

Численное исследование точности разностных схем для волновых уравнений

А. С. Анисимова

Институт вычислительной математики

и математической геофизики СО РАН

Новосибирский государственный университет

УДК 519.64

Численно исследованы разностные схемы различной точности. Схемы приведены как для волновых уравнений, так и для волновых систем, переписанных в терминах давление — скорость. Выполнено исследование зависимости фазовой скорости от различных волновых чисел и шагов по пространству, так называемый “дисперсионный анализ”. Приведены результаты расчетов для начальных возмущений различной гладкости и различных чисел Куранта. Исследование проведено на равномерной сетке для стандартной явной разностной схемы и схемы “расширенный крест”, аппроксимирующих двумерное волновое уравнение.

Ключевые слова: волновое уравнение, система волновых уравнений, сеточная задача, разностная схема, дисперсионный анализ.

Введение. Многие задачи геофизики решаются при помощи численного моделирования. При моделировании сеточных волновых задач зачастую возникают численные артефакты. Это происходит из-за скачкообразного уменьшения шага сетки, что приводит к возникновению нефизической отраженной волны. Появление таких артефактов, изучение такой “нефизичности” является актуальной проблемой. Первые упоминания о таких численных отраженных волнах можно встретить в работах [1, 2].

Глобальной целью работы является исследование механизма возникновения отраженных волн и величины ее амплитуды при использовании неравномерной разностной сетки.

Цель данной работы — численное исследование точности явных разностных схем для волнового уравнения и систем уравнений первого порядка в двумерном пространстве.

Заметим, что подобные исследования были проведены в одномерном случае, и результаты были представлены на различных конференциях.

1. Постановка задачи. Исходной задачей для данной работы является задача Коши для двумерного волнового уравнения (см., например, [3]):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (t, x, y) \in (0, 1.5) \times (-2, 2) \times (-2, 2), \quad (1.1)$$

$$u(0, x, y) = \varphi(x, y), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(0, x, y) = 0, \quad (x, y) \in [-2, 2]^2 \quad (1.2)$$

где $\varphi(-2, y) = \varphi(2, y) = \varphi(x, -2) = \varphi(x, 2) = 0$,

$$u(t, -2, y) = u(t, 2, y) = u(t, x, -2) = u(t, x, 2) = 0, \quad t \in (0, 1.5]. \quad (1.3)$$

В дальнейшем будем предполагать, что существует единственное достаточно гладкое решение задачи (1.1)–(1.3), т.е. функция $\varphi(x, y)$ является достаточно гладкой.

2. Уравнения и схемы. В соответствии с [4] рассмотрим разностную схему для численного решения данной задачи. Пусть на временном интервале $t \in (0, 1.5]$ задана равномерная сетка с шагом $\tau = \frac{1}{N} : \omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, \dots, N\}$. и на пространственном интервале $(x, y) \in [-2, 2]^2$ задана, вообще говоря, неравномерная сетка $\omega_{h_x} \times \omega_{h_y} = \{x_{-M_x} = -2 < x_{-M_x+1} < \dots < x_{M_x-1} < x_{M_x} = 2\} \times \{x_{-M_y} = -2 < x_{-M_y+1} < \dots < x_{M_y-1} < x_{M_y} = 2\}$.

2.1. *Пятиточечный шаблон.* Тогда на сетке $\omega_\tau \times \omega_{h_x} \times \omega_{h_y}$ рассмотрим следующую разностную задачу:

$$\frac{u_{ij}^{n+1} - 2u_{ij}^n + u_{ij}^{n-1}}{\tau^2} = \frac{u_{i+1j}^n - 2u_{ij}^n + u_{i-1j}^n}{h_x^2} + \frac{u_{ij+1}^n - 2u_{ij}^n + u_{ij-1}^n}{h_y^2}, \quad (2.1.1)$$

$$n = 1, \dots, N-1, \quad i = -M_x + 1, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y + 1, \dots, M_y - 1.$$

