(0, 0.2^2)$ (fig. 1). Smoothing was carried by presented approach and MGCV package [11], which implements smoothing with penalized splines, including multidimensional case with tensor product of basic functions. Below is a table contains result of smoothing with different methods.

Real data: To demonstrate the practical application of the approach, real data of mortality in Russia have been smoothed and compared with results of another approaches. The data are taken from the open source [12] and contains observations for ages of 0 and 110 between years of 1959 and

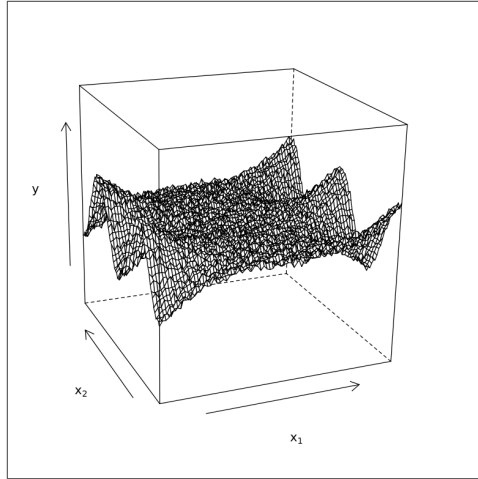


Figure 1. Function $\sin(2\pi(x - 0.5)^3) \cdot \cos(4\pi y)$ with noise.

Table 1

The results of smoothing model data with different methods.

	P-splines with DCT	GAM with 10^2 knots	GAM with 20^2 knots
RSS	9.488243	11.72485	9.87163
MSE	0.001483	0.001832	0.00154
Corr. with true values	0.9993394	0.996919	0.9991624
Est. time (sec)	1.941	10.237	29.875

2010. For experiment was taken part of data, which belongs to the older ages (50-101, fig. 2). That part was chosen, because observations contain many errors and outliers. Thus, analyzed data are evenly spaced values of mortality rates on grid with size 52×52 . Smoothing conducted outlined approach, package MGCV and parametric model of the Lee-Carter, who has become a classic for appraisals dimensional mortality surface. The next table contains result of estimations.

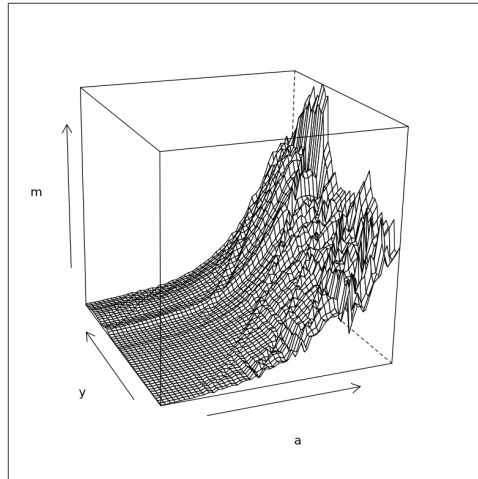


Figure 2. The raw mortality rates in Russia for ages of 50 and 101 between years of 1959 and 2010.

Table 2
The results of smoothing a two-dimensional surface of Russian mortality rates.

	P-splines with DCT	Lee-Carter model	GAM with 12^2 knots
RSS	0.21637	18.5092	0.41395
MSE	0.0000905	0.0077379	0.0001731
Est. time (sec)	0.49	1.194	4.185

5. Conclusion

Obviously, described approach is very effective, because it's fast and no need much memory. Note, if the sample size increases then calculation speed increases slightly with same estimation quality. Results:

1. equations obtained for two-dimensional case with two smoothing parameters;
2. the approach implemented in R for one- and two-dimensional cases;
3. the approach compared with similar approaches and models.

In next studies is expected to consider the following possibilities:

- extension of the approach to the multidimensional case with many smoothing parameters;
- use other common criteria for smoothing parameters selection, for example, *BIC* or *AIC*;
- use a faster method for minimization *GCV* instead of grid search.

References

1. Whittaker E. On a new method of graduation // Proceedings of the Edinburgh Mathematical Society. — 1923. — Vol. 41. — P. 62–75.
2. Wahba G. Spline Models for Observational Data. — Society for Industrial Mathematics, 1990. — ISBN: 9780898712445.
3. Schoenberg I. Spline functions and the problem of graduation // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. — 1964. — Vol. 52. — P. 947–950.
4. Takezawa K. Introduction to Nonparametric Regression. — Wiley & Sons, Inc., 2005. — ISBN: 9780471745839.
5. Weinert H. Efficient computation for whittaker-henderson smoothing // Computational Statistics & Data Analysis. — 2007. — Vol. 52. — P. 959–974.
6. Shetinin E., Lyubin P. Robust smoothing with splines // Science Review. — 2015. — Vol. 1. — P. 86–94.
7. Lyubin P., Shetinin E. Stochastic models of mortality estimation // Science Review. — 2015. — Vol. 18. — P. 147–155.
8. Xiao L., Li Y., Ruppert D. Fast bivariate p-splines: the sandwich smoother // Journal of the Royal Statistical Society. — 2013. — Vol. 75. — P. 577–599.
9. Garcia D. Robust smoothing of gridded data in one and higher dimensions with missing values // Computational Statistics & Data Analysis. — 2010. — Vol. 54. — P. 1167–1178.
10. Seber G. A Matrix Handbook for Statisticians. — Wiley-Interscience, 2007. — ISBN: 9780471748694.
11. Wood S. mgcv: Mixed GAM Computation Vehicle with GCV/AIC/REML Smoothness Estimation. — R package version 1.8.10. URL: <https://cran.r-project.org/web/packages/mgcv/index.html>.
12. Department of Demography at the University of California The human mortality database. — Last visited on 25.02.2016. URL: <http://www.mortality.org/>.

UDC 519.633.2

Phase-ray coordinate system corresponding to Maxwell's equations solution

M. D. Malykh^{*†}, N. E. Nikolaev[‡], L. A. Sevastianov^{*§}

^{*} *Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia.
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

[†] *Moscow State University Materials Science Department.
Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia*

[‡] *Department of Applied Physics
Peoples' Friendship University of Russia.
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

[§] *Joint Institute for Nuclear Research.
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

Abstract. The paper describes the relationship between the solutions of Maxwell's equations and the curvilinear coordinates of geometrical optics. It generalizes the results achieved by Lüneburg, concerning the evolution of surfaces of electromagnetic fields discontinuities. This coordinate system in the future we will call phase-ray coordinate system. In the work, it is proved that field under study can be represented by two scalar functions.

It is shown that under certain conditions on variable real coefficients of medium filling in the region under consideration, a phase-ray coordinate system that describes the laws of geometrical optics in this region can be constructed. There exist solutions of Maxwell's equations, which take in this coordinate system the simplest canonical form. A pair of quasi-wave equations gives this canonical form of the Maxwell's equations.

The work also specifies the necessary and sufficient conditions for the existence of a coordinate system, generated by the solution of Maxwell's equations with the holonomic field of the Poynting vector. It is shown that the class of solutions of Maxwell's equations includes monochromatic polarized waves, and the Hilbert-Courant solutions and their generalizations.

Keywords: rays, geometrical optics, Maxwell optics, eikonal equation.

1. Introduction

Suppose that in domain

$$(x, y, z) \in G \subset \mathbb{R}^3, \quad t > 0$$

with isotropic dielectric permittivity ε and magnetic permeability μ two vector fields \vec{E} and \vec{H} are given, satisfying the homogeneous system of Maxwell's equations

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\mu}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \vec{H} = \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (1)$$

It is well known that there are solutions of the system, which can be described by means of geometrical optics. These are, eg., the plane waves in a homogeneous medium. Under the traditional approach [1, 2] it would be expected that in the general case, the laws of geometrical optics are valid only for harmonic vibrations, and only in the high-frequency limit. But yet Lüneburg [3] noted that the movement of discontinuity surfaces of electromagnetic fields obey the laws of geometrical optics exactly, and not only in the high-frequency limit. Let's try to introduce the concepts of rays and phase fronts for solving Maxwell's equations without reference to the high-frequency limit and prove that the so-imposed rays obey the laws of geometrical optics. Of course, it will be necessary to impose on the considered electromagnetic field some additional conditions, without which by and large it is not only impossible to deduce the laws of geometrical optics, but even to introduce the concepts of rays and phase fronts.

2. Rays and phase fronts

For electromagnetic fields which can be considered at least locally as plane waves, vectors \vec{E} and \vec{H} are orthogonal to each other and their directions do not change with time t , but may vary from point to point in the domain G , as it occurs, for example, in the case of spherical wave. Therefore, as the first condition for the considered electromagnetic field, assume the following.

Condition 1. Let the vectors $\vec{e}_2 = \pm \vec{E} / \|\vec{E}\|$ and $\vec{e}_3 = \pm \vec{H} / \|\vec{H}\|$ do not depend on t and are orthogonal to each other. The sign is chosen once in an arbitrary manner under assumption that \vec{e}_2 and \vec{e}_3 are smooth vector fields in the domain G .

Defenition 1. The integral curves of the vector field $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ we will call the rays of the electromagnetic field $\{\vec{E}, \vec{H}\}$. The surface orthogonal to $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ at all points, will be called the phase front of the electromagnetic field $\{\vec{E}, \vec{H}\}$.

Note 1. Formally, this definition does not use the fact that the field is an electromagnetic wave, and the Poynting vector $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ indicates the direction of its propagation. However, further developed theory, of course, is not applicable to crossed static electromagnetic fields.

By the condition 1 directions of vectors \vec{E} and \vec{H} do not change with time, so the vector $\vec{e}_1 = \pm \vec{S} / \|\vec{S}\|$ does not depend on t as well. By definition 1, the ray emanating from the point (x_0, y_0, z_0) , is a trajectory of a point which motion is described by the initial problem

$$\dot{\vec{r}} = \vec{e}_1(\vec{r}), \quad \vec{r}|_{t=0} = (x_0, y_0, z_0)^T.$$

The existence and uniqueness of its solution follow directly from Cauchy's theorem. Therefore from any point (x_0, y_0, z_0) it is always possible to emit

a ray and it will be the only one. However, the existence of a family of phase surfaces imposes a condition on the field.

Condition 2. Let the Poynting vector $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ be holonomic, that is $(\vec{S}, \text{rot } \vec{S}) = 0$ in the considered region.

Recall that the vector field \vec{A} is called holonomic if there is a family of surfaces $u(x, y, z) = \text{const}$ orthogonal to vector field \vec{A} . Subject to Jacobi theorem [4] the necessary and sufficient condition of holonomicity of field \vec{A} is the equality $(\text{rot } \vec{A}, \vec{A}) = 0$; scalar $(\text{rot } \vec{A}, \vec{A})$ is called the quantity of field \vec{A} nonholonomicity. Therefore, if the electromagnetic field satisfies Maxwell's equations (1) and the conditions 1 and 2, by virtue of the theorems of Cauchy and Jacobi there are well defined: 1) two-parameter family of rays, and 2) one-parameter family of phase surfaces in the sense of Definition 1.

3. Phase-ray coordinate system

From Maxwell's equations follows:

Theorem 1. If the fields \vec{E} and \vec{H} satisfy the Maxwell's equations (1) and the condition 1, they are holonomic.

Proof. Maxwell's equations imply that

$$\text{rot } \vec{E} \parallel \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad \text{and} \quad \text{rot } \vec{H} \parallel \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}.$$

By condition 1 vectors directions do not change with time, so

$$(\vec{E}, \text{rot } \vec{E}) = (\vec{E}, \vec{H}) = 0 \quad \text{and} \quad (\vec{H}, \text{rot } \vec{H}) = (\vec{H}, \vec{E}) = 0$$

because of the assumption of fields orthogonality, made earlier. \square

This theorem allows one to associate the field with a curvilinear orthogonal coordinate system in which the Maxwell's equations look particularly simple. Let the electromagnetic field satisfies the conditions 2 and 1, then due to the theorem of Jacobi, there are three such functions u_1 , u_2 and u_3 , that

$$\vec{S} \parallel \nabla u_1, \quad \vec{E} \parallel \nabla u_2, \quad \vec{H} \parallel \nabla u_3.$$

Formulas

$$x_1 = u_1(x, y, z), \quad x_2 = u_2(x, y, z), \quad x_3 = u_3(x, y, z)$$

define an orthogonal curvilinear coordinate system. To write Maxwell's equations explicitly let us use the same method [5] that is used in the theory of diffraction when introducing Borgnis functions [6, 7].

Let h_1, h_2, h_3 be the Lamé coefficients of the coordinate system, that is, we assume that the distance between two infinitesimally nearby points (x_1, x_2, x_3) and $(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3)$ is given by

$$ds^2 = h_1^2 dx_1^2 + h_2^2 dx_2^2 + h_3^2 dx_3^2,$$

and let denote by $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ the vectors indicating the directions of the coordinate lines of the coordinate system. Then, by construction of the coordinate system

$$\vec{E} = E_2 \vec{e}_2, \quad \vec{H} = H_3 \vec{e}_3,$$

where E_2 and H_3 are some scalar quantities. The equation $\text{rot } \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$ in the curvilinear coordinate system gives

$$\begin{cases} \frac{1}{h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial x_2} h_3 H_3 = 0, \\ \frac{c}{h_1 h_3} \frac{\partial}{\partial x_1} h_3 H_3 = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} E_2, \end{cases}$$

and the equation $\text{rot } \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$ gives

$$\begin{cases} \frac{1}{h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial x_3} h_2 E_2 = 0, \\ \frac{c}{h_1 h_2} \frac{\partial}{\partial x_1} h_2 E_2 = -\mu \frac{\partial}{\partial t} H_3. \end{cases}$$

For simplicity let

$$h_2 E_2 = E, \quad h_3 H_3 = H, \quad \text{and} \quad m_e = \frac{\mu}{c} \frac{h_1 h_2}{h_3}, \quad m_h = \frac{\varepsilon}{c} \frac{h_1 h_3}{h_2}, \quad (2)$$

then we can rewrite the Maxwell's equations in the form

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_1} E + m_e \frac{\partial}{\partial t} H = 0, \\ \frac{\partial}{\partial x_1} H + m_h \frac{\partial}{\partial t} E = 0, \\ \frac{\partial}{\partial x_3} E = 0, \\ \frac{\partial}{\partial x_2} H = 0. \end{cases} \quad (3)$$

For easiness of references, let us fix proven states as a theorem.

Theorem 2. If the electromagnetic field satisfies Maxwell's equations (1) and the conditions 1 and 2, then there is a locally orthogonal coordinate system in which this field can be represented as

$$\vec{E} = \frac{E}{h_2} \vec{e}_2, \quad \vec{H} = \frac{H}{h_3} \vec{e}_3,$$

where scalars E and H satisfy the system (3), the coefficients of which m_e and m_h are expressed in terms of the dielectric permittivity ε and magnetic permeability μ in the domain and the Lamé coefficients by the formulas (2).

The coordinate system introduced in Theorem 2 will be called phase-ray coordinate system, if necessary, indicating exactly what the solution of Maxwell's equations corresponds the system.

4. The case of constant coefficients

Using constants m_e and m_h the general solution of the system (3) can be written explicitly.

Theorem 3. If the electromagnetic field satisfies Maxwell's equations (1), conditions 1 and 2 and the values of m_e and m_h are constants, the x_1 -lines of the phase-ray coordinate system represent rays of geometrical optics, and the field itself is a superposition of two waves running along the rays in opposite directions:

$$\vec{E} = F(\sqrt{\varepsilon\mu}h_1x_1 - ct)\frac{\vec{e}_2}{h_2} + G(\sqrt{\varepsilon\mu}h_1x_1 + ct)\frac{\vec{e}_2}{h_2}.$$

In particular, if the field in question has a gap at $t = 0$, the gap propagates along the rays according to the laws of geometrical optics, as it should be, according to the Lüneburg [3].

5. The case of variable coefficients

In general, the system (3) comprises only four equations and two unknown functions, so from general considerations one would expect that the condition of the solvability of this system provides some restrictions on the coefficients m_e and m_h . But in fact, this system has a whole family of stationary solutions, namely

$$E = \varphi(x_2), \quad H = \psi(x_3),$$

where φ and ψ are arbitrary functions.

Theorem 4. For the system (3) has a non-static solution it is necessary that one of its coefficients m_e and m_h can be represented as a product of the form $\varphi(x_1, x_2)\psi(x_1, x_3)$ and it is enough that both coefficients m_e and m_h depend only on x_1 .

Proof. (i) If the system (3) has a non-static solution, at least one of the two functions E and H depends on t . Assume for definiteness that it is H that depends on t . Then

$$m_e = -\frac{\partial E}{\partial x_1} : \frac{\partial H}{\partial t},$$

and by virtue of the third equation of (3) the numerator of this ratio is independent of x_3 , and the denominator of it by virtue of the fourth equation is independent of x_2 .

(ii) If m_e and m_h are independent of x_2 and x_3 , the initial value problem

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_1} E + m_e \frac{\partial}{\partial t} H = 0, \\ \frac{\partial}{\partial x_1} H + m_h \frac{\partial}{\partial t} E = 0, \\ E|_{t=0} = E_0(x_1), \\ H|_{t=0} = H_0(x_1) \end{cases}$$

by the Cauchy–Kowalevski theorem [8] for any initial condition has a solution, which obviously satisfies the last two equations of the system (3). \square

Sufficient conditions immediately lied us to geometrical optics.

Theorem 5. If in the curvilinear coordinate system the value

$$m_e m_h = \varepsilon \mu h_1^2$$

depends only on x_1 , then x_1 -lines are extremal curves of the functional

$$\int_A^B \sqrt{\varepsilon \mu} ds,$$

i.e. they are rays of geometrical optics.

The proof of this statements is similar to the proof of Theorem 3.

Let us consider a non-static electromagnetic field, satisfying the conditions 1 and 2. By theorem 2, there exists a phase-ray coordinate system in which $\vec{E} = E\vec{e}_2/h_2$, $\vec{H} = H\vec{e}_3/h_3$, and the dependence on t appears only in scalar functions of E and H . Consequently, the system (3) has a non-static solution. By theorem 4, the coefficients (2) of this system can not be arbitrary functions, and this in turn leads to some restrictions on the Lamé coefficients. Strictly speaking, the conditions 1 and 2 involve only the necessary condition of Theorem 4.

If the sufficient conditions of Theorem 5 hold x_1 -lines of phase-ray coordinate system are rays of geometrical optics, but the wave propagation along the rays will be subject to the equations system (3). To investigate the type of this system let us excluded a variable H from the system (3). To this end, we differentiate the first equation of the system (3) by x_1 , then we have

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x_1^2} - m_e m_h \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \frac{\partial \ln m_e}{\partial x_1} \frac{\partial E}{\partial x_1}, \tag{4}$$

which is different from the usual hyperbolic equation by an additional term on the right side.

Equation (4) has the form

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a \frac{\partial u}{\partial x_1},$$

thus, it is a classical equation of oscillations with an additional term $a \frac{\partial u}{\partial x_1}$, which in the theory of oscillations is used for modeling damping vibrations phenomena due to the resistance of the medium [9, § 1.4]. If we take $a = 0$ we get the usual equation of vibrations, so when choosing a certain initial conditions the instantaneous profile u will move along the x_1 -axis at the velocity c . Posing $a > 0$ will lead to damping.

6. Monochromatic field at high frequencies

Assuming that the solution (4) depends on time as

$$E = u(x_1) \sin \omega t,$$

and assuming for brevity $x_1 = x$, we obtain

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{1}{m_e} \frac{\partial m_e}{\partial x} \frac{du}{dx} + \omega^2 m_e m_h u = 0.$$

In the high-frequency limit $\omega \rightarrow \infty$ one can try to find a solution by the JWKB method [10]. In this case the monochromatic field \vec{E} is a superposition of waves

$$\frac{1}{\sqrt{h_2 h_3}} \sqrt[4]{\frac{\varepsilon}{\mu}} \sin \left(\omega t \pm \int \frac{\sqrt{\varepsilon \mu}}{c} h_1 dx_1 + \text{const} \right) \vec{e}_2.$$

Therefore, in homogeneous media the amplitudes of the fields \vec{E} and \vec{H} increase or decrease along the ray according to the same law.

7. Conclusion

On the assumption that in the domain G there is a homogeneous solution of Maxwell's equations, satisfying additional conditions of holonomicity of the Poynting vector field we build locally-orthogonal coordinate system (called the phase-ray system) having a clear geometric-optical interpretation. It is shown that under certain non-burdensome (sufficient) conditions on variable real coefficients of medium filling in the region (on the permittivity and magnetic susceptibility), a phase-ray coordinate system that describes the laws of geometrical optics in this region, can be

constructed, and there exist solutions of Maxwell's equations, which take in this coordinate system the simplest (canonical) form. In general, the canonical form of the Maxwell's equations is given by a pair of quasi-wave equations.

A small additional study showed that the Maxwell's equations solutions described in this work and associated with curvilinear coordinates generated by them, include at least two classes: the widespread monochromatic polarized waves [6, 11] and less known waves of Hilbert-Courant and their generalizations [8, 12].

Acknowledgments

The work was partially supported by RFBR grants No 14-01-00628, No 15-07-08795 and No 16-07-00556.

References

1. Babich V., Buldyrev V. Short-Wavelength Diffraction Theory: Asymptotic Methods. — Berlin : Springer, 1991.
2. Kravtsov Y., Orlov Y. Geometrical Optics of Inhomogeneous Media. — Berlin : Springer, 1990.
3. Lüneburg R. K. Mathematical Theory of Optics. — Providence, Rhode Island : Brown University, 1944.
4. Aminov Y. Geometry of Vector Fields. — Singapore : Gordon and Breach Science Publishers, 2000.
5. Malykh M. On solutions of the Maxwell's equations from the viewpoint of geometrical optics // Bull. PFUR, ser. MIPh. — 2014. — no. 4. — P. 65–72.
6. Zhang K., Li D. Electromagnetic Theory for Microwaves and Optoelectronics. — Berlin : Springer, 2007.
7. Sveshnikov A., Mogilevsky I. Mathematical problems of the theory of diffraction. — Moscow : MSU, 2010. — In Russian.
8. Courant R., Hilbert D. Methoden der mathematischen Physik. — Springer Verlag, 1968. — Vol. 2.
9. Yang W. Reflection Seismology. — Elsevier, 2014.
10. Fröman N., Fröman O. JWKB approximation. — Amsterdam : North-Holland Publ. Comp., 1965.
11. Weinstein L. Electromagnetic Waves. — Moscow : Radio & Communication, 1988. — In Russian.
12. Besieris I. M., Shaarawi A. Three classes of Courant-Hilbert progressive solutions to the scalar wave equation // Journal of electromagnetic waves and applications. — 2002. — Vol. 16, no. 8. — P. 1047–1060.

УДК 004.272.2, 004.272.3, 004.272.4; 544.18, 544.183

Эффективная параллелизация программ методов Хартри-Фока, теории функционала плотности и метода конфигурационного взаимодействия

А. В. Митин^{*†‡}

^{*} *Кафедра физической химии, Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Ленинские горы, Дом 1, Строение 3, ГСП-1, Москва, Россия, 119991*

[†] *Отдел гиперзвуковой магнитоплазменной аэродинамики, Объединённый институт высоких температур РАН, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, Москва, Россия, 125412*

[‡] *Факультет нано-, био-, информационных и когнитивных технологий, Московский физико-технический институт, ул. Максимова, д. 4, Москва, Россия, 123098*

Аннотация. Показано, что модифицированный обычный метод вычисления матрицы Фока сосжатием данных, использующий хранимые интегралы, линейно масштабируется по числу базисных функций для больших молекулярных систем. Представлены эффективные алгоритмы параллелизации методов Хартри-Фока и теории функционала плотности (ТФП): модифицированный обычный и полу-прямой методы со сжатием данных. Сформулированы основные подходы к параллелизации метода конфигурационного взаимодействия с отбором конфигураций, в котором матричные элементы вычисляются по правилам Слэтера.

Ключевые слова: распределенные вычисления, параллельные вычисления, метод Хартри-Фока, метод Кона-Шама, метод конфигурационного взаимодействия.

1. Введение

Начиная с середины последнего десятилетия прошлого века кластерная архитектура вычислительных систем, создаваемых на основе различных компьютеров, постепенно превратилась в основную архитектуру суперкомпьютеров. В настоящее время большинство суперкомпьютеров построено по кластерной архитектуре. Появление в последние годы многоядерных микропроцессоров и многопроцессорных материнских плат привело к тому, что параллельное выполнение программ на современных кластерах возможно путём параллелизации как по узлам кластера, так и на одном узле, используя несколько (до 32) многоядерных микропроцессоров на нём.

С точки зрения вычислительных методов, решение уравнений неэмпирических методов теории электронной структуры молекулярных систем и нано-структур включает использование почти всех основных методов вычислительной математики. Это вычисление многомерных интегралов, интерполирование и экстраполирование функций, решение систем линейных уравнений, нахождение собственных значений

и соответствующих собственных векторов матричной обобщённой и обычной задачи на собственные значения, минимизация многомерных функций, суммирование рядов и многие другие методы. Известно, что эффективность параллелизации отмеченных выше методов заметно различается. Поэтому, обычно, в программах, реализующих неэмпирические методы теории электронной структуры, параллелизуются только те стадии, которые требуют наибольших вычислительных ресурсов. В методах Хартри-Фока и ТФП - это вычисление двухэлектронной составляющей матрицы Фока из двухэлектронных интегралов и матрицы плотности, а в методе конфигурационного взаимодействия - вычисление матричных элементов оператора Гамильтона между конфигурационными функциями состояния и решения задачи на собственные значения с матрицами экстремально большой размерности - 10^7 и выше. Новые подходы к эффективной параллелизации этих вычислений рассматриваются в настоящей работе.

2. Эффективная параллелизация вычисления двухэлектронной части матрицы оператора Фока

В настоящее время известны два основных метода построения двухэлектронной части матрицы Фока, а также метод являющийся промежуточным между ними. Это - обычный метод, с хранением вычисленных двухэлектронных интегралов на внешнем устройстве [1], прямой метод, в котором двухэлектронные интегралы перевычисляются на каждом шаге итерационного метода [2], а также полу-прямой метод, в котором часть интегралов сохраняется на внешнем устройстве, а часть перевычисляется [3].

Каждый из этих двух методов имеет свои преимущества. Так, обычный метод требует меньше арифметических операций, поскольку двухэлектронные интегралы вычисляются в нём один раз, а прямой метод имеет преимущество, когда чтение интегралов и их индексов с внешнего устройства требует больше времени, чем их вычисление.

До последнего времени преимущество отдавалось прямому методу построения двухэлектронной части матрицы Фока, поскольку, как было показано, этот метод проявляет свойство супер-линейной масштабируемости сложности вычисления матрицы Фока по отношению к числу базисных функций используемых в расчёте [4-6].

Однако, недавно нами была доказана теорема об асимптотически линейной масштабируемости числа ненулевых двухэлектронных интегралов по отношению к числу базисных функций для больших молекулярных систем [7]. Она была численно проверена путём построения зависимостей числа ненулевых двухэлектронных интегралов от числа базисных функций и точности вычисления интегралов, а также их производных для полимеров аланина, полученные в расчётах с базисом 6-31G, которые представлены на Рис. 1.

Кроме этого, было показано, что использование методов сжатия данных для хранения двухэлектронных интегралов и их индексов [8,9]

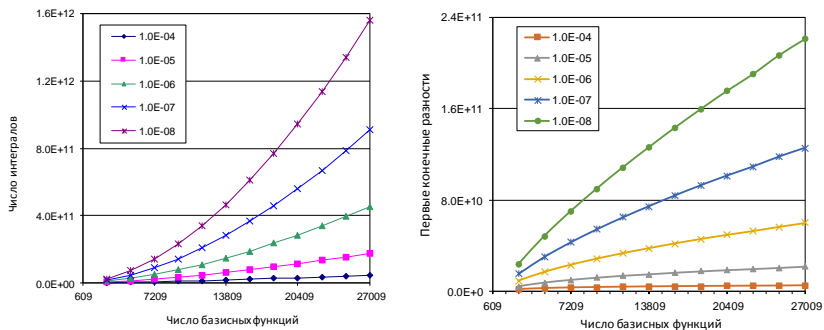


Рис. 1. Зависимость числа ненулевых двухэлектронных интегралов (а) и их первых конечных разностей (б) от числа базисных функций и разной точности вычисления интегралов для полимеров аланина.

