

ISSN 2222-8772

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
СТРУКТУРЫ
И
МОДЕЛИРОВАНИЕ**



**№ 4 (72)
2024**

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМ. Ф.М. ДОСТОЕВСКОГО»**

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
СТРУКТУРЫ
И
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

№ 4 (72)

Омск
2024

Редакционная коллегия

- А. К. Гуц** **главный редактор**, председатель редакционной коллегии, доктор физ.-мат. наук, профессор, заслуженный работник высшей школы Российской Федерации, профессор кафедры информационных технологий и математики Сочинского государственного университета, г. Сочи
- Н. Ф. Богаченко** **зам. гл. редактора**, технический редактор, канд. физ.-мат. наук, доцент, зав. кафедрой компьютерных технологий и сетей Омского государственного университета им. Ф. М. Достоевского, г. Омск
- Д. Н. Лавров** **зам. гл. редактора**, выпускающий редактор, канд. техн. наук, доцент, проректор по образовательной деятельности и информатизации Нижневартковского государственного университета, г. Нижневартовск
- В. В. Варламов** доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры прикладной математики и информатики Сибирского государственного индустриального университета, г. Новокузнецк
- В. П. Голубятников** доктор физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник Института математики СО РАН им. С. Л. Соболева, г. Новосибирск
- С. И. Горлов** доктор физ.-мат. наук, профессор, ректор Нижневартковского государственного университета, г. Нижневартовск
- А. Г. Гринь** доктор физ.-мат. наук, профессор, профессор кафедры информационной безопасности Омского государственного университета им. Ф. М. Достоевского, г. Омск
- В. А. Еровенко** доктор физ.-мат. наук, профессор, г. Минск, Республика Беларусь
- В. Zilber** Dr.Sc. (Phys.-Math.), Professor of Mathematical Logic, Mathematical Institute, University of Oxford, United Kingdom
- А. Н. Кабанов** канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры компьютерных технологий и сетей Омского государственного университета им. Ф. М. Достоевского, г. Омск
- А. В. Копыльцов** доктор техн. наук, профессор, профессор кафедры информационных систем Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), г. Санкт-Петербург
- А. Г. Коробейников** доктор техн. наук, профессор, зам. директора по науке Санкт-Петербургского филиала Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н. В. Пушкова РАН, г. Санкт-Петербург
- П. А. Корчагин** доктор техн. наук, профессор, и.о. ректора Омского государственного технического университета, г. Омск
- V. Kreinovich** Ph.D. (Phys.-Math.), Professor, Computer Science Department, University of Texas at El Paso, Texas, USA
- В. А. Плетюхов** доктор физ.-мат. наук, профессор, профессор кафедры общей и теоретической физики Брестского государственного университета им. А. С. Пушкина, г. Брест, Республика Беларусь
- Л. Б. Соколинский** доктор физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой системного программирования Южно-Уральского государственного университета (национального исследовательского университета), г. Челябинск
- А. А. Fedorenko** Ph.D. (Phys.-Math.), Researcher (CR1) at the French National Centre of Scientific Research (CNRS) Laboratoire de Physique de l'ENS-Lyon, France
- A. Jadczyk** Ph.D., Professor, Researcher, Laboratoire de Physique, Universite de Toulouse III et CNRS, France, and Ronin Institute, Montclair, New Jersey, USA

Учредитель

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского»

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций. Реестровая запись ПИ № ФС77-72200 от 15 января 2018 г.

Адрес редакции, издателя и типографии

644077, Омская обл., г. Омск, пр-т Мира, д. 55а.

Дата выхода в свет: 9.12.2024.

Тираж 25 экз.

Свободная цена.

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
СТРУКТУРЫ
И
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Журнал основан в 1998 году. В журнале публикуются статьи, в которых излагаются результаты исследований по математике, теоретической физике, компьютерным наукам, философии и истории математики и информатики.

Все статьи журнала проходят обязательное рецензирование.

Рефераты статей журнала опубликованы в «Реферативном журнале», «Mathematical Reviews» (США), «Zentralblatt für Mathematik» (Германия) и в РИНЦ (elibrary.ru). Журнал входит в Перечень рецензируемых научных изданий ВАК РФ, входящих в Международные реферативные базы данных (МРБД) и системы цитирования (Список от 31.12.2023, № 769), в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание учёных степеней (Приказ Минобрнауки России от 25.07.2014 № 793). Имеет категорию К1.

Все статьи в журнале публикуются под лицензией Attribution 4.0 International (CC-BY).

Электронная версия журнала представлена в сети:

<http://msm.omsu.ru>

<http://msm.univer.omsk.su>

Подписной индекс по каталогу «Пресса России»: 94082

Электронная почта главного редактора:

aguts@mail.ru

Электронная почта выпускающего редактора:

dmtrl@ya.ru

СОДЕРЖАНИЕ

Фундаментальная математика и физика

А.Г. Гринь. *О центральной предельной теореме для функций от величин с ρ -перемешиванием* 5

А.К. Гуц, М.Н. Подоксёнов. *О возможности использования в общей теории относительности формул типа Гаусса – Бонне – Чжэня из собственной римановой геометрии* 15

Прикладная математика и моделирование

Е.В. Ворожцов. *Новые симплектические пятистадийные схемы для задач молекулярной динамики* 23

Е.Е. Володченков. *Экономическая безопасность и динамика прибыли строительной компании с точки зрения математической теории катастроф* 48

А.И. Задорин, С.Б. Шагаев. *Двухсеточный метод на сетке Бахвалова для эллиптической сингулярно возмущённой задачи* 63

А.В. Паничкин, Л.Г. Варепо. *Численное моделирование конечно-разностным методом динамических характеристик двух вращающихся цилиндров при протекании пленки вязкой несжимаемой жидкости* 73

Р.Ю. Симанчев, И.В. Уразова. *Об одном подходе к понятию устойчивости и построению системы пороговых значений ключевых показателей социально-экономической системы* 84

С.Н. Чуканов, И.С. Чуканов, С.В. Лейхтер, А.В. Калекина, И.Е. Чернуха. *Адаптивное обучение нечётких когнитивных карт* 91

А.С. Шумилов. *Модель роста лигниндеструкторных организмов при их симбиозе: исследование на основе математической теории бифуркаций* ... 97

Продолжение на следующей странице

Наши публикации



Компьютерные науки

- Д.Э. Вильховский. *Возможности ИИ в сфере кибербезопасности: вопросы обнаружения, предотвращения и реагирования на SQL-инъекции, XSS- и CSRF-атаки* 111
- М.В. Калашник. *Обзор методов построения траекторий движения для беспилотных средств* 125
- С.В. Шабунин. *Прогнозирование объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей с использованием метода искусственной нейронной сети* 130

О ЦЕНТРАЛЬНОЙ ПРЕДЕЛЬНОЙ ТЕОРЕМЕ ДЛЯ ФУНКЦИЙ ОТ ВЕЛИЧИН С ρ -ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ

А.Г. Гринь

д.ф.-м.н., профессор, e-mail: griniran@gmail.com

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

Аннотация. Получены оценки для моментов и центральная предельная теорема для симметрических функций специального вида от величин из стационарной последовательности с ρ -перемешиванием. Для сумм случайных величин с ρ -перемешиванием такие результаты ранее были получены Магдой Пелиград.

Ключевые слова: симметрические функции от случайных величин, центральная предельная теорема, ρ -перемешивание.

Рассматриваются симметрические функции, удовлетворяющие свойству, являющемуся своеобразным аналогом правильного изменения порядка 1 для функций нескольких переменных. Получены неулучшаемые по порядку оценки моментов таких функций от величин из последовательности с ρ -перемешиванием. Эти оценки обобщают результаты М. Пелиград [1]. Для последовательностей с более жёстким φ -перемешиванием аналоги таких оценок ранее были получены автором (в качестве вспомогательных утверждений) в [2].

Пусть при каждом $n \in \mathbb{N}$ определена вещественнозначная функция $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ (т. е. определена последовательность функций, но, чтобы не загромождать рассуждений, мы не будем подчёркивать зависимость f от n какими-либо индексами и называть f последовательностью), удовлетворяющая следующим условиям (см., например, [2]):

f1. $f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_{i_1}, \dots, x_{i_n})$ для любых $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$; для любой перестановки $\{i_1, \dots, i_n\}$ множества $\{1, \dots, n\}$;

f2. $f(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, 0) = f(x_1, x_2, \dots, x_{n-1})$;

f3. $f(-\mathbf{x}) = -f(\mathbf{x})$;

f4. $f(\mathbf{x} + \mathbf{y}) \sim f(\mathbf{x}) + f(\mathbf{y})$, если $\tau(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = |f(\mathbf{x} + \mathbf{y})| + |f(\mathbf{x})| + |f(\mathbf{y})| \rightarrow \infty$ (т. е. хотя бы одно из слагаемых в $\tau(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ стремится к бесконечности). Эквивалентность в f_3 понимается следующим образом: для любого $\varepsilon > 0$ найдётся $N = N(\varepsilon) > 0$ такое, что если $\tau(\mathbf{x}, \mathbf{y}) > N$, то

$$|f(\mathbf{x} + \mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq \varepsilon |f(\mathbf{x} + \mathbf{y})|. \quad (1)$$

Свойство f4 – это и есть аналог правильного изменения порядка 1 для функций нескольких переменных (см., например, лемму 1).

Простым переобозначением переменных ($\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{y}$, $\mathbf{y}' = -\mathbf{y}$) можно сделать, чтобы в правой части (1) стояло $\varepsilon |f(\mathbf{x})|$ так, что

$$|f(\mathbf{x} + \mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq \varepsilon |f(\mathbf{x})|, \quad |\tau(\mathbf{x}, \mathbf{y})| > N,$$

а для любых $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$

$$|f(\mathbf{x} + \mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq \varepsilon |f(\mathbf{x})| + N,$$

и отсюда следует, что для любых $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ имеет место

$$|f(\mathbf{x}_1 + \dots + \mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_1) - \dots - f(\mathbf{x}_k)| \leq \varepsilon(|f(\mathbf{x}_1)| + \dots + |f(\mathbf{x}_{k-1})|) + (k-1)N, \quad (2)$$

$$|f(\mathbf{x}_1 \pm \dots \pm \mathbf{x}_k)| \leq (1 + \varepsilon)(|f(\mathbf{x}_1)| + \dots + |f(\mathbf{x}_k)|) + (k-1)N. \quad (3)$$

Следуя [3], назовём $\{b_n, n = 1, 2, \dots\}$ правильно меняющейся последовательностью порядка ρ , если $b_{[x]}$, $x > 0$ является правильно меняющейся функцией порядка ρ , где $[x]$ – целая часть x .

Пусть $\{\xi_n\} = \{\xi_n, n = 1, 2, \dots\}$ – стационарная в узком смысле последовательность и пусть $\mathcal{F}_{\leq n}$ и $\mathcal{F}_{\geq n}$ – σ -алгебры, порождённые семействами $\{\xi_i : i \leq n\}$ и $\{\xi_i : i \geq n\}$, $L_{\leq 0} = \{\xi : \xi \mathcal{F}_{\leq 0} \text{ – измерима, } \|\xi\|_2 = \sqrt{\mathbf{E}\xi^2} < \infty\}$, $L_{\geq n} = \{\eta : \eta \mathcal{F}_{\geq n} \text{ – измерима, } \|\eta\|_2 = \sqrt{\mathbf{E}\eta^2} < \infty\}$. Будем говорить, что стационарная последовательность $\{\xi_n\}$ удовлетворяет условию ρ -перемешивания, если

$$\rho(n) = \sup \left\{ \frac{|\mathbf{E}\xi\eta - \mathbf{E}\xi\mathbf{E}\eta|}{\|\xi\|_2\|\eta\|_2} : \xi \in L_{\leq 0}, \eta \in L_{\geq n} \right\} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty$$

(см., например, [4]). Взяв в этом определении

$$\xi = \mathbf{1}(A) = \begin{cases} 1, & \omega \in A \\ 0, & \omega \notin A \end{cases}, \quad A \in \mathcal{F}_{\leq 0}, \eta = \mathbf{1}(B), \quad B \in \mathcal{F}_{\geq n},$$

получим

$$|\mathbf{P}\{AB\} - \mathbf{P}\{A\}\mathbf{P}\{B\}| \leq \rho(n)\sqrt{\mathbf{P}\{A\}\mathbf{P}\{B\}}. \quad (4)$$

Будем обозначать

$$X_{k,m} = f(\xi_k, \dots, \xi_m), \quad X_n = X_{1,n}, \quad \bar{X}_n = \max_{1 \leq k \leq n} |X_k|, \quad k, m, n \in \mathbb{N},$$

$\tilde{\xi}_n = \xi_n - \xi'_n$, где последовательности $\{\xi_n\}$ и $\{\xi'_n\}$ независимы и имеют одинаковые конечномерные распределения. Последовательность $\{\tilde{\xi}_n\}$ удовлетворяет условию ρ -перемешивания с коэффициентом перемешивания $\tilde{\rho}(n) \leq \rho(n)$ [5, Theorem 6.2]. Далее пусть

$$\tilde{X}_{k,m} = f(\tilde{\xi}_k, \dots, \tilde{\xi}_m), \quad \tilde{X}_n = \tilde{X}_{1,n}.$$

Нетрудно видеть, что $\tilde{X}_{k,m}$ имеет симметричное распределение и, следовательно, $\mathbf{E}\tilde{X}_{k,m} = 0$.

Лемма 1. [6] $\{c_n^\rho\}$ является правильно меняющейся последовательностью порядка 1 (а c_n – правильно меняющейся последовательностью порядка $1/\rho$, $\rho > 0$), тогда и только тогда, когда

$$c_{n+m}^\rho \sim c_n^\rho + c_m^\rho, \quad n + m \rightarrow \infty.$$

Обозначение $n + m \rightarrow \infty$ здесь понимается в следующем смысле: $n \rightarrow \infty$, а $m = m(n)$ – произвольная последовательность натуральных чисел.

Лемма 2. Если $\{\xi_n\}$ удовлетворяет условию ρ -перемешивания, $\mathbf{E}X_n^2 < \infty$ и $\sigma_n^2 = \mathbf{D}X_n \rightarrow \infty$, то $\{\sigma_n^2\}$ является правильно меняющейся последовательностью порядка 1.

Доказательство. Обозначим

$$\tilde{\sigma}_n^2 = \mathbf{D}\tilde{X}_n = \|\tilde{X}_n\|_2^2, \quad X'_n = f(\xi'_1, \dots, \xi'_n), \quad A_n = \mathbf{E}X_n = \mathbf{E}X'_n.$$

В силу (1) и условия f3

$$\left| \tilde{X}_n - (X_n - A_n) + (X'_n - A_n) \right| \leq \varepsilon |\tilde{X}_n| + N,$$

откуда

$$\left| \tilde{\sigma}_n - \|(X_n - A_n) - (X'_n - A_n)\|_2 \right| \leq \varepsilon \tilde{\sigma}_n + N, \quad (5)$$

где ε можно сделать сколь угодно малым выбором N . Далее

$$\mathbf{E}[(X_n - A_n) - (X'_n - A_n)]^2 = 2\sigma_n^2$$

и поскольку $\sigma_n^2 \rightarrow \infty$, из (5) следует теперь $\tilde{\sigma}_n(1 + o_\varepsilon(1)) = \sqrt{2}(1 + o_n(1))\sigma_n$, т. е. $\tilde{\sigma}_n^2 \sim 2\sigma_n^2$, $n \rightarrow \infty$.

Пусть $m = m(n)$, $r = r(n) \rightarrow \infty$. В силу (2)

$$\begin{aligned} & \left| \tilde{X}_{n+m} - \tilde{X}_n - \tilde{X}_{n+r+1, n+m+r} \right| \leq \left| \tilde{X}_{n+m+r} - \tilde{X}_n - \tilde{X}_{n+1, n+r} - \tilde{X}_{n+r+1, n+m+r} \right| + \\ & + \left| \tilde{X}_{n+m+r} - \tilde{X}_{n+m} \right| + \left| \tilde{X}_{n+1, n+r} \right| \leq \varepsilon \left(\left| \tilde{X}_n \right| + \left| \tilde{X}_{n+1, n+r} \right| + \left| \tilde{X}_{n+m} \right| \right) + \left| \tilde{X}_{n+1, n+r} \right| + 3N. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\left| \tilde{\sigma}_{n+m} - \left\| \tilde{X}_n - \tilde{X}_{n+r+1, n+m+r} \right\|_2 \right| \leq \varepsilon (\tilde{\sigma}_n + \tilde{\sigma}_r + \tilde{\sigma}_{n+m}) + \tilde{\sigma}_r + 3N. \quad (6)$$

Далее из определения $\rho(n)$ выводим

$$\begin{aligned} & \left| \left\| \tilde{X}_n - \tilde{X}_{n+r+1, n+m+r} \right\|_2^2 - \tilde{\sigma}_n^2 - \tilde{\sigma}_m^2 \right| \leq 2 \left| \mathbf{E}\tilde{X}_n \tilde{X}_{n+r+1, n+m+r} \right| \leq \\ & \leq 2\rho(r)\tilde{\sigma}_n\tilde{\sigma}_m \leq \rho(r)(\tilde{\sigma}_n^2 + \tilde{\sigma}_m^2), \end{aligned}$$

и так как $\rho(r) \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$, отсюда следует

$$\left\| \tilde{X}_n - \tilde{X}_{n+r+1, n+m+r} \right\|_2 = \sqrt{\tilde{\sigma}_n^2 + \tilde{\sigma}_m^2}(1 + o_n(1)).$$

Выбрав последовательность $r(n)$ растущей столь медленно, что $\tilde{\sigma}_r = o(\tilde{\sigma}_n)$, с помощью (6) получим

$$\tilde{\sigma}_{n+m}(1 + o_\varepsilon(1)) = \sqrt{\tilde{\sigma}_n^2 + \tilde{\sigma}_m^2}(1 + o_n(1) + o_\varepsilon(1)),$$

т. е. $\tilde{\sigma}_{n+m}^2 \sim \tilde{\sigma}_n^2 + \tilde{\sigma}_m^2$, $n \rightarrow \infty$ при любой последовательности $m = m(n)$. В силу леммы 1 $\{\tilde{\sigma}_n^2\}$ является правильно меняющейся последовательностью порядка 1, а так как $\tilde{\sigma}_n^2 \sim 2\sigma_n^2$, то таковой же является и $\{\sigma_n^2\}$. ■

Следующие две леммы – это обобщение соответствующих неравенств М. Пелиград из [1].

Лемма 3. Пусть $\{\xi_n\}$ – стационарная последовательность и пусть при некоторых натуральных n и r таких, что $l = [n/r] \geq 2$ и $a_n > 0$, выполняется

$$\max_{1 \leq l \leq n} \mathbf{P}\{|X_l| > a_n\} + \sqrt{n/r} \rho(r) \leq \gamma < 1, \quad 2N \leq (1 - 9\varepsilon)a_n, \quad (7)$$

где $\varepsilon > 0$ и $N > 0$ из условия (3). Тогда при любом $x \geq a_n$

$$\mathbf{P}\{\bar{X}_n \geq 10x\} \leq \frac{1}{1 - \gamma} \left(2 \max_{2r \leq i \leq n} \mathbf{P}\{|X_i| > 4x\} + l \mathbf{P}\{\bar{X}_{2r} > x\} \right).$$

Доказательство. Пусть $E_i(x) = \{\bar{X}_{i-1} \leq x, |X_i| > x\}$, $i = 1, 2, \dots$. Тогда $E_i(x)E_j(x) = \emptyset$, $i \neq j$, $\bigcup_{i=1}^n E_i(x) = \{\bar{X}_n > x\}$.

В силу (3)

$$|X_{(i+1)r,n}| \geq \frac{1}{1 + \varepsilon} |X_{(i-1)r+j}| - |X_n| - |X_{(i-1)r+j+1, (i+1)r-1}| - \frac{2N}{1 + \varepsilon},$$

$1 \leq i \leq l - 1$, $1 \leq j \leq r$, откуда с помощью (7) получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{\bar{X}_n \geq 10x\} &\leq \mathbf{P}\{|X_n| > 4x\} + \mathbf{P}\left\{\bigcup_{i=1}^{n-1} (E_i(10x), |X_n| \leq 4x)\right\} \leq \\ &\leq \mathbf{P}\{|X_n| > 4x\} + \sum_{i=1}^{l-1} \mathbf{P}\left\{\bigcup_{j=1}^r (E_{(i-1)r+j}(10x), |X_{(i+1)r,n}| \geq 4x)\right\} + \\ &\quad + \sum_{i=1}^{l-1} \mathbf{P}\left\{\bigcup_{j=1}^r (E_{(i-1)r+j}(10x), |X_{(i-1)r+j+1, (i+1)r-1}| \geq x)\right\} + \\ &\quad + \sum_{i=(l-1)r+1}^n \mathbf{P}\{E_i(10x), |X_{i+1,n}| \geq 6x\} \leq \mathbf{P}\{|X_n| > 4x\} + \\ &\quad + \sum_{i=1}^{l-1} \mathbf{P}\left\{\bigcup_{j=1}^r E_{(i-1)r+j}(10x)\right\} \mathbf{P}\{|X_{(i+1)r,n}| \geq 4x\} + \\ &\quad + \rho(r) \sum_{i=1}^{l-1} \mathbf{P}^{1/2}\left\{\bigcup_{j=1}^r E_{(i-1)r+j}(10x)\right\} \mathbf{P}^{1/2}\{|X_{(i+1)r,n}| \geq 4x\} + \\ &\quad + \sum_{i=1}^{l-1} \mathbf{P}\left\{\max_{1 \leq j \leq r} |X_{(i-1)r+j+1, (i+1)r-1}| \geq x\right\} + \mathbf{P}\left\{\max_{(l-1)r+1 \leq i \leq n} |X_{(i+1)r,n}| \geq x\right\}. \quad (8) \end{aligned}$$

Обозначим $R_n(x) = \max_{2r \leq l \leq n} \mathbf{P}\{|X_{l,n}| > x\} = \max_{2r \leq l \leq n} \mathbf{P}\{|X_{n-l+1}| > x\}$,
 $S_m(x) = \mathbf{P}\{\bar{X}_m > x\}$. Нетрудно видеть, что

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{l-1} \mathbf{P}^{1/2} \left\{ \bigcup_{j=1}^r E_{(i-1)r+j}(10x) \right\} \mathbf{P}^{1/2} \{|X_{(i+1)r+1,n}| \geq 4x\} \leq \\ & \leq \sqrt{(l-1) \sum_{i=1}^{l-1} \mathbf{P} \left\{ \bigcup_{j=1}^r E_{(i-1)r+j}(10x) \right\} \mathbf{P}\{|X_{(i+1)r+1,n}| \geq 4x\}} \leq \\ & \leq \sqrt{(l-1)R_n(4x)S_n(10x)} \leq \sqrt{l-1} \left(S_n(10x) + \frac{1}{4}R_n(4x) \right) \end{aligned} \quad (9)$$

(в последнем переходе использовалось элементарное неравенство $xy \leq x^2 + y^2/4$.) Из (8) и (9) следует теперь

$$\begin{aligned} S_n(10x) & \leq R_n(4x) + R_n(4x)S_n(10x) + \rho(r)\sqrt{n/r} \left(S_n(10x) + \frac{1}{4}R_n(4x) \right) + \\ & + lS_{2r}(x) \leq \gamma S_n(10x) + 2R_n(4x) + lS_{2r}(x), \end{aligned}$$

откуда следует утверждение леммы. ■

Лемма 4. В условиях леммы 1

$$\mathbf{P}\{\bar{X}_n > 10x\} \leq \frac{2\gamma}{1-\gamma} \mathbf{P}\{\bar{X}_n > x\} + \frac{2}{1-\gamma} \mathbf{P}\{\bar{X}_{2r} > x\}.$$

Доказательство. Пусть $k = [m/r] \geq 2$, $E_i(x)$, $S_n(x)$, $R_n(x)$ определены так же, как в лемме 1. В силу (3)

$$|X_{(i+1)r,m}| \geq \frac{|X_m|}{1+\varepsilon} - |X_{(i-1)r+j,(i+1)r-1}| - |X_{(i-1)r+j-1}| - \frac{2N}{1+\varepsilon}, \quad 1 \leq i \leq k-1, \quad 1 \leq j \leq r.$$

Аналогично (8) получаем

$$\begin{aligned} & \mathbf{P}\{|X_m| > 4x\} = \mathbf{P}\{|X_m| > 4x, \bar{X}_m > x\} \leq \\ & \leq \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{P} \left\{ \bigcup_{j=1}^r (E_{(i-1)r+j}(x), |X_{(i+1)r,m}| \geq x) \right\} + \\ & + \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{P} \left\{ \bigcup_{j=1}^r (E_{(i-1)r+j}(x), |X_{(i-1)r+j,(i+1)r-1}| \geq x) \right\} + \\ & + \sum_{i=(k-1)r+1}^m \mathbf{P}\{E_i(x), |X_{i,m}| \geq 3x\} \leq S_m(x)R_m(x) + \\ & + \rho(r) \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{P}^{1/2} \left\{ \bigcup_{j=1}^r E_{(i-1)r+j}(x) \right\} \mathbf{P}^{1/2} \{|X_{(i+1)r,m}| \geq x\} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{P} \left\{ \max_{1 \leq j \leq r} |X_{(i-1)r+j+, (i+1)r-1}| \geq x \right\} + \mathbf{P} \left\{ \max_{(k-1)r+1 \leq i \leq m} |X_{i,m}| \geq x \right\} \leq \\
& \leq S_m(x)R_m(x) + \rho(r)\sqrt{(k-1)S_m(x)R_m(x)} + kS_{2r}(x).
\end{aligned}$$

Так как $R_m(x) \leq S_m(x)$, отсюда следует

$$R_n(4x) \leq \gamma S_n(x) + lS_{2r}(x),$$

и с помощью леммы 1 получаем теперь

$$S_n(10x) \leq \frac{\gamma}{1-\gamma} (2R_n(4x) + lS_{2r}(x)) \leq \frac{2\gamma}{1-\gamma} S_n(x) + \frac{2}{1-\gamma} S_{2r}(x).$$

■

Теорема 1. Если $\{\xi_n\}$ удовлетворяет условию ρ -перемешивания,

$$\delta = \frac{2\gamma(10)^p}{1-\gamma} < 1, \quad p > 1, \quad \frac{n}{r} \left(\frac{a_r}{a_n} \right)^p \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty. \quad (10)$$

Тогда $\sup_{n \geq 1} a_n^{-p} \mathbf{E} \bar{X}_n^p < \infty$.

Доказательство. Имеем

$$\mathbf{E}\{|\xi|^p, |\xi| \geq a_n\} = - \int_{a_n}^{\infty} x^p d\mathbf{P}\{|\xi| \geq x\} = a_n^p \mathbf{P}\{|\xi| \geq a_n\} + p \int_{a_n}^{\infty} x^{p-1} \mathbf{P}\{|\xi| \geq x\} dx.$$

Пусть $a_n \geq 1$ удовлетворяет условиям (7). С помощью леммы 4 получаем отсюда

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}\{\bar{X}_n^p, \bar{X}_n \geq 10a_n\} & \leq (10a_n)^p \mathbf{P}\{\bar{X}_n \geq 10a_n\} + p(10)^p \int_{a_n}^{\infty} x^{p-1} \mathbf{P}\{\bar{X}_n \geq 10x\} dx \leq \\
& \leq \frac{2\gamma(10)^p}{1-\gamma} a_n^p \mathbf{P}\{\bar{X}_n \geq a_n\} + \frac{2l(10)^p}{1-\gamma} a_n^p \mathbf{P}\{\bar{X}_{2r} \geq a_n\} + \\
& + \frac{2p\gamma(10)^p}{1-\gamma} \int_{a_n}^{\infty} x^{p-1} \mathbf{P}\{\bar{X}_n \geq x\} dx + \frac{2lp(10)^p}{1-\gamma} \int_{a_n}^{\infty} x^{p-1} \mathbf{P}\{\bar{X}_{2r} \geq x\} dx = \\
& \leq \frac{2\gamma(10)^p}{1-\gamma} \mathbf{E}\{\bar{X}_n^p, \bar{X}_n \geq a_n\} + \frac{2l(10)^p}{1-\gamma} \mathbf{E}\{\bar{X}_{2r}^p, \bar{X}_{2r} \geq a_n\}.
\end{aligned}$$

Отсюда

$$\mathbf{E} \bar{X}_n^p \leq (10a_n)^p + \delta \mathbf{E} \bar{X}_n^p + \frac{2l(10)^p}{1-\gamma} \mathbf{E} \bar{X}_{2r}^p,$$

$$\mathbf{E} \bar{X}_n^p \leq \frac{(10a_n)^p}{1-\delta} + \frac{2l(10)^p}{(1-\gamma)(1-\delta)} \mathbf{E} \bar{X}_{2r}^p.$$

Обозначим

$$D_n = \mathbf{E} \left(\frac{\bar{X}_n}{a_n} \right)^p, \quad A = \frac{(10)^p}{1 - \delta}, \quad C = \frac{2(10)^p}{(1 - \gamma)(1 - \delta)}.$$

Последнее неравенство принимает вид

$$D_n \leq A + C \frac{n}{r} \left(\frac{a_{2r}}{a_n} \right)^p D_{2r}, \quad r = r(n) \rightarrow \infty, \quad 2r < n.$$

По условию при достаточно больших n

$$C \frac{n}{2r} \left(\frac{a_{2r}}{a_n} \right)^p < \varepsilon < 1,$$

так что

$$D_n \leq A + \varepsilon D_{2r}. \tag{11}$$

Если $\limsup_{n \rightarrow \infty} D_n = \infty$, то найдётся подпоследовательность $n_k \rightarrow \infty$ такая, что $D_{n_k} = \max_{n \leq n_k} D_n \rightarrow \infty$, и тогда, поскольку $2r_k = 2r(n_k) < n_k$, то в силу (11)

$$D_{n_k} \leq A + \varepsilon D_{2r_k} \leq A + \varepsilon D_{n_k}, \quad \text{т. е. } D_{n_k} \leq \frac{A}{1 - \varepsilon}.$$

Полученное противоречие означает, что $\limsup_{n \rightarrow \infty} D_n < \infty$. Теорема доказана. ■

Следствие 1. Если $\{\xi_n\}$ удовлетворяет условию ρ -перемешивания, $\mathbf{E}X_n = 0$, $\sigma_n^2 = \mathbf{D}X_n \rightarrow \infty$, $\mathbf{E}|X_n|^p < \infty$, $p > 2$, тогда $\sup_{n \geq 1} \sigma_n^{-p} \mathbf{E} \bar{X}_n^p < \infty$.

Доказательство. В силу леммы 2 $\{\sigma_n\}$ является правильно меняющейся последовательностью порядка $1/2$, поэтому $\{\sigma_n\}$ эквивалентна некоторой неубывающей последовательности [3, с. 26] так, что $\max_{1 \leq k \leq n} \sigma_k \sim \sigma_n$ и

$$\max_{1 \leq k \leq n} \mathbf{P}\{|X_k| > N\sigma_n\} \leq \frac{\max_{1 \leq k \leq n} \sigma_k}{N^2 \sigma_n^2} = o_N(1).$$

Следовательно, в качестве a_n в леммах 3 и 4 можно взять $N\sigma_n$, где $N > 0$ достаточно велико. Далее, в (3) $k = n/2r \rightarrow \infty$ ($2r = m$) можно сделать растущей столь медленно, что $\frac{a_{km}}{a_m} \sim k^{1/2}$, $m \rightarrow \infty$, Тогда если в (10) $p > 2$,

$$\frac{n}{2r} \left(\frac{a_{2r}}{a_n} \right)^p = k \left(\frac{a_m}{a_{km}} \right)^p \sim k^{1-p/2} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Из теоремы 1 следует теперь утверждение следствия. При этом, так как $\mathbf{E}|X_n|^p \geq \sigma_n^p$, то полученное неравенство неумлучшаемо по порядку. ■

Следствие 2. Если $\{\xi_n\}$ удовлетворяет условию ρ -перемешивания, $\sigma_n^2 = \mathbf{D}X_n \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$, $\mathbf{E}|X_n|^p < \infty$, $p > 2$, тогда $\mathbf{E}|X_n - A_n|^p < C\sigma_n^p$, где $C > 0$ не зависит от n .

Доказательство. Обозначим через μ_n медиану величины X_n . Тогда $|\mu_n - A_n| \leq \sqrt{2}\sigma_n$ [7, с. 258] и $\mathbf{E}|X_n - \mu_n|^p \leq 2\mathbf{E}|X_n - X'_n|^p$ [7, с. 259]. Имеем

$$\|X_n - A_n\|_p \leq \|X_n - \mu_n\|_p + |\mu_n - A_n| \leq 2^{1/p}\|X_n - X'_n\|_p + \sqrt{2}\sigma_n. \quad (12)$$

Аналогично (5) с помощью следствия 1 получаем

$$\|X_n - X'_n\|_p \leq (1 + \varepsilon)\|\tilde{X}_n\|_p + N \leq C_1\tilde{\sigma}_n + N \quad (C_1 \text{ не зависит от } n),$$

и так как $\tilde{\sigma}_n \sim \sqrt{2}\sigma_n \rightarrow \infty$, то из (12) следует теперь утверждение следствия. \blacksquare

В случае когда $X_n = S_n = \sum_{i=1}^n \xi_i$ утверждение следствия 1 (даже несколько более общее) доказано в [1], которое, в свою очередь, обобщает неравенство И.А. Ибрагимова (лемма 18.5.1 из [4]): $\mathbf{E}|S_n|^p \leq C\sigma_n^p$, где $C > 0$ не зависит от n , доказанное в предположении, что $\{\xi_n\}$ удовлетворяет более жёсткому, чем ρ -перемешивание, условию φ -перемешивания.

Будем писать $\xi \stackrel{d}{=} \eta$, $\xi_n \xrightarrow{d} \eta$ и $\xi_n \stackrel{d}{\sim} \eta_n$ в случаях, когда, соответственно, распределения ξ и η совпадают, $\{\xi_n\}$ сходится к η по распределению и когда последовательности $\{\xi_n\}$ и $\{\eta_n\}$ слабо эквивалентны (см., например, [7, § 28.1]). Слабая эквивалентность равносильна поточечной сходимости разности характеристических функций величин $\{\xi_n\}$ и $\{\eta_n\}$ к нулю при $n \rightarrow \infty$ [7, с. 393].

Обозначим срез $\mathcal{N}(0, 1)$ случайную величину, имеющую нормальное распределение с параметрами 0 и 1. Будем говорить, что к последовательности $\{X_n\}$ применима центральная предельная теорема, если $\sigma_n^{-1}(X_n - A_n) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, 1)$, $n \rightarrow \infty$.

Скажем, что последовательность $\{\xi_n\}$ удовлетворяет условию (R_f) , если

$$\frac{X_{n+m}}{\sigma_{n+m}} \stackrel{d}{\sim} \frac{X'_n}{\sigma_{n+m}} + \frac{X'_m}{\sigma_{n+m}}, \quad n + m \rightarrow \infty, \quad (R_f)$$

где X_n и X'_n независимы и одинаково распределены. Ясно, что условие (R_f) можно записать так:

$$\mathbf{E} \exp\{it\sigma_{n+m}^{-1}X_{n+m}\} - \mathbf{E} \exp\{it\sigma_{n+m}^{-1}X_n\} \cdot \mathbf{E} \exp\{it\sigma_{n+m}^{-1}X_m\} \rightarrow 0, \quad n + m \rightarrow \infty.$$

Если σ_n является правильно меняющейся последовательностью порядка $1/2$ и $\sigma_{n+m}^{-1}(A_n + A_m - A_{n+m}) \rightarrow 0$, $n + m \rightarrow \infty$, то будем говорить, что выполнены условия нормировки (N).

В [8] показано, что для того, чтобы к последовательности $\{X_n\}$ была применима центральная предельная теорема и выполнялись условия нормировки (N), необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие (R_f) и последовательность $\{\sigma_n^{-2}(X_n - A_n)^2\}$ была равномерно интегрируема.

Теорема 2. Пусть $\{\xi_n\}$ удовлетворяет условию ρ -перемешивания, $\sigma_n^2 = \mathbf{D}X_n \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$, $\mathbf{E}|X_n|^p < \infty$, $p > 2$. Тогда к последовательности $\{X_n\}$ применима центральная предельная теорема.

Доказательство. Пусть $m = m(n)$, $r = r(n) \rightarrow \infty$. Из (2) аналогично (6) выводится

$$\left\| \tilde{X}_{n+m} - \tilde{X}_n - \tilde{X}_{n+r+1, n+m+r} \right\|_2 \leq \varepsilon (\tilde{\sigma}_n + \tilde{\sigma}_r + \tilde{\sigma}_{n+m}) + \tilde{\sigma}_r + 3N, \quad (13)$$

где $\varepsilon > 0$ можно сделать сколь угодно малым выбором N . Правильно меняющуюся последовательность положительного порядка $\{\tilde{\sigma}_n\}$ без ограничения общности можно считать неубывающей [3, с. 26] так, что если $r = r(n) \rightarrow \infty$ растет достаточно медленно, то

$$\frac{\varepsilon (\tilde{\sigma}_n + \tilde{\sigma}_r + \tilde{\sigma}_{n+m}) + \tilde{\sigma}_r + 3N}{\tilde{\sigma}_{n+m}} \leq 2\varepsilon + o_n(1),$$

и из (13) теперь следует

$$\frac{\tilde{X}_{n+m}}{\tilde{\sigma}_{n+m}} \stackrel{d}{\sim} \frac{\tilde{X}_n}{\tilde{\sigma}_{n+m}} + \frac{\tilde{X}_{n+r+1, n+m+r}}{\tilde{\sigma}_{n+m}}, \quad n \rightarrow \infty. \quad (14)$$

Далее

$$\left| \mathbf{E} \exp \left\{ it \frac{\tilde{X}_n + \tilde{X}_{n+r+1, n+m+r}}{\tilde{\sigma}_{n+m}} \right\} - \mathbf{E} \exp \left\{ it \frac{\tilde{X}_n}{\tilde{\sigma}_{n+m}} \right\} \cdot \mathbf{E} \exp \left\{ it \frac{\tilde{X}_{n+r+1, n+m+r}}{\tilde{\sigma}_{n+m}} \right\} \right| \leq$$

$\leq \rho(r) \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$. Это означает, что

$$\frac{\tilde{X}_n}{\tilde{\sigma}_{n+m}} + \frac{\tilde{X}_{n+r+1, n+m+r}}{\tilde{\sigma}_{n+m}} \stackrel{d}{\sim} \frac{\tilde{X}'_n}{\tilde{\sigma}_{n+m}} + \frac{\tilde{X}'_{n+r+1, n+m+r}}{\tilde{\sigma}_{n+m}} \stackrel{d}{=} \frac{\tilde{X}'_n}{\tilde{\sigma}_{n+m}} + \frac{\tilde{X}'_m}{\tilde{\sigma}_{n+m}}.$$

Вместе с (14) это означает, что для последовательности $\{\tilde{X}_n\}$ выполняется условие (R_f).

Далее в силу следствия 1

$$\tilde{\sigma}_n^{-2} \mathbf{E} \left\{ \tilde{X}_n^2, |\tilde{X}_n| \geq N\tilde{\sigma}_n \right\} \leq \frac{\mathbf{E} |\tilde{X}_n|^p}{N^{p-2}\tilde{\sigma}_n^p} = o_N(1),$$

т. е. последовательность $\{\tilde{\sigma}_n^{-2}\tilde{X}_n^2\}$ равномерно интегрируема. Теперь из [8] следует, что к последовательности $\{\tilde{X}_n^2\}$ применима центральная предельная теорема.

В силу (1) и условия f3

$$\begin{aligned} \left| \tilde{X}_n - X_n + X'_n \right| &\leq \varepsilon |\tilde{X}_n| + N \\ \tilde{\sigma}_n^{-1} \left\| \tilde{X}_n - X_n + X'_n \right\|_2 &\leq \varepsilon + N\tilde{\sigma}_n^{-1} = \varepsilon + o_n(1), \end{aligned}$$

откуда

$$\frac{\tilde{X}_n}{\tilde{\sigma}_n} \stackrel{d}{\sim} \frac{X_n}{\tilde{\sigma}_n} + \frac{X'_n}{\tilde{\sigma}_n} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, 1), \quad n \rightarrow \infty.$$

С помощью известной теоремы Н.А. Сапогова [9] отсюда можно вывести, что $(X_n - A_n) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, 1), n \rightarrow \infty$ (см. [10]). ■

Теорема 2 обобщает аналогичный результат М. Пелиград из [1], который, в свою очередь, обобщает известную теорему И.А. Ибрагимова [4, теорема 18.5.1].

Литература

1. Peligrad M. The convergence of moments in the central limit theorem for ρ -mixing sequences of random variables // Proceeding of the AMS. 1987. Vol. 101, No. 1. P. 142–148.
2. Гринь А.Г. О притяжении к нормальному закону функций от слабо зависимых величин // Математические структуры и моделирование. 2020. No. 2 (54). С. 24–39.
3. Сенета Е. Правильно меняющиеся функции. М.: Наука, 1985. 141 с.
4. Ибрагимов И.А., Линник Ю.В. Независимые и стационарно связанные величины. М.: Наука, 1965. 524 с.
5. Csaki P., Fischer J. On the general notion of maximal correlation // Magyar Tud. Akad. Mat. Kutato Int. Kozl. 1963. Vol. 8. P. 27–51.
6. Гринь А.Г. Об областях притяжения для сумм зависимых случайных величин // Теория вероятностей и её применение. 1990. Т. 35, № 2. С. 955–970.
7. Лоэв М. Теория вероятностей. М.: ИЛ, 1962. 719 с.
8. Гринь А.Г. О центральной предельной теореме для симметрических функций от зависимых величин // Математические структуры и моделирование. 2017. № 1 (41). С. 5–11.
9. Сапогов Н.А. О независимых слагаемых суммы случайных величин, распределённой приближено нормально // Вестник Ленинградского университета. 1959. Вып. 19. С. 78–105.
10. Гринь А.Г. Об асимптотически нормальных функциях от зависимых величин // Математические структуры и моделирование. 2019. № 4 (52). С. 5–16.

ON THE CENTRAL LIMIT THEOREM FOR FUNCTIONS OF VARIABLES WITH ρ -MIXING

A.G. Grin'

Dr.Sc. (Phys.-Math.), Professor, e-mail: griniran@gmail.com

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Abstract. Estimates for moments and a central limit theorem for symmetric functions of a special type of quantities from a stationary sequence with ρ -mixing are obtained. For sums of random quantities with ρ -mixing, such results were previously obtained by Magda Peligrad.

Keywords: symmetric functions of random variables, central limit theorem, ρ -mixing.

Дата поступления в редакцию: 14.10.2024

О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ОБЩЕЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ ФОРМУЛ ТИПА ГАУССА – БОННЕ – ЧЖЭНЯ ИЗ СОБСТВЕННО РИМАНОВОЙ ГЕОМЕТРИИ

А.К. Гуц¹

д.ф.-м.н., профессор, e-mail: aguts@mail.ru

М.Н. Подоксёнов²

к.ф.-м.н., доцент, e-mail: p._michael@mail.ru

¹Сочинский государственный университет, Сочи, Россия

²Витебский государственный университет им. П.М. Машерова, Витебск, Республика
Беларусь

Аннотация. В статье показано как можно применять формулы типа Гаусса – Бонне – Чжэня, выведенные для собственно римановой геометрии, с целью решения задач по оценке плотности энергии, необходимой для изменения топологии пространства-времени.

Ключевые слова: общая теория относительности, лоренцевы многообразия, теорема Гаусса – Бонне – Чжэня, изменение топологии, кротовые норы, оценки энергии.

Введение

В общей теории относительности (ОТО) существуют задачи, которые требуют оценки энергии, необходимой для порождения в пространстве кротовых нор. Фактически речь идёт об изменении топологии физического 3-мерного пространства, и значит и 4-мерного пространства-времени. Эти задачи касаются сверхбыстрых межзвёздных перелётов и построения машины времени, т. е. изменения топологии пространства-времени таким образом, чтобы образовалась замкнутая армениподобная кривая, ведущая из настоящего в прошлое.

Первая такая оценка энергии, точнее плотности энергии, была сделана в 1982 г. в статьях [1–3] одного из авторов и касалась порождения как 4-мерных кротовых нор, нарушающих связность физического пространства, так и 3-мерных кротовых нор, изменяющих односвязность пространства. Для получения оценки плотности энергии источника, порождающего изменение топологии, был использован аналог формулы Гаусса – Бонне – Чжэня для 3-мерного риманова многообразия, получен-

ной Ревентосом [4]:

$$\frac{1}{2\pi l(\xi)} \int_{M^3} \{K(\xi^\perp) + 3K(\xi)\} dv = 2b_0(M^3) - b_1(M^3) + d_0, \quad (1)$$

где (M^3, g) – замкнутое связное ориентируемое риманово многообразие размерности 3, а ξ – регулярное единичное векторное поле Киллинга на M^3 .

Как оказалось, с помощью формулы Ревентоса (1) можно оценить знак энергии [5]. Это очень важно, поскольку в случае положительной энергии мы имеем дело с классическим источником энергии, с классической материей. Отрицательная энергия говорит о том, что её источник является экзотическим, практически неизвестным.

В 1987 г. о порождении 3-мерных кротовых нор заговорил К. Торн с соавторами, имея в виду соответствующую конструкцию машины времени [6, 7]. Однако они столкнулись с тем, что 3-мерные кротовые норы нестабильны, «схлопываются», и для поддержания их стабильности нужна экзотическая материя.

Наконец, проект сверхбыстрого межзвёздного корабля Алькубьерре, или так называемого варп-корабля [8], при полете которого, как считалось, не меняется топология, в действительности, когда сравнивается энергия, требуемая для выхода на сверхсветовой режим полёта, и энергия, необходимая для порождения кротовых нор, неизбежно реализуется только за счёт изменения топологии. Более того, такой полёт происходит скорее всего по 4-мерной кротовой норе [5]. Для прояснения столь важных деталей полёта варп-корабля была использована формула Ревентоса.

Однако важно не только понять, каковы происходящие изменения топологии 3-пространства, важно ещё прояснить, как меняется топология самого пространства-времени. Для этого надо обратиться к формулам типа Гаусса – Бонне – Чжэня.

На сегодня мы имеем достаточно много различных формул типа Гаусса – Бонне – Чжэня как для псевдоримановых многообразий, так и для собственно римановых. В статье [9] мы продемонстрировали как может быть использована такая формула, полученная Авезом [10] для 4-мерных псевдоримановых многообразий. В статье мы неявно предполагали, что характеристика Эйлера – Пуанкаре $\chi(M^4)$ не равна нулю. Это тонкий момент, поскольку, как известно, $\chi(M^4) = 0$ в случае лоренцевой метрики на многообразии. Однако это в случае отсутствия каких-либо аномалий у лоренцевой метрики или у соответствующего времениподобного векторного поля. Ниже мы говорим об этом подробнее.

Хотя формул типа Гаусса – Бонне – Чжэня для псевдоримановых многообразий, казалось бы, предостаточно, не стоит пренебрегать для достижения наших целей подобными формулами, полученными и для собственно римановых многообразий. Тем более что поиск таких формул для случая римановых многообразий ведётся более активно, чем для лоренцевых многообразий, и делают это весьма квалифицированные математики. Другими словами, шанс, что на этом направлении будут по-

лучены самые разнообразные и изощрённые варианты формул типа Гаусса – Бонне – Чжэня, учитывающие сложнейшие пространственные построения реальности как явные, так и скрытые, и самые разнообразные сферы физической науки, гораздо большие, чем в лоренцевом случае.

Отчасти, наше обращение к римановым формулам подогревается гипотезой Хокинга о евклидовой природе пространства-времени. Хокинг ратовал за сигнатуру $(++\dots+)$, отводя сигнатуре $(+-\dots-)$ ту же судьбу, что и Кант природе пространства и времени. И то и другое всего лишь формы восприятия реальности человеком.

В статье, говоря о компактных многообразиях, имеются в виду замкнутые многообразия, т. е. компактные многообразия без края.

1. Гипотеза Хокинга и римановы многообразия

Итак, рассматриваем формулы Гаусса – Бонне – Чжэня, относящиеся к римановой геометрии чётномерных римановых многообразий M^{2k} . Последние, казалось бы, не имеют отношения к пространству-времени. Однако если мы осуществляем поворот Вика $x^0 \rightarrow ix^0$ в многообразии с сигнатурой $(- + \dots +)$, то оказываемся уже в римановом многообразии с сигнатурой $(+\dots+)$, и этот приём может оказаться полезным в физических приложениях. Этот приём успешно использовал Хокинг [11], но в рамках квантовой теории, считая, что лоренцева метрика – это результат нашего восприятия Мира, а реальный мир имеет евклидову сигнатуру $(+ + \dots +)$.

В нашем случае мы применяем формулы Гаусса – Бонне – Чжэня для решения интересующих нас задач по искусственному изменению топологии в рамках классической общей теории относительности ОТО и должны ответить на вопрос о правомерности обращения к повороту Вика конкретно в классической теории.

«Впрочем, соответствие между псевдоримановыми и римановыми пространствами может быть установлено и без перехода к комплексному времени». На этот факт обратил внимание М.Ю. Константинов [12].