Начальные данные и краевые условия переписуются следующим образом:

$$u_{ij}^0 = G_0(x_i, y_j),$$

$$u_{ij}^1 = u_{ij}^0 + \tau^2 \left(\frac{u_{i+1j}^0 - 2u_{ij}^0 + u_{i-1j}^0}{h_x^2} + \frac{u_{ij+1}^0 - 2u_{ij}^0 + u_{ij-1}^0}{h_y^2} \right), \quad (2.1.2)$$

$$i = -M_x + 1, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y + 1, \dots, M_y - 1$$

$$u_{-M_x j}^n = u_{M_x j}^n = u_{i -M_y}^n = u_{i M_y}^n = 0, \quad n = 0, \dots, N. \quad (2.1.3)$$

Условие устойчивости численного решения дается ограничением (см. [4])

$$\tau^2 \frac{h_x^2 + h_y^2}{h_x^2 h_y^2} \leq 1.$$

Точность схемы обеспечивается порядком аппроксимации $O(\tau^2 + h_x^2 + h_y^2)$.

2.2. *Девятиточечный шаблон.* Тогда на сетке $\omega_\tau \times \omega_{h_x} \times \omega_{h_y}$ рассмотрим следующую разностную задачу:

$$\frac{u_{ij}^{n+1} - 2u_{ij}^n + u_{ij}^{n-1}}{\tau^2} = \frac{u_{i+1j}^n - 2u_{ij}^n + u_{i-1j}^n}{h_x^2} -$$

$$- \frac{u_{i+2j}^n - 4u_{i+1j}^n + 6u_{ij}^n - 4u_{i-1j}^n + u_{i-2j}^n}{12h_x^2} + \frac{u_{ij+1}^n - 2u_{ij}^n + u_{ij-1}^n}{h_y^2} -$$

$$- \frac{u_{ij+2}^n - 4u_{ij+1}^n + 6u_{ij}^n - 4u_{ij-1}^n + u_{ij-2}^n}{12h_y^2}, \quad (2.2.1)$$

$$n = 1, \dots, N - 1, \quad i = -M_x + 1, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y + 1, \dots, M_y - 1.$$

Начальные данные и краевые условия переписутся следующим образом:

$$u_{ij}^0 = G_0(x_i, y_j),$$

$$u_{ij}^1 = u_{ij}^0 + \tau^2 \left(\frac{u_{i+1j}^0 - 2u_{ij}^0 + u_{i-1j}^0}{h_x^2} - \right. \quad (2.2.2)$$

$$- \frac{u_{i+2j}^0 - 4u_{i+1j}^0 + 6u_{ij}^0 - 4u_{i-1j}^0 + u_{i-2j}^0}{12h_x^2} +$$

$$+ \left. \frac{u_{ij+1}^0 - 2u_{ij}^0 + u_{ij-1}^0}{h_y^2} - \frac{u_{ij+2}^0 - 4u_{ij+1}^0 + 6u_{ij}^0 - 4u_{ij-1}^0 + u_{ij-2}^0}{12h_y^2} \right),$$

$$i = -M_x + 1, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y + 1, \dots, M_y - 1,$$

Таблица 1

Сходимость по времени и пространству для пятиточечного шаблона

h	ϵ_C	ϵ_{L_2}
1/640	0.001219	0.000298
1/320	0.002509	0.000609
1/160	0.007505	0.001892
1/80	0.024198	0.006549
1/40	0.044672	0.015926

Таблица 2

Сходимость по времени и пространству для девятиточечного шаблона

h	ϵ_C	ϵ_{L_2}
1/640	0	0
1/320	0.000005	0.000001
1/160	0.000078	0.000015
1/80	0.001102	0.000325
1/40	0.010853	0.004313

$$u_{-M_x j}^n = u_{M_x j}^n = u_{i-M_y}^n = u_{i M_y}^n = 0, \quad n = 0, \dots, N. \quad (2.2.3)$$

Условие устойчивости численного решения дается ограничением (см. [4])

$$\tau^2 \frac{h_x^2 + h_y^2}{h_x^2 h_y^2} \leq \frac{12}{13}.$$

Точность схемы обеспечивается порядком аппроксимации $O(\tau^2 + h_x^4 + h_y^4)$.

2.3. Численное исследование точности волновых уравнений.