позволяет переформулировать обычный метод вычисления матрицы Фока в стиле прямого метода с использованием разности матриц плотности для предварительной оценки вклада двухэлектронных интегралов в матрицу Фока [10]. Исследование таким образом модифицированного обычного метода построения матрицы Фока показало, что он также обладает свойством линейной масштабируемости по отношению к числу базисных функций используемых в расчёте [7]. Это хорошо

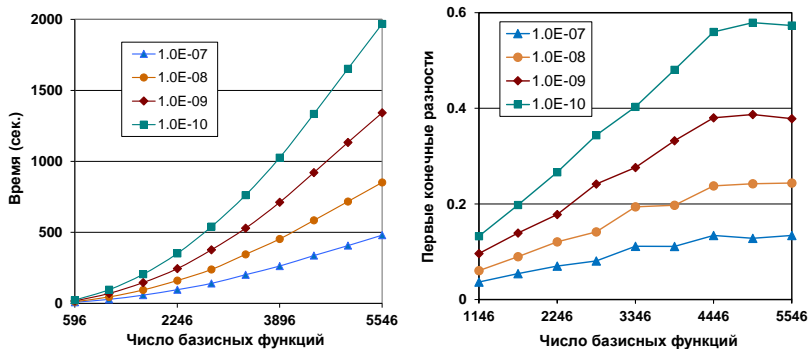


Рис. 2. Зависимость времени построения матрицы Фока (а) и его первых производных (б) от числа базисных функций в Хартри-Фоковских расчётах полимеров аланина в базе 3-21SP для различной точности вычисления интегралов.

видно на примере зависимостей времён построения двухэлектронной части матрицы Фока и их первых производных от числа базисных функций в Хартри-Фоковских расчётах полимеров аланина в базе 3-21SP для различной точности вычисления интегралов, представленных на Рис. 2. Они показывают, что после достижения достаточно большого размера вычисление матрицы Фока становится линейно масштабируемым по числу базисных функций.

Результаты вышеупомянутых исследований показывают, что модифицированный обычный метод вычисления матрицы Фока, подобно прямому методу, также обладает свойством линейной масштабируемости по отношению к размеру рассчитываемой системы. Таким образом сравнение двух методов вычисления матрицы Фока показывает, что преимущество одного метода над другим определяется исключительно соотношением между быстродействием центрального процессора и скоростью чтения данных с внешнего устройства. Поэтому, в дальнейшем нами были параллелизованы все методы: прямой, полу-прямой и модифицированный обычный метод вычисления матрицы Фока.

Здесь следует добавить, что твёрдотельные диски, появившиеся недавно, с существенно более высокой скоростью передачи данных по сравнению с традиционными дисками, очевидно даёт новые преимущества классическому методу вычисления двухэлектронной части оператора Фока. Например, для дисковых RAID устройств с новыми дисками достигнута скорость передачи данных более 6 ГБ/сек в настоящее время. Проблема здесь только в том, как быстро такие устройства станут общедоступными.

Эффективный алгоритм параллелизации вычисления двухэлектронной части матрицы оператора Фока в методах Хартри-Фока и ТФП по узлам кластера был разработан нами [10] на основе системы PVM [11].

Большинство из аналогичных методов параллелизации были разработаны для суперкомпьютеров, в которых узловой компьютер имел относительно небольшую оперативную память. Поэтому в них использовалось расщепление матриц плотности и Фока на блоки с хранением только несколько блоков на каждом из узлов. Такие методы хорошо масштабируются по небольшому числу использованных узлов. Однако, для большого числа узлов масштабируемость становится неудовлетворительной из-за всё возрастающего потока данных между ними.

В связи с этим мы построили параллелизацию с сохранением копий матриц плотности и Фока на каждом из узлов. Такой подход заметно упрощает параллелизацию и требует передачи на узлы только управляющей информации, объём которой является незначительным. Это означает, что построенный метод обладает значительным потенциалом для эффективной параллелизации на большом числе узлов. Ограничителем в нём является размер оперативной памяти на узле необходимой для хранения основных матриц.

В построенном параллельном методе решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шама со сжатием данных вычисление и хранение интегралов, а также вычисление частей матрицы Фока происходит на каждом из подчинённых узлов. Управляющую информацию о блоках интегралов, подлежащих вычислению на каждом из узлов, рассылает управляющий узловой компьютер, работая по принципу первый свободный узел получает первым информацию о новом требуемом блоке интегралов. Суммирование частей матрицы Фока происходит на управляющем узле, выполняющем также другие операции. Такая схема параллелизации хорошо подходит как для чисто классического, так и для полу-прямого метода. В классическом методе все двухэлектронные интегралы вычисляются и хранятся на дисках подчинённых узлов. В полу-прямом методе сначала вычисляются двухэлектронные интегралы и сохраняются на дисках подчинённых узлов. Затем, в начале вычисляется вклад в матрицу Фока от сохранённых на диске интегралов, а потом вычисляются оставшиеся интегралы и находится их вклад в матрицу Фока.

Одной из важнейших задач, которые необходимо решить для получения эффективной параллелизации, является балансировка узлов по времени их работы. В качестве целевой функции для балансировки узлов, нами было выбрано число двухэлектронных интегралов. Оно позволяет сбалансировать работу узлов как по времени вычисления, так и по времени ввода/вывода данных. С выбранной целевой функцией потеря времени, из-за несбалансированности узлов, составляла около 2% в тестовых расчётах.

Время расчёта молекул разными параллельными методами Хартри-Фока и ТФП в зависимости от числа узлов на кластере представлено в Таблице 1. Полученные результаты показывают, что разработанные модифицированный классический и полу-прямой параллельные методы значительно опережают прямой метод. Это преимущество обусловлено главным образом тем, что модифицированный классический и пол-упрямой методы требуют значительно меньше арифметических операций.

3. Эффективная параллелизация метода конфигурационного взаимодействия

Основная проблема методов конфигурационного взаимодействия, основанных на использовании теории унитарной группы для вычисления матричных элементов, заключается в том, что они позволяют явно коррелировать только около 20 электронов. Это явно недостаточно для теоретического исследования больших молекулярных систем. Вместе с тем, в работе [12], на примере расчёта энергии адсорбции молекулы NH_2 на поверхности металлического никеля, было показано, что модифицированный методом конфигурационного взаимодействия с отбором конфигураций, в котором матричные элементы вычисляются по правилам Слэтера позволил явно коррелировать 76 электронов.

Таблица 1

Зависимость времени (в мин.) расчёта молекул параллельными обычным (Кл), прямым (Пр) и полу-прямым (ППр) методами Хартри-Фока и ТФП от числа использованных узлов кластера.

Мол.	Мет.	БФ		Число узлов				
				1	2	3	4	5
Si ₁₇ H ₂₀	HF	406	Пр	81.2	42.4	29.9	22.3	18.5
			Кл	28.3	15.3	11.1	8.8	7.0
			Пр/Кл	2.9	2.8	2.7	2.5	2.6
Taxol	SVWN	660	Пр	395.9	202.8	137.3	104.9	85.4
			ППр	262.5	145.4	98.0	75.4	60.8
			Пр/ППр	1.5	1.4	1.4	1.4	1.4
Yohimbine	BLYP	494	Пр	289.8	145.9	99.1	76.6	60.6
			ППр	163.9	88.3	59.6	45.6	36.8
			Пр/ППр	1.8	1.7	1.7	1.7	1.6
Porphine	V3LYP	916	Пр	614.7	319.1	209.6	159.3	130.4
			ППр	305.1	182.0	124.8	92.9	77.7
			Пр/ППр	2.0	1.8	1.7	1.7	1.7

По этому показателю его параллелизация является наиболее интересной, поскольку позволит проводить исследования систем с большим числом явно коррелированных электронов.

Особенностью данной формулировки метода конфигурационного взаимодействия является необходимость хранения в оперативной памяти всех двухэлектронных интегралов от молекулярных орбиталей (МО). Это число, пропорциональное $1/8N^4$, где N - число МО, задаёт высокие требования к размеру оперативной памяти узлового компьютера. Для хранения только интегралов при N=1000 требуется около 933 ГБ. Однако, для современных микропроцессоров это незначительная проблема. Например, контроллер памяти в микропроцессорах хеон E7-4800 v4 и хеон E7-8800 v4 поддерживает адресацию до 3ТБ оперативной памяти на процессор.

Сам метод конфигурационного взаимодействия с глобальной точки зрения является по сути методом нахождения экстремальных собственных значений и их собственных векторов экстремально большой матрицы размерности - 10^7 и выше (см. обзор [13] новых итерационных методов автора). Известно, что математические методы нахождения экстремальных собственных значений хорошо параллелизуются как по числу узлов, так и по числу ядер макропроцессоров, работающих над общим полем памяти. Поэтому параллелизация метода конфигурационного взаимодействия, технически сложная, не имеет принципиальных проблем. Главное требование для этого иметь достаточный размер

оперативной памяти для размещения двухэлектронных интегралов от МО и волновой функции.

4. Заключение

Разработанные модифицированный классический и полу-прямой параллельные методы решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шама значительно опережают параллельный прямой метод решения этих уравнений. Сформулированы основные подходы к параллелизации метода конфигурационного взаимодействия с отбором конфигураций, в котором матричные элементы вычисляются по правилам Слэтера. Он позволяет явно коррелировать значительно больше 20 электронов, которое является лимитирующим для общепринятого в настоящее время метода конфигурационного взаимодействия, в котором матричные элементы вычисляются на основе теоретико-групповых подходов.

Благодарности

Работа частично поддержана грантом РФФИ № 14-01-00420.

Литература

1. Veillard A. The logic of scf procedures // in: Computational Techniques in Quantum Chemistry and Molecular Physics. Vol. 15 / Ed. by G. H. F. Dierksen, B. T. Sutcliffe, A. Veillard. — Dordrecht : Reidel, 1975. — P. 201–250.
2. Almlöf J., Faegri K., Korsell K. Principles for a direct scf approach to lcao-mo *ab-initio* calculations // J. Comput. Chem. — 1982. — Vol. 3, no. 3. — P. 385–399.
3. Häser M., Ahlrichs R. Improvements on the direct scf method // J. Comput. Chem. — 1989. — Vol. 10, no. 1. — P. 104–111.
4. White C. A., Head-Gordon M. Derivation and efficient implementation of the fast multipole method // J. Chem. Phys. — 1994. — Vol. 101, no. 8. — P. 6593–6605.
5. Strain M. C., Scuseria G. E., Frisch M. J. Achieving linear scaling for the electronic quantum coulomb problem // Science. — 1996. — Vol. 271, no. 5245. — P. 51–53.
6. Challacombe M., Schwegler E., Almlöf J. Fast assembly of the coulomb matrix: A quantum chemical tree code // J. Chem. Phys. — 1996. — Vol. 104, no. 12. — P. 4685–4698.
7. Mitin A. V. The origin of linear scaling fock matrix calculation with density prescreening // AIP Conf. Proc. — 2015. — Vol. 1702. — P. 090028 (4 pages).

8. Mitin A. V. Large scale hartree-fock calculations. compression of two-electron integrals and their indices // J. Molec. Struct. (Theochem). — 2002. — Vol. 592, no. 1–3. — P. 115–121.
9. Mitin A. V. Large scale hartree-fock calculations with conventional scf algorithm. influence of integral and index compression on fock matrix construction // Журн. физ. химии. — 2010. — Т. 84, № 5. — С. 912–919.
10. Mitin A. V., Baker J., Wolinski K., Pulay P. Parallel stored-integral and semidirect hartree-fock and dft methods with data compression // J. Comput. Chem. — 2003. — Vol. 24, no. 2. — P. 154–160.
11. Geist A., Beguelin A., Dongarra J. et al. PVM: Parallel Virtual Machine, A Users' Guide and Tutorial for Network Parallel Computing. — Cambridge, MA, USA : MIT Press, 1994. — ISBN: 0-262-57108-0.
12. Mitin A. V., Buenker R. J. Ab initio calculation of adsorption energy of the ch₂ molecule on the ni surface. preliminary results // Fourth European Workshop, Quantum Systems in Chemistry and Physics. — 1999. — P. B7.
13. Mitin A. V. Iterative methods for calculations of extreme eigenvalues of large symmetric matrices // Math. Model. Geom. — 2014. — Vol. 2, no. 1. — P. 10–26.

UDC 004.272.2, 004.272.3, 004.272.4; 544.18, 544.183

Efficient parallelization of programs of the Hartree-Fock method, the density functional theory, and the configuration interaction method

A. V. Mitin^{*†‡}

^{*} *Chemistry Department, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Russia*

[†] *Department of hypersonic magneto-plasma aerodynamics, Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, Izhorskaya st. 13 Bd.2, Moscow, 125412, Russia*

[‡] *Department of Nano-, Bio-, Information Technology and Cognitive Science, Moscow Institute of Physics and Technology, Maksimova street. 4, Moscow, 123098, Russia*

It is demonstrated that the modified method of Fock matrix calculation with data compression using stored integrals linearly scales with respect to the number of basis functions for large molecular systems. Efficient parallel algorithms of the modified usual and semi-direct Hartree-Fock and the DFT methods are presented. The main requirements are formulated for parallelization of the configuration interaction method with configuration selection in which the matrix elements are calculated in accordance with Slater rules.

Keywords: distributed computations, parallel calculations, Hartree-Fock method, Kohn-Scham method, configuration interaction method.

UDC 004.4

Control of System Dynamics and Constraints Stabilization

R. G. Muharlyamov

*Department of Theoretical Physics and Mechanics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

Abstract. The equations of classical mechanics used for describing a dynamical process of controlled systems containing different elements. The method of constructing differential equations of known partial integrals is used to stabilize the constraints imposed on the mechanical system dynamics which is described by Lagrange equations and Hamilton equations. The problem of constructing the dynamics equations with known properties of motion in the class of Ito stochastic differential equations was investigated by Tleubergenov M.I., Azhymbaev D.T. Assuming that some of the properties of the motion are known and the random perturbing forces belong to the class of processes with independent increments, Lagrange functions, Hamilton functions and Birkhoff functions can be constructed. Stability conditions for solutions of equations of dynamics with respect to the constraint equations are obtained, and an algorithm for constructing equations of constraint perturbations that guarantees the stabilization of constraints in the course of numerical solution is proposed. The problem of controlling the rectilinear motion of a cart with inverted pendulum is solved.

Keywords: Modeling, system, differential, equation, dynamics, stability, construction, solution, control.

1. Introduction

Modern methods for modeling the dynamics of complex systems imply that the required operating properties satisfied at the stage of setting up the equations of dynamics. To set up these equations and to investigate the kinematic and dynamic properties of controlled systems equations methods of classical mechanics [1] - [5] are used. The analogy of dynamic processes in a simple economic object with the motion of a point of variable mass [3] makes it possible to solve problems of scheduling and managing the dynamics of production systems using the methods of analytical dynamics of systems with variable mass [6]. The motions of mechanical systems are described by differential-algebraic equations composed of equations of dynamics and constraint equations. A considerable problem in the numerical solution of such systems is the stabilization of constraints [7], [8], which is formulated as a problem of limitation of deviations due to additional forces or adequate modification of constraint forces.

2. Statement of the problem

We consider the problem of modeling the dynamics of a system with its kinematic properties and control objectives given by constraint equations. The control of dynamics should ensure that the constraint equations are satisfied for appropriate initial conditions and the constraints are stabilized under perturbations caused by deviations of the initial conditions and errors in the numerical solution of dynamics equations. This problem can be solved only if the constraint equations involve the partial integrals of the corresponding equations of system dynamics. In this case, the solution of the equations of dynamics must be asymptotically stable with respect to the functions that estimate the deviations from the constraint equations. The existing methods of constrain stabilization [7] - [10] are based on a linear combination of equations of constraints and their derivatives. The control constraint forces can be determined using the generic approach based on the construction of systems of differential equations given known partial integrals [11] - [13].

3. Construction of dynamics equations

Due to the dynamic analogies, methods of classical mechanics can be used for the analysis and synthesis of control systems [12]. The necessary kinematic properties and dynamics of the controlled system are described by the system of differential-algebraic equations, presented by constraints equations and, for example, the Lagrange equations

$$\begin{aligned} f(q, t) = 0, \quad f_q v + f_t = 0, \quad \varphi(q, v, t) = 0, \\ \frac{dq}{dt} = v, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = Q - \frac{\partial D}{\partial v} + Bu, \\ q(t_0) = q^0, \quad v(t_0) = v^0, \\ q, v \in R_n, \quad f \in R_m, \quad \varphi \in R_r, \quad u \in R_k, \\ B = B(q, v, t), m + r \leq k \leq n. \end{aligned}$$

Here q, v are the vectors of generalized coordinates and velocities, Q, u are generalized forces and controlling, L is Lagrange function, D is dissipative function. The general solution of problem of control synthesis that provides constraints stabilization is proposed. For the purpose of constraint stabilization excessive coordinates $\tilde{q} = f(q, t)$, $\tilde{v} = f_q v + f$, $v' = \varphi(q, v, t)$ are introduced and consider the extended system to which correspond Lagrange function $\tilde{L} = \tilde{L}(x, y, t)$ and dissipative function $\tilde{D} = \tilde{D}(x, y, t)$, $x = (q, v)$, $y = (\tilde{q}, \tilde{v}, v')$, which satisfy the conditions $\tilde{L}(x, 0, T) = L(x, t)$, $\tilde{D}(x, 0, t) = D(x, t)$. For definition of constraint stabilization conditions we will present the expanded system equations in the form.

$$\frac{dx}{dt} = w(x, t) + G(x, t)y, \quad (1)$$

$$\frac{dy}{dt} = K(x, t)y, \quad (2)$$

$$y - g(x, t) = 0, \quad (3)$$

$$x(t_0) = x^0, \quad y^0 = g(x^0, t). \quad (4)$$

4. Stability and stabilization

The stability with respect to constraints' equations we shall consider in sense of the following definitions.

Definition 1. The solution of the expanded system equations is stable with respect to constraints equations, if for any ε there exists such δ , that for any initial conditions $x(t_0) = x^0$, that satisfy the inequalities $\|y(t_0)\| \leq \delta$, for all $t > t_0$ the inequality $\|y(t)\| \leq \varepsilon$ fulfills.

Definition 2. The solution of the expanded system equations is asymptotically stable with respect to constraints equations, if it is stable and the condition $\lim_{t \rightarrow \infty} \|y(t)\| = 0$ is fulfilled.

The solution of the system of equations (1),(3) is asymptotically stable with respect to constraint equations $g(x, t) = 0$, if the trivial solution $y = 0$ of the system of constraint perturbation equations (2) has this property. The matrix K of the coefficients of equations (2) of constraint perturbations is determined by the choice of functions \tilde{L} , \tilde{D} , and it generally depends on the phase coordinates q, v of the original system. If matrix K is constant, then the trivial solution is asymptotically stable if the roots of the characteristic equation have negative real parts. In the general case, the stability conditions are determined directly by the method of Lyapunov's functions [14]

For the successful numerical simulation of the dynamics of controlled systems, the asymptotic stability of the solution of equations (1),(3) with respect to constraint equations $g(x, t) = 0$ is insufficient. The constraints will be stabilized only if the deviations of the numerical solution of the equations of dynamics satisfy the constraint equations with certain accuracy. Obviously, the estimation for deviations of the solution to the equations of dynamics depends on the numerical solution method.

Let differential equation (1) with (3) and the initial conditions (4) be solved using the simple difference scheme

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \tau \tilde{v}(x^k, t_k), \\ \tilde{v}(x, t) &= w(x, t) + G(x, t)y, \\ x^k &= x(t_k), \\ \tau &= t_{k+1} - t_k, \\ k &= 0, 1, 2 \dots \end{aligned}$$

Then, expanding the function $y^{k+1} = g(x^{k+1}, t_{k+1})$ in powers of τ with regard to (1),(3) as

$$y^{k+1} = y^k + \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)^k \Delta x^k + \tau \left(\frac{\partial g}{\partial t}\right)^k + \frac{\tau^2}{2} g^{k(2)},$$

we obtain the bound

$$\|y^{k+1}\| \leq \|I_{m+r} + \tau K(x^k, t_k)\| \|y^k\| + \frac{\tau^2}{2} \|g^{k(2)}\|.$$

Hence, if $\|y^k\| \leq \varepsilon$, $\|I_{m+r} + \tau K(x^k, t_k)\| \leq \alpha \leq 1$, $\tau^2 \|g^{k(2)}\| \leq 2\varepsilon(1 - \alpha)$, then we have the inequality $\|y^{k+1}\| \leq \varepsilon$.

If equations (1),(3) is solved using the second order difference scheme

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \Delta x^k, & \Delta x^k &= \tau(1 - \sigma)\tilde{v}^k + \tau\sigma\tilde{v}^k, \\ \tilde{v}^k &= \tilde{v}(x^k, t_k + \alpha\tau), & \tilde{x}^k &= x_k + \alpha\tau\tilde{v}^k, \\ \sigma &> 0, & \alpha &> 0, & k &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

where α and σ are constants and the conditions

$$\begin{aligned} 2\alpha\sigma &= 1, & \|y^k\| &\leq \varepsilon, & \tau^3 \|g^{k(3)}\| &\leq 6\varepsilon(1 - \beta), \\ \|I_{m+r} + \tau K_1(x^k, t_k) + \frac{1}{2}\tau^2 K_2(x^k, t_k)\| &\leq \beta \leq 1, & & & & (5) \\ K_2(x^k, t_k) &= K^2(x^k, t_k) + \frac{dK(x^k, t_k)}{dt}, \end{aligned}$$

hold for all $k = 0, 1, 2, \dots$, then we have the inequality $\|y^{k+1}\| \leq \varepsilon$ (see [15]). If is a constant matrix, inequality (5) is simplified:

$$\|I_{m+r} + \tau K + \frac{1}{2}\tau^2 K\| \leq \beta \leq 1.$$

The constraint stabilization conditions to be imposed on the coefficients of constraint perturbation equations (2) with the help of higher order finite difference schemes were obtained in [16]. Specifically, the solution of equations (1),(3) by a fourth order Runge–Kutta method can provide the stabilization of constraints if the following conditions are satisfied:

$$\begin{aligned} \tau^5 \|g^{k(5)}\| &\leq (5!)\varepsilon(1 - \beta)\ddot{x}, \\ \|I_{m+r} + \sum_{s=1}^4 \frac{\tau^s}{s!} (K_s)^k\| &\leq \beta < 1, \\ K_1 &= K, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 K_2 &= \frac{dK}{dt} + K^2, \\
 K_3 &= \frac{d^2K}{dt^2} + 3\frac{dK}{dt} + K^3, \\
 K_4 &= \frac{d^3K}{dt^3} + 4\frac{d^2K}{dt^2} + 3\left(\frac{dK}{dt}\right)^2 + 6\frac{dK}{dt}K^2 + K^4.
 \end{aligned}$$

At each computing step, the constraint stabilization conditions ensure that the constraint equations are satisfied with a given accuracy and the deviation errors are not accumulated. This makes it possible to use simple numerical methods for solving the equations of the controlled system dynamics.

Example. The solution of the system of first order differential equations

$$\begin{aligned}
 \frac{dx}{dt} &= X(x, y), & \frac{dy}{dt} &= Y(x, y), \\
 X(x, y) &= -4cy - \frac{x}{x^2 + 16y^2}u(x, y), \\
 Y(x, y) &= cx - \frac{4y}{x^2 + 16y^2}u(x, y), \\
 u(x, y) &= k(x^2 + 4y^2 - 4),
 \end{aligned}$$

satisfies the constraint equation $g(x, y) = (x^2 + 4y^2 - 4)/2 = 0$. The equation of constraint perturbations $dg/dt = /kg$ has an asymptotically stable trivial solution $g = 0$ for all $k > 0$. The system is numerically solved using the difference scheme

$$x^{k+1} = x^k + \tau X^k, \quad y^{k+1} = y^k + \tau Y^k, \quad t_{k+1} = t_k + \tau.$$

We assume that

$$\begin{aligned}
 \varepsilon &= 0.001, \tau = 0.001, |x| \leq 2.1, |y| \leq 1.1, c = 1, \\
 t_0 &= 0, x^0 = 2, y^0 = 0, |g(x^0, y^0)| = 0 < \varepsilon.
 \end{aligned}$$

Inequalities for α and k take the form $\alpha \leq 0.815$, $0 < k < 38217$. Assuming that $\alpha = 0.8$, we obtain the conditions for k : $200 < k < 1800$. The direct calculations show that, for $k = 50$ and $k = 2050$, the condition for the numerical solution stability is violated at $t = 0.023$: $|g^{23}| = 0.00011 > \varepsilon$ and $t = 0.069$: $|g^{69}| = 0.00011 > \varepsilon$, respectively. For $k = 300$, the stabilization conditions are satisfied: $|g| \leq 2.66E - 05$. The graphs of changes in the deviation of $g(t)$ from the constraint equation $g(x, y) = 0$, corresponding to the values $k = 50, 300, 2050$, are shown in Fig. 1.

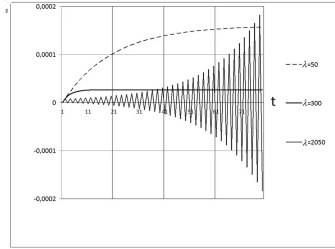


Figure 1. The deviations from the constraint equation

5. Construction of stochastic differential equations

The problem of modeling control dynamics systems in general formulation has a broader interpretation and relates to inverse problems of dynamics. The problem of reducing the system of differential equations to the structure of the Lagrange equations and systems of Helmholtz is studied in [17], [18]. A method of constructing dynamics equations of systems with constraints in the form of Lagrange equations is proposed in [19]. Inverse problems of the Helmholtz dynamics systems are investigated in [20], [21]. In [22], [23] methods for solving inverse problems of dynamics are used to construct the equations of the dynamics of systems with constraints in generalized coordinates, in the canonical variables and equations in the form of Birkoff.

The task of constructing stochastic equations in the form of Lagrange equations is as follows. From the known constraint equations

$$g(q, v, t) = 0, \quad g \in R_m, \quad q \in R_n, \quad v = \frac{dq}{dt}, \quad (6)$$

required to construct a stochastic differential equation in the form of Lagrange equations.

$$\frac{dq}{dt} = v, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_\nu} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_\nu} = \sigma'_{\nu j}(q, v, t) \xi^j, \quad (7)$$

$\xi \in R_k, k \geq m,$

so that the set (6) was a system of partial integrals of the system (7). Here, $\xi(t, \omega)$ is a system of random processes with independent increments.

We represent the random process as the sum [24] $\xi = \xi_0 + \int c(y)P^0(t, dy)$, where ξ_0 - Wiener process, P^0 - Poisson process, $P^0(t, dy)$ - the number of jumps of the process P^0 at the interval $[0, t]$, entering into a set of dy , $c(y)$ - vector function mapping space R_{2n} in the space values

of $\xi(t)$ for all t . To solve the problem in the first phase build a system of Ito differential equations of the second order

$$\frac{dq}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = f(q, v, t) + \sigma(q, v, t)\dot{\xi}, \quad (8)$$

for which the equality (6) is a set of partial integrals. Next, construct stochastic equations of Lagrangian, Hamiltonian or Birkoffian structure equivalent to the equation (8).