Суть в том, что соответствие между римановой h_{ij} и лоренцевой g_{ij} метриками устанавливается равенствами

$$g_{ij} = u_i u_j - h_{ij} \text{ и } h_{ij} = u_i u_j - g_{ij},$$

которые в общем случае являются локальными. А чтобы такое соответствие было справедливо на всём пространстве-времени, необходимо существование на M^4 нигде не обращающегося в нуль векторного поля u^i , что эквивалентно, как известно, условию равенства нулю характеристики Эйлера – Пуанкаре.

Тензоры кривизны Римана – Кристоффеля, Риччи и скалярная кривизна метрик h_{ik} и g_{ik} связаны хорошо известными формулами биметрического формализма. Например, для тензора кривизны Риччи имеем:

$$R_{(h)ik} = R_{(g)ik} + \Pi_{ik;m}^m - \Pi_{im;k}^m + \Pi_{ik}^m \Pi_{ms}^s - \Pi_{is}^m \Pi_{mk}^s,$$

$$\Pi_{jk}^i = \Gamma_{(h)jk}^i - \Gamma_{(g)jk}^i.$$

Здесь точка с запятой обозначает ковариантную производную в соответствии с метрикой g_{ik} , а взятые в скобки индексы h и g обозначают величины, вычисленные по соответствующим метрикам.

При этом соответствии действия имеют вид:

$$S = \int (kR_h + L_m) \sqrt{h} d^4x$$

— для римановой метрики на M^4 ,

$$S = \int (-kR_g + L_m + F(u_i, u_{i,j})) \sqrt{g} d^4x \quad (b)$$

— для лоренцевой метрики на M^4 , где

$$F(u_i, u_{i,j}) = 2R_g^{ik} u_i u_k + (2u^i u^k - g^{ik})(\Pi_{ik;m}^m - \Pi_{im;k}^m + \Pi_{ik}^m \Pi_{ms}^s - \Pi_{is}^m \Pi_{mk}^s),$$

$$(-kR_g + F(u_i, u_{i,j})) \sqrt{-g} = kR_h \sqrt{h}.$$

Формально функционал действия (b) описывает представляемое людьми по мысли Хокинга пространство-время, порождаемое полями обычной материи (слагаемое L_m) и векторным полем u_i с минимальной связью. Однако, в отличие от обычных моделей с минимальной связью, связь между обычной материей и векторным полем u^i отсутствует [12].

Поэтому слагаемое $F(u_i, u_{i,j})$ в интеграле (b) следует рассматривать как лагранжиан тёмной материи (тёмной энергии) [12]. Поэтому принятие классического варианта гипотезы Хокинга о евклидовой природе пространства-времени влечёт неизбежное существование тёмной материи или тёмной энергии [12].

В случае наших интересов мы, принимая в расчёт распространённое признание существования тёмной материи или тёмной энергии, можем использовать римановы варианты формулы Гаусса – Бонне – Чжэня для расчёта энергии, необходимой для порождения кротовых нор, основываясь при этом на уравнениях Эйнштейна (при этом, конечно, надо предварительно из получаемой плотности энергии T_{00} вычитать долю тёмной материи и тёмной энергии).

Но пока мы не учли то, что поскольку поле везде ненулевое, то характеристика Эйлера – Пуанкаре $\chi(M^4) = 0$. Это разрушает искомую нами функциональную связь между кривизной в левой части формулы Гаусса – Бонне – Чжэня, а значит и с плотностью энергии рассматриваемой в пространстве материи и нашего энергетического воздействия с целью образования кротовой норы, с числами Бетти в правой части равенства формулы Гаусса – Бонне – Чжэня [2, 3].

Выход из неприятной ситуации прост – поле u_i не везде ненулевое, оно обладает сингулярностями. Точнее, до начала нашего энергетического воздействия поле u_i не имело сингулярностей, и поэтому $\chi(M_{\text{до}}^4) = 0$, а после, т. е. в пространстве времени-времени $\chi(M_{\text{после}}^4) = 0$, уже приобретшем кротовую нору, они появляются.

С одной стороны, это, скорее всего, так и есть, поскольку в моделях [2, 3], которые мы строили для описания процесса образования кротовой норы, метрика пространства претерпевала разрывы производных, а это сингулярности метрики.

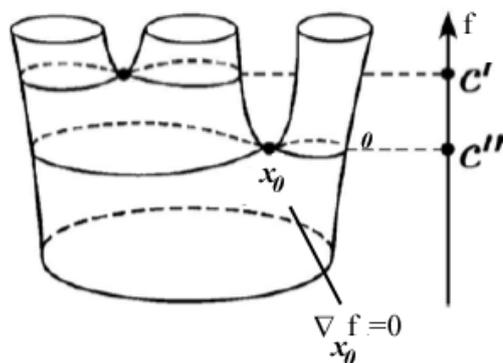


Рис. 1. Рождение кротовой норы, появление критической точки у функции f

С другой стороны, выходит, что «прорывая» кротовые норы, мы воздействуем на поле u^i , или на тёмную материю (!), а это как-то противоречит тому, что она, как считается, не взаимодействует с обычной материей. Правда, мы воздействуем не на неё, а меняем топологию пространства-времени, и, как следствие, тёмная материя «приспосабливается» к новым условиям. О таком влиянии на тёмную материю в литературе ничего не говорится.

Наконец, при рождении кротовой норы от пространства-времени отходит «ручка» и происходит появление нуля у векторного поля $u = \nabla f$ (см. рис. 1). Функция f – это функция Морса, которая определяет ненулевую правую часть в формуле Гаусса – Бонне – Чжэня из теорем 1, 2 из следующего параграфа.

2. Формула Гаусса – Бонне – Чжэня для замкнутого M^{2k} и функции Морса

Пусть M^n – гладкое компактное многообразие без края, т. е. замкнутое. Точка $x \in M^n$ является *критической точкой* гладкой функции $f : M^n \rightarrow \mathbb{R}$, если $d_x f = 0$ или $\nabla_x h = 0$.

Функцией Морса на гладком многообразии M^n называется гладкая функция $f : M^n \rightarrow \mathbb{R}$, все критические точки которой невырождены, т. е. в этих точках $\det d_x^2 h \neq 0$.

Функция $f : M^n \rightarrow \mathbb{R}$, определённая на компактном многообразии M^n с краем ∂M^n , называется *функцией Морса*, если:

- 1) все её критические точки не вырождены и содержатся во внутренности многообразия M^n ;
- 2) ограничение $f|_{\partial M^n}$ является функцией Морса на замкнутом многообразии ∂M^n .

Теорема 1. (Gauss – Bonnet – Chern [13]). Пусть R обозначает тензор кривизны Римана, связанный со связностью Леви – Чивиты на замкнутом римановом мно-

гообразии M^{2k} , а $Pf(R)$ обозначает плотность кривизны Пфаффа. Тогда

$$\frac{1}{(2\pi)^k} \int_{M^{2k}} Pf(R) = ind(\nabla f), \quad (2)$$

где f – любая функция Морса на M^{2k} .

Мы видим, что в правой части имеем число, отличное от нуля, если векторное поле $v = \nabla f$ имеет особые точки.

Рассмотрим другую формулу, написанную непосредственно для риманова многообразия M^4 с сигнатурой $(+++)$.

Теорема 2. (Chern [14]). Пусть (M^4, g) – замкнутое ориентированное 4-мерное риманово многообразие, тогда

$$\frac{1}{32\pi^2} \int_{M^4} (|Riem|^2 - 4|Ric|^2 + R^2) dv_g = \chi(M^4),$$

где:

$$\begin{aligned} |Riem|^2 &= 8(R_{1234}^2 + R_{1324}^2 + R_{1423}^2 + R_{1334}^2 + R_{1424}^2 + R_{1434}^2 + R_{2324}^2 + R_{2334}^2 + R_{2434}^2) + \\ &+ 4(R_{1212}^2 + R_{1313}^2 + R_{1414}^2 + R_{2323}^2 + R_{2424}^2 + R_{3434}^2), \\ |Ric|^2 &= \sum_{i,j=1}^4 R_{ij}^2, \end{aligned}$$

R – скалярная кривизна.

Характеристику Эйлера – Пуанкаре надо будет рассчитывать благодаря теореме Пуанкаре – Хопфа с помощью индекса поля u^i [15]:

$$\chi(M^4) = ind(u).$$

Если теперь мы рассмотрим либо сами уравнения Эйнштейна для метрики h_{ik} , либо их аналог в той или иной гравитационной теории Эйнштейна – Гаусса – Бонне и сможем с их помощью пересчитать $Pf(R)$ через плотность энергии ε из правой части полевых уравнений, то формула (2) даст нам желанную оценку скачка энергии, требуемую для изменения топологии пространства-времени. Хотя понятно, опыт работы с формулой (1) в статье [5] подсказывает нам, что эта оценка будет, скорее всего, иметь вид:

$$\varepsilon \sim \frac{c^4}{G} \sqrt[m]{sg(L) \cdot sg(\delta[ind(\nabla f)])}, \quad m \geq 1, \quad (3)$$

где $sg(\delta[ind(\nabla f)])$ – знак изменения величины $ind(\nabla f)$ при перестройке топологии, а $sg(L)$ – знак, появляющийся при ε^m при вычислениях левой части с использованием уравнений поля типа уравнений Эйнштейна. Заметим, что $m = 2$ при использовании теоремы 1 и 2.

В результате мы находим не только абсолютное значение затрат энергии на преобразование топологии пространства-времени, но и определяем знак энергии, хотя не исключено и её мнимое значение. В случае положительности правой части соотношения (3) мы имеем дело с классической энергией, в остальных случаях мы сталкиваемся с экзотическим источником энергии (см., например, [5]).

В любом случае абсолютная величина энергии имеет очень большое значение, к которому из естественных объектов близки лишь нейтронные звезды. Варп-корабль уйдёт в кротовую нору, если величина (3) меньше, чем $(1/4)M_{\odot}$.

Заключение

Мы представили алгоритм расчёта энергии, которая востребуется при попытке изменить топологию пространства-времени, применимый в случае обращения к любой теории гравитационного поля, к любым полевым уравнениям типа уравнений Эйнштейна. В случае использования ОТО основная трудность состоит в пересчёте членов вида $R_{ijkl}R^{ijkl}$.

Литература

1. Гуц А.К. Космический корабль, разрушающий пространство // Техника – молодёжи. 1983. № 11. С. 14–16.
2. Гуц А.К. Изменение топологии физического пространства в замкнутой вселенной // Известия вузов. Физика. 1982. № 5. С. 23–26.
3. Гуц А.К. Нарушение связности физического пространства // Известия вузов. Физика. 1983. № 8. С. 3–6.
4. Reventos A. On the Gauss-Bonnet formula on the odd-dimensional manifolds // Tohoku Mathematical Journal. 1979. Vol. 31, No. 2. P. 165–178.
5. Гуц А.К. Топологический характер работы варп-двигателя Алькубьерре при выходе на сверхсветовую скорость // Эффективное обеспечение научно-технического прогресса: исследование задач и поиск решений: сборник статей Международной научно-практической конференции (г. Магнитогорск, РФ, 25 августа 2024г.). Уфа: Аэтерна, 2024. С. 6–9.
6. Morris M.S., Thorne K.S. Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity // American Journal of Physics. 1988. Vol. 56, No. 5. P. 395–412.
7. Торн К.С. Чёрные дыры и складки времени: Дерзкое наследие Эйнштейна. М.: Издательство физико-математической литературы, 2007. 616 с.
8. Alcubierre M. The Warp drive: Hyper-fast travel within general relativity // Classical and Quantum Gravity. 1994. Vol. 11. P. L73–L77. arXiv: gr-qc/0009013.
9. Гуц А.К., Подоксёнов М.Н. Топологическое описание образования кротовых нор в общей теории относительности // Пространство, Время и Фундаментальные взаимодействия. 2022. № 4 (41). С. 4–12.

10. Avez A. Characteristic classes and Weyl tensor: Applications to general relativity // Proceedings of the National Academy of Sciences. USA. 1970. Vol. 66. P. 265–268.
11. Hawking S. Euclidian Quantum Gravity, in Recent Developments in Gravitation / ed. S. Deser. N.Y.; London: Plenum Press, 1978. 356 p.
12. Константинов М.Ю. Гипотеза Хокинга о евклидовой природе пространства-времени в классической физике // Международный научно-исследовательский журнал. 2016. № 12 (54). Ч. 5. С. 8–12. URL: https://research-journal.org/media/PDF/irj_issues/12-5-54.pdf#page=8 (дата обращения: 10.08.2024).
13. Berwick-Evans D. The Chern-Gauss-Bonnet Theorem via supersymmetric Euclidean field theories. URL: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1310.5383> (дата обращения: 10.08.2024).
14. Marigliano L. The Weyl Tensor of Riemannian Manifolds and some Topological Invariants in Dimension Four // Tesi di Laurea Magistrale. Anno Accademico, 2021. 96 p.
15. Milnor W. Topology from the differentiable viewpoint. Charlottesville: University Press of Virginia, 1965.

**ON THE POSSIBILITY OF APPLYING FORMULAS IN THE GENERAL THEORY
OF RELATIVITY OF THE GAUSS – BONNET – CHERN TYPE FROM RIEMANNIAN
GEOMETRY**

A.K. Guts¹

Dr.Sc. (Phys.-Math.), Professor, e-mail: aguts@mail.ru

M.N. Podoksenov²

Ph.D. (Phys.-Math.), Associate Professor, e-mail: p_michael@mail.ru

¹Sochi State University, Sochi, Russia

²Masherov Vitebsk State University, Vitebsk, Belarus'

Abstract. In the article is shown how formulas of the type can be applied Gauss – Bonnet – Chern, derived for Riemannian geometry, in order to solve problems of estimating the energy density necessary to change the topology of space-time.

Keywords: general relativity, Lorentzian manifolds, Gauss – Bonnet – Chern theorem, topology change, wormholes, energy estimates.

Дата поступления в редакцию: 15.09.2024

НОВЫЕ СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ ПЯТИСТАДИЙНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Е.В. Ворожцов

д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник, e-mail: vorozh@itam.nsc.ru

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирское отделение РАН, Новосибирск, Россия

Аннотация. Рассматривается семейство Фореста – Рута симплектических пятистадийных схем типа Рунге – Кутты для численного решения задач молекулярной динамики, описываемых системами с распадающимся гамильтонианом. Предложен двухшаговый оптимизационный метод нахождения симплектических схем высокого порядка точности. По сути дела, предложен метод повышения точности симплектических разностных схем с фиксированным числом стадий за счёт получения вещественных схем с наименьшей нормой ведущего члена погрешности аппроксимации разностной схемы. Найдены 146 новых пятистадийных схем четвёртого порядка точности с помощью численной оптимизации. Проведено сравнение условий устойчивости схем Фореста – Рута с числом стадий 3, 4 и 5. Точность новых схем продемонстрирована на примере численного решения задачи Кеплера двух тел. Показано, что новые пятистадийные схемы обеспечивают более высокую точность сохранения энергии частиц, чем лучшие известные четырёхстадийные схемы четвёртого порядка точности и известная схема Верле второго порядка точности.

Ключевые слова: молекулярная динамика, уравнения Гамильтона, симплектические разностные схемы, оптимизационные методы, устойчивость.

Введение

В настоящее время явные симплектические интеграторы, разработанные в рамках молекулярной динамики, получили широкое распространение при численном моделировании разнообразных явлений и процессов в таких областях естественных наук, как физика плазмы [1], небесная механика [2], биология [3], медицина [4], механика твёрдого тела [5].

Уравнения молекулярной динамики – обыкновенные дифференциальные уравнения Гамильтона, описывающие взаимодействие материальных частиц. Количество N этих уравнений пропорционально количеству частиц, присутствующих в решаемой задаче. Значения N могут достигать величин порядка $\mathcal{O}(10^4)$ – $\mathcal{O}(10^6)$. Преимущество явных схем – простота их программной реализации. Но, с другой стороны, эти схемы накладывают существенные ограничения на временной шаг из требования устойчивости. Даже если счёт происходит устойчиво, может развиваться во времени явление дрейфа полной энергии системы частиц [6, 7]. Суть этого

явления, возникающего при использовании приближенных симплектических интеграторов, состоит в постепенном изменении величины полной энергии в замкнутой системе с течением времени несмотря на то, что теоретически энергия должна быть константой движения и не должна изменяться [8]. В этих случаях приходится делать пробные расчёты задачи с уменьшающимися временными шагами h .

В данной статье рассматриваются методы расщепления типа Рунге – Кутты (РРК). В этих методах ищется решение гамильтоновых уравнений в фазовом пространстве (координаты – импульсы частиц). Эволюция системы частиц в фазовом пространстве может рассматриваться как однопараметрическая группа преобразований, которая даётся эволюционным оператором (пропагатором) [5]. В работе [9] были предложены РРК-схемы второго и третьего порядков точности.

Симплектический четырёхстадийный РРК-интегратор четвёртого порядка точности был впервые предложен в [10], где была получена одна вещественная РРК-схема. Та же схема была вскоре найдена независимо Форестом [11] и Нери [12]. Первые журнальные статьи, описывающие интегратор четвёртого порядка точности, это работы [10, 13], в которых были найдены в аналитическом виде две вещественные РРК-схемы четвёртого порядка точности без использования базисов Грёбнера. Одна из этих схем совпадает со схемой, найденной ранее в [11, 12].

В работах [14–18] имеется подробный обзор методов построения симплектических схем для решения уравнений гамильтоновой механики, в которых гамильтониан взаимодействующих частиц распадается на сумму кинетической и потенциальной энергии. Показано, что задача построения симплектических схем заданного порядка точности с фиксированным количеством стадий сводится к задаче нахождения корней системы полиномиальных уравнений, возникающих из требования обращения в ноль выражений для коэффициентов погрешности аппроксимации схемы. Оказалось, что использование техники базисов Грёбнера [19–21], реализованной в пакете программ *Mathematica* [22], позволяет находить корни больших систем полиномиальных уравнений. В [16, 18] было найдено в семействе четырехстадийных схем Фореста–Рута [13] 97 новых четырёхстадийных схем четвёртого порядка точности с помощью параметрических базисов Грёбнера и результатов Сильвестра. В K -стадийных схемах Фореста – Рута (FR) ($K > 1$) на каждой стадии выполняются однотипные арифметические операции, и их количество одинаково на каждой стадии. Поэтому ясно, что машинное время, потребное для вычислений на всех K стадиях FR-метода, пропорционально числу стадий K . Тем не менее, использование РРК-схем с увеличенным числом стадий может давать значительную экономию машинного времени компьютера за счёт увеличения временного шага без потери точности численного решения благодаря высокому порядку точности метода.

В [15, 17, 23] было проведено сравнение точности явных симплектических схем порядков точности от 2 до 5 на примере задачи Кеплера двух тел, имеющей аналитическое решение. В качестве схемы второго порядка точности использовалась для сравнения известная схема Верле [24]. Было показано, что схемы, имеющие более высокие порядки точности, чем схема Верле, обеспечивают намного меньшие относительные ошибки в полной энергии, чем схема Верле. Например, в случае схем четвёртого и пятого порядков точности эти ошибки на шесть–семь десятичных

порядков точности меньше, чем в случае схемы Верле.

1. Семейство симплектических схем Фореста – Рута

В молекулярной динамике расчёт движения N частиц ($N \geq 1$) осуществляется путем решения уравнений Гамильтона [8]:

$$\frac{dx_{\alpha l}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha l}}, \quad \frac{dp_{\alpha l}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_{\alpha l}}, \quad H(x_{\alpha l}, p_{\alpha l}) = \mathcal{K}(p_{\alpha l}) + V(x_{\alpha l}), \quad \mathcal{K}(p_{\alpha l}) = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^{N_d} \frac{p_{\alpha l}^2}{2m_l}, \quad (1)$$

где t – время, l – номер частицы, N_d – размерность евклидова пространства точек (x_1, \dots, x_{N_d}) , $1 \leq N_d \leq 3$. Например, $N = 1$ и $N_d = 1$ в задаче о гармоническом осцилляторе, т. е. единственная частица может двигаться или осциллировать только вдоль оси x_1 [25,26]. Задача двух тел (задача Кеплера) [8] – пример двух частиц (тел), которые перемещаются в одной и той же плоскости, т. е. $N = 2$, $N_d = 2$. Величина $\mathcal{K}(p_{\alpha l})$ в (1) – кинетическая энергия, где $p_{\alpha l}$ – количество движения вдоль оси x_{α} , m_l – масса l -й частицы; $V(x_{\alpha l})$ – потенциальная энергия взаимодействия частиц, $H(x_{\alpha l}, p_{\alpha l})$ – гамильтониан системы частиц. Решение системы уравнений (1) при заданных начальных условиях $x_{\alpha l}(t = 0) = x_{\alpha l}^0$, $p_{\alpha l}(t = 0) = p_{\alpha l}^0$ представляет собой каноническое преобразование от начального состояния к конечному состоянию

$$x_{\alpha l} = x_{\alpha l}(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0, t), \quad p_{\alpha l} = p_{\alpha l}(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0, t). \quad (2)$$

Решение (2) уравнений Гамильтона (1) сохраняет фазовый объём (теорема Лиувилля [8]), условие сохранения этого объёма имеет следующий вид [8]:

$$|G| = \left| \frac{\partial(x_{\alpha l}, p_{l\alpha})}{\partial(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0)} \right| = 1, \quad (3)$$

где G – якобиан.

Для удобства дальнейшего изложения перепишем уравнения Гамильтона (1) для одной частицы в виде:

$$dx/dt = p/m, \quad dp/dt = f(x), \quad H = p^2/(2m) + V(x), \quad (4)$$

где $f(x)$ – сила, действующая на частицу, $f(x) = -\partial H(x)/\partial x$.

Предположим, что значения x^n и p^n известны на n -ом временном слое, $n = 0, 1, 2, \dots$. Мы хотим найти решение системы (4) на $(n + 1)$ -м временном слое $t^{n+1} = t^n + h$, где h – временной шаг. С этой целью разобьём переход с t^n к t^{n+1} на K стадий, $K \geq 1$. В семействе схем Фореста – Рута этот переход выполняется следующим образом [9, 13]:

$$p^{(i)} = p^{(i-1)} + c_i h f(x^{(i-1)}), \quad x^{(i)} = x^{(i-1)} + d_i \frac{h}{m} p^{(i)}, \quad i = 1, \dots, K. \quad (5)$$

Легко показать, что условие $|G| = \left| \frac{\partial(p^{(i)}, x^{(i)})}{\partial(p^{(i-1)}, x^{(i-1)})} \right| = 1$ выполняется для любого $i \geq 1$. Действительно,

$$\left| \frac{\partial(p^{(i)}, x^{(i)})}{\partial(p^{(i-1)}, x^{(i-1)})} \right| = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial p^{(i)}}{\partial p^{(i-1)}} & \frac{\partial p^{(i)}}{\partial x^{(i-1)}} \\ \frac{\partial x^{(i)}}{\partial p^{(i-1)}} & \frac{\partial x^{(i)}}{\partial x^{(i-1)}} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} 1 & c_i h f'(x^{(i-1)}) \\ 0 & 1 \end{array} \right| = 1.$$

Если уже выполнено n шагов по t ($n > 1$), то, согласно (3), должно выполняться равенство $\left| \frac{\partial(p^{(n)}, x^{(n)})}{\partial(p^{(0)}, x^{(0)})} \right| = 1$. Для доказательства этого равенства воспользуемся формулой

$$\left| \frac{\partial(p^{(n)}, x^{(n)})}{\partial(p^{(0)}, x^{(0)})} \right| = \left| \frac{\partial(p^{(n)}, x^{(n)})}{\partial(p^{(n-1)}, x^{(n-1)})} \right| \times \left| \frac{\partial(p^{(n-1)}, x^{(n-1)})}{\partial(p^{(n-2)}, x^{(n-2)})} \right| \times \cdots \times \left| \frac{\partial(p^{(1)}, x^{(1)})}{\partial(p^{(0)}, x^{(0)})} \right| = 1.$$

Уравнения (5) определяют класс явных симплектических схем, точность которых определяется числом стадий K и коэффициентами c_i, d_i .

Ранее в работах [16, 18] было исследовано семейство (5) при $K = 4$ и были получены 97 новых схем. Ниже мы применяем ту же методологию, что и в [18], для поиска, главным образом, схем четвёртого порядка точности в семействе трёхстадийных схем (5). Рассмотрим схему (5) с $K \geq 1$. Пусть значение количества движения p^n известно. Решение в следующем узле $t^{n+1} = t^n + h$ вычисляется по формуле $p^{n+1} = p^n + \Delta p_{h,n}$. Формула для вычисления $\Delta p_{h,n}$ зависит от количества стадий K рассматриваемого метода и от $2K$ постоянных $c_i, d_i, i = 1, \dots, K$. С другой стороны, легко получить «точную» формулу для приращения Δp , используя разложение величины p^n в отрезок ряда Тейлора: $\Delta p_n = p(t^n + h) - p(t^n) \approx \sum_{j=1}^{N_T} \frac{h^j}{j!} \frac{d^j p(t^n)}{dt^j}$, где N_T – целое число, задаваемое пользователем, $N_T \geq K + 1$. Если разность $\delta p_n = \Delta p_n - \Delta p_{h,n}$ удовлетворяет соотношению $\delta p_n/h = \mathcal{O}(h^\lambda)$, где $\lambda > 0$, то схема имеет порядок точности $\mathcal{O}(h^\lambda)$ [25].

В случае интегратора Фореста – Рута (5) нужно разложить $f(x^{(i-1)})$ в ряд Тейлора по степеням временного шага h относительно момента времени t^n . При переходе от вычисления $p^{(i-1)}$ к вычислению $p^{(i)}$ происходит нелинейный рост длин возникающих символьных выражений. Например, выражение для $p^{(2)}$ уже содержит степени h^k с $k = 1, \dots, 11$. В результате происходит нехватка памяти, и компьютер прекращает дальнейшие символьные вычисления с распечаткой соответствующего диагностического сообщения. Это явление называется «разбухание промежуточных выражений» в компьютерной алгебре. Мы успешно реализовали следующие два мероприятия во избежание этого явления: во-первых, мы вводили на каждой стадии новые имена для всех величин, не содержащих шаг h ; во-вторых, мы полагали все степени $h^k = 0$ для $k > 6$ в случаях, когда $K \leq 5$ в (5).

2. Пятистадийные схемы Фореста – Рута

Из формул семейства Фореста – Рута следует, что на каждой стадии выполняются однотипные арифметические операции. Это означает, что на каждом временном шаге пятистадийная FR-схема будет требовать расход машинного времени, который на 25 % больше, чем в случае четырёхстадийной схемы. Авторы работ [27] и [28] полагают, что за счёт минимизации ведущего члена погрешности аппроксимации схемы можно заметно повысить точность схемы, и тогда за счёт вычислений с увеличенным временным шагом можно добиться экономии машинного времени. Четырёхстадийная FR-схема содержит восемь параметров c_i, d_i ($i = 1, \dots, 4$). Число параметров в пятистадийной FR-схеме равно 10. Ясно, что увеличение числа параметров создаёт дополнительные возможности для минимизации погрешности схемы

по сравнению со случаем меньшего числа параметров. В [27] поиск оптимальных многостадийных FR-схем осуществлялся с применением техники пропагаторов. При этом упор делался на обрабатываемые во времени (симметричные, палиндромные) схемы.

В [28] были построены симметричные шестистадийные схемы четвёртого порядка точности в семействах RKN и FR, а также FR-методы шестого порядка точности с числом стадий от 7 до 15. При этом наиболее эффективным методом оказался FR-метод с 10 стадиями. В работе [29] были найдены с помощью численной оптимизации четыре пятистадийные RKN-схемы пятого порядка точности. В [17] были найдены еще три пятистадийные RKN-схемы пятого порядка точности с помощью функции численной оптимизации NMinimize[...] пакета программ Mathematica.

По аналогии со случаем пятистадийной RKN-схемы нашим первоначальным намерением было найти пятистадийные схемы пятого порядка точности в семействе FR-схем. Однако это нам не удалось. Мы трижды вывели с помощью символьных вычислений в СКА Mathematica выражения для погрешностей $\delta p_{n,5}$ и $\delta x_{n,5}$, и выражения совпали. Кроме того, была сделана проверка правильности этих выражений ещё одним способом. Из формул (5) следует, что коэффициенты c_5 и d_5 появляются только на пятой стадии FR-метода. Отсюда следует, что если положить в выражениях для ошибки пятистадийного метода $c_5 = 0$, $d_5 = 0$, то эти выражения должны совпасть с формулами для ошибок четырёхстадийного метода, которые были представлены в [18]. Это совпадение было получено.

Семейство пятистадийных схем Фореста – Рута получается из разностных уравнений (5) при $K = 5$. Соответствующая погрешность δp_n имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \delta p_n = & hP_1 f(x) + \frac{h^2}{2} P_2 u(t) f'(x) + \frac{h^3}{6} [P_{31} f(x) f'(x)/m + P_{32} u^2 f''(x)] + \\ & + \frac{h^4 u}{24m} \{ P_{41} \cdot [f'(x)]^2 + 3P_{42} f(x) f''(x) + P_{43} m u^2 f^{(3)}(x) \} + \\ & + \frac{h^5}{120m^2} \{ 3P_{51} f^2(x) f''(x) + P_{52} f(x) [f'(x)]^2 + 6P_{53} m u^2 f^{(3)}(x) + \\ & + 5P_{54} m u^2 f'(x) f''(x) + P_{55} m^2 u^4 f^{(4)}(x) \}, \end{aligned}$$

где $u(t)$ – скорость частицы,

$$\begin{aligned} P_1 = 1 - \sum_{j=1}^5 c_j, \quad P_2 = 1 - 2 \sum_{i=2}^K c_i \sum_{j=1}^{i-1} d_j, \\ P_{31} = 1 - 6 \sum_{i=1}^{K-1} d_i \sum_{j=1}^i c_j \sum_{k=i+1}^K c_k, \quad P_{32} = 1 - 3 \sum_{i=2}^K c_i \left(\sum_{j=1}^{i-1} d_j \right)^2, \\ P_{41} = 1 - 24(c_4 c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 + c_3 (d_1 + d_2) ((c_4 + c_5) d_3 + c_5 d_4) + \\ + c_2 d_1 (c_3 d_2 + (c_4 + c_5) (d_2 + d_3) + c_5 d_4)), \\ P_{42} = 1 - 8(c_3 (c_4 + c_5) d_3 (d_1 + d_2 + d_3) + c_5 (c_4 (d_1 + d_2 + d_3) + \\ + c_3 (d_1 + d_2 + 2d_3)) d_4 + (c_3 + c_4) c_5 d_4^2 + c_1 (c_2 d_1^2 + c_3 (d_1 + d_2)^2 + \\ + (c_4 + c_5) (d_1 + d_2 + d_3)^2 + 2c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 + c_5 d_4^2) + \\ + c_2 (c_3 d_2 (d_1 + d_2) + c_4 (d_2 + d_3) (d_1 + d_2 + d_3) + \\ + c_5 (d_2 + d_3 + d_4) (d_1 + d_2 + d_3 + d_4))), \\ P_{43} = 1 - 4 \sum_{i=2}^K c_i \left(\sum_{j=1}^{i-1} d_j \right)^3, \end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}
 P_{51} = & 1 - 20c_3^2c_4d_3^2 - 20c_3^2c_5d_3^2 - 40c_3^2c_5d_3d_4 - 40c_3c_4c_5d_3d_4 - 20c_3^2c_5d_4^2 - \\
 & - 40c_3c_4c_5d_4^2 - 20c_4^2c_5d_4^2 - 20c_1^2(c_2d_1^2 + c_3(d_1 + d_2)^2 + (c_4 + c_5)(d_1 + d_2 + d_3)^2 + \\
 & + 2c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4 + c_5d_4^2) - 20c_2^2(c_3d_2^2 + c_4(d_2 + d_3)^2 + c_5(d_2 + d_3 + d_4)^2) - \\
 & - 40c_2(c_4c_5d_4(d_2 + d_3 + d_4) + c_3(c_4d_3(d_2 + d_3) + c_5(d_3 + d_4)(d_2 + d_3 + d_4))) - \\
 & - 40c_1(c_4c_5d_4(d_1 + d_2 + d_3 + d_4) + c_3(c_4d_3(d_1 + d_2 + d_3) + \\
 & + c_5(d_3 + d_4)(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)) + c_2(c_3d_2(d_1 + d_2) + \\
 & + c_4(d_2 + d_3)(d_1 + d_2 + d_3) + c_5(d_2 + d_3 + d_4)(d_1 + d_2 + d_3 + d_4))), \\
 P_{52} = & 1 + 120(-c_1c_2(c_3 + c_4 + c_5)d_1d_2 - (c_4 + c_5)(c_1(c_2 + c_3)d_1 + \\
 & + (c_1 + c_2)c_3d_2)d_3 - c_5(c_2(c_3 + c_4)d_2 + (c_2 + c_3)c_4d_3 + c_1(c_2d_1 + \\
 & + (c_3 + c_4)(d_1 + d_2) + c_4d_3))d_4), \tag{7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{53} = & 1 - 10c_1(c_2d_1^3 + c_3(d_1 + d_2)^3 + (c_4 + c_5)(d_1 + d_2 + d_3)^3 + \\
 & + 3c_5(d_1 + d_2 + d_3)^2d_4 + 3c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4^2 + c_5d_4^3) - \\
 & - 10c_2(c_3d_2(d_1 + d_2)^2 + c_4(d_2 + d_3)(d_1 + d_2 + d_3)^2 + \\
 & + c_5(d_2 + d_3 + d_4)(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^2) - 10(c_4c_5d_4(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^2 + \\
 & + c_3(c_4d_3(d_1 + d_2 + d_3)^2 + c_5(d_3 + d_4)(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^2)),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{54} = & 1 - 12(c_4c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4(3(d_1 + d_2 + d_3) + 2d_4) + \\
 & + c_3(d_1 + d_2)(c_4d_3(3(d_1 + d_2) + 2d_3) + c_5(d_3 + d_4)(3d_1 + 3d_2 + 2(d_3 + d_4)))) + \\
 & + c_2d_1(c_3d_2(3d_1 + 2d_2) + c_4(d_2 + d_3)(3d_1 + 2(d_2 + d_3)) + \\
 & + c_5(d_2 + d_3 + d_4)(3d_1 + 2(d_2 + d_3 + d_4))), \quad P_{55} = 1 - 5 \sum_{i=2}^K c_i \left(\sum_{j=1}^{i-1} d_j \right)^4.
 \end{aligned}$$

Погрешность δx_n , получаемая при вычислении координаты x^{n+1} по рассматриваемой схеме, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 \delta x_n = & hu(t)R_1 + \frac{h^2}{2m}R_2f(x) + \frac{h^3}{6m}R_3u(t)f'(x) + \frac{h^4}{24m^2}[R_{41}f(x)f'(x) + \\
 & + R_{42}mu^2f''(x)] + \frac{h^5u(t)}{120m^2}\{R_{51}[f'(x)]^2 + 3R_{52}f(x)f''(x) + R_{53}mu^2f^{(3)}(x)\}, \tag{8}
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 R_1 = & 1 - \sum_{j=1}^K d_j, \quad R_2 = 1 - 2 \sum_{i=1}^K c_i \sum_{j=i}^K d_j, \quad R_3 = 1 - 6 \sum_{i=2}^K c_i \left[\sum_{j=1}^{i-1} d_j - \left(\sum_{j=1}^{i-1} d_j \right)^2 \right], \\
 R_{41} = & 1 - 24c_3c_4d_3d_4 - 24c_3c_4d_3d_5 - 24c_3c_5d_3d_5 - 24c_3c_5d_4d_5 - 24c_4c_5d_4d_5 - \\
 & - 24c_2(c_5(d_2 + d_3 + d_4)d_5 + c_4(d_2 + d_3)(d_4 + d_5) + c_3d_2(d_3 + d_4 + d_5)) - \\
 & - 24c_1(c_4d_1d_4 + c_4d_2d_4 + c_4d_3d_4 + c_4d_1d_5 + c_5d_1d_5 + c_4d_2d_5 + c_5d_2d_5 + c_4d_3d_5 + \\
 & + c_5d_3d_5 + c_5d_4d_5 + c_3(d_1 + d_2)(d_3 + d_4 + d_5) + c_2d_1(d_2 + d_3 + d_4 + d_5)), \\
 R_{42} = & 1 - 12 \sum_{j=2}^K c_j \left(\sum_{k=1}^{j-1} d_k \right)^2 \left(\sum_{l=j}^K d_l \right). \tag{9}
 \end{aligned}$$

Аналогично случаю четырёхстадийной схемы Рунге – Кутты – Нистрёма [17] нетрудно доказать, что многочлены $R_2, R_3, R_{41}, R_{42}, R_{52}, R_{53}$ выражаются через многочлены $P_1, P_2, P_{31}, P_{32}, P_{42}, P_{43}, P_{53}, P_{55}$ по следующим формулам:

$$\begin{aligned} R_2 &= -P_2 - 2P_1, & R_3 &= 3P_2 - 2P_{32}, & R_{41} &= 4P_{31} - 3P_{42}, \\ R_{42} &= 4P_{32} - 3P_{43}, & R_{52} &= 5P_{42} - 4P_{53}, & R_{53} &= 5P_{43} - 4P_{55}. \end{aligned} \quad (10)$$

Многочлен R_{51} имеет следующий вид:

$$R_{51} = 1 - 120 \left[c_4 c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 d_5 + c_2 d_1 \sum_{i=3}^K c_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} d_j \right) \left(\sum_{j=i}^K d_j \right) \right].$$

Из формул для погрешностей δp_n и δx_n следует, что для обеспечения четвёртого порядка точности схемы (5) с $K = 5$ необходимо, чтобы десять параметров $c_i, d_i, i = 1, \dots, 5$, удовлетворяли следующей полиномиальной системе:

$$\begin{aligned} P_1 = 0, P_2 = 0, P_{31} = 0, P_{32} = 0, P_{41} = 0, P_{42} = 0, P_{43} = 0, \\ R_1 = 0, R_2 = 0, R_3 = 0, R_{41} = 0, R_{42} = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Количество уравнений в (11) больше, чем количество неизвестных $c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, d_1, d_2, d_3, d_4, d_5$. С учётом (10) уравнения $R_2 = 0, R_3 = 0, R_{41} = 0, R_{42} = 0$ в (11) избыточны. Таким образом, нужно решить следующую полиномиальную систему:

$$P_1 = 0, P_2 = 0, P_{31} = 0, P_{32} = 0, P_{41} = 0, P_{42} = 0, P_{43} = 0, R_1 = 0. \quad (12)$$

Количество уравнений в (12) меньше, чем количество неизвестных $c_i, d_i, i = 1, \dots, 5$.

Так как мы ищем схемы четвёртого порядка точности, то в качестве ведущих членов погрешности в формулах (6) и (8) должны рассматриваться члены порядка малости $\mathcal{O}(h^5)$. В качестве количественной меры погрешности новых схем будем использовать следующие два функционала:

$$P_{5,rms}^{(l)} = \left[(1/5) \sum_{j=1}^5 (\sigma_j P_{5j})^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad X_{5,rms}^{(l)} = \{ [R_{51}^2 + (3R_{52})^2 + R_{53}^2] / 3 \}^{\frac{1}{2}}. \quad (13)$$

Здесь $\sigma_1, \dots, \sigma_5$ – множители перед многочленами P_{5j} в (6), $\sigma_1 = 3, \sigma_2 = 1, \sigma_3 = 6, \sigma_4 = 5, \sigma_5 = 1$, они не зависят от специфики решаемой задачи. Формула для $X_{5,rms}^{(l)}$ учитывает множитель «3» перед R_{52} в (8). Наконец, l – номер найденной новой схемы, $l = 1, 2, \dots$.

Ниже описываются некоторые результаты поиска оптимальных пятистадийных FR-схем четвёртого порядка точности. При этом под оптимальной пятистадийной FR-схемой понимается FR-схема, у которой норма ведущего члена погрешности аппроксимации меньше, чем у лучших четырёхстадийных FR-схем четвёртого порядка точности, найденных в [18]. Наилучшими схемами, найденными в [18], являются следующие схемы: FR47, FR50, FR51, FR52. Они имеют следующие

значения функционалов (13): $P_{5,\text{rms}}^{(l)} = 0.0386$, $X_{5,\text{rms}}^{(l)} = 0.0708$, $l = 47, 50, 51, 52$. Теперь дадим определение лучших пятистадийных FR-схем четвёртого порядка точности как схем, удовлетворяющих следующим неравенствам:

$$P_{5,\text{rms}}^{(l)} < 0.0386 \wedge X_{5,\text{rms}}^{(l)} < 0.0708. \quad (14)$$

Заметим, что система уравнений $P_1 = 0$, $P_2 = 0$, $P_{32} = 0$, $P_{43} = 0$, $P_{55} = 0$ линейна относительно c_i , $i = 1, \dots, 5$. Её легко переписать в виде $\mathcal{P}\mathbf{c} = \mathbf{b}$, где $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3, c_4, c_5)^T$, $\mathbf{b} = (1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{5})^T$ и

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & d_1 & d_1 + d_2 & d_1 + d_2 + d_3 & d_1 + d_2 + d_3 + d_4 \\ 0 & d_1^2 & (d_1 + d_2)^2 & (d_1 + d_2 + d_3)^2 & (d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^2 \\ 0 & d_1^3 & (d_1 + d_2)^3 & (d_1 + d_2 + d_3)^3 & (d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^3 \\ 0 & d_1^4 & (d_1 + d_2)^4 & (d_1 + d_2 + d_3)^4 & (d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^4 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Определитель этой матрицы имеет следующий вид:

$$\det \mathcal{P} = d_1 d_2 d_3 d_4 (d_1 + d_2) (d_2 + d_3) (d_3 + d_4) (d_1 + d_2 + d_3) (d_2 + d_3 + d_4) (1 - d_5). \quad (16)$$

Если $\det \mathcal{P} = 0$, то нельзя применять правило Крамера для нахождения выражений для c_i . В этой связи нужно рассматривать все десять частных случаев обращения в ноль определителя (16). В пяти случаях, когда $d_1 = 0$, или $d_2 = 0$, или $d_3 = 0$, или $d_4 = 0$, или $d_5 = 1$, фактическое число параметров, которое нужно найти, уменьшается на единицу, т. е. надо найти девять неизвестных. Но и девять параметров – это очень большое количество неизвестных. Ниже мы покажем, что в этих частных случаях можно найти искомые параметры с помощью базисов Грёбнера. По своему построению каждый многочлен G_i , входящий в базис Грёбнера $G = \{G_1, G_2, \dots\}$, является линейной комбинацией многочленов, входящих в левые части уравнений (12). Поэтому корни уравнений $G_i = 0$ являются корнями и исходной системы (12) [19–21]. При этом система уравнений $G_i = 0$ зачастую оказывается настолько проще, чем исходная система, что удаётся найти все корни системы (12).

Четыре случая, когда $d_1 = 0$, или $d_2 = 0$, или $d_3 = 0$, или $d_4 = 0$, имеют несколько общих черт:

- Соответствующий базис Грёбнера G состоит из восьми многочленов. Введём обозначение $G = \{G_1, G_2, \dots, G_8\}$.
- Многочлен G_1 зависит от одной переменной d_5 или d_1 .
- Базис Грёбнера G является треугольным [19]. Это означает, что базисные многочлены G_i , $i = 1, \dots, 8$, зависят от параметров c_j , d_j , $j = 1, \dots, 5$, следующим образом (на примере случая, когда $d_1 = 0$):

$$\begin{aligned} G_1(d_5), & \quad G_2(d_4, d_5), \quad G_3(d_3, d_5), \quad G_4(d_2, d_5), \\ G_5(c_5, d_5), & \quad G_6(c_4, d_5), \quad G_7(c_3, d_5), \quad G_8(c_1, c_2, d_5). \end{aligned} \quad (17)$$

Из уравнения $G_1(d_5) = 0$ находится корень d_5 . Он подставляется в уравнение $G_2(d_4, d_5) = 0$, которое становится уравнением для определения параметра d_4 . Хотя

многочлен $G_8(c_1, c_2, d_5)$ зависит от двух переменных c_1 и c_2 , параметр c_2 легко исключить с помощью равенства $c_2 = 1 - c_1 - c_3 - c_4 - c_5$.

- Степень многочлена G_1 равна 11.
- Уравнение $G_1 = 0$ имеет три вещественных корня. Остальные корни – это четыре пары комплексно-сопряжённых корней.
- Во всех четырёх случаях полиномы $P_1, P_2, \dots, P_{43}, R_1$ удовлетворяют следующим неравенствам после подстановки найденных решений в систему (12):

$$\mathcal{O}(10^{-97}) \leq |P_1|, |P_2|, |P_{31}|, |P_{32}|, |P_{41}|, |P_{42}|, |P_{43}|, |R_1| \leq \mathcal{O}(10^{-96}).$$

- В случаях, когда $d_1 = 0$, или $d_2 = 0$, или $d_4 = 0$, пара функционалов (13), полученная на первом вещественном корне уравнения $G_1 = 0$, одна и та же: $(P_{5,\text{rms}}^{(l)}, X_{5,\text{rms}}^{(l)}) = (0.0738, 0.1224)$. В случае $d_3 = 0$ была получена пара $(P_{5,\text{rms}}^{(l)}, X_{5,\text{rms}}^{(l)}) = (0.1253, 0.2996)$. Для сравнения заметим, что в случае 99 четырёхстадийных FR-схем, найденных в [18], только семь схем удовлетворяли неравенствам $P_{5,\text{rms}}^{(l)} < 0.126$, $X_{5,\text{rms}}^{(l)} < 0.30$. Так что найденные пятистадийные схемы весьма неплохие в терминах функционалов погрешности по сравнению с четырёхстадийными FR-схемами.

В случае, когда $d_5 = 1$, был получен базис Грёбнера $\{G_1, g_2, \dots\}$, состоящий из 25 многочленов, при этом $G_1 = \mathcal{F}_1(d_3, d_4)$ и $G_2 = \mathcal{F}_2(d_2, d_3, d_4)$. Это означает, что данный базис Грёбнера не является треугольным. Это не является неожиданным фактом, так как исходная система (12) содержит только восемь уравнений. При этом количество неизвестных $c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, d_1, d_2, d_3, d_4$ равно девяти. В этом случае базис Грёбнера должен отражать тот факт, что одно из перечисленных выше девяти неизвестных должно рассматриваться как свободный параметр, который может принимать любые вещественные значения. Вид функциональных зависимостей для G_1 и G_2 даёт подсказку, какое из упомянутых выше девяти неизвестных можно взять в качестве свободного параметра: либо d_4 , либо d_3 . Выберем для определённости, d_4 в качестве свободного параметра. Нашей целью является определение такого значения $d_4 = d_4^*$, при котором функция $P_{5,\text{rms}}^{(l)} = P_{5,\text{rms}}^{(l)}(d_4)$ принимает наименьшее значение в промежутке $I = \{-1 \leq d_4 \leq 1\}$. Функция $P_{5,\text{rms}}^{(l)}(d_4)$ может иметь несколько локальных минимумов в I . Поэтому желательно использовать метод равномерного поиска [30] минимизации функции одной переменной в промежутке. Согласно алгоритму этого метода, введём в I сравнительно грубую равномерную сетку с узлами $d_{4,k} = -1 + \frac{k}{10}$, где $k = 0, 1, \dots, 20$. Возьмём для определённости узел $d_{4,15} = \frac{1}{2}$. Подставляя в систему (12) значения $d_4 = \frac{1}{2}$ и $d_5 = 1$, получаем треугольный базис Грёбнера G из восьми многочленов G_j . В этом базисе многочлен G_1 зависит от одной переменной, это многочлен 12-й степени от переменной d_3 . Он имеет четыре вещественных корня: $d_3 \approx -273.16$, $d_3 \approx -1.427$, $d_3 \approx -1.271$, $d_3 \approx -0.5898$.

Многочлены G_2, \dots, G_8 линейны относительно $d_2, d_1, c_5, c_4, c_3, c_2, c_1$ соответственно. Поэтому легко находятся численные значения этих семи неизвестных из уравнений $G_j = 0, j = 2, \dots, 8$, при заданных значениях параметров d_3, d_4 . Значение $d_3 \approx -273.16$ слишком велико. Наилучшим подходящим значением является $d_3 \approx -0.5898$. Подставляя его, наряду с $d_4 = \frac{1}{2}$, в многочлены G_2, \dots, G_8 , получаем

численное решение для всех неизвестных $c_i, d_i, i = 1, \dots, 5$. Поскольку полученное решение является приближённым, его подстановка в левые части уравнений (12) приводит к ненулевым невязкам. Эти невязки имеют следующие порядки малости:

$$\mathcal{O}(10^{-75}) \leq |P_1|, |P_2|, |P_{31}|, |P_{32}|, |P_{41}|, |P_{42}|, |P_{43}|, |R_1| \leq \mathcal{O}(10^{-73}).$$

Полученные значения функционалов (13) таковы: $P_{5,\text{rms}}^{(l)} \approx 2.0573, X_{5,\text{rms}}^{(l)} \approx 2.3832$. Они не удовлетворяют условию (14), поэтому мы не приводим здесь полное решение для c_i и d_i . Аналогичные символьно-численные вычисления выполняются для остальных 20 узлов $d_{4,k} = -1 + \frac{k}{10}$. Затем находится узел $d_{4,k}^*$, в котором достигается минимум функции $P_{5,\text{rms}}^{(l)}(d_4)$ в I . С целью уточнения найденного решения для d_4 вводится равномерная сетка, скажем, из 10 узлов в промежутке $d_{4,k}^* - \Delta d_4 \leq d_{4,k}^* \leq d_{4,k}^* + \Delta d_4$, где $\Delta d_4 = \frac{1}{10}$ – шаг сетки в I . Этот процесс продолжается до получения желаемой точности определения параметра d_4 , см. детали в [30].