Пример 2.1. Рассмотрим функцию

$$G_0 = \begin{cases} \cos^4 \frac{\pi x}{2h_0} \cos^4 \frac{\pi y}{2h_0}, & \text{если } -h_0 \leq x, y \leq h_0, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

В табл. 1 приведены результаты для пятиточечного шаблона при сечении $x = y$ для $h_0 = 0.1$, показывающие, что при уменьшении шагов по времени и пространству в 2 раза, ошибка уменьшается в среднем в 4 раза.

В табл. 2 приведены результаты для девятиточечного шаблона при сечении $x = y$ для $h_0 = 0.1$, показывающие, что при уменьшении шагов по времени и пространству в 2 раза ошибка уменьшается в среднем в 12 раз.

Таким образом, функция (2.1) является недостаточно гладкой для девятиточечного пространственного шаблона, поэтому в дальнейших исследованиях не рассматривается.

Пример 2.2. Рассмотрим функцию

Таблица 3

Сходимость по пространству для пятиточечного шаблона

h	ϵ_C	ϵ_{L_2}
1/640	0.001514	0.000335
1/320	0.003489	0.000777
1/160	0.011243	0.002553
1/80	0.029313	0.007945
1/40	0.041634	0.016609

Таблица 4

Сходимость по пространству для девятиточечного шаблона

h	ϵ_C	ϵ_{L_2}
1/640	0	0
1/320	0.000011	0.000002
1/160	0.000175	0.000158
1/80	0.00232	0.000652
1/40	0.01372	0.006557

$$G_0 = \begin{cases} \cos^6 \frac{\pi x}{2h_0} \cos^6 \frac{\pi y}{2h_0}, & -h_0 \leq x, y \leq h_0; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (2.3.1)$$

Далее все результаты приведены для $h_0 = 0.1$.

Табл. 3 демонстрирует сходимость по пространству для пятиточечного шаблона. Как видно из таблицы, значение ошибки уменьшается в 4 раза при уменьшении шага в 2 раза.

Для девятиточечного пространственного шаблона и начальной функции (2.3.1) приведена табл. 4. Как видно из нее, при уменьшении шага в 2 раза, ошибка в среднем уменьшается в 15 раз – это близко к четвертому порядку.

Все дальнейшие исследования будут проводиться на основе функции (2.3.1).

Заметим, что в качестве точного решения берутся расчеты, полученные для девятиточечного шаблона при $\tau = 1/1280$ и $h = 1/640$.

Таким образом, все дальнейшие исследования будут проводиться на основе функции (2.3.1).

3. Система уравнений первого порядка. Перепишем исходное уравнение в терминах скорость – давление. Введем следующие обозначения:

$$v = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad w_x = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad w_y = \frac{\partial u}{\partial y}.$$

Тогда задача Коши (1.1)–(1.3) переписется в виде:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y}, \quad \frac{\partial w_x}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \frac{\partial w_y}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial y},$$

$$\begin{aligned} (t, x, y) &\in (0, 1.5) \times (-2, 2) \times (-2, 2), \\ v(0, x, y) &= 0, \quad w_x(0, x, y) = \frac{\partial G_0}{\partial x}(x, y), \\ w_y(0, x, y) &= \frac{\partial G_0}{\partial y}(x, y), \quad (x, y) \in (-2, 2)^2, \end{aligned}$$

$$v(t, -2, y) = v(t, 2, y) = v(t, x, -2) = v(t, x, 2) = 0, \quad t \in (0, 1.5].$$

Далее, положим

$$v_{ij}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n}{\tau}, \quad w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^n = \frac{u_{i+1j}^n - u_{ij}^n}{h_x}, \quad w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^n = \frac{u_{ij+1}^n - u_{ij}^n}{h_y}, \quad (3.1)$$

т. е. скорость вычисляется в дробных узлах по времени, а давление — в дробных узлах по пространству.