Previously, by the rule of stochastic Ito differentiation derivative is calculated:

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dt} &= \frac{\partial g}{\partial q}v + \frac{\partial g}{\partial v}f + \frac{\partial g}{\partial t} + S_1 + S_2 + S_3 + \frac{\partial g}{\partial v}\sigma\dot{\xi}, \\ S_1 &= \frac{1}{2}\sigma^T \frac{\partial^2 g}{\partial v^T \partial v}, \\ S_2 &= \left\{ g(q, v + \sigma c(y), t) - g(q, v, t) + \frac{\partial g}{\partial v}\sigma c(y) \right\} dy, \\ S_3 &= \int [g(q, v + \sigma c(y), t) - g(q, v, t)] P^0(t, dy). \end{aligned} \quad (9)$$

Equating the right-hand side of equation (3) expressions

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dt} &= A(g, q, v, t) + B(g, q, v, t)\dot{\xi}, \\ A(0, q, v, t) &= 0, \quad B(0, q, v, t) = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

form the equations of perturbation constraints. Comparing equation (9) and (10) we arrive at the relations

$$\begin{cases} \frac{\partial g}{\partial v}f = A - \frac{\partial g}{\partial t} - \frac{\partial g}{\partial q}\dot{x} - S_1 - S_2 - S_3, \\ \frac{\partial g}{\partial v}\sigma = B. \end{cases} \quad (11)$$

The vector f and the matrix σ is defined as the total solution of the equations (11)

$$\begin{aligned} f &= s_0 \left[\frac{\partial g}{\partial v}C \right] + \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)^+ \left(A - \frac{\partial g}{\partial t} - \frac{\partial g}{\partial q}v - S_1 - S_2 - S_3 \right), \\ \sigma &= S_0 \left[\frac{\partial g}{\partial v}C \right] + \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)^+ B, \end{aligned}$$

where s_0 - arbitrary scalar value, S_0 is an arbitrary diagonal matrix.

Thus the set (8) Ito differential equations of the second order, allowing partial integrals (6) has the form

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} = v, \frac{dv}{dt} = s_0 \left[\frac{\partial g}{\partial v} C \right] + \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)^+ \left(A - \frac{\partial g}{\partial t} - \frac{\partial g}{\partial q} v - S_1 - S_2 - S_3 \right) + \\ + \left(S_0 \left[\frac{\partial g}{\partial v} C \right] + \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)^+ B \right) \dot{\xi} \end{aligned} \tag{12}$$

After similar calculations for $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_\nu} \right)$ by the rule of Ito stochastic differentiation

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_\nu} \right) = \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial t} + \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial q_k} v_k + \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial v_k} \frac{dv_k}{dt} + \tilde{S}_{1\nu} + \tilde{S}_{2\nu} + \tilde{S}_{3\nu},$$

arrive at the system

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} = v, \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial t} + \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial q_k} v_k + \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial v_k} \frac{dv_k}{dt} - \frac{\partial L}{\partial q_\nu} + \\ + \tilde{S}_{1\nu} + \tilde{S}_{2\nu} + \tilde{S}_{3\nu} = \sigma'_{\nu j}(q, v, t) \xi^j, \end{aligned} \tag{13}$$

From a comparison of the expressions (12), (13) the conditions that must be imposed on the Lagrangian L and the matrix σ' :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial v_k} = \delta_\nu^k, \\ \frac{\partial L}{\partial q_\nu} + \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial t} + \frac{\partial^2 L}{\partial v_\nu \partial q_k} v_k + \tilde{S}_{1\nu} + \tilde{S}_{2\nu} + \tilde{S}_{3\nu} = f_\nu, \\ \sigma' = S_0 \left[\frac{\partial g}{\partial v} C \right] + \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)^+ B. \end{aligned}$$

6. Applications

The proposed methods are used for solving problems of control of production, logistics and technical systems.

A. The control problem for discrete adaptive optical system's element.

Mirror's element is simulated by a rigid body with six degrees of freedom and controlled by three parallel forces applied to the points of rigid body at which the mirror is attached. The mirror moves along the guides.

B. Modeling of electromechanical system.

In the control problem of electromechanical system, consisting of power supply unit and direct current motor, which controls crank mechanism, the variable voltage is used for control. The dynamics equations and the constraint equations are formulated. The solution of differential–algebraic equations and phase portraits plotting are performed using the integrative system of computing symbol mathematics Maple.

C. A control problem of a wheel system’s motion.

A control problem of a wheel system’s movement along a given trajectory $x = -k_1t, y = 0$ with avoidance of moving bodies is resolved. Three-wheel system is controlled by torque moments applied to back axle wheels. In order to formulate the trajectory set qualitative theory’s inverse problem of differential equations is used. System dynamics is described by Voronet’s equations. The system is moving with avoidance two moving obstacles, constrained curves

$$(q_1 - 2 + k_3t)^2 + 4q_2^2 = 1,$$

$$\frac{1}{4}(q_1 + 1 - k_4t)^2 + \frac{16}{9}(q_2 + \frac{3}{2})^2 = 1.$$

The trajectory is obtained as a result of solution of the dynamics equations at given initial conditions.

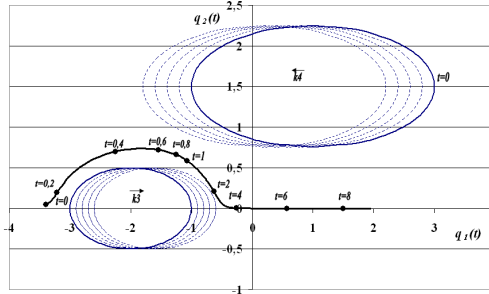


Figure 2. The trajectory of the center of the system.

D. Management of tire enterprise consisting of two plants.

The management problem of enterprise for the production of tires, which consists of two factories: the factory of truck tire and of car tire factory. We investigate the dynamics of the necessary resources. As control functions considers the cash inflow on acquisition for the necessary equipment.

E. The problem of control for inverted pendulum on a movable base.

In a uniform gravitational field, a cart of mass m_1 can move linearly along the horizontal axis Ox of the Cartesian coordinate system under the

action of force \mathbf{F} . The position of the cart on the axis Ox is determined by the coordinate x of point O_1 , which has a hinged uniform rod O_1A of length $2l$ and mass m_2 (Fig. 3). It is required to determine the magnitude F of force \mathbf{F} and torque M applied to the rod needed to move the end A of the rod along a predetermined curve. The system dynamics is described by the equations

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v, & \frac{d\varphi}{dt} &= \omega, \\ \frac{dv}{dt} &= \frac{m_2 \cos \varphi (4l\omega^2 - 3g \sin \varphi)}{lN(\varphi)} + \frac{4}{N(\varphi)} F + \frac{3 \sin \varphi}{lN(\varphi)} M, \\ \frac{d\omega}{dt} &= \frac{3 \cos \varphi}{lN(\varphi)} (lm_2\omega^2 \sin \varphi - (m_1 + m_2)g) + \frac{3 \sin \varphi}{lN(\varphi)} F + \frac{3(m_1 + m_2)}{m_2 l^2 N(\varphi)} M, \\ N(\varphi) &= 4m_1 + m_2(1 + 3 \cos^2 \varphi), \end{aligned}$$

where φ is the rod slope angle with respect to the axis Ox and g is the acceleration due to gravity. Constraints corresponding to the motion of a point A on the curve described by the equations

$$x + 2l \cos \varphi - a(t) = 0, \quad 2l \sin \varphi - b(t) = 0.$$

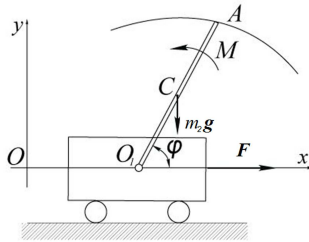


Figure 3. Control for inverted pendulum on a movable base.

Believing

$$f_1 = x + 2l \cos \varphi - a(t), \quad f_2 = 2l \sin \varphi - b(t).$$

the constraint perturbation equations can be represented by a linear system

$$\frac{df_i}{dt} = \dot{f}_i, \quad \dot{f}_1 = -k_{11}f_1 - k_{12}\dot{f}_1, \quad \dot{f}_2 = -k_{21}f_2 - k_{22}\dot{f}_2,$$

$$k_{ij} > 0, \quad i, j = 1, 2.$$

The problem of describing the point of the text is composed from straight segments and arcs of ellipses is solved (Fig. 4).

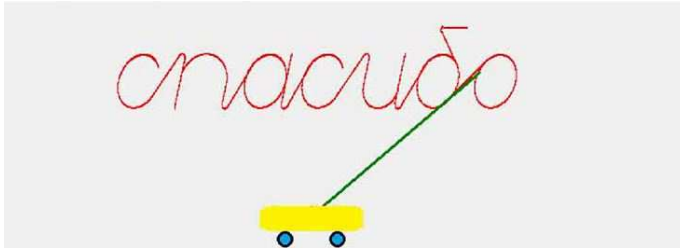


Figure 4. Movement of a cart with inverted pendulum along a curve.

7. Conclusions

The results of theoretical research and numerical experiments confirm the efficiency of the proposed methods of stabilization of constraints that describe the system dynamics and the constraints that restrict the changes of the coordinates and velocities.

Acknowledgments

This study was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project 16-08-00558 A and the state task 3.1939.2014/A; design part.

References

1. *Olson H. F.* Dynamical Analogies. — Van Nostrand, New York 1943.
2. *Layton R. A.* Principles of Analytical System Dynamics. — Springer, New York 1997.
3. *Sirazetdinov T. K.* A dynamical predictive model and optimal control of an economic object. — *Izv. Vuzov, Aviatsionnaya Tekhnika* No. 4, 3–8 (1972).
4. *Meiser P., Enge O., Freudenberg H., Kielau G.* Electromechanical interactions in multibody systems containing electromechanical drives. — *Multibody System Dynamics*, No. 1, 281–302 (1997).
5. *Mukharlyamov R. G.* Modeling dynamic processes of various nature. — in *Problems of Analytical Mechanics and Stability Theory* (Nauka, Moscow, 2009), pp. 310–324.

6. *Mukharlyamov R. G.*, Modeling the dynamics of simple economic objects as systems with program constraints // Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia., Ser. Fiz.-Mat. Nauki, No. 1, 25–34 (2007).
7. *Baumgarte J.*, Stabilization of constraints and integrals of motion in dynamical systems, Comp. Math. Appl. Mech. Eng., No. 1, 1–16 (1972).
8. *Ascher U. M., Chin H., Petzold L. R., and Reich S.*, Stabilization of constrained mechanical systems with DAEs and invariant manifolds, J. Mech. of Structures Machines, No. 23, 135–158 (1995).
9. *Rentrop P., Strehmel K., Weiner R.*, Ein Überblick über Einschnitten zur numerischen Integration in der technischen Simulation, GAMM Mitt. Berlin. 19 (1996), No. 1, 9–43.
10. *Amirouche F.* Fundamentals of Multibody Dynamics. Theory and Applications (Springer, Birkhauser, 2005).
11. *Erugin N. P.* Construction of the entire set of systems of differential equations that have a given integral curve. Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 21, 659–670 (1952).
12. *Mukharlyamov R. G.* On the construction of differential equations of optimal motion on the given manifold, Differ. Equat. 7, 1825–1834 (1971).
13. *Galiullin A. S.*, Methods for Solving Inverse Problems of Dynamics (Nauka, Moscow, 1986).
14. *Mukharlyamov R. G.* On the construction of the set of differential equations of stable motion given an integral manifold, Differ. Equat. 5, 688–699 (1969).
15. *Mukharlyamov R. G.* On the numerical solution of differential algebraic equations, Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Ser. Appl. Mat., Inform., No. 1, 20–24 (1999).
16. *Mukharlyamov R. G., Beshaw, A. W.* Solving differential equation of motion for constrained mechanical systems, Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia., Ser. Mat., Inform., Fiz., No. 3, 81–92 (2013).
17. *Santilli R.M.* Foundations of Theoretical Mechanics. I: The Inverse Problem in Newtonian Mechanics. New York; Heidelberg; Berlin: Springer-Verlag, (1978). 266 p.
18. *Santilli R.M.* Foundations of Theoretical Mechanics. II: Birkhoffian Generalization of Hamiltonian Mechanics. New York; Heidelberg; Berlin: Springer-Verlag, (1982). 370 p.
19. *Mukharlyamov R. G.* Reduction of dynamical equations for the systems with constraints to given structure, Journal of Applied Mathematics and Mechanics Vol. 71, No 3 (2007). Elsevier. 401–410.
20. *Galiullin A.S., Tuladhar B.M.* An Introduction to the Theory of Stability of Motion. Katmandu University. (2000). 94 p.
21. *Galiullin A.S., Gafarov G.G., Malaishka R.P. and Hvan A.M.* Gelmgolce, Birgoff, Nambu systems analytical dynamics Moscow. Editorial office Advances of physical sciences. (1997). (in Russian). P. 384.
22. *Tleubergenov M.I., Ashimbayev D.T.* On the construction of the set

- of stochastic differential equations from a given integral manifold, independent of the velocity, Ukrainian mathematical journal. Kiev. (2010). T. 62. No 7. Pp. 1002-1009.
23. *Tleubergenov M.I., Ashimbayev D.T.* The solution of the recovery with degenerate diffusion method of separation³, Journal of Applied Mathematics and Mechanics, Ser. Mat., Inform., Fiz., (2011). No 2, Pp. 81–92.
 24. *Pugachev V.S., Sinitsyn I.N.* Stochastic differential systems. Analysis and filtration. M., (1990). 632p.

УДК 681.513.7

Оценка точности восстановления координат при моделировании трехмерных объектов с использованием стереоизображений

З. Т. Нгуен*, М. Б. Фомин*, В. М. Хачумов*

** Кафедра информационных технологий,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо-Маклая, д.6, Москва, Россия, 117198*

Аннотация. Необходимость реконструкции трехмерных координат возникает в задачах распознавания, в которых требуется восстановить форму изображенного объекта. Один из способов решения задачи базируется на использовании модели системы технического зрения, описывающей формирование стереопары изображений. Параметры такой модели задаются матрицами преобразования однородных координат сцены. Для калибровки модели могут быть использованы тестовые стереоизображения, сделанные в разных ракурсах, для шести точек которых известны координаты соответствующих им точек сцены. Точность восстановления координат точек поверхности изображенного объекта (при условии удачного распознавания соответствующих им точек стереопары изображений) обуславливается, главным образом, точностью калибровки модели технического зрения. Оценка погрешностей позволяет построить тетраэдр, во внутренней области которого лежит точка поверхности трехмерного тела, соответствующая распознанной точке стереоизображения.

Ключевые слова: стереоизображение, калибровка стереокамеры, стереографическая проекция.

1. Введение

Поиск точного местоположения целевых объектов путем анализа снимков, сделанных стереокамерой, установленной на летательном аппарате, представляет существенный практический интерес. При этом важно иметь обоснованные оценки погрешностей, возникающих в процессе вычислений. Исходной информацией для получения координат объектов служит множество согласованных пар пикселей, первый из которых принадлежит левому, а второй – правому изображению, полученному стереокамерой. Для выявления этих пар пикселей производят сопоставление соответствующих строк пары изображений, являющихся проекциями одной горизонтальной линии на местности. Точность восстановления трехмерных координат объектов обуславливается множеством факторов, главными среди которых являются погрешность калибровки стереокамер и неоднозначность определения координат соответствующих пикселей. Эта неоднозначность возникает вследствие разницы распределения яркостей на изображениях, полученных в разных ракурсах, и дискретной природы изображений. С практической точки зрения важной является выработка алгоритма оценки абсолютных погрешностей вычисленных трехмерных координат.

2. Постановка задачи

Преобразующие характеристики системы технического зрения моделируются матрицей T размерностью 4×4 , которая описывает проецирование пространственной точки, заданной в однородных координатах, в плоскость изображения [1]:

$$[x \ y \ z \ 1] \times T = [Hx^* \ Hy^* \ 0 \ H],$$

где (x, y, z) – трехмерные координаты точек объекта, (x^*, y^*) – координаты точки в проекции, H – масштабный коэффициент. В случае анализа стереоизображения, когда известны два набора (x^*, y^*) , соответствующие разным ракурсам, и две соответствующие матрицы T^1 и T^2 , задача восстановления трехмерных координат сводится к системе из четырех уравнений с тремя неизвестными. В случае рассогласования параметров преобразования левой и правой видеокамер эти уравнения несовместны, и систему можно решить только приближенно [2]. Систему можно привести к форме

$$\begin{cases} (T_{11}^1 - T_{14}^1 x^{1*})x + (T_{21}^1 - T_{24}^1 x^{1*})y + (T_{31}^1 - T_{34}^1 x^{1*})z + (T_{41}^1 - T_{44}^1 x^{1*}) = 0 \\ (T_{12}^1 - T_{14}^1 y^{1*})x + (T_{22}^1 - T_{24}^1 y^{1*})y + (T_{32}^1 - T_{34}^1 y^{1*})z + (T_{42}^1 - T_{44}^1 y^{1*}) = 0 \\ (T_{11}^2 - T_{14}^2 x^{2*})x + (T_{21}^2 - T_{24}^2 x^{2*})y + (T_{31}^2 - T_{34}^2 x^{2*})z + (T_{41}^2 - T_{44}^2 x^{2*}) = 0 \\ (T_{12}^2 - T_{14}^2 y^{2*})x + (T_{22}^2 - T_{24}^2 y^{2*})y + (T_{32}^2 - T_{34}^2 y^{2*})z + (T_{42}^2 - T_{44}^2 y^{2*}) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

и записать в матричном виде

$$A_0 x_0 = b_0. \quad (2)$$

Система может быть приближенно решена методом наименьших квадратов, обеспечивающим минимум квадрата ошибки:

$$x_0 = (A_0^T A_0)^{-1} A_0^T b_0, \quad (3)$$

где

$$x_0 = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}, \quad A_0 = \begin{bmatrix} T_{11}^1 - T_{14}^1 x^{1*} & T_{21}^1 - T_{24}^1 x^{1*} & T_{31}^1 - T_{34}^1 x^{1*} \\ T_{12}^1 - T_{14}^1 y^{1*} & T_{22}^1 - T_{24}^1 y^{1*} & T_{32}^1 - T_{34}^1 y^{1*} \\ T_{11}^2 - T_{14}^2 x^{2*} & T_{21}^2 - T_{24}^2 x^{2*} & T_{31}^2 - T_{34}^2 x^{2*} \\ T_{12}^2 - T_{14}^2 y^{2*} & T_{22}^2 - T_{24}^2 y^{2*} & T_{32}^2 - T_{34}^2 y^{2*} \end{bmatrix},$$

$$b_0 = \begin{bmatrix} T_{44}^1 x^{1*} - T_{41}^1 \\ T_{44}^1 y^{1*} - T_{42}^1 \\ T_{44}^2 x^{2*} - T_{41}^2 \\ T_{44}^2 y^{2*} - T_{42}^2 \end{bmatrix}.$$

Точка, соответствующая решению (3), расположена внутри тетраэдра, ограниченного четырьмя плоскостями, заданными уравнениями системы (1).

3. Оценка точности восстановления трехмерных координат

Для выработки алгоритма оценки погрешностей, возникающих при восстановлении трехмерных координат по данным стереоизображения, проанализируем особенности приближенного решения (3) системы (2). Это решение лежит внутри тетраэдра, вершины которого можно найти решением четырех систем уравнений, полученных из системы (1) удалением одного из уравнений. Размеры тетраэдра определяют точность приближенного решения (3). Покажем, что если коэффициенты матрицы A_0 и столбец свободных членов b_0 изменить на малые величины, то и решение (3), полученное с помощью метода наименьших квадратов, изменится незначительно. Для этого введем возмущающую матрицу A_1 , возмущающий вектор b_1 и потребуем, чтобы сингулярные числа (то есть квадратные корни из собственных чисел) матрицы A_1 были ограничены сверху некоторой константой [3]. Помимо системы (2) рассмотрим также систему

$$(A_0 + \varepsilon A_1) x_\varepsilon = b_0 + \varepsilon b_1,$$

где ε —малый параметр [4]. Её решение имеет вид

$$x_\varepsilon = ((A_0^T + \varepsilon A_1^T) (A_0 + \varepsilon A_1))^{-1} (A_0^T + \varepsilon A_1^T) (b_0 + \varepsilon b_1).$$

Рассмотрим выражение

$$J = (A_0^T + \varepsilon A_1^T) (A_0 + \varepsilon A_1) \Delta,$$

где $\Delta = |x_\varepsilon - x_0|$ — отклонение. Величину J можно привести к виду

$$J = \varepsilon A_1^T (E - A_0(A_0^T A_0)^{-1} A_0) b_0 + \varepsilon A_0^T (b_1 - A_1(A_0^T A_0)^{-1} A_0^T b_0) + O(\varepsilon^2),$$

где E — единичная матрица. Матрица $A_0^T A_0$ положительно определена. Значит, при малых значениях ε это свойство сохраняется и для $(A_0^T + \varepsilon A_1^T) (A_0 + \varepsilon A_1)$, вследствие чего имеем

$$\Delta = O(\varepsilon) = \|(A_0 + \varepsilon A_1)^T (A_0 + \varepsilon A_1)\| - \|A_0^T A_0\|.$$

Таким образом, малые изменения параметров стереокамеры приводят к малым изменениям решения задачи восстановления трехмерных координат изображенного объекта.

4. Выбор оптимального приближения

Решение (3) приближает точные координаты точки сцены, для которой распознаны координаты её проекции на стереоизображении, по методу наименьших квадратов. Возможно использование других критериев, в соответствии с которыми другие точки, лежащие внутри тетраэдра, заданного уравнениями системы (1), будут рассматриваться в качестве оптимального приближения [4]. Для выработка таких критериев будем использовать систему (1), переопределенную в обозначениях уравнения (3):

$$\begin{cases} a_{x1}x + a_{y1}y + a_{z1}z + b_1 = 0 \\ a_{x2}x + a_{y2}y + a_{z2}z + b_2 = 0 \\ a_{x3}x + a_{y3}y + a_{z3}z + b_3 = 0 \\ a_{x4}x + a_{y4}y + a_{z4}z + b_4 = 0, \end{cases} \quad (4)$$

Можно предложить следующие критерии поиска точки $N = (x, y, z)$, являющейся оптимальным приближением:

1. Минимизация среднеквадратичного отклонения N от решения уравнений системы (4);
2. Минимизация отклонения N от решения уравнения из системы (4) для случая уравнения, дающего самое большое отклонение;
3. Минимизация среднеквадратичного отклонения N от граней тетраэдра, заданного уравнениями системы (4);
4. Минимизация отклонения N от грани тетраэдра, для случая грани, соответствующей самому большому отклонению;
5. Минимизация среднеквадратичного отклонения одной из координат точки N от решения уравнений системы (4);
6. Минимизация расстояния от точки N до вершины тетраэдра для случая вершины, соответствующей самому большому отклонению, при условии нахождения N внутри тетраэдра.

Первый критерий применяется наиболее часто. Он уже рассмотрен в третьем разделе.

При рассмотрении случая минимизации отклонения для случая уравнения, дающего самое большое отклонение систему (4) можно привести к виду

$$\begin{cases} a_{x1}x + a_{y1}y + a_{z1}z + b_1 = \xi \\ a_{x2}x + a_{y2}y + a_{z2}z + b_2 = \xi \\ a_{x3}x + a_{y3}y + a_{z3}z + b_3 = \xi \\ a_{x4}x + a_{y4}y + a_{z4}z + b_4 = \xi, \end{cases}$$

где ξ – отклонение от решения системы. Решая систему можно найти точность приближения ξ .

При минимизации среднеквадратичного отклонения от граней тетраэдра условие поиска оптимального решения имеет вид

$$\delta^2 = \sum_i \frac{(a_{xi}x + a_{yi}y + a_{zi}z + b_i)^2}{a_{xi}^2 + a_{yi}^2 + a_{zi}^2} \rightarrow \min_{x,y,z},$$

и приводит к системе уравнений

$$\begin{cases} x \sum_i \frac{a_{xi}^2}{\Delta_i^2} + y \sum_i \frac{a_{xi}a_{yi}}{\Delta_i^2} + z \sum_i \frac{a_{xi}a_{zi}}{\Delta_i^2} + \sum_i \frac{a_{xi}b_i}{\Delta_i^2} = 0 \\ x \sum_i \frac{a_{xi}a_{yi}}{\Delta_i^2} + y \sum_i \frac{a_{yi}^2}{\Delta_i^2} + z \sum_i \frac{a_{yi}a_{zi}}{\Delta_i^2} + \sum_i \frac{a_{yi}b_i}{\Delta_i^2} = 0 \\ x \sum_i \frac{a_{xi}a_{zi}}{\Delta_i^2} + y \sum_i \frac{a_{yi}a_{zi}}{\Delta_i^2} + z \sum_i \frac{a_{zi}^2}{\Delta_i^2} + \sum_i \frac{a_{zi}b_i}{\Delta_i^2} = 0, \end{cases} \quad (5)$$

где $\Delta_i^2 = a_{xi}^2 + a_{yi}^2 + a_{zi}^2$, $i \in \{1, 2, 3, 4\}$.

Условие минимизация отклонения N от грани тетраэдра для случая грани, соответствующей самому большому отклонению, приводит к равенству расстояний до всех граней. В случае достижения минимума точка N лежит в центре шара, вписанного в тетраэдр.

При минимизации среднеквадратичного отклонения точки N по одной из координат приходим к системе уравнений, подобной системе (5):

$$\begin{cases} x \sum_i \frac{a_{xi}^2}{a_{zi}^2} + y \sum_i \frac{a_{xi}a_{yi}}{a_{zi}^2} + z \sum_i \frac{a_{xi}}{a_{zi}} + \sum_i \frac{a_{xi}b_i}{a_{zi}^2} = 0 \\ x \sum_i \frac{a_{xi}a_{yi}}{a_{zi}^2} + y \sum_i \frac{a_{yi}^2}{a_{zi}^2} + z \sum_i \frac{a_{yi}}{a_{zi}} + \sum_i \frac{a_{yi}b_i}{a_{zi}^2} = 0 \\ x \sum_i \frac{a_{xi}}{a_{zi}} + y \sum_i \frac{a_{yi}}{a_{zi}} + 4z + \sum_i \frac{b_i}{a_{zi}} = 0. \end{cases}$$

Условие минимизация отклонения N от вершины тетраэдра для случая вершины, соответствующей самому большому отклонению, приводит к равенству расстояний до всех вершин. В случае достижения минимума точка N лежит в центре шара, описанного вокруг тетраэдра.

5. Погрешность восстановления координат, связанная с неоднозначностью распознавания соответствующих пикселей

Исходными данными для вычисления коэффициентов уравнения (1) являются два набора координат (x^*, y^*) , описывающие пару соответствующих пикселей, распознанных на стереоизображении. Распознавание производится путем анализа распределения яркости в сопоставляемых областях стереоизображения, выявлением особенностей этого распределения и установлением соответствия между пикселями, найденными на левом и правом изображениях, в окрестности которых проявляется эта особенность. В качестве математического критерия используются различные статистические характеристики распределения яркости.

Неоднозначность определения координат соответствующих пикселей на стереоизображении приводит к погрешности при восстановлении координат точек на поверхности объектов сцены. Возможны разные причины возникновения неоднозначности. Из-за различия ракурсов пиксело на одном изображении может соответствовать несколько пикселей на другом, для которых одинаково будут выполняться критерии оценки распределения яркости. Пиксели, имеющиеся на одном изображении, могут не быть представлены соответствующими пикселями на другом из-за эффекта загораживания. Алгоритм сопоставления может выполняться безрезультатно из-за монотонности текстуры изображенных объектов. Описанные случаи могут приводить к большим погрешностям, для которых сложно произвести строгую количественную оценку.

6. Заключение

В работе была рассмотрена задача реконструкции трехмерных координат точек объектов, изображение которых получено с использованием стереокамеры. Знание преобразующих характеристик системы технического зрения позволяет в случае распознавания на стереоизображении пары пикселей, соответствующих одной точке на поверхности изображенного объекта, сформировать систему уравнений и найти решение, соответствующее минимальной погрешности. Точка, соответствующая этому решению, лежит в центре тетраэдра, вершины которого можно найти путем точного решения системы с исключением одного из уравнений.

Литература

1. *Hartley R., Zisserman A.* Multiple View Geometry in Computer Vision. — Cambridge University Press, 2004. — ISBN: 0-521-54051-8.
2. *Роджерс Д., Адамс Д.* Математические основы машинной графики. — М.: Мир, 2001. — ISBN: 5-03-002143-4.