Более простым способом получения нескольких дальнейших вещественных корней системы (12) является использование функций численной минимизации, имеющихся в пакете программ *Mathematica*. Мы использовали двухшаговую оптимизационную процедуру, описанную ранее в [18]. Она позволяет уменьшать машинное время, требуемое для решения оптимизационной задачи с высокой точностью, в 10 раз. Ниже мы очень кратко описываем эту процедуру.

На первом шаге вводится следующий квадратичный функционал:

$$F_1(X) = P_1^2 + P_2^2 + P_{31}^2 + P_{32}^2 + \sum_{j=1}^3 P_{4j}^2 + \sum_{j=1}^5 P_{5j}^2 + R_1^2 + \sum_{j=1}^3 R_{5j}^2, \quad (18)$$

где $X = (c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, d_1, d_2, d_3, d_4, d_5)$. На этом шаге ищется решение задачи минимизации с низкой точностью. Используется *Mathematica*-функция `NMinimize[...]`, в которой задаётся опция `WorkingPrecision -> 17`. Это означает, что используется арифметика машинных чисел с плавающей запятой и длиной мантииссы из 17 десятичных цифр. Полиномы P_{5j} и R_{5j} включены в (18) в стремлении получить малые значения величин $|P_{5j}|$ и $|R_{5j}|$ при подстановке решения оптимизационной задачи. Количество точек поиска минимума функционала (18) задавалось равным 3000. Но в список решений, полученных на первом шаге, включаются только те точки X , в которых $|F_1(X)| < 10^{-4}$.

На втором шаге точность решений, найденных на первом шаге, повышается до четверной точности. Для этого задается `WorkingPrecision -> 80` в вызове *Mathematica*-функции `FindMinimum[...]`. Используется укороченный функционал

$$F_2(X) = P_1^2 + P_2^2 + P_{31}^2 + P_{32}^2 + \sum_{j=1}^3 P_{4j}^2 + R_1^2. \quad (19)$$

После уточнения 146 решений, найденных на первом шаге, оказалось, что все эти решения удовлетворяют условию (14). Так как новые решения являются приближенными, то при их подстановке в левые части уравнений (12) получаются ненулевые невязки. С целью проверки правильности полученных решений мы

Таблица 1. Значения параметров приближенных пятистадийных схем семейства Фореста – Рута $FR_{5,l}$ ($l = 1, \dots, 5$)

l	c_i	d_i	$P_{4,rms}^{(l)}$	$X_{4,rms}^{(l)}$
1	0.114708370543397234	0.329073852375988954	0.0107	0.0174
	0.734134202640520034	-0.054966376109499292		
	-0.229529385681249533	0.554350211298705965		
	0.995523041962284969	-0.009674826825454959		
	-0.614836229464952705	0.181217139260259332		
2	0.115014897478607712	0.331159922546512897	0.0111	0.0183
	0.767955057325819579	-0.047775148593238103		
	-0.261165814488949832	0.546154665357935268		
	0.963836421552595425	-0.010187300873597520		
	-0.585640561868072884	0.180647861562387458		
3	0.115114271084472133	0.331232169838587736	0.0112	0.0184
	0.763488481826150878	-0.048748625362975296		
	-0.256593762170024001	0.546599135075668547		
	0.927016367150885175	-0.011303248663834809		
	-0.549025357891484185	0.182220569112553822		
4	0.115234767372571914	0.331996378133286170	0.0113	0.0186
	0.774855957772089103	-0.046626005112929035		
	-0.267120602099105694	0.543795587468122763		
	0.895182197171311066	-0.012271669934171567		
	-0.518152320216866388	0.183105709445691670		
5	0.113183170010790785	0.333134453982853897	0.0117	0.0180
	0.957704220572055191	-0.024920522098163402		
	-0.448808414442811870	0.551977319826554641		
	-0.892650324217786421	-0.004564580406969805		
	1.270571348077752315	0.144373328695724669		

подставляли их в рассматриваемую систему (12). Определим невязки r_{\min} и r_{\max} следующим образом:

$$\begin{aligned}
 r_{\min} &= \min(|R_1|, |P_1|, |P_2|, |P_{31}|, |P_{32}|, |P_{41}|, |P_{42}|, |P_{43}|), \\
 r_{\max} &= \max(|R_1|, |P_1|, |P_2|, |P_{31}|, |P_{32}|, |P_{41}|, |P_{42}|, |P_{43}|).
 \end{aligned}
 \tag{20}$$

Полиномы, входящие в (19), имеют на всех 146 решениях невязки следующих порядков малости: $r_{\min} = \mathcal{O}(10^{-47})$, $r_{\max} = \mathcal{O}(10^{-42})$. Из найденных решений мы отобрали пять решений с наименьшими значениями функционалов (13), решения

приводятся в табл. 1. Видно, что погрешности лучших четырёхстадийных FR-схем четвертого порядка точности, найденных в [18], в три раза больше, чем значения функционалов (13), соответствующих пятистадийным FR-схемам, представленным в табл. 1. Иными словами, точность схем из [18] ниже, чем точность схем, полученных в данной статье.

3. Анализ устойчивости схем

Исследование устойчивости симплектических схем типа Рунге – Кутты обычно проводится на примере задачи о гармоническом осцилляторе. В этой задаче фигурирует только одна частица, которая осциллирует вдоль оси x_1 с ростом времени t . Поэтому аналитические вычисления с целью получения условия устойчивости сравнительно простые. Однако с увеличением числа стадий K РК-метода требуемый объем вычислений возрастает нелинейно. В этой связи целесообразно выполнять эти вычисления на компьютере с использованием одного из пакетов программ общего назначения, в которых заложены аналитические вычисления на компьютере; в отличие от человека компьютер не ошибается при выполнении аналитических вычислений. В [17, 23] эти вычисления были выполнены для схем Рунге – Кутты – Нистрёма с помощью пакета программ *Mathematica* для числа стадий $K = 2, 3, 4, 5$. Было показано, что размер области устойчивости возрастает с увеличением числа стадий. Как известно, схема Верле принадлежит к классу одностадийных РКН-схем [5]. Авторы работ [5, 31] и [32, р. 140] приводят условие устойчивости схемы Верле в виде $0 < \kappa \leq 2$, где κ – число Куранта (определение будет дано ниже в данном разделе). Однако в [17, 23] с помощью изучения поведения дискриминанта характеристического уравнения было показано, что условие устойчивости схемы Верле имеет следующий вид: $0 < |\kappa| \leq 2$. Это существенное уточнение, оно показывает, что возможен устойчивый счёт по схеме Верле от настоящего времени к прошлому с отрицательным шагом во времени. Этот результат не является неожиданным или удивительным. Дело в том, что уравнения Гамильтона обратимы во времени при одновременном обращении времени и скоростей частиц [5]. Отсюда следует, что разностные симплектические схемы так же обратимы во времени, как и уравнения Гамильтона.

Известно, что если симплектическая схема устойчива, то все корни ее характеристического уравнения лежат на единичной окружности комплексной плоскости. В качестве физической модели рассмотрим осциллятор с квадратичным потенциалом $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, для которого положение равновесия находится при $x = 0$, $p = 0$. Подставляя данное выражение $V(x)$ в уравнения (4), получим линейные уравнения движения

$$dx/dt = p/m, \quad dp/dt = -m\omega^2 x. \quad (21)$$

Пусть $\vec{X}^n = (x^n, p^n)^T$ и $\vec{X}^{n+1} = (x^{n+1}, p^{n+1})^T$, где верхний индекс T обозначает операцию транспонирования. В матричной записи уравнения (5), применённые к системе (21), имеют вид: $\vec{X}^{n+1} = G\vec{X}^n$, где G – матрица размера 2×2 . Пусть g_{ij} , $i, j = 1, 2$, – элементы этой матрицы. Характеристическое уравнение матрицы G имеет вид: $|G - \lambda E| = \lambda^2 + \text{Tr}(G)\lambda + 1 = 0$, где $\text{Tr}(G)$ – след матрицы

G , $\text{Tr}(G) = -g_{11} - g_{22}$; E – единичная матрица размера 2×2 . Величина $\text{Tr}(G)$ является функцией параметров $c_j, d_j, j = 1, \dots, K$, и числа Куранта $\kappa = \omega h$. Условиями устойчивости схемы (5) являются условия $|\lambda_i| \leq 1$, где $\lambda_i, i = 1, 2$, – собственные значения матрицы G , т. е. корни характеристического уравнения. Если дискриминант этого уравнения $D = [\text{Tr}(G)/2]^2 - 1 < 0$, то оно имеет два комплексно-сопряжённых корня λ_1, λ_2 такие, что $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$ по теореме Виета. В этом случае существует ненулевая область устойчивости $|\kappa| \leq \kappa_{cr}$, где κ_{cr} – критическое число Куранта. Введём обозначение $D_2(\kappa) = |\text{Tr}(G)| - 2$. Для рассматриваемых FR-схем κ_{cr} является решением уравнения $D_2(\kappa) = 0$, а искомое условие устойчивости получается из неравенства $D_2 < 0$, вытекающего из неравенства $D < 0$.

Соотношение $|G| = 1$ использовалось для проверки правильности формул для коэффициентов характеристического уравнения.

Ниже мы будем рассматривать условия устойчивости некоторых FR-схем с числами стадий $K = 3, 4, 5$ и сравнивать их с условием устойчивости схемы Верле [24]. Эта схема в применении к линейным уравнениям (21) имеет следующий вид:

$$x^{(1)} = x^n + \frac{h}{2} \frac{p^n}{m}, \quad x^{n+1} = x^n + h \frac{p^n}{m} - \frac{h^2 \omega^2}{2} x^{(1)}, \quad p^{n+1} = p^n - hm \omega^2 x^{(1)}. \quad (22)$$

Приведём программу на языке пакета программ *Mathematica* для вычисления элементов матрицы G :

```
x1 = xn + h*pn/(2m); xnew = xn + h*pn/m - h^2*omega^2*x1/2;
pnew = pn - h*m*omega^2*x1; xnew = xnew; g11 = Coefficient[xnew, xn];
g12 = Coefficient[xnew, pn]; g21 = Coefficient[pnew, xn];
g22 = Coefficient[pnew, pn]; G = {{g11, g12}, {g21, g22}};
G = G /. omega -> kappa/h;
```

В последней строке этой программы введена величина $\kappa = \omega h$. В работах [5, 31] она названа числом Куранта. Матрица G получается в виде

$$G = \begin{pmatrix} 1 - \kappa^2/2 & h/m - h\kappa^2/(4m) \\ -m\kappa^2/h & 1 - \kappa^2/2 \end{pmatrix}.$$

Коэффициенты характеристического уравнения вычисляются с помощью команды $\text{Det}[G - \lambda * \text{IdentityMatrix}[2]]$, и искомое уравнение имеет следующий вид: $1 - 2\lambda + \kappa^2\lambda + \lambda^2 = 0$. Дискриминант $D = \kappa^2(\kappa^2/4 - 1)$. Условие устойчивости выполняется, если $D \leq 0$. В области положительных κ это приводит к условию устойчивости в виде $0 < \kappa \leq 2$. Так как κ входит в D только в чётной степени, то $D \leq 0$ также в интервале $[-2, 0]$, т. е. схема Верле устойчива также в этом интервале. Поэтому условие устойчивости данной схемы должно записываться в виде $0 < |\kappa| \leq 2$.

Программа на языке пакета *Mathematica* для вычисления элементов матрицы G в случае схемы Верле (22) легко обобщается на случай любых пятистадийных FR-схем, поэтому здесь не приводится для краткости. Элементы g_{ij} матрицы G имеют

следующий вид:

$$\begin{aligned} g_{11} &= 1 + \sum_{j=1}^5 (-1)^j \alpha_j^{(1,1)} \kappa^{2j}, & g_{12} &= (h/m) \left(1 + \sum_{j=1}^4 (-1)^j \alpha_j^{(1,2)} \kappa^{2j} \right), \\ g_{21} &= (m/h) \left(-\kappa^2 + \sum_{j=2}^5 (-1)^j \alpha_j^{(2,1)} \kappa^{2j} \right), & g_{22} &= 1 + \sum_{j=1}^4 (-1)^j \alpha_j^{(2,2)} \kappa^{2j}, \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_1^{(1,1)} &= c_3 d_3 + c_3 d_4 + c_4 d_4 + (c_3 + c_4 + c_5) d_5 + c_2 (d_2 + d_3 + d_4 + d_5) + c_1, \\ \alpha_2^{(1,1)} &= c_2 c_3 d_2 d_3 + c_2 c_3 d_2 d_4 + c_2 c_4 d_2 d_4 + c_2 c_4 d_3 d_4 + c_3 c_4 d_3 d_4 + (c_3 (c_4 + c_5) d_3 + \\ &+ (c_3 + c_4) c_5 d_4 + c_2 (c_3 d_2 + (c_4 + c_5) (d_2 + d_3) + c_5 d_4)) d_5 + c_1 (c_4 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 + \\ &+ ((c_4 + c_5) (d_1 + d_2 + d_3) + c_5 d_4) d_5 + c_3 (d_1 + d_2) (d_3 + d_4 + d_5) + \\ &+ c_2 d_1 (d_2 + d_3 + d_4 + d_5)), \\ \alpha_3^{(1,1)} &= c_2 c_3 c_4 d_2 d_3 d_4 + (c_2 c_3 (c_4 + c_5) d_2 d_3 + c_5 (c_2 (c_3 + c_4) d_2 + (c_2 + c_3) c_4 d_3) d_4) d_5 + \\ &+ c_1 (c_4 c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 d_5 + c_3 (d_1 + d_2) (c_5 (d_3 + d_4) d_5 + c_4 d_3 (d_4 + d_5)) + \\ &+ c_2 d_1 (c_5 (d_2 + d_3 + d_4) d_5 + c_4 (d_2 + d_3) (d_4 + d_5) + c_3 d_2 (d_3 + d_4 + d_5))), \\ \alpha_4^{(1,1)} &= c_1 c_2 c_3 c_4 d_1 d_2 d_3 d_4 + (c_1 c_2 c_3 (c_4 + c_5) d_1 d_2 d_3 + c_5 (c_1 c_2 (c_3 + c_4) d_1 d_2 + \\ &+ c_4 (c_1 (c_2 + c_3) d_1 + (c_1 + c_2) c_3 d_2) d_3) d_4) d_5, \\ \alpha_5^{(1,1)} &= c_1 c_2 c_3 c_4 c_5 d_1 d_2 d_3 d_4 d_5, \\ \alpha_1^{(1,2)} &= c_4 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 + ((c_4 + c_5) (d_1 + d_2 + d_3) + c_5 d_4) d_5 + \\ &+ c_3 (d_1 + d_2) (d_3 + d_4 + d_5) + c_2 d_1 (d_2 + d_3 + d_4 + d_5), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_2^{(1,2)} &= (c_4 c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 d_5 + c_3 (d_1 + d_2) (c_5 (d_3 + d_4) d_5 + c_4 d_3 (d_4 + d_5)) + \\ &+ c_2 d_1 (c_5 (d_2 + d_3 + d_4) d_5 + c_4 (d_2 + d_3) (d_4 + d_5) + c_3 d_2 (d_3 + d_4 + d_5))), \\ \alpha_3^{(1,2)} &= c_3 c_4 c_5 (d_1 + d_2) d_3 d_4 d_5 + c_2 d_1 (c_4 c_5 (d_2 + d_3) d_4 d_5 + \\ &+ c_3 d_2 (c_5 (d_3 + d_4) d_5 + c_4 d_3 (d_4 + d_5))), \\ \alpha_4^{(1,2)} &= c_2 c_3 c_4 c_5 d_1 d_2 d_3 d_4 d_5, \\ \alpha_2^{(2,1)} &= c_3 (c_4 + c_5) d_3 + (c_3 + c_4) c_5 d_4 + c_2 (c_3 d_2 + (c_4 + c_5) (d_2 + d_3) + c_5 d_4) + \\ &+ c_1 (c_2 d_1 + c_3 (d_1 + d_2) + (c_4 + c_5) (d_1 + d_2 + d_3) + c_5 d_4), \end{aligned}$$

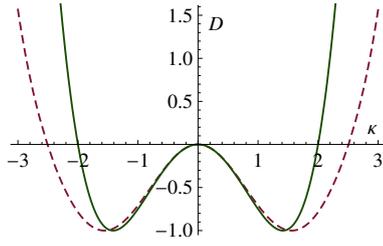


Рис. 1. Дискриминанты $D = D(\kappa)$ для случая схемы Верле (—) и трёхстадийной FR-схемы (---)

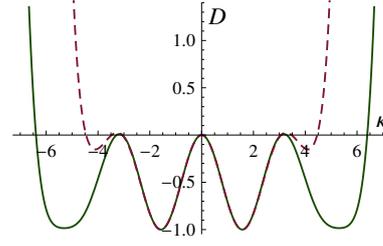


Рис. 2. Дискриминанты $D = D(\kappa)$ для случая схемы FR50 (---) и пятистадийной схемы $FR_{5,1}$ (—)

$$\begin{aligned}
 \alpha_3^{(2,1)} &= c_2c_3(c_4 + c_5)d_2d_3 + c_5(c_2(c_3 + c_4)d_2 + (c_2 + c_3)c_4d_3)d_4 + \\
 &+ c_1(c_4c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4 + c_3(d_1 + d_2)((c_4 + c_5)d_3 + c_5d_4) + \\
 &+ c_2d_1(c_3d_2 + (c_4 + c_5)(d_2 + d_3) + c_5d_4)), \\
 \alpha_4^{(2,1)} &= (c_1c_2c_3(c_4 + c_5)d_1d_2d_3 + c_5(c_1c_2(c_3 + c_4)d_1d_2 + \\
 &+ c_4(c_1(c_2 + c_3)d_1 + (c_1 + c_2)c_3d_2)d_3)d_4), \\
 \alpha_5^{(2,1)} &= c_1c_2c_3c_4c_5d_1d_2d_3d_4, \\
 \alpha_1^{(2,2)} &= c_2d_1 + c_3(d_1 + d_2) + (c_4 + c_5)(d_1 + d_2 + d_3) + c_5d_4, \\
 \alpha_2^{(2,2)} &= c_4c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4 + c_3(d_1 + d_2)((c_4 + c_5)d_3 + c_5d_4) + \\
 &+ c_2d_1(c_3d_2 + (c_4 + c_5)(d_2 + d_3) + c_5d_4), \\
 \alpha_3^{(2,2)} &= c_3c_4c_5(d_1 + d_2)d_3d_4 + c_2d_1(c_4c_5(d_2 + d_3)d_4 + c_3d_2((c_4 + c_5)d_3 + c_5d_4)), \\
 \alpha_4^{(2,2)} &= c_2c_3c_4c_5d_1d_2d_3d_4.
 \end{aligned} \tag{24}$$

Равенства $P_1 = 0$, $R_1 = 0$, входящие в систему (13), являются условиями первого порядка точности FR-схемы. Из них получаются соотношения $\sum_{j=1}^5 c_j = 1$, $\sum_{j=1}^5 d_j = 1$. Эти соотношения были использованы для некоторого уменьшения длин выражений для $\alpha_k^{(i,j)}$, $i, j = 1, 2$. Так как число Куранта κ входит в g_{ij} только в чётных степенях, то ясно, что $D(\kappa)$ – чётная функция, и условие устойчивости будет иметь вид $0 < |\kappa| \leq \kappa_{cr}$.

Докажем, что формулы (23), (24) применимы для анализа устойчивости FR-схем с числом стадий $K = 1, 2, 3, 4, 5$. Действительно, из структуры разностных уравнений (5) видно, что параметры c_i, d_i появляются только на i -й стадии FR-метода ($i = 1, \dots, K$). Поэтому, например, в трёхстадийном FR-методе нет параметров c_4, d_4, c_5, d_5 . То есть можно применить формулы (23) и (24) для получения условия устойчивости трёхстадийной FR-схемы, положив в них $c_4 = 0, d_4 = 0, c_5 = 0, d_5 = 0$.

Легко показать, что при числах стадий $K \leq 5$ кривая $D = D(\kappa)$ всегда проходит

через начало координат. Действительно, используя формулы (24), получаем:

$$D(\kappa) = \frac{1}{4}\kappa^2(\alpha_1^{(1,1)} + \alpha_1^{(2,2)} - \alpha_2^{(1,1)}\kappa^2 - \alpha_2^{(2,2)}\kappa^2 + \alpha_4^{(1,1)}\kappa^4 + \alpha_3^{(2,2)}\kappa^4 - \alpha_4^{(1,1)}\kappa^6 - \alpha_4^{(2,2)}\kappa^6 + \alpha_5^{(1,1)}\kappa^8)(-4 + \alpha_1^{(1,1)}\kappa^2 + \alpha_1^{(2,2)}\kappa^2 - \alpha_2^{(1,1)}\kappa^4 - \alpha_2^{(2,2)}\kappa^4 + \alpha_4^{(1,1)}\kappa^6 + \alpha_3^{(2,2)}\kappa^6 - \alpha_4^{(1,1)}\kappa^8 - \alpha_4^{(2,2)}\kappa^8 + \alpha_5^{(1,1)}\kappa^{10}). \quad (25)$$

Из (25) следует, что $D(\kappa) = 0$ при $\kappa = 0$, причём корень $\kappa = 0$ имеет кратность 2.

В частности, в работе [9] была представлена единственная трёхстадийная схема, имеющая следующие значения шести параметров:

$$c_1 = \frac{7}{24}, \quad c_2 = \frac{3}{4}, \quad c_3 = -\frac{1}{24}, \quad d_1 = \frac{2}{3}, \quad d_2 = -\frac{2}{3}, \quad d_3 = 1. \quad (26)$$

Подставляя эти значения в формулы (23) и (24), получаем следующую матрицу G :

$$G = \begin{pmatrix} -\frac{7\kappa^6}{1728} + \frac{5\kappa^4}{72} - \frac{\kappa^2}{2} + 1 & \frac{h}{m}(\frac{\kappa^4}{72} - \frac{\kappa^2}{6} + 1) \\ \frac{m}{h}(-\frac{7\kappa^6}{1728} + \frac{\kappa^4}{6} - \kappa^2) & \frac{\kappa^4}{72} - \frac{\kappa^2}{2} + 1 \end{pmatrix}.$$

Характеристическое уравнение имеет следующий вид:

$$\lambda^2 + \lambda\left(-2 + \kappa^2 - \frac{\kappa^4}{12} + \frac{7\kappa^6}{1728}\right) + 1 = 0.$$

Отсюда находится дискриминант в виде $D(\kappa) = \frac{1}{4}\left(\frac{7\kappa^6}{1728} - \frac{\kappa^4}{12} + \kappa^2 - 2\right)^2 - 1$. Уравнение $D(\kappa) = 0$ имеет 12 корней, из которых четыре корня являются вещественными. На рис. 1 показан график функции $D(\kappa)$. Итоговое условие устойчивости имеет следующий вид:

$$0 < |\kappa| \leq 2\sqrt{\frac{3}{7}(4 - 2 \cdot 6^{1/3} + 6^{2/3})} \approx 2.50748. \quad (27)$$

Заметим, что интервал устойчивости трёхстадийной FR-схемы вдоль оси κ примерно на 25 % больше, чем в случае схемы Верле (см. также рис. 1).

Среди пятистадийных FR-схем, приведённых в табл. 1, наименьшие значения функционалов ошибок (13) имеет схема $FR_{5,1}$. На рис. 2 сравниваются области устойчивости этой схемы и лучшей четырёхстадийной схемы $FR50$, найденной в [18]. Параметры схемы $FR50$ даны в табл. 2; дискриминант даётся формулой:

$$D(\kappa) = -1 + (1/4)[2 - \kappa^2 + (1/12)\kappa^4 - 0.002536488904\kappa^6 + 0.000018395117\kappa^8]^2.$$

Область устойчивости схемы $FR50$ состоит из нескольких интервалов:

$$9.82669 \leq |\kappa| \leq 9.84599; \quad 3.47141 \leq |\kappa| \leq 4.45764; \quad 0 < |\kappa| \leq 3.06662.$$

Эти интервалы устойчивости разделены интервалами неустойчивости (см. рис. 2). Интервалами устойчивости $9.82669 \leq \kappa \leq 9.84599$ и $-9.84599 \leq \kappa \leq -9.82669$ можно пренебречь ввиду их малости, поэтому они не показаны на рис. 2.

Таблица 2. Значения параметров схемы FR50 в семействе четырёхстадийных схем Фореста – Рута

c_i	d_i	$P_{5,rms}^{(l)}$	$X_{5,rms}^{(l)}$
0.136825942475053071	1/2	0.0386	0.0708
-0.295364245574992759	-0.062976137694193308		
0.837926908632179149	0.440948891327570560		
0.320611394467760539	0.122027246366622748		

В случае схемы $FR_{5,1}$ из табл. 1 дискриминант имеет следующий вид:

$$D(\kappa) = -1 + (1/4)[2 - \kappa^2 + (1/12)\kappa^4 - 0.002702663921\kappa^6 + 0.000037953855\kappa^8 - 2.079872909348 \cdot 10^{-7}\kappa^{10}]^2.$$

С целью проверки правильности вычисления величин g_{ij} по формулам (24) и (25) мы подсчитывали определитель $|G|$ для каждой из рассматриваемых FR-схем. Например, в случае схемы $FR_{5,1}$ мы получили $|G| = 1.\underbrace{0000 \dots 0}_{78 \text{ нулей}}$. Область устойчивости

схемы $FR_{5,1}$ также состоит из нескольких интервалов:

$$3.28026 \leq |\kappa| \leq 6.39298; \quad 0 < |\kappa| \leq 3.06393.$$

Суммарные длины интервалов устойчивости схем FR50 и $FR_{5,1}$ равны соответственно 8.1 и 12.35. То есть запас устойчивости схемы $FR_{5,1}$ больше, чем в случае схемы FR50. Кроме того, из сравнения рис. 1 и 2 видно, что размеры областей устойчивости растут с увеличением числа стадий FR-схем.

В работе [33] рассматривались вопросы построения явных несимплектических схем Рунге – Кутты (РК) высоких порядков точности. Отмечалось, что заметное нарушение неравенств

$$0 \leq c_i, d_i \leq 1 \tag{28}$$

может существенно увеличивать коэффициенты в остаточных членах, т. е. ухудшать точность. При этом в [33] предполагалось численное интегрирование только в направлении возрастания времени. Как было отмечено выше, уравнения Гамильтона обратимы во времени. В условиях устойчивости рассмотренных симплектических FR-схем это свойство отражается в том, что число Куранта κ входит в эти условия только в виде $|\kappa|$. Поэтому нужно обобщить условия (28) на случай FR-схем следующим образом: $0 \leq |c_i|, |d_i| \leq 1$. В табл. 1 этим условиям удовлетворяют первые четыре схемы $FR_{5,l}$, $l = 1, 2, 3, 4$.

4. Задача Кеплера

Задача о движении системы, состоящей из двух взаимодействующих частиц (задача двух тел, задача Кеплера), допускает полное аналитическое решение в общем виде [8]. Эта задача описывается системой из восьми обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), в которой четыре уравнения описывают эволюцию во времени координат (x_k, y_k) каждого из двух тел, а величины (p_{kx}, p_{ky}) ,

$k = 1, 2$, описывают эволюцию количеств движения тел. Подробный вид этой системы имеется в [23]. Указанная ОДУ-система решается с использованием заданных начальных положений тел и их количеств движения. При одинаковых массах тел $m_1 = m_2 = 1$ суммарная начальная энергия E_0 обоих тел $|E_0| = |v_0^2 - 1/(2a_0)|$, где $2a_0$ – заданное начальное расстояние между телами ($a_0 = 2$), v_0 – заданное абсолютное значение начальной скорости каждого тела [23].

Таблица 3. Погрешности δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$ при $v_0 = 0.15, t = 300$

Метод	K	Порядок схемы	δE_{mean}	$ \delta E _{\text{mean}}$
Верле	1	$\mathcal{O}(h^2)$	$8.361e - 6$	$8.361e - 6$
FR50	4	$\mathcal{O}(h^4)$	$1.645e - 11$	$1.708e - 11$
FR _{5,1}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$1.028e - 11$	$1.034e - 11$
FR _{5,2}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$1.009e - 11$	$1.011e - 11$
FR _{5,3}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$1.006e - 11$	$1.018e - 11$
FR _{5,4}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$1.001e - 11$	$1.012e - 11$
FR _{5,5}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$9.375e - 12$	$9.454e - 12$

При численном решении задачи Кеплера с использованием симплектических разностных схем энергия E^n при $t = t^n > 0$ вычисляется с ошибкой. Пусть $\delta E^n = (E^n - E_0)/E_0$, где $E^n = (1/2)[(p_{1x}^n)^2 + (p_{1y}^n)^2 + (p_{2x}^n)^2 + (p_{2y}^n)^2] - 1/r^n$, $r^n = [(x_1^n - x_2^n)^2 + (y_1^n - y_2^n)^2]^{1/2}$. В [17, 23] было показано, что для обеспечения нулевого эксцентриситета e орбит частиц достаточно положить $v_0 = 0.5/\sqrt{a_0}$.

Таблица 4. Погрешности δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$ при $v_0 = 0.15, t = 500$

Метод	K	Порядок схемы	δE_{mean}	$ \delta E _{\text{mean}}$
Верле	1	$\mathcal{O}(h^2)$	$8.361e - 6$	$8.361e - 6$
FR50	4	$\mathcal{O}(h^4)$	$1.226e - 10$	$1.284e - 10$
FR _{5,1}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$8.951e - 11$	$8.978e - 11$
FR _{5,2}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$8.706e - 11$	$8.725e - 11$
FR _{5,3}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$8.749e - 11$	$8.775e - 11$
FR _{5,4}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$8.684e - 11$	$8.714e - 11$
FR _{5,5}	5	$\mathcal{O}(h^4)$	$8.158e - 11$	$8.189e - 11$

Численные результаты, представленные в табл. 3 и 4, были получены при одном и том же эксцентриситете каждой орбиты $e = 0.82$ согласно точному решению. При этом значении e каждая частица совершает полный оборот за период времени $T = 16.3227$. Таким образом, за время $t = 300$ каждая частица совершила 18 полных оборотов. При расчётах, представленных в табл. 3, использовался один и тот же временной шаг $h = 0.003$ для всех схем (было выполнено 10^5 шагов во времени). Величины δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$ вычислялись как средние арифметические

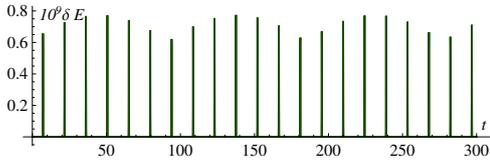


Рис. 3. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Величина $10^9 \delta E$ для случая метода $FR_{5,1}$ как функция времени

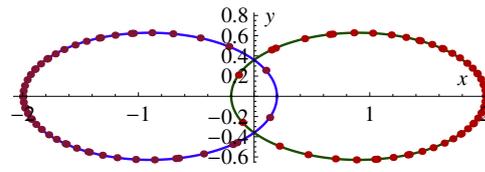


Рис. 4. Эллиптические орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в плоскости (x, y) , $0 \leq t \leq 300$. Сплошные линии – точные эллипсы, тёмные кружки – численное решение по методу $FR_{5,1}$

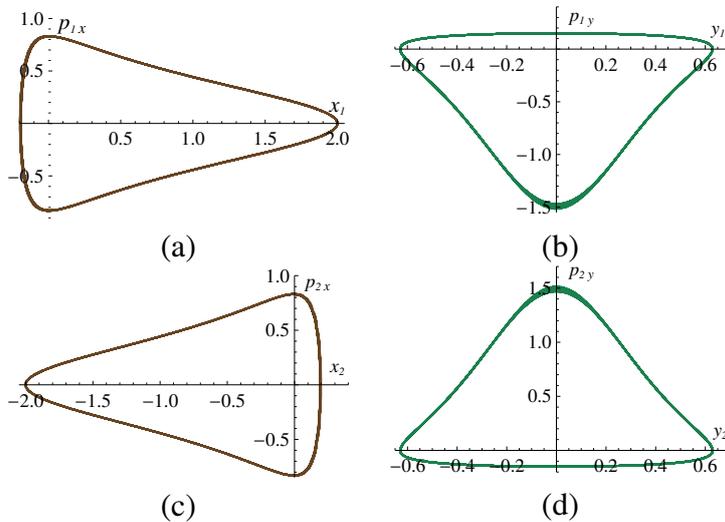


Рис. 5. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Расчёт по методу $FR_{5,1}$. Вид фазовых траекторий в различных фазовых плоскостях: (a), (b) – частица 1, (c), (d) – частица 2

значения величин δE^n и $|\delta E^n|$. Погрешности в энергии, полученные по наилучшей четырёхстадийной схеме FR_{50} , найденной в [18], примерно в 1.6 раза больше, чем при использовании пятистадийных схем четвёртого порядка точности $FR_{5,l}$, $l = 1, \dots, 5$.

Численные результаты, представленные в табл. 4, были получены при временном шаге $h = 0.005$ для всех схем (было выполнено 10^5 шагов во времени). Из сравнения табл. 3 и 4 следует, что при увеличении размера шага h уменьшается отличие результатов, полученных по схеме FR_{50} , от результатов, полученных по пятистадийным схемам. При этом погрешности в энергии, полученные при использовании пятистадийных схем четвёртого порядка точности $FR_{5,l}$, $l = 1, \dots, 5$, на 34–40 % меньше, чем в случае четырёхстадийной схемы FR_{50} .

Результаты численных расчётов, представленные на рис. 3–5, были получены при эксцентриситете $e = 0.82$ и шаге $h = 0.003$. Как видно из рис. 3, дрейфа полной энергии системы из двух частиц нет. Вместо этого имеются локальные пики колебаний, огибающая которых может быть аппроксимирована синусоидальной кривой вида $\delta E_{\max}(t) = A + B \sin(\omega_1 t + \psi)$, где A, B, ω_1, ψ – некоторые постоянные.

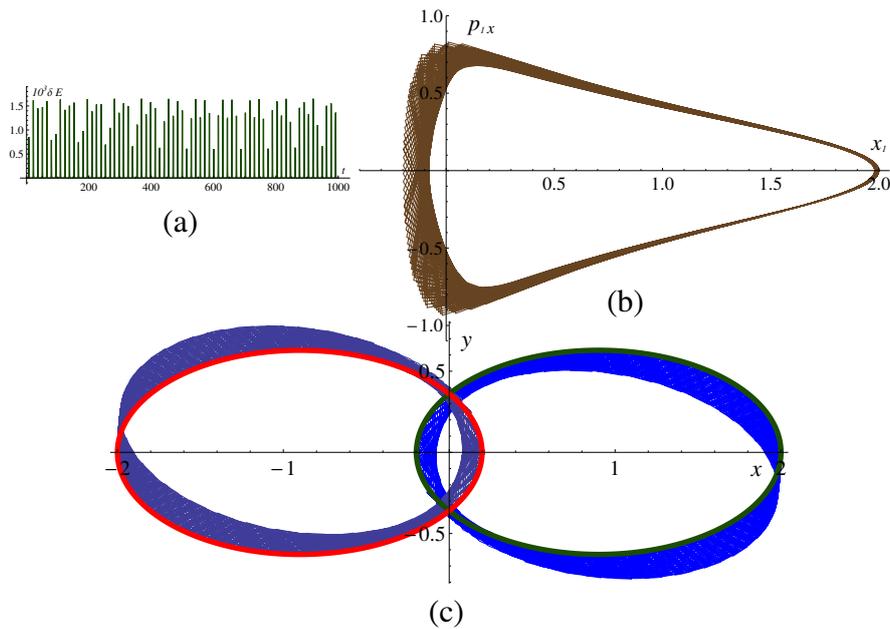


Рис. 6. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Расчёт по схеме Верле с $h = 0.015$ в промежутке $0 \leq t \leq 1000$: (a) – величина $10^3 \delta E$ как функция времени, (b) – фазовая траектория первой частицы в фазовой плоскости (x_1, p_{1x}) , (c) – орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в плоскости (x, y) , (—) – точные эллипсы, (---) – численное решение по методу Верле

Численное решение для координат обеих частиц, полученное по методу $FR_{5,1}$ на момент времени $t = 300$ после выполнения 10^5 временных шагов с шагом $h = 0.003$, представлено на рис. 4. Видно, что каждая частица движется по своей эллиптической орбите и положения частиц очень хорошо согласуются с точными орбитами.

На рис. 5 показаны фазовые траектории обеих частиц в четырёх фазовых плоскостях. Орбиты обеих частиц стационарные в пространстве точек (x, y) . Поэтому после каждого полного оборота по эллиптической орбите каждая частица должна вернуться в исходную точку, если расчёт проводится по устойчивой схеме достаточно высокой точности. Так что во всех четырёх рассмотренных фазовых плоскостях фазовые траектории должны быть замкнутыми кривыми, что и видно на рис. 5.

В заключение этого раздела рассмотрим вопрос об оптимальном выборе временного шага h численного интегрирования методом молекулярной динамики. Представленные выше новые пятистадийные FR-схемы обладают более высокой точностью, чем схема Верле. Но K -стадийная FR-схема требует при $K > 1$ в K раз больших расходов машинного времени, чем схема Верле. С другой стороны, в [34] было показано, что четырёхстадийная схема FR_{50} (параметры этой схемы приведены выше в табл. 2) позволяет существенно сократить расход машинного времени при численном решении задачи о высокоскоростном ударе медной наночастицы по медной пластине. В итоге расход машинного времени по схеме FR_{50} составил только 37.5 % от машинного времени, понадобившегося при расчёте той же задачи по схеме Верле. Это было достигнуто за счёт подбора оптимального размера

временного шага h . Благодаря повышенной точности, а также большему размеру области устойчивости схема FR50 позволяет применять большие шаги h , при этом дрейф полной энергии системы ударник-преграда появляется при гораздо большем временном шаге, чем в случае схемы Верле. Именно это и позволило существенно снизить расход машинного времени при численном решении трёхмерной задачи о соударении медной наночастицы с медной пластиной.

В задаче Кеплера используется гравитационный потенциал, который намного проще, чем ЕАМ-потенциал, применённый в [34] (ЕАМ – аббревиатура английских слов Embedded Atom Method – метод погружённого атома). Тем не менее представляет интерес сравнение критических временных шагов h_{cr} , при которых появляется дрейф полной энергии частиц в таких двух существенно различных задачах, как задача высокоскоростного соударения тел и задача Кеплера. Ниже мы приводим результаты вычислительных экспериментов, которые были выполнены с целью обнаружения дрейфа полной энергии при численном решении задачи Кеплера по схеме Верле и по одной из новых пятистадийных FR-схем, а именно, по схеме FR_{5,1}.

Очень заметный дрейф полной энергии наблюдался в [34] при использовании схемы Верле при $h = 0.015$. Для сравнения на рис. 6 приводятся результаты расчёта задачи Кеплера по схеме Верле с этим же шагом. Следуя работам [18, 25], мы рассмотрели поведение симплектических схем в промежутке времени $[0, 1000]$. Видно, что траектории обеих частиц с ростом времени t всё более отклоняются от своих точных стационарных эллиптических орбит. Интересно отметить, что дрейф полной энергии не наблюдается, амплитуда колебаний погрешности δE^n не увеличивается с ростом времени t . В то же время вполне ясно, что шаг $h = 0.015$ неприемлем с точки зрения точности результата.

Результаты расчёта задачи Кеплера с шагом $h = 0.06$ по схеме Верле и по новой схеме FR_{5,1} представлены соответственно на рис. 7 и на рис. 8. Видно, что отклонения обеих частиц от их точных орбит весьма значительные на рис. 7. В то же время отклонения обеих частиц от их точных орбит очень малы на рис. 8 во всём промежутке $0 \leq t \leq 1000$.

Из полученных результатов численного решения задачи Кеплера по схемам Верле и FR_{5,1} можно сделать следующий вывод: безопасный максимальный временной шаг h , при котором не возникает дрейф полной энергии, в случае схемы FR_{5,1} превосходит аналогичный безопасный шаг для схемы Верле более, чем в четыре раза.

5. Выводы

Рассмотрена задача построения симплектических схем высокого порядка точности для численного решения задач молекулярной динамики с распадающимся гамильтонианом. Использовались базисы Грёбнера и методы численной оптимизации. Эти методы позволили нам найти 146 новых симплектических пятистадийных схем четвертого порядка точности в семействе Фореста – Рута.

Новые схемы были протестированы на задаче Кеплера двух тел, которая имеет точное решение. Показано, что новые схемы обеспечивают более высокую точность сохранения энергии частиц, чем лучшие четырёхстадийные FR-схемы

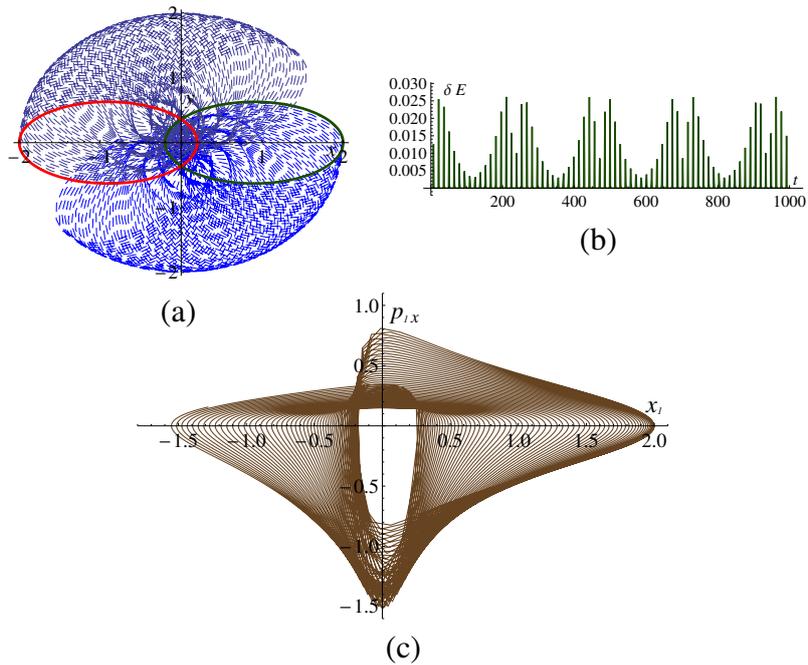


Рис. 7. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Расчёт по схеме Верле с $h = 0.06$ в промежутке $0 \leq t \leq 1000$: (a) – орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в плоскости (x, y) , (—) – точные эллипсы, (— — —) – численное решение по методу Верле, (b) – величина δE как функция времени, (c) – фазовая траектория первой частицы в фазовой плоскости (x_1, p_{1x})

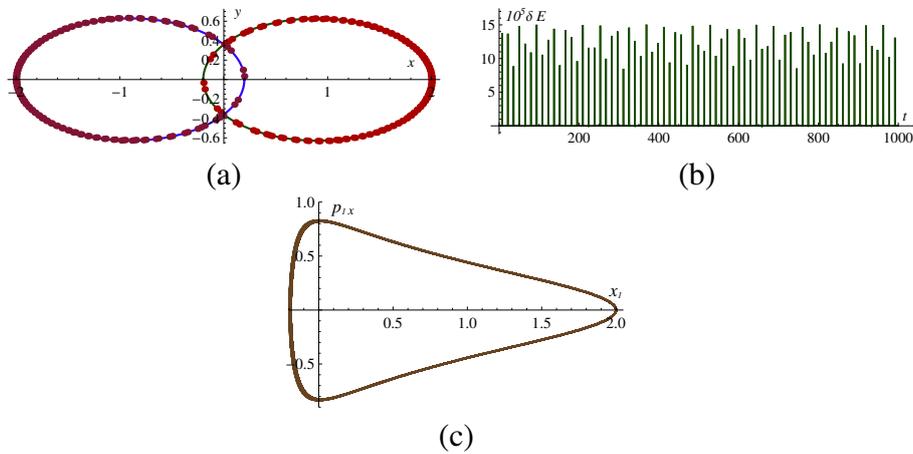


Рис. 8. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Расчёт по новому методу $FR_{5,1}$ с шагом $h = 0.06$ в промежутке $0 \leq t \leq 1000$: (a) – орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в плоскости (x, y) , (—) – точные эллипсы, (• • •) – численное решение по методу $FR_{5,1}$, (b) – величина δE как функция времени, (c) – фазовая траектория первой частицы в фазовой плоскости (x_1, p_{1x})

четвёртого порядка точности из [18] и известная схема Верле второго порядка точности. Проведено сравнение условий устойчивости FR-схем с числом стадий 3, 4 и 5. Показано, что размер области устойчивости растёт с увеличением числа стадий FR-схем.

Литература

1. Lewis H., Barnes D., Melendes K. The Liouville theorem and accurate plasma simulation // *Journal of Computational Physics*. 1987. Vol. 69, No. 2. P. 267–282.
2. Gladman B., Duncan M. Symplectic integrators for long-term integrations in celestial mechanics // *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*. 1991. Vol. 52. P. 221–240.
3. Karplus M., Petsko G.A. Molecular dynamics simulations in biology // *Nature*. 1990. Vol. 347. P. 631–639.
4. Tosenberger A., Salnikov V., Bessonov N., Babushkina E., Volpert V. Particle dynamics methods in blood flows simulations // *Mathematical Modelling of Natural Phenomena*. 2011. Vol. 6, No. 5. P. 320–332.
5. Годунов С.К., Киселёв С.П., Куликов И.М., Мали В.И. Моделирование ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. Москва; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2014. 296 с.
6. Engle R.D., Skeel R.D., Drees M. Monitoring energy drift with shadow Hamiltonians // *Journal of Computational Physics*. 2005. Vol. 206, No. 2. P. 432–452.
7. LAMMPS Users Manual 31 Mar 2017 version. Sandia National Laboratories. URL: <http://lammps.sandia.gov> (дата обращения: 01.06.2024).
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1973. 208 с.
9. Ruth R.D. A canonical integration technique // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 1983. Vol. NS-30, No. 4. P. 2669–2671.
10. Feng K. Difference schemes for Hamiltonian formalism and symplectic geometry // *Journal of Computational Mathematics*. 1986. Vol. 4. P. 279–289.
11. Forest E. Canonical integrators as tracking codes. SSC Central Design Group Technical Report SSC-138, 1987.
12. Neri F. Lie algebras and canonical integration. University of Maryland, preprint, 1988.
13. Forest E., Ruth R.D. Fourth-order symplectic integration // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1990. Vol. 43. P. 105–117.
14. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Comparative study of the accuracy of higher-order difference schemes for molecular dynamics problems using the computer algebra means // *Computer Algebra in Scientific Computing*. CASC 2020. LNCS. Vol. 12291. P. 600–620.
15. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Optimal four-stage symplectic integrators for molecular dynamics problems // *Computer Algebra in Scientific Computing*. CASC 2021. LNCS. Vol. 12865. P. 420–441.
16. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. A general method of finding new symplectic schemes for Hamiltonian mechanics // *Computer Algebra in Scientific Computing*. CASC-2022. LNCS. Vol. 13366. P. 353–376.
17. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Higher-order symplectic integration techniques for molecular dynamics problems // *Journal of Computational Physics*. 2022. Vol. 452. Art. 110905.
18. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P.: An efficient method of finding new symplectic schemes for Hamiltonian mechanics problems with the aid of parametric Gröbner bases // *Journal of Computational Physics*. 2024. Vol. 496. Art. 112601.
19. Adams A.L., Loustaunau P. An Introduction to Gröbner Bases. Vol. 3. Providence: Amer. Math. Soc., Rhode Island, 1996.