3.1. *Пятиточечный шаблон.* Разностные уравнения для пятиточечного пространственного шаблона имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^{n+1} - w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^n}{\tau} &= \frac{v_{i+1j}^{n+\frac{1}{2}} - v_{ij}^{n+\frac{1}{2}}}{h_x}, \\ n = 0, \dots, N-1, \quad i &= -M_x, \dots, M_x-1, \quad j = -M_y, \dots, M_y-1, \\ \frac{w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^{n+1} - w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^n}{\tau} &= \frac{v_{ij+1}^{n+\frac{1}{2}} - v_{ij}^{n+\frac{1}{2}}}{h_y}, \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

$$\begin{aligned} n = 0, \dots, N-1, \quad i &= -M_x, \dots, M_x-1, \quad j = -M_y, \dots, M_y-1, \\ \frac{v_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - v_{ij}^{n-\frac{1}{2}}}{\tau} &= \frac{w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^n - w_{x_{i-\frac{1}{2}j}}^n}{h_x} + \frac{w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^n - w_{y_{ij-\frac{1}{2}}}^n}{h_y}, \quad (3.1.2) \\ n = 1, \dots, N-1, \quad i &= -M_x, \dots, M_x-1, \quad j = -M_y, \dots, M_y-1. \end{aligned}$$

Отметим, что подстановка (3.4) в (3.1.1), (3.1.2) приводит к уравнению (2.1.1). Начальные данные и краевые условия зададим таким образом, чтобы сеточная задача для системы уравнений с учетом (3.4) была эквивалентна задаче (2.1.1)–(2.1.3). Как легко видеть, из (2.1.2), (2.1.3) и (3.4) следует:

$$w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^0 = \frac{G_0(x_{i+1}, y_j) - G_0(x_i, y_j)}{h_x},$$

$$\begin{aligned}
 i &= -M_x, \dots, M_x - 1, & j &= -M_y, \dots, M_y - 1, \\
 w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^0 &= \frac{G_0(x_i, y_{j+1}) - G_0(x_i, y_j)}{h_y}, \\
 i &= -M_x, \dots, M_x - 1, & j &= -M_y, \dots, M_y - 1, \\
 v_{ij}^{\frac{1}{2}} &= 2\tau \left(\frac{w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^0 - w_{x_{i-\frac{1}{2}j}}^0}{h_x} + \frac{w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^0 - w_{y_{ij-\frac{1}{2}}}^0}{h_y} \right), \\
 i &= -M_x + 1, \dots, M_x - 1, & j &= -M_y + 1, \dots, M_y - 1, \\
 v_{-M_x j}^{n+\frac{1}{2}} &= v_{M_x j}^{n+\frac{1}{2}} = v_{i-M_y}^{n+\frac{1}{2}} = v_{iM_y}^{n+\frac{1}{2}} = 0, \\
 n &= 0, \dots, N.
 \end{aligned}$$

Отметим, что подстановка (3.4) в (3.1.1) и (3.1.2) приводит к уравнениям (2.1.1). Начальные данные и краевые условия зададим таким образом, чтобы сеточная задача для системы уравнений с учетом (3.4) была эквивалентна задаче (2.1.1)–(2.1.3).

3.2. *Девятиточечный шаблон.* Разностные уравнения для девятиточечного пространственного шаблона имеют вид:

$$\begin{aligned}
 \frac{w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^{n+1} - w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^n}{\tau} &= \frac{v_{i+\frac{1}{2}j}^{n+\frac{1}{2}} - v_{ij}^{n+\frac{1}{2}}}{h_x}, \\
 n = 0, \dots, N - 1, & \quad i = -M_x, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y, \dots, M_y - 1, \\
 \frac{w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^{n+1} - w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^n}{\tau} &= \frac{v_{ij+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - v_{ij}^{n+\frac{1}{2}}}{h_y}, \tag{3.2.1} \\
 n = 0, \dots, N - 1, & \quad i = -M_x, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y, \dots, M_y - 1,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{v_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - v_{ij}^{n-\frac{1}{2}}}{\tau} &= \frac{w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^n - w_{x_{i-\frac{1}{2}j}}^n}{h_x} + \\
 &+ \frac{w_{x_{i+\frac{3}{2}j}}^n - 3w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^n + 3w_{x_{i-\frac{1}{2}j}}^n - w_{x_{i-\frac{3}{2}j}}^n}{12h_x} + \frac{w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^n - w_{y_{ij-\frac{1}{2}}}^n}{h_y} + \\
 &+ \frac{w_{y_{ij+\frac{3}{2}}}^n - 3w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^n + 3w_{y_{ij-\frac{1}{2}}}^n - w_{y_{ij-\frac{3}{2}}}^n}{12h_y}, \tag{3.2.2}
 \end{aligned}$$

$$n = 1, \dots, N - 1, \quad i = -M_x, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y, \dots, M_y - 1.$$