3. *Grodecki J., Dial G.* Block Adjustment of High-Resolution Satellite Images Described by Rational Polynomials // Photogrammetric Engineering & Remote Sensing. — 2003. — Vol. 69. — No. 1. — January 2003. — P. 59–68.
4. *Амелькин С.А., Трушков В.В., Хачумов В.М.* Оценка точности восстановления трехмерных координат в системе технического зрения // Авиакосмическое приборостроение. — 2010. — №10. — С. 3–8.

UDC 681.513.7

Evaluation of the reconstruction precision of coordinates in modeling tree-dimensional objects using stereo images

D. T. Nguen*, M. B. Fomin*, V. M. Khachumov*

** Department of Information Technologies
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

The need for reconstruction of three-dimensional coordinates arises in pattern recognition, in which you want to restore the form of the object that is depicted. Machine vision system model, describing the formation of a stereo pair of images, can be used to solve this problem. The parameters of this model are determined by the matrices, which specify transformation of the homogeneous coordinates of the scene. Calibration of the model can be performed using several test images at which six points that correspond to known points on the surface of depicted object are recognized. The precision of reconstructing the points' coordinates on the surface is determined mainly by the precision of the machine vision system model calibration. Estimation of errors allows building the tetrahedron, inside which lies the point, corresponding to the detected point of the stereo image.

Keywords: stereo image, stereo camera calibration, stereographic projection.

UDC 532.5

Filtration Flow in Porous Medium: Cylindrical and Radial Geometry

Yu. P. Rybakov

*Department of Theoretical Physics and Mechanics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

Abstract. We study the hydrodynamics of flow in porous medium modelling the grain filling in filters. Using the lattice approximation, we derive the structure of the current in porous medium and obtain the transverse diffusion coefficient, which proves to be proportional to the diameter d of the grain. Solving the resulting continuity equation, one can explain the so-called “near-wall effect” resulting in large value of velocity near the wall. Finally, the filtration coefficient is found for two kinds of filters: cylindrical and radial ones.

Keywords: porous medium, filtration, hydrodynamics, diffusion, near-wall effect.

1. Introduction. Lattice approximation and continuous limit

The main difficulty in the filtration process seems to be the “near-wall effect” [1, 2], that is the anomalously large value of flow velocity near the wall due to more large value of the gap between the wall and the grains, the effectiveness of the filtration being decreasing. In order to take this effect into account, let us first consider the discrete variant of the mass conservation equation and number the lattice cells by the indices i, j (transverse to the flow direction) and k (along the flow), the corresponding Cartesian coordinates being x, y and z , respectively. Let us denote the local stream of the fluid by $G_{ijk} = S_0 u_{ijk}$, where u_{ijk} is the velocity of the flow and S_0 is the area of the gap between the grains, i. e. lattice spacing squared. Therefore, the conservation law reads

$$G_{ijk} = rG_{ijk-1} + p(G_{i-1jk-1} + G_{i+1jk-1}) + q(G_{ij-1k-1} + G_{ij+1k-1}), \quad (1)$$

where the branching coefficients r, p, q are introduced and it is supposed that $p = q$ due to the x, y symmetry of the flow. Inserting (1) into the conservation equation

$$\sum_{ij} G_{ijk} = \sum_{ij} G_{ijk-1}, \quad (2)$$

one immediately gets the following constraint on the branching coefficients:

$$r + 4p = 1. \quad (3)$$

Identifying now the lattice spacing with the size d of the grain, it can be proved through (1), (2), (3) that in continuous limit the following differential equation holds:

$$\operatorname{div}(r\vec{u}) = d\partial_x(p\partial_x u_z) + d\partial_x(p\partial_x u_z). \quad (4)$$

One can rewrite the equation (4) in the form of the stationary conservation law:

$$\operatorname{div}\vec{j} = 0, \quad (5)$$

where the components of the current \vec{j} in cylindrical coordinates ρ, z read:

$$j_\rho = ru_\rho - D\partial_\rho u_z, \quad j_z = ru_z, \quad (6)$$

and the transverse diffusion coefficient is introduced:

$$D = pd. \quad (7)$$

Taking into account that $p = 0$ at the wall, one can easily deduce from (5), (6) and (7) the specific behavior of the fluid velocity near the wall.

2. “Near-wall effect”, velocity profile for two geometries

To find the velocity profile, let us first consider the flow in the cylindrical tube of the radius a . Suppose also that $u_\rho \ll u_z = u$ and $D \approx D_0 = \text{const}$ in the center of the tube ($\rho \rightarrow 0$), but near the wall ($\rho \rightarrow a$) one could expect the behavior of the form:

$$D = D_0(a - \rho)/d, \quad (8)$$

if $a - \rho \sim d$. Thus, the velocity $u(\rho, z)$ satisfies the equation

$$\partial_z(ru) - \frac{1}{\rho}\partial_\rho(D\rho\partial_\rho u) = 0, \quad (9)$$

where $D = D(\rho)$, $r = r(\rho)$. Let us solve the equation (9) by the separation of variables:

$$u = \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\lambda_n z) R_n(\rho), \quad (10)$$

where $z > 0$ corresponds to the direction of the flow. At $\rho \rightarrow 0$ one easily finds

$$R_n = R_n^- = C_n J_0(k_n \rho), \quad k_n^2 = \lambda_n \frac{r_0}{D_0}, \quad r_0 = r(0), \quad C_n = \text{const},$$

with J_0 standing for the Bessel function. However, at $\rho \rightarrow a$ one gets

$$\partial_\rho [D_0 \rho (a - \rho) \partial_\rho R_n^+] + d \lambda_n \rho r(\rho) R_n^+ = 0,$$

where

$$r(\rho) = 1 - \frac{4D_0}{d^2} (a - \rho).$$

In the first approximation one finds

$$R_n = R_n^+ \approx B_n \left(1 - \frac{dk_n^2}{r_0} (a - \rho) \right), \quad B_n = \text{const},$$

where

$$B_n \approx C_n J_0(k_n a), \quad J_1(k_n a) = 0. \quad (11)$$

As follows from (10) and (11), the main contribution to the velocity profile is given by the first eigenfunction with $k_1 a \approx 3, 8317$.

Let us now consider the radial flow, for which the components of the current \vec{j} in cylindrical coordinates are given by the formulas similar to (6):

$$j_\rho = r u_\rho, \quad j_z = r u_z - D \partial_z u_\rho,$$

with the stream conservation equation reading:

$$\partial_z (r u_z) + \frac{1}{\rho} \partial_\rho (r \rho u_\rho) - \partial_z (D \partial_z u_\rho) = 0.$$

If one supposes that $u_z \ll u_\rho = u$ and $D = D_0 = \text{const}$ at $z \rightarrow 0$, then at $z - l \sim d$ one can expect the form of $D(z)$ similar to (8):

$$D = D_0(l - z)/d,$$

with $u(\rho, z)$ satisfying the equation

$$\frac{1}{\rho} \partial_\rho (r(z) \rho u) - \partial_z (D(z) \partial_z u) = 0. \quad (12)$$

Solution to (12) can be found by the separation of variables:

$$u = \sum_{n=1}^{\infty} Z_n(z) \frac{1}{\rho} \exp(-\lambda_n \rho),$$

where $\rho \geq \rho_0 > 0$, $z \in [-l, l]$. If $z \rightarrow 0$, one easily finds that

$$Z_n = Z_n^- = C_n \cos(k_n z), \quad k_n^2 = \lambda_n \frac{r_0}{D_0}.$$

However, at $z \rightarrow l$ one obtains the equation

$$[D(z)Z_n']' = -\lambda_n Z_n$$

with the following behavior of its solution:

$$Z_n = Z_n^+ = B_n \left[1 - \lambda_n \frac{d}{D_0} (l - z) \right].$$

The smooth matching of the functions Z_n^- and Z_n^+ gives the conditions:

$$\sin(k_n l) = 0, \quad B_n = (-1)^n C_n.$$

In particular, for the first mode ($n = 1$) one gets $k_1 = \pi/l$ and $B_1 = -C_1$. Thus, such a behavior of the velocity profile again illustrates the “near-wall effect”.

3. Effectiveness of the filtration process

Finally, let us estimate the so-called filtration coefficient, which is given by the ratio of the impurity concentration n for the outgoing flow to that for the incoming one. Taking into account that n satisfies the balance equation of the form

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n \vec{u}) = -\beta n,$$

where \vec{u} stands for the velocity of the fluid and β — for the absorption coefficient of the porous medium, one gets for the stationary process of filtration the following relation:

$$\operatorname{div}(n \vec{u}) = -\beta n, \tag{13}$$

For the rude estimation of the solution to (13) one can neglect the contribution of the diffusion term to the current \vec{j} , since $D \sim d$ and $\lambda_n l \sim ld/a^2 \sim d/l \ll 1$ for both kinds of filters. Therefore, for the cylindrical filter one derives from (13), in supposition that $u = u_0 = \text{const}$, the more simple relation:

$$\operatorname{div}(n \vec{u}) \approx \partial_z u_0 = -\beta n,$$

whence

$$n(z) = n_0 \exp\left(-\frac{\beta z}{u_0}\right). \tag{14}$$

Taking into account that for the radial flow the velocity appears to be inverse proportional to the radial coordinate ρ :

$$u = u_0 \rho_0 / \rho,$$

one easily finds

$$\operatorname{div}(n \vec{u}) \approx \frac{1}{\rho} \partial_{\rho}(\rho n u) = \frac{u_0 \rho_0}{\rho} \partial_{\rho} n = -\beta n,$$

whence

$$n(\rho) = n_0 \exp \left[\frac{\beta}{2u_0 \rho_0} (\rho_0^2 - \rho^2) \right]. \quad (15)$$

Comparing the formulas (14) and (15) giving the expressions for the filtration coefficient, one can easily see that for $\rho \gg \rho_0$ the radial filter proves to be more effective than the cylindrical one.

4. Conclusions

Studying the filtration process, we describe the flow in the porous medium by the diffusion equation for the velocity, with the diffusion coefficient being proportional to the grain diameter. This result reveals a simple mechanism generating the well-known “near-wall effect” in filters. Finally, we estimate the effectiveness of the filtration process in the filters of two possible geometries: cylindrical and radial ones, the latter type proving to be more effective.

References

1. *Rybakov Yu. P., Shikin G. N.* Flow in tube with grain filling: near-wall effect//Proc. of the 16th Intern. Conference “Mathematical Methods in Techniques and Technologies (MMTT-16) — St-Petersburg: 2003. — Vol. 1. — P. 138–139.
2. *Lukerchenko V. N., Maslov D. N., Rybakov Y. P., Shabalina T. M., Shikin G. N., Yanushkevich V. A.* Electric circuit model of hydrodynamic flows in porous medium//In: *Mathematical Models of Non-linear Phenomena, Processes and Systems: From Molecular Scale to Planetary Atmosphere.* Editors: A. B. Nadykto, L. A. Uvarova et al.—1983. Nova Science Publishers. Inc. — P. 217–224.

UDC 532.5

Motion of a Small Rigid Spinning Sphere in Shear Flow of Viscous Fluid

Yu. P. Rybakov

*Department of Theoretical Physics and Mechanics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

Abstract. The Rubinow–Keller and Maxey–Riley method of estimating the force and the torque acting on a small rigid spinning spherical particle moving in viscous Navier–Stokes fluid is generalized to the case of shear flow and arbitrary Reynolds number. We represent the velocity of the flow near the particle as solid body part and small perturbation. As for the velocity far from the particle, it includes a steady external shear flow part and again small perturbation. We use quadratic polynomial approximation for the small velocity parts and insert it in matching condition at some intermediate spherical surface. It appears that the force and the torque acting on the particle depend only on linear parts of the perturbative velocity. The force parallel to the angular velocity of the particle proves to contain the oscillatory part, with the frequency being proportional to the gradient of the external steady velocity.

Keywords: viscous fluid, spinning particle, shear flow.

1. Introduction

The equations of motion for small spinning grains in viscous fluid flow were investigated in numerous papers [1, 2]. The main approach was based on the small Reynolds number approximation. We don't use this supposition and suggest the polynomial development of the flow velocity near the particle. As a result the linearization procedure appears to be effective both in the nearest domain and far from the particle. General formulae will be given for the force \mathbf{F} and the torque \mathbf{T} acting on the particle. In the sequel we use the following notations:

a – radius of the sphere particle; $\xi(t)$ – radius-vector of its center,
 $\Omega(t)$ – its angular velocity; $\mathbf{V}(t) = \dot{\xi}(t)$ – velocity of its center,
 $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ – Cartesian coordinate radius-vector;
 $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ – steady fluid velocity; $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ – perturbed fluid velocity,
 S – the particle surface; $\mathbf{a} = \mathbf{r} - \xi(t)$ – relative radius-vector,
 \mathbf{n} – the unit normal vector on the surface S ; ρ – fluid density ,
 μ – dynamical viscosity; $\nu = \mu/\rho$ – kinematic viscosity,
 σ_{ik} – the stress tensor of the fluid; p – the pressure in the fluid.

2. Main equations

The Navier–Stokes equations for the viscous fluid read:

$$\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p / \rho + \nu \Delta \mathbf{v}, \quad (1)$$

with the condition of incompressibility

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0. \quad (2)$$

We divide the space out of the sphere particle into two domains:

$$I = \{a \leq |\mathbf{r} - \xi(t)| \leq r_0\}, \quad II = \{r_0 \leq |\mathbf{r} - \xi(t)| \leq \infty\},$$

with some parameter $r_0 \sim a$. In the domain I one can put

$$\mathbf{v} = \mathbf{U} + \mathbf{w}_1, \quad (3)$$

where \mathbf{U} stands for

$$\mathbf{U} = \mathbf{V} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{a} \quad (4)$$

and it is supposed that

$$|\mathbf{w}_1| \ll |\mathbf{U}|. \quad (5)$$

It can be seen that (4) corresponds to solid body motion of the fluid.

Inserting (3) into (1), in view of the restriction (5) one can linearize the equation (1) in the domain I :

$$\partial_t \mathbf{w}_1 + (\mathbf{w}_1 \nabla) \mathbf{U} + (\mathbf{U} \nabla) \mathbf{w}_1 - \nu \Delta \mathbf{w}_1 = -\nabla p_1 / \rho - \partial_t \mathbf{U} - (\mathbf{U} \nabla) \mathbf{U}, \quad (6)$$

with the trivial boundary condition on the surface of the particle:

$$\mathbf{w}_1|_S = 0.$$

As for the domain II , one can put

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} + \mathbf{w}_2, \quad (7)$$

with the natural restriction

$$|\mathbf{w}_2| \ll |\mathbf{u}|. \quad (8)$$

Inserting (7) into (1), one can linearize that equation due to (8):

$$\partial_t \mathbf{w}_2 + (\mathbf{w}_2 \nabla) \mathbf{u} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{w}_2 - \nu \Delta \mathbf{w}_2 = -\nabla p_2 / \rho - (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u}. \quad (9)$$

Taking into account that $\operatorname{div} \mathbf{U} = \operatorname{div} \mathbf{u} = 0$, one also derives from (2) the similar equations:

$$\operatorname{div} \mathbf{w}_1 = \operatorname{div} \mathbf{w}_2 = 0, \quad (10)$$

with the natural boundary and matching conditions for the velocity, pressure and their normal derivatives:

$$(1 + \varkappa \partial_n)(\mathbf{w}_1 + \mathbf{U} - \mathbf{w}_2 - \mathbf{u})|_{r_0} = 0, \quad (1 + \varkappa \partial_n)(p_1 - p_2)|_{r_0} = 0, \quad (11)$$

where \varkappa is an arbitrary parameter. In particular, one can search for the solution to (6) in the form of the polynomial decomposition:

$$w_{1i} \approx A_i + B_{ik}a_k + C_{ijk}a_ja_k, \quad (12)$$

with coefficients vanishing on S and being some functions of time t and $|\mathbf{a}|$, and use (12) to calculate the stress tensor

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \mu (\partial_i v_j + \partial_j v_i). \quad (13)$$

Using (12) and (13), one can obtain the force \mathbf{F} acting on the particle:

$$F_i = \oint_S n_j \sigma_{ij} dS = \frac{4\pi}{3} a^3 (-\partial_i p + \mu \Delta v_i)_0 \approx \frac{4\pi}{3} a^3 \left(-\partial_i p + \frac{3\mu}{a} A'_i \right)_0, \quad (14)$$

where the prime denotes the radial derivative and the subscript “0” stands for the mean value of the corresponding function in the particle domain. The latter value, due to small size of the particle, can be obtained by extrapolation. Similarly, one can get the torque \mathbf{T} :

$$T_i = a \epsilon_{ijk} \oint_S n_j \sigma_{kl} n_l dS \approx \mu a^2 \epsilon_{ijk} B'_{kl} \oint_S n_j n_l dS = \frac{4\pi}{3} a^4 \mu \epsilon_{ijk} B'_{kj}. \quad (15)$$

Denoting the mass of the particle by m_p , one deduces from (14) and (15) the following equations of motion for the spherical grain:

$$m_p \frac{dV_i}{dt} \approx \frac{4\pi}{3} a^2 (-a \partial_i p + 3\mu A'_i)_0; \quad m_p \frac{d\Omega_i}{dt} \approx \frac{10\pi}{3} a^2 \mu \epsilon_{ijk} B'_{kj}.$$

3. Structure of Solution in the Domain I

In the domain I we use the first three terms in the decomposition (12) and the analogous one for the pressure:

$$p_1 \approx P_0 + P_k a_k + Q_{kl} a_k a_l, \quad (16)$$

where the coefficients are tensor functions of $|\mathbf{a}|$ and t with the evident restrictions:

$$C_{ikl} = C_{ilk}, \quad C_{ikk} = 0, \quad Q_{ik} = Q_{ki}, \quad Q_{ii} = 0, \quad (17)$$

and the Einstein rule of summation over the repeating indices is used.

Now we choose the following Cartesian components for the vectors Ω and \mathbf{U} :

$$\Omega_i = \Omega(t)\delta_{i3}, \quad U_i = \dot{\xi}_i - \Omega\epsilon_{ik3}a_k,$$

where dot denotes the time derivative, and insert the decompositions (12) and (16) into (6). Using the well-known formulae:

$$\partial_t|\mathbf{a}| = -n_k\dot{\xi}_k, \quad \partial_j|\mathbf{a}| = n_j, \quad \partial_j a_k = \delta_{jk}, \quad n_k \equiv a_k/|\mathbf{a}|,$$

one gets, after multiplying (6) consequently by 1, a_j , $a_j a_k$ and averaging over the sphere $n_k n_k = 1$, the following relations:

$$\dot{A}_i - \Omega\epsilon_{ij3}A_j - \nu \left(A''_i + \frac{2}{|\mathbf{a}|}A'_i \right) = -\ddot{\xi}_i - \frac{1}{\rho} \left(P_i + \frac{1}{3}|\mathbf{a}|P'_i \right); \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \dot{B}_{ik} - \Omega(\epsilon_{jk3}B_{ij} + \epsilon_{ij3}B_{jk}) - \nu \left(B''_{ik} + \frac{4}{|\mathbf{a}|}B'_{ik} \right) = \\ = \dot{\Omega}\epsilon_{ik3} + \Omega^2\delta_{ik}^\perp - \frac{1}{\rho} \left(\frac{1}{|\mathbf{a}|}P'_0\delta_{ik} + 2Q_{ik} + \frac{2}{5}|\mathbf{a}|Q'_{ik} \right); \end{aligned} \quad (19)$$

$$\dot{C}_{isl} - \Omega(\epsilon_{ij3}C_{jst} + 2\epsilon_{j(s3}C_{ijl})) - \nu \left(C''_{isl} + \frac{6}{|\mathbf{a}|}C'_{isl} \right) = -\frac{1}{\rho|\mathbf{a}|}P'_{(l}\delta_{is)}, \quad (20)$$

where the special notations were used for the symbol $\delta_{ik}^\perp = \epsilon_{ij3}\epsilon_{kj3}$ and for the symmetrization operation: $f_{(ik)} \equiv 1/2[f_{ik} + f_{ki}]$, the tensor C_{ijk} being totally symmetric.

Executing similar procedures with the incompressibility equation (10), one easily finds the following two new relations:

$$B_{ii} + \frac{|\mathbf{a}|}{3}B'_{ii} = 0; \quad (21)$$

$$\frac{1}{|\mathbf{a}|}A'_i = -2C_{kki} - \frac{2}{5}|\mathbf{a}|C'_{kki}. \quad (22)$$

Taking into account the vanishing of the radial functions on the surface of the particle, one deduces from (21) that

$$B_{ii} = 0. \quad (23)$$

Then the equations (23), (20), and (19) imply, due to (17),

$$P'_0 = \frac{2\rho}{3}|\mathbf{a}|\Omega(\Omega + \epsilon_{jk3}B_{kj}); \quad P'_i = 0.$$

Now we search for the solutions to the equations (18)–(23) in the form of the radial polynomial decomposition:

$$Q_{ik} = \sum_{n=0}^{\infty} Q_{ik}^{(n)} x^n, \quad B_{ik} = \sum_{n=1}^{\infty} B_{ik}^{(n)} x^n, \quad C_{ijk} = \sum_{n=1}^{\infty} C_{ijk}^{(n)} x^n,$$

where $x \equiv |\mathbf{a}| - a$. In the cubic approximation one gets

$$B_{ik}^{(2)} = -\frac{2}{a} B_{ik}^{(1)} - \frac{1}{2\nu} \left[-\frac{2}{\rho} \left(Q_{ik}^{(0)} + \frac{a}{5} Q_{ik}^{(1)} \right) + \dot{\Omega} \epsilon_{ik3} + \Omega^2 \left(\delta_{ik}^{\perp} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \right) \right]; \quad (24)$$

$$6\nu B_{ik}^{(3)} = \dot{B}_{ik}^{(1)} - \Omega \left(\epsilon_{jk3} B_{ij}^{(1)} + \epsilon_{ij3} B_{jk}^{(1)} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \epsilon_{js3} B_{sj}^{(1)} \right) + \frac{20\nu}{a^2} B_{ik}^{(1)} + \frac{4}{a} \left[-\frac{1}{5\rho} \left(10Q_{ik}^{(0)} - aQ_{ik}^{(1)} - a^2 Q_{ik}^{(2)} \right) + \dot{\Omega} \epsilon_{ik3} + \Omega^2 \left(\delta_{ik}^{\perp} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \right) \right];$$

$$C_{isl}^{(2)} = -\frac{3}{a} C_{isl}^{(1)}; \quad (25)$$

$$C_{isl}^{(3)} = \frac{7}{a^2} C_{isl}^{(1)} + \frac{1}{6\nu} \left[\dot{C}_{isl}^{(1)} - \Omega \left(\epsilon_{ij3} C_{jsl}^{(1)} + 2\epsilon_{j(s3} C_{ijl}^{(1)} \right) \right]. \quad (26)$$

Inserting the expressions $C_{isl}^{(n)}$ from (25) and (26) into (22), one derives

$$A_i \approx -\frac{1}{5} \left[ax(2a+x)C_{kki}^{(1)} + ax^2 C_{kki}^{(1)} + 2x^3 \left(-7C_{kki}^{(1)} + a^2 C_{kki}^{(3)} \right) \right].$$

Inserting the latter expression into (18), one obtains the following relations:

$$\begin{aligned} \ddot{\xi}_i + \frac{P_i}{\rho} &= -\frac{6a\nu}{5} C_{kki}^{(1)}; \\ \epsilon_{ij3} C_{kkj}^{(1)} &= \epsilon_{kj3} C_{jki}^{(1)}. \end{aligned} \quad (27)$$

The relation (27) is equivalent to $C_{kkj}^{(1)} = 0$ for $j = 1, 2$.

4. Structure of Solution in the Domain II

In the domain II we consider the simplest steady shear flow of the form $u_1 = \Lambda x_2 + u_0$, where Λ stands for the constant velocity gradient and u_0 is the constant velocity. In this case the equations (9) take the form:

$$\partial_t w_{2i} + (\Lambda x_2 + u_0) \partial_1 w_{2i} + \Lambda \delta_{i1} w_{22} - \nu \Delta w_{2i} = -\frac{1}{\rho} \partial_i p_2. \quad (28)$$

In much the same way as in the previous section, we insert into (28) the polynomial decompositions of the form:

$$w_{2i} \approx A_i^* + B_{ik}^* a_k + C_{ijk}^* a_j a_k; \quad p_2 \approx P_0^* + P_k^* a_k + Q_{kl}^* a_k a_l.$$

As a result we obtain the following equations for the radial functions:

$$\begin{aligned} \dot{A}_i^* - B_{ik}^* \dot{\xi}_k - \frac{|\mathbf{a}|}{3} B_{ik}^* \dot{\xi}_k + \frac{\Lambda}{3} \bar{\xi}_2 |\mathbf{a}| B_{i1}^* + (\Lambda \xi_2 + u_0) B_{i1}^* + \frac{2\Lambda}{15} |\mathbf{a}|^3 C_{i12}^* + \\ + \frac{2\Lambda}{3} |\mathbf{a}|^2 C_{i12}^* + \Lambda \delta_{i1} A_2^* - \nu \left(A_i^{*''} + \frac{2}{|\mathbf{a}|} A_i^{*'} \right) = -\frac{1}{\rho} \left(P_i^* + \frac{|\mathbf{a}|}{3} P_i^{*'} \right); \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \dot{B}_{ik}^* - \frac{1}{|\mathbf{a}|} A_i^{*'} - 2\dot{\xi}_s \left(C_{iks}^* + \frac{1}{5} |\mathbf{a}| C_{iks}^{*'} \right) + \Lambda \left[B_{i1}^* \delta_{k2} + B_{2k}^* \delta_{i1} \right] + \\ + \Lambda \left[\bar{\xi}_2 \left(\frac{1}{|\mathbf{a}|} A_i^{*'} \delta_{k1} + C_{ik1}^* + \frac{|\mathbf{a}|}{5} C_{ik1}^{*'} \right) + \frac{|\mathbf{a}|}{5} \left(B_{i1}^* \delta_{k2} + B_{i2}^* \delta_{k1} \right) \right] - \\ - \nu \left(B_{ik}^{*''} + \frac{4}{|\mathbf{a}|} B_{ik}^{*'} \right) = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{1}{|\mathbf{a}|} P_0^* \delta_{ik} + 2Q_{ik}^* + \frac{2}{5} |\mathbf{a}| Q_{ik}^{*'} \right); \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_{ikl}^* - \frac{1}{|\mathbf{a}|} B_{i(k} \dot{\xi}_{l)} + \Lambda \left[C_{2kl}^* \delta_{i1} + 2C_{i(k1}^* \delta_{l)2} + \frac{1}{|\mathbf{a}|} \left(A_i^{*'} \delta_{(k1} \delta_{l)2} + \bar{\xi}_2 B_{i(k}^* \delta_{l)1} \right) \right] + \\ + \frac{2}{7} |\mathbf{a}| \left(C_{i2(k}^* \delta_{l)1} + C_{i1(l}^* \delta_{k)2} \right) \right] - \nu \left(C_{ikl}^{*''} + \frac{6}{|\mathbf{a}|} C_{ikl}^{*'} \right) = -\frac{1}{\rho |\mathbf{a}|} P_{(k}^* \delta_{il)}, \end{aligned}$$

where $\bar{\xi}_2 = \xi_2 + u_o/\Lambda$. Finally, the incompressibility equation (10) gives the relations similar to (21) and (22):

$$B_{ii}^* + \frac{|\mathbf{a}|}{3} B_{ii}^{*'} = 0; \quad (31)$$

$$\frac{1}{|\mathbf{a}|} A_i^{*'} = -2C_{kki}^* - \frac{2}{5} |\mathbf{a}| C_{kki}^{*'}. \quad (32)$$

From (31) and (21) one deduces, in view of matching condition (11), that

$$B_{ii}^* = 0.$$

Taking into account (30), (31) and (32), one obtains from (29), (30) and (31) the following relations containing the radial gradient of pressure:

$$\begin{aligned} \Lambda \left[B_{12}^* + B_{21}^* + \frac{|\mathbf{a}|}{5} (B_{12}' + B_{21}') \right] &= -\frac{3}{\rho|\mathbf{a}|} P_0^{*'}; \\ \Lambda \left[2C_{i12}^{*'} + \frac{4|\mathbf{a}|}{7} C_{i12}^{*''} + \frac{\bar{\xi}_2}{|\mathbf{a}|} B_{i1}^{*'} \right] - \frac{1}{|\mathbf{a}|} B_{ik}^{*'} \dot{\xi}_k &= -\frac{1}{\rho|\mathbf{a}|} P_i^{*'}; \\ \dot{A}_i^* - B_{ik}^* \dot{\xi}_k + \Lambda \left(A_2^* \delta_{i1} + \bar{\xi}_2 B_{i1}^* - \frac{2}{35} |\mathbf{a}|^3 C_{i12}^{*'} \right) - \\ &\quad - \nu \left(A_i^{*''} + \frac{2}{|\mathbf{a}|} A_i^{*'} \right) = -\frac{1}{\rho} P_i^*. \quad (33) \end{aligned}$$

Now we search for the solutions to the equations (29)–(33) in the form of decompositions in decreasing degrees of $|\mathbf{a}|$:

$$\begin{aligned} P_0^* &= \sum_{n=0}^{\infty} P_0^{*(n)} |\mathbf{a}|^{-n}; & P_i^* &= \sum_{n=2}^{\infty} P_i^{*(n)} |\mathbf{a}|^{-n}; & Q_{ik}^* &= \sum_{n=3}^{\infty} Q_{ik}^{*(n)} |\mathbf{a}|^{-n}; \\ A_i^* &= \sum_{n=1}^{\infty} A_i^{*(n)} |\mathbf{a}|^{-n}; & B_{ik}^* &= \sum_{n=2}^{\infty} B_{ik}^{*(n)} |\mathbf{a}|^{-n}; & C_{ikl}^* &= \sum_{n=3}^{\infty} C_{ikl}^{*(n)} |\mathbf{a}|^{-n}, \end{aligned}$$

with the coefficients depending on time t . Thus, the relations similar to (24)–(26) arise. In particular, putting $n = 2$ one finds in the first approximation the following nontrivial tensor components:

$$B_{31}^{*(2)} = \epsilon \cos(\omega t) + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta \sin(\omega t); \quad B_{32}^{*(2)} = \delta \cos(\omega t) - \sqrt{\frac{3}{2}} \epsilon \sin(\omega t),$$

with ϵ , δ being arbitrary integration constants and ω standing for the frequency

$$\omega = \frac{\sqrt{6}}{5} \Lambda.$$

Substituting the solutions found above into the matching conditions (11) one obtains the continuity relations for the decomposition coefficients considered as radial functions defined on the matching sphere $|\mathbf{a}| = r_0(t)$.