20. Кокс Д., Литтл Дж., О'Ши Д. Идеалы, многообразия и алгоритмы. М.: Мир, 2000. 687 с.
21. Cox D., Little J., O'shea D. Using Algebraic Geometry. N.Y.: Springer, Science+Business media, Inc., 2005. 184 p.
22. Дьяконов В.П. Mathematica 5/6/7. Полное руководство. М.: ДМК Пресс, 2010. 624 с.
23. Ворожцов Е.В., Киселев С.П. Явные схемы высоких порядков точности для задач молекулярной динамики // Вычислительные методы и программирование. 2021. Т. 22. С. 87–108.
24. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. Thermodynamical properties of Lennard–Jones molecules // Physical Review Journals. 1967. Vol. 159, No. 1. P. 98–103.
25. Hairer E., Lubich C., Wanner G. Geometric Numerical Integration. 2nd ed. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.
26. Leimkuhler B., Reich S. Simulating Hamiltonian Dynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
27. Omelyan I.P., Mryglod I.M., Folk R. Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations // arXiv. 2001. arXiv:cond-mat/0110438v1.
28. Blanes S., Moan P. Practical symplectic partitioned Runge–Kutta and Runge–Kutta–Nyström methods // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2002. Vol. 142. P. 313–330.
29. Okunbor D.I., Skeel R.D. Canonical Runge–Kutta–Nyström methods of orders five and six // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1994. Vol. 51. P. 375–382.
30. Кудрявцева И.В., Рыков С.А., Рыков С.В., Скобов Е.Д. Методы оптимизации в примерах в пакете MathCAD 15. Учебное пособие. Ч. I. СПб: НИУ ИТМО, ИХиБТ, 2014. 166 с.
31. Софронов В.Н., Шемарулин В.Е. Классификация явных трехстадийных симплектических разностных схем численного решения натуральных гамильтоновых систем. Сравнительное исследование точности схем высокого порядка на задачах молекулярной динамики // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Т. 56, № 4. С. 551–571.
32. Leimkuhler B., Matthews C. Molecular Dynamics With Deterministic and Stochastic Numerical Methods. Heidelberg: Springer, 2015.
33. Альшина Е.А., Закс Е.М., Калиткин Н.Н. Оптимальные схемы Рунге Кутты с первого по шестой порядок точности // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2008. Т. 48, № 3. С. 418–429.
34. Ворожцов Е.В. Анализ эффективности симплектических схем высокого порядка точности на примере задачи о соударении наночастицы с преградой // Вычислительные методы и программирование. 2024. Т. 25, № 2. С. 214–237.

NEW SYMPLECTIC FIVE-STAGE SCHEMES FOR MOLECULAR DYNAMICS PROBLEMS

E.V. Vorozhtsov

Dr.Sc. (Phys.-Math.), Professor, Leading Researcher, e-mail: vorozh@itam.nsc.ru

Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics
Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

Abstract. We consider the Forest – Ruth family of symplectic five-stage Runge – Kutta type schemes for the numerical solution of molecular dynamics problems described by systems with a separable Hamiltonian. A two-step optimization method for finding symplectic schemes of high order of accuracy is proposed. In fact, a method has been proposed for increasing the accuracy of symplectic difference schemes with a fixed number of stages by obtaining real schemes with the smallest norm of the leading term of the difference scheme approximation error. 146 new five-stage schemes of the fourth order of accuracy were found using numerical optimization. A comparison was made of the stability conditions of the Forest – Ruth schemes with a number of stages of 3, 4, and 5. The accuracy of the new schemes was demonstrated using the example of a numerical solution to the Kepler two-body problem. It is shown that the new five-stage schemes provide higher accuracy of particle energy conservation than the best known four-stage fourth-order schemes and the well-known second-order Verlet scheme.

Keywords: molecular dynamics, Hamilton equations, symplectic difference schemes, optimization methods, stability.

Дата поступления в редакцию: 17.06.2024

ЭКОНОМИЧЕСКАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ И ДИНАМИКА ПРИБЫЛИ СТРОИТЕЛЬНОЙ КОМПАНИИ С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ КАТАСТРОФ

Е.Е. Володченко

аспирант, e-mail: vee-395@yandex.ru

Международный инновационный университет, Сочи, Россия

Аннотация. Предлагается модель скачков прибыли строительного предприятия, основанная на математической теории катастроф. Модель даёт возможность рассчитывать изменения прибыли по шести (семи) факторам, определяющим экономическую безопасность предприятия. Мы рассматриваем б-факторную модель, известную как катастрофа Star. Эта модель представляет типичный росток катастроф, т. е. описывает основную массу однотипных строительных предприятий. Типичность роста и его универсальные деформации дают нам возможность говорить о достаточной адекватности предлагаемой модели, поскольку нетипичные ростки относятся, с точки зрения математики, к исключительным явлениям, редко встречающимся в экономике.

Ключевые слова: экономическая безопасность, строительное предприятие, математическая модель, прибыль, теория катастроф.

Введение

Под экономической безопасностью предприятия понимается способность этого предприятия, находящегося в определённых экономических условиях, обеспечивать его существование и привычное для его работников функционирование в случае изменения факторов, которые определяют деятельность рассматриваемого предприятия.

Как бы не был подготовлен управляющий предприятием персонал, возникают ситуации, когда предприятие, его экономика, претерпевает неожиданные скачкообразные изменения, которые, в частности, могут иметь катастрофические последствия. Поэтому если говорить об экономической безопасности предприятия, то очевидно, что управляющий персонал должен уметь предсказывать возможные скачки и уметь их предотвращать.

Помимо традиционных, чисто экономико-управленческих методов, персонал должен быть готовым использовать и современные математические методы управления предприятием и методы принятия решений.

С середины XX в. в экономике стали использоваться математические методы. В основном это методы оптимизации, методы теории игр, принятия решений и др. Однако был и период, когда в экономике стала использоваться математическая

теория катастроф, которая исследовала скачкообразные изменения в состоянии изучаемой системы [1].

Методы описания скачков, катастроф, известные под названиями теория бифуркаций и теория катастроф, были разработаны математиками во второй половине XX в. В начале 1970-х гг. появилось множество статей, в которых демонстрировалась результативность теории катастроф в различных областях науки. В частности, с помощью теории катастроф Зеeman (1974) описал динамику финансового рынка.

Однако после первых шумных обсуждений предложенных теоретико-катастрофических моделей со временем достигнутые результаты стали подвергаться критике и постепенно интерес к теории катастроф угас.

Сейчас, похоже, происходит переосмысление применимости методов теории катастроф в экономике. В 2007 г. Дж.Б. Россер (мл.) подвёл итог этому периоду в статье «Взлёт и падение теории катастроф. Применение в экономике: Выплеснули ли ребёнка вместе с водой?» следующими словами: «Общие критики теории катастроф также подвергли резкой критике работу Зеemана (1974) о динамике финансового рынка. Однако переоценка показывает, что многие из этих критических замечаний были ошибочными. В той степени, в которой экономисты избегали использования теории катастроф из-за этой критики, им больше не следует этого делать» [2].

Поэтому совсем неслучайно в XXI в. теория катастроф вновь стала интересовать экономистов [2–8].

Дело в том, что эта теория даёт аппарат исследования скачкообразных процессов, когда сам процесс описывается дифференциальным уравнением. В нашем случае это касается описания скачкообразных, катастрофических изменений состояния предприятия и непредсказуемых заранее направлений его развития, возникающих при, казалось бы, совершенно спокойных, незначительных и контролируемых плавных изменениях в окружающей среде, и которые в математике известны под названием *бифуркация процессов*.

Поскольку в жизни наблюдаются скачкообразные изменения состояния предприятий с последующей непредсказуемой эволюцией, то очевидно, что возобновление использования теории катастроф в экономике – это закономерное явление. Время протекания таких скачков часто пренебрежимо мало по сравнению с временем существования предприятия. Скачки могут привести и к краху, катастрофе предприятия. «Теория катастроф позволяет идентифицировать границы устойчивости предприятия и определить критические значения показателей» [5].

Следует отметить, что «эта теория находится ещё в стадии начального развития. В обратном же случае, полагаем, что теория экономической безопасности могла бы рассматриваться как частный случай теории катастроф. Тем не менее, её элементы, несомненно, ценны и требуют серьёзной проработки» [4].

В данной статье в развитие масштабов применимости теории катастроф в экономике строится теоретико-катастрофическая модель прибыли строительного предприятия, которую мы рассматриваем как величину, определяющую экономическую безопасность предприятия.

1. Экономическая безопасность и прибыль предприятия

Если мы говорим об экономической безопасности предприятия, в частности строительного, необходимо отметить, что экономическая безопасность – это качественная характеристика.

Да, она может подкрепляться количественными данными, однако результаты экспертного суждения будут даны в виде формулировок: «низкий», «допустимый», «удовлетворительный», «высокий», ... уровень экономической безопасности.

На данный момент общая модель оценки экономической безопасности представляет собой комплексный сбор данных о предприятии по 4 ключевым параметрам:

- финансовая безопасность (коэффициенты ликвидности, автономности, независимости, финансового рычага);
- кадровая безопасность (уровень з/п, стабильность кадрового состава, производительность и т. д.);
- технико-технологическая безопасность (расчёт коэффициентов, связанных с основными средствами);
- производственно-сбытовая составляющая (расчёт коэффициентов рентабельности).

По каждому параметру рассчитываются определённые коэффициенты, которые дают представление об уровне устойчивости предприятия, а после определения весовых/поправочных коэффициентов выводят средневзвешенные.

Если мы исходим из того, что целью любого коммерческого предприятия является систематическое извлечение прибыли (что по закону именно так, ст. 50 ГК РФ), то логично брать за основную величину именно прибыль.

В обосновании выбора имеет смысл говорить о том, что если предприятие занимается какой-либо деятельностью на постоянной основе, то выручка будет однозначно (от реализации товаров, работ, услуг), а прибыли может и не быть, в связи с различными факторами (высокая себестоимость, неграмотный менеджмент, налоги, закредитованность).

Факторов, влияющих на объём прибыли, великое множество. Однако необходимо определить наиболее ключевые, влияющие именно на состояние экономической защищённости предприятия.

2. Факторы, влияющие на объём прибыли

Перечислим эти факторы:

u_1 – ставка Центрального Банка РФ, u_2 – себестоимость строительства,

u_3 – себестоимость строительства (кв. м., 1 км дороги и т. п.),

u_4 – спрос, u_5 – объём продаж,

u_6 – земельный банк, u_7 – сумма исков.

Они управляют величиной прибыли предприятия. Обоснования даны в табл. 1. Большое число показателей > 5 порождает определённые трудности для выбора модели прибыли в рамках теории катастроф, поскольку хотя они и перечислены, но

Таблица 1. Факторы, влияющие на экономическую безопасность предприятия

№ п/п	Фактор	Измерение	Обоснование
1	Ставка Центрального Банка РФ и как следствие ставка по кредитам	%	В любом строительстве кредит имеет колоссальное значение. Заёмные денежные средства необходимы для пополнения оборота, приобретения техники и материалов, выплаты зарплаты и т. п. В современных реалиях жилищного строительства невозможно начать проект на собственные средства? если застройщик работает по 214-ФЗ, так как необходимо открытие эскроу-счёта, на котором будут аккумулироваться денежные средства приобретателей недвижимости, а параллельно застройщику в этот момент выдаётся кредит на строительство (проектное финансирование)
2	Себестоимость строительства (кв. м., 1 км дороги и т. п.)	руб.	Изменение себестоимости вследствие колебания валютных курсов, стоимости материалов, рабочей силы и прочего значительно может повлиять на финансовые результаты строительной компании. Однако себестоимость включает в себя различные затраты, связанные с функционированием предприятия
3	Спрос	руб.	Фактически спрос можно определить только объёмом заключённых сделок по конкретной цене в конкретный момент времени
4	Объём продаж	руб.	Количество реализованных объектов в денежном выражении
5	Инциденты безопасности	шт.	Тут необходимо учитывать произошедшее количество инцидентов безопасности, без разбивки (т. е. общее число утечек информации, физический травматизм, просроченная задолженность, кражи и т. п.)
6	Земельный банк	га/кв.м	Важный показатель для застройщиков, работающих в сфере жилищного строительства, так как от количества приобретённой земли напрямую зависят объёмы будущей застройки
7	Сумма исков	руб.	Количество исков от клиентов и их стоимостная оценка – самый точный показатель, определяющий добросовестность застройщика, качество и своевременность сдаваемых объектов. Справедливо как для компаний, работающих в сфере жилищного строительства, так и иных объектов

их может быть бесконечное число, а выбранные могут быть структурно неустойчивыми, т. е. терять свои свойства при внешних небольших возмущениях (при малых шевелениях).

3. Модель динамики величины $x(t)$ в теории катастроф

Изменчивость прибыли со временем t описывается с помощью математической модели, представляющей дифференциальное уравнение вида

$$\frac{dx}{dt} = -\nabla V(x, u),$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad u = (u_1, \dots, u_k) \in \mathbb{R}^k,$$

где $V(x, u)$ – семейство, вид которого даёт теория катастроф. Нас будут интересовать *стационарные равновесные состояния*, т. е. состояния, для которых

$$\frac{dx}{dt} = \nabla V(x, u) = 0.$$

Иначе говоря, это состояния, находясь в которых прибыль не меняется некоторое длительное время, а если меняется, то скачками, осуществляющимися сравнительно за короткое время, в случае, когда управляющие параметры u_1, \dots, u_k , меняясь, пересекают *бифуркационное множество* (если таковое имеется, см. § 4.1 и рис. 1).

Нам необходимо будет найти функцию $V(x, u)$ так, чтобы она заведомо обладала бифуркационным множеством. Для этого мы и обратимся к теории особенностей дифференцируемых отображений [10], или к математической теории катастроф. Эта теория классифицирует *типичные* формы семейств функций, или виды функций $V(x, u)$.

Типичность понимается как то, что встречается почти всегда, и поскольку прибыль предприятия скорее нужно отнести к типичным, обычным явлениям, то вполне можно искать функцию $V(x, u)$ среди **типичных ростков**.

Росток в точке p – это класс эквивалентности функций, когда две функции $f : (\mathbb{R}^n, p) \rightarrow (\mathbb{R}, 0)$ и $g : (\mathbb{R}^n, p) \rightarrow (\mathbb{R}, 0)$ считаются эквивалентными, если они совпадают на некоторой окрестности точки p . В случае признания прибыли рассматриваемого предприятия, а она в нашем подходе определяет экономическую безопасность предприятия, *нетипичным явлением* нам придётся искать вид функции V уже вне теории катастроф, а точнее, придётся выводить, определять её вид, опираясь на некоторые, скажем, эвристические методы, обращаясь к профессиональным математикам, работающим в союзе с экономистами.

«Типичные формы ростков во многом все классифицированы, и нам всего лишь нужно будет выбрать подходящую. Это обстоятельство отчасти нас смущает – одна и та же функция для различных явлений, совсем не из близких сфер человеческой деятельности или природы. Но в этом блеск теории катастроф, ведь она сумела единым способом описать самые разнообразные явления, сосредоточившись на типе катастрофического, скачкообразного перехода от одного равновесия к другому. Эти переходы оказались достаточно однообразными и их смогли классифицировать. Правда, если число управляющих ими факторов/параметров не слишком большое. Но в ряду случаев, их может быть и бесконечно много» [16].

Если мы описываем прибыль одним уравнением, т. е. имея только одну 1-мерную переменную x , и учитываем 7 управляющих факторов (параметров), то в общем

случае функция $V(x, u)$ имеет вид [11, с. 52]

$$V(x, u) = \pm x^9 + \sum_{k=1}^7 u_k x^k,$$

и, следовательно, динамика прибыли предприятия описывается уравнением

$$\frac{dx}{dt} = \mp 9x^8 - \sum_{k=1}^7 k u_k x^{k-1}.$$

4. Типичные ростки и их версальные деформации [16]

Теория катастроф пытается дать ответ на вопрос: каковы *обычно* встречаемые типы k -параметрических гладких семейств функций $V(x, u_1, \dots, u_k)$? Или: каковы типичные формы этих семейств?

Хотелось, чтобы именно эти типы и властвовали в природе. А те, что к ним не причислены, были крайне редки. На языке математики можно это выразить словами: множество семейств с типичными формами образуют среди всех гладких семейств *открытое плотное* множество. Иначе говоря, если берём типичную форму, то все близкие к ней также типичны, а если попалась нам нетипичная форма, то сколь угодно близко к ней всегда есть типичная.

Семейство с параметром u

$$V : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R},$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad u \in \mathbb{R}^k,$$

имеет *особенность* в точке $x = 0$, если

$$V(0, u) = 0, \quad d_x V(0, u) = 0.$$

Функцию с особенностью часто саму называют *особенностью*.

Особенность вырожденная, если

$$\det \left\| \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} (0, u) \right\| = 0,$$

где l – число нулевых собственных чисел λ_i матрицы

$$\left\| \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} (0, u) \right\|.$$

Рассматриваемое нами семейство $V(x, u)$ с помощью замены переменных $x \rightarrow \phi(x, u)$, $u \rightarrow \psi(u)$ может быть приведено к *каноническому* выражению вида (расщепление Тома):

$$V(x, u) = f(x, u) + F(x, u),$$

где

$$f(x, u) = CG(l) + \underbrace{\sum_{i=l+1}^n \lambda_i(u)x_i^2}_{\text{морсова часть}}$$

l – коранг функции V ,

где $CG(l) = CG(l)(x_1, \dots, x_l)$ – *росток катастрофы*, $F : (\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k, 0) \rightarrow \mathbb{R}$ – его *универсальная деформация* (возмущение).

Задача теории особенностей дифференцируемых отображений состоит в вычислении канонических ростков катастрофы и их универсальных деформаций¹.

Тем самым мы получаем канонические списки потенциальных функций $V(x, u)$, которые можно использовать в целях моделирования процессов в виде дифференциального уравнения (2). Выбирая каноническое выражение, мы будем автоматически получать типичные модели.

4.1. Бифуркационное множество

Рассмотрим семейство $V : \mathbb{R}^x \times \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$. Множество

$$C_V = \{(x, u) : d_x V(x, u) = 0\}$$

называется *множеством катастроф семейства* V , оно состоит из стационарных равновесий.

Среди стационарных равновесий есть вырожденные – это особенности, образующие *множество особенностей*:

$$\Sigma_V = \{(x, u) \in C_V : \det d_x^2 V(x, u) = 0\},$$

проекция $\pi_V : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$ которого на плоскость $u \in \mathbb{R}^k$ даёт **бифуркационное множество**:

$$B_V = \pi_V(\Sigma_V) = \{u \in \mathbb{R}^k : \exists x((x, u) \in \Sigma_V)\}.$$

При изменении u с пересечением множества B_V происходит смена равновесия. Это и есть катастрофа!

4.2. Пример катастрофы Cusp (катастрофа сборки)

Рассмотрим семейство

$$V(x, u, v) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}ux^2 + vx,$$

для которого

$$C_V = \{(x, u, v) : x^3 + ux + v = 0\},$$

¹Алгоритм вычисления универсальных деформаций дан в [12, с. 256].

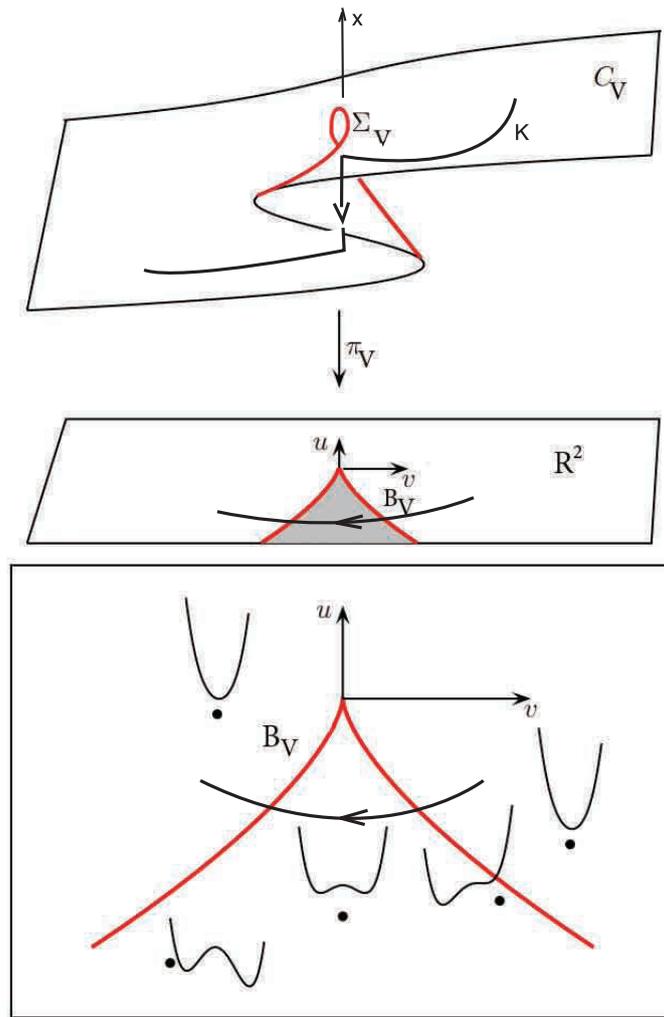


Рис. 1. Катастрофы сборки [9]. При движении в плоскости (u, v) вокруг $(0,0)$ функция $V_{(u,v)}(x) = V(x, u, v)$ меняет число критических точек (в которых $d_x V_{(u,v)} = 0$). На рисунках видно как пересечение (проекция кривой K) бифуркационного множества B_V скачком «обрушивает» значение прибыли предприятия x

$$\begin{aligned} \Sigma_V &= \{(x, u, v) \in C_V : 3x^2 + u = 0\} = \\ &= \{(x, u, v) : x^3 + ux + v = 0, u = -3x^2\} = \{(x, u, v) : v = 2x^3, u = -3x^2\} \end{aligned}$$

– множество особенностей.

Тогда

$$B_V = \pi(\Sigma_V) = \{(u, v) \in \mathbb{R}^2 : \exists x(u = -3x^2, v = 2x^3)\}.$$

При движении в плоскости (u, v) вокруг $(0,0)$ функция $V_{(u,v)}(x) = V(x, u, v)$ меняет число критических точек, происходят катастрофы (см. рис. 1).

Таблица 2. Ростки и их деформации при $k \leq 5$

Тип	n	k	$CG(l)$	$F(-, -)$
Складка	1	1	x^2	u_1x
Сборка	1	2	$\pm x^4$	$u_1x + u_2x^2$
Ласточкин хвост	1	3	x^5	$u_1x + u_2x^2 + u_3x^3$
Бабочка (A_5)	1	4	$\pm x^6$	$u_1x + u_2x^2 + u_3x^3 + u_4x^4$
Гиперболическая омбилическая точка	2	3	$x^3 + y^3$	$u_1x + u_2y + u_3xy$
Параболическая омбилическая точка	2	3	$\pm(x^2y + y^4)$	$u_1x + u_2y + u_3x^2 + u_4y^2$
Эллиптическая омбилическая точка	2	4	$x^3 - xy^2$	$u_1x + u_2y + u_3(x^2 + y^2)$
Вигвам (A_6)	1	5	x^7	$u_1x + u_2x^2 + u_3x^3 + u_4x^4 + u_5x^5$
Вторая эллиптическая омбилическая точка (D_6^-)	2	5	$x^2y - y^5$	$u_1x + u_2y + u_3x^2 + u_4y^2 + u_5y^3$
Вторая гиперболическая омбилическая точка (D_6^+)	2	5	$x^2y + y^5$	$u_1x + u_2y + u_3x^2 + u_4y^2 + u_5y^3$
Символическая омбилическая точка (E_6)	2	5	$\pm(x^3 + y^4)$	$u_1x + u_2y + u_3xy + u_4y^2 + u_5xy^2$

5. Теорема Тома – Зимана ($k \leq 5$)

Теорема 1. Для $n \geq 1$ и $k \leq 5$ существует открытое и плотное множество структурно устойчивых гладких k -параметрических семейств $V(x, u) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$, эквивалентных вблизи любой точки одному из канонических семейств, перечисленных в табл. 2. Число таких семейств зависит от k :

k	≤ 1	≤ 2	≤ 3	≤ 4	≤ 5	≥ 6
Число типов	1	2	5	7	11	∞

Мы видим, что формулировка этой теоремы раскрывает нам понятие *типичности* ростка катастрофы: они образуют открытое плотное множество в многообразии всех гладких k -параметрических семейств функций. Иначе говоря, *почти любое* гладкое k -параметрическое семейство указано в табл. 2.

Бесконечное число семейств функций V при $k \geq 6$ можно исключить за счёт ослабления определения эквивалентности семейств [13, с. 170]. Для решаемой нами

задачи это принципиально – число факторов k оценки прибыли часто больше 5, и желательно иметь конечное число вариантов при выборе модели прибыли предприятия.

6. Скачки прибыли предприятия в случае роста Cusp

Если бы мы для моделирования скачков прибыли предприятия использовали росток Cusp, т. е. располагали только двумя управляющими факторами, то множество катастроф C_V выглядело бы как на рис. 1 или на рис. 2.

Плавное изменение факторов u_1, u_2 при пересечении ими бифуркационного множества B_V приводило бы либо к падению прибыли, либо к её подъёму (рис. 2). Именно такую модель для финансового рынка выбрал Зеeman в 1970-е гг. и, как мы знаем, попал под критику.

В нашем случае факторов семь, поэтому множество катастроф – это 7-мерная поверхность в 8-мерном пространстве. Её проекции на 2-мерные плоскости факторов (u_i, u_j) могут давать при изменении этих факторов скачки типа скачков Cusp-катастрофы. Но могут проявляться и другие катастрофы, например Swallowtail-катастрофа, т. е. катастрофа «Ласточкин хвост».

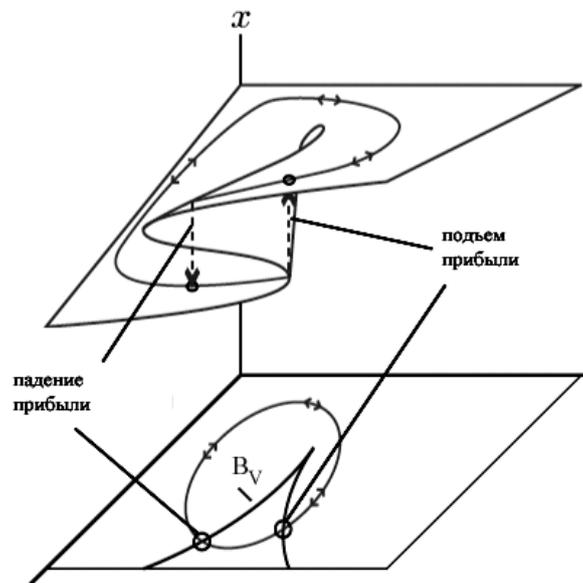


Рис. 2. Скачки прибыли в случае катастрофы Cusp (сборки) (рис. из [14])

7. Скачки прибыли предприятия в случае роста Star

Если мы не будем рассматривать фактор «спрос» как существенный фактор, влияющий на прибыль строительного предприятия, то можем моделировать дина-

мику прибыли с помощью катастрофы Star:

$$V(x, u) = x^8 + \sum_{k=1}^6 u_k x^k. \quad (1)$$

Для этой катастрофы в книге [15] были рассчитаны проекции множества катастроф C_V , а значит и множество особенностей Σ_V на различные двумерные плоскости (u_i, u_j) (см рис. 3, 4).

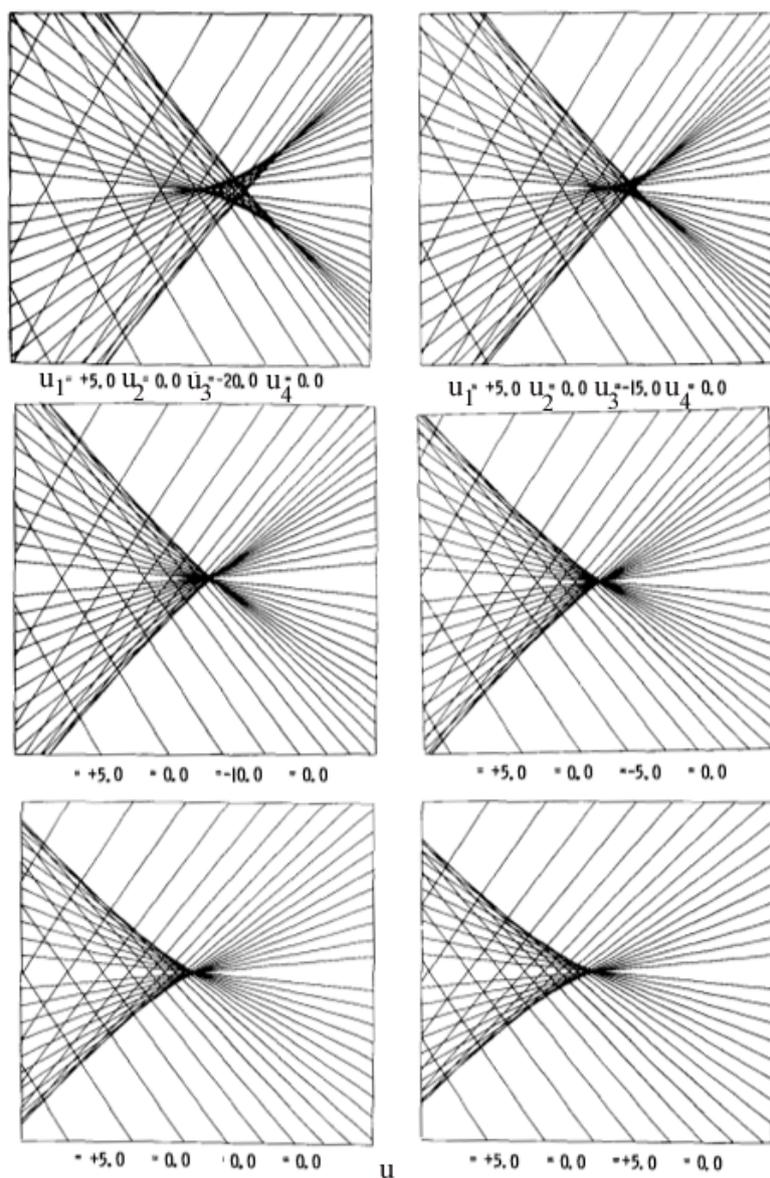


Рис. 3. Проекция (линейчатой) поверхности катастрофы Star на плоскость (u_5, u_6) . Значения факторов u_1, u_2, u_3, u_4 указаны под рисунками (рис. из [15, p. 46])

Когда $u_1 = 0$ или положительно, то картина особенности типична для катастрофы «Бабочки» с двумя крыльями, появляющимися, когда u_3 отрицательно (рис. 3). Но когда u_1 отрицательно, u_2 велико и положительно, а $u_3 = u_4 = 0$, особенность у Star – просто сборка (Cusp) (рис. 4).

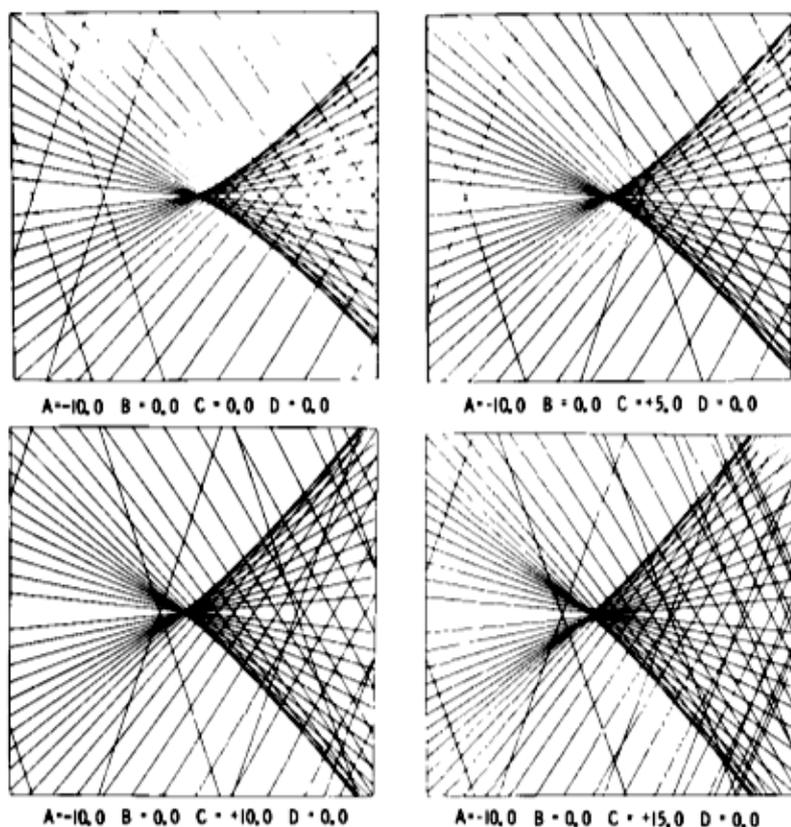


Рис. 4. Проекция (линейчатой) поверхности катастрофы Star на плоскость (u_5, u_6) с каспидным поведением (рис. из [15, p. 42])

Поведения функции $V(x, u)$ дано на рис. 5. Она может иметь не более 7 действительных корней. Поскольку это нечётное число, катастрофа не является самодвойственной. Будет либо 4 максимума и 3 минимума, либо 4 минимума и 3 максимума.

Мы видим, что исследование и предсказание возможных скачков при плавных изменениях управляющих факторов $(u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6)$ наталкивается на весьма сложную геометрическую картину как множества катастроф, так и прохождения факторов по возможным путям в пространстве $(u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6)$. Без создания соответствующего программного приложения с визуализацией возникающих ситуаций вряд ли возможна плодотворная экспертная работа.

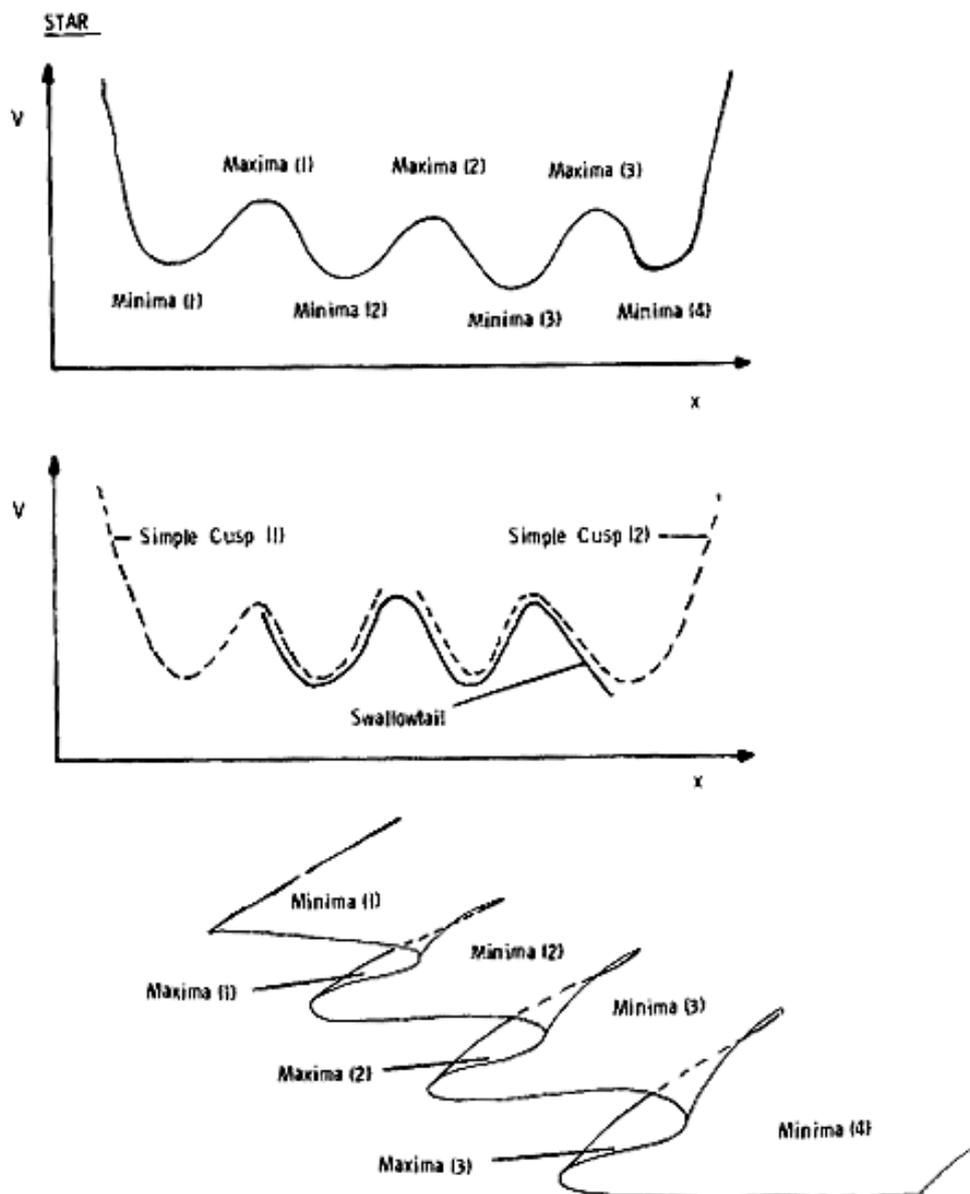


Рис. 5. Возможные стационарные равновесия потенциальной энергии (4) – это максимумы и минимумы функции $V(x, u)$. Здесь $u_1 = -8, 0$, $u_2 = 0, 0$, $u_3 = +16, 0$ и $u_4 = 0, 0$ (рис. из [15, p. 229])

Ещё более сложная ситуация имеет место в случае учёта всех семи факторов из табл. 1. Тогда мы получаем катастрофу, обозначаемую как A_8 :

$$V(x, u) = x^9 + \sum_{k=1}^7 u_k x^k. \quad (2)$$

В литературе отсутствует какое-либо геометрическое изучение этой катастрофы.

Заключение

Мы видим, что теория катастроф позволяет построить множество различных моделей прибыли предприятия, которые дают возможность учитывать достаточно большое количество факторов, влияющих на прибыль, и при желании в ряде моделей их число можно неограниченно увеличивать. Такая множественность в принципе позволяет учитывать специфические особенности в деятельности тех или иных строительных предприятий.

Типичность используемых при моделировании ростков и их универсальных деформаций позволяет говорить о достаточной адекватности предлагаемых моделей, поскольку нетипичные ростки относятся с точки зрения математики к исключительным явлениям, редко встречающимся в природе, в нашем случае – в экономике предприятий.

Благодарности

Автор благодарит профессора А.К. Гуца за консультации по теории катастроф и за разрешение использовать фрагменты из его статьи [16].

Литература

1. Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и её приложения. М.: Мир, 1982.
2. Rosser J.V.Jr. The rise and fall of catastrophe theory applications in economics: Was the baby thrown out with the bathwater? // *Journal of Economic Dynamics & Control*. 2007. Vol. 31. P. 3255–3280.
3. Ганчар Н.А. Экономическая безопасность и устойчивость развития приграничных регионов // *Журнал правовых и экономических исследований*. 2019. № 3. С. 118–123.
4. Феофилова Т.Ю. Исходные предпосылки формирования основ теории экономической безопасности. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:146592581> (дата обращения: 10.09.2024).
5. Данілова Е.І. Теоретичні концепти формування системи економічної безпеки // *Бізнесінформ*. 2019. № 8. С. 8–14.
6. Бородин А.И., Новикова Н.И., Шаш Н.Н. Применение синергетических методов и теории катастроф // *Эффективное Антикризисное Управление*. 2015. № 2 (89). С. 84–90.
7. Зенченко С.В., Егоркин Е.А. Применение теории катастроф для оценки устойчивости позиций кредитной организации // *Вестник СевКавГТУ*. 2014. Вып. 19. С. 22–27.
8. Неделько Н.С. Использование теории катастроф к анализу поведения экономических систем // *Вестник МГТУ*. 2010. Т. 13, № 1. С. 223–227.
9. Montaldi J. *Singularities Bifurcations & Catastrophes*. University of Manchester, 2009.
10. Арнольд В.И., Варченко А.Н., Гусейн-Заде С.М. Особенности дифференцируемых отображений. М.: МЦНМО, 2009. 672 с.
11. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. Т. 1. М.: Мир, 1984.
12. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. Т. 2. М.: Мир, 1984.
13. Касти Дж. Большие системы. Связность, сложность и катастрофы. М.: Мир, 1982.

14. Crutchfield J. Lecture 4. The Big, Big Picture / Nonlinear Physics, Physics 150/250. Spring, 2008. URL: <https://csc.ucdavis.edu/~chaos/courses/nlp/Lectures/Lecture4Slides.pdf> (дата обращения: 10.09.2024).
15. Woodcock A.E.R., Poston T. A geometric study of the Elementary Catastrophes. N.Y.: Springer-Verlag, 1974.
16. Гуц А.К. Моделирование стационарных равновесных состояний почвы и их катастрофические изменения под влиянием антропогенных нагрузок // Математические структуры и моделирование. 2023. № 2 (66). С. 15–37.

**ECONOMIC SECURITY AND PROFIT DYNAMICS OF A CONSTRUCTION
COMPANY FROM THE POINT OF VIEW OF THE MATHEMATICAL THEORY
OF CATASTROPHES**

E.E. Volodchenkov

Postgraduate Student, e-mail: vee-395@yandex.ru

International Innovation University, Sochi, Russia

Abstract. A model of jumps in profits of a construction company based on the mathematical theory of catastrophes is proposed. The model makes it possible to calculate changes in profits for six (seven) factors that determine the economic security of the enterprise. We consider a 6-factor model known as the Star catastrophe. This model represents a typical sprout of catastrophes, i.e. it describes the bulk of similar construction companies. The typicality of the sprout and their universal deformations allows us to talk about the sufficient adequacy of the proposed model, since atypical sprouts are related from the point of view of mathematics to exceptional phenomena, rarely encountered in the economy

Keywords: economic security, construction company, mathematical model, profit, catastrophe theory.

Дата поступления в редакцию: 17.09.2024

ДВУХСЕТОЧНЫЙ МЕТОД НА СЕТКЕ БАХВАЛОВА ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОЙ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЁННОЙ ЗАДАЧИ

А.И. Задорин

д.ф.-м.н., профессор, e-mail: zadorin@ofim.oscbras.ru

С.Б. Шагаев

аспирант, e-mail: ssairan@yandex.ru

Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

Аннотация. Исследуется двухсеточный метод численного решения сингулярно возмущённой эллиптической задачи. На сетке Бахвалова применяется схема направленных разностей, обладающая на этой сетке свойством сходимости, равномерной по малому параметру. Для реализации схемы применяется итерационный метод Зейделя. В результате проведённых численных экспериментов показано, что применение двухсеточного метода позволяет существенно сократить вычислительные затраты. Кроме того, при использовании двухсеточного метода возможно применение метода экстраполяции Ричардсона, что позволяет повысить точность разностной схемы.

Ключевые слова: эллиптическое уравнение, пограничный слой, разностная схема, двухсеточный метод, сетка Бахвалова, экстраполяция Ричардсона.

Введение

В работе проводится анализ двухсеточного метода решения сингулярно возмущённой эллиптической задачи для уравнения с малым параметром ε при старших производных. Актуальность данной задачи обусловлена тем, что на основе сингулярно возмущённых задач моделируются конвективно-диффузионные процессы с преобладающей конвекцией. Решение такой задачи имеет большие градиенты в областях пограничного слоя, поэтому применение классических разностных схем на равномерной сетке приводит к существенным погрешностям. Известно, что в случае применения сеток, сгущающихся в пограничных слоях, можно добиться сходимости разностной схемы, равномерной по малому параметру. Широко известны сетки Бахвалова [1] и Шишкина [2, 3].

Исследование двухсеточного алгоритма представляет интерес, поскольку его применение приводит к существенному сокращению вычислительных затрат. Кроме этого, на основе известного решения схемы на двух вложенных сетках можно повысить точность решения методом Ричардсона. Сетка Бахвалова ранее не применялась в двухсеточном методе решения сингулярно возмущённой эллиптической задачи.

Двухсеточный метод для решения сингулярно возмущённой задачи применялся в [4–6]. В [4] и [5] использовалась разностная схема экспоненциальной подгонки на равномерной сетке в случае краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. В [6] для эллиптической задачи применялась схема направленных разностей на сетке Шишкина.

В данной работе исследуем применение сетки Бахвалова в двухсеточном методе решения эллиптической сингулярно возмущённой задачи.

Используем следующие обозначения. Всюду под C и $C_j, j \geq 0$, будем подразумевать положительные постоянные, не зависящие от малого параметра ε и числа шагов сетки N . Пусть $\|u^h\|_h = \max_{i,j} |u_{i,j}^h|$.

1. Постановка задачи

Рассмотрим сингулярно возмущённую краевую задачу:

$$\begin{aligned} Lu(x, y) = \varepsilon u_{xx} + \varepsilon u_{yy} + a(x)u_x + b(y)u_y - c(x, y)u = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega; \\ u(x, y) = g(x, y), \quad (x, y) \in \Gamma, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\Omega = (0, 1)^2$, $\Gamma = \bar{\Omega} \setminus \Omega$. Предполагаем, что функции a, b, c, f, g являются достаточно гладкими,

$$a(x) \geq \alpha > 0, \quad b(y) \geq \beta > 0, \quad c(x, y) \geq 0, \quad \varepsilon \in (0, 1].$$

Решение задачи (1) имеет погранслоиные области больших градиентов у границ $x = 0, y = 0$ [2].

Зададим двумерную неравномерную сетку:

$$\Omega^h = \{(x_i, y_j)\}, \quad i, j = 0, 1, \dots, N,$$

$$h_i = x_i - x_{i-1}, \quad k_j = y_j - y_{j-1}, \quad x_0 = 0, x_N = 1, \quad y_0 = 0, y_N = 1.$$

Зададим модифицированную сетку Бахвалова в соответствии с [7], сгущающуюся в областях пограничного слоя.

Зададим шаги сетки по переменной x . Сначала зададим параметр σ_1 :

$$\sigma_1 = \min \left\{ \frac{1}{2}, -\frac{2\varepsilon}{\alpha} \ln \varepsilon \right\}, \quad \varepsilon \leq e^{-1}. \quad (2)$$

При $\varepsilon > e^{-1}$ зададим $\sigma_1 = 1/2$.

При $\sigma_1 = 1/2$ зададим сетку Ω^h равномерной по x с шагами $h_i = 1/N$.

При $\sigma_1 < 1/2$ сетку зададим неравномерной на интервале $[0, \sigma_1]$:

$$x_i = -\frac{2\varepsilon}{\alpha} \ln \left[1 - 2(1 - \varepsilon)i/N \right], \quad i = 0, 1, \dots, N/2, \quad (3)$$

и равномерной на интервале $[\sigma_1, 1]$:

$$x_i = \sigma_1 + (2i/N - 1)(1 - \sigma_1), \quad N/2 \leq i \leq N. \quad (4)$$

Аналогично зададим шаги сетки по переменной y . Зададим σ_2 , узлы y_j и шаги сетки:

$$\sigma_2 = \min \left\{ \frac{1}{2}, -\frac{2\varepsilon}{\beta} \ln \varepsilon \right\}, \quad \varepsilon \leq e^{-1}. \quad (5)$$

При $\varepsilon > e^{-1}$ зададим $\sigma_2 = 1/2$. При $\sigma_2 = 1/2$ сетку Ω^h зададим равномерной по y с шагами $k_j = 1/N$. При $\sigma_2 < 1/2$ зададим сетку следующим образом:

$$y_j = -\frac{2\varepsilon}{\beta} \ln \left[1 - 2(1 - \varepsilon)j/N \right], \quad j = 0, 1, \dots, N/2, \quad (6)$$

$$y_j = \sigma_2 + (2j/N - 1)(1 - \sigma_2), \quad N/2 \leq j \leq N. \quad (7)$$

На заданной сетке Ω^h выпишем схему направленных разностей [8]:

$$\begin{aligned} L_{i,j}^h u^h &= \frac{2\varepsilon}{h_i + h_{i+1}} \left[\frac{u_{i+1,j}^h - u_{i,j}^h}{h_{i+1}} - \frac{u_{i,j}^h - u_{i-1,j}^h}{h_i} \right] + \\ &+ \frac{2\varepsilon}{k_j + k_{j+1}} \left[\frac{u_{i,j+1}^h - u_{i,j}^h}{k_{j+1}} - \frac{u_{i,j}^h - u_{i,j-1}^h}{k_j} \right] + \\ &+ a(x_i) \frac{u_{i+1,j}^h - u_{i,j}^h}{h_{i+1}} + b(y_j) \frac{u_{i,j+1}^h - u_{i,j}^h}{k_{j+1}} - c(x_i, y_j) u_{i,j}^h = f(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Omega, \\ &u_{i,j}^h = g(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Gamma. \end{aligned} \quad (8)$$

В [9] для схемы (8) на сетке (2)–(7) для некоторой постоянной C получена оценка погрешности, равномерная по параметру ε :

$$\max_{i,j} |u(x_i, y_j) - u_{i,j}^h| \leq \frac{C}{N}. \quad (9)$$

Целью работы является разработка двухсеточного алгоритма для реализации схемы (8).

2. Разработка двухсеточного алгоритма

2.1. Реализация разностной схемы методом Зейделя

Схему (8) можно записать как пятиточечную и для её реализации применить итерационный метод Зейделя:

$$\begin{aligned} A_{i,j} u_{i-1,j}^{(m+1)} + B_{i,j} u_{i,j-1}^{(m+1)} + C_{i,j} u_{i+1,j}^{(m+1)} + D_{i,j} u_{i,j+1}^{(m)} - E_{i,j} u_{i,j}^{(m+1)} &= F_{i,j}, \quad 1 \leq i, j < N, \\ u_{i,j}^{(m+1)} &= g(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Gamma_h, \end{aligned} \quad (10)$$

где $F_{i,j} = f(x_i, y_j)$, m – номер итерации, $u_{i,j}^{(0)}$ – начальное приближение для итераций.

Матрица схемы (8) обладает диагональным преобладанием, поэтому итерационный метод Зейделя для нахождения решения схемы является сходящимся [10].