Отметим, что подстановка (3.4) в (3.2.1), (3.2.2) приводит к уравнениям (3.2.1). Начальные данные и краевые условия зададим таким образом, чтобы сеточная задача для системы уравнений с учетом (3.4) была эквивалентна задаче (2.2.1)–(2.2.3). Из (2.2.2), (2.2.3) и (3.4) следует:

$$w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^0 = \frac{G_0(x_{i+1}, y_j) - G_0(x_i, y_j)}{h_x},$$

$$i = -M_x, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y, \dots, M_y - 1,$$

$$w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^0 = \frac{G_0(x_{i+1}, y_{j+1}) - G_0(x_i, y_j)}{h_y},$$

$$i = -M_x, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y, \dots, M_y - 1,$$

$$v_{ij}^{\frac{1}{2}} = 2\tau \left(\frac{w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^0 - w_{x_{i-\frac{1}{2}j}}^0}{h_x} + \frac{w_{x_{i+\frac{3}{2}j}}^0 - 3w_{x_{i+\frac{1}{2}j}}^0 + 3w_{x_{i-\frac{1}{2}j}}^0 - w_{x_{i-\frac{3}{2}j}}^0}{12h_x} + \right. \\ \left. + \frac{w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^0 - w_{y_{ij-\frac{1}{2}}}^0}{h_y} + \frac{w_{y_{ij+\frac{3}{2}}}^0 - 3w_{y_{ij+\frac{1}{2}}}^0 + 3w_{y_{ij-\frac{1}{2}}}^0 - w_{y_{ij-\frac{3}{2}}}^0}{12h_y} \right),$$

$$i = -M_x + 1, \dots, M_x - 1, \quad j = -M_y + 1, \dots, M_y - 1,$$

$$v_{-M_x j}^{n+\frac{1}{2}} = v_{M_x j}^{n+\frac{1}{2}} = v_{i-M_y}^{n+\frac{1}{2}} = v_{iM_y}^{n+\frac{1}{2}} = 0, \quad n = 0, \dots, N.$$

Отметим, что подстановка (3.4) в (3.2.1), (3.2.2) приводит к уравнениям (2.2.1). Начальные данные и краевые условия зададим таким образом, чтобы сеточная задача для системы уравнений с учетом (3.4) была эквивалентна задаче (2.2.1)–(2.2.3).

4. Дисперсионный анализ.

4.1. *Пятиточечный шаблон.* Рассмотрим частное решение разностной схемы (2.1.1) вида

$$u_{lm}^n = e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{x})}, \quad (4.1.1)$$

где $t = n\tau$, $\vec{x} = (lh_x, mh_y)$. Кроме того, λ — длина волны; $h_x = \lambda/M_x$; $h_y = \lambda/M_y$; $\vec{k} = (k_x, k_y)$ — волновой вектор; $|k| = 2\pi/\lambda$; ω — частота. Подставим (4.1.1) в (2.1.1). В результате приходим к равенству

$$\frac{e^{i\omega\tau} - 2 + e^{-i\omega\tau}}{\tau^2} = \frac{e^{ik_x h_x} - 2 + e^{-ik_x h_x}}{h_x^2} + \frac{e^{ik_y h_y} - 2 + e^{-ik_y h_y}}{h_y^2},$$

или, упрощая, получим

$$\frac{\sin^2 \frac{\omega\tau}{2}}{\tau^2} = \frac{1 - \cos k_x h_x}{2h_x^2} + \frac{1 - \cos k_y h_y}{2h_y^2}. \quad (4.1.2)$$

Для дальнейшего упрощения полагаем $h = h_x = h_y$ и $cour = \tau/h$, как число Куранта в одномерном случае. В соответствии с введенными выше обозначениями

$$|k|h/2 = \pi M, \quad \omega\tau/2 = V_h \cdot cour \cdot \pi/M$$

где $V_h = \omega/k$ – сеточная фазовая скорость. Тогда (4.1.2) задает формулу сеточной фазовой скорости:

$$V_h = \frac{1}{cour} \frac{M}{\pi} \arcsin(cour \sqrt{1 - \cos \frac{k_x + k_y}{2} h \cdot \cos \frac{k_x - k_y}{2} h}). \quad (4.1.3)$$

Для проверки полагаем, например, $k_x = 0$ и $cour = 1$. Упрощая (4.1.3), получаем $V_h = 1$. Таким образом, получен переход к одномерному случаю, для которого фазовая скорость $V = 1$.