5. Conclusions

Using polynomial decompositions of the viscous fluid velocity in the vicinity of small rigid particle moving in the shear flow, we found the approximate expressions for the pressure and velocity and calculated the

force and the torque acting on the particle. The force parallel to the angular velocity of the particle proves to contain the oscillatory part, with the frequency being proportional to the gradient of the external steady velocity.

References

1. *Rubinow S. I. and Keller J. B.* The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid//J. Fluid Mech. — 1961. — Vol. 11. — P. 447–459.
2. *Maxey M. R. and Riley J. J.* Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow//Phys. Fluids. — 1983. — Vol. 28, no. 4. — P. 883–889.

UDC 532.5

Pulsating Flow in Blood Vessel with a Clot

Yu. P. Rybakov, K. I. Khryapin, N. V. Semenova

*Department of Theoretical Physics and Mechanics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

Abstract. The mathematical model is suggested describing a typical clinical situation when a clot in blood vessel is detected, the problem being to estimate the time interval between the drug injection and its action on the clot. We consider pulsating blood flow in cylindrical vessel with variable boundary, the Navier–Stokes equations being used for simplifying the problem. Taking into account the incompressibility of the liquid in question, we introduce the current function to satisfy the continuity equation in axially symmetric case. In the vicinity of the axis we search for the solution to the Navier–Stokes equations in the polynomial form with respect to the radial coordinate, the coefficients depending on the time and the longitudinal coordinate not surpassing the length of the vessel. The fluid velocity is supposed to be periodic in time. The main difficulty concerns the variable form of the vessel boundary consistent with the flow and harmonic in time, the small periodic variation being considered as a perturbation. Finally, the approximate expression for the range of time in question is obtained.

Keywords: blood vessel, clot, Navier–Stokes equations.

1. Introduction. Main equations

The blood belonging to a class of non-Newtonian liquids, we admit, however, as a simplifying hypothesis that its flow can be described by the Navier–Stokes equations for the incompressible viscous liquid [1, 2]. Let us consider a piece of the cylindrical blood vessel with the length l and the radius R_0 , its boundary wall being flexible and changing the form in accordance with the character of the flow. Supposing the axial symmetry of the flow, we use the cylindrical coordinates r , $\phi \in [0, 2\pi]$, $z \in [0, l]$ and adopt the following form of the boundary wall:

$$F(t, r, z) \equiv r - R(t, z) = 0, \quad (1)$$

where the unknown function R depends on the time t and the longitudinal coordinate z . In view of the axial symmetry the velocity \mathbf{u} of the liquid has the components:

$$\mathbf{u} = (u_r, 0, u_z).$$

Taking into account that the points of the boundary (1) and those of the liquid have the same velocity, one finds from (1) the equation for the function $R(t, z)$ [1]:

$$\frac{dF}{dt} = (u_r - u_z \partial_z R - \partial_t R)|_{F=0} = 0. \quad (2)$$

Now let us consider the Navier–Stokes equations in cylindrical coordinates:

$$\partial_t u_r = -(\mathbf{u}\nabla)u_r - \frac{1}{\rho} \partial_r p + \nu \left(\Delta u_r - \frac{1}{r^2} u_r \right), \quad (3)$$

$$\partial_t u_z = -(\mathbf{u}\nabla)u_z - \frac{1}{\rho} \partial_z p + \nu \Delta u_z, \quad (4)$$

where p stands for the pressure, ρ — for the constant density, ν — for the kinematic viscosity and the following operators are used:

$$(\mathbf{u}\nabla) = u_r \partial_r + u_z \partial_z, \quad \Delta = \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \partial_z^2.$$

Excluding the pressure p between the equations (3) and (4), one converts them to the form:

$$\begin{aligned} \partial_t (\partial_z u_r - \partial_r u_z) = \partial_r (\mathbf{u}\nabla)u_z - \partial_z (\mathbf{u}\nabla)u_r + \\ \nu \left(\Delta \partial_z u_r - \frac{1}{r^2} \partial_z u_r - \partial_r \Delta u_z \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Now we take into account the incompressibility condition

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = \frac{1}{r} \partial_r (r u_r) + \partial_z u_z = 0,$$

which can be solved by introducing the Stokes current (or stream) function $\psi(t, r, z)$:

$$u_r = \frac{1}{r} \partial_z \psi \equiv \frac{1}{r} \psi_z, \quad u_z = -\frac{1}{r} \partial_r \psi \equiv \frac{1}{r} \psi_r. \quad (6)$$

Inserting (6) into (5), one gets the equation for ψ :

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\psi_{rr} + \psi_{zz} - \frac{1}{r} \psi_r \right) = \frac{1}{r} (\psi_r \partial_z - \psi_z \partial_r) (\psi_{rr} + \psi_{zz}) + \\ \frac{1}{r^2} [\psi_z (3\psi_{rr} + 2\psi_{zz}) - \psi_r \psi_{rz}] - \frac{3}{r^3} \psi_r \psi_z + \\ \nu \left[(\partial_r^2 + \partial_z^2) (\psi_{rr} + \psi_{zz}) - \frac{2}{r} (\partial_r^2 + \partial_z^2) \psi_r + \frac{3}{r^3} (r\psi_{rr} - \psi_r) \right], \end{aligned} \quad (7)$$

with the following boundary conditions being imposed:

$$u_r|_{z=0} = u_z|_{z=0} = u_r|_{r=0} = 0, \quad u_z|_{z=l, r=0} = u_0 \sin \omega t, \quad (8)$$

where ω stands for the frequency of the pulsating wave, $u_0 = \text{const}$.

2. Structure of the flow at small r

First we analyze the structure of the flow in the central region of the vessel, at $r \rightarrow 0$, supposing the following representation of the stream function:

$$\psi = \psi_1(t, z)r^2/2 + \psi_2(t, z)r^4/4 + \dots \quad (9)$$

Inserting (9) into (7), one finds the following relation:

$$4\dot{\psi}_2 + \dot{\psi}_1'' = \psi_1 (4\psi_2' + \psi_1''') + \nu (4\psi_2'' + \psi_1''''), \quad (10)$$

where dots and primes stand for ∂_t and ∂_z , respectively. To satisfy the boundary conditions (8), one can choose the function ψ_1 as follows:

$$\psi_1 = u_0 \sin \omega t (1 - \cos kz)^3, \quad (11)$$

where $k = \pi n^*/l$, $n^* = n + 1/2$, $n \in \mathbb{Z}$.

Inserting (11) into (10), one can search for ψ_2 by perturbation method with respect to small dimensionless parameter

$$\epsilon = \nu \frac{k^2}{\omega},$$

which is proportional to the kinematic viscosity ν . In the first approximation one derives from (10) that

$$\psi_2 = -\frac{1}{4}\psi_1'' + \epsilon\tilde{\psi}_2, \quad (12)$$

where $\tilde{\psi}_2$ satisfies the following equation:

$$\dot{\tilde{\psi}}_2 - \psi_1 \tilde{\psi}_2' = -\frac{\omega}{4k^2} \psi_1'''' \quad (13)$$

If one takes into account only the first mode in the time Fourier development of $\tilde{\psi}_2$, the second mode being neglected, one can obtain from (9), (12) and (13) the following structure of ψ at $r \rightarrow 0$:

$$\psi \approx \frac{r^2}{2} u_0 f(z) \sin \omega t + \frac{r^4}{4} u_0 [g(z) \sin \omega t + h(z) \cos \omega t], \quad (14)$$

where

$$\begin{aligned} f(z) &= (1 - \cos kz)^3, \\ g(z) &= -\frac{3}{4}k^2(1 - \cos kz)^2(2 + 3 \cos kz) = -\frac{1}{4}f'', \\ h(z) &= -\frac{3}{4}\epsilon k^2(1 - \cos kz)(19 + 11 \cos kz - 27 \sin^2 kz). \end{aligned}$$

3. Structure of the flow at the boundary $r \rightarrow R(t, z)$

In order to describe the flow at $r \rightarrow R(t, z)$, we deform ψ_1 in (14) by adding a small stationary part $\xi(z)$:

$$\psi \approx \frac{r^2}{2}(u_0 f \sin \omega t + \xi) + \frac{r^4}{4} \left(u_0 g \sin \omega t + u_0 h \cos \omega t - \frac{1}{4} \xi'' \right), \quad (15)$$

It appears that ξ can be found from the equation (2), if one assumes the following structure of the variable boundary:

$$R(t, z) = R_0 + a(z) \cos \omega t + b(z) \sin \omega t, \quad (16)$$

where $a(z)$ and $b(z)$ are supposed to be small with respect to R_0 . Inserting (15) and (16) into (2), one gets, after linearization with respect to a , b , and ξ , the following expressions for the functions a and b :

$$a(z) = -\frac{u_0 R_0}{2\omega} f' - \frac{u_0 R_0^3}{4\omega} g',$$

$$b(z) = \frac{u_0 R_0^3}{4\omega} h',$$

and also the differential equation for ξ :

$$\xi' - \frac{R_0^2}{8} \xi''' = \frac{u_0^2 R_0^2}{4\omega} [f' h' - h'' (f + R_0^2 g) + h (2f'' + R_0^2 g'')]. \quad (17)$$

As can be seen, the right hand side of the equation (17) represents the total derivative, that allows us to integrate it:

$$\xi - \frac{R_0^2}{8} \xi'' = \frac{u_0^2 R_0^2}{4\omega} [2f' h' - h' f + R_0^2 (h g' - h' g)], \quad (18)$$

where the boundary condition $\xi(0) = \xi''(0) = 0$ was taken into account. In view of evident inequality $k^2 R_0^2 \ll 1$ the expression (18) can be used for estimating the transport velocity in the blood vessel. For example, for $n = 1$ one finds, at the point $z = l/3$, $\cos kz = 0$, $\sin kz = 1$, and therefore, the stationary part of the liquid velocity reads

$$\xi_0 = 18.6\epsilon \frac{\pi^3 u_0^2 R_0^2}{\omega l^3}. \quad (19)$$

If one uses the following numerical values of the parameters: $\omega = 7, 3s$, $R_0 = 0.3cm$, $l = 5cm$, $u_0 = 50cm/s$, $\nu = 0.06cm^2/s$, one derives from (19) the following estimate for the time interval τ of the drug transport to the clot:

$$\tau = l/\xi_0 \approx 5s.$$

4. Conclusions

Using the perturbation method for solving the Navier–Stokes equations, we could estimate the steady part of the velocity for the pulsating flow in the blood vessel with a clot. As can be found reasonable on physical grounds, this stationary velocity proves to be proportional to the viscosity of the liquid.

References

1. *Serrin J.* Mathematical Principles of Classical Fluid Mechanics. — Berlin — Göttingen — Heidelberg: Handbuch der Physik, Band VIII/1, 1959.
2. *Pedley J. T.* The Fluid Dynamics of Large Blood Vessels. — Cambridge: Cambridge University Press, 1980.

УДК 517.93

Операторное уравнение со второй производной по времени и уравнения Гамильтона

В. М. Савчин, С. А. Будочкина

*Кафедра математического анализа и теории функций,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо-Маклая, д.6, Москва, Россия, 117198*

Аннотация. Операторное уравнение со второй производной по времени, допускающее прямую вариационную формулировку, представлено в форме уравнений Гамильтона.

Ключевые слова: потенциальный оператор, гамильтонов оператор, уравнения Гамильтона.

1. Введение

Теория гамильтоновых систем обладает достаточно действенными методами интегрирования и качественного исследования дифференциальных уравнений [1]. С помощью классического гамильтонова формализма был решен ряд конкретных задач механики. Большую роль он сыграл в определении подходов к изучению движения сложных систем различной физической природы, являющихся объектами исследований квантовой механики, статистической физики, а также при построении теории возмущений и различных вариантов методов усреднения.

Известно, что между конечномерными и бесконечномерными системами имеются значительные различия. В частности, движения последних описываются дифференциальными уравнениями с частными производными, интегро-дифференциальными уравнениями с частными производными и другими видами уравнений, а также системами таких уравнений.

Распространение методов классической гамильтоновой механики на случай бесконечномерных систем не является тривиальной задачей, поэтому проходило весьма медленно. До недавнего времени даже не существовало единого мнения о том, что считать истинной формой уравнений Гамильтона для бесконечномерных систем. Начало правильного понимания этого вопроса, связанное с определением соответствующей скобки Пуассона, заложено в работах [2, 3], во многом способствовавших развитию дальнейших исследований по уравнениям Гамильтона.

Наша цель - представить операторное уравнение со второй производной по времени в форме уравнений Гамильтона.

Будем следовать обозначениям и терминологии работ [4–6].

2. Об уравнениях Гамильтона в механике бесконечномерных систем

Изложим некоторые сведения об уравнениях Гамильтона и гамильтоновых операторах, которые будут использоваться в дальнейшем.

Пусть уравнения движения бесконечномерной системы представлены в виде

$$\frac{\partial u^i}{\partial t} = N^i(u), \quad (x, t) \in Q_T = \Omega \times (0, T), \quad i = \overline{1, n}, \quad (1)$$

где все операторы N^i не содержат операцию дифференцирования по t ; $u(x, t) = (u^1(x, t), \dots, u^n(x, t))^t$ — неизвестная вектор-функция, принадлежащая некоторому действительному линейному нормированному пространству U .

Уравнения (1) вместе с заданными краевыми условиями определяют оператор $\tilde{N} = (\tilde{N}^1, \dots, \tilde{N}^n)^t : D(\tilde{N}) \subset U \rightarrow V$ формулой

$$\tilde{N}(u) = \frac{\partial u}{\partial t} - N(u),$$

где V — некоторое действительное линейное нормированное пространство. Будем предполагать, что $U \subset V$.

Определение 1. Система уравнений (1) называется представимой в области $D(\tilde{N})$ в виде уравнений Гамильтона, если существуют:

1. билинейная форма $\Phi(\cdot, \cdot) \equiv \langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$;
2. гамильтонов оператор $G_u = (G_u^{ij})_{i,j=1}^n : D(G_u) \subset V \rightarrow V$;
3. функционал $H = H[u]$, $u \in D(\tilde{N})$, такие, что

$$N^i(u) = G_u^{ij} (\text{grad}_{\Phi} H[u])_j \quad \forall u \in D(\tilde{N}).$$

При этом функционал H называется гамильтонианом.

Действие линейного матричного оператора $G_u = (G_u^{ij})_{i,j=1}^n$ определяется формулой

$$(G_u v)^i = \sum_{j=1}^n G_u^{ij} v^j.$$

Определение 2. Линейный оператор $G_u : D(G_u) \subset V \rightarrow V$ называется гамильтоновым (относительно заданной билинейной формы Φ), если для любых $g, h, v \in D(G_u)$ выполняются условия

$$\begin{aligned} \Phi(g, G_u h) &= -\Phi(h, G_u g), \\ \Phi(v, G'_u(g; G_u h)) + \Phi(g, G'_u(h; G_u v)) + \Phi(h, G'_u(v; G_u g)) &= 0. \end{aligned}$$

Отметим, что второе условие здесь заведомо выполняется, если оператор G_u постоянный, т.е. когда G'_u является нулевым оператором.

Существование представления системы уравнений (1) в виде уравнений Гамильтона

$$\frac{\partial u^i}{\partial t} = G_u^{ij} (\text{grad}_\Phi H[u])_j, \quad i = \overline{1, n}, \quad (2)$$

при заданном операторе G_u зависит как от области определения $D(\tilde{N})$, так и от выбора билинейной формы. Поскольку выбор этих форм по структуре не ограничивается, то это может приводить к гамильтонианам, принадлежащим как эйлеровым, так и неэйлеровым классам функционалов.

Теорема 1 [7]. Предположим, что дифференцируемый по Гато оператор $N : D(N) \subset U \rightarrow V$ и обратимый гамильтонов оператор $G_u : D(G_u) \subset V \rightarrow V$ такие, что $R(G_u) \supseteq R(N)$ и билинейная форма $\langle (G_u^{-1}N)'_u g, h \rangle$ непрерывна по u в односвязной области $D(N)$. Тогда для представимости уравнений (1) в виде уравнений Гамильтона (2) необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$\langle (G_u^{-1}N)'_u g, h \rangle = \langle (G_u^{-1}N)'_u h, g \rangle \quad \forall u \in D(\tilde{N}), \quad \forall g, h \in D(\tilde{N}'_u).$$

При этом гамильтониан находится по формуле

$$H[u] = \int_{\lambda=0}^{\lambda=1} \left\langle G_{\tilde{u}(\lambda)}^{-1} N(\tilde{u}(\lambda)), \frac{\partial \tilde{u}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle \Big|_{\tilde{u}(\lambda)=u_0+\lambda(u-u_0)} d\lambda + \text{const},$$

где u_0 — фиксированный элемент из $D(\tilde{N})$.

Теорема 1 означает, что если существует указанный оператор G_u , то G_u^{-1} является вариационным интегрирующим оператором для N , поэтому методы нахождения вариационных интегрирующих операторов могут быть применены для отыскания гамильтоновых операторов.

3. О представлении операторного уравнения со второй производной по времени в форме уравнений Гамильтона

Пусть уравнения движения материальной системы представлены в операторном виде

$$N(u) \equiv P_{2u,t} u_{tt} + P_{1u,t} u_t + Q(t, u) = 0, \quad (3)$$

$$u \in D(N) \subseteq U \subseteq V, \quad t \in [t_0, t_1] \subset \mathbb{R},$$

$$u_t \equiv D_t u \equiv \frac{d}{dt} u, \quad u_{tt} \equiv \frac{d^2}{dt^2} u.$$

Здесь $\forall t \in [t_0, t_1]$, $\forall u \in U_1$ операторы $P_{i,u,t} : U_1 \rightarrow V_1$ ($i = 1, 2$) являются линейными; $Q : [t_0, t_1] \times U_1 \rightarrow V_1$ - произвольный оператор, вообще говоря, нелинейный; $D(N)$ - область определения оператора N ,

$$D(N) = \{u \in U : u(t) \in W \forall t \in [t_0, t_1], u|_{t=t_0} = \varphi_1, u|_{t=t_1} = \varphi_2, \\ u_t|_{t=t_0} = \varphi_3, u_t|_{t=t_1} = \varphi_4, \varphi_i \in U_1 (i = \overline{1,4})\}; \quad (4)$$

$U = C^2([t_0, t_1]; U_1)$, $V = C([t_0, t_1]; V_1)$, U_1, V_1 - действительные линейные нормированные пространства, $U_1 \subseteq V_1$. Множество $W \subseteq U_1$ определяется внешними связями, наложенными на систему.

Будем предполагать, что при каждом $t \in [t_0, t_1]$ и $g(t), u(t) \in U_1$ функция $P_{1u,t}g(t)$ со значениями в V_1 непрерывно дифференцируема, а $P_{2u,t}g(t)$ - дважды непрерывно дифференцируема на $[t_0, t_1]$.

Под решением задачи (3) понимается функция $u \in D(N)$, удовлетворяющая (3).

В дальнейшем для упрощения обозначений будем записывать (3) также в виде

$$N(u) \equiv P_{2u}u_{tt} + P_{1u}u_t + Q(u) = 0,$$

считая, что операторы P_{iu} ($i = 1, 2$) и Q зависят также и от t .

Операторное уравнение движения (3) может быть обыкновенным дифференциальным, дифференциальным уравнением в частных производных, интегро - дифференциальным уравнением и др., а также системой таких уравнений.

Будем предполагать, что билинейная форма

$$\Phi(\cdot, \cdot) \equiv \int_{t_0}^{t_1} \langle \cdot, \cdot \rangle dt : V \times V \rightarrow \mathbb{R} \quad (5)$$

является симметрической и невырожденной.

Теорема 2. Пусть $D_t^* = -D_t$ на $D(N'_u)$. Оператор N вида (3) является потенциальным на $D(N)$ (4) относительно билинейной формы (5) тогда и только тогда, когда операторы P_{iu} ($i = 1, 2$) и Q имеют вид

$$P_{2u} \equiv P_2 = -R_2^* - R_2, \\ P_{1u} = R_{1u}^* - R'_{1u} - 2 \frac{\partial R_2^*}{\partial t}, \\ Q(u) = \text{grad}B[u] - \frac{\partial R_1}{\partial t}(u) + \frac{\partial^2 R_2}{\partial t^2} u,$$

где

$$\Phi(R_1(u), u_t) = \int_{t_0}^{t_1} \int_0^1 \left\langle -P_{1\tilde{u}(\lambda)}(u - u_0), \frac{\partial \tilde{u}(\lambda)}{\partial t} \right\rangle d\lambda dt,$$

$$\Phi(R_2 u_t, u_t) = \int_{t_0}^{t_1} \int_0^1 \left\langle -P_2(u_t - u_{0_t}), \frac{\partial \tilde{u}(\lambda)}{\partial t} \right\rangle d\lambda dt,$$

$$B[u] = \int_0^1 \left[\langle Q(\tilde{u}(\lambda)), u - u_0 \rangle + \lambda \left\langle \frac{\partial P_{1\tilde{u}(\lambda)}}{\partial t} (u - u_0), u - u_0 \right\rangle - \right. \\ \left. - \lambda \left\langle \frac{\partial^2 P_2}{\partial t^2} (u - u_0), u - u_0 \right\rangle \right] d\lambda,$$

u_0 - фиксированный элемент из $D(N)$.

Теорема 3. Пусть оператор N (3) является потенциальным на множестве $D(N)$ (4) относительно билинейной формы (5), существует $(R_2^* + R_2)^{-1}$. Тогда уравнение (3) представимо в форме уравнений Гамильтона.

4. Выводы

В работе получены необходимые и достаточные условия потенциальности заданного оператора N . Доказано, что в этом случае рассматриваемое операторное уравнение со второй производной по времени представимо в форме уравнений Гамильтона.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 16-01-00450.

Литература

1. Козлов В. В. Симметрии, топология и резонансы в гамильтоновой механике. — Ижевск: Изд-во Удмуртского гос. университета, 1995.
2. Захаров В. Е., Фаддеев Л. Д. Уравнение Кортевега-де Фриза - вполне интегрируемая гамильтонова система // Функциональный анализ и его приложения. — 1971. — Том 5, вып. 4. — С. 18–27.
3. Gardner S. C. Korteweg-de Vries equation and generalizations. IV. The Korteweg-de Vries equation as a Hamiltonian system // J. Math. Phys. — 1971. — Vol. 12. — P. 1548–1551.
4. Савчин В. М., Будочкина С. А. О существовании вариационного принципа для операторного уравнения со второй производной по "времени" // Математические заметки. — 2006. — Том 80, вып. 1. — С. 87–94.

5. Савчин В. М., Будочкина С. А. Уравнения Гамильтона для бесконечномерных систем и их уравнения в вариациях // Дифференциальные уравнения. — 2008. — Том 44, № 4. — С. 570–573.
6. Будочкина С. А. О представлении одного операторного уравнения с первой производной по времени в форме B_u -гамильтонова уравнения // Дифференциальные уравнения. — 2013. — Том 49, № 2. — С. 175–185.
7. Савчин В. М. Математические методы механики бесконечномерных непотенциальных систем. — М.: Изд-во УДН, 1991.

UDC 517.93

An operator equation with the second time derivative and Hamiltonian equations

V. M. Savchin, S. A. Budochkina

*Department of Mathematical Analysis and Theory of Functions
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

The given operator equation with the second time derivative, admitting a direct variational formulation, is represented in the form of Hamiltonian equations.

Keywords: potential operator, Hamiltonian operator, Hamiltonian equations.

UDC 517.93, 519.62

Computer realization of variational methods for dissipative problems with nonclassical Hamilton's actions

V. M. Savchin, S. A. Budochkina

*Department of Mathematical Analysis and Theory of Functions
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

Abstract. In the frame of the Euler's functionals there may not exist solutions of the inverse problems of the calculus of variations, but if we extend the class of functionals then it could allow to get the variational formulations of given problems. There naturally arises the problem of the constructive determination of the corresponding functionals – nonclassical Hamilton's actions - and their application for the search of approximate solutions of the given boundary value problems. The main goal of the paper is to demonstrate the opportunity of effective use of such functionals for the construction of approximate solutions with the high accuracy for the given dissipative problems.

Keywords: nonpotential operators, non-Eulerian functionals, approximate solutions, dissipative problems, variational methods.

1. Introduction

An important problem in applications of variational methods is a representation of the given equations in the form of the Euler-Lagrange equations. It means the construction of the functional F_N such that its extremals are solutions of the given equations. This is known as the classical inverse problem of the calculus of variations.

In spite of the remarkable number of papers on the subject different approaches for constructing of integral variational principles for equations with nonpotential operators should be developed. They will allow to obtain so-called indirect variational formulations of given problems.

First let us introduce the following concepts of bilinear forms, Gâteaux derivatives and B_u -potential operators.

Let N be an operator such that its domain of definition $D(N) \subseteq U$ and the range of values $R(N) \subseteq V$, where U and V are real linear normed spaces, i. e.

$$N(u) = v, \quad u \in U, \quad v \in V.$$

If there exists a limit

$$\delta N(u, h) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{N(u + \varepsilon h) - N(u)\}, \quad u \in D(N), \quad (u + \varepsilon h) \in D(N),$$

then it is called the Gâteaux variation of the operator N at the point u or the first variation of the operator N at the point u .

$\delta N(u, h)$ is homogeneous relative to $h : \delta N(u, \lambda h) = \lambda \delta N(u, h)$, but the operator $\delta N(u, \cdot) : U \rightarrow V$ is not always additive relative to h .