Для метода Зейделя известна оценка сходимости итераций [10]:

$$\|u^{(m+1)} - u^h\|_h \leq q_h \|u^{(m)} - u^h\|_h, \quad q_h < 1. \quad (11)$$

Для оператора разностной схемы (8) справедлива оценка устойчивости [8]:

$$\max_{i,j} |u_{i,j}^{(m_h)} - u_{i,j}^h| \leq \frac{1}{\alpha} \max_{i,j} |L_{i,j}^h u^{(m_h)} - f(x_i, y_j)|. \quad (12)$$

Итерации (10) продолжаем, пока не выполнится условие:

$$\max_{i,j} |L_{i,j}^h u^{(m_h)} - f(x_i, y_j)| \leq \frac{\alpha}{N}. \quad (13)$$

При выполнении оценки (13) в силу оценки (12) имеем:

$$\max_{i,j} |u_{i,j}^{(m_h)} - u_{i,j}^h| \leq \frac{1}{N}. \quad (14)$$

Оценка (14) согласуется с оценкой (9) для погрешности разностной схемы (8) при применении итерационного метода.

Известно, что для реализации прогонки требуется выполнить dN арифметических действий, где $d < 10$. При анализе двухсеточного метода рассмотрим общий случай, когда

$$\delta_h = \|u^{(0)} - u^h\|_h, \|u^h - [u]_{\Omega^h}\|_h \leq C\Delta_h. \quad (15)$$

Учитывая (11), (15), получаем, что для выполнения условия

$$\max_{i,j} |u(x_i, y_j) - u_{i,j}^{(m_h)}| \leq C\Delta_h$$

потребуется

$$N_h \approx dN^2 \log_{q_h} \left(\frac{\Delta_h}{\delta_h} \right) \quad (16)$$

арифметических действий.

Итак, задана реализация разностной схемы на основе метода Зейделя.

При реализации разностной схемы двухсеточным алгоритмом потребуется интерполяция сеточного решения с редкой сетки на густую. Проведём анализ формулы двумерной интерполяции на сетке Бахвалова.

2.2. Двумерная интерполяция на сетке Бахвалова

Пусть $K_{i,j} = [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$ – произвольная ячейка сетки Ω^h . Зададим полиномиальную интерполяцию для этой ячейки следующим образом:

$$\begin{aligned} I(u, x, y) = & \left(u_{i+1,j+1} - u_{i,j+1} - u_{i+1,j} + u_{i,j} \right) \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \times \frac{y - y_j}{y_{j+1} - y_j} + \\ & + \left(u_{i,j+1} - u_{i,j} \right) \frac{y - y_j}{y_{j+1} - y_j} + \left(u_{i+1,j} - u_{i,j} \right) \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} + u_{i,j}, \quad u_{i,j} = u(x_i, y_j). \end{aligned} \quad (17)$$

Оценим погрешность интреполяционной формулы (17).

Лемма 1. В случае сетки Бахвалова Ω^h для некоторой постоянной C справедлива оценка погрешности

$$|I(u, x, y) - u(x, y)| \leq \frac{C}{N^2}, \quad (x, y) \in K_{i,j}. \quad (18)$$

Доказательство. Представим $I(u, x, y)$ в виде

$$I(u, x, y) = I_y(I_x(u, x, y), x, y). \quad (19)$$

Здесь $I_x(u, x, y)$ – формула линейной интерполяции по x при фиксированном значении y ,

$$I_x(u, x, y) = u_{i,j} + (u_{i+1,j} - u_{i,j}) \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad x_i \leq x \leq x_{i+1}.$$

Аналогично определяется $I_y(u, x, y)$:

$$I_y(u, x, y) = u_{i,j} + (u_{i,j+1} - u_{i,j}) \frac{y - y_j}{y_{j+1} - y_j}, \quad y_j \leq y \leq y_{j+1}.$$

Из (19) следует

$$|I(u, x, y) - u(x, y)| \leq |I_y(I_x(u, x, y) - u(x, y), x, y)| + |I_y(u, x, y) - u(x, y)|. \quad (20)$$

В [11] получена оценка погрешности для одномерной формулы линейной интерполяции на сетке Бахвалова:

$$|I_y(u, x, y) - u(x, y)| \leq \frac{C_1}{N^2}, \quad (x, y) \in K_{i,j}, \quad (21)$$

где C_1 – некоторая постоянная. Аналогичная оценка верна для интерполянта $I_x(u, x, y)$. Несложно показать, что интерполянт $I_y(u, x, y)$ удовлетворяет оценке устойчивости:

$$|I_y(u, x, y) - I_y(\tilde{u}, x, y)| \leq 3 \max |u(x, y) - \tilde{u}(x, y)|. \quad (22)$$

Учитывая оценки (21), (22), из (20) получаем оценку (18) на сетке Бахвалова. ■

2.3. Применение двухсеточного метода

Исследуем двухсеточный метод для сокращения числа арифметических действий при нахождении решения разностной схемы.

Перейдём к заданию двухсеточного метода. Введём сетку Ω^H , такую же по структуре, как сетка Ω^h , с намного меньшим количеством узлов n , $n \ll N$.

Сначала с применением итерационного метода (10) решаем задачу (1) на сетке Ω^H . По аналогии с (15) справедлива оценка

$$\|u^H - [u]_{\Omega^H}\|_H \leq C \Delta_H. \quad (23)$$

Итерации на сетке Ω^H продолжаем, пока не выполнится условие

$$\|L^H u^{(m_H)} - f^H\|_H \leq \alpha \Delta_H.$$

Учитывая (12), получаем

$$\|u^{(m_H)} - u^H\|_H \leq \Delta_H.$$

Эта оценка соответствует оценке погрешности (23) для разностной схемы. Далее необходимо сеточное решение $u^{(m_H)}$, найденное в узлах сетки Ω^H , проинтерполировать в узлы исходной сетки Ω^h .

В соответствии с оценкой (18) применение интерполяции (17) не снижает точности найденного решения на грубой сетке, поэтому интерполяционную формулу (17) можно использовать в двухсеточном методе.

Таким образом, решение разностной схемы на сетке Ω^h находится с погрешностью порядка $O(\Delta_H)$ и принимается за начальное приближение для итераций на густой сетке.

Оценим выигрыш в числе арифметических действий при применении двухсеточного метода. Пусть N_{Hh} – число арифметических действий при применении двухсеточного метода. Учитывая оценку (11), по аналогии с получением оценки (16) имеем

$$N_{Hh} \approx d n^2 \log_{q_H} \left(\frac{\Delta_H}{\delta_H} \right) + I_H + d N^2 \log_{q_h} \left(\frac{\Delta_h}{\Delta_H} \right), \quad (24)$$

где I_H – необходимое число арифметических действий для интерполяции, $\delta_H = \|u^{(0)} - u^H\|_H$.

Используя (16), (24), получаем выигрыш в числе арифметических действий при применении двухсеточного метода:

$$N_h - N_{Hh} \geq d (N^2 - n^2) \log_{q_H} \left(\frac{\Delta_H}{\delta_H} \right) - I_H. \quad (25)$$

2.4. Экстраполяция Ричардсона

Зная решение разностной схемы на сетках Ω^h и Ω^H , можно повысить точность разностной схемы на основе метода Ричардсона. Выделяя главный член погрешности, в узлах сетки Ω^H для некоторой постоянной C имеем

$$u(x_{i,j}) = u_{i,j}^h + C \Delta_h + o(\Delta_h), \quad u(x_{i,j}) = u_{i,j}^H + C \Delta_H + o(\Delta_H).$$

На основе этих соотношений, пренебрегая величинами $o(\Delta_h)$, $o(\Delta_H)$, находим решение разностной схемы в узлах сетки Ω^H с повышенной точностью:

$$u_{i,j}^{Hh} = u_{i,j}^H + \frac{u_{i,j}^H - u_{i,j}^h}{\Delta_h - \Delta_H} \Delta_H, \quad (26)$$

при этом выполняется соотношение

$$u(x_i, y_j) = u_{i,j}^{Hh} + o(\Delta_H).$$

Для разностной схемы (8) с учётом оценки (9) из (26) получаем

$$u_{i,j}^{Hh} = \frac{N}{N-n} u_{i,j}^h - \frac{n}{N-n} u_{i,j}^H, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, n, \quad (27)$$

при этом справедлива оценка погрешности

$$|u(x_i, y_j) - u_{i,j}^{Hh}| \leq \frac{C}{n^2}, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (28)$$

Из (28) следует, что при $n = N/2$ применение метода Ричардсона приводит к повышению точности разностной схемы, при этом погрешность становится порядка $O(1/N^2)$.

В соответствии с Леммой 1, без потери точности можно проинтерполировать полученное решение $u_{i,j}^{Hh}$ с сетки Ω^H на сетку Ω^h по формуле (17).

3. Численные эксперименты

Рассмотрим задачу

$$\begin{aligned} \varepsilon u_{xx} + \varepsilon u_{yy} + u_x + 2u_y - u &= f(x, y), & (x, y) \in \Omega, \\ u(x, y) &= g(x, y), & (x, y) \in \Gamma, \end{aligned} \quad (29)$$

где $f(x, y), g(x, y)$ соответствуют решению

$$u(x, y) = (1 - e^{-x/\varepsilon}) (1 - e^{-2y/\varepsilon}) + \cos \frac{\pi x}{2} e^y. \quad (30)$$

Остановимся на односеточном методе и применим схему (8) на сетке Бахвалова. В табл. 1 для различных значений ε приведены максимальная погрешность $\Delta_{N,\varepsilon} = \max_{i,j} |u_{i,j}^h - u(x_i, y_j)|$, вычисленный порядок точности $M_{N,\varepsilon} = \log_2(\Delta_{N,\varepsilon}/\Delta_{2N,\varepsilon})$ и число итераций при реализации схемы (8) на сетке Бахвалова. В таблицах $ae - m$ обозначает $a \cdot 10^{-m}$.

Рассмотрим два подхода для реализации метода Зейделя: прямой ход, когда в (10) индексы i, j возрастают, и расчёт в сторону пограничного слоя (обратный ход), когда индексы i, j убывают. В дополнение рассмотрим подход, когда в итерационном методе при каждом j схема записывается как трёхточечная по i и реализуется методом прогонки.

В табл. 2 приведены результаты сравнения итерационных методов для нахождения решения схемы (8) при $\varepsilon = 10^{-1}$, $n = N/2$. Для различных вариантов реализации итерационного метода приведено число итераций односеточного и двухсеточного методов. Перед скобками – число итераций на сетке Ω^H , в скобках – на сетке Ω^h . Как по числу итераций, так и по времени вычислений более экономичен метод с применением прогонки при заданном j .

В табл. 3 при $\varepsilon = 10^{-2}$ в зависимости от n и N приведено число итераций метода Зейделя (обратный ход). Для сравнения приведено число итераций односеточного метода. Наибольший выигрыш в числе арифметических действий от применения двухсеточного метода достигается при $n = N/2$.

В табл. 4 для заданных n и N приведены максимальная погрешность схемы (8) и максимальная погрешность при применении метода Ричардсона (ниже) на сетке Ω^h . Метод Ричардсона даёт выше точность при $n = N/2$.

Таблица 1. Погрешность, порядок точности схемы (8) и число итераций на сетке Бахвалова

ε	N			
	16	32	64	128
1	3.54e-3 0.77 220	2.07e-3 0.89 930	1.12e-3 0.94 3939	0.55e-3 –
10^{-1}	1.05e-1 0.79 107	6.07e-2 0.89 378	3.28e-2 0.94 1420	1.71e-2 0.98 5592
10^{-2}	1.62e-1 0.82 120	9.17e-2 0.93 402	4.82e-2 0.97 1450	2.46e-2 0.98 5553
10^{-3}	1.81e-1 0.83 141	1.01e-1 0.94 463	5.28e-2 0.99 1636	2.66e-2 0.99 6196

Таблица 2. Сравнение итерационных методов

Метод	N, число итераций		
	16	32	64
Зейделя прямой	110	383	1410
	31 (81)	110 (279)	383 (1006)
Зейделя обратный	88	338	1322
	21 (66)	88 (251)	338 (952)
Применение прогонки	88	310	1151
	24 (65)	88 (224)	310 (804)

Заключение

Проведён анализ двухсеточного алгоритма для численного решения эллиптической сингулярно возмущённой задачи. Исследовано применение в двухсеточном алгоритме схемы направленных разностей на сетке Бахвалова. Проведено численное сравнение аналогов метода Зейделя для реализации разностной схемы. Показано, что число арифметических действий сокращается при применении двухсеточного метода. Повышена точность разностной схемы на основе применения метода экс-

Таблица 3. Число итераций на сетке Бахвалова, $\varepsilon = 10^{-2}$

n	N			
	16	32	64	128
4	2(72)	2(288)	2(1147)	2(4653)
8	21(66)	21(273)	21(1102)	21(4492)
16		88(251)	88(1041)	88(4288)
32			338(952)	338(4032)
64				1322(3679)
односеточный метод	88	338	1322	5295

Таблица 4. Погрешность разностной схемы без применения метода Рундсона и с применением (ниже), $\varepsilon = 10^{-2}$

n	N			
	16	32	64	128
4	$1.72e - 1$	$9.46e - 2$	$4.90e - 2$	$2.48e - 2$
	$1.10e - 1$	$5.96e - 2$	$3.06e - 2$	$1.54e - 2$
8	$1.72e - 1$	$9.46e - 2$	$4.90e - 2$	$2.48e - 2$
	$1.06e - 1$	$5.14e - 2$	$2.59e - 2$	$1.29e - 2$
16		$9.46e - 2$	$4.90e - 2$	$2.48e - 2$
		$5.02e - 2$	$2.23e - 2$	$1.11e - 2$
32			$4.90e - 2$	$2.48e - 2$
			$2.09e - 2$	$8.75e - 3$
64				$2.48e - 2$
				$7.43e - 3$

траполяции Рундсона.

Литература

1. Бахвалов Н.С. К оптимизации методов решения краевых задач при наличии пограничного слоя // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1969. Т. 9, № 4. С. 841–890.
2. Шишкин Г.И. Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург: УрО РАН, 1992.

3. Miller J.J.H., O’Riordan E., Shishkin G.I. Fitted numerical methods for singular perturbation problems. Singapore, World Scientific, 1996.
4. Vulkov L.G., Zadorin A.I. Two-grid Interpolation Algorithms for Difference Schemes of Exponential Type for Semilinear Diffusion Convection-Dominated Equations // American Institute of Physics Conference Proceedings. 2008. Vol. 1067. P. 284–292.
5. Vulkov L.G., Zadorin A.I. Two-Grid Algorithms for an ordinary second order equation with exponential boundary layer in the solution // International Journal of Numerical Analysis and Modeling. 2010. Vol. 7, No. 3. P. 580–592.
6. Zadorin A.I., Tikhovskaya S.V., Zadorin N.A. A two-grid method for elliptic problem with boundary layers // Applied Numerical Mathematics. 2015. Vol. 93. P. 270–278.
7. Roos H.G. Layer-adapted meshes: milestones in 50 years of history // Applied mathematics. 2019. arXiv:1909.08273v1.
8. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука. Гл.ред.физ.-мат.лит., 1977. 656 с.
9. Nhan T. A., Vulcanovic R. The Bakhvalov mesh: a complete finite-difference analysis of two-dimensional singularly perturbed convection-diffusion problems // Numerical Algorithms. 2020. Vol. 87. P. 203–221.
10. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука. Гл.ред.физ.-мат.лит., 1975. 632 с.
11. Блатов И.А., Задорин Н.А. Интерполяция на сетке Бахвалова при наличии экспоненциального пограничного слоя // Учёные записки Казанского университета. Физико-математические науки. 2019. Т. 161, №. 4. С. 497–508.

TWO GRID METHOD ON THE BAKHVALOV GRID FOR AN ELLIPTIC SINGULARLY PERTURBED PROBLEM

A.I. Zadorin

Dr.Sc. (Phys.-Math.), Professor, e-mail: zadorin@ofim.oscbras.ru

S.B. Shagaev

Postgraduate Student, e-mail: ssairan@yandex.ru

Sobolev Institute of Mathematics, Novosibirsk, Russia

Abstract. A two-grid method for the numerical solution of a singularly perturbed elliptic problem using Bakhvalov-type mesh is studied. A scheme of upwind differences is used, which has the property of convergence on the grid, which is uniform in a small parameter. The Seidel iterative method is used to find the scheme solution. Previously, the use of the two-grid method leads to a reduction in computational costs. In addition, it is shown that based on the Richardson extrapolation method, it is possible to improve the accuracy of the difference scheme.

Keywords: elliptic equation, boundary layer, difference scheme, two-grid method, Bakhvalov mesh, Richardson extrapolation.

Дата поступления в редакцию: 17.06.2024

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫМ МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУХ ВРАЩАЮЩИХСЯ ЦИЛИНДРОВ ПРИ ПРОТЕКАНИИ ПЛЕНКИ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ

А.В. Паничкин¹

д.т.н., ведущий научный сотрудник, e-mail: panich@ofim.oscsbras.ru

Л.Г. Варепо²

д.т.н., профессор, e-mail: larisavarepo@yandex.ru

¹Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

²Омский государственный технический университет, Омск, Россия

Аннотация. Для моделирования течения ограниченного объёма жидкости между вращающимися цилиндрами со свободными границами и соприкосновении с твёрдыми поверхностями цилиндров разработан численный алгоритм. Основная особенность этого алгоритма заключается в возможности учёта таких основных характеристик вязкой несжимаемой жидкости, как поверхностное натяжение, адгезия с твёрдыми поверхностями. Проведён ряд тестовых расчётов с определением асимптотических параметров сходимости от шагов по времени и по пространственным координатам. Представлены результаты численного моделирования с определением границ течения жидкости и с изображениями функции тока, получены на сетках 80×80 , 160×160 при различных числах Re .

Ключевые слова: моделирование, уравнения гидродинамики, вязкая несжимаемая жидкость, динамические характеристики.

Введение

Разработки различных подходов к моделированию течений вязкой несжимаемой жидкости в сложных областях с применением конечно-разностных методов ведутся как в РФ, так и за рубежом [1–3]. Для повышения точности расчётов при согласовании локальных направлений потоков с направлениями узловых линий требуются значительные вычисления по построению расчётных сеток. Разработаны различные подходы построения адаптивных сеток при наличии в решениях зон с сингулярностью или наличием больших градиентов, что отображает их индивидуальность. В работах [4–10] рассмотрена возможность экономии ресурсов с использованием регулярных сеток при подвижных границах (твёрдых и свободных) вязкой жидкости в процессе моделирования движения между вращающимися цилиндрами ограниченного объёма жидкости со свободными границами и с соприкосновением

с твёрдыми поверхностями цилиндров. В основе разработанного численного алгоритма положено перемещение граничных узлов по узловым линиям, что позволяет учитывать основные характеристики вязкой несжимаемой жидкости.

1. Постановка задач

Ставится задача симуляции течения вязкой несжимаемой жидкости между двумя цилиндрами с одинаковыми радиусами R и параллельными осями. Цилиндры вращаются с постоянными угловыми скоростями ω в противоположных направлениях и находятся на расстоянии δ , меньшем толщины δ_S жидкости, занимающей в начальный момент времени $t = 0$ область Ω на цилиндре 1 с её центром, обозначенным как O_1 .

Рассмотрим постановку задачи в неподвижной полярной системе координат (r, φ) , связанной с центром O_1 цилиндра 1, считая течения жидкости подобными вдоль осей цилиндров. В координатах (r, φ) с вектором скорости (V_r, V_φ) уравнения Навье – Стокса для вязкой несжимаемой жидкости с кинематической вязкостью ν и плотностью ρ имеют вид [4]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_r}{\partial t} + V_r \frac{V_\varphi}{R} \frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - \frac{(V_\varphi)^2}{r} &= -\frac{1}{\rho} + \nu \left(\nabla^2 V_r - \frac{V_r}{r^2} - \frac{2R}{r^2} \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi} \right), \\ \frac{\partial V_r}{\partial t} + V_r \frac{V_\varphi}{R} + \frac{V_\varphi R}{r} \frac{\partial V_{r\varphi}}{\partial r} + \frac{V_r V_\varphi}{r} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \varphi R} + \nu \left(\nabla^2 V_\varphi - \frac{V_{r\varphi}}{r^2} - \frac{2R}{r^2} \frac{\partial V_r}{\partial \varphi} \right), \\ \frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{V_r}{r} + \frac{R}{r} \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi R} &= 0, \\ \nabla^2 V &= \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{R^2}{r^2} \frac{\partial^2 V}{(\partial \varphi R)^2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Сделаем переход к сопутствующей системе координат (r, θ) , связанной с цилиндром 1 и вращающейся с постоянной угловой скоростью ω в положительном направлении $\theta = \varphi + \omega t$ за счёт преобразования компонентов скоростей (V_r, V_φ) в вектор (U_r, U_θ) , а вектора ускорения жидкости с угловой скоростью ω и угловым ускорением ε с тем же началом координат в точке O_1 в вид $\left(\frac{dV_r}{dt}, \frac{dV_\varphi}{dt} \right) = \left(\frac{dU_r}{dt}, \frac{dU_\theta}{dt} \right) + (0, \varepsilon r) + (-2\omega U_\theta, 2\omega U_r)$. Градиент давления изменится на величину $(-\omega^2 r, 0)$.

После преобразований к системе координат (r, θ) уравнения (1) примут вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_r}{\partial t} + U_r \frac{\partial U_r}{\partial r} - \frac{U_\theta R}{r} \frac{\partial U_r}{\partial \theta R} - \frac{(U_\theta + \omega r)^2}{r} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} + \nu \left(\nabla^2 V_r - \frac{U_r}{r^2} - \frac{2R}{r^2} \frac{\partial U_\varphi}{\partial \varphi R} \right), \\ \frac{\partial U_\theta}{\partial t} + U_r \frac{\partial U_\theta}{\partial r} + \frac{U_\theta R}{r} \frac{\partial U_\theta}{\partial \theta R} + \frac{U_r U_\theta}{r} + 2U_r \omega + \varepsilon r &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} + \nu \left(\nabla^2 V_r - \frac{U_r}{r^2} - \frac{2R}{r^2} \frac{\partial U_\varphi}{\partial \varphi R} \right), \\ \nabla^2 U &= \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{R^2}{r^2} \frac{\partial^2 U}{(\partial \theta R)^2}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\partial U_r}{\partial r} + \frac{U_r}{r} + \frac{R}{r} \frac{\partial U_\theta}{\partial \theta R} = 0, \quad (3)$$

Полагаем, что $U_r(t, r, \theta) = 0$, $U_\theta(t, r, \theta) = 0$, жидкость в начальный момент времени $t = 0$ определена в области Ω длиной по окружности δL , толщиной δS и координатами (r, θ) в сопутствующей системе координат в пределах $r \in [R, R + \delta_s]$, $\theta \in \left[\frac{-\delta_L}{(2R)}, \frac{\delta_L}{(2R)} \right]$.

Допускаем, что в начальный момент времени точка $(R + \delta_s, \frac{\delta_L}{2R})$ является точкой соприкосновения с цилиндром 2. Скорость будет определяться из условия движения твёрдой границы цилиндра 2, а безразмерные величины можно определить в виде: $Re = V_0 \frac{\delta_L}{\nu}$, $Eu = \frac{P_a}{\rho V_0^2} = P_0$, где $V_0 = \omega \delta_L$ – характерная скорость, $P_a = 105 \text{ Н/м}^2$ – атмосферное давление, ρ и ν – плотность и кинематическая вязкость жидкости.

Если пренебречь внешним воздействием, на свободных границах жидкости для градиента давления по нормали n к границе можно положить, что $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$.

При рассмотрении координат центра цилиндра 1 (x_c, y_c) и исходной точки (x_m, y_m) в системе координат Oxy , или $(r, \theta) = (r, \varphi_{m1})$, при радиусах цилиндров $r_1 = r_2 = R$ на основе углов φ_1, φ_2 , обозначающих положение центра цилиндра 2 и точки на его окружности с начальными значениями φ_0 и φ_{m0} , определяются следующие величины для компонент скоростей и координат:

$$U_\theta = V_x \cos \varphi_{m1} + V_y \sin \varphi_{m1}, U_r = V_x \sin \varphi_{m1} - V_y \cos \varphi_{m1}, \quad (4)$$

$$x_m = x_c + (2R + \delta) \sin(\varphi_1) + r_2(\varphi_2),$$

$$y_m = y_c - (2R + \delta) \cos(\varphi_1) + r_2 \cos(\varphi_2),$$

$$V_x = (2R + \delta) \omega \cos(\varphi_1) + 2\omega r_2 \cos(\varphi_2),$$

$$V_y = (2R + \delta) \omega \sin(\varphi_1) - 2\omega r_2 \sin(\varphi_2),$$

$$\varphi_1 = \varphi_0 - \omega t, \varphi_2 = \varphi_{m0} - 2\omega t.$$

Расположение точек поверхности цилиндра 2 (ψ_1, r) в рассматриваемой системе координат (r, θ) определяются по углу дуги на нём $\psi_2 = \varphi_2 - \varphi_1$ при расстоянии между центрами цилиндров $(2R + \delta)$ из выражений:

$$r = R \sqrt{5 + \frac{4\delta}{R} + \frac{\delta^2}{R^2} - 2(2 + \frac{\delta}{R}) \cos \psi_2}, \quad (5)$$

$$\psi_1 = \arcsin \left(\frac{\sin \psi_2}{\sqrt{5 + \frac{4\delta}{R} + \frac{\delta^2}{R^2} - 2(2 + \frac{\delta}{R}) \cos \psi_2}} \right). \quad (6)$$

Для точки (x_m, y_m) на окружности значение угла в системе координат (r, θ) $\varphi_{m1} = \varphi_1 - \psi_1$.

Для непроницаемости жидких границ, описываемых функцией $f(t, r, \theta)$, необходимо выполнение кинематического условия:

$$f_t + f_r U_r + f_\theta U_\theta = 0. \quad (7)$$

При этом поверхностное натяжение определяется на основе радиуса кривизны r_{cr} для $f(t, r, \theta)$ и коэффициента поверхностного натяжения жидкости n в виде C_n/r_{cr} . Давление на свободных границах с внешней нормалью n к границе будет определяться из формулы Лапласа:

$$P = P_{атм} - r_{cr} n C_n / r_{cr}^2. \quad (8)$$

Другие условия, как компоненты скорости на всех границах по времени и градиенты давления на твёрдых границах, основанные на уравнениях (1) и (2), были рассмотрены в работе [5].

Преобразование полярной системы координат (r, θ) в полярную систему координат $(x, y) = (R_\theta, R - r)$ с вектором скорости $V = (u, \nu) = (U_\theta, -U_r)$ и уравнениями (1), (2), (3) необходимо для численного моделирования:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \nu \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{uR}{R-y} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{u\nu}{R-y} - 2\nu\omega = \\ = -\frac{1}{\rho} \frac{R}{R-y} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \left(\nabla^2 u - \frac{u}{(R-y)^2} - \frac{2R}{(R-y)^2} \frac{\partial \nu}{\partial x} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \nu}{\partial t} + \nu \frac{\partial \nu}{\partial y} + \frac{uR}{R-y} \frac{\partial \nu}{\partial x} + \frac{(u + \omega(R-y))^2}{R-y} = \\ = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \left(\nabla^2 \nu - \frac{\nu}{(R-y)^2} - \frac{2R}{(R-y)^2} \frac{\partial u}{\partial x} \right), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\frac{\partial \nu}{\partial y} - \frac{\nu}{R-y} + \frac{R}{R-y} \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (11)$$

где

$$\nabla^2 V = -\frac{1}{R-y} \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{R^2}{(R-y)^2} \frac{\partial^2 V}{(\partial x)^2}.$$

Использование в численном алгоритме конечно-разностного аналога уравнения (11) в эволюционной форме и схемы стабилизирующей поправки [11] необходимо для расчёта давления и конвективно-диффузионных членов в уравнениях (9) и (10).

2. Расчёт свободной границы жидкости

Для проведения расчётов течения вязкой жидкости с учётом движения свободных границ в двухмерных областях рассмотрена регулярная сетка с шагами по двум пространственным направлениям h_x и h_y , с выделением дополнительных узлов на узловых линиях между внутренними и внешними узлами. Эти узлы, представляющие геометрическую линию функции границы (7) в дискретном виде, отслеживают положение этих границ по времени.

Повышение разрешимости границ и точности их перемещения, что требуется при вычислениях поверхностных натяжений на свободных границах движущейся

жидкости, возможно за счёт перерасчёта движения дополнительных узлов, отслеживающих положение границ и расположенных на узловых линиях. Для определения границы, например, около узла «02» с дальнейшим перерасчётом за время τ по оси x строится интерполяция по трём соседним граничным узлам «36», «02» и «04» (рис. 1) с соответствующими координатами (x_1, y_1) , (x_2, y_2) и (x_3, y_3) в виде

$$x = x_2 + (y - y_2) \left(\frac{x_3 - x_1}{y_3 - y_1} \right) + \frac{(y - y_2)^2}{y_3 - y_1} \left(\frac{x_3 - x_2}{y_3 - y_2} - \frac{x_2 - x_1}{y_2 - y_1} \right). \quad (12)$$

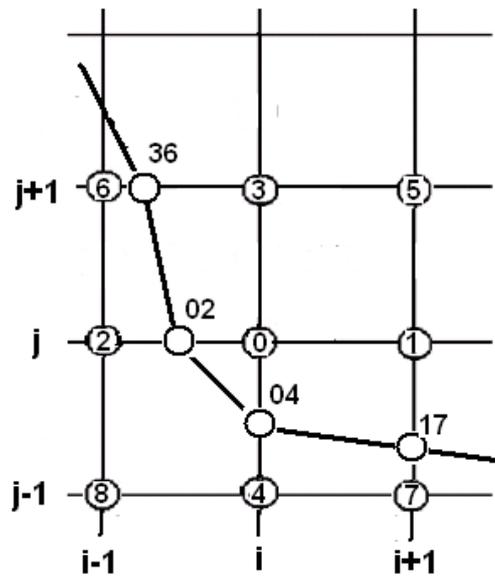


Рис. 1. Пример сеточного шаблона подвижной границы жидкости

Аналогичные действия будут при построении интерполяции по граничным узлам «02», «04» и «17» около узла «04» для определения перемещений по оси y .

Указанные интерполяции являются приближениями к граничной функции $f(t, r, \theta)$ для условия (7) в полярных координатах как отдельные функции свободной границы $f_1(t, x, y)$ и $f_2(t, x, y)$.

Принимая допущение, с течением времени τ рассматриваемые узлы переместятся $\tau u_{i,j}$ и $\tau v_{i,j}$ по x и y и примут значения, определяем у дополнительного узла «02» следующие координаты (\bar{x}_2, \bar{y}_2) с перемещением на величину δx по оси x :

$$\delta x = \tau u_{i,j} + \tau v_{i,j} \left(\frac{x'_3 - x'_1}{y'_3 - y'_1} \right) + \frac{(\tau v_{i,j})^2}{y'_3 - y'_1} \left(\frac{x'_3 - x'_2}{y'_3 - y'_2} - \frac{x'_2 - x'_1}{y'_2 - y'_1} \right), \bar{x}_2 = x_2 + \delta x. \quad (13)$$

Для дополнительного узла «04», расположенного на узловой линии по оси y , новыми координатами станут (x_2, \bar{y}_2) с перемещением на величину δy по оси y :

$$\delta y = \tau \nu_{i,j} + \tau u_{i,j} \left(\frac{y'_3 - y'_1}{x'_3 - x'_1} \right) + \frac{(\tau u_{i,j})^2}{x'_3 - x'_1} \left(\frac{y'_3 - y'_2}{x'_3 - x'_2} - \frac{y'_2 - y'_1}{x'_2 - x'_1} \right), \bar{y}_2 = y_2 + \delta y. \quad (14)$$

Примечание: при направлениях вектора скорости к узловым линиям под углом 45 градусов и при отсутствии учёта кривизны границы (вторые и третьи слагаемые в правых частях формул (13) и (14)) имеет место высокая погрешность моделирования течений жидкости со свободными границами.

3. Результаты и обсуждение

Проведено моделирование протекания вязкой несжимаемой жидкости между вращающимися цилиндрами, как представлено в постановке исходной задачи, с применением расчётного алгоритма с конечно-разностными схемами на регулярных сетках и метода расчёта подвижных границ. На основе уравнений (9)–(11) был проведён ряд тестовых расчётов с определением асимптотических параметров сходимости от шагов по времени и по пространственным координатам.

В расчётах были рассмотрены числа Рейнольдса от 1 до 100 на различных регулярных сетках с количеством узлов N_x и N_y по x и y , равными 40, 80, 160, с итерационным шагом τ от $0.3 \cdot 10^{-8}$ с до $0.2 \cdot 10^{-7}$ с.

Вся расчётная область имела координаты по x от -0.008 м до 0.008 м и по y от -0.0049 м до 0.0001 м и включала начальную область жидкости Ω с размерами $\delta L = 0.008$ м и $\delta S = 0.004$ м.

Другие параметры имели следующие значения: радиусы цилиндров r_1 и r_2 равнялись 0.05 м, угловая скорость $\omega = 100$ рад/с, расстояние между поверхностями цилиндров $\delta = 0.001$ м, коэффициент для расчёта давления ε_P от $0.2 \cdot 10^{-7}$ до $0.2 \cdot 10^{-5}$, коэффициент поверхностного натяжения $C_n = 0.03$ Н/м, жидкость с плотностью $\rho = 800$ кг/м³ и вязкостью ν от $0.32 \cdot 10^{-4}$ м²/с до $0.32 \cdot 10^{-2}$ м²/с (для соответствия числам Re от 100 до 1). Для числа Рейнольдса $Re = U\delta_S/\nu$ бралась характерная скорость на краю области жидкости в виде скорости схождения поверхностей двух $U = 2\omega\delta_L/2 = 0.8$ м/с при условии, что $r_1 = r_2 \gg \delta_L$, а характерным размером области бралась начальная толщина жидкости $\delta_S = 0.004$ м.

Для графического представления результатов расчётов проводилось определение функций тока из уравнений

$$\frac{R-y}{R} \frac{\delta\psi}{\delta y} = u, \frac{\delta\psi}{\delta x} = -v. \quad (15)$$

Расчёт функций тока проводился с помощью интегрирования в расчётной области уравнений с точностью $O(h_x^2 + h_y^2)$ при значении функции тока на верхней границе $\psi = 0$.

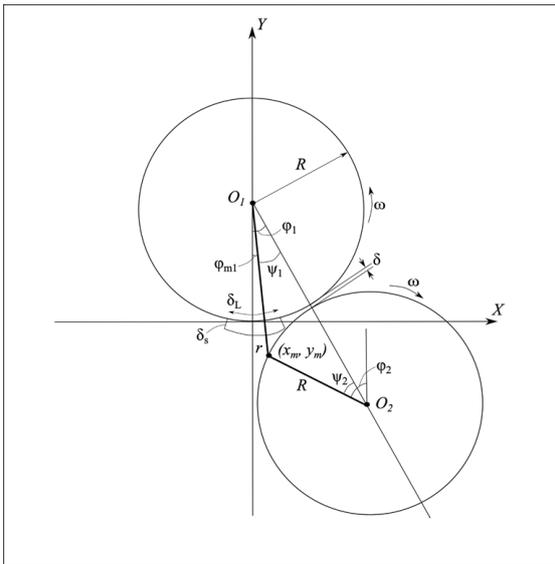


Рис. 2. Начальное расположение жидкости и вращающихся цилиндров

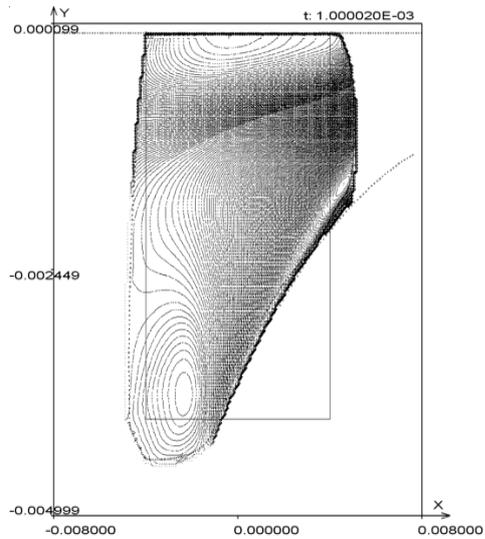


Рис. 3. Расчёт при $t = 0.1 \cdot 10^{-2}$, $Re = 1$, 160×160 , $S = 0.32 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$, $R_1 = R_2 = 0.05 \text{ м}$, $\omega = 100 \text{ рад/с}$, $\tau_3 = 0.2 \cdot 10^{-7}$, $\psi_3 = -0.898 \dots 0.292$, $\Delta\psi_{23} = 0.048$, $S_3 = 0.322 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$, $\Delta S_3 = 0.002 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$ (0.6 %)

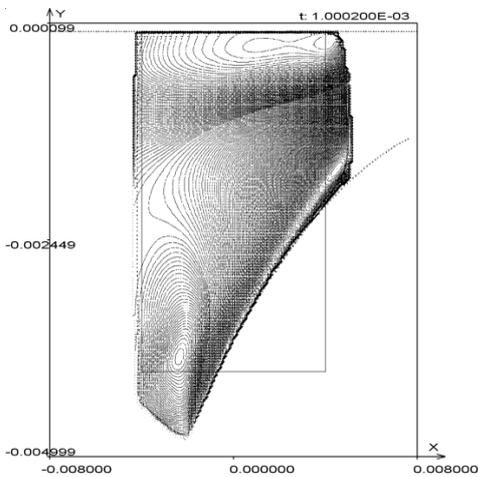


Рис. 4. Расчёт при $t = 0.1 \cdot 10^{-2} \text{ с}$, $Re = 10$, 160×160 , $S = 0.32 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$, $R_1 = R_2 = 0.05 \text{ м}$, $\omega = 100 \text{ рад/с}$, $\tau_3 = 0.200 \cdot 10^{-6} \text{ с}$, $\psi_3 = -0.800 \dots 0.260$, $\Delta\psi_{23} = 0.023$, $S_3 = 0.318 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$, $\Delta S_3 = 0.002 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$ (0.6 %)

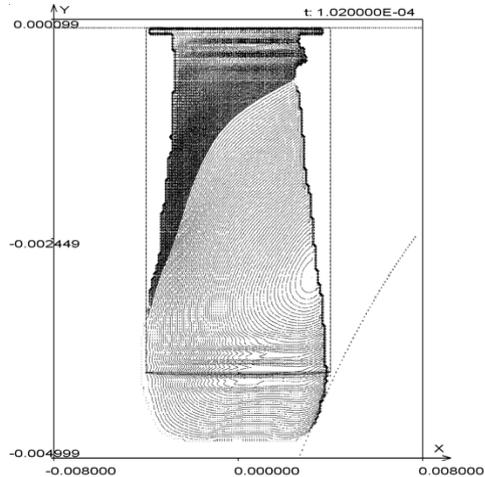


Рис. 5. Границы области течения жидкости при $Re = 100$ в момент времени $t = 0.1 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ при угловой скорости вращения $\omega = 104 \text{ рад/с}$

Таблица 1. Результаты численных расчётов при разных расчётных параметрах по порядку сходимости от шагов по расчётной сетке (h^p) и шага по времени (τ^p). Расчёт $S = 0.32 \cdot 10^{-4}$, $R_1 = R_2 = 0.05$ м, $\omega = 100$ рад/с. Расчёт на сетках 1 – 40×40 , 2 – 80×80 , 3 – 160×160

Время расчёта с шагами τ_2, τ_3 , число Рейнольдса	Потери площади на сетке 80×80 , м ² и %	Потери площади на сетке 160×160 , м ² и %	Значения функции тока и модуль её изменения на сетках 40×40 и 80×80	Значения функции тока и модуль её изменения на сетках 80×80 и 160×160	Порядок сходимости p по шагу сетки h
при $t = 0.1 \cdot 10^{-2}$ с, $Re = 1$, $\tau_2 = 0.5 \cdot 10^{-7}$ с $\tau_3 = 0.2 \cdot 10^{-7}$ с	$\Delta S_2 = 0.004 \cdot 10^{-4}$ (1.2 %)	$\Delta S_3 = 0.002 \cdot 10^{-4}$ (0.6 %)	$\psi_2 = -0.850$... 0.254, $\Delta\psi_{12} = 0.185$	$\psi_3 = -0.898$... 0.292, $\Delta\psi_{23} = 0.048$	$p = \ln_2(0.185 / 0.048) = \ln_2(3.85) = 1.95$
при $t = 0.2 \cdot 10^{-2}$ с, $Re = 10$, $\tau_2 = 0.5 \cdot 10^{-7}$ с $\tau_3 = 0.2 \cdot 10^{-7}$ с	$\Delta S_2 = 0.006 \cdot 10^{-4}$ (1.8 %)	$\Delta S_3 = 0.002 \cdot 10^{-4}$ (0.6 %)	$\psi_2 = -1.415$... 0.0, $\Delta\psi_{12} = 0.240$	$\psi_3 = -1.472$... 0.018, $\Delta\psi_{23} = 0.057$	$p = \ln_2(0.240 / 0.057) = \ln_2(4.21) = 2.74$
при $t = 0.1 \cdot 10^{-2}$ с, $Re = 10$, $\tau_2 = 0.5 \cdot 10^{-7}$ с $\tau_3 = 0.2 \cdot 10^{-7}$ с	$\Delta S_2 = 0.004 \cdot 10^{-4}$ (1.2 %)	$\Delta S_3 = 0.002 \cdot 10^{-4}$ (0.6 %)	$\psi_2 = -0.823$... 0.280, $\Delta\psi_{12} = 0.199$	$\psi_3 = -0.800$... 0.260, $\Delta\psi_{23} = 0.023$	$p = \ln_2(0.199 / 0.023) = \ln_2(8.65) = 3.11$
при $t = 0.2 \cdot 10^{-2}$ с, $Re = 10$, $\tau_2 = 0.5 \cdot 10^{-7}$ с $\tau_3 = 0.2 \cdot 10^{-7}$ с	$\Delta S_2 = 0.004 \cdot 10^{-4}$ (1.2 %)	$\Delta S_3 = 0.004 \cdot 10^{-4}$ (1.2 %)	$\psi_2 = -1.190$... 0.0, $\Delta\psi_{12} = 0.206$	$\psi_3 = -1.273$... 0.015, $\Delta\psi_{23} = 0.083$	$p = \ln_2(0.206 / 0.083) = \ln_2(2.48) = 1.31$
при $t = 0.2 \cdot 10^{-2}$ с, $Re = 100$, $\tau_2 = 0.1 \cdot 10^{-5}$ с $\tau_3 = 0.1 \cdot 10^{-5}$ с	$\Delta S_2 = 0.007 \cdot 10^{-4}$ (2.1 %)	$\Delta S_3 = 0.000 \cdot 10^{-4}$ (0.0 %)	$\psi_2 = -0.673$... 0.207, $\Delta\psi_{12} = 0.206$	$\psi_3 = -0.725$... 0.223, $\Delta\psi_{23} = 0.052$	$p = \ln_2(0.206 / 0.052) = \ln_2(3.96) = 1.98$
при $t = 0.2 \cdot 10^{-2}$ с, $Re = 100$, $\tau_2 = 0.1 \cdot 10^{-5}$ с $\tau_3 = 0.1 \cdot 10^{-5}$ с	$\Delta S_2 = 0.007 \cdot 10^{-4}$ (2.1 %)	$\Delta S_3 = 0.002 \cdot 10^{-4}$ (0.6 %)	$\psi_2 = -1.079$... 0.004, $\Delta\psi_{12} = 0.323$	$\psi_3 = -1.180$... 0.254, $\Delta\psi_{23} = 0.101$	$p = \ln_2(0.323 / 0.101) = \ln_2(3.20) = 1.68$

На рис. 2–5 представлены результаты численного моделирования с определением границ течения жидкости и с изображениями функции тока, получены на сетках

Таблица 2. Результаты численных расчётов при разных расчётных параметрах по порядку сходимости от шагов по расчётной сетке (h^p) и шага по времени (τ^p). Расчёт $f S = 0.32 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$, $R_1 = R_2 = 0.05 \text{ м}$, $\omega = 100 \text{ рад/с}$. Расчёт на сетках 1 – 40×40 , 2 – 80×80 , 3 – 160×160 .

Время расчёта с шагами τ_2, τ_3 , число Рейнольдса	Потери площади на сетке 80×80 , м^2 и %	Значения функции тока и модуль её изменения на сетках 40×40 и 80×80	Порядок сходимости p по шагу времени τ
при $t = 0.1 \cdot 10^{-2} \text{ с}$, $Re = 10$, $\tau_1 = 0.5 \cdot 10^{-6} \text{ с}$	$\Delta S_1 = 0.004 \cdot 10^{-4}$ (1.2 %)	$\psi_1 = -0.804 \dots 0.278$	
при $t = 0.1 \cdot 10^{-2} \text{ с}$, $Re = 10$, $\tau_2 = 0.250 \cdot 10^{-6} \text{ с}$	$\Delta S_2 = 0.006 \cdot 10^{-4}$ (1.8 %)	$\psi_2 = -0.752 \dots 0.268$ $\Delta\psi_{12} = 0.052$	
при $t = 0.1 \cdot 10^{-2} \text{ с}$, $Re = 10$, $\tau_3 = 0.125 \cdot 10^{-6} \text{ с}$	$\Delta S_3 = 0.004 \cdot 10^{-4}$ (1.2 %)	$\psi_3 = -0.734 \dots 0.241$ $\Delta\psi_{23} = 0.018$	$p = \ln_2(0.052/0.018)$ $= \ln_2(2.89) = 1.53$

$80 \times 80, 160 \times 160$ при числах $Re = 1, 10$ и 100 для угловой скорости $\omega = 100$ на моменты времени $t = 0.1 \cdot 10^{-2} \text{ с}$ и $0.2 \cdot 10^{-2} \text{ с}$.

В табл.1 приведены результаты численных расчётов при разных расчётных параметрах.

В табл. 2 представлены расчёты на сетке 80×80 при $Re = 10, S = 0.32 \cdot 10^{-4}, R_1 = R_2 = 0.05 \text{ м}, \omega = 100 \text{ рад/с}$ для определения порядка сходимости от шага по времени τ .

По данным расчётам при числах Рейнольдса Re от 1 до 100 на рассмотренных регулярных сетках при моделировании нестационарного течения вязкой жидкости сохраняется асимптотический второй порядок сходимости по шагам сетки.

Как показали расчёты (табл. 2), на основе значений функции тока достигается сходимость 1-го порядка по $\tau, p = \ln_2(0.052/0.018) = \ln_2(2.89) = 1.53$. При этом потери массы составили 1.3–1.8 %, что сопоставимо с потерей половины площадей приграничных ячеек, что возможно при суммировании всех их площадей.

На рис. 2 показан расчёт начального момента соприкосновения с поверхностью второго цилиндра вязкой жидкости в момент времени $t = 0.1 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ при повышенной угловой скорости, равной $\omega = 104 \text{ рад/с}$, и при вязкости $\nu = 0.32 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$. Несмотря на значение числа Рейнольдса $Re = 100$, как и в расчётах при $\omega = 10^2 \text{ рад/с}$ образуется отрыв тонкого слоя жидкости из-за наличия повышенного центробежного ускорения, присутствующего в уравнении (10) в виде $\frac{(u+\omega(R-y)^2)}{R-y}$ и действующего в отрицательном направлении по оси y данной полярной системы координат.

Заключение

Проведена постановка задачи для моделирования течений вязкой жидкости между вращающимися цилиндрами при различных числах вязкости на основе уравнений Навье – Стокса с отражением основных физических процессов (учёт вязкости с определением поля давления и компонент скоростей во всей области течения жидкости, учёт динамического по времени взаимодействия жидкости с подвижными твёрдыми границами, учёт поверхностного натяжения на свободных границах).

Применена разработанная методика расчёта подвижных границ жидкости как совместно с твёрдыми, так и свободно перемещаемыми границами, на сетках с регулярно распределёнными узлами при $N_x = N_y = 40 \div 160$. Приведены результаты расчёта сложных по геометрии течений жидкости при числах Рейнольдса $Re \leq 100$.

Использование численного алгоритма и схемы с аппроксимациями вида $O(\tau, h^2)$ показало достижение таких же порядков точности по τ и h на тестовой задаче.

Благодарности

Исследования проведены в рамках государственного задания Института математики СО РАН, проект ФВНФ-2022-0016 «Модели и методы обработки данных для поддержки процессов принятия решений».

Литература

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989. 608 с.
2. Копченков В.И., Крайко А.Н., Левин М.П. О применении существенно неравномерных сеток при численном решении уравнений Навье-Стокса // Вычислительная математика и математическая физика. 1982. Т. 22, № 6. С. 1457–1467.
3. Гушин В.А., Матюшин П.В. Математическое моделирование пространственных течений несжимаемой жидкости // Математическое моделирование. 2006. Т. 18, № 5. С. 5–20.
4. Паничкин А.В. Численное решение задач нестационарного конвективно-диффузионного переноса на регулярных сетках при наличии пограничных слоев // Вычислительные технологии. Новосибирск: ИТПМ СО РАН, 2003. Вып. 8, ч. 3. С. 15–20.
5. Паничкин А.В., Варепо Л.Г. Моделирование течения вязкой несжимаемой жидкости со свободными границами между двумя вращающимися цилиндрами // Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика: материалы междунар. конф., посвящ. 90-летию акад. Н.Н. Яненко, 30 мая – 4 июня 2011 г. Новосибирск, 2011. URL: <http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/47491/47492/Panichkin.pdf> (дата обращения: 02.11.2024).
6. Panichkin A., Varepo L. The numerical calculation of the viscous incompressible fluid transfer onto porous surface between rotating cylinders // International Multidisciplinary Microscopy Congress – Springer Proceedings in Physics. 2014. Vol. 154.
7. Паничкин А.В., Варепо Л.Г. Численный расчёт свободного движения малого объёма вязкой несжимаемой жидкости между вращающимися цилиндрами // Вычислительные технологии. 2013. № 2. С. 62–71.