4.2. *Девятиточечный шаблон.* Аналогичные преобразования проводятся и для девятиточечного шаблона. Подставляя (4.1.1) в (2.2.1), приходим к равенству

$$\begin{aligned} \frac{e^{i\omega\tau} - 2 + e^{-i\omega\tau}}{\tau^2} &= \frac{e^{ik_x h_x} - 2 + e^{-ik_x h_x}}{h_x^2} - \\ &\quad \frac{e^{2ik_x h_x} - 4e^{ik_x h_x} + 6 - 4e^{-ik_x h_x} + e^{-2ik_x h_x}}{12h_x^2} + \\ &+ \frac{e^{ik_y h_y} - 2 + e^{-ik_y h_y}}{h_y^2} + \frac{e^{2ik_y h_y} - 4e^{ik_y h_y} + 6 - 4e^{-ik_y h_y} + e^{-2ik_y h_y}}{12h_y^2}. \end{aligned}$$

Упрощая, получим:

$$\frac{\sin^2 \frac{\omega\tau}{2}}{\tau^2} = \frac{\sin^2 k_x h_x}{h_x^2} + \frac{\sin^4 k_x h_x}{12h_x^2} + \frac{\sin^2 k_y h_y}{h_y^2} + \frac{\sin^4 k_y h_y}{12h_y^2}. \quad (4.2.1)$$

Для дальнейшего упрощения полагаем $h = h_x = h_y$, другие обозначения аналогичны предыдущему случаю. Тогда (4.2.1) задает формулу сеточной фазовой скорости:

$$V_h = \frac{1}{\text{cour}} \frac{M}{\pi} \arcsin \left(\frac{\text{cour}}{4} \times \sqrt{\frac{51 - 52 \cos \frac{k_x + k_y}{2} h \cos \frac{k_x - k_y}{2} h}{3} + \cos(k_x + k_y) h \cos(k_x - k_y) h} \right).$$

Проверка проводилась аналогично.

Заключение. В представленной работе приведены результаты исследования точности разностных схем для волнового уравнения и системы уравнений первого порядка в двумерном случае, а также дисперсионный анализ для данных схем.

Данная работа является первым этапом работы, направленной на численное исследование двумерной задачи при различных способах измельчения сетки, а также на поиск новых эффективных средств борьбы с численными артефактами.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Ю. М. Лаевский.

Список литературы

1. Browning G., Kreiss H.-O., Olinger J. Mesh refinement // *Math. Comp.* 1973. N 27. P. 29–39.
2. Trefethen L. N. Group velocity in finite difference schemes // *SIAM Review.* 1982. N 24. P. 113–135.
3. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977.
4. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
5. Анисимова А. С. Исследование влияния скачка шага пространственной сетки для сеточных аппроксимаций волнового уравнения // Труды конференции молодых ученых ИВМиМГ СО РАН. 2015. С. 3–14. [Electron/ resource]. http://elibrary.ru/download/elibrary_26651690_94248330.pdf.

*Анисимова Анастасия Сергеевна — магистрант
Новосибирского государственного университета;
e-mail: nastya-anisimova@list.ru*

Алгоритмы и модули динамического планирования вычислительной нагрузки в системе фрагментированного программирования LuNA

Н. А. Беляев

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

Новосибирский государственный технический университет

УДК 519.685.1

Разработан алгоритм динамического распределения вычислительной нагрузки между CPU и GPU для системы LuNA, разрабатываемой в ИВМиМГ СО РАН. Предлагаемый алгоритм реализован в виде модуля для системы LuNA. Система LuNA со встроенным модулем распределения нагрузки протестирована на тестовой задаче умножения матриц. **Ключевые слова:** CUDA, GPU, балансировка, распределение нагрузки.