If $\delta N(u, h)$ is a linear operator relative to h , when u is a fixed element of $D(N)$, then we say that the operator N is Gâteaux differentiable at the point u . The expression $\delta N(u, h)$ is called the Gâteaux differential and denoted by $DN(u, h)$. In this case we shall also write $DN(u, h) = N'_u h$ and say that N'_u is the Gâteaux derivative of operator N at the point u .

If N is a linear operator then $N'_u h = Nh$, i. e. the Gâteaux derivative of the linear operator coincides with it.

Further assume that for any given operator $N : D(N) \subset U \rightarrow V$ there exists its Gâteaux derivative at any point $u \in D(N)$. The domain of definition $D(N'_u)$ consists of elements $h \in U$ such that $(u + \varepsilon h) \in D(N)$ for all ε sufficiently small. In this case $h \in D(N'_u)$ is called an admissible element.

Note that for any linear operator \tilde{N}'_u which may depend on u in a nonlinear way, the Gâteaux derivative is defined by

$$\tilde{N}'_u(g; h) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\tilde{N}'_{u+\varepsilon h} g - \tilde{N}'_u g}{\varepsilon}.$$

The second Gâteaux derivative N''_u of the operator N is given by

$$N''_u(h_1, h_2) = \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^1 \partial \varepsilon^2} N(u + \varepsilon^1 h_1 + \varepsilon^2 h_2) \Big|_{\varepsilon^1 = \varepsilon^2 = 0}.$$

In the most general applications N''_u satisfies the symmetry condition

$$N''_u(h_1, h_2) = N''_u(h_2, h_1).$$

Definition 1. A mapping $\Phi : V \times U \rightarrow \mathbb{R}$ is said to be a bilinear form if it is linear relative to every argument.

Definition 2. A bilinear form $\Phi : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ is called symmetric if

$$\Phi(v, g) = \Phi(g, v) \quad \forall g, v \in V.$$

Consider a bilinear form

$$\Phi(\cdot, \cdot) \equiv \int_{t_0}^{t_1} \langle \cdot, \cdot \rangle dt : V \times U \rightarrow \mathbb{R} \quad (1)$$

such that the bilinear mapping $\Phi_1(\cdot, \cdot) \equiv \langle \cdot, \cdot \rangle$ satisfies the following conditions:

$$\langle v_1(t), v_2(t) \rangle = \langle v_2(t), v_1(t) \rangle \quad \forall v_1(t), v_2(t) \in V_1,$$

$$D_t \langle v(t), g(t) \rangle = \langle D_t v(t), g(t) \rangle + \langle v(t), D_t g(t) \rangle \quad \forall v, g \in C^1([t_0, t_1]; U_1).$$

If $v = v(x, t)$, $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, $t \in (t_0, t_1)$, $U_1 = V_1 = C(\bar{\Omega})$, then we can take for example

$$\langle v, g \rangle = \int_{\Omega} v(x, t)g(x, t) dx.$$

Definition 3. The operator $N : D(N) \subset U \rightarrow V$ is said to be B_u -potential on the set $D(N)$ relative to the bilinear form $\Phi : V \times U \rightarrow \mathbb{R}$, if there exist a functional $F_N : D(F_N) = D(N) \rightarrow \mathbb{R}$ and a linear operator $B_u : D(B_u) \subset V \rightarrow V$ such that

$$\delta F_N[u, h] = \Phi(N(u), B_u h) \quad \forall u \in D(N), \quad \forall h \in D(N'_u, B_u),$$

where $D(N'_u, B_u) = D(N'_u) \cap D(B_u)$.

If $B_u \equiv I$ is the identical operator then the operator N is called potential on $D(N)$ relative to bilinear form Φ .

The following theorem is needed for the sequel.

Theorem 1 [1]. Consider the operator $N : D(N) \subset U \rightarrow V$ and the bilinear form $\Phi : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ such that for any fixed elements $u \in D(N)$, $g, h \in D(N'_u, B_u)$ the function $\psi(\varepsilon) = \Phi(N(u + \varepsilon h), B_{u+\varepsilon h}g)$ belongs to class $C^1[0, 1]$. For N to be B_u -potential on the convex set $D(N)$ relative to Φ it is necessary and sufficient to have

$$\begin{aligned} \Phi(N'_u h, B_u g) + \Phi(N(u), B'_u(g; h)) &= \Phi(N'_u g, B_u h) + \Phi(N(u), B'_u(h; g)) \\ &\forall u \in D(N), \quad \forall g, h \in D(N'_u, B_u). \end{aligned}$$

Under this condition the functional F_N is given by

$$F_N[u] = \int_0^1 \Phi \left(N(\tilde{u}(\lambda)), B_{\tilde{u}(\lambda)} \frac{\partial \tilde{u}(\lambda)}{\partial \lambda} \right) d\lambda + F_N[u_0],$$

where $\tilde{u}(\lambda) = u_0 + \lambda(u - u_0)$, u_0 is a fixed element of $D(N)$.

In the paper we shall use notations and notions of [1–5].

2. An operator equation with the second time derivative and variational principles

Consider the following operator equation

$$N(u) \equiv P_{2u,t}u_{tt} + P_{1u,t}u_t + P_{3u,t}u_t^2 + Q(t, u) = 0, \quad (2)$$

$$u \in D(N) \subseteq U \subseteq V, \quad t \in [t_0, t_1] \subset \mathbb{R},$$

$$u_t \equiv D_t u \equiv \frac{d}{dt} u, \quad u_{tt} \equiv \frac{d^2}{dt^2} u.$$

Here $\forall t \in [t_0, t_1], \forall u \in U_1$ $P_{iu,t} : U_1 \rightarrow V_1$ ($i = \overline{1,3}$) are linear operators; $Q : [t_0, t_1] \times U_1 \rightarrow V_1$ is an arbitrary operator; $D(N)$ is the domain of definition of the operator N ,

$$D(N) = \{u \in U : u(t) \in W \forall t \in [t_0, t_1], u|_{t=t_0} = \varphi_1, u|_{t=t_1} = \varphi_2,$$

$$u_t|_{t=t_0} = \varphi_3, u_t|_{t=t_1} = \varphi_4, \varphi_i \in U_1 (i = \overline{1,4})\}; \quad (3)$$

$U = C^2([t_0, t_1]; U_1)$, $V = C([t_0, t_1]; V_1)$, U_1, V_1 are real linear normed spaces, $U_1 \subseteq V_1$. The set $W \subseteq U_1$ is defined by the external constraints imposed on the system.

Assume that for every $t \in [t_0, t_1]$ and $g(t), u(t) \in U_1$ the functions $P_{1u,t}g(t)$, $P_{3u,t}g(t)$ are continuously differentiable and $P_{2u,t}g(t)$ is twice continuously differentiable on (t_0, t_1) .

Any function $u \in D(N)$ is called a solution of problem (2) if it satisfies Eq. (2).

For notational simplicity, Eq. (2) hereafter written as

$$N(u) \equiv P_{2u}u_{tt} + P_{1u}u_t + P_{3u}u_t^2 + Q(u) = 0,$$

assuming that the operators P_{iu} ($i = \overline{1,3}$) and Q additionally depend on t .

Theorem 2. Let $D_t^* = -D_t$ on $D(N'_u, B_u)$. Operator N (2) is B_u -potential on the set $D(N)$ (3) relative to bilinear form (1) $\iff \forall u \in D(N), \forall t \in [t_0, t_1], \forall h \in D(N'_u, B_u)$ the following conditions are fulfilled on $D(N'_u, B_u)$:

$$\begin{aligned} & B_u^* P_{2u} - P_{2u}^* B_u = 0, \\ & u_t P_{3u}^* B_u - P_{2u}^{*'}(B_u(\cdot); u_t) - P_{2u}^* B'_u(\cdot; u_t) + B_u^* P_{3u}(u_t(\cdot)) = 0, \\ & -2 \frac{\partial}{\partial t} (P_{2u}^* B_u) + P_{1u}^* B_u + B_u^* P_{1u} = 0, \\ & - \frac{\partial^2}{\partial t^2} (P_{2u}^* B_u) h + [B'_u(\cdot; h)]^* Q(u) - [B'_u(h; \cdot)]^* Q(u) + \frac{\partial}{\partial t} (P_{1u}^* B_u) h + \\ & \quad + B_u^* Q'_u h - Q_u^* B_u h = 0, \\ & P_{1u}^{*'}(B_u h; u_t) + B_u^* P'_{1u}(u_t; h) - [P'_{1u}(u_t; \cdot)]^* B_u h + 2u_t \frac{\partial}{\partial t} (P_{3u}^* B_u) h + \\ & \quad + P_{1u}^* B'_u(h; u_t) - 2 \frac{\partial}{\partial t} P_{2u}^{*'}(B_u h; u_t) + [B'_u(\cdot; h)]^* P_{1u} u_t - \\ & \quad - 2 \frac{\partial}{\partial t} (P_{2u}^* B'_u(h; u_t)) - [B'_u(h; \cdot)]^* P_{1u} u_t = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & B_u^* P'_{2u}(u_{tt}; h) - P_{2u}^{*'}(B_u h; u_{tt}) - [P'_{2u}(u_{tt}; \cdot)]^* B_u h + 2u_{tt} P_{3u}^* B_u h + \\
 & + [B'_u(\cdot; h)]^* P_{2u} u_{tt} - P_{2u}^* B'_u(h; u_{tt}) - [B'_u(h; \cdot)]^* P_{2u} u_{tt} = 0, \\
 & - P_{2u}^{*''}(B_u h; u_t; u_t) + B_u^* P'_{3u}(u_t^2; h) - [P'_{3u}(u_t^2; \cdot)]^* B_u h + \\
 & + 2u_t P_{3u}^{*'}(B_u h; u_t) + [B'_u(\cdot; h)]^* P_{3u} u_t^2 - 2P_{2u}^{*'}(B'_u(h; u_t); u_t) - \\
 & - P_{2u}^* B''_u(h; u_t; u_t) + 2u_t P_{3u}^* B'_u(h; u_t) - [B'_u(h; \cdot)]^* P_{3u} u_t^2 = 0.
 \end{aligned}$$

The corresponding functional F_N is represented in the form

$$\begin{aligned}
 F_N[u] &= \int_{t_0}^{t_1} \{ \langle R_{3u}(u_t u), B_u u_t \rangle + \langle R_{2u} u_t, B_u u_t \rangle + \\
 & + \langle R_1(u), B_u u_t \rangle - \left\langle \frac{\partial}{\partial t} (B_u^* R_{2u}) u, u_t \right\rangle + \tilde{B}[u] \} dt + F_N[u_0],
 \end{aligned}$$

where

$$\Phi(R_1(u), B_u u_t) = \int_{t_0}^{t_1} \int_0^1 \left\langle -P_{1\tilde{u}(\lambda)}(u - u_0), B_{\tilde{u}(\lambda)} \frac{\partial \tilde{u}(\lambda)}{\partial t} \right\rangle d\lambda dt,$$

$$\Phi(R_{2u} u_t, B_u u_t) = \int_{t_0}^{t_1} \int_0^1 \left\langle -P_{2\tilde{u}(\lambda)}(u_t - u_{0_t}), B_{\tilde{u}(\lambda)} \frac{\partial \tilde{u}(\lambda)}{\partial t} \right\rangle d\lambda dt,$$

$$\begin{aligned}
 \Phi(R_{3u}(u_t u), B_u u_t) &= \\
 &= \int_{t_0}^{t_1} \int_0^1 \left\langle -P_{3\tilde{u}(\lambda)} \left(\frac{\partial \tilde{u}(\lambda)}{\partial t} (u - u_0) \right), B_{\tilde{u}(\lambda)} \frac{\partial \tilde{u}(\lambda)}{\partial t} \right\rangle d\lambda dt,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{B}[u] &= \int_0^1 [\langle Q(\tilde{u}(\lambda)), B_{\tilde{u}(\lambda)}(u - u_0) \rangle + \\
 & + \lambda \left\langle \frac{\partial}{\partial t} (B_{\tilde{u}(\lambda)}^* P_{1\tilde{u}(\lambda)}) (u - u_0), u - u_0 \right\rangle - \\
 & - \lambda \left\langle \frac{\partial^2}{\partial t^2} (B_{\tilde{u}(\lambda)}^* P_{2\tilde{u}(\lambda)}) (u - u_0), u - u_0 \right\rangle] d\lambda,
 \end{aligned}$$

u_0 is a fixed element of $D(N)$.

3. On performance of a variational method for some dissipative problems

Let us present the numerical performance of a variational method for a simple linear ordinary differential equation with nonpotential operator.

Let us consider the following problem

$$\begin{aligned} N(u) &\equiv u'' - 5u' + x^4 = 0, \\ x &\in [0, 1], \quad u(0) = u(1) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

By $D(N) = \{u \in C^2[0, 1] : u(0) = u(1) = 0\}$ we denote the domain of definition of the operator N .

The exact solution of problem (4) has the form

$$u(x) := \frac{434}{3125(e^5 - 1)}(1 - e^{5x}) + \frac{125x^5 + 125x^4 + 100x^3 + 60x^2 + 24x}{3125}.$$

Operator N (4) is not potential relative to the classical bilinear form

$$\Phi(v, g) = \int_0^1 v(x)g(x)dx. \quad (5)$$

There exists the variational multiplier $M(x) = e^{-5x}$ such that the operator $\tilde{N}(u) = M(x)N(u)$ is potential relative to bilinear form (5). It means that operator N (4) is B -potential on its domain of definition $D(N)$ relative to bilinear form (5), where $B = M(x)I$, I is the identical operator.

The corresponding functional of $\tilde{N}(u)$ has the form

$$F_{\tilde{N}}[u] = \int_0^1 e^{-5x} \left(-0.5 (u')^2 + x^4 u \right) dx.$$

Applying the Ritz-process [6] we find out three approximate solutions of problem (4).

The first one is

$$u_0(x) := 7.491414512583465465 \cdot 10^{-3} \cdot x \cdot (1 - x),$$

the second one -

$$\begin{aligned} u_1(x) &:= x \cdot (1 - x) \cdot \left(5.5511435176018702506 \cdot 10^{-2} \cdot x - \right. \\ &\quad \left. - 4.0678902532769005056 \cdot 10^{-3} \right), \end{aligned}$$

the third one -

$$u_2(x) := x \cdot (1 - x) \cdot (-4.336202537698754952 \cdot 10^{-2} \cdot x + 0.1610369015630196335 \cdot x^2 + 7.230056822340569444 \cdot 10^{-3}).$$

Let us choose the auxiliary operator \bar{B} of the kind $\bar{B}u(x) = u(1 - x)$ and consider the following convolution bilinear form

$$\Phi_1(v, g) = \int_0^1 v(1 - x)g(x)dx.$$

Operator N (4) is potential relative to that bilinear form and the corresponding functional has the form

$$F_N[u] = \int_0^1 (0.5u'(x)u'(1 - x) - 2.5u'(x)u(1 - x) + x^4u(1 - x)) dx.$$

Applying the Ritz-process [6] we find out three approximate solutions of problem (4).

The first approximate solution is

$$u_0(x) := \frac{1}{14} \cdot x \cdot (1 - x),$$

the second one -

$$u_1(x) := x \cdot (1 - x) \cdot \left(\frac{20}{119} \cdot x - \frac{13}{238} \right),$$

and the third one -

$$u_2(x) := x \cdot (1 - x) \cdot \left(\frac{1495}{4824} \cdot x^2 - \frac{835}{4824} \cdot x + \frac{130}{4221} \right).$$

Let us evaluate the deviations between approximate and the exact solutions in the norm of space L_2 .

First let us consider the approximate solutions, found out with the use of the classical bilinear form. Their deviations with the exact solution $u(x)$ are equal correspondingly to

$$R_0 = 6.7713069428403088645 \cdot 10^{-3},$$

$$R_1 = 3.7315363415981250298 \cdot 10^{-3},$$

$$R_2 = 1.138326186371896467 \cdot 10^{-3}.$$

The deviations of approximate solutions, found out with the use of the convolution bilinear form, with the exact solution $u(x)$ are equal correspondingly to

$$r_0 = 8.701 \cdot 10^{-3},$$

$$r_1 = 2.526 \cdot 10^{-3},$$

$$r_2 = 7.145 \cdot 10^{-4}.$$

4. Conclusions

In the paper we obtained the necessary and sufficient conditions for the given operator equation with the second time derivative to admit in general an indirect variational formulation and constructed the corresponding functional - variational principle. The results are applied for finding of approximate solutions of some boundary value problems.

Acknowledgments

The work is supported by RFBR grant No 16-01-00450.

References

1. *Savchin V. M.* Mathematical methods in the mechanics of infinite-dimensional nonpotential systems. — Univ. Druzhby Narodov, Moscow, 1991 (in Russian).
2. *Savchin V. M., Budochkina S. A.* On the structure of a variational equation of evolution type with the second t-derivative // *Differential Equations*, 2003. — Vol. 39, no. 1. — P. 127–134.
3. *Savchin V. M., Budochkina S. A.* On the existence of a variational principle for an operator equation with the second derivative with respect to "time" // *Mathematical Notes*, 2006. — Vol. 80, no. 1. — P. 83–90.
4. *Budochkina S. A., Savchin V. M.* On indirect variational formulations for operator equations // *Journal of Function Spaces and Applications*, 2007. — Vol. 5, no. 3. — P. 231–242.
5. *Budochkina S. A., Savchin V. M.* On direct variational formulations for second order evolutionary equations // *Eurasian Mathematical Journal*, 2012. — Vol. 3, no. 4. — P. 23–34.
6. *Mikhlin S. G.* Numerical performance of variational methods. — Nauka, Moscow, 1965 (in Russian).

УДК 517.9

Моделирование формы линии распространения поверхностной электромагнитной волны в планарном волноводе

И. И. Васильева*, О. Б. Гладких*

** Кафедра математического моделирования
и компьютерных технологий,
Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина,
ул. Коммунаров, д. 28, Елец, Россия, 399770*

Аннотация. Работа посвящена анализу зависимости диэлектрических свойств высокопроводящих анизотропных материалов от величины и направления магнитного поля. Рассмотрена нелинейная модель распространения поверхностной электромагнитной волны в планарном волноводе из висмута, находящегося в квантующем магнитном поле при температуре жидкого гелия. Выведено дисперсионное уравнение волны для каждого направления (бинарного, биссекторного и тригонального). Получена формула для расчета прохождения субмиллиметрового излучения через симметричную полосковую линию в зависимости от величины магнитного поля. Предложен алгоритм численного решения с помощью пакета компьютерной математики Maple и разработаны сопутствующие приложения для оцифровки экспериментальных данных в графическом виде. Полученные результаты позволяют применять данную методику для широкого класса исследовательских задач и могут быть использованы для создания активных волноводных сред на базе симметричной полосковой линии, управляемых магнитным полем.

Ключевые слова: планарный волновод, электромагнитные волны в квантующем магнитном поле, алгоритм численного решения, магнитооптический эффект, коэффициент пропускания.

1. Введение

Методы математического моделирования позволяют приобрести информацию, которую невозможно получить из экспериментального материала прямым методом. В задачах математического моделирования физических процессов актуальным является исследование зонной структуры висмута [1–5]. Интерес к висмуту и его сплавам обусловлен рядом электронных свойств – малыми значениями энергетических параметров зонного спектра, малыми концентрациями носителей тока, малыми эффективными массами. Резонансные оптические переходы носителей заряда на уровнях Ландау в кристаллах висмута дают уникальную информацию о закономерностях электронного энергетического спектра в широком диапазоне температур. Большой интерес к этому материалу обусловлен тем, что он служит базой для изготовления фотоприемников и быстродействующих модуляторов.

Полуметалл висмут из-за малости эффективных циклотронных масс дает уникальную возможность проводить эксперимент в магнитных полях, достижимых с применением относительно простого оборудования. Особенности энергетического спектра висмута делают его модельным материалом при исследовании гальваномагнитных свойств твердых тел. Электронные свойства полуметалла висмута подробно изучались Чоом [1].

Висмут является одним из первых полуметаллов, для которого были проведены теоретические исследования энергетических зон и поверхности Ферми в приближении свободных электронов. Проблему определения локализации носителей заряда в висмуте решил Феррейра с помощью расчета уровней энергии зоны Бриллюэна по методу присоединенных плоских волн. Было показано, что поверхность Ферми висмута состоит из трех электронных участков и одного дырочного. Объем трех электронных участков равен дырочному. Точно такое же расположение энергетических экстремумов было предложено в более ранней работе Абрикосовым и Фальковским [2] на основе предложенной ими деформационной модели. Теоретические выводы нашли подтверждение в экспериментальных работах по исследованию гальваномагнитных эффектов и квантовых осцилляций.

Общее представление о зонной структуре висмута было получено Голиным [3] с помощью расчета в псевдопотенциальном приближении. В этом расчете использовался псевдопотенциал с пятью параметрами.

Последовательное сопоставление теории с экспериментом потребовало использования машинного расчета. Такое сравнение было проведено в работе Фальковского и Разиной [4]. Определено, что экспериментальные данные согласуются с теоретическими в пределах 10-20%. Однако, указанная модель энергетического спектра имела ряд недостатков.

Особенностью изучаемого в данной работе физического эксперимента является то, что магнитное поле модифицирует электронный энергетический спектр в систему энергетических уровней Ландау. Изучение переходов между уровнями позволяет получить уникальную информацию о параметрах спектра. Применение системы, состоящей из двух трансляционно-симметричных монокристаллов, позволяет получить интенсивные магнитооптические спектры, пригодные для исследования формы зависимости интенсивности полезного сигнала от величины индукции магнитного поля. Математическая обработка экспериментальных данных методом моделирования формы линии магнитооптических спектров позволила реализовать преимущества осцилляционного эксперимента, в котором проявляются закономерности взаимодействия электромагнитного излучения с анизотропной плазмой носителей заряда, находящихся в квантующем магнитном поле.

Для описания зонной структуры висмута в рамках кр-приближения метода эффективной массы используют

эллипсоидально-параболическую модель Шенберга, эллипсоидально-непараболическую модель Лэкса [5], неэллипсоидально-непараболическую модель Коэна-Абрикосова-Макклюра и Чоя [1, 2, 6]. Самая общая модель энергетического спектра носителей тока была предложена Макклюром и Чоём.

2. Основная часть

Магнитооптический эксперимент, проведенный под руководством Кондакова [7], заключался в измерении пропускания электромагнитного излучения симметричной полосковой линией (СПЛ) со стенками из висмута, помещенной при температуре $T = 4,2$ К в магнитное поле, создаваемое сверхпроводящим соленоидом. В качестве источника излучения использовался лазер с длиной волны $\lambda = 337$ мкм. С помощью высокочувствительного болометра измерялась интенсивность излучения, прошедшего через зазор между двумя трансляционно-симметричными монокристаллами висмута. Экспериментально наблюдались осцилляции пропускания симметричной полосковой линии. Схема взаимодействия элементов сложной системы представлена на рис. 1.

Уникальность построения модели заключалась в устройстве самого волновода, при прохождении через который волна отражается от двух симметричных кристаллов висмута. Интенсивность полезного сигнала при использовании метода полосковой линии превосходит соответствующую величину в случае однократного отражения от поверхности исследуемого кристалла более чем в 2 раза, что обеспечивает возможность получения детальной информации о форме отклика на электромагнитное возмущение. При таком рассмотрении имеется ряд особенностей построения и применения физической модели [8].

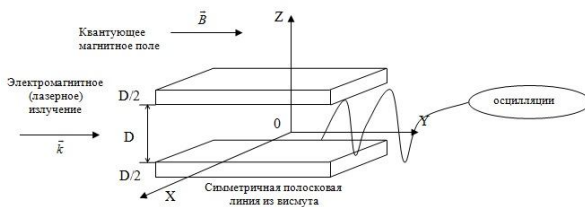


Рис. 1. Схема взаимодействия элементов сложной системы

Математическая модель магнитооптического эффекта, наблюдающегося в планарном волноводе, основывается на сочетании следующих особенностей построения.

1. Электромагнитный процесс рассчитывается аналитическим решением уравнений Максвелла в среде стенок волновода и в вакууме.

2. Искомое решение представляет собой неоднородную электромагнитную волну (поверхностную волну) с комплексным волновым вектором, имеющим компоненты вдоль продольной оси и по направлению вглубь стенок волновода.

3. Граничные условия, определяющие непрерывность решений в среде и в вакууме обеспечивается непрерывностью тангенциальных составляющих векторов электрического и магнитного поля.

4. Решения классифицированы с использованием свойств симметрии планарного волновода, находящегося в магнитном поле.

5. Анизотропия свойств висмута учитывалась в приближении тензора второго ранга эффективных масс с учетом всех 9 компонент.

6. Квантование электронного энергетического спектра для уровней Ландау с $j \geq 1$ проведено в первом порядке, а для уровней с $j=0$ во втором порядке квантовомеханической теории возмущений.

7. Тензор диэлектрической проницаемости рассчитывался как сумма двух тензоров: тензора фоновой части диэлектрической проницаемости и тензора высокочастотной диэлектрической проницаемости в первом порядке теории возмущений в приближении времени релаксации.

8. Компоненты тензора фоновой части диэлектрической проницаемости принимались комплексными с мнимыми частями, сравнимыми с действительными.

9. Расчет коэффициента пропускания планарного волновода проведен в самых общих предположениях и справедлив для любых анизотропных немагнитных материалов в линейном приближении по полю.

10. Численный расчет коэффициента пропускания планарного волновода велся отдельно для электронов сосредоточенных в различных экстремумах. В результате суммировались интенсивности откликов от электронов с различными циклотронными массами.

В расчетах удобно сравнивать энергию $W(B)$, переносимую волной при некотором значении магнитного поля B , с энергией $W(0)$, переносимой волной при $B = 0$. Коэффициент пропускания полосковой линии определяется формулой:

$$T(B) = \frac{W(B)}{W(0)}.$$

Моделирование формы линии магнитооптического эксперимента заключается в численном расчете коэффициента пропускания СПЛ. Для решения системы уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j}, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho, \\ \vec{D} &= \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H}, \end{aligned}$$

где \vec{E} , \vec{B} , \vec{D} , \vec{H} – зависящие от времени векторы напряженности и индукции электрического и магнитного полей, $\vec{\nabla}$ – оператор градиента.

Вопросом приближенного решения уравнений Максвелла посвящены работы [9–11].

Зависимость диэлектрической и магнитной проницаемости от частоты электромагнитной волны позволяет судить о конкретных микроскопических свойствах материальных сред. Исследование микроскопических свойств твердых тел с помощью электромагнитных волн целесообразно проводить в том спектральном диапазоне, в котором наблюдается существенная временная или пространственная дисперсия. Быстрое изменение диэлектрической проницаемости обычно происходит на частотах, соответствующих резонансному возбуждению электронной или ионной системы кристалла. Обычно эти частоты соответствуют длинам волн намного меньших размеров образца.

Из секулярного уравнения, полученного в результате подстановки предполагаемого решения в систему уравнений Максвелла (2), найдено нелинейное алгебраическое уравнение четвертой степени. Два из четырех корней этого уравнения соответствуют физически реальной ситуации, когда электромагнитная волна затухает, проникая в вещество. Эти корни и являются искомыми решениями [10, 11].

Чтобы рассчитать коэффициент пропускания $T(B)$, необходимо знать зависимость волнового вектора от величины индукции магнитного поля. необходимо знать зависимость волнового вектора от величины индукции магнитного поля. Графическая интерпретация в идеале должна приближаться к экспериментальной кривой, однако, на рис. 2 прослеживаются расхождения, связанные с особенностями численных методов. Отметим, что выявленные погрешности являются допустимыми.

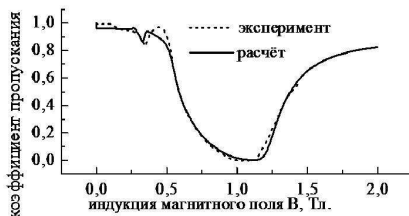


Рис. 2. Зависимость коэффициента пропускания полосковой линии из висмута от величины индукции магнитного поля

Расчеты производились с использованием программного продукта символьной математики – Maple [12]. Алгоритм нахождения коэффициента пропускания состоит из следующих шагов:

- 1) установить случай, когда вектор напряженности магнитного поля направлен вдоль бинарной, биссекторной или тригональной оси висмута. В зависимости от направления рассчитываются три алгоритма для каждого случая, повторяя шаги 2-7;

- 2) рассчитать компоненты тензора электропроводности;
- 3) в соответствии с направлением установить вид тензора диэлектрической проницаемости;
- 4) найти коэффициенты поглощения из уравнения четвертой степени;
- 5) рассчитать y -составляющую волнового вектора и разделить на действительную и мнимую части;
- 6) подставив значение волнового вектора в уравнение Максвелла, найти коэффициент пропускания симметричной полосковой линии;
- 7) сравнить графическую интерпретацию расчета с экспериментальными данными, которые были получены с приборов и аппроксимированы с помощью численных методов.