8. Варепо Л.Г., Паничкин А.В., Панчук К.Л. Алгоритм компьютерного моделирования и визуального представления результатов расчёта течения вязкой несжимаемой жидкости в двумерной области определения // Вестник компьютерных и информационных технологий. 2017. № 11 (161). С. 16–22.
9. Panichkin A.V., Varepo L.G. Geometric interpretation of modeling calculation of cylinders axial vibration effect on transfer of viscous incompressible fluid // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1260. Art. 072013.
10. Panichkin A.V. Numerical method of modeling of a current of viscous liquid with free borders // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1441. Art. 012159.
11. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967. 196 с.

**FINITE-DIFFERENCE SIMULATION OF THE DYNAMIC CHARACTERISTICS
OF TWO ROTATING CYLINDERS DURING THE FLOW OF A VISCOUS
INCOMPRESSIBLE FLUID FILM**

A.V. Panichkin¹

Dr.Sc. (Techn.), Leading Researcher, e-mail: panich@ofim.oscsbras.ru

L.G. Varepo²

Dr.Sc. (Techn.), Professor, e-mail: larisavarepo@yandex.ru

¹Institute of mathematics named after S.L. Soboleva Siberian branch of the Russian Academy
of Sciences, Novosibirsk, Russia

²Omsk State Technical University, Omsk, Russia

Abstract. A numerical algorithm has been developed to simulate the flow of a limited volume of liquid between rotating cylinders with free boundaries and in contact with solid surfaces of the cylinders. The main feature of this algorithm is the ability to consider such basic characteristics of a viscous incompressible liquid as surface tension and adhesion to solid surfaces. A few test calculations have been performed, with the determination of asymptotic parameters of convergence from time steps and spatial coordinates. The results of numerical modeling with the determination of the boundaries of the liquid flow and with images of the stream function obtained on 80×80 , 160×160 grids at different Re numbers are presented.

Keywords: modeling, hydrodynamic equations, viscous incompressible liquid, dynamic characteristics.

Дата поступления в редакцию: 02.11.2024

ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ПОНЯТИЮ УСТОЙЧИВОСТИ И ПОСТРОЕНИЮ СИСТЕМЫ ПОРОГОВЫХ ЗНАЧЕНИЙ КЛЮЧЕВЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Р.Ю. Симанчев¹

д.ф.-м.н., доцент, e-mail: osiman@rambler.ru

И.В. Уразова²

к.ф.-м.н., доцент, e-mail: urazovainn@mail.ru

¹Омский научный центр СО РАН, Омск, Россия

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

Аннотация. Определена общая методика построения пороговых значений ключевых показателей в контексте подхода к оценке устойчивости состояния социально-экономической системы. Через понятие системы пороговых значений обозначен аналитический подход к понятию угрозы экономической безопасности.

Ключевые слова: система ключевых показателей, пороговые значения, устойчивость социально-экономической системы, доминирующие множества.

Введение

Под экономической безопасностью региона мы понимаем интегральную характеристику состояния экономики региона, отражающую уровень её защищённости от угроз социально-экономическому развитию. Проблематика экономической безопасности территорий активно исследуется в западных странах с середины XX в., российскими учёными – с начала 1990-х гг. Но до сих пор продолжаются дискуссии о показателях, подходах и методиках оценки региональной экономической безопасности.

Особое внимание при анализе уровня экономической безопасности региона в современной экономической науке уделяется созданию индикативной системы оценки. Количество подходов к формированию систем индикаторов, к определению самих понятий, таких как показатель, пороговое значение, индикатор, растёт с каждой новой публикацией. При этом неоднозначность предлагаемых формулировок, методологическая нестройность понятий и особенно отсутствие обоснованной методики вычисления сопутствующих подходу числовых характеристик мешают, на наш взгляд, построить объективную концепцию индикативной оценки уровня экономической безопасности региона.

Для разработки авторского подхода к построению системы индикативной оценки экономической безопасности региона ставятся следующие задачи:

- исследование сущности понятия «ключевые показатели», его формализация в терминах минимальных по включению индикаторных (доминирующих) подмножеств графа, формулирование оптимизационных задач и построение их целочисленных моделей;
- разработка подхода к определению устойчивости системы, использование понятия устойчивости как целеполагающего направления для построения системы пороговых значений показателей (ключевых показателей), обеспечивающих экономическую безопасность региона.

Показателями принято называть содержательные характеристики экономической ситуации, допускающие количественное выражение. Принципиальным в этом понятии мы считаем возможность численного измерения показателя на протяжении определённого количества периодов. При этом важно, чтобы методика получения численных характеристик оставалась постоянной, что позволит использовать статистические методы для анализа ситуации.

Отметим, что в научной литературе наиболее широко применяется понятие «индикатор экономической безопасности» [1, 2]. Понятие «ключевой показатель экономической безопасности» встречается крайне редко, однако с его помощью становится возможным выстроить логическую связь между терминами в рамках изучаемой темы. В нашей трактовке индикатор экономической безопасности представляет собой ключевой показатель в совокупности с пороговым значением, выход за пределы которого грозит разрушительными процессами. Под ключевыми показателями мы понимаем ограниченный перечень показателей, способных достаточно полно отразить состояние экономики с позиции экономической безопасности.

Фактические значения индикаторов сравниваются с пороговыми значениями, что позволяет судить об уровне экономической безопасности территории, чему посвящены работы [3–6]. При этом предполагается, что перечень индикаторов выбран из множества статистических показателей социально-экономического развития региона. Однако подробное обоснование этого выбора в основном не приводится. Авторы ограничиваются лишь общим видением ситуации на основе экспертных оценок.

Иначе говоря, из перечня показателей выделяются некоторые «ключевые» показатели. Однако в экономической литературе на сегодняшний день плохо просматривается ответ на вопрос о том, на основании каких соображений выделять этот ограниченный набор показателей. Здесь при анализе существующих систем индикаторов мы вновь сталкиваемся с мнениями специалистов, которых зачастую больше, чем самих показателей. При ответе на этот вопрос нам представляется важным следующее соображение.

В описательной форме под ключевыми показателями будем считать показатели, которые:

- в количественной форме отражают состояние экономической безопасности;
- обладают высокой чувствительностью к изменениям ситуации;
- взаимодействуют с остальными показателями и между собой в достаточно сильной степени.

1. Функция оценки состояния системы и устойчивость

В настоящем разделе мы предлагаем подход к определению понятия устойчивости социально-экономической системы. Мы делаем это с целью минимизации субъективизма при анализе функционирования системы, при определении основных понятий индикаторного подхода. Ранее [7] мы разработали модели построения множества ключевых показателей как короткого (насколько возможно) набора показателей, которые наиболее сильно влияют на функционирование системы и в конечном счёте могут служить фундаментом для её анализа. Следующим принципиальным шагом при использовании индикаторного подхода является определение пороговых значений найденных ключевых показателей. На сегодняшний день, как уже говорилось, пороговые значения определяются, как правило, экспертным путём, т. е. отражают скорее наши предположения и экспертные мнения, чем внутренние свойства самой системы. Мы закладываем во главу угла тезис о том, что критерием для определения пороговых значений показателей должны быть не возрастание/убывание значений показателей, а реакция системы на изменение взаимосвязей между показателями. Изменение степени влияния одного показателя на другой в идеале не должно сильно отражаться на состоянии системы. Один из вариантов построения функции, отражающей интегральное состояние системы, рассматривался нами в предыдущие годы. Эта функция основывалась на так называемом весе множества ключевых показателей [7]. Были предложены три различные модели (точная и две приближённые) вычисления этой функции, проведены численные эксперименты, целью которых были:

- оценка возможностей предложенных алгоритмов с точки зрения размерности задачи (числа показателей системы);
- формирование множества ключевых показателей максимального веса для Томской, Новосибирской и Омской областей России.

При этом подходе вес оптимального множества ключевых показателей мы рассматриваем как интегральную характеристику, как функцию системы, отражающую глубину взаимосвязей показателей между собой. Изменение внешней ситуации может либо привести к уменьшению веса оптимального множества ключевых показателей (т. е. ослаблению взаимосвязей между показателями), либо нет. Отсюда естественным образом мы приходим к понятию устойчивости социально-экономической системы, т. е. к состоянию «безопасному» с точки зрения своей стабильности. В этом смысле состояние системы может оказаться устойчивым или неустойчивым.

Итак, под системой S мы будем понимать множество V из n показателей в совокупности с вектором переменных $x = (x_{ij}, i, j = 1, 2, \dots, n; i \neq j)$. Переменные $x_{ij} \in [\alpha, 1]$ будем понимать как коэффициенты, численно характеризующие степень связи между показателями i и j . Параметр $\alpha \in [0, 1]$ задаётся априори и является порогом зависимости между парой показателей, в том смысле что если степень зависимости между показателями i и j меньше α , то полагаем $x_{ij} = 0$, т. е. этой зависимостью можно пренебречь. Вектор x при фиксированных значениях переменных будем называть состоянием системы. В связи с этим целесообразно

использовать обозначение $S_\alpha(x)$. Введём в рассмотрение числовую функцию $r_\alpha(x)$ – оценку состояния системы. Она может быть разной, её, видимо, формируют эксперты. Например, она может рассматриваться как

- «глубина», степень взаимосвязанности показателей системы $S_\alpha(x)$ при том или ином подходе к оценке этой взаимосвязанности;
- как наибольший вес среди всех весов множеств ключевых показателей;
- и т. п.

Функция $r_\alpha(x)$ может иметь аналитическое выражение или вычисляться алгоритмически. Как уже говорилось, конкретная структура и содержательный смысл этой функции может быть разным [7].

Для определения понятия устойчивости нами используется классический подход, заключающийся в оценке изменения функции при возмущении её аргументов.

Пусть $\delta = (\delta_{ij}, i, j = 1, 2, \dots, n)$ – вектор возмущений, $\delta_{ij} \in (-1, 1)$ и при этом $0 \leq x_{ij} + \delta_{ij} \leq 1$ для всех $ij \in A$.

Определим также $O_\delta(x) = \{y | d(x, y) \leq \delta\}$ – окрестность состояния x , где $d(\cdot, \cdot)$ – какой-либо способ сравнения «расстояния» между двумя состояниями.

Формально говоря, состояние $S_\alpha(x)$ будем считать **δ -устойчивым**, если для любого $y \in O_\delta(x)$ разность $|r_\alpha(x) - r_\alpha(y)|$ достаточно мала. Конкретизация формулировки «достаточно мала» является на данный момент, по-видимому, прерогативой экспертов. Отметим также, что внесение возмущения в состояние системы возможно в том числе и путём изменения порога зависимости α .

2. Система пороговых значений

Пороговые значения показателей для состояния $S_\alpha(x)$ целесообразно понимать как максимальный вектор пороговых значений $\delta = (\delta_{ij}, i, j = 1, 2, \dots, n)$. Иначе говоря, вектором пороговых значений назовём такой $\delta = (\delta_{ij}, i, j = 1, 2, \dots, n)$, что состояние $S_\alpha(x)$ является δ -устойчивым, но не является $(\delta + \epsilon)$ -устойчивым при любом $\epsilon > 0$.

По сути дела, пороговое значение, равно как и множество ключевых показателей, определяется не отдельно для каждого показателя (или ключевого показателя), а одновременно для всего множества показателей (ключевых показателей).

Мы приходим к понятию системы пороговых значений.

С точки зрения устойчивости система пороговых значений должна характеризовать «близость» устойчивого состояния к резкому изменению функции взаимосвязей между показателями (функция $r_\alpha(x)$).

Возможен другой взгляд: если система не находится в устойчивом состоянии, то «насколько устойчивое состояние далеко от данного» и какими показателями следует управлять, чтобы попасть в какое-либо из устойчивых состояний.

Предлагается заложить во главу угла тезис о том, что критерием для определения пороговых значений показателей должен быть не «рост благосостояния», а реакция системы на изменение взаимосвязей между показателями. Во всяком случае

добиваться роста благосостояния тоже нужно, но не путём «борьбы» за отдельно взятый показатель, а путём переходов от одного устойчивого к другому устойчивому состоянию.

Между устойчивыми состояниями возможна своя иерархия предпочтений. При этом сравнение состояний между собой – это отдельная задача, которая зачастую исследуется вне привязки к самой природе пороговых значений. В этой ситуации основная трудность заключается в выборе функции, посредством которой оценивается глубина взаимосвязей между показателями. Мы предлагаем возможный вариант построения такой функции.

3. Пример функции оценки состояния системы

С системой $S_\alpha(x)$ мы связываем ориентированный рёберно-взвешенный граф $G_\alpha(x)$, множеством вершин которого является множество всех показателей V , а множеством дуг A – упорядоченные пары вершин с ненулевой степенью зависимости [8].

С помощью графа $G_\alpha(x)$ мы определяем функцию, интегрально характеризующую «глубину» взаимосвязей показателей между собой. Множество W из V называется множеством ключевых показателей (МКП) системы $S_\alpha(x)$, если любая вершина графа $G_\alpha(x)$ либо принадлежит W , либо достижима из W за один шаг [8,9]. В рамках этого определения само множество V всех показателей тоже является МКП. Для исключения этой ситуации и стремления уменьшить количество ключевых показателей, мы будем рассматривать только минимальные по включению МКП, т. е. только такие, из которых нельзя отбросить ни одной вершины без потери свойства быть МКП. Соответственно через $I_\alpha(x)$ мы обозначим множество всех минимальных по включению МКП в графе $G_\alpha(x)$. Теперь определим функцию, посредством которой мы предлагаем «измерять» степень взаимосвязанности системы $S_\alpha(x)$:

$$r_\alpha(x) = \max \left\{ \sum_{i \in W, j \in V \setminus W} x_{ij}, \text{ по всем } W \in I_\alpha(x) \right\}.$$

Таким образом, мы измеряем степень взаимосвязанности показателей системы $S_\alpha(x)$ как наибольший вес среди всех весов множеств ключевых показателей.

В нашей ситуации аргументами функции $r_\alpha(x)$ являются переменные, характеризующие степень связанности между показателями. При переходе от состояния $S_\alpha(x)$ к состоянию $S_\alpha(x + \delta)$ возможны достаточно резкие скачки в значении функции $r_\alpha(x)$. Это связано с тем, что для какой-либо дуги величина $x_{ij} + \delta_{ij}$ может оказаться меньше порога зависимости α , либо наоборот при первоначальном x_{ij} меньшем α новое значение $x_{ij} + \delta_{ij}$ может оказаться больше, чем α . В первом случае дуга из графа $G_\alpha(x)$ исчезает, во втором – появляется.

Более подробное описание данной модели, а также анализ поведения предложенной функции $r_\alpha(x)$ можно найти в работе [7].

Заключение

Предложенный подход к определению ключевых показателей экономической безопасности региона опирается на формализацию понятия «ключевые показатели» в математических терминах (статистический анализ, теория графов, оптимизация), так как именно этот язык, на наш взгляд, в наибольшей степени позволяет избежать субъективности. Множество ключевых показателей определяется как некоторое подмножество исходного множества показателей, имеющее наибольшее влияние на ситуацию. Особенностью предлагаемого подхода является тезис о том, что одна и та же система индикаторов не может быть универсальной для различных социально-экономических образований, поскольку глубинные взаимосвязи между показателями могут иметь различную природу.

Мы также обсуждаем вопрос об определении понятия устойчивости социально-экономической системы. Мы закладываем во главу угла тезис о том, что критерием для определения пороговых значений показателей должны быть не возрастание/убывание значений показателей, а реакция системы на изменение взаимосвязей между показателями. В этой ситуации основная трудность заключается в выборе функции, посредством которой оценивается глубина взаимосвязей. Мы предлагаем возможный вариант построения такой функции.

Одной из особенностей нашего подхода является вывод о том, что пороговое значение, равно как и множество ключевых показателей, определяется не отдельно для каждого показателя (или ключевого показателя), а одновременно для всего множества показателей (ключевых показателей). Иначе говоря, мы приходим к понятию системы пороговых значений. С точки зрения устойчивости система пороговых значений должна характеризовать «близость» устойчивого состояния к резкому изменению функции взаимосвязей между показателями.

Данный подход следует рассматривать как аппарат, применимый для определённого круга ситуаций, как элемент гибридного анализа не только для экономической безопасности, но и более широкого спектра социально-экономических задач.

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания Омского научного центра СО РАН, № 121022000112-2.

Литература

1. Агалаков С.А., Симанчев Р.Ю., Уразова И.В. Об одном подходе к построению системы ключевых показателей экономической безопасности // Вестник Омского университета. Серия «Экономика». 2018. № 4. С. 5–12.
2. Кораблева А.А., Карпов В.В. Индикаторы экономической безопасности региона // Вестник Сибирского института бизнеса и информационных технологий. 2017. № 3 (23). С. 36–42.
3. Ворона-Сливинская Л.Г., Лобанов М.В. Проблемы выбора индикаторов экономической безопасности государства и определение их пороговых значений // Вестник Санкт-

- петербургского университета Государственной противопожарной службы. 2009. № 4. С. 43–47.
4. Логинов К.К. Анализ индикаторов региональной экономической безопасности // Вестник Сибирской государственной автомобильно-дорожной академии. 2015. № 2 (42). С. 132–139.
 5. Кузнецов Д.А., Руденко М.Н. Система индикаторов оценки экономической безопасности страны // Национальные интересы: приоритеты и безопасность. 2015. Т. 11, вып. 23. С. 59–68.
 6. Карпов В.В., Симанчев Р.Ю. Определение и угрозы энергетической безопасности // Вестник Омского университета. Серия «Экономика». 2016. № 4. С. 30–38.
 7. Simanchev R.Yu., Urazova I.V., Voroshilov V.V. The minimal dominating sets in a directed graph and key indicators set of socio-economic system // Ural Mathematical Journal. 2023. Vol. 9, No. 1. P. 153–161.
 8. Christofides N. Graph Theory. An Algorithmic approach. London; Academic Press Inc., 1975.
 9. Cheston G.A., Fricke G., Hedetnieme S.T. On the computational complexity of upper fractional domination // Discrete Applied Mathematics. 1990. No. 27. P. 195–207.

**ON APPROACH TO THE CONCEPT OF SUSTAINABILITY
OF THE SOCIO-ECONOMIC SYSTEM AND TO THE CONSTRUCTION
OF A THRESHOLD VALUES SET OF KEY INDICATORS**

R.Yu. Simanchev¹

Dr.Sc. (Phys.-Math.), Associate Professor, e-mail: osiman@rambler.ru

I.V. Urazova²

Ph.D. (Phys.-Math.), Associate Professor, e-mail: urazovainn@mail.ru

¹Omsk Scientific Center of SB RAS, Omsk, Russia

²Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Abstract. A general methodology for constructing threshold values of key indicators in the context of an approach to assessing the sustainability of a socio-economic system is defined. The concept of a threshold value system is used to define an analytical approach to the concept of a threat to economic security.

Keywords: key indicators system, threshold values, sustainability of the socio-economic system, dominating sets.

Дата поступления в редакцию: 15.09.2024

АДАПТИВНОЕ ОБУЧЕНИЕ НЕЧЁТКИХ КОГНИТИВНЫХ КАРТ

С.Н. Чуканов¹

д.т.н., профессор, e-mail: ch_sn@mail.ru

И.С. Чуканов²

магистрант, e-mail: chukanov022@gmail.com

С.В. Лейхтер³

старший преподаватель, e-mail: leykhter@mail.ru

А.В. Калекина⁴

к.э.н., доцент, e-mail: annakav82@mail.ru

И.Е. Чернуха⁵

аспирант, e-mail: ilyachernuha92@gmail.com

¹Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Омский филиал, Омск, Россия
²Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия

³Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

⁴Омский институт водного транспорта, Омск, Россия

⁵Омский государственный технический университет, Омск, Россия

Аннотация. Метод нечётких когнитивных карт (FCM) разработан Б. Коско для расширения когнитивных карт, которые широко используются для представления знаний в социальных науках. Предложено несколько алгоритмов для обучения FCM. Основная задача процедуры обучения – найти настройку весов FCM, которая приведёт FCM к требуемому устойчивому состоянию. Это достигается посредством минимизации правильно определённой целевой функции. Установленные алгоритмы в значительной степени зависят от начального приближения матрицы весов, которое предоставляется экспертами. Один из методов обучения FCM основан на оптимизации роя частиц (PSO). PSO используется для определения соответствующих весовых матриц для системы путём минимизации заданной целевой функции.

Ключевые слова: нечёткие когнитивные карты, правило Хебба, оптимизации роя частиц.

Введение

В 1986 г. Б. Коско представил FCM для причинно-следственной обработки и вычислительной обработки оценок причинно-следственных связей, представленных в виде ориентированного графа [1]. Создание FCM требует знаний экспертов о рассматриваемой системе. FCM состоит из концепций $C_i, i = 1, \dots, N$. Каждый узел (концепция) содержит значение $A_i \in [0, 1], i = 1, \dots, N$. Концепции соединены

взвешенными дугами, которые показывают отношения. Связь между двумя концепциями имеет вес W_{ij} . Направление указывает, является ли концепция причиной или следствием. Существует три типа весов:

$$\begin{cases} W_{ij} > 0, & \text{positive causality,} \\ W_{ij} < 0, & \text{negative causality,} \\ W_{ij} = 0, & \text{absence of causality.} \end{cases}$$

На каждом шаге значение концепции A_i находится под влиянием значений других концепций:

$$A_i(k+1) = f \left(A_i(k) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n W_{ji} A_j(k) \right), \quad (1)$$

где W_{ji} – вес дуги, соединяющей концепцию C_j с концепцией C_i ;

$$f(x) = (1 + \exp(-\lambda x))^{-1}. \quad (2)$$

Проектирование FCM опирается на мнения экспертов. Эксперты описывают влияние одной концепции на другую как «негативное», «положительное» или «отсутствие». Метод дефаззификации используется для преобразования лингвистического веса в числовое значение. Преимущество этого подхода в том, что экспертам не нужно напрямую присваивать значения для создания корреляций и эффектов, но им необходимо сравнивать значения между понятиями. Экспертами задаётся начальная матрица весов $W^{initial} = [W_{ij}] ; i, j = 1, \dots, N$, с $W_{ii} = 0 ; i = 1, \dots, N$.

Процедуры обучения представляют собой средства повышения эффективности и надёжности FCM путём обновления матрицы весов. На сегодняшний день существует всего несколько алгоритмов обучения FCM, основанных на опыте обучения нейронных сетей [2]. Такие алгоритмы начинают с начального состояния и начальной матрицы весов $W^{initial}$ FCM и адаптируют веса, чтобы вычислить матрицу весов, которая приводит FCM к желаемому устойчивому состоянию.

1. Алгоритмы обучения

Алгоритм обучения PSO (particle swarm optimization) [3,4] принадлежат к классу алгоритмов роевого интеллекта, вдохновлённых социальной динамикой в организованных колониях (например, пчёл). В алгоритме каждая частица движется в пространстве поиска с адаптивной скоростью и сохраняет в памяти лучшее положение. В глобальной версии PSO наилучшее положение сообщается всем частицам. При этом между частицами происходит обмен информацией о лучшем положении, достигнутом окружающими частицами. i -я частица роя является D -мерным вектором $X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})^T \in S \subset \mathbb{R}^D$, а скорость i -й частицы – $V_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})^T \in S$. Наилучшее положение i -й частицы является точкой $P_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iD})^T \in S$. Рой частиц управляется уравнениями:

$$V_i(t+1) = \chi [wV_i(t) + c_1r_1(P_i(t) - X_i(t)) + c_2r_2(P_{g_i}(t) - X_i(t))], \quad (3)$$

$$X_i(t+1) = X_i(t) + V_i(t+1), \quad (4)$$

где $i = 1, \dots, N$; c_1, c_2 – параметры алгоритма; $r_1, r_2 \in [0, 1]$; g_i – индекс частицы, которая достигла наилучшего положения всего роя.

Пусть C_1, \dots, C_N являются концепциями FCM и $C_{out_1}, \dots, C_{out_m}, 1 \leq m \leq N$ – выходными концепциями. Значения выходных концепций должны быть ограниченными экспертами: $A_{out_i}^{\min} \leq A_{out_i} \leq A_{out_i}^{\max}, i = 1, \dots, m$. Основная цель состоит в нахождении весовой матрицы $W = [W_{ij}], i, j = 1, \dots, N$, приводящей FCM к состоянию, при котором выходные концепции лежат в требуемых границах. Рассмотрим целевую функцию

$$F(W) = \sum_{i=1}^m H(A_{out_i}^{\min} - A_{out_i}) |A_{out_i}^{\min} - A_{out_i}| + \sum_{i=1}^m H(A_{out_i} - A_{out_i}^{\max}) |A_{out_i} - A_{out_i}^{\max}|, \quad (5)$$

где

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0, \end{cases}$$

– функция Хевисайда. FCM с N взаимосвязанными концепциями сталкивается с $N(N-1)$ -мерной задачей минимизации. Процесс PSO для минимизации целевой функции F начинается с этапа инициализации, на котором рой $S = \{X_1, \dots, X_M\}$ случайно формируется и оценивается с использованием F . Алгоритм завершает работу в конце процесса глобальной оптимизации функции F .

Алгоритм обучения Хебба. Цель обучения FCM с использованием адаптивных методов, основанных на правиле Хебба, состоит в получении матрицы весов на основе знаний экспертов и повышении точности ранее определённых весов [5]. Алгоритм дифференциального обучения Хебба (DHL) предполагает, что если концепция причины C_i и концепция следствия C_j одновременно изменяют свои значения активации, то причинный вес W_{ij} должен быть увеличен на постоянный коэффициент; в противном случае причинно-следственная связь не будет изменена в этой итерации. Уравнение (6) отображает правило обновления веса, используемое в этом алгоритме:

$$w_{ij}^{(t+1)} = \begin{cases} w_{ij}^{(t)} + \eta_t [\Delta A_i^{(t)} \Delta A_j^{(t)} - w_{ij}^{(t)}], & \Delta A_i^{(t)} \neq 0, \\ w_{ij}^{(t)}, & \Delta A_i^{(t)} = 0, \end{cases} \quad (6)$$

где η_t – скорость обучения.

2. Пример системы управления

Рассмотрим пример задачи управления процессом для иллюстрации работы предлагаемого алгоритма обучения, в которой имеется 5 объектов с концепциями $C_1 - C_5$.

Пусть дана начальная матрица весов и диапазоны значений весов, заданные экспертами (табл. 1).

Таблица 1. Начальные значения и диапазоны значений весов

W	W^{init}	W^{min}	W^{max}
W_{12}	-0,4	-0,55	-0,25
W_{13}	-0,3	-0,4	-0,2
W_{15}	0,3	0,15	0,45
W_{21}	0,3	0,2	0,4
W_{31}	0,4	0,3	0,5
W_{41}	-0,8	-0,9	-0,7
W_{52}	0,6	0,45	0,75
W_{54}	0,33	0,2	0,4

Таблица 2. Значения концепций в различные моменты времени

k	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
0	0,1	0,45	0,36	0,34	0,01
1	0,1033	0,3865	0,2819	0,2970	0,02
2	0,0970	0,3132	0,2026	0,2534	0,02
3	0,0856	0,2359	0,18	0,2108	0,02
4	0,0815	0,22	0,18	0,1745	0,02
5	0,0903	0,22	0,18	0,17	0,02
6	0,0960	0,22	0,18	0,17	0,02
7	0,0988	0,22	0,18	0,17	0,02
8	0,1001	0,22	0,18	0,17	0,02
9	0,1008	0,22	0,18	0,17	0,02
10	0,1012	0,22	0,18	0,17	0,02
11	0,1013	0,22	0,18	0,17	0,02
12	0,1014	0,22	0,18	0,17	0,02
13	0,1014	0,22	0,18	0,17	0,02
14	0,1015	0,22	0,18	0,17	0,02
15	0,1015	0,22	0,18	0,17	0,02

Значения концептов находятся в пределах, определённых экспертами: $0,05 \leq C_1 \leq 0,2$; $0,22 \leq C_2 \leq 0,9$; $0,18 \leq C_3 \leq 0,72$; $0,17 \leq C_4 \leq 0,68$; $0,005 \leq C_5 \leq 0,02$.

Примем следующие начальные значения концепций: $C_1 = 0,1$; $C_2 = 0,45$; $C_3 = 0,36$; $C_4 = 0,34$; $C_5 = 0,01$.

В результате адаптации весов и значений концепций получим динамический процесс изменения концепций в различные моменты времени, который представлен в табл. 2.

Заключение

FCM успешно используется для проектирования сложных систем. Предложен алгоритм обучения для определения матриц с субоптимальными весами для нечётких когнитивных карт. Метод основан на минимизации целевой функции с использованием алгоритма PSO и обучении, основанном на правиле Хебба.

Благодарности

Работа выполнена по Госзаданию Института математики СО РАН, проект № FWNF-2022-0016.

Литература

1. Kosko B. Fuzzy cognitive maps // International journal of man-machine studies. 1986. Vol. 24, No. 1. P. 65–75.
2. Papageorgiou E., Stylios C.D., Groumpos P.P. Activation hebbian learning rule for fuzzy cognitive maps // IFAC Proceedings Volumes. 2002. Vol. 35, No. 1. P. 319–324.
3. Eberhart R.C., Shi Y., Kennedy J. Swarm Intelligence (Morgan Kaufmann series in evolutionary computation). Morgan Kaufmann Publishers, 2001.
4. Parsopoulos K.E. et al. A first study of fuzzy cognitive maps learning using particle swarm optimization // The 2003 Congress on Evolutionary Computation, 2003. IEEE, 2003. Vol. 2. P. 1440–1447.
5. Dickerson J.A., Kosko B. Virtual worlds as fuzzy cognitive maps // Presence: Teleoperators & Virtual Environments. 1994. Vol. 3, No. 2. P. 173–189.

ADAPTIVE LEARNING OF FUZZY COGNITIVE MAPS**S.N. Chukanov**¹

Dr.Sc. (Techn.), Professor, e-mail: a@a.ru

I.S. Chukanov²

Master's Degree Student, e-mail: chukanov022@gmail.com

S.V. Leykhter³

Assistant Professor, e-mail: leykhter@mail.ru

A.V. Kalekina⁴

PhD (Econ.), Associate Professor, e-mail: annakav82@mail.ru

I.V. Chernuha⁵

Ph.D. Student, e-mail: ilyachernuha92@gmail.com

¹Sobolev Institute of Mathematics, Omsk branch, Omsk, Russia²Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia³Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia⁴Omsk Institute of Water Transport, Omsk, Russia⁵Omsk State Technical University, Omsk, Russia

Abstract. The Fuzzy Cognitive Map (FCM) method was developed by B. Kosko to extend cognitive maps, which are widely used to represent knowledge in the social sciences. Several algorithms have been proposed for training FCMs. The main objective of the training procedure is to find a setting of FCM weights that will bring the FCM to a desired stable state. This is achieved by minimizing a well-defined objective function. The established algorithms heavily depend on the initial approximation of the weight matrix, which is provided by experts. One of the methods for training FCMs is based on particle swarm optimization (PSO). PSO is used to determine the appropriate weight matrices for the system by minimizing a given objective function.

Keywords: fuzzy cognitive maps, Hebb's rule, particle swarm optimization.

Дата поступления в редакцию: 31.10.2024

МОДЕЛЬ РОСТА ЛИГНИНДЕСТРУКТОРНЫХ ОРГАНИЗМОВ ПРИ ИХ СИМБИОЗЕ: ИССЛЕДОВАНИЕ НА ОСНОВЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ БИФУРКАЦИЙ

А.С. Шумилов

к.с.-х.н., старший научный сотрудник, e-mail: anatoliy.sergreevich.shumilov@gmail.com

Институт физико-химических и биологических проблем почвоведения РАН,
Пушино, Россия

Аннотация. Имеющимися научными работами в области микологии показано, что с отходами деревопереработки и сельхозотходами работать экономически выгодно. Следовательно, исследования в этой сфере необходимо развивать и усиливать более сложными моделями, которые работают с организмами – лигнино-деструкторами. Автором предложена модель микробиологического и грибкового разложения лигнина, позволяющая работать с несколькими организмами, субстратами, температурами и кислотностью. Данная модель параметризована и верифицирована для роста вешенки *Pleurotus ostreatus* на древесных субстратах. На вход модель получает кинетические константы скоростей биохимических реакций в организме, а также константы диффузии. Порядок потоков в модели внутри одного организма следующий: синтез ферментов в организме; их диффузия в компост, затем разложение полимеров компоста на мономеры; далее происходит диффузия мономеров в организм. На всех стадиях происходит взаимодействие разных организмов (симбиоз или конкуренция). Была проверена гипотеза о стабильности модели, ранее полученная с помощью математической теории бифуркаций. На основе этого теоретически предсказано, какие значения культивирования дадут лучший результат.

Ключевые слова: модель роста гриба, модель Торнли, лигнинодеструкторы, биотехнологическая модель, вешенки *Pleurotus ostreatus*, организмы – лигнинодеструкторы, математическая теория бифуркаций, инкапсуляция, ферменты.

Введение

Лигнино содержащие подобные отходы – древесные опилки и солома – являются натуральным, биоразлагаемым материалом, который в основном используют при изготовлении бумаги, в строительстве и ремонте, а также в сельском хозяйстве и быту. Сейчас отходы древесной промышленности рассматриваются в том числе как биоматериал для культивирования организмов, например грибов [1, с. 16] и [2, с. 357].

Имеющимися научными работами в области микологии показано, что с отходами деревопереработки и сельхозотходами работать экономически выгодно [3, с. 39].

Однако для развития и ускорения исследований в этой сфере нужны более сложные модели, которые работают с организмами – лигнино-деструкторами.

В табл. 1 представлены существующие модели и их свойства по различным параметрам. Чтобы понять, какие параметры у этих моделей, надо прочитать эти статьи целиком, указать страницу, где сказано, что модель работает с такими параметрами, не получится, таких страниц там много. Потому это оформлено не ссылками на литературу в тексте, а ссылками на литературу в таблице.

На основе представленных данных были выбраны входные параметры, которыми должна обладать разрабатываемая нами модель. Существующие модели (см. табл. 1) имеют свои плюсы и минусы, что не позволяет им комплексно отвечать всем необходимым требованиям и быть использованными в полной мере.

Например, наиболее часто автору встречались модели, которые могли рассчитывать биомассу исследуемого гриба, который рос при разных температурах и кислотностях среды (см. модели 7–11), некоторые модели вместо температуры рассматривали кислотность, но одновременно температуру и кислотность, а также возможность при этом рассматривать несколько организмов и их разные отношения ни одна модель из увиденных автором не могла.

Таблица 1. Сравнение грибных потоковых моделей, работающих с труднорастворимыми субстратами

Существующие модели	Характеристики моделей					
	Учёт рН	Учёт Т	Расчёт биомассы	Учёт кинетики	Есть ли Содружество разных организмов?	Возможность изменения модели другим исследователями
1. Ma, Li. et al. [4]	–	+	–	–	–	–
2. Jung, Yun et al. [5]	–	–	–	+	–	–
3. Mahomoodally, Gu-ib-Fakim et al. [6]	–	–	–	–	–	–
4. Jung, Yun et al. [5]	–	–	–	–	–	–
5. Liang, Leona–d et al. [7]	+	+	–	–	–	–
6. Xiong, Liu et al. [8]	–	+	–	+	–	–
7. Kemanian and Stöckle [9]	–	+	+	+	–	–
8. Spokas, Veneman et al. [10]	–	+	+	+	–	–
9. Drake, Darby et al. [11]	–	+	+	+	–	–
10. Michel, G-ulke et al. [12]	–	+	+	+	–	–
11. Yu, Ahrens et al. [13]	–	+	+	+	–	–
12. McGill, Hunt et al. [14]	+	–	+	+	–	–
13. Huang, Guenet et al. [15]	+	–	–	+	–	–

Примечание: кислотность – рН, температура – Т, биомасса – bt, кинетика ферментативных реакций, симбиоз – s, простота работы для исследователей – res. Знаками «+» и «–» показано, соответственно, наличие или отсутствие учёта какого-либо параметра в существующей модели

Целей работы было две, биотехнологическая и математическая, и они связаны через поиск оптимальной стратегии выращивания гриба.

Биотехнологической целью данной работы являлось создание модели микробиологического и грибного разложения лигнина вешенкой, позволяющей работать с несколькими побочными организмами, субстратами, температурами и кислотностями, которая в перспективе может быть преобразована для других целей или объектов.

Для достижения цели была поставлена задача создать модель, которая:

1. Может работать сразу с широким кругом организмов и спектром биотехнологических методик.
2. Учитывает температуру, кислотность и влияние размера мицелия на процессы внутри него.
3. Была бы доступна для доработки тем, кто не владеет методами программирования.

Математической целью являлась проверка формулы устойчивости системы, полученной из математической теории бифуркаций. В источнике [3] исследована устойчивость уравнений системы, а вернее, исследовалось, как реагирует мицелий на изменение параметра A_m . Делается вывод, что система наиболее устойчива близ прямой $w_m = w_m^0 + A_m$. Мы хотим проверить этот вывод через постановку цифровых экспериментов в нашей модели. Кроме того, не совсем ясен физический смысл параметра A_m , мы также хотим уточнить этот смысл.

1. Материалы и методы

Субстраты и объекты. В качестве основного объекта исследования был взят съедобно-целебный базидиальный ксилосапротроф вешенка (*Pleurotus ostreatus*). В качестве среды для роста была взята лигниносодержащая среда (опилки лиственных деревьев и солома) фракцией 1–30 мм. Своих натуральных экспериментов пока не производилось, возможно, что эта статья поможет в будущем проверить модель на практике. В источнике данной методики был указан штамм вешенки (штамм НК-35, но марка опилок и точные характеристики соломы, не указаны, сказано лишь, что это солома овса).

Для разработки необходимой модели выбрана методика с микробиологической подготовкой субстрата, суть которой основывалась на гипотезе, что внесённая заранее микрофлора повышает способность гриба бороться с патогенами. В качестве такого «помощника» по борьбе вешенки с патогенными микроорганизмами (*Trichoderma pleurotum* или *Trichoderma pleuroticola*) был использован вид грамположительных, спорообразующих почвенных бактерий *Bacillus cereus*, которые являются продуцентом антибиотиков широкого спектра действия [16, с. 13] и [17, с. 179]. Лигнин компоста разлагался базидиальными грибами и бациллами с накоплением фенольных соединений, избыток которых препятствует нормальному росту и развитию триходермы и помогает развитию грибов [18, с. 97]. К ранее учтённым сахарам в модели Вигонта [19, с. 378] в качестве абстрактного субстрата роста добавлен лигнин. Его характеристики можно ввести в модель вручную, в зависимости от имеющегося под рукой источника лигнина.

2. Алгоритмы моделирования

Обсудим общую парадигму имитации в соответствии с задачами исследования, описав *концептуальную модель* из пяти стадий:

1. Эндогенный синтез ферментов.
2. Диффузия ферментов из гриба в среду его роста (например, описанные выше опилки).
3. Воздействие ферментов на среду роста (например, опилки) и превращение полимеров, находящихся в среде роста гриба, в мономеры и олигомеры.
4. Диффузия образовавшихся мономеров обратно в организм.
5. Рост и развитие организма.

Первые три стадии были имитированы с помощью потоковых уравнений. Четвёртая и пятая стадии уже были воплощены ранее в модели Вигонта [19, с. 380].

Стадия 1. Синтез ферментов грибом. Чем больше масса гриба, тем больше он способен выделить ферментов W_{ferm} в окружающую среду. В представленной модели гриб вырабатывает ферменты лигниназу и целлюлазу, которые разлагают лигнин и целлюлозу соответственно.

Выделение ферментов грибом зависит напрямую от массы через коэффициент «массовая доля фермента» W_f . Также на выделение ферментов влияют температура и кислотность, описанные через редуцирующие коэффициенты pH_f и T_f (1):

$$W_{ferm} = w_f \times W_m \times pH_f \times T_f \quad (1)$$

Стадия 2. Диффузия ферментов из гриба в компост. Выделившиеся ферменты – лигниназа и целлюлаза – должны диффундировать в окружающую гриб среду (дерево или опилки). Терминологически расширим область понятий для W_{ferm} . Когда эта величина относится к грибу (Fungi), мы используем обозначение W_{fermA} , а применительно к среде роста гриба, который микроорганизмами превратился в компост, величина по своему обозначению превратится в W_{fermC} (вес фермента в компосте – Compost).

Изменение массы фермента во времени dW_{fermC}/dt будет зависеть от изменения массы субстрата Sg и от двух параметров: температурного коэффициента K_t и эффективной площади MC_{seff} (2) – (4).

$$\frac{dW_{fermC}}{dt} = \frac{dS_g}{dt} K_t \times MC_{seff}, \quad (2)$$

$$K_t = K_0 \times \exp^{-\frac{GH}{T}}, \quad (3)$$

$$MC_{seff} = \frac{Sq_0 \times Sq}{Sq_m + Sq_c}, \quad (4)$$

где Sq_M – площадь организма, Sq_c – площадь компоста.

С помощью параметра «площадь компоста» можно учесть сразу несколько видов древесного компоста, а потом использовать средневзвешенное содержание лигнина в них, что упрощает расчёт.

После диффузии в компост начинается процесс его растворения ферментом.

Для отражения зависимости скорости ферментативных реакций от температуры и кислотности – используем теоретические данные (формулы Аррениуса и кинетические уравнения Фурсовой [20, с. 329]), которые мы здесь не приводим в виду их доступности в литературе.

Стадия 3. Разложение лигнина среды роста ферментом. Разложение основано на уравнении Михаэлиса (5)

$$v = \frac{s \times K_{cat} \times E_0}{K_M + s}, \quad (5)$$

где v – скорость разложения, s – количество субстрата (в нашем случае – древесины), K_{cat} – количество древесины, которую способна разложить одна единица фермента, E_0 – количество «единиц» фермента, K_m – константа Михаэлиса.

Мы усложнили данную формулу впоследствии через процедуры параметризации и валидации целой модели, а не отдельных формул, проверив корректность такого усложнения. Формула была усложнена в числителе. Как и в прошлой формуле, здесь были введены температурная и кислотная поправки pH_d и T_d (индекс d – от английского *Degradation*). Умножим уже имеющуюся скорость v на наши коэффициенты и на объём компоста V_c (6):

$$v_1 = v \times pH_d \times T_d \times V_c. \quad (6)$$

При этом

$$V_{max} = K_0 \times C_{fc} \times K_{er}, \quad (7)$$

где K_0 – кинетическая константа скорости ферментативной реакции, C_{fc} – концентрация фермента в компосте, K_{er} – ошибка параметризации, которая в этой части модели колеблется от 0,6 до 0,9.

Скорость разложения целлюлозы v_c зависит от того, насколько она разрушается без лигниновой оболочки v_{c_0} , и оттого, насколько уже разрушена её лигниновая оболочка. Коэффициент разложения лигниновой оболочки Sh_{lyg} рассчитывается как доля разложенного лигнина $S_{cgl_{ygmom}}$ от всей массы лигнина $S_{cgl_{ygppl}}$ (8) – (9):

$$Sh_{lyg} = \frac{S_{cgl_{ygmom}}}{S_{cgl_{ygmom}} + S_{cgl_{ygppl}}}, \quad (8)$$

$$v_c = Sh_{lyg} \times v_{c_0}. \quad (9)$$

3. Результаты исследования (моделирования)

3.1. Результаты в рамках биотехнологической цели

Параметризация без введения режима пастеризации. Для того чтобы моделировать внутри схемы DFBA (фоновый динамический анализ баланса потоков) два потока веществ для трёх организмов, изначально возникла необходимость верификации всех потоков веществ для одного организма – для модельного организма оригинальной модели Торнли. Результаты параметризации представлены в табл. 2.

В связи с тем, что для упрощения поиска данных к вешенке мы применили порядковую аналогию, о которой мы говорили выше, часть данных была заимствована из статьи Торнли [19, с. 379]. Дальнейшие цифровые эксперименты показывают, что аналогия была верной и модель соответствует экспериментальным данным.

Таблица 2. Параметризация модели

Наименования	Значения	Обозначения	Ссылки
Масса компоста	2 кг	m_c	[21, с. 12]
Вес организма	Вешенка – 8 г Триходерма – 1 г Бацилла – 8 г	m_{org}	[21, с. 12]
Массовая доля фермента в организме	0,0001	W_f	[22, с. 42] ¹
Константа пропорциональности диффузии потока из мицелия в компосте	0,0002	Z_{fm}	[23, с. 56], [24, с. 81]
Массовая доля целлюлозы и лигнина в компосте	Целлюлоза – 50 % Лигнин – 20 %	w_c	[25, с. 173]
Зависимость W_f от pH	Колоколообразная кривая	pH_f	[22, с. 42]
Зависимость W_f от T		T_f	
Изменение работы фермента от pH		pH_d	
Зависимость работы фермента от T		T_d	
Зависимость диффузии от T	Зависит от $K_0 = 0,7421$, $G_h = -7,46$	K_0, G_h	[26, с. 219], [27, с. 7591]
Объём изначально существующего в системе организма	см ³	V_o	[21, с. 12]
Ошибка, которую мы получаем, используя литературные данные для гриба вешенки	790	K_{er}	[8, с. 436]
Константа деполимеризации	Для лигнина: $0,95 \times 100 \times 10$, для целлюлозы: 1 900 000	K_{p_0}	[20, с. 332], [24, с. 81]

¹Необходимо учитывать, что в данной статье количество фермента указывается в международных единицах, которые не равны массе или объёму самого фермента

В нашем случае субстратные колебания выходят дальше за критическое значение теоретической прямой, параллельной оси абсцисс – Sm_{crit} [19, с. 380]. Происходит это из-за эффекта накопления субстрата в связи с работой ферментов гриба. В модели Торнли такого эффекта не наблюдалось, так как поступление мономеров было постоянным и равномерным. К тому же посевная масса мицелия у Торнли была ниже, чем стабильная масса мицелия.

Для исследования изменения поступления мономеров рассмотрим два графика. Первый график (рис. 1) показывает диффузию лакказы из мицелия в субстрат. Второй график (рис. 2) демонстрирует процесс деполимеризации целлюлозы.

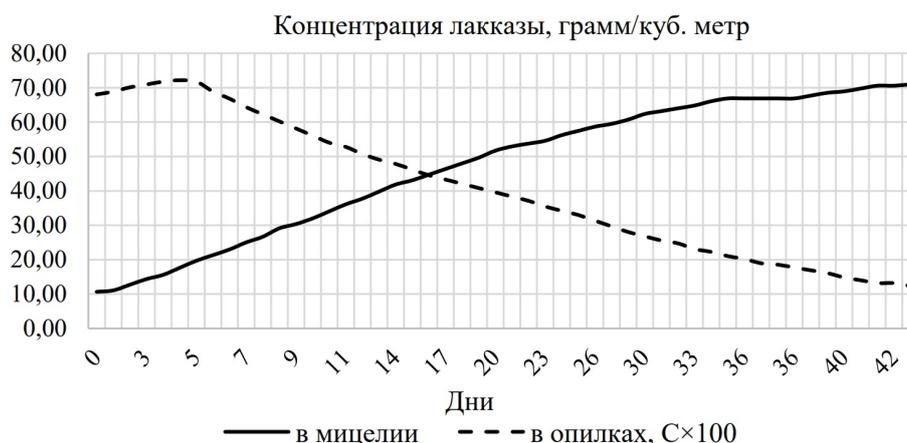


Рис. 1. Концентрация ферментов

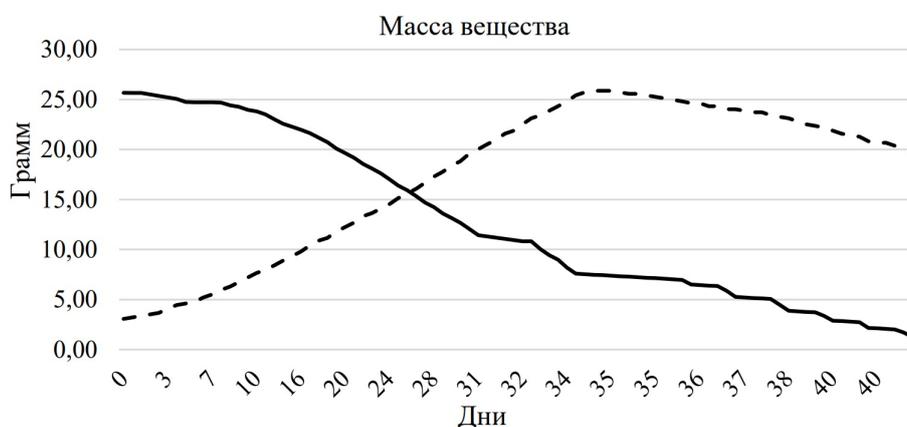


Рис. 2. Концентрация субстратов

Верификация модели с пастеризацией. Представленная модель была верифицирована по первой точке сбора спорофоров в эксперименте Анненкова, которая, с учётом пастеризации, имела место приблизительно спустя 800–850 ч после начала эксперимента. При этом на данных из модели Торнли было получено *в три раза большее количество спорофоров*, чем было в эксперименте Анненкова.