Введение. Для решения больших задач численного моделирования и вычислительной математики активно применяются суперкомпьютеры, состоящие из большого числа узлов, соединенных высокоскоростной сетью. Узел суперкомпьютера, в свою очередь, может состоять из вычислительных устройств, имеющих различные архитектуры. Для построения суперкомпьютеров часто применяются специализированные вычислительные устройства в составе узлов, такие как ускорители Intel Xeon Phi или графические карты Nvidia. Такие специализированные вычислительные устройства способны повысить производительность суперкомпьютера, однако их применение усложняет разработку параллельных программ, эффективно утилизирующих все доступные ресурсы суперкомпьютера. Обеспечение эффективного использования параллельной программой всех доступных вычислительных устройств в узле суперкомпьютера является сложной задачей системного параллельного программирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке студенческого гранта Новосибирского государственного технического университета.

ния. Частичная или полная автоматизация обеспечения необходимых свойств параллельных программ системами параллельного программирования позволит значительно упростить и ускорить разработку параллельных программ.

В настоящее время существуют средства параллельного программирования, обеспечивающие возможность вовлекать в вычисления специализированные вычислительные устройства в составе узлов суперкомпьютера. OpenCL [1] – это открытый фреймворк для создания параллельных программ, использующих для работы вычислительные устройства, построенные на различных архитектурах. OpenCL включает в себя компилятор встроенного Си-подобного языка и исполнительную систему. Параллельная программа разбивается на множество задач, записываемых на встроенном языке OpenCL. OpenCL представляет собой низкоуровневое средство параллельного программирования. Разработчик параллельных программ, помимо непосредственно подпрограмм, выполняемых на специализированных вычислительных устройствах, программирует логику их взаимодействия, передачи входных и выходных данных каждой подпрограммы и задает распределение ресурсов, используя API OpenCL. OpenACC [2] является открытым стандартом, описывающим набор директив компилятора для работы с GPU. Директивы OpenACC синтаксически схожи с аналогичными директивами OpenMP [3]. OpenACC компилирует код, помеченный директивами, в машинный код для GPU и управляет пересылками данных и запуском кода на GPU.

Система фрагментированного программирования LuNA [4], разрабатываемая в Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, представляет собой систему параллельного программирования, ориентированную на решение больших задач численного моделирования и вычислительной математики. Система LuNA частично абстрагирует разработчика параллельных программ от решения ряда задач системного параллельного программирования, однако позволяет вовлекать в вычисления только CPU в составе вычислительных узлов суперкомпьютера.

Целью работы является разработка алгоритмов динамического планирования вычислительной нагрузки и реализация разработанных алгоритмов в виде модулей для системы фрагментированного программирования LuNA.



Рис. 1. Устройство системы LuNA

1. Система фрагментированного программирования LuNA. Система LuNA состоит из компилятора языка LuNA и исполнительной системы, работающей в распределенной памяти (рис. 1). Разработчик фрагментированной программы записывает алгоритм на языке LuNA. Фрагментированная программа, записанная на языке LuNA, преобразуется оптимизирующим компилятором системы LuNA во внутреннее представление фрагментированного алгоритма, которое затем может быть исполнено параллельно системой LuNA в распределенной памяти.

Параллельная программа в системе LuNA представляется в виде множества фрагментов вычислений (ФВ) и фрагментов данных (ФД). ФД представляет в технологии фрагментированного программирования переменные алгоритма. ФД являются переменными единственного присваивания. Значение ФД может быть базового (вещественного или целочисленного) или структурированного типа. ФВ представляет собой исполняемую единицу, обрабатывающую значения своих входных ФД и вычисляющую на их основе значения своих выходных ФД. Фрагментированная программа может быть также представлена в виде двудольного ориентированного графа, вершинами которого являются ФД и ФВ, а дуги показывают информационные зависимости между ФВ. Пример фрагментированной программы, представленной в виде графа, приведен на рис. 2.