Исследования прохождения субмиллиметрового излучения с длиной волны 337 мкм через симметричную полосковую линию, изготовленную из висмута, показали, что мощность прошедшей через такую полосковую линию волны имеет сильную зависимость, как от величины внешнего магнитного поля, так и от ее ориентации относительно кристаллографических осей монокристаллического висмута. Подобные исследования в планарных волноводах проводились для разных сред [13]. Для оцифровки кривых, полученных экспериментально, использовалась программа Grafula. С помощью пакета CurveFitting, встроенного в Maple, проведена оценка формы модельной кривой на основе метода наименьших квадратов (рис. 3).

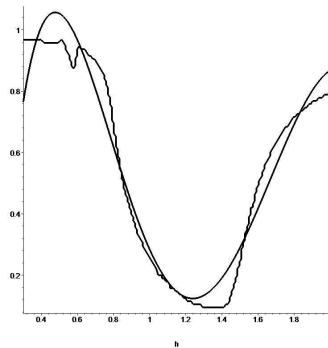


Рис. 3. Обработка экспериментальных данных средствами математического пакета Maple

Для решения задачи аппроксимации в Maple существует функция `LeastSquares` из пакета `CurveFitting`, которая позволяет подобрать параметры практически любой зависимости. В параметры этой функции входит массив или список абсцисс и ординат экспериментальных точек, имя переменной подбираемой кривой, уравнение подбираемой кривой с соответствующими параметрами.

3. Заключение

Программная реализация разобранной математической модели в пакете компьютерной математики Maple дала возможность получить данные для всех ориентаций вектора напряженности внешнего магнитного поля относительно кристаллографических осей висмута. На основе выполненных теоретических расчетов, с учетом их согласованности с экспериментальными данными, можно сделать следующие выводы:

1) для разработки теоретической модели выведено дисперсионное уравнение волны для каждого направления анизотропного кристалла висмута и получена формула для расчета прохождения субмиллиметрового излучения через СПЛ в зависимости от величины магнитного поля;

2) исследование диэлектрических свойств высокопроводящих анизотропных материалов может быть использовано для создания активных волноводных сред, управляемых магнитным полем.

Литература

1. *Choi K.H.* Calculation of Landau levels and electronic properties of bismuth // Diss.doct.of phyl. — 1978. — P. 128.
2. *Абрикосов А.А., Фальковский Л.А.* Теория электронного энергетического спектра металлов с решеткой типа висмута // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 43. — No. 3 — С. 1089–1101.
3. *Golin S.* SBand structure of bismuth: Pseudopotential approach // *Phys. Rev.* — 1968. — С. 643–651.
4. *Фальковский Л.А., Разина Г.С.* Электроны и дырки в висмуте // ЖЭТФ. — 1965. — В.1(7) — С. 265–274.
5. *Lax V., Mavroides J.G., Zeiger H.J., Keyes R.I.* Infrared magnetoreflection in bismuth // *Phys. Rev. Lett.* — 1960. — V. 5. — No. 6. — P. 241–243.
6. *McClure J.W.* The Energy Band Model for Bismuth: Resolution of a Theoretical Discrepancy // *Temp. Phys.* — 1976. — V. 25. — No 5/6. — P. 527–540.
7. *Кондаков О.В., Васильева И.И.* Моделирование магнитопропускания планарного волновода, сделанного из висмута, в далекой инфракрасной области спектра // *Материалы межвузовской научно-практической конференции «Системы управления, технические системы: пути и методы исследования».* — Елец: ЕГУ им. И.А. Бунина. — 2011. — С. 70–76.
8. *Кравченко И.Т.* Теория волновых процессов // М: Едиториал УРСС. — 2003. — 240 с.
9. *Севастьянов Л.А., Ловецкий К.П., Бикеев О.Н., Горобец А.П.* Методы и алгоритмы решения задач в моделях оптических покрытий. Учебное пособие // М.: — РУДН — 2008.

10. Масина О.Н., Васильева И.И. Особенности исследования зонной структуры висмута //Международный академический вестник. — 2014. — №. 1. — С. 45–51.
11. Васильева И.И. Различные модели закона дисперсии носителей заряда в висмуте // Материалы Международной научно-практической конференции «Системы управления, технические системы: устойчивость, стабилизация, пути и методы исследования», посвященной 95-летию со дня рождения профессора А.А. Шестакова (Елец, 2-3 апреля 2015 г.). — Елец: ЕГУ им. И.А. Бунина. — 2015. — С. 159–164.
12. Алексеев Е.Р., Чеснокова О.В. Решение задач вычислительной математики в пакетах Mathcad 12, MATLAB 7, Maple 9 //М.: НТ Пресс. — 2010.
13. Егоров А.А., Ловецкий К.П., Севастьянов А.Л., Севастьянов Л.А. Интегральная оптика: теория и компьютерное моделирование //Москва: Российский университет дружбы народов. — 2015. — 330 с.

UDC 517.9

Modeling of distribution line form of surface electromagnetic wave in planar waveguide

I.I. Vasilyeva*, O.B. Gladkikh*

** Department of Mathematical Modeling and Computer Technologies
Yelets State University named after Ivan Bunin
Communards str. 28, Yelets, 399770, Russia*

The work is devoted to the analysis of the dependence of the dielectric properties of highly conducting anisotropic materials from the magnitude and the direction of the magnetic field. The nonlinear model of distribution of surface electromagnetic wave in planar waveguide out of bismuth located in the quantizing magnetic field at temperature of liquid helium is considered. The dispersing equation of wave for each direction is removed (binary, bisector and trigonal). The formula for calculation of passing of submillimeter radiation through the symmetrical strip line depending on value of magnetic field is obtained. The algorithm of the numerical solution by means of packet of computer mathematics Maple is offered and the accompanying applications for digitization of the experimental data in graphical form are developed. The received results allow to apply this technique to wide class of research problems and can be used for creation of the active waveguide environments on the basis of the balanced strip line, controlled by a magnetic field.

Keywords: planar waveguide, electromagnetic waves in quantizing magnetic field, the numerical solution algorithm, magneto-optical effect, transmission coefficient.

UDC 519.632.4

Kantorovich and Galerkin-Type Methods for Modelling Quantum Tunneling of Composite Systems through Barriers

S. I. Vinitsky^{*†}, A. A. Gusev^{*}, O. Chuluunbaatar^{*},
A. Gózdź[‡], V. L. Derbov[§]

^{*} *Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

[†] *RUDN University, Moscow, Russia*

[‡] *Institute of Physics, University of M. Curie-Skłodowska, Lublin, Poland*

[§] *Saratov State University, Saratov, Russia*

Abstract. The description of quantum tunnelling of composite systems through repulsive barriers using the coupled-channel approximation of the adiabatic approach is presented. In this approach the multichannel scattering problem for the Schrödinger equation is reduced to a set of coupled second-order ordinary differential equations with the boundary conditions of the third type and solved using the R-matrix method. The efficiency of the proposed approach is demonstrated by the example of analyzing metastable states that appear in composite quantum systems tunnelling through repulsive barriers and give rise to the quantum transparency effect.

Keywords: Kantorovich and Galerkin-type methods, system of second order ordinary differential equations, quantum tunnelling.

1. Introduction

Quantum tunnelling of composite systems through barriers is one of the problems most often occurring in nuclear physics, physics of solid state and semiconductor nanostructures. Usually the theory is based on considering the penetration of a structureless particle through barriers within the effective mass approximation. However, the majority of important applications deal with tunnelling of structured objects (clusters), e.g., atomic nuclei through Coulomb barrier, where the effects of structure (multiple particles) manifest themselves in anomalous behaviour of nuclear reaction cross-sections below the Coulomb barrier. Indeed, when the cluster size is comparable with the spatial width of the barrier, the mechanisms arise that enhance the barrier transparency. The effect of quantum barrier transparency depending on the internal structure of the incident particles was revealed for a pair of coupled particles tunnelling through a repulsive barrier. The effect was shown to be due to the barrier resonance formation under the condition that the potential energy of the compound system (cluster + barriers) possesses local minima, thus providing the appearance of metastable states of the moving cluster [1]. A method and program for solving the tunnelling of a system of n identical particles coupled by oscillator-type potentials through repulsive barriers has been presented in [2, 3].

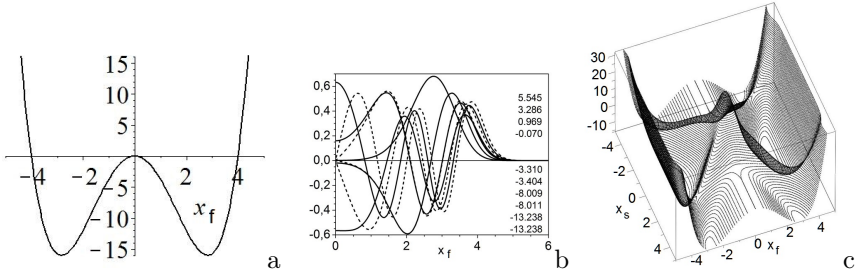


Figure 1. Double-well interaction potential (a), the first even (solid lines) and odd (dashed lines) eigenfunctions (b), and the corresponding 2D potential $V(x_f) + V^b(x_f; x_s)$ (c).

Here we consider the cluster tunnelling problem basing on the close-coupling adiabatic and Kantorovich methods that imply the approximate consideration of fast and slow variables. By the examples of particles with different coupling potentials, tunnelling through Gaussian barriers, the transmission coefficients, and the metastable states are analyzed. The energy dependences of these coefficients demonstrate the phenomena of quantum transparency and total reflection.

2. Problem statement

2.1. Close-coupling adiabatic and Kantorovich methods

Consider a boundary-value problem (BVP) for the equation

$$\left(\hat{H}_f(\mathbf{x}_f; x_s) + \hat{H}_s(x_s) + \check{V}_{fs}(\mathbf{x}_f, x_s) - \mathcal{E}_t \right) \Psi_t(\mathbf{x}_f, x_s) = 0 \quad (1)$$

with fast \mathbf{x}_f and slow x_s variables. The operators $\hat{H}_f(\mathbf{x}_f; x_s)$ and $\hat{H}_s(x_s)$ describe the fast and slow subsystem

$$\hat{H}_f(\mathbf{x}_f; x_s) = -\frac{1}{g_{1f}(\mathbf{x}_f)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_f} g_{2f}(\mathbf{x}_f) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_f} + \check{V}_f(\mathbf{x}_f; x_s),$$

$$\hat{H}_s(x_s) = -\frac{1}{g_{1s}(x_s)} \frac{\partial}{\partial x_s} g_{2s}(x_s) \frac{\partial}{\partial x_s} + \check{V}_s(x_s),$$

$\check{V}_f(\mathbf{x}_f; x_s)$ and $\check{V}_s(x_s)$ are the potentials of the fast and slow subsystem, and $\check{V}_{fs}(\mathbf{x}_f, x_s)$ is the interaction potential. The solution $\Psi_t(\mathbf{x}_f, x_s)$ of the problem (1) with the appropriate boundary conditions is sought for in the

form of Kantorovich expansion

$$\Psi_t(\mathbf{x}_f, x_s) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} B_j(\mathbf{x}_f; x_s) \chi_{jt}(x_s). \quad (2)$$

The trial functions $B_j(\mathbf{x}_f; x_s)$ are chosen to be eigenfunctions of the Hamiltonian $\hat{H}_f(\mathbf{x}_f; x_s)$ with the eigenvalues $\hat{E}_j(x_s)$, parametrically depending on $x_s \in \Omega(x_s)$:

$$\hat{H}_f(\mathbf{x}_f; x_s) B_j(\mathbf{x}_f; x_s) = \hat{E}_j(x_s) B_j(\mathbf{x}_f; x_s). \quad (3)$$

These functions satisfy the orthonormality conditions with the weighting function $g_{1f}(\mathbf{x}_f)$ in the same interval $\mathbf{x}_f \in \Omega_{\mathbf{x}_f}(x_s)$:

$$\int_{\mathbf{x}_f^{\min}(x_s)}^{\mathbf{x}_f^{\max}(x_s)} B_i(\mathbf{x}_f; x_s) B_j(\mathbf{x}_f; x_s) g_{1f}(\mathbf{x}_f) d\mathbf{x}_f = \delta_{ij}.$$

Substitution of (2) into (1) yields a BVP for a set of ordinary differential equations (ODEs) with respect to the unknown vector functions $\chi_t(x_s) = (\chi_{1;t}(x_s), \dots, \chi_{j_{\max};t}(x_s))^T$ of the slow subsystem, corresponding to the unknown eigenvalues $2E_t \equiv \mathcal{E}_t$,

$$\left(\mathbf{D} + \mathbf{E}(x_s) + \mathbf{W}(x_s) - \mathbf{I} \mathcal{E}_t \right) \chi_t(x_s) = 0,$$

$$\mathbf{D} = -\frac{1}{g_{1s}(x_s)} \mathbf{I} \frac{d}{dx_s} g_{2s}(x_s) \frac{d}{dx_s} + \mathbf{I} \check{V}_s(x_s),$$

$$\mathbf{W}(x_s) = \mathbf{V}(x_s) + \frac{g_{2s}(x_s)}{g_{1s}(x_s)} \mathbf{H}(x_s) + \frac{1}{g_{1s}(x_s)} \frac{dg_{2s}(x_s)}{dx_s} \mathbf{Q}(x_s) + \frac{g_{2s}(x_s)}{g_{1s}(x_s)} \mathbf{Q}(x_s) \frac{d}{dx_s}$$

with the effective potentials $H_{ij}(x_s)$ and $Q_{ij}(x_s)$ defined as

$$V_{ij}(x_s) = V_{ji}(x_s) = \int_{\mathbf{x}_f^{\min}(x_s)}^{\mathbf{x}_f^{\max}(x_s)} B_i(\mathbf{x}_f; x_s) \check{V}_{fs}(\mathbf{x}_f, x_s) B_j(\mathbf{x}_f; x_s) g_{1f}(\mathbf{x}_f) d\mathbf{x}_f,$$

$$H_{ij}(x_s) = H_{ji}(x_s) = \int_{\mathbf{x}_f^{\min}(x_s)}^{\mathbf{x}_f^{\max}(x_s)} \frac{\partial B_i(\mathbf{x}_f; x_s)}{\partial x_s} \frac{\partial B_j(\mathbf{x}_f; x_s)}{\partial x_s} g_{1f}(\mathbf{x}_f) d\mathbf{x}_f, \quad (4)$$

$$Q_{ij}(x_s) = -Q_{ji}(x_s) = - \int_{\mathbf{x}_f^{\min}(x_s)}^{\mathbf{x}_f^{\max}(x_s)} B_i(\mathbf{x}_f; x_s) \frac{\partial B_j(\mathbf{x}_f; x_s)}{\partial x_s} g_{1f}(\mathbf{x}_f) d\mathbf{x}_f.$$

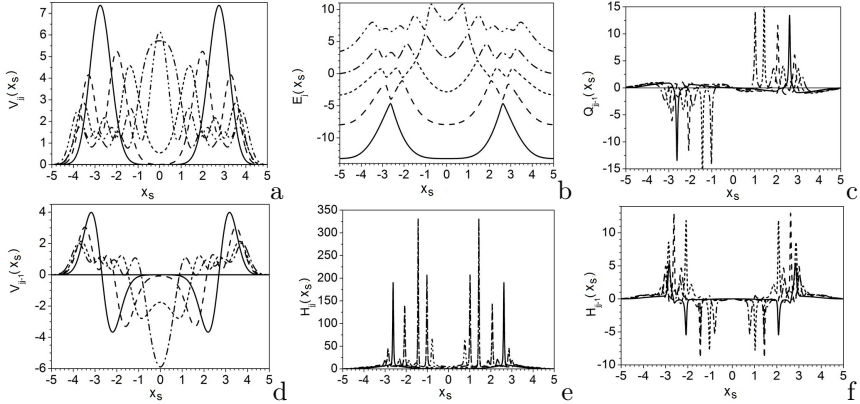


Figure 2. Even effective potentials for Galerkin-type (a,d) and Kantorovich (b,c,e,f) expansions.

If the potential of the fast subsystem $\check{V}_f(\mathbf{x}_f; x_s)$ is independent of the slow variable, then the expansion is referred to as Galerkin-type expansion. Its advantage is that the eigenvalue problem (3) should be solved only once. However, if the position of the potential well and, therefore, the localization of eigenfunctions changes, the convergence of Galerkin-type expansions becomes very slow [4]. The example of the effective potentials for double well potential (from fig. 1) are shown in Fig. 2

2.2. Scattering problem

Consider the scattering problem with the homogeneous boundary conditions of the third kind at $x_s = x_s^{\min} \ll 0$ and $x_s = x_s^{\max} \gg 0$:

$$\left. \frac{d\Phi(x_s)}{dx_s} \right|_{x_s=x_s^{\min}} = \mathcal{R}(x_s^{\min})\Phi(x_s^{\min}), \quad \left. \frac{d\Phi(x_s)}{dx_s} \right|_{x_s=x_s^{\max}} = \mathcal{R}(x_s^{\max})\Phi(x_s^{\max}),$$

where $\mathcal{R}(x_s)$ is an unknown $N \times N$ matrix function, $\Phi(x_s) = \{\chi^{(j)}(x_s)\}_{j=1}^{N_o}$ is the desired $N \times N_o$ matrix solution and N_o is the number of open channels, $N_o = \max_{2E \geq \epsilon_j} j \leq N$.

The matrix solution $\Phi_v(x_s) = \Phi(x_s)$, describing the incidence of the particle and its scattering, with the asymptotic form “incident wave +

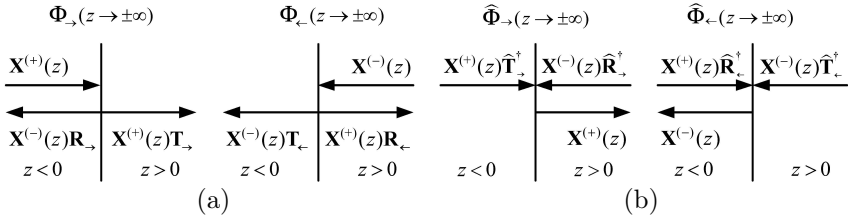


Figure 3. Schematic diagrams of the wave functions $\Phi_v(z)$ at $z \equiv x_s$ having the asymptotic form: (a) “incident wave + outgoing waves”, (b) “incident waves + ingoing wave”.

outgoing waves” (see Figure 3a) is written as

$$\Phi_v(x_s \rightarrow \pm\infty) = \begin{cases} \begin{cases} \mathbf{X}^{(+)}(x_s)\mathbf{T}_v, & x_s > 0, \\ \mathbf{X}^{(+)}(x_s) + \mathbf{X}^{(-)}(x_s)\mathbf{R}_v, & x_s < 0, \end{cases} & v = \rightarrow, \\ \begin{cases} \mathbf{X}^{(-)}(x_s) + \mathbf{X}^{(+)}(x_s)\mathbf{R}_v, & x_s > 0, \\ \mathbf{X}^{(-)}(x_s)\mathbf{T}_v, & x_s < 0, \end{cases} & v = \leftarrow, \end{cases} \quad (5)$$

where \mathbf{R}_v and \mathbf{T}_v are the reflection and transmission $N_o \times N_o$ matrices, $v = \rightarrow$ and $v = \leftarrow$ denote the initial direction of the particle motion along the x_s axis. The leading term of the asymptotic rectangular matrix functions $\mathbf{X}^{(\pm)}(x_s)$ has the form

$$X_{ij}^{(\pm)}(x_s) \rightarrow p_j^{-1/2} \exp\left(\pm i \left(p_j x_s - \frac{Z_j}{p_j} \ln(2p_j|x_s|)\right)\right) \delta_{ij},$$

$$p_j = \sqrt{2E - \epsilon_j} \quad i = 1, \dots, N, \quad j = 1, \dots, N_o,$$

where $Z_j = Z_j^+$ at $x_s > 0$ and $Z_j = Z_j^-$ at $x_s < 0$. The matrix solution $\Phi_v(x_s, E)$ is normalized by the condition

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{v'}^\dagger(x_s, E') \Phi_v(x_s, E) dx_s = 2\pi \delta(E' - E) \delta_{v'v} \mathbf{I}_{oo},$$

where \mathbf{I}_{oo} is the unit $N_o \times N_o$ matrix.

Let us rewrite Eq. (5) in the matrix form at $x_s^+ \rightarrow +\infty$ and $x_s^- \rightarrow -\infty$ as

$$\begin{pmatrix} \Phi_{\rightarrow}(x_s^+) & \Phi_{\leftarrow}(x_s^+) \\ \Phi_{\rightarrow}(x_s^-) & \Phi_{\leftarrow}(x_s^-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{X}^{(-)}(x_s^+) \\ \mathbf{X}^{(+)}(x_s^-) & \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{X}^{(+)}(x_s^+) \\ \mathbf{X}^{(-)}(x_s^-) & \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{S},$$

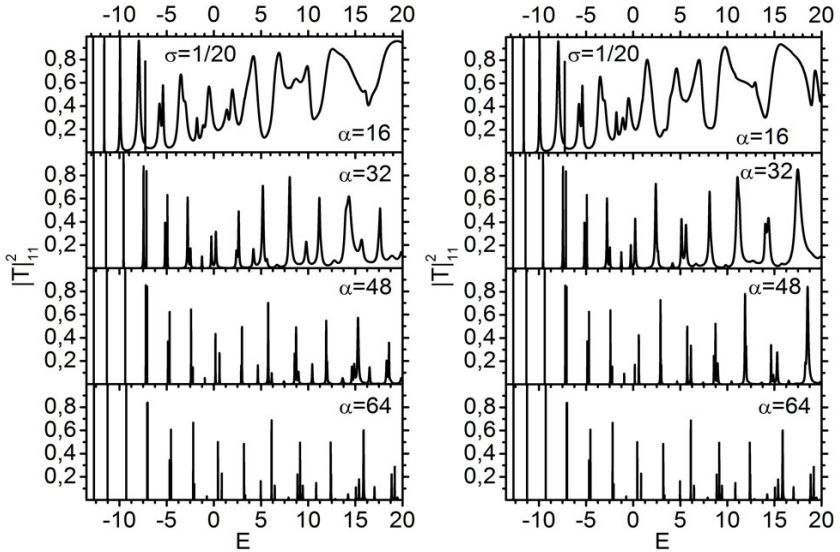


Figure 4. The total probability of penetration through repulsive Gaussian potential barriers $|T|_{11}^2$ versus the energy E with the ground and excited initial states.

where the unitary and symmetric scattering matrix \mathbf{S}

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\rightarrow} & \mathbf{T}_{\leftarrow} \\ \mathbf{T}_{\rightarrow} & \mathbf{R}_{\leftarrow} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}$$

is composed of the reflection and transmission matrices. Detailed calculation of the matrix solution $\Phi_v(x_s)$ is presented in Ref. [5].

3. Tunnelling of clusters comprised of two and three identical particles

Consider a cluster of two or three identical particles with the masses m coupled with the potential $U^{pair}(x_{tt'})$, $x_{tt'} = x_t - x_{t'}$ penetrating through the repulsive barriers $V(x_t)$. The wave function of this system satisfies the

Schrödinger equation

$$\left[-\sum_{t=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_t^2} + \sum_{t,t'=1;t < t'}^n \frac{(x_{tt'})^2}{n} + \sum_{t,t'=1;t < t'}^n U^{pair}(x_{tt'}) + \sum_{t=1}^n V(x_t) - E \right] \Psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (6)$$

Here E is a total energy of n particles, $V^{pair}(x_{tt'}) = \tilde{V}^{pair}(x_{tt'} x_{osc})/E_{osc}$, $V^{hosc}(x_{tt'}) = \tilde{V}^{hosc}(x_{tt'} x_{osc})/E_{osc} = \frac{1}{n}(x_{tt'})^2$ and $V(x_t) = \tilde{V}(x_t x_{osc})/E_{osc}$, $U^{pair}(x_{tt'}) = V^{pair}(x_{tt'}) - V^{hosc}(x_{tt'})$, i.e. for $V^{pair}(x_{tt'}) = V^{hosc}(x_{tt'})$, $U^{pair}(x_{tt'}) = 0$. In symmetric coordinates [2]:

$$\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{t=1}^n x_t, \quad \xi_{t'} = \frac{1}{\sqrt{n}} \left(x_1 + \sum_{t=2}^n a_0 x_t + \sqrt{n} x_{t'+1} \right), \quad t' = 1, \dots, n-1,$$

where $a_0 = 1/(1 - \sqrt{n}) < 0$, $a_1 = a_0 + \sqrt{n}$, Eq. (6) takes the form

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_0^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + (\xi_i)^2 \right) + U(\xi_0, \dots, \xi_{n-1}) - E \right] \Psi(\xi_0, \dots, \xi_{n-1}) = 0,$$

$$U(\xi_0, \dots, \xi_{n-1}) = \sum_{i,j=1;i < j}^n U^{pair}(x_{ij}(\xi_1, \dots, \xi_{n-1})) + \sum_{i=1}^n V(x_i(\xi_0, \dots, \xi_{n-1})).$$

Here $x_s = \xi_0$ in center-of-mass variable and $\mathbf{x}_f = \{\xi_1, \dots, \xi_{n-1}\}$ is set of relative variables, such that at $n = 2$ they correspond to Jacobi coordinates.

Double well interaction potential. Now consider a pair of particles, coupled by the double well interaction potential $V(x_f) = x_f^4/4 - 4x_f^2$ (see Fig. 1a) tunnelling through repulsive Gaussian barriers $V_i(x_i) = \alpha \exp(-x_i^2/2\sigma)$ with $\alpha = 16, 32, 48, 64$, $\sigma = 1/20$. So, eq. (6) takes the form

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_s^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} + V(x_f) + V^b(x_f; x_s) - 2E \right) \Psi(x_f, x_s) = 0,$$

$$V^b(x_f; x_s) = V_1(x_1) + V_2(x_2).$$

The first even and odd eigenfunctions are presented in Fig. 1b. The typical behaviour of symmetric double-well potential eigenfunctions is seen, namely, for $E < 0$ there are pairs of even and odd eigenfunctions localized in the potential wells, with closely spaced energy levels. For $E > 0$ the energy levels of even and odd states alternate. The corresponding 2D potential is demonstrated in Fig. 1c

In this case we have two possibilities to construct the fast, slow, and interaction potential, corresponding either to the Galerkin-type expansion

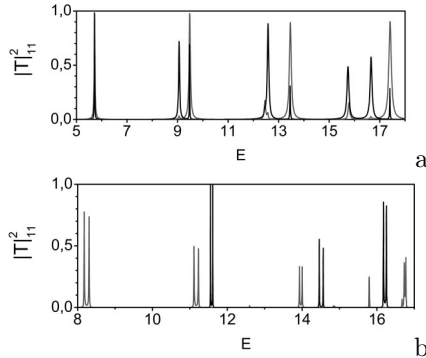


Figure 5. The total transmission probability $|T|_{11}^2$ versus the energy E (in oscillator units). The two (a) and three (b) identical particles, coupled by the oscillator potential, penetrates through the repulsive Gaussian barrier with $\sigma = 0.1$ and $\alpha = 20$. The system is initially in the ground state.