Дополнительно был учтён механизм инкапсуляции – уменьшения метаболизма старых гифов, в следствие чего получена параметризованная интегральная модель (рис. 3).

На правом нижнем графике показано снижение биомассы гриба. На левом нижнем графике представлена концентрация лигнина, умноженная на 100.

3.2. Результаты в рамках биотехнологической цели

В источнике [28] сделан вывод, что система наиболее устойчива близ прямой $w_m = w + A_m^0$. При проверке данного положения у нас получилось два вида ответов системы в виде изменения w_m в ответ на повышение A_m . Эти два вида приведены

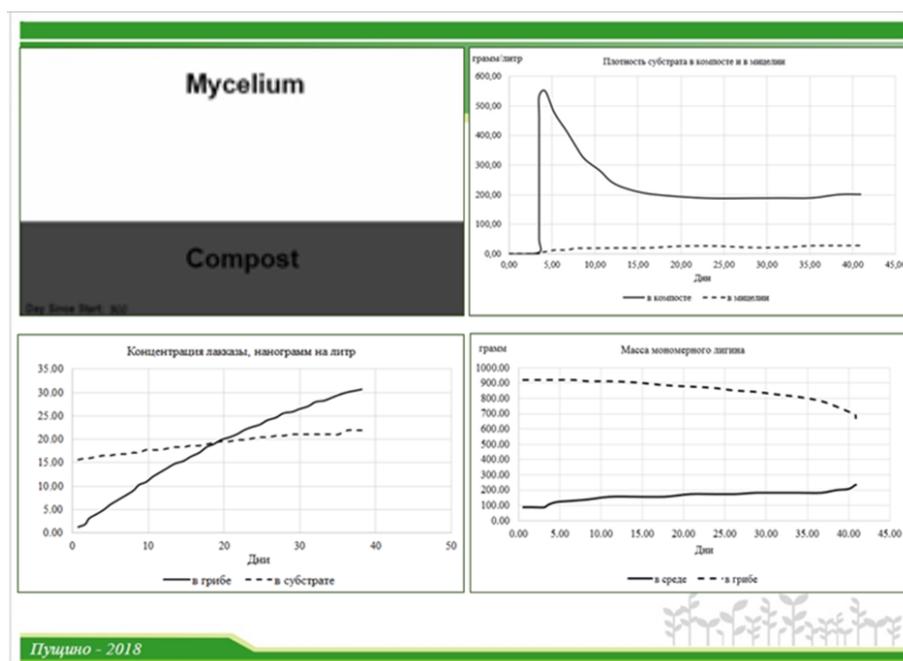


Рис. 3. Скриншот моделирования для случая предварительной микробиологической пастеризации

далее в виде схематических графиков, в обоих из них мы построили для графиков линии тренда $y = kx + b$, на обоих видах графиков мы наблюдаем подтверждение положительной взаимосвязи между W_m от A_m . В первом виде графиков на примере, полученном для изначально взятого мицелия $W_m^0 = 10$ грамм, мы наблюдаем, что линия тренда соответствует источнику [28], отсекая на оси ординат число, близкое к 10, и степень аппроксимации в целом показывает удовлетворительные результаты для упрощения кривой до прямой (рис. 4).

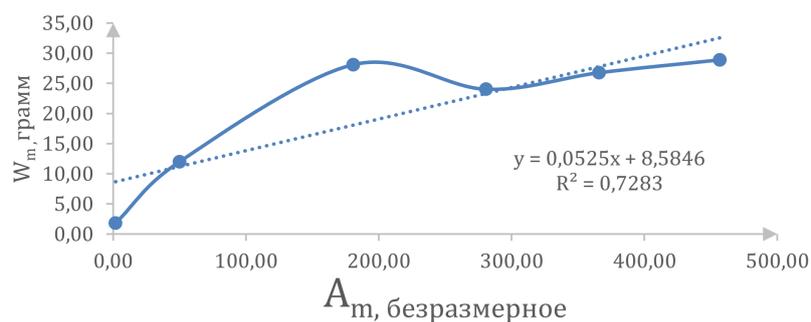


Рис. 4. Зависимость W_m от A_m для $W_m^0 = 10$ г, для 2000 ч моделирования

Второй вид графиков, который создан на в два раза больших модельных временах, не удовлетворяет параметрам линейной регрессии (рис. 5).

На обоих графиках мы видим «горб» в районе $A_m = 190$.

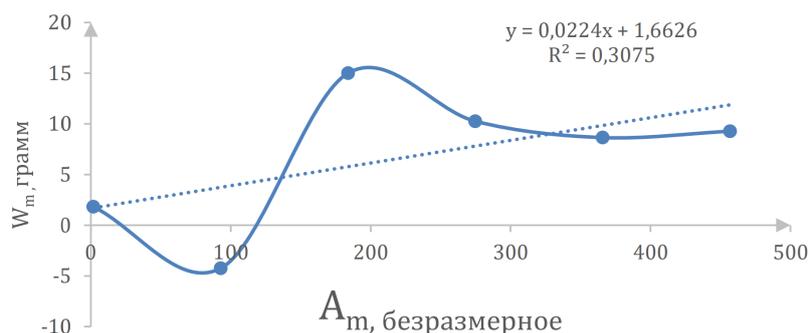


Рис. 5. Зависимость W_m от A_m для $W_m^0 = 10$ г, для 4000 ч моделирования

4. Обсуждение результатов

4.1. Обсуждение результатов в рамках биотехнологической цели

При рассмотрении результатов проведено обсуждение двух тезисов:

1. Насколько перспективна предложенная модель?
2. Переход от биотехнологии к экологии.

Для того чтобы представленная модель смогла работать с разными видами организмов, было использовано достаточно простое и неспецифическое ядро Торнли [23, с. 56] и [25, с. 174].

Изначально модель Торнли к тому же была аппроксиматической — т. е. являлась такой моделью, в которой нельзя достичь роста общей массы мицелия больше некоторого объёма.

Также не добавляет специфичности модели то, что используется параметр эффективной площади вкупе со средним содержанием лигнина в субстрате. В этом смысле данная модель может использоваться для получения неких быстрых теоретических выводов, можно ли вообще использовать какие-то организмы вместе, точных размеров предсказанного продукта можно не получить.

Кроме того, для моделирования необходимо знать точно, на каких параметрах какая максимальная масса может получиться. Максимальную массу, отличающуюся от уже имеющейся на практике в сторону увеличения, на модели получить нельзя. В ходе выполнения работы было выявлено, что при параметризации модели выходной результат — масса мицелия гриба — иногда достигает предельного значения низкой массы — свойство аппроксимизации изначальной модели Торнли.

Формула (9) не учитывает геометрическое строение частиц разлагаемого субстрата.

Однако все эти проблемы — эффективная площадь, средняя концентрация лигнина в субстрате и аппроксимация массы, отсутствие учёта геометрического строения частиц — могут стать плюсами при ином применении. В этом смысле полезно будет попробовать применить данную модель под экологические системы, в которых общая биомасса отдельных пищевых ступеней экологической пирамиды ограничена нижними и верхними ступенями.

У авторов статьи уже есть алгоритмы для создания модели, которая применима для описания процесса влияния грибов на цикл процессов, происходящих в почве

под их воздействием (N, P, C). В свою очередь, необходимо отметить, что и почва, благодаря своим биогеохимическим свойствам, влияет на растения, в том числе на грибы, на протяжении всего времени своего существования, в первую очередь предоставляя растительным сообществам питательные вещества вследствие их рециркуляции.

Такие механизмы происходят в результате смены растительных покровов и типов почв, движущей силой которого будет выступать не растительное наземное сообщество, как в классических научных исследованиях, а микробиологическое сообщество и сообщество высших грибов в почве под этими растительными сообществами.

4.2. Результаты в рамках математической цели

Мы проверяем, получится ли повторить прямую линию, регрессию зависимости A_m от W_m , которые были получены в источнике [28]. Внизу представлены два графика, один из которых похож на данный.

На обоих графиках мы видим «горб» в районе $A_m = 190$. Мы связываем это с разным результатом растворения компоста грибом на разных расстояниях вокруг самого гриба.

Гриб вокруг себя «разжижает» компост, чтобы потом легче его впитать. Для этого он должен выбросить в окружающую среду ферменты. Гриб может выбросить в среду ограниченное количество ферментов. A_m можно представить как разрешённый радиус, в который гриб выбрасывает ферменты. Чем больше A_m , тем больше радиус. Кратковременно назовём A_m радиусом выброса ферментов.

Пусть три разных гриба массой $W_m^0 = 10$ г выбрасывают ферменты, предположим, в количестве 10 микрограмм, в слой слизи в 2 мл объёмом, и они делают это каждый в свой радиус. Это будет три возрастающих в данном ряду радиуса $A_{m_1} = 0,1$ мм, $A_{m_2} = 2$ мм, $A_{m_3} = 7$ мм.

Первый радиус слишком маленький для 2 мл ферментов, второй – оптимальный, а третий – слишком большой. Это означает, что в первом случае ферменты могли бы растворить больше компоста, но у них не было такой возможности. Во втором случае ферменты растворили весь компост в своём радиусе действия. В третьем случае ферменты были разбросаны по слишком большому радиусу, 2 мл вокруг 10-граммового гриба не смогли разойтись по радиусу 7 мм так, чтобы растворение было достаточным.

Мы предположили, что у нас есть три радиуса, три случая. Раз в первом и третьем случае растворение было недостаточным, то гриб впитал меньше питательных веществ, потому меньше вырос, т. е. в первом и третьем случае параметр W_m меньше, что видно на рис. 6.

Но на рис. 5 мы видим, что перед «горбом» на 190 есть «впадина». Это может быть связано с увеличением времени эксперимента.

Уже к 2500 ч прирастает большее количество мицелия, чем ранее к 2000 ч. Это означает, что нужно больше энергии на поддержку массы мицелия, тем более что в середине мицелия все припасы уже давно израсходованы и мицелий получает припасы на периметре. Площадь мицелия растёт быстрее, чем периметр, и потому

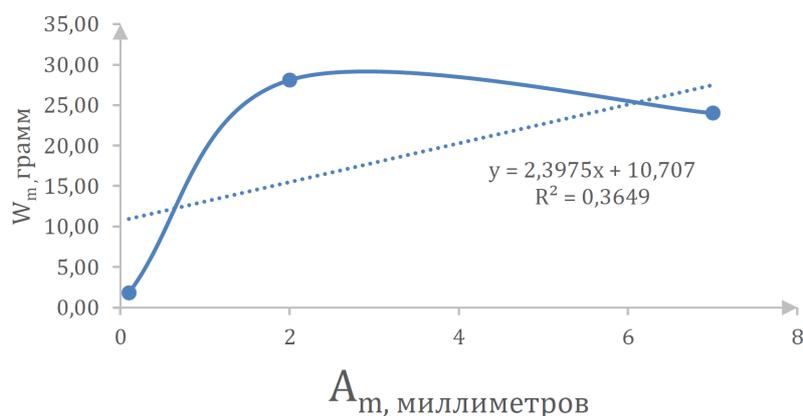


Рис. 6. Предположительная примерочная зависимость W_m от A_m для $W_m^0 = 20$ г, для 3000 ч моделирования

при увеличении радиуса гриба на самом деле будет уменьшаться относительное количество фермента, который может выбросить гриб в окружающую среду. То есть если гриб массой 10 г может выбросить 10 микрограмм фермента, то гриб массой 30 г уже не сможет выбросить 30 микрограмм, а сможет только, скажем, выбросить 15 микрограмм из-за увеличения трат на внутреннюю часть мицелия. Такое большое время поедания грибом старых запасов случается потому, что древесина, опилки, солома – достаточно медленно перевариваемые живыми системами продукты.

Как мы видели, оптимальные условия для роста мицелия для случая 2000 ч – это как раз таки «средние» значения A_m . Для большего времени у нас наблюдается энергодефицитное состояние: запасы у старого, изначально занесённого мицелия, израсходуются, и новая часть гриба начинает кормить старую. Чем лучше растёт мицелий, тем быстрее мы будем входить в энергодефицитное состояние.

Оттого получается, что те радиусы ферментативного распыливания, минимальный и максимальный, которые раньше давали прирост конечного мицелия на 2000 ч больше, на 3000 ч и выше наоборот позволяют за счёт меньшей скорости роста мицелия медленнее войти в энергодефицитное состояние.

Это позволяет мицелию дожидаться эффекта инкапсулирования, который предусмотрен в модели – со временем старые гифы начинают меньше взаимодействовать со средой, впадают в некую «гибернацию».

Таким образом, мы имеем три ситуации по скорости роста мицелия от минимальной к максимальной:

1. Если мицелий будет расти слишком медленно, то он не успеет переместиться на новое место кормления до того, как израсходует всю еду на старом месте кормления.
2. Если мицелий будет расти слишком быстро, внутренняя его часть не успеет перейти состояние инкапсуляции, затраты на внутреннюю часть вырастут, гриб перестанет выделять наружу ферменты и в конце концов начнёт погибать.
3. И только золотая середина позволит успеть перейти на новый участок кормления и одновременно не расти настолько быстро, чтобы новая часть мицелия вырастала раньше, чем инкапсулировалась старая.

Заключение

Несмотря на некоторые минусы, биотехнологическая методика работы с вешенкой на основе манипулирования кислотностью и температурой и разработанная на этой основе модель являются легко применимыми и могут быть взяты в работу биологами, а при необходимости изменены под другие объекты или дополнены даже в случае, если учёный не обладает навыками программирования и глубоким знанием высшей математики.

Свойства предложенной биотехнологической модели, а именно возможность отследить влияние кислотности и температуры на конечную биомассу, в особенности свойство замедлять метаболизм в процессе инкапсуляции могут иметь практическое применение в текущих исследованиях различных авторов, а также будут применены в будущем математическом исследовании авторов данной работы.

Уже сейчас можно предположить, что, скорее всего, будет необходимо отдельно ввести несколько новых категорий субстратов, что можно сделать довольно легко в среде AnyLogic. Таким образом, для получения более детальной модели необходимо проведение дальнейшего исследования, в котором будут установлены более точные параметры выращивания грибов. Для этого было бы желательно пригласить к соавторству микологов и биотехнологов. Также автор планирует использовать модель алгоритмов влияния грибов на сукцессию, для чего можно запросить помощь экологов.

Найденная теория «золотой середины» для параметра A_m может быть применена для анализа роста экологических сообществ и смены видов растений и грибов, т. е. с помощью этой модели можно моделировать сукцессии. В литературе нами не было найдено достаточно чётких теорий о том, как смена грибов вызывает изменения в почве и как эти изменения влияют на смену поколений растений в сукцессии. Теория «золотой середины» может быть применена и к развитию экологических сообществ: этапу сукцессии грибов, который может начинаться, скажем, на изменчивом рельефе в низинах или наоборот, на верхах, нельзя распространяться слишком быстро или медленно, для всего должны быть свои оптимальные критерии, сукцессия грибов не может слишком быстро или медленно менять свой субстрат-почву.

Литература

1. Комин П.А. Искусственное выращивание гриба шиитакэ (*lentinula edodes* (berk.) pegler) на хвойных опилках // Вестник КрасГАУ. 2016. № 11. С. 15–19.
2. Mayuzumi Y., Mizuno T. III. Cultivation methods of maitake (*Grifola frondosa*) // Food Reviews International. 2006. Vol. 13, No. 3. P. 357–364.
3. Минаков Д.В. Культивирование *Grifola frondosa* на субстрате с березовыми опилками // Техника и технология пищевых производств. 2016. Т. 40, № 1. С. 39–45.
4. Ma Y., Li X., Fu Z., Zhang L. Structural design and thermal performance simulation of shade roof of double-slope greenhouse for mushroom-vegetable cultivation // International Journal of Agricultural and Biological Engineering. 2019. Vol. 12, No. 3. P. 126–133.

5. Jung K.H., Yun J.W., Kang K.R., Lim J.Y., Lee J.H. Mathematical model for enzymatic production of fructo-oligosaccharides from sucrose // *Enzyme and microbial technology*. 1989. Vol. 11, No. 8. P. 491–494.
6. Mahomoodally M.F., Gurib-Fakim A., Subratty A.H. A kinetic model for in vitro intestinal uptake of L-tyrosine and D (+) glucose across rat everted gut sacs in the presence of *Momordica charantia*, a medicinal plant used in traditional medicine against diabetes mellitus // *Journal of Cell and Molecular Biology*. 2004. No. 3. P. 39–44.
7. Liang Y., Leonard J.J., Feddes J.J., McGill W.B. A simulation model of ammonia volatilization in composting // *Transactions of the ASAE*. 2004. Vol. 47, No. 5. P. 1667–1680.
8. Xiong Z., Liu W., Zhou L., Zou L., Chen J. Mushroom (*Agaricus bisporus*) polyphenoloxidase inhibited by apigenin: Multi-spectroscopic analyses and computational docking simulation // *Food Chemistry*. 2016. No. 203. P. 430–439.
9. Kemanian A.R., Stöckle C.O. C-Farm: A simple model to evaluate the carbon balance of soil profiles // *European Journal of Agronomy*. 2010. Vol. 32, No. 1. P. 22–29.
10. Spokas L.A., Veneman P.L.M., Simkins S.C., Long S.C. Performance Evaluation of a Constructed Wetland Treating High-Ammonium Primary Domestic Wastewater Effluent // *Water environment research*. 2010. Vol. 82, No. 7. P. 592–600.
11. Drake J.E., Darby B.A., Giasson M.-A., Kramer M.A., Phillips R.P., Finzi A.C. Stoichiometry constrains microbial response to root exudation—insights from a model and a field experiment in a temperate forest // *Biogeosciences*. 2013. Vol. 10, No. 2. P. 821–838.
12. Michel Jr, Grulke E.A., Reddy C.A. A kinetic model for the fungal pellet lifecycle // *AICHe journal*. 1992. Vol. 38, No. 9. P. 1449–1460.
13. Yu L., Ahrens B., Wutzler T., Schrumpf M., Zaehle S. Jena Soil Model (JSM v1. 0; revision 1934): a microbial soil organic carbon model integrated with nitrogen and phosphorus processes // *Geoscientific Model Development*. 2020. Vol. 13, No. 2. P. 783–803.
14. McGill W.B., Hunt H.W., Woodmansee R.G., Reuss J.O. Phoenix, a model of the dynamics of carbon and nitrogen in grassland soils // *Ecological Bulletins*. 1981. No. 33. P. 49–115.
15. Huang Y., Guenet B., Ciais P., Janssens I.A., Soong J.L., Wang Y., Goll D., Blagodatskaya E., Huang, Y. ORCHIMIC (v1. 0), a microbe-mediated model for soil organic matter decomposition // *Geoscientific Model Development*. 2018. Vol. 11, No. 6. P. 2111–2138.
16. Анненков Б.Г., Азарова В.А. Использование *Vacillus cereus* в создании качественных избирательных субстратов для интенсивного культивирования вешенки обыкновенной // *Дальневосточный аграрный вестник*. 2008. No. 2 (6). С. 10–18.
17. Довженко Л.В. Биотехнологический потенциал бактерий рода *Vacillus* // *Современные достижения фармацевтической науки и практики*. 2019. С. 179–181.
18. Мун Т.Х. Микробиологический метод агротехники. Хабаровск: Стат. управление, 2004.
19. Вигонт В.А., Миронычева Е.С., Топаж А.Г. Модификация модели роста грибов Чантера–Торнли и её анализ средствами многоподходного имитационного моделирования // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2015. Т. 7, № 2. С. 375–385.
20. Фурсова П.В., Надежина О.С., Лаврова А.И., Кадималиев Д.А., Ризниченко Г.Ю. Математическая модель функционирования лакказы внеклеточного лигнолитического комплекса гриба *Ranus Tigrinus*. PH зависимость работы фермента // *Математика. Компьютер. Образование. МКО*. 2007. Т. 2. С. 327–334.
21. Анненков Б.Г., Азарова В.А. Методика совмещения процессов интенсивного культивирования вешенок в стеклбанках и наработки субстратного инокулюма для экстенсивного грибоводства // *Дальневосточный аграрный вестник*. 2008. № 4(8). С. 10–15.

22. Pal S., Sinha P., Bose S. Production of Laccase from *Pleurotus sajor (caju)* in liquid state fermentation and study of degradation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon // *The journal of bioprocess technology*. 2014. No. 100. P. 462–487.
23. Chanter D.O., Thornley J.H. Mycelial M. Growth and the initiation and growth of sporophores in the mushroom crop: a mathematical model // *Microbiology*. 1978. Vol. 106, No. 1. P. 55–65.
24. Chanter D.O. Harvesting the mushroom crop: a mathematical model // *Microbiology*. 1979. Vol. 115, No. 1. P. 79–87.
25. Гагарина И.Н., Ботуз Н.И., Горьков А.А., Козина Н.С. Переработка соломы овса // *Теоретические и прикладные аспекты современной науки*. 2014. № 5-1. С. 173–175.
26. Canzano S., Iovino P., Leone V., Salvestrini S., Capasso S. Use and misuse of sorption kinetic data: A common mistake that should be avoided // *Adsorption Science & Technology*. 2012. Vol. 30, No. 3. P. 217–225.
27. Hubbe M.A., Azizian S., Douven S. Implications of apparent pseudo-second-order adsorption kinetics onto cellulosic materials: A review // *BioResources*. 2019. Vol. 14, No. 3. P. 7582–7626.
28. Володченкова Л.А., Гуц А.К. Анализ роста мицелия на основе модели Чантера–Торнли // *Математические структуры и моделирование*. 2020. № 1 (53). С. 77–81.

MODEL OF GROWTH OF LIGNIN-DEGRADING ORGANISMS DURING THEIR SYMBIOSIS: A INVESTIGATION BASED ON THE MATHEMATICAL THEORY OF BIFURCATIONS

A.S. Shumilov

Ph.D.(Agricultural Sciences), Senior Researcher,
e-mail: anatoliy.sergreevich.shumilov@gmail.com

Institute of Physico-Chemical and Biological Problems of Soil Science, Pushchino, Russia

Abstract. Available scientific works in the field of mycology have shown that it is economically profitable to work with wood processing waste and agricultural waste. Therefore, research in this area needs to be developed and strengthened with more complex models that work with lignin-degrading organisms. In this article, the author proposes a model for the microbiological and fungal decomposition of lignin, which allows working with several organisms, substrates, temperatures and acidity. This model is parameterized and verified for the growth of oyster mushroom *Pleurotus ostreatus* on woody substrates. As input, the model receives kinetic rate constants of biochemical reactions in the body, as well as diffusion constants. The order of flows in the model within one organism is as follows: synthesis of enzymes in the body; their diffusion into the compost, then the decomposition of compost polymers into monomers; then diffusion of monomers into the body occurs. At all stages, interaction between different organisms occurs (symbiosis or competition). The model is parameterized and verified. A new theoretical biotechnological method of working with oyster mushrooms, based on the manipulation of acidity and temperature, can be easily applied in practice and, if necessary, modified or supplemented, depending on the tasks, by biologists unfamiliar with programming and higher mathematics.

Keywords: fungal growth model, Thornley's model, lignin destructors, biotechnological model, oyster mushrooms *Pleurotus ostreatus*, organisms – lignin destructors.

Дата поступления в редакцию: 28.05.2024

ВОЗМОЖНОСТИ ИИ В СФЕРЕ КИБЕРБЕЗОПАСНОСТИ: ВОПРОСЫ ОБНАРУЖЕНИЯ, ПРЕДОТВРАЩЕНИЯ И РЕАГИРОВАНИЯ НА SQL-ИНЪЕКЦИИ, XSS- И CSRF-АТАКИ

Д.Э. Вильховский

старший преподаватель, e-mail: vilkhovskiy@gmail.com

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

Аннотация. Представлен обзор возможностей применения искусственного интеллекта для усиления кибербезопасности веб-приложений с акцентом на обнаружение, предотвращение и реагирование на SQL-инъекции, XSS- и CSRF-атаки. Обсуждаются методы машинного обучения, такие как SVM, наивный байесовский алгоритм, ансамблевое и глубокое обучение, а также их интеграция с существующими системами безопасности. Включены гибридные модели и подходы к адаптации систем к новым угрозам. Также анализируются существующие проблемы и определены направления будущих исследований для преодоления этих вызовов.

Ключевые слова: компьютерная безопасность, информационная безопасность, кибербезопасность, SQL-инъекции, XSS-атаки, CSRF-атаки, машинное обучение, искусственный интеллект.

Введение

В современном мире киберугрозы становятся всё более сложными и разнообразными, что требует от организаций постоянного совершенствования своих стратегий информационной безопасности. Согласно отчёту по кибербезопасности [1], в 2023 г. наблюдался значительный рост кибератак. В частности, такие атаки, как SQL-инъекции, XSS и CSRF, остаются одними из наиболее распространённых и опасных. Например, согласно этому отчёту, в 2023 г. было зафиксировано более крупных 2,700 организаций, пострадавших от уязвимости SQL-инъекций. Эти атаки могут привести к утечке конфиденциальной информации и нарушению работы систем, что делает их приоритетной целью для предотвращения и реагирования.

Одной из ключевых технологий, способных значительно повысить уровень защиты, является искусственный интеллект (ИИ). Используя сложные алгоритмы, ИИ может быстро выявлять подозрительные паттерны и аномалии, что позволяет предотвращать атаки на ранних стадиях. Это особенно важно в условиях, когда атаки становятся всё более изощрёнными и частыми. Кроме того, ИИ может значительно сократить время и ресурсы, необходимые для реагирования на инциденты.

Таким образом, интеграция ИИ в системы кибербезопасности, особенно в области обнаружения, предотвращения и реагирования на SQL-инъекции, XSS и

CSRF-атаки, является актуальной и необходимой мерой для защиты организаций от современных киберугроз.

1. Возможности ИИ в обнаружении, предотвращении и реагировании на SQL-инъекции

Атаки с использованием SQL-инъекций остаются значительной угрозой для веб-приложений, используя уязвимости для получения несанкционированного доступа к базам данных, а также позволяя злоумышленникам выполнять несанкционированные SQL-команды. Поэтому необходимо разрабатывать решения, позволяющие повысить надёжность защиты организаций от SQL-инъекций, одним из которых является использование ИИ.

Проведём краткий обзор возможностей ИИ в обнаружении, предотвращении и реагировании на SQL-инъекции.

1.1. Возможности использования ИИ в области обнаружения SQL-инъекций

Использование ИИ повышает эффективность обнаружения атак с использованием SQL-инъекций.

- 1.1.1. Метод опорных векторов и наивный байесовский алгоритм.** Данные алгоритмы могут эффективно использоваться для обнаружения и классификации атак с использованием SQL-инъекций. Исследование [2] показало, что использование метода опорных векторов (SVM) позволяет определить SQL-инъекции в 99,08 %. В работе [3] наивный байесовский алгоритм также характеризуется как наиболее эффективная модель с показателем обнаружения 97,06 %. Наконец, согласно исследованиям [4] и [5], интерпретируемость моделей SVM и наивного байесовского алгоритма также находится на высоком уровне, что подчёркивает необходимость их использования в процессах принятия решений при классификации SQL-команд. Указывается, что, постоянно обновляя данные для обучения, эти модели могут быстро адаптироваться к новым шаблонам атак.
- 1.1.2. Ансамблевое обучение.** Такие методы, как Random Forest и AdaBoost, показали себя многообещающими в обнаружении SQL-инъекций. В работах [6] и [3] подчёркивается эффективность использования ансамблевых методов, таких как Gradient Boosting Machine (GBM) и Light Gradient Boosting Machine (LGBM), достигающих высокой точности и низкого уровня ложных срабатываний. В исследовании [7] предлагается архитектура глубокого обучения с использованием автокодировщиков RNN, точность которой достигает 94 %.
- 1.1.3. Модели глубокого обучения.** Сверточные нейронные сети (CNN) и сети с долговременной краткосрочной памятью (LSTM) использовались для обнаружения атак SQL-инъекций. Подход на основе CNN, разработанный и описанный в работе [8], продемонстрировал более высокую точность и устойчивость

к запутыванию по сравнению с традиционными методами. Исследование [9] также показывает высокую точность этих моделей в захвате синтаксиса и семантических особенностей SQL-запросов. В целом использование глубокого обучения повышает способность системы обобщать данные обучения, повышая точность обнаружения.

4. **Гибридные модели.** Гибридная модель CNN-BiLSTM, предложенная в работе [10], также позволяет достигнуть высокой точности в обнаружении атак SQL-инъекций, используя для повышения эффективности обнаружения сильные стороны свёрточных нейронных сетей и сетей с долговременной краткосрочной памятью.
5. **Извлечение признаков и векторизация.** В исследованиях [11, 12] рассматриваются вопросы интеграции этих методов с моделями машинного обучения, позволяющими повысить точность обнаружения SQL-инъекций посредством предварительной обработки SQL-запросов для лучшей методы классификации.
6. **Семантическое обучение.** Так, в работе [13] для улучшения обнаружения SQL-инъекций путём внедрения семантической информации на уровне предложений из SQL-операторов предлагается использование моделей семантического обучения, таких как `synBERT`.
7. **Генеративно-сопоставительные сети (GAN).** В работе [13] описывается использование GAN для генерации образцов SQL-инъекций. Отмечается, что это позволяет улучшить обучающие наборы данных для моделей обнаружения.
8. **Адаптивный глубокий лес (Adaptive Deep Forest).** В исследовании [14] предлагается использование метода Адаптивного глубокого леса. Доказывается, что данный метод позволяет оптимизировать структуру в соответствующих алгоритмах для обработки сложных атак SQL-инъекций, демонстрируя лучшую производительность, чем классические методы машинного обучения.

1.2. Возможности использования ИИ в области предотвращения атак с использованием SQL-инъекций

Интегрируя ИИ в стратегии предотвращения SQL-инъекций, организации могут значительно повысить уровень своей безопасности.

1. **Брандмауэры веб-приложений с встроенными ИИ-инструментами.** Интеграция ИИ в сетевые экраны повышает их способность обнаруживать и блокировать вредоносные SQL-запросы. Например, в работе [15] рассматривается, как фреймворк с использованием ИИ позволяет выявлять и смягчать попытки SQL-инъекции, даже когда злоумышленники используют методы мутации.

2. **Методы глубокого обучения.** В исследовании [9] доказывається, что посредством изучения сложных шаблонов в SQL-запросах CNN и рекуррентные нейронные сети (RNN) способны предотвращать даже сложные атаки.
3. **Гибридные модели.** Объединение различных методов ИИ может улучшить возможности предотвращения. Например, в работе [16] отмечается, что гибридный подход, использующий как статический, так и динамический анализ, может эффективно предотвращать атаки SQL-инъекций, анализируя структуры запросов и поведение во время выполнения.
4. **Применении ИИ для безопасного кодирования.** В исследованиях [17, 18] рассматриваются возможности ИИ в обеспечении соблюдения методов безопасного кодирования, таких как использование параметризованных запросов и проверка ввода пользователя. Также инструменты на основе ИИ могут автоматически анализировать код на наличие уязвимостей, предлагая улучшения для предотвращения атак с использованием SQL-инъекций, что помогает разработчикам выявлять и устранять потенциальные проблемы безопасности до того, как они будут использованы.

1.3. Возможности использования ИИ в области реагирования на атаки с использованием SQL-инъекций

Механизмы реагирования на атаки с использованием SQL-инъекций имеют решающее значение для смягчения воздействия этих угроз после их обнаружения. Решения на основе ИИ предлагают расширенные возможности для реагирования и смягчения в реальном времени, повышая безопасность веб-приложений.

1. **Автоматизированные системы реагирования с использованием моделей машинного обучения.** В работах [19, 20] указывается, что использование моделей машинного обучения, таких как основанные на архитектурах глубокого обучения, позволяет не только быстро идентифицировать вредоносные запросы, но и немедленно применять контрмеры. Например, эти системы могут выполнять предопределённые протоколы реагирования, такие как изоляция затронутых систем или откат вредоносных транзакций, чтобы минимизировать ущерб [21].
2. **Динамическая очистка запросов с использованием ИИ.** В исследовании [22] рассматриваются вопросы динамической очистки SQL-запросы инструментами, использующими алгоритмы ИИ, и отмечается, что использование ИИ действительно позволяет быстро предотвратить выполнение вредоносного кода.
3. **Интеграция с системами обнаружения вторжений (IDS).** IDS-системы с использованием ИИ-инструментов позволяют улучшить их возможности обнаружения и реагирования. Так, используя алгоритмы машинного обучения, эти системы могут лучше определять аномальное поведение, указывающее на попытки SQL-инъекций, и инициировать соответствующие ответы [23].

2. Возможности ИИ в обнаружении, предотвращении и реагировании на XSS-атаки

Атаки с подделкой межсайтовых запросов (Cross-Site Request Forgery, CSRF-атаки) представляют собой серьёзную угрозу для веб-приложений, позволяя злоумышленникам выполнять несанкционированные действия от имени пользователей. Применение ИИ в этой области позволяет автоматизировать процесс обнаружения и реагирования на такие угрозы.

2.1. Возможности использования ИИ в области обнаружения XSS-атак

ИИ предоставляет значительные возможности для обнаружения XSS-атак.

1. **SVM и наивный байесовский алгоритм.** Исследование [24] оценивает несколько методов машинного обучения, включая SVM и наивный байесовский алгоритм, улучшенные с помощью метода n-грамм, помогающего захватывать последовательность символов в скриптах для улучшения производительности обнаружения. Указывается, что эффективность данного подхода была протестирована в реальных сценариях и позволяет достигать точности обнаружения в 98 %.
2. **Гибридные модели машинного обучения.** Использование гибридных моделей, таких как комбинация CNN и методов машинного обучения, позволяет эффективно выявлять XSS-атаки. Например, в исследовании [25] предложена модель, которая сочетает CNN и LSTM для повышения точности обнаружения XSS-атак. CNN используется для извлечения признаков из входных данных, а LSTM помогает анализировать временные зависимости и контекстуальные семантики. Это позволяет системе более точно идентифицировать вредоносные скрипты, даже если они замаскированы под легитимные запросы.
3. **Глубокое обучение.** В исследовании [26] изучается использование моделей глубокого обучения, таких как CNN и LSTM, которые могут фиксировать как пространственные, так и временные характеристики веб-запросов. А в исследовании [27] для улучшения обнаружения XSS-атак используются гибридные семантические вложения. Объединяя семантический анализ с традиционным машинным обучением, эти модели могут лучше понимать намерения, стоящие за веб-запросами, что приводит к улучшению показателей обнаружения.
4. **Использование векторизации и алгоритмов машинного обучения.** Применение TF-IDF векторизации и One Class SVM для обнаружения XSS-атак позволяет эффективно выявлять аномалии без необходимости включения данных об атаках в обучающую выборку [28]. Этот подход помогает преобразовать текстовые данные в числовые векторы, что облегчает их анализ. В свою очередь, One Class SVM обучается на нормальных данных и выявляет отклонения, которые могут указывать на наличие XSS-атак. Этот метод особенно полезен в условиях, когда данные об атаках ограничены или отсутствуют, так как он позволяет выявлять новые и неизвестные угрозы.

5. **Глубокое обучение и нейронные сети.** Использование глубоких нейронных сетей, таких как LSTM, для анализа временных зависимостей и контекстуальных семантик в XSS-пейлоудах позволяет улучшить обнаружение и предотвращение XSS-атак [29]. LSTM способны учитывать последовательность символов и их взаимосвязь, что делает их эффективными для анализа сложных текстовых данных. Это особенно важно для XSS-атак, где вредоносный код может быть замаскирован под легитимные запросы. Глубокое обучение позволяет системе адаптироваться к новым типам атак и улучшать свои модели на основе полученных данных.
6. **Модели на основе генеративных сетей.** Применение генеративных моделей помогает создавать синтетические данные для обучения систем обнаружения XSS-атак, что особенно полезно в условиях ограниченных данных, так как позволяет расширить обучающую выборку и улучшить точность обнаружения. Например, в исследовании [30] изучается использование GAN для создания состязательных XSS-атак, повышающих надёжность систем обнаружения. В работе [31] исследуются такие генеративные сети, как Wasserstein GAN с градиентным штрафом, авторы приходят к выводу об их высокой эффективности.
7. **Интеграция с существующими системами безопасности.** Внедрение ИИ в существующие системы безопасности, такие как межсетевые экраны и системы предотвращения вторжений, позволяет автоматизировать процессы обнаружения и реагирования на XSS-атаки [32]. ИИ может анализировать сетевой трафик в реальном времени, выявлять аномалии и автоматически блокировать подозрительные запросы. Это повышает общую эффективность защиты и снижает количество ложных срабатываний. Интеграция ИИ с существующими системами также позволяет улучшить их адаптивность и способность реагировать на новые угрозы.
8. **Графовые свёрточные сети (GCN).** Обеспечивают более полное понимание потенциальных угроз. В работе [33], посвящённой использованию GCN для обнаружения XSS, предлагается модель, которая эффективно идентифицирует полезные нагрузки XSS, используя графовые признаки, что фиксирует отношения между различными частями веб-запроса, обеспечивая более полное понимание потенциальных угроз.

2.2. Возможности использования ИИ в области предотвращения XSS-атак

Представленные ниже стратегии демонстрируют, как ИИ может быть использован в области предотвращения XSS-атак.

1. **Методы контролируемого обучения.** Модели машинного обучения, такие как метод опорных векторов и наивный байесовский алгоритм, используются для классификации и предотвращения атак XSS. Эти модели обучаются на наборах данных, содержащих как безвредные, так и вредоносные скрипты, что позволяет им распознавать и блокировать потенциальные угрозы [34].

2. **Глубокое обучение.** В работе [35] рассматривались возможности модели глубокого обучения, такие как LSTM-Attention, для обнаружения атак XSS с фокусом на критических частях входных данных, что позволяет предотвращать достаточно сложные атаки.
3. **Гибридные модели машинного обучения.** Использование гибридных моделей, таких как комбинация CNN и методов машинного обучения, позволяет эффективно выявлять XSS-атаки. Эти модели обучаются на больших наборах данных, что повышает их точность и устойчивость к новым типам атак [26].
4. **Использование генеративных моделей.** Применение генеративных моделей, таких как Wasserstein GAN с градиентным штрафом, помогает создавать синтетические данные для обучения систем обнаружения XSS-атак. Это особенно полезно в условиях ограниченных данных, что позволяет улучшить точность обнаружения [36].
5. **Интеграция с существующими системами безопасности.** Внедрение ИИ в существующие системы безопасности, такие как межсетевые экраны и системы предотвращения вторжений, позволяет автоматизировать процессы обнаружения и реагирования на XSS-атаки. Это повышает общую эффективность защиты и снижает количество ложных срабатываний [37]. При этом такие системы могут учиться на моделях трафика и адаптироваться к новым угрозам, обеспечивая динамический механизм защиты.
6. **Обучение на основе естественного языка.** Применение моделей обработки естественного языка, таких как BERT и BiLSTM, для извлечения и анализа текстовых данных помогает более эффективно выявлять вредоносные скрипты и предотвращать XSS-атаки [38].

2.3. Возможности использования ИИ в области реагирования на XSS-атаки

Системы с использованием ИИ могут автоматически реагировать на атаки XSS в реальном времени, что позволяет смягчить атаки до того, как они смогут причинить вред. Интегрируя ИИ в механизмы реагирования на XSS-атаки, организации могут значительно повысить свои возможности по смягчению этих угроз.

1. **Динамическая фильтрация контента.** Инструменты на основе ИИ могут динамически фильтровать и очищать веб-контент, чтобы предотвратить выполнение вредоносных скриптов. Это включает анализ входящих данных и их изменение для удаления потенциально опасных элементов до того, как они попадут к пользователю [39].
2. **IDS-системы с использованием ИИ.** Модели ИИ могут быть интегрированы с существующими IDS для улучшения их возможностей обнаружения и реагирования. Используя алгоритмы машинного обучения, эти системы могут лучше определять аномальное поведение, указывающее на попытки

XSS-атак, и запускать соответствующие ответы, а также производить оценку эффективности реагирования и обновления моделей обнаружения на основе новых идей [40].

3. **Адаптивное обучение и реагирование.** Системы ИИ могут адаптироваться к новым шаблонам атак, постоянно обучаясь на обнаруженных угрозах. Эта адаптивная способность позволяет совершенствовать стратегии реагирования, гарантируя, что система остаётся эффективной против развивающихся методов XSS-атак [41].

3. Возможности ИИ в обнаружении, предотвращении и реагирования на CSRF-атаки

CSRF (Cross-Site Request Forgery) — это тип кибератаки, в которой злоумышленник обманом заставляет пользователя выполнить нежелательные действия на веб-сайте, на котором он аутентифицирован. Эта атака эксплуатирует доверие веб-приложения к аутентифицированным пользователям, отправляя запросы от их имени, что может привести к нежелательным изменениям в данных или настройках. Искусственный интеллект может помочь в противодействии CSRF-атакам, включая их обнаружение, предотвращение и реагирование на них.

3.1. Возможности использования ИИ в области обнаружения CSRF-атак

Методы обнаружения на основе ИИ позволяют повысить эффективность обнаружения этих атак, используя сильные стороны машинного обучения и расширенного анализа данных для обеспечения надёжной защиты от развивающихся угроз.

1. **Использование алгоритмов машинного обучения.** Использование алгоритмов машинного обучения позволяет, в том числе, проводить анализ исторических данных о трафике и выявления признаков CSRF-атак. Так, в работе [42] предложено использование методов кластеризации и классификации для идентификации подозрительных запросов.
2. **Графовый анализ.** Например, в работе [43] исследовалась эффективность использования для обнаружения CSRF-уязвимостей графового анализа. Исследования показали высокую эффективность использования таких моделей.
3. **Методы ансамблевого обучения.** Например, в [44] исследуются ансамблевые модели Extreme Gradient Boosting и Extra Trees. На наш взгляд, их производительность позволит обеспечить высокую эффективность при выявлении CSRF-атак.

3.2. Возможности использования ИИ в области предотвращения CSRF-атак

В области предотвращения CSRF-атак применение ИИ также позволяет повысить эффективность решений и их адаптивность к новым угрозам.

1. **Самообучающиеся системы.** Разработка интеллектуальных систем, которые могут адаптироваться к новым угрозам и автоматически обновлять свои модели обнаружения. Такие системы могут использоваться для постоянного мониторинга и анализа сетевого трафика, что позволяет своевременно выявлять и блокировать попытки CSRF-атак [45].
2. **Интеграция с существующими системами безопасности.** ИИ может быть интегрирован с существующими системами безопасности для улучшения их эффективности. Это включает в себя использование ИИ для автоматизации процессов реагирования на инциденты и улучшения точности обнаружения угроз [46].
3. **Разработка гибких стратегий.** Использование ИИ для разработки стратегий, которые могут адаптироваться к изменяющимся условиям и новым типам атак. Это может включать в себя использование гибридных моделей, которые комбинируют различные подходы к обнаружению и предотвращению атак [46].
4. **Использование алгоритмов машинного обучения для поведенческого анализа.** Системы ИИ могут анализировать поведение пользователя и шаблоны запросов для обнаружения аномалий, которые могут указывать на атаку CSRF. Это включает в себя мониторинг необычной активности, которая отклоняется от обычных взаимодействий пользователя. Исследование [42] демонстрирует эффективность использования машинного обучения для анализа взаимодействий пользователя и атрибутов сеанса в режиме реального времени.
5. **Использование алгоритмов машинного обучения для анализа трафика.** Модели машинного обучения можно использовать для анализа веб-трафика и выявления запросов, не имеющих анти-CSRF-токенов. Например, в работе [46] предлагается метод пассивного обнаружения CSRF-устойчивых запросов путем анализа шаблонов трафика с использованием алгоритмов машинного обучения.
6. **Интеграция ИИ с сетевыми экранами.** ИИ может улучшить возможности брандмауэров, предоставляя интеллектуальную фильтрацию и блокировку вредоносных запросов. Эта интеграция позволяет более точно обнаруживать и предотвращать CSRF атаки, используя способность ИИ к обучению и адаптации к новым угрозам [46].

3.3. Возможности использования ИИ в области реагирования на CSRF-атаки

Решения на основе ИИ позволяют обеспечить возможности динамического реагирования в реальном времени.

1. **Обнаружение и смягчение в реальном времени.** Системы ИИ могут автоматически обнаруживать и реагировать на атаки CSRF в реальном времени.

Используя модели машинного обучения, эти системы могут быстро идентифицировать подозрительные запросы и применять контрмеры для предотвращения несанкционированных действий [39]

2. **Интеграция ИИ с IDS.** Модели ИИ могут быть интегрированы с существующими IDS для улучшения их возможностей обнаружения и реагирования. Используя алгоритмы машинного обучения, эти системы могут лучше идентифицировать аномальное поведение, указывающее на попытки CSRF, и инициировать соответствующие ответы [23].
3. **Использование машинного обучения для анализа и обучения после атаки.** После атаки системы ИИ могут анализировать инцидент, чтобы выявлять уязвимости и улучшать будущие стратегии реагирования. Это включает оценки эффективности реагирования и обновления моделей обнаружения на основе новых идей [46].

4. Проблемы использования ИИ в кибербезопасности и направления будущих исследований

В качестве основных проблем использования ИИ в кибербезопасности можно выделить:

- **Обучение на ограниченных данных.** Для эффективного обучения моделей ИИ требуется большое количество данных. Однако в кибербезопасности часто наблюдается нехватка данных о реальных атаках, что затрудняет обучение и тестирование моделей.
- **Адаптация к новым угрозам.** Киберугрозы постоянно эволюционируют, и модели ИИ должны быстро адаптироваться к новым типам атак. Это требует постоянного обновления и дообучения моделей, что может быть ресурсозатратным процессом.
- **Этичность и конфиденциальность.** Использование ИИ в кибербезопасности поднимает вопросы этичности и конфиденциальности, особенно в контексте обработки персональных данных. Необходимо разрабатывать методы, которые обеспечивают защиту данных пользователей.

В то же время, на наш взгляд, указанные ниже направления исследований помогут преодолеть существующие проблемы и расширить возможности применения ИИ в кибербезопасности, обеспечивая более надежную защиту информационных систем:

- **Разработка устойчивых моделей.** Исследования должны быть направлены на создание моделей, которые могут эффективно работать в условиях ограниченных данных и адаптироваться к новым угрозам. Это может включать использование методов переноса обучения и генеративных моделей.

- **Интеграция с другими технологиями.** Будущее развитие может включать интеграцию ИИ с другими технологиями, такими как блокчейн и квантовые вычисления, для создания более комплексных систем защиты.
- **Улучшение интерпретируемости моделей.** Для повышения доверия к ИИ-системам необходимо разрабатывать методы, которые делают модели более интерпретируемыми и прозрачными для пользователей и специалистов по безопасности.
- **Этические и правовые аспекты.** Необходимо продолжать исследования в области этических и правовых аспектов использования ИИ в кибербезопасности, чтобы обеспечить соблюдение прав пользователей и защиту их данных.

Заключение

Таким образом, можно сделать вывод, что применение ИИ в сфере кибербезопасности предоставляет значительные преимущества, включая автоматизацию процессов, повышение точности и адаптивность к новым угрозам. При этом следует отметить, что технологии ИИ продолжают развиваться, предлагая всё новые возможности для обеспечения кибербезопасности.

Литература

1. CrowdStrike 2024 Global Threat Report. URL: <https://go.crowdstrike.com/global-threat-report-2024.html> (дата обращения: 18.10.2024).
2. Nacham S.A.K., Uçan O.N. Detection of Malicious SQL Injections Using SVM and KNN Algorithms // 2023 7th International Symposium on Innovative Approaches in Smart Technologies (ISAS). Istanbul, 2023. P. 1–5.
3. Angula T.J., Hashiyana V. Detection of Structured Query Language Injection Attacks Using Machine Learning Techniques // International Journal of Computer Science and Information Technology (IJCSIT). 2023. Vol. 15, No. 4.
4. Recio-Garcia J.A., Orozco-Del-Castillo M.G., Soladrero J.A. Case-based Explanation of Classification Models for the Detection of SQL Injection Attacks // CEUR Workshop Proceedings. 2023. Vol. 3438. P. 200–215.
5. Ibrohim M.M., Suryani V. Classification of SQL Injection Attacks using ensemble learning SVM and Naïve Bayes // International Conference on Data Science and Its Applications (ICoDSA). IEEE, 2023. P. 230–236.
6. Farooq U. Ensemble machine learning approaches for detection of SQL injection attack // Tehnički glasnik. 2021. Vol. 15, No. 1. P. 112–120.
7. Alghawazi M., Alghazzawi D., Alarifi S. Deep learning architecture for detecting SQL injection attacks based on RNN autoencoder model // Mathematics. 2023. Vol. 11, No. 15. Art. 3286.
8. Luo A., Huang W., Fan W. A CNN-based Approach to the Detection of SQL Injection Attacks // IEEE/ACIS 18th International Conference on Computer and Information Science (ICIS). IEEE, 2019. P. 320–324.
9. ALazzawi A. SQL Injection Detection Using RNN Deep Learning Model // Journal of Applied Engineering and Technological Science (JAETS). 2023. Vol. 5, No. 1. P. 531–541.

10. Gandhi N., Patel J., Sisodiya R., Doshi N., Mishra S. A CNN-BiLSTM based approach for detection of SQL injection attacks // International conference on computational intelligence and knowledge economy (ICCIKE). IEEE, 2021. P. 378–383.
11. Li Y., Zhang B. Detection of SQL injection attacks based on improved TFIDF algorithm // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1395, No. 1. Art. 012013.
12. Venkatramulu S., Waseem M.S., Taneem A., Thoutam S.Y., Apuri S. Research on SQL injection attacks using word embedding techniques and machine learning // Journal of Sensors, IoT and Health Sciences. 2024. Vol. 2, No. 1. P. 55–66.
13. Lu D., Fei J., Liu L., Li Z. A GAN-based method for generating SQL injection attack samples // IEEE 10th Joint International Information Technology and Artificial Intelligence Conference (ITAIC). IEEE, 2022. Vol. 10. P. 1827–1833.
14. Li Q., Li W., Wang J., Cheng M. A SQL injection detection method based on adaptive deep forest // IEEE Access. 2019. Vol. 7. P. 145385–145394.
15. Coscia A., Dentamaro V., Galantucci S., Maci A., Pirlo G. PROGESI: a PROxy Grammar to Enhance web application firewall for SQL Injection prevention // IEEE Access. 2024.
16. Maina H.Y. A Critical Evaluation of Security Approaches for Detection and Prevention of SQL Injection Attacks in Web-Based Applications // FUDMA Journal of Sciences. 2024. Vol. 8, No. 2. P. 241–246.
17. Nair S.S. Securing Against Advanced Cyber Threats: A Comprehensive Guide to Phishing, XSS, and SQL Injection Defense // Journal of Computer Science and Technology Studies. 2024. Vol. 6, No. 1. P. 76–93.
18. Li Z., et al. LLM-Assisted Static Analysis for Detecting Security Vulnerabilities // ArXiv preprint. 2024. arXiv:abs/2405.17238.
19. Abdullah A.S., Shankar A.R., Mohapatra P. Detection and Analysis of Port Scanning and SQL Injection Vulnerabilities with correlating factors in Web Applications to Enhance secure Data Transmission // International Conference on Research Methodologies in Knowledge Management, Artificial Intelligence and Telecommunication Engineering (RMKMATE). Chennai, India, 2023. P. 1–5.
20. Xu M., Xie B., Cui F., Jin C., Wang Y. SQL injection attack sample generation based on IEGAN // IEEE 22nd International Conference on Trust, Security and Privacy in Computing and Communications (TrustCom). IEEE, 2023. P. 1014–1021.
21. Irungu J., Graham S., Girma A., Kacem T. Artificial intelligence techniques for SQL injection attack detection // Proceedings of the 2023 8th International Conference on Intelligent Information Technology. 2023. P. 38–45.
22. Ashlam A.A., Badii A., Stahl F. Multi-Phase Algorithmic Framework to Prevent SQL Injection Attacks using Improved Machine learning and Deep learning to Enhance Database security in Real-time // 15th International Conference on Security of Information and Networks (SIN). Sousse, Tunisia, 2022. P. 1–4.
23. Gaspar D., Silva P., Silva C. Explainable AI for Intrusion Detection Systems: LIME and SHAP Applicability on Multi-Layer Perceptron // IEEE Access. 2024. Vol. 12. P. 30164–30175.
24. Upender T., Lal B., Nagaraju R. Transfer Learning Method for Handling The Intrusion Detection System with Zero Attacks Using Machine Learning and Deep Learning // Proceedings of the 5th International Conference on Information Management and Machine Intelligence. 2023. P. 1–11.
25. Lente C., et al. An Improved Tool for Detection of XSS Attacks by Combining CNN with LSTM // Anais Estendidos do XXI Simpósio Brasileiro de Segurança da Informação e de

- Sistemas Computacionais (SBSEg Estendido 2021). 2021.
26. Abhishek S., et al. AI-Driven Deep Structured Learning for Cross-Site Scripting Attacks // International Conference on Innovative Data Communication Technologies and Application (ICIDCA). Uttarakhand, India, 2023. P. 701–709.
 27. Bakır Ç. New Hybrid Distributed Attack Detection System for IoT // Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi. 2024. Vol. 13, No. 1. P. 232–246.
 28. Tamamura K., Sakai S., Watarai K., Okada S., Mitsunaga T. Detection of XSS Attacks with One Class SVM Using TF-IDF and Devising a Vectorized Vocabulary // IEEE International Conference on Computing (ICOCO). IEEE, 2023. P. 35–40.
 29. Et-Tolba M., et al. DL-Based XSS Attack Detection Approach Using LSTM Neural Network with Word Embeddings // 11th International Conference on Wireless Networks and Mobile Communications (WINCOM). 2024. P. 1–6.
 30. Alhamyani R., Alshammari M. Machine Learning-Driven Detection of Cross-Site Scripting Attacks // Information. 2024. Vol. 15. No. 7. P. 420. DOI: 10.3390/info15070420.
 31. Mokbal F.M.M., Wang D., Wang X., Fu L. Data augmentation-based conditional Wasserstein generative adversarial network-gradient penalty for XSS attack detection system // PeerJ Computer Science. 2020. Vol. 6. Art. e328.
 32. Hubballi N., et al. XSSMitigate: Deep Packet Inspection based XSS Attack Quarantine in Software Defined Networks // IEEE International Conference on Consumer Electronics (ICCE). IEEE, 2023. Art. 1025.
 33. Liu Z., Fang Y., Huang C., Han J. GraphXSS: An efficient XSS payload detection approach based on graph convolutional network // Computers and Security. 2022. Vol. 114. Art. 102597.
 34. Kaur J., Garg U., Bathla G. Detection of cross-site scripting (XSS) attacks using machine learning techniques: a review // Artificial Intelligence Review. 2023. Vol. 56. P. 12725–12769.
 35. Lei L., Chen M., He C., Li D. XSS Detection Technology Based on LSTM-Attention // 5th International Conference on Control, Robotics and Cybernetics (CRC). Wuhan, China, 2020. P. 175–180.
 36. Oladiipo O.S., et al. AI-Driven Cloud Security: Examining the Impact of User Behavior Analysis on Threat Detection // Asian Journal of Research in Computer Science. 2024.
 37. Wang Q., Huang J., Qi X. XSS attack detection and prevention system based on instruction set randomization // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2019. Vol. 563, No. 4. Art. 042086.
 38. Wan S., Xian B., Wang Y., Lu J. Methods for Detecting XSS Attacks Based on BERT and BiLSTM // 8th International Conference on Management Engineering, Software Engineering and Service Sciences (ICMSS). IEEE, 2024. P. 1–7.
 39. Shahid M. Machine learning for detection and mitigation of web vulnerabilities and web attacks. ArXiv preprint. 2023. arXiv:2304.14451.
 40. Ahmed Mohanad Jaber ALHILO, Hakan Koyuncu. Enhancing SDN Anomaly Detection: A Hybrid Deep Learning Model with SCA-TSO Optimization // International Journal of Advanced Computer Science and Applications. 2024. Vol. 15, No. 5.
 41. Shradha F., et al. Detection of cyber-attacks and network attacks using Machine Learning // World Journal of Advanced Engineering Technology and Sciences. 2024.
 42. Ramadan M., Osama B., Zaher M., Mansour H., El Sersi W. Enhancing Web Security: A Comparative Analysis of Machine Learning Models for CSRF Detection // Intelligent Methods, Systems, and Applications (IMSA). Giza, Egypt, 2024. P. 18–25.
 43. Liu C., Shen X., Gao M., Dai W. CSRF Detection Based on Graph Data Mining // 2020

- IEEE 3rd International Conference on Information Systems and Computer Aided Education (ICISCAE). Dalian, China, 2020. P. 475–480.
44. Kharwar A.R., Thakor D.V. An Ensemble Approach for Feature Selection and Classification in Intrusion Detection Using Extra-Tree Algorithm // International Journal of Information Security and Privacy. 2022. Vol. 16, No. 1. P. 1–21.
 45. Hadavi M.A., Sadeghi S. Automatic Black-Box Detection of Resistance Against CSRF Vulnerabilities in Web Applications // Journal of Computing and Security. 2021. Vol. 8, No. 1. P. 19–32.
 46. Ghumman S. A Comparative Evaluation of network Attack Detection and Prevention Strategies in multi model Cloud servers // 4th IEEE Global Conference for Advancement in Technology (GCAT). 2023. P. 1–6.

AI CAPABILITIES IN CYBERSECURITY: DETECTION, PREVENTION AND RESPONSE TO SQL INJECTIONS, XSS, AND CSRF ATTACKS

D.E. Vilkhovsky

Assistant Professor, e-mail: vilkhovskiy@gmail.com

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Abstract. The paper provides an overview of the possibilities of using artificial intelligence to enhance the cybersecurity of web applications, with an emphasis on detecting, preventing, and responding to SQL injections, XSS, and CSRF attacks. Machine learning methods such as SVM, Naive Bayes, ensemble learning, and deep learning are discussed, as well as their integration with existing security systems. Hybrid models and approaches to adapting systems to new threats are included. Existing problems are analyzed and future research directions for overcoming these challenges are identified

Keywords: computer security, information security, cybersecurity, SQL injections, XSS attacks, CSRF attacks, machine learning, artificial intelligence.

Дата поступления в редакцию: 20.10.2024

ОБЗОР МЕТОДОВ ПОСТРОЕНИЯ ТРАЕКТОРИЙ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ БЕСПИЛОТНЫХ СРЕДСТВ

М.В. Калашник

аспирант, e-mail: kalashnikmaxim@mail.ru

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

Аннотация. Приведён обзор методов построения траекторий движения для беспилотных средств, описаны подходы, преимущества, недостатки и ограничения методов.

Ключевые слова: траектория движения, компьютерное зрение, регистрация окружения.

Использование беспилотных транспортных средств в современном мире постепенно становится частью повседневной жизни. Беспилотные роботы-доставщики еды, автомобили, способные к самостоятельному управлению движением на дорогах общего пользования, дроны, продолжающие движение к заданной цели без ассистирующего воздействия оператора, принимающие самостоятельные решения для оптимизации маршрута.

Планирование пути является сложной задачей, которая усугубляется различными ограничениями, такими как связь, ограничение по времени работы устройства и препятствия на пути следования. Эти проблемы охватывают множество дисциплин, такие как искусственный интеллект, модель и механику полёта, автоматическое управление.

Поиск новых путей решения задачи получения оптимального маршрута движения – это одно из важнейших направлений развития робототехники.

Локализация робота в пространстве

Для построения траектории, в первую очередь, необходимо выполнить локализацию. Под локализацией понимается процесс определения позиции робота относительно его окружения и отображение (сохранение в памяти) полученной информации.

Одним из наиболее распространённых методов для получения информации об окружении является SLAM (simultaneous localization and mapping – одновременная локализация и построение карты) [1]. Это метод, используемый в робототехнике и компьютерном зрении для навигации и создания карт неизвестной среды. Принцип его работы заключается в том, что робот или сенсорная система одновременно оценивают своё местоположение (локацию) в окружающей среде и строят карту (картографирование) окружающей среды. Получить информацию об окружении

помогают датчики типа LIDAR, ультразвуковые датчики либо информация с камер. Для определения текущей позы (вектор направления, относительно стартовой точки) используются датчики: гироскоп, акселерометр и магнитометр. Эти датчики объединяются в единую функциональную единицу – инерционно измерительное устройство (IMU). LIDAR и ультразвуковые датчики дают информацию о расстоянии до объектов, в направлении которых используется датчик. Изображение с камер анализируется методами оценки глубины (Depth Estimation) с помощью нейронных сетей, преобразующих изображение в карту глубины, либо используются бинокулярные камеры, изображение с которых в дальнейшем оценивается подобно физическому процессу, называемому «фузия», заимствованному у людей и животных, позволяющему определять проекцию расстояния (см. рис. 1).



Рис. 1. Поток данных для метода SLAM

Существуют различные стратегии исследования пространства. «Пограничное» исследование подразумевает систематическое исследование неизвестных (не размеченных на карте) областей пространства. Используя «покрывающую» стратегию, робот стремится изучить все возможные области на карте. Придерживаясь стратегии «случайного» исследования, робот перемещается случайным образом в пространстве для покрытия карты.

Локализация конечной точки

Для задачи направления движения конечная точка может быть определена несколькими способами. Имея приблизительную информацию (направление вектора движения, относительную координату, внешние признаки) о конечной точке, робот будет следовать заданным параметрам и прокладывать путь, пока система не сможет определить достижение цели.

Прогрессивные уточнения используются для уточнения роботом своего понимания местоположения конечной точки на основе новых данных, полученных с датчиков, которые могут включать в себя функции распознавания – идентификацию отличительных черт (формы, текстуры) в среде, соответствующей описанию конечной точки.

Вероятностная локализация использует байесовские методы для оценки местоположения конечной точки на основе данных, полученных в процессе перемещения и предварительных знаний.

Метод ячеек

Метод охватывает методы сетки и дерева ячеек. Метод сеток использует разбику пространства на сетку из ячеек одинакового размера. Это может быть как двухмерное, так и трёхмерное пространство. Исследованное и определённое как препятствие, пространство закрашивается в ячейке чёрным цветом.

Метод дерева ячеек является развитием метода сеток, использует различные размеры ячеек пространства, демонстрирует лучшую адаптивность к окружающему пространству. Для уменьшения вычислительной нагрузки был предложен [2] метод преобразования трёхмерного пространства в двумерное.

Геометрический метод

Геометрические методы [3] используют симуляцию движения как робота, так и препятствия. Основное требование у данного метода – это необходимость знать физические параметры (модель движения) анализируемых объектов. При этом не имеет значения, динамическое препятствие или статическое. Это требование делает данный подход мало применимым для использования в плохо исследованной среде.

Метод оптимизированной траектории

Как и геометрический метод, метод оптимизированных траекторий использует геометрические и физические модели траектории движения робота. Особенность метода – в генерации траектории, минимально отклонённой от начальной. Подход используется для решения задач со статическими препятствиями.

В работе [4] описывается пример предотвращения столкновения с помощью оптимизации траектории для полета БПЛА. Параметризация маневров отклонения траектории выполняется с помощью геометрического метода. В качестве БПЛА используется самолет. Основная цель исследования – оптимизация алгоритма обнаружения препятствий в реальном времени для планирования траектории.

Метод потенциального поля

Метод независим от графического представления. Конечная точка рассматривается как источник притяжения. Угрозы препятствий и другие системы рассматриваются как источник силы отталкивания. Потенциальная функция определяет силы притяжения и отталкивания, действующие на робота в каждой точке пространства. Размеченные силы интегрируют направления силы робота и задают соответствующий путь.

Данный метод является не затратным для расчетов и применим к двумерным и трехмерным пространствам. У метода существует ряд минусов. Первый – это

локальные минимумы. Потенциальная функция может иметь локальные минимумы, где робот застрянет, требуются дополнительные шаги для преодоления этого ограничения. Плотность препятствий может быть очень большой, что создаёт мощные отталкивающие силы, и конечная точка не будет достигнута.

Гистограмма векторного поля (VFH)

Метод [5] использует показания датчиков анализа расстояния (например LIDAR) для построения параметризованных бинарных гистограмм, которые ограничены пороговыми значениями. При построении гистограмм используются основные физические характеристики робота, такие как его размер, радиус поворота и безопасная для движения дистанция. Построенная гистограмма представляет собой поле, окружающее робота, с размеченным пространством. Разметка указывает на благоприятные для дальнейшего движения регионы.

Хоть и считается, что метод предназначен для локального планирования и не предназначен для построения глобально оптимального пути, тесты показывают, что найденные пути почти оптимальны.

Рандомизированные деревья случайного исследования (RRT)

Метод постоянного перепланирования нового пути [6], который хорошо подстраивается под изменчивое окружение. Метод заключается в построении дерева, узлы которого являются состоянием системы (точка в пространстве). Из исходного состояния почти всегда существуют переходы в новые возможные состояния. Система создаёт выборку точек с заранее заданными параметрами распределения, затем производится проверка, что новая точка не пересекается с препятствиями. Если точка не удовлетворяет условию, то она отбрасывается, в противном случае точка включается в дерево в качестве нового узла, и между точками строится новое ребро. Алгоритм повторяется, пока новый узел не будет являться конечной точкой маршрута. Полный маршрут определяется как совокупность ветвей дерева от корневого узла к конечной точке.

Главный недостаток данного метода – это высокая вычислительная сложность при инициализации большого количества вершин. Ещё одним недостатком является избыточность при построении маршрута, он получается не всегда оптимальным.

Метод рандомизированных деревьев активно применяется, совершенствуется и получает модификации, использующие алгоритмы удаления невостребованных промежуточных узлов и ветвей, и применяется сглаживание траектории за счёт параметризации физических особенностей робота.

Задача планирования пути для беспилотного транспортного средства в сложных неизвестных окружениях требует многогранного подхода, в котором необходимо объединить локализацию, планирование пути и предотвращение столкновений с препятствиями. В настоящее время акцент сдвигается на использование компьютерного зрения и моделей глубокого обучения. По мере развития физических датчиков и средств компьютерного зрения приближается время, когда беспилотные

системы смогут автономно генерировать оптимальные маршруты и выполнять поставленные задачи, а развитие систем, основанных на глубоком обучении, позволит расширить сферы применения беспилотных средств.

Литература

1. Simultaneous Localisation and Mapping (SLAM): Part I The Essential Algorithms. Hugh Durrant-Whyte, Fellow, IEEE, and Tim Bailey, 2006. URL: https://people.eecs.berkeley.edu/~pabbeel/cs287-fa09/readings/Durrant-Whyte_Bailey_SLAM-tutorial-I.pdf (дата обращения: 10.08.2024).
2. Environment representation and path planning for unmanned aircraft in industrial indoor applications, 2021. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2351978921002225> (дата обращения: 15.08.2024).
3. Cooperative Sense and Avoid Implementation in Simulation and Real World for Small Unmanned Aerial Vehicles. Armin Strobel, Marc Schwarzbach. s.l. : Research Training Group Cooperative, Adaptive and Responsive Monitoring in Mixed Mode Environments, 2021. URL: https://www.researchgate.net/publication/269299851_Cooperative_sense_and_avoid_Implementation_in_simulation_and_real_world_for_small_unmanned_aerial_vehicles (дата обращения: 15.08.2024).
4. Visual Flight Rules-Based Collision Avoidance Systems for UAV Flying in Civil Aerospace. URL: <https://www.mdpi.com/2218-6581/9/1/9> (дата обращения: 17.08.2024).
5. The vector field histogram – fast obstacle avoidance for mobile robots // IEEE Journal of Robotics and Automation. 1991. Vol. 7, No. 3. P. 278–288.
6. A Fast and Efficient Approach to Path Planning for Unmanned Vehicles. URL: https://www.researchgate.net/publication/269254521_A_Fast_and_Efficient_Approach_to_Path_Planning_for_Unmanned_Vehicles (дата обращения: 17.08.2024).

REVIEW OF METHODS FOR CONSTRUCTING TRAJECTORIES FOR UNMANNED VEHICLES

M.V. Kalashnik

Postgraduate Student, e-mail: kalashnikmaxim@mail.ru

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Abstract. The article provides an overview of methods for constructing motion trajectories for unmanned vehicles, describes approaches, advantages, disadvantages and limitations of the methods.

Keywords: motion trajectory, computer vision, environment registration.

Дата поступления в редакцию: 25.08.2024

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ОБЪЁМОВ ПРОДАЖ АВТОМОБИЛЬНЫХ АККУМУЛЯТОРНЫХ БАТАРЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

С.В. Шабунин

аспирант, e-mail: AgranomMotor@yandex.ru

Омский государственный технический университет, Омск, Россия

Аннотация. Рассмотрены вопросы прогнозирования объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей торговой организации с использованием искусственной нейронной сети. Определены значимые параметры для построения прогноза объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей с требуемой точностью.

Ключевые слова: искусственная нейронная сеть, прогнозирование, объём продаж автомобильных аккумуляторных батарей.

Введение

В настоящее время совершенствование систем, способствующих улучшению эффективности товародвижения на предприятии оптовой торговли, является важным элементом стратегии ведения бизнеса. В современной экономической среде структурные изменения спроса, товарные эмбарго, ограничительные санкции и многие другие факторы, эффективные методы моделирования и прогнозирования товарных остатков и объёмов продаж дают оптовым организациям необходимое преимущество. Построение прогноза, которое учитывает влияние параметров, таких как температура окружающей среды, скорости ветра, относительной влажности воздуха, влияет на планирование бизнеса: анализ продаж, формирование оптимальных запасов, построение бизнес-плана, планирование бюджета, оптимизацию и контроль расходов, распределение ресурсов компании для обеспечения ожидаемых продаж [1–8]. В прогнозировании объёмов продаж широко используются статистические методы, такие как ARIMA (AutoRegressive Integrated Moving Average) [9] и экспоненциальное сглаживание [10], использование средних для прогнозирования будущих значений временного ряда. Также востребованными являются методы, основанные на интеллектуальном прогнозировании, такие как искусственные нейронные сети (ИНС), используют наименьшее количество данных и времени для обучения, менее подвержены переобучению.

В работе рассмотрено влияние метеоданных на модель при прогнозировании объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей, определяя значимые технологические параметры.

1. Формирование массива исходных данных

В исследовании используются данные, полученные от торговой фирмы «Николь», крупнейшего поставщика автомобильных аккумуляторных батарей в Сибирском федеральном округе, и представленные массивом, состоящим из объёмов продаж аккумуляторных батарей (Омская обл.) за период с 01.09.2021 по 01.12.2023. Фрагмент исходных данных представлен в табл. 1.

Таблица 1. Исходные данные объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей

Момент времени	Технологические параметры				
	$V_{руб}$, руб.	$V_{шт}$, шт.	T_A	V_W	ϕ
01.07.2023	415 219,40	114,00	34	1	98
02.07.2023	82 309,81	35,00	25	12	95
03.07.2023	196 068,63	49,00	28	6	94
04.07.2023	209 155,92	54,00	29	5	94
05.07.2023	88 259,44	23,00	23	10	90
06.07.2023	29 530,00	4,00	20	4	90
...		
01.12.2023	1520000	359	-25	15	89

Примечание: $V_{руб}$ – объёмы продаж автомобильных аккумуляторных батарей в денежном выражении, руб. и $V_{шт}$ – объёмы продаж автомобильных аккумуляторных батарей в количественном выражении, шт. Также в таблицу входят метеоданные: T_A – среднесуточная температура окружающей среды; V_W – скорость ветра, м/с; ϕ – относительная влажность воздуха, %.

Для определения структуры, обеспечивающей требуемую точность прогнозирования, сформировано два варианта обучающей выборки. В первом варианте используются все метеоданные в исходном наборе данных (вариант В1). Во втором случае выбираются параметры, имеющие наибольший коэффициент корреляции с объёмом продаж автомобильных аккумуляторных батарей (вариант В2). Для оценки функционирования модели в качестве критерия рассматривалась ошибка прогнозирования объёма продаж автомобильных аккумуляторных батарей. При выполнении исследования рассмотрена модель прогнозирования на основе метода искусственной нейронной сети, который является одним из немногочисленных методов, не требующих предварительной обработки данных. Автоматически обрабатывает категориальные переменные (обозначаемые не числами, а условными символами) и дополняет пропущенные значения, что упрощает его применение.

Для полученных вариантов обучающей выборки производился анализ вклада каждого входного параметра в значение прогноза с целью сокращения количества

входных параметров в модель.

2. Определение вклада входных параметров в значение прогноза

Для определения важности вклада каждого из входных параметров применялся метод SHAP (SHapley Additive exPlanations) [11], который позволяет оценить вероятностный вклад каждого параметра в результат прогноза. Этот метод вычисляет важность конкретного параметра путём сравнения результатов, полученных с учётом этого параметра и без его учёта. Вклад каждого параметра определяется с помощью SHAP значений, вычисляемых по формуле:

$$S_i(x) = \sum_{S \subseteq N \setminus \{i\}} \frac{|S|!(|N| - |S| - 1)!}{|N|!} [f(x_S \cup \{i\}) - f(x_S)], \quad (1)$$

где $S_i(x)$ – SHAP-значений для i -го параметра и наблюдения x ; N – множество параметров, $|N|$ – его размер; S – подмножество параметров, исключая i -й параметр; $|S|$ – размер подмножества S ; x_S – наблюдение x с учётом только параметров из множества S ; $f(x_S \cup \{i\})$ – прогноз модели для наблюдения x_S , включая i -й параметр; $f(x_S)$ – прогноз для наблюдения x_S . В основе понятия SHAP-значений заложена идея распределения каждого вклада в прогнозирование между всеми вариантами сочетания параметров. Происходит учёт всех возможных перестановок признаков, определяющих, насколько изменяется предсказание при добавлении или удалении отдельных параметров. Каждому параметру присваивается его SHAP-значение, которое показывает, насколько он внёс вклад в прогнозируемое значение.

Для определения структуры обучающей выборки и определения значимости каждого параметра построены графики для двух вариантов структуры входных данных (рис. 1). Графики созданы на основе обработки исходных данных B1 и B2.

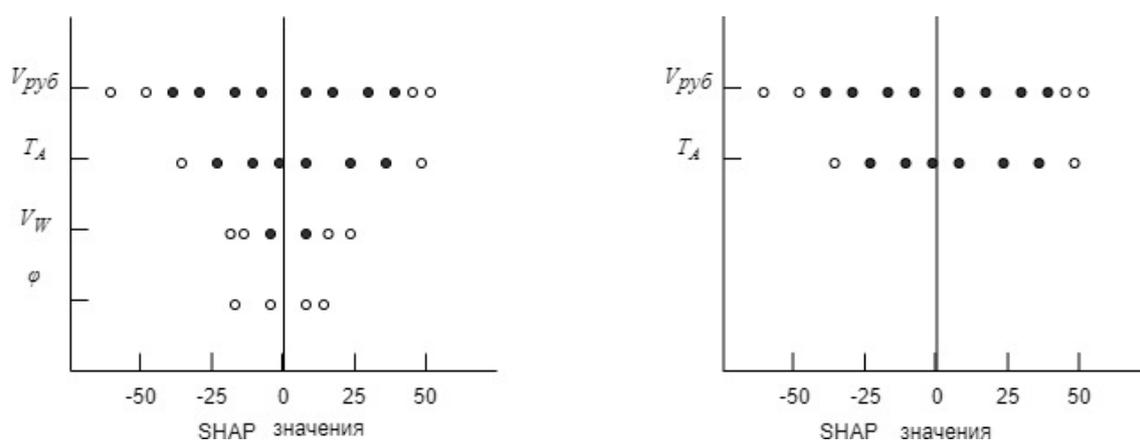


Рис. 1. Диаграммы вероятностных вкладов для вариантов прогнозирования: левый – B₁, правый – B₂

На рис. 1. диаграммы показывают силу влияния параметров на прогноз: чёрный указывает на сильное влияние. Значимость параметра определяется его очередно-

стью (сверху вниз): чем выше находится параметр, тем больше его значения воздействуют на итоговый прогноз. Степень влияния на увеличение или уменьшение прогнозных значений определяется по оси абсцисс: чем больше параметр распределяется по оси абсцисс, тем больше он склонен к увеличению или уменьшению прогнозных значений. Таким образом, на графиках отображены наиболее значимые по воздействию параметры вне зависимости от размера обучающей выборки, такими параметрами являются $V_{руб}$, T_A , V_W . Получено, что наибольшее распределение (по оси абсцисс) имеет $V_{руб}$ (значение объёма продаж автомобильных аккумуляторных батарей), определяющий сильную зависимость прогноза от значений $V_{руб}$.

С использованием метода SHAP получены интерпретируемые значения вклада каждого признака в конкретный прогноз модели. При этом входные параметры сравнивались между собой для определения значимости для конечного результата и определения их вклада в прогнозные значения. Те параметры, значимость которых высока, должны быть использованы для построения прогноза в обязательном порядке. Параметры, вносящие наименьший вклад, могут не рассматриваться, если не предъявляются высокие требования к точности прогноза. Отсутствие менее значимых параметров (в случае трудности сбора данных) позволяет сделать прогноз, но точность прогноза ухудшится.

По итогу метода анализа SHAP для рассматриваемых вариантов выявлены значимые параметры (в порядке убывания): $V_{руб}$ – объём продаж автомобильных аккумуляторных батарей, T_A — среднесуточная температура окружающей среды, V_W — скорость ветра, ϕ — относительная влажность воздуха – которые требуют обязательного присутствия в обучающей выборке для прогнозирования объёма продаж автомобильных аккумуляторных батарей.

3. Описание нейросетевой модели для прогнозирования объёмов продаж

При прогнозировании объёмов продаж особое значение имеет метеорологический прогноз погоды, так как нормальная температура работы автомобильных аккумуляторных батарей находится в диапазоне от +20 до –20 °С. Поэтому при повышении температуры окружающей среды электрохимическая активность аккумулятора возрастает, происходит перегрев, что приводит к осыпанию активной массы с пластин аккумуляторных батарей, а также к кипению воды. При понижении температуры ёмкость и пусковой ток аккумуляторных батарей снижается, что затрудняет запуск автомобиля и приводит к потере плотности электролита и последующему замерзанию аккумуляторных батарей. Следует отметить, эксплуатация в таких условиях сокращает срок службы и может привести к выходу из строя аккумуляторной батареи, вследствие чего потребуются её замена, что прямым образом влияет на объём продаж данной продукции.

Для построения нейросетевой модели прогнозирования воспользуемся информационно-аналитической системой Rapidminer с блоками deep learning [12], где функциональные блоки выделены в специальные операторы, с помощью которых формируется обработка данных. Архитектура интеллектуальной нейронной сети формируется с учётом особенностей, влияющих на объём продаж

автомобильных аккумуляторных батарей. Примем, что сеть содержит большое количество скрытых слоёв, состоящих из нейронов с функциями активации \tanh , выпрямителя и \max out. Расширенные функции, такие как адаптивная скорость обучения, скоростной отжиг, тренировка по импульсу, отсев и регуляризация, обеспечивают высокую точность прогнозирования. Каждый вычислительный узел обучает копию параметров глобальной модели на своих локальных данных с помощью многопоточности (асинхронно) и периодически вносит свой вклад в глобальную модель посредством усреднения модели по сети [11]. Структура искусственной нейронной сети (ИНС) имеет 4 слоя, 2 из которых – скрытые. Вход ИНС содержит 4 нейрона. Модель в скрытых слоях содержит 16 нейронов. Выходной слой состоит из 1 нейрона. При прогнозировании с использованием такой структуры модели переобучение не происходит.

Внешние входные данные подаются на входы входного слоя X_1, X_2, \dots, X_n , а W_1, W_2, \dots, W_n – весовые коэффициенты. Сначала нейрон вычисляет взвешенную сумму, далее, применяя функцию активации $F(S)$, вычисляет выходной сигнал Y . Функция активации нейрона – это функция, которая вычисляет выходной сигнал нейрона. На вход этой функции подаётся сумма всех произведений сигналов и весов этих сигналов, и в процессе функционирования нейронная сеть формирует выходной сигнал Y .

Сначала нейрон вычисляет взвешенную сумму (1), далее, применяя функцию активации $F(S)$ вычисляются выходные данные.

$$S = \sum_l W_l X_l - b, \quad (2)$$

где X_l – входной сигнал, W_l – весовые коэффициенты, b – порог нейрона.

$$Y = F(S), \quad (3)$$

где Y – выходные данные, $F(S)$ – функция активации.

Структурная схема приведена на рис. 2.

4. Результаты прогнозирования объёма продаж автомобильных аккумуляторных батарей

Для оценки качества работы и производительности сформированной ИНС применялись метрики, характеризующие точность модели [3]. Значения метрик качества модели от различных структур входных данных и объёмов обучающей выборки представлены в табл. 2.

Используя набор данных В1 с полными технологическими параметрами, модель продемонстрировала лучшие результаты прогнозирования, как указано в табл. 2. Метрика RMSE показала небольшую разницу между фактическими и прогнозируемыми значениями (406915 руб. в лучшем варианте В1), и коэффициент детерминации $R^2 = 0.993$, что говорит о хорошем соответствии модели фактическим данным (99.3 %). Метрика MAPE также подтвердила качество прогноза средней абсолютной процентной ошибкой в 1.93 %.

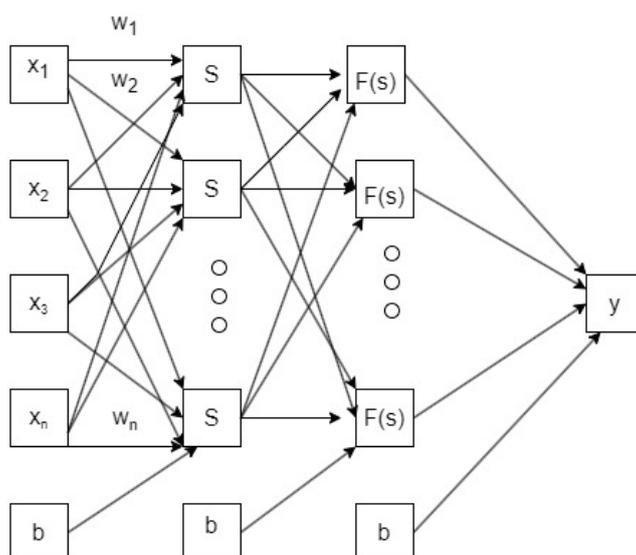


Рис. 2. Структурная схема ИНС для прогнозирования объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей

Таблица 2. Метрики качества модели прогнозирования объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей

Метрики прогноза	Вариант прогноза	
	набор параметров В1	набор параметров В2
$MAPE_{model}$	2.39 %	3.05 %
$MAPE$	1.93 %	2.77 %
$RMSE$	406915	403593
$R2$	0.993	0.985

На основании полученных результатов сделан вывод о том, что для прогнозирования объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей целесообразно использовать весь набор метеоданных, так как они позволяют модели выявить закономерности и зависимости в данных.

График прогнозирования объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей методом ИНС за период с 01.07.2023 по 08.07.2023 представлен на рис. 3.

Фактический объём продаж на диаграмме чёрным цветом за первую неделю июля 2023 г., светло серым – значения прогноза модели с набором данных В2, темно серым – значение прогноза с полным набором метеоданных. По графику установлено, что наибольший объём продаж приходится на 1, 3 и 4 июля, что соответствует более высокой температуре воздуха. Прослеживается, что на графике наилучшие результаты получены моделью с полным набором технологических параметров (В1). Ошибка прогноза уменьшилась на 0.84 % по метрике MAPE, что является существенным улучшением точности прогнозирования объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей.

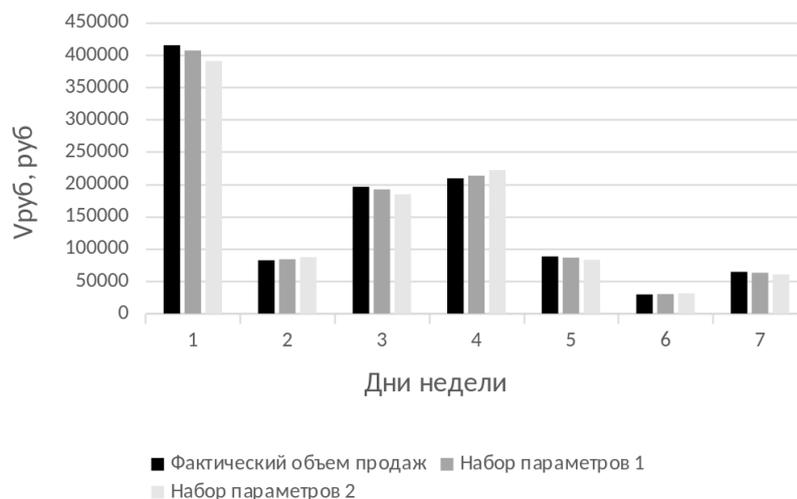


Рис. 3. Прогнозирование объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей на неделю вперёд

Заключение

Проведённые исследования позволили установить, что использование метода, основанного на ИНС для прогнозирования объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей, является эффективным подходом. Метод ИНС, используемый в исследовании, уменьшает дисперсию прогнозов и обладает устойчивостью к переобучению, что доказывает его функциональность на больших обучающих выборках. Модель, обученная на большой выборке, также более устойчива к случайным аномалиям. В результате исследования сформирована обучающая выборка, выбрана структура данных для прогнозирования объёмов продаж автомобильных аккумуляторных батарей методом ИНС. Сделан вывод о том, что количество наблюдений и параметров в обучающей выборке влияет на конечные результаты прогнозных значений ($B1 \text{ MAPE} = 1,93 \%$, $B2 \text{ MAPE} = 2,77 \%$). Выявление значимых параметров позволяет не включать в обучающую выборку параметры, имеющие наименьший вклад, отсутствие которых позволит сделать прогноз, но с потерей качества.

В условиях постоянного роста стоимости автомобильных аккумуляторных батарей становится критически важным уменьшение ошибок прогнозирования объёмов продаж. Уменьшение ошибок в расчётах позволяет торговым компаниям выстроить наиболее оптимальную бизнес стратегию своего развития и снизить сопутствующие издержки.

В дальнейшем планируется исследовать влияние температуры окружающей среды на уровень продаж во все сезоны года, что позволит более точно определить сезонность данного продукта и более качественно сформировать складские остатки и спрогнозировать выручку организации, что повысит эффективность и прибыльность организации.

Литература

1. Васильев А.А. Методы и модели прогнозирования объёма продаж в маркетинге // Известия Тульского государственного университета. Экономические и юридические

- науки. 2021. № 2. С. 213–216.
2. Reynolds C.F. A Distributed Behavioral Model // Computer Graphics. 1987. Vol. 21, No. 4. P. 25–34.
 3. Eberhart R.C., Kennedy J., Eberhart R.C. New Optimizer Using Particle Swarm Theory // VI International Symposium on Micro Machine and Human Science. 1995. P. 39–43.
 4. Kennedy J., Eberhart R.C. Particle swarm optimization // International Conference on Neural Networks (ICNN'95). Perth, WA, Australia. 1995. P. 1942–1948.
 5. Shi, Y. A modified particle swarm optimizer / Y. Shi, R. Eberhart // IEEE International Conference on Evolutionary Computation. Anchorage, AK, USA. 1998. P. 69–73
 6. Karaboga D. An idea based on honey bee swarm for numerical optimization. Technical report-tr06. Turkey, Kayseri: Erciyes University, 2005. 10 p. URL: http://www.dmi.unict.it/mpravone/nc-cs/materiale/tr06_2005.pdf (дата обращения: 10.06.2024).
 7. Pham D.T., Ghanbarzadeh A., Коç E., Otri S., Rahim S., Zaidi M., Pham D.T. The Bees Algorithm — A Novel Tool for Complex Optimisation Problems. 2005.
 8. Soman S.S., Zareipour H., Malik O., Mandal P. A review of wind power and wind speed forecasting methods with different time horizons // North American Power Symposium. 2010.
 9. Denisova L.A. A mathematical model of a digital control system with variable parameters // Automation and Remote Control. 2012. Vol. 73 (11). P. 1895–1901.
 10. Singh U. et al. Wind energy scenario, success and initiatives towards renewable energy in India—A review // Energies. 2022. Vol. 15 (6). Art. 2291.
 11. George A.F., Alan J.L. Linear Regression Analysis. Hoboken : John Wiley & Sons, 2003. 592 p.
 12. Горшенин А.Ю., Денисова Л.А. Прогнозирование выработки электроэнергии ветро-электростанцией с применением рекуррентной нейронной сети // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. 2023. № 4. С. 39–45.

FORECASTING SALES VOLUMES OF AUTOMOTIVE BATTERIES USING THE ARTIFICIAL NEURAL NETWORK METHOD

S.V. Shabunin

Ph.D. Student, e-mail: AgranomMotor@yandex.ru

Omsk State Technical University, Omsk, Russia

Abstract. The article discusses the issues of forecasting sales volumes of automotive batteries of a trade organization by a method based on an artificial neural network. Significant parameters have been determined for forecasting sales volumes of automotive batteries with the required accuracy

Keywords: artificial neural network, forecasting, sales volume of car batteries.

Дата поступления в редакцию: 20.06.2024

Авторам

Предоставляемые данные и документы

Автор предоставляет в редакцию:

- рукопись статьи в формате \LaTeX (см. требования к оформлению);
- список из трёх экспертов по тематике статьи, давших согласие написать рецензию на представленную работу¹;
- экспертное заключение о возможности открытого опубликования.

Лицензирование

Согласно ГК РФ ст. 1286 лицензионный договор с автором для публикации в периодических изданиях может быть заключён в устной форме. Сам факт получения рукописи статьи редколлегией журнала «Математические структуры и моделирование» является акцептом (принятием) лицензионного договора.

Все статьи в журнале «Математические структуры и моделирование» публикуются под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY). Текст лицензии находится по адресу <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/legalcode>.

Требования к оформлению рукописи

К публикации принимаются рукописи объёмом не более 16 страниц.

Авторам необходимо предоставить следующую информацию на русском и английском языках:

- название статьи;
- список авторов с указанием
 - фамилии, имени и отчества,
 - учёного звания,
 - учёной степени,
 - должности,
 - места работы или учёбы,
 - действующего адреса электронной почты;
- аннотация (абстракт) объёмом от 100 до 250 слов;
- список ключевых слов.

Автор также указывает УДК (универсальный десятичный код) статьи. Его можно подобрать по тематике статьи в справочнике <http://msm.univer.omsk.su/udc/>.

Библиографические ссылки оформляются согласно ГОСТ 7.0.5–2008.

Рукопись статьи представляется в редакцию по электронной почте в двух форматах pdf и tex. Статья должна быть набрана с использованием макропакета \LaTeX и стиля msmb.cls, предоставляемого редакцией <http://msm.univer.omsk.su/files/msmb.zip>. Рекомендуется установить компилятор Mi \TeX , так как именно им пользуются в редакции.

Отклонения в оформлении рукописи от приведённых правил позволяют редколлегии принять решение о снятии статьи с публикации. Статья может быть отклонена по причинам несоответствия тематике журнала или в связи с низким уровнем качества научного исследования.

В статье запрещается переопределять стандартные команды и окружения.

Нумеруемые формулы необходимо выделять в отдельную строку.

Нумерация только арабскими цифрами в порядке возрастания с единицы. Нумеровать следует только те формулы, на которые в тексте имеются ссылки.

Запрещается использовать в формулах буквы русского алфавита. Если без них никак не обойтись, то следует использовать команду $\mbox{\dots}$.

¹Необходимы полные данные экспертов (место работы, учёная степень, должность), с указанием способа связи с ними (e-mail, телефон). Редколлегия может обратиться к одному из экспертов из предложенного списка с просьбой написать рецензию или может назначить рецензента из собственного списка.

Все рисунки и таблицы должны иметь подпись, оформленную с помощью команды `\caption{...}`.

Файлы с рисунками необходимо представить в формате PDF или EPS (использовать редакторы векторной графики типа InkScape, Adobe Illustrator или Corel Draw).

Используйте стандартные команды переключения на готический, каллиграфический и ажурный шрифты: `\mathfrac`, `\mathcal` и `\mathbb`.

Не допускается заканчивать статью рисунком или таблицей.

В списке литературы обязательно указание следующих данных: для книг — фамилии и инициалы авторов, название книги, место издания, издательство, год издания, количество страниц; для статей — фамилии и инициалы авторов, название статьи, название журнала, год издания, том, номер (выпуск), страницы начала и конца статьи (для депонированных статей обязательно указать номер регистрации).

Кавычки в русском тексте («абвгд») должны быть угловыми, в английском — прямыми верхними кавычками ("abcdefg" или "abcdefg").

Обязательна расшифровка сокращений при первом вхождении термина. Например: ... искусственный интеллект (ИИ)...

Порядок рецензирования

Первичная экспертиза проводится главным редактором (заместителем главного редактора). При первичной экспертизе оценивается соответствие статьи тематике журнала, правилам оформления и требованиям, установленным редакцией журнала к научным публикациям.

Все статьи, поступившие в редакцию научного журнала «Математические структуры и моделирование», проходят через институт рецензирования.

Рецензент выбирается главным редактором журнала из числа членов редколлегии или ведущих специалистов по профилю данной работы.

Рецензенты уведомляются о том, что присланные им рукописи являются частной собственностью авторов и относятся к сведениям, не подлежащим разглашению. Рецензентам не разрешается делать копии статей для своих нужд.

Срок для написания рецензии устанавливается по согласованию с рецензентом.

Рецензия должна раскрывать актуальность представленного материала, степень научной новизны исследования, определять соответствие предлагаемого к публикации текста общему профилю издания и стиль изложения.

Рецензент выносит заключение о возможности опубликования статьи: «рекомендуется», «рекомендуется с учётом исправления замечаний, отмеченных рецензентом» или «не рекомендуется». В случае отрицательной рецензии редакция направляет автору мотивированный отказ, заверенный главным редактором или его заместителем.

В случае несогласия с мнением рецензента автор статьи имеет право предоставить аргументированный ответ в редакцию журнала. Статья может быть направлена на повторное рецензирование, либо на согласование в редакционную коллегию.

При наличии в рецензии рекомендаций по исправлению и доработке статьи автору направляется текст рецензии с предложением учесть их при подготовке нового варианта статьи или аргументированно (частично или полностью) их опровергнуть. Доработанная (переработанная) автором статья повторно направляется на рецензирование и рассматривается в общем порядке. В этом случае датой поступления в редакцию считается дата возвращения доработанной статьи.

После принятия редколлекцией решения о допуске статьи к публикации автор информируется об этом и указываются сроки публикации.

Оригиналы рецензий хранятся в редакции в течение пяти лет.

Авторская этика

Авторы публикаций должны гарантировать, что в список авторов включены только лица, соответствующие критериям авторства (лица, внёсшие значительный вклад в работу), и что заслуживающие авторства исследователи не исключены из списка авторов.

Должны работать вместе с редакторами или издателями для скорейшего исправления своих работ в случае обнаружения в них ошибок или упущений после публикации.

Обязаны незамедлительно уведомлять редакцию в случае обнаружения ошибки в любой поданной ими на публикацию, принятой для публикации или уже опубликованной работе.

Не вправе копировать из других публикаций ссылки на работы, с которыми они сами не ознакомились; цитаты и ссылки на другие работы должны быть точными и оформленными в соответствии с предъявляемыми требованиями.

Должны ссылаться максимально правильно и точно на имеющие отношение к публикации предыдущие работы как других исследователей, так и самих авторов, обращаясь, прежде всего к первоисточнику; дословное воспроизведение собственных работ и их перефразирование неприемлемы, они могут быть использованы лишь в качестве основы для новых выводов.

Необходимо указывать авторство данных, текста, рисунков и идей, которые автор получил из других источников — они не должны представляться, как принадлежащие автору публикации; прямые цитаты из работ других исследователей должны выделяться кавычками и соответствующей ссылкой.

Должны соблюдать нормы законодательства о защите авторских прав; материалы, защищённые авторским правом (например, таблицы, цифры или крупные цитаты), могут воспроизводиться только с разрешения их владельцев.

Памятка для перевода должностей, учёных степеней и званий на английский язык

Профессор = Professor

Доцент = Associate Professor

Старший преподаватель = Assistant Professor

Преподаватель = Instructor

Ассистент = Instructor

Аспирант = Postgraduate Student или Ph.D. Student

Соискатель = Ph.D. Doctoral Candidate

Магистрант = Master's Degree Student

Студент = Student

д.ф.-м.н. = Dr.Sc. (Phys.-Math.)

к.ф.-м.н. = Ph.D. (Phys.-Math.)

д.т.н. = Dr.Sc. (Techn.)

к.т.н. = Ph.D. (Techn.)

Инженер-программист = Software Engineer

Старший/младший научный сотрудник = Senior/Junior Scientist Researcher

Электронная почта для отправки статей

dmtree@ya.ru — зам. главного редактора (ответственный за выпуск) Д.Н. Лавров.

Научный журнал

Математические структуры И моделирование

№ 4 (72)

Главный редактор
А.К. Гуц

Зам. гл. ред., выпускающий редактор
Д.Н. Лавров

Зам. гл. ред., технический редактор
Н.Ф. Богаченко

Корректор:
Д.С. Нерозник

Перевод на английский язык в авторской редакции

Адрес научной редакции

644077, Омская обл., г. Омск, пр-т Мира, д. 55а,

Омский государственный университет

E-mail: aguts@mail.ru, dmtrl@ya.ru

Электронная версия журнала:

<http://msm.omsu.ru>

<http://msm.univer.omsk.su>



Подписано в печать 03.12.2024. Формат 60 × 84 1/8.

Усл. печ. л. 16,4. Тираж 25 экз. Заказ № 320.

Отпечатано на полиграфической базе издательства ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
644077, Омская обл., г. Омск, пр-т Мира, д. 55а

ISSN 2222-8772



9 772222 877005

24072 >