$\check{V}_f(x_f; x_s) = V(x_f)$, $\check{V}_s(x_s) = 0$, $\check{V}_{fs}(x_f, x_s) = V^b(x_f; x_s)$, or the Kantorovich expansion $\check{V}_f(x_f; x_s) = V(x_f) + V^b(x_f; x_s)$, $\check{V}_s(x_s) = 0$, $\check{V}_{fs}(x_f, x_s) = 0$. The effective potentials (4) are presented in Fig. 2. It is seen that the non-diagonal matrix elements in the case of Kantorovich expansion are small as compared to the case of Galerkin-type expansion, except some areas, corresponding to quasi-crossing of the energy levels in the problem (3) (see Fig. 2b).

Figure 4 shows the energy dependence of the total transmission probability $|T|_{ii}^2 = \sum_{j=1}^{N_o} |T_{ji}(E)|^2$. This is the probability of a transition from a chosen state i into any of N_o states, found by solving the boundary-value problem in the Galerkin form. The behaviour of the probability versus the energy is non-monotonic, and the observed resonances are manifestations of the quantum transparency effect. This effect is caused by the existence of barrier metastable states, embedded in the continuum.

Parabolic interaction potential. Two and three identical particles ($n=2,3$) are coupled by the harmonic oscillator potential $V(x_t - x_{t'}) = (x_t - x_{t'})^2$, $t', t = 1, \dots, n$ and the repulsive barrier is Gaussian $V(x_t) = \alpha / (\sqrt{2\pi}\sigma) \exp(-x_t^2/\sigma^2)$.

Figure 5 shows the energy dependence of the total transmission probability $|T|_{ii}^2 = \sum_{j=1}^{N_o} |T_{ji}(E)|^2$. This is the probability of a transition from the ground state i to any of N_o eigenstates of the BVP in the Galerkin form solved using the program KANTBP [3]. The dependence of the probability upon the energy is non-monotonic, and the observed resonance peaks are manifestations of the quantum transparency effect. The multiplet structure of the peaks for symmetric and antisymmetric states is similar. Due

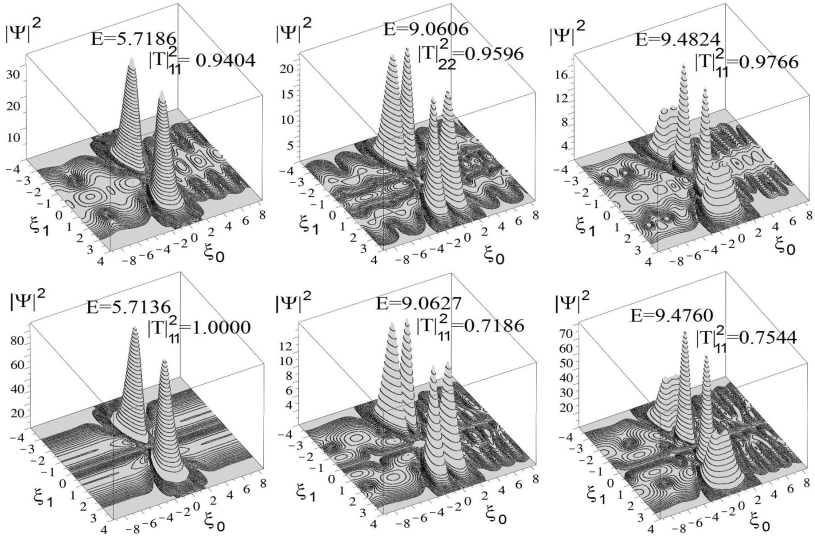


Figure 6. Profiles of probability densities $|\Psi(\xi_0, \xi_1)|^2$ for symmetric (top panel) and antisymmetric (bottom panel) states of two particles, revealing resonance transmission and total reflection at resonance energies, shown in Fig. 5 .

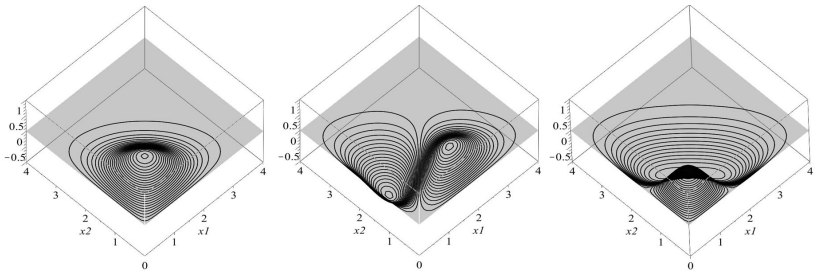


Figure 7. The first three metastable states corresponding to $E_i^D = 5.76, 9.12, 9.53$.

to the symmetry of the potential in the case of two identical particles, the position of the maxima for symmetric and antisymmetric states coincide. In the case of three particles peak positions for symmetric and antisymmetric states are different, but due to the symmetry with respect to the plane $\xi_0 = 0$, explain the presence of doublets.

Fig. 6 shows the profiles of $|\Psi|^2 \equiv |\Psi_{Em \rightarrow}^{(-)}|^2$ with $\alpha = 20$, $\sigma = 1/10$ at the resonance energies of the first three maxima and the second maximum and the first minimum of the transmission coefficient, illustrating the resonance transmission. It is seen that in the case of resonance transmission the energy is transferred from the centre-of-mass degree of freedom, described by the coordinate ξ_0 , to the internal (transverse) one, described by ξ_1 i.e., the transverse oscillator undergoes a transition from the ground state to the excited state. On the contrary, in the case of total reflection the energy transfer is extremely small, and the transverse oscillator returns to infinity in the initial state. In Fig. 7 the first three metastable states are presented. The wave function amplitudes for these states are seen to differ from the amplitudes of the states, corresponding to the first three maxima in the vicinity of wells.

4. Conclusion

We present the application of the adiabatic and Kantorovich methods to the problem of quantum tunnelling of a cluster of coupled particles through repulsive potential barriers. The initial boundary problem is reduced to that for a set of ordinary differential equations. By a few examples we demonstrate the efficiency of the proposed approach for the cluster tunnelling problem and the capability of the method to provide correct description of the cluster tunnelling specific features, including the quantum transparency and total reflection phenomena induced by barrier metastable states. An important advantage of the approach is the possibility of efficient use of symbolic-numeric software packages that considerably simplify the calculations as compared to direct numerical approaches.

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 14-01-00420) and the Bogoliubov-Infeld JINR program.

References

1. *Pen'kov F.M.* Quantum transmittance of barriers for composite particles // Journal of Experimental and Theoretical Physics — 2000 — Vol. 91 — P. 698–705.
2. *Gusev A.A., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Derbov V.L., Gózdź A., and Krassovitskiy P.M.*, Metastable states of a composite system tunneling through repulsive barriers // Theoretical and Mathematical Physics — 2016 — Vol. 186 — P. 21–40.
3. *Gusev A.A., Hai L.L., Chuluunbaatar O., Vinitsky S.I.*, Programm KANTBP 4M for solving boundary-value problems for systems of ordinary differential equations of the second order, 2015 – <http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m>
4. *Gusev A.A., Hai L.L.* Algorithm for Solving the Two-Dimensional Boundary Value Problem for Model of Quantum Tunneling of a Diatomic Molecule Through Repulsive Barriers // Bulletin of Peoples'

- Friendship University of Russia. Series "Mathematics. Information Sciences. Physics"— 2015 — N. 1 — P. 15–36.
5. *Gusev A.A., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A.* Symbolic-numerical algorithms to solve the quantum tunneling problem for a coupled pair of ions // Lecture Notes in Computer Science — 2011— Vol. 6885 — P. 175–191.

UDC 519.688

Processing the algorithms, compression of hyperspectral images based on aerospace crossband correlation with and without losses

A. V. Zamyatin, A. Zh. Sarinova

*Department of Applied Informatics
National Research Tomsk State University
Lenin Avenue 36, Tomsk, 634050, Russia*

Abstract. There were researched, modified and developed new algorithms for compressing hyperspectral aerospace images based crossband correlation with and without losses. The comparative characteristic shows superiority over the universal and specialized compression algorithms.

Keywords: hyperspectral aerospace images; algorithms of compression; wavelet transform.

1. Task description of compression aerospace hyperspectral images

Modern satellite centers of space monitoring and remote sensing of the Earth centers (CRP) allow rapidly receive, register, process, archive and distribute large volumes of data that make up the sometimes hundreds of gigabytes. The transmitted data are accumulated on terrestrial stations, taking up a huge disk space, which requires, in turn, the cost of storing them. It is known that the aerospace images (AI) are characterized by the following features - spectral, radiometric, spatial resolution, the geometrical dimensions of the stage, characterized by a different number of channels and bands. The hyperspectral AI for each pixel in the image, hyperspectral camera receives the light intensity for a large number (typically several tens to several hundreds) of the adjacent spectral bands. Each pixel in the image, thus comprises a continuous spectrum and can be used for the characterization of objects in a scene with high accuracy and detail [1–3].

Therefore, hyperspectral AI lead to a significantly improved ability to classify objects in the scene based on their spectral properties. Due to the rich content of the information in hyperspectral AI, they are uniquely well suited for automated processing of remote sensing images. In recent years, the majority of researchers in solving the problems of remote sensing hyperspectral pay special attention to the AI.

Hyperspectral AI characterized by a different number of channels, the spectral range and radiometric resolution, passed with the spacecraft (SC) to ground stations that require archiving to storage subsystems ERS limited capacity for data communication channels limited capacity [4]. In this regard, one of the important tasks is archiving hyperspectral AI. The basis

of such filing systems are different kinds of formats, techniques and compression algorithms. Problems associated with the development of modern compression systems for archiving hyperspectral AI can be divided into two main areas: 1) the development of high-performance methods and compression algorithms hyperspectral AI on board the spacecraft to reduce the computational resources for archiving; 2) the development of effective methods and algorithms for compressing hyperspectral AI centers of aerospace monitoring and processing of images with high archiving.

The first direction is the creation of the backup systems on board the spacecraft, the development of which is quite time consuming and challenging. Level is defined in such a problem that the backup computer processes lead to an increase in temporal resolution.

The second area involves the development and use of the most effective approaches to methods and algorithms for compression of hyperspectral AI. In this case there is a situation where it is necessary to explore the problems of compression tasks hyperspectral AI, for known solutions to address it. Specialized software systems to handle the AI study the above issues represent the most well-known compression systems hyperspectral AI. Currently, there is a software designed for compressing hyperspectral AI. These include ERDAS Imagine, ERDASER Mapper, ArcView GIS, GeoExpress, which confer increasingly specialized modules to compress AI. Thus, the package ERDAS Imagine, ArcView GIS and image compression tools are in MrSID format (IMAGINE MrSID Desktop Encoder and IMAGINE MrSID Workstation Encoder). Their essence is that when you create a MrSID image uses a discrete wavelet transform is with and without losses. ERDASER Mapper system has a compression module with data loss based on JPEG2000 standard and Enhanced Compression Wavelet (ECW) [5–8]. The software uses GeoExpress JPEG2000, MrSID format. The above software systems increasingly include algorithms and methods for compressing hyperspectral AI based on known standards and formats. According to the analysis of existing specialized systems for compressing hyperspectral AI indicated that many systems use a small range of compression formats with and without losses JPEG 2000, the MrSID and ECV. In addition to the specialized systems to compress investigated private implementations that are maintained by the AI processing hyperspectral data are reflected in the work [9–14].

These works were carried out studies of the problems and prospects of hyperspectral data compression with and without losses. Most approaches based on wavelet with and without losses. Among the developments of lossless involved fewer researchers.

The proposed solution compression tasks hyperspectral AI on the basis of the above approaches to the algorithms and methods for compressing hyperspectral AI, we can conclude that the most widely used methods of solving the problem of compression can be: - consideration of the spectral correlation, which gives certain advantages on the basis of the calculated correlation matrix; - adaptive wavelet transformation; - metrics to assess

the quality criteria of the reconstructed image PSNR, MSE, PMSE and others.

2. Results of the research

Experimental studies preparatory processing for compressing hyperspectral AI based on the characteristics of the developed algorithms degree of lossless and losses.

I. The preparatory process for compressing hyperspectral AI lossless. Consider the preparatory process of the adapted data compression algorithm to hyperspectral AI lossless considering crossband correlation. An algorithm is proposed to implement in three stages:

1. Convert the data structure based on the original hyperspectral AI storing the values of the wavelet coefficients, by the example of the one-dimensional Haar wavelet and accounting crossband correlation between image channels by its count (the formation of arrays of deviations (differences) from the original data values found functional dependence).
2. Adapted processing the converted data sets based on the formation of block-based hyperspectral AI.
3. Compressing one of entropy algorithms.

II. The preparatory process for compressing hyperspectral AI losses. Consider the preparatory processing based on wavelet transformation based on the correlation crossband before compressing hyperspectral AI lossless. Possible next steps preparatory treatments hyperspectral AI based on the suggested steps:

1. Accounting crossband correlations between the AI channels.
2. Convert the data structure based on the original hyperspectral AI storing the values of the wavelet coefficients, by the example of one-dimensional and two-dimensional Haar wavelet [15].
3. Convert the basis of the data structure on the original hyperspectral AI storing the values of the wavelet coefficients, by the example of the one-dimensional wavelet Dobeshi [16].
4. Conversion based on stages 1-3 by a predetermined quantization step wavelet coefficients.
5. The use of standard metrics for evaluating the quality criteria of the reconstructed image PSNR, MSE, PMSE and others.
6. Compress one of standard entropy algorithms. Consider proposed hyperspectral AI algorithms compression without loss.

Haar wavelet

1. Haar wavelet (one-dimensional), the algorithm runs in lines Convert data structure based on the original hyperspectral AI storing the values of the wavelet coefficients, by the example of the one-dimensional Haar wavelet. The fundamental in the wavelet - analysis of the idea is to allocate information data at different levels of detail. Parts, in turn, can be regarded as information about the scale or resolution. The method consists in converting that transformed row images, thereby carried dimensional wavelet transformation. Being half-sums and half using

Haar wavelets as the use of low-frequency and high-frequency filters. After conversion, the Haar wavelet we obtain wavelet coefficients of two components - the low-frequency (LF) and high frequency (HF). After the cut-off procedures HF ratio of the image is reduced by half, which gives an advantage in compression.

2. The two-dimensional Haar wavelet transform hyperspectral AI. One way to obtain a two-dimensional wavelet transformation the image is to first apply a one-dimensional wavelet transformation to the each of the rows of channels hyperspectral AI, and then apply a one-dimensional wavelet transformation to each of the columns. The method is to first convert an image line, and then convert the image to convert the string columns. The result is a new matrix, the first two columns that contain the values of the approximation coefficients of each line, and the next two columns - the values of the differences of the coefficients. Similar to the previous one-dimensional Haar wavelet may cut off the high frequency coefficients thereby reduce the image four times.

3. Three-dimensional Haar wavelet transform hyperspectral AI. This method consists in the fact that the first step is to apply a one-dimensional Haar on the second two-dimensional Haar received data to the previous stage, the third stage of the two-dimensional Haar apply to the received data of the second stage. As a result, we obtain the values of the bass and treble of the wavelet coefficients, cut off high-frequency coefficients, which will give a significant compression ratio, and the image is reduced by eight times.

Dobeshi Wavelet

1. One-dimensional Dobeshi transform applied to aerospace hyperspectral images. Methods Dobeshi wavelet encoding images combine the use of Haar wavelets, and concepts such as weighted average and weighted difference. Its difference from the Haar wavelet is that the values of high and low wavelet coefficients are calculated on the basis of each subsequent four brightness values of the original image, while each four values include the values of the previous two. This method is inferior in comparison with the Haar wavelet, as Haar wavelet coefficients calculates on the basis of the two values.

2. Two-dimensional transformation of Dobeshi is applied to the values obtained after a one-dimensional transformation. This method gives the advantage of compression than the one-dimensional transformation of Dobeshi.

The compression algorithm based on different transformations

Consider the preparatory process of difference transformation hyperspectral AI lossless considering crossband correlation. We calculate the correlation value (crossband dependence) between the channels hyperspectral AI, which will reduce the range of the data changes, then require fewer bits to store them. We perform accounting crossband correlation between channels aerospace hyperspectral image by calculating the correlation and forming arrays deviations (differences) from the original

data values found functional dependence.

Experimental research

In order to access the effectiveness of the proposed algorithm in what concerns both the point compression ratio as the limits of its application, a number of experiments was performed using hyperspectral AI of the system RS AVIRIS (see Table 1) in the format of data of raster geoinformation system Idrisi Selva. The system AVIRIS (Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer) provides 224 spectral images with the wavelength of the band from 400 nanometers to 2500 nanometers. Also, the comparison of the proposed algorithms with the results of experiments received for universal archivers compression algorithms WinRar, WinZip and Lossless JPEG which applies the resolution of compression standard JPEG widely used in commercial compression systems were made.

The experiments are made on a computer with the processor Intel Core i5 2,5 GigaHerz and RAM 4 Gigabit under operating system Windows 7 (updating package 3), 8.1.

To determine the effectiveness of the proposed algorithm in terms of the degree of compression, as well as the limits of its applicability, a number of experiments on hyperspectral AI. The comparison of the proposed algorithm with the experimental results obtained for the purpose of compression algorithms Lossless JPEG 2000 archiver and compressor, widely used in commercial applications of remote sensing data. Experiments compression ratio in comparison with the known JPEG 2000 and archiver are presented in the graph of lossless compression, (see Fig.1).

As can be seen from Fig.1, the exponents of the compression algorithm I excel in compression ratio archiver WinRar, WinZip and Lossless JPEG more than 80%. The exponents of compression of two-dimensional and one-dimensional wavelet transform Haar, Dobeshi and Lossy JPEG 2000 (see Fig.2), exponents compression transform one-dimensional and two-dimensional Haar wavelet lossy compression superior to wavelet Dobeshi and compressor Lossless JPEG 2000.

Table 1
Examples of characteristics of test data (of the systems RS AVIRIS)

Name of hyperspectral AI	K	$M \times N$, pixel	File size, byte
f970619t01p02_r07_sc01	224	100 × 100	6140096
f970619t01p02_r07_sc02	224	200 × 200	36199296
f970619t01p02_r07_sc03	224	300 × 300	81178496
f970619t01p02_r07_sc04	224	400 × 400	144077196
f970619t01p02_r07_sc05	224	500 × 500	210746396
f970619t01p02_r07_sc06	224	600 × 600	281673728

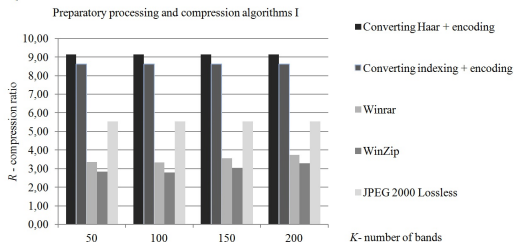


Figure 1. Comparison of compression algorithms for compression with and without losses

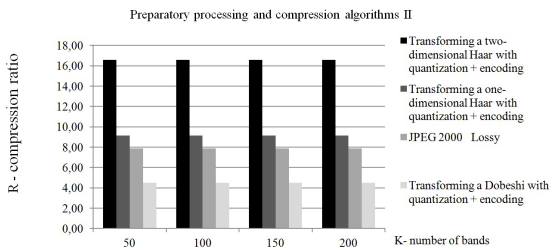


Figure 2. The exponents compression algorithms conclusion with losses

Conducted a large number of studies in different dimensions and the number of bands, the compression ratios results of which are presented (see Fig.3): a)10 bands; b)50 bands; c)200 bands.

3. Conclusion

Based on these studies should make the following conclusions:

- the preparatory process without taking into account losses from cross-band correlation and proposed algorithm improves the compression ratio to a ($R = 9$) than in the proposed algorithm;
- the proposed approach with losses determined adaptive transform based on wavelet transforms Haar and Daubechies by applying a pre-determined quantization step and the subsequent arithmetic coding;
- comparison results obtained transformed hyperspectral AI with Lossless JPEG 2000 using the obtained wavelet coefficients suggest the effectiveness of the preparatory stages.

Prospects for further research can be transformed hyperspectral AI coding adaptive algorithm SPIHT, SPECK and adaptive arithmetic coding.

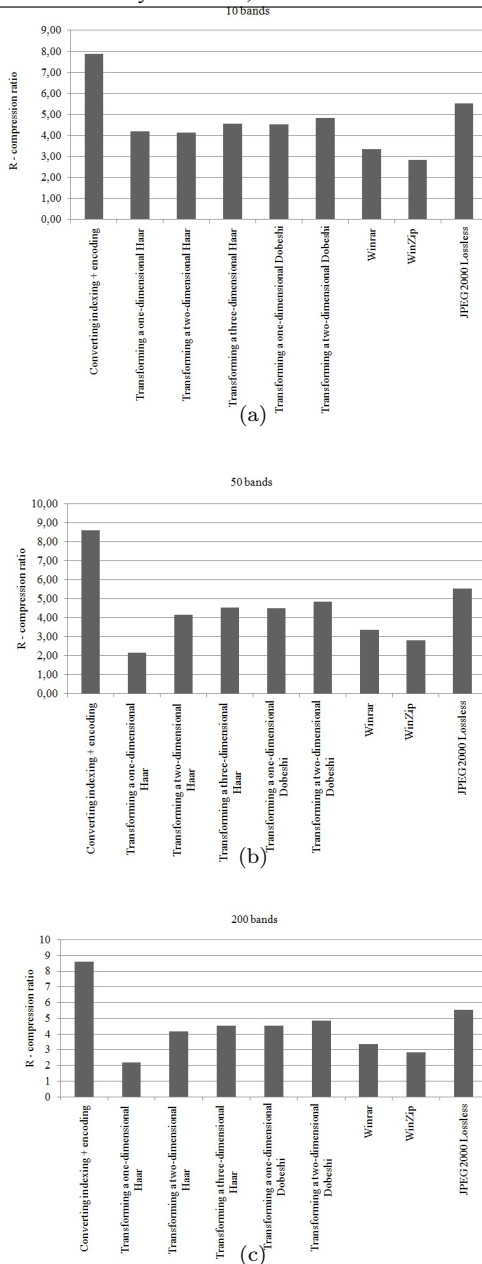


Figure 3. Dependence of compression exponent R of algorithms on the number of bands K: a) K=10; b) K=50; c) K=200

References

1. *Panchromatic film* http://www.en.wikipedia.org/wiki/Panchromatic_film.html (date of the application:15.02.2016)
2. *Multispectral image* http://en.wikipedia.org/wiki/Multispectral_image(date of the application: 16.02.2016)
3. *Hyperspectral* http://www.hyspex.no/hyperspectral_imaging/(date of the application: 16.02.2016)
4. *AVIRIS* http://aviris.jpl.nasa.gov/aviris/data_facility.html(date of the application: 16.02.2016)
5. *ERDAS IMAGINE* <http://www.gisa.ru/1489.html> (date of the application: 02.03.2016)
6. *MrSID* <https://en.wikipedia.org/wiki/MrSID> (date of the application: 03.03.2016)
7. *Overview of JPEG 2000* <http://www.jpeg.org/jpeg2000/> (date of the application: 01.03.2016)
8. *Enhanced Compression Wavelet* [https://en.wikipedia.org/wiki/ECW_\(file_format\)](https://en.wikipedia.org/wiki/ECW_(file_format))(date of the application: 01.03.2016)
9. *Mohand O., Akrouf L. and etc.* Aviris Hyperspectral Images Compression Using 3d Spiht Algorithm. *Journal of Engineering.* – 2012. – Vol. 2, Issue 10, – P. 31 – 36.
10. *Cheng-chen L. and Yin-Tsung H.* Lossless Compression of Hyperspectral Images Using Adaptive Prediction and Backward Search Schemes // *Journal of information science and engineering.* – 2011. – No. 27. P. 419 – 435.
11. *Emmanuel C.* Hyperspectral Data Compression Tradeoff. *Augmented Vision and Reality*, 3, DOI: 10.1007/978-3-642-14212-3_2, Springer-Verlag Berlin Heidelberg. –2011. – 22 p.
12. CCSDS Secretariat. Lossless multispectral hyperspectral image compression. CCSDS Recommended standard for lossless multispectral hyperspectral image compression. Recommended Standard, Space Communications and Navigation Office, 7L70. NASA Headquarters. Washington, DC 20546-0001, USA. – 2012. – 52 p.
13. *Sindhujha N.M., Arumugam A.* SPIHT based compression of hyperspectral images // *International Journal of Advanced Research in Electrical, Electronics and Instrumentation Engineering.* – 2013. – Vol. 2, Issue 10, – P. 4933 – 4938.
14. *Yuan L, Jianping L and Ke G.* Lossless compression of hyperspectral images using hybrid context prediction // *OPTICS EXPRESS.* – 2012. – Vol. 20, – No. 7, – P. 8199 – 8206.
15. *Richard W., Hamming N.* *Haar Wavelets* // CRC Press LLC. – 1999. – 28 p.
16. *Daubechies, I.* *Lectures on Wavelets* // SIAM. – 1992. – 343 p.

Author index

- A**
Axyonov S. 27
- B**
Bakanov A. S. 35
Bokova O. V. 39
Borog V. V. 43
Budochkina S. A. ... 46, 258, 264
- C**
Chechkin A. V. 52
Chuluunbaatar O. ... 100, 109, 118,
129, 280
- D**
Dashitsyrenov G. D. 59
Demidova A. V. 9, 17
Derbov V. L. . 100, 109, 118, 129,
280
Druzhinina O. V. 9, 67
- F**
Fomin M. B. 75, 233
- G**
Gerdt V. P. 100
Getmanov V. G. 43
Gevorkyan M. N. 17, 84
Gladkikh O.B. 272
Gostev I. M. 92
Gusev A. A. . 100, 109, 118, 129,
280
Gózdź A. 280
- H**
Hai L. L. 118, 129
Hnatic M. 17
- I**
Igonina E. V. 67
Ivanov A. M. 165
Ivanov A. P. 145, 153
Ivanov I. O. 43
Ivanov V. V. 140
- J**
Jacimovic M. 9
- K**
Karnilovich S. P. 159
Khachumov V. M. 233
Khokhlov N. I. 165
Khryapin K. I. 253
Klimanov S. G. 140
Korolkova A. V. 17
Kostin K. 27
Krassovitskiy P. M. 129
Kryanev A. V. . 39, 43, 140, 175,
183
Kudinov A. N. 145, 153
Kulyabov D. S. 17, 84, 189
- L**
Liang J. 27
Lovetskiy K. P. ... 59, 84, 159, 189
Lukin G. V. 175
Lyubin P. G. 197
- M**
Malykh M. D. 204
Masina O. N. 9, 67
Mikheev S. A. 145, 153
Mitin A. V. 212
Muharlyamov R. G. 220
- N**
Nguen D. T. 233
Nikolaev N. E. ... 59, 84, 189, 204
- P**
Petrov I. B. 165
Pirogov M. V. 52
Potupkin A. Y. 52

R

Ryabinkin E. A. 165
Rybakov Yu. P. 240, 245, 253

S

Sarinova A. Zh. 291
Savchin V. M. 46, 258, 264
Schesnyak E. L. 159
Schetinin E. Yu. 197
Semenova N. V. 253
Sevastianov A. L. 59, 84
Sevastianov L. A. 17, 59, 84, 159,
189, 204
Sidorov R. V. 43
Sinitsin A. E. 183
Sliva D. E. 39, 183

T

Tsvetkov I. V. 145, 153
Tsvetkov V. P. 145, 153

U

Udumyan D. K. 175

V

Vasilyeva I.I. 272
Vinitsky S. I. . 100, 109, 118, 129,
280

Z

Zamyatin A. V. 27, 291
Zhdanov M. S. 165

Научное издание

**РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ КОМПЬЮТЕРНЫЕ
И ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ СЕТИ:
УПРАВЛЕНИЕ, ВЫЧИСЛЕНИЕ, СВЯЗЬ
(DCCN-2016)**

В трех томах

Том 2

Математическое моделирование и задачи управления

Издание подготовлено в авторской редакции

Технический редактор *Н.А. Ясько*
Дизайн обложки *М.В. Рогова*

Подписано в печать 07.11.2016 г. Формат 60×84/16.
Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура Таймс.
Усл. печ. л. 17,67. Тираж 500 экз. Заказ 1579

Российский университет дружбы народов
115419, ГСП-1, г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3

Типография РУДН
115419, ГСП-1, г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, тел. 952-04-41