На рис. 2 окружностями обозначены ФД, прямоугольниками — ФВ. В данном примере системой параллельно могут быть выполнены ФВ f_1 и f_2 ввиду отсутствия между ними информационной зависимости. Рассмотрим подробнее устройство исполнительной системы LuNA. Архитектура исполнительной системы LuNA приведена на рис. 3.

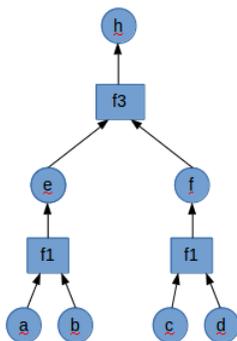


Рис. 2. Пример фрагментированной программы, представленный в виде графа

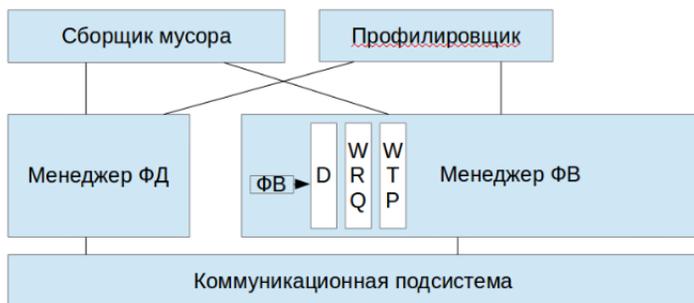


Рис. 3. Архитектура исполнительной системы LuNA

Исполнительная система LuNA состоит из двух основных компонент: менеджера ФВ и менеджера ФД. Менеджер ФД представляет собой распределенное хранилище ФД, обеспечивающее доступ системы к ФД, хранящимся в памяти узлов суперкомпьютера. Менеджер ФВ обеспечивает исполнение ФВ на узлах суперкомпьютера и представляет собой конвейер (рис. 4).

На стадии Distributor определяется узел суперкомпьютера, на котором ФВ будет исполнен. В случае, если целевой узел является текущим, ФВ поступает на стадию Queue, иначе происходит передача ФВ на необходимый узел с помощью коммуникационного слоя. На стадии Queue ФВ ожидает готовности всех его входных ФД. Входные ФД запрашиваются у менеджера ФД. Готовый к исполнению

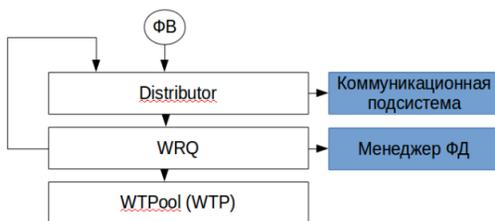


Рис. 4. Архитектура менеджера ФВ

ФВ поступает на последнюю стадию – WTPool, представляющую собой распределенную очередь задач. ФВ помещается в очередь, откуда извлекается рабочим потоком, исполняющим ФВ.

2. Распределение нагрузки между CPU и GPU в системе LuNA. Для вовлечения GPU в вычисления с использованием системы LuNA необходимо разработать алгоритм и модуль динамического распределения нагрузки между GPU и CPU для системы LuNA. Алгоритм динамического планирования нагрузки должен назначать ФВ для вычисления на GPU или CPU так, чтобы по возможности экономить на пересылках данных между CPU и GPU. В общем случае алгоритм распределения нагрузки должен учитывать особенности фрагментированной программы для сокращения количества пересылок между CPU и GPU. Также важно учесть наличие накладных расходов на выполнение распределения нагрузки. В ряде случаев имеет смысл применять простые алгоритмы распределения, не учитывающие особенности фрагментированной программы. Такие алгоритмы применимы в случае, когда невелика продолжительность работы фрагментированной программы на одном узле суперкомпьютера (составляет минуты) или размеры передаваемых ФД невелики. Алгоритм распределения нагрузки реализуется в виде модуля для системы LuNA. Архитектура модуля должна позволять применение различных алгоритмов распределения нагрузки.

Далее рассматривается алгоритм распределения нагрузки, разработанный для случаев, когда выгодно применять простые алгоритмы распределения нагрузки с малыми накладными расходами. Предлагается алгоритм динамического планирования нагрузки для системы LuNA. Распределение вычислительной нагрузки между CPU и GPU Nvidia внутри узла суперкомпьютера выполняется путем назначения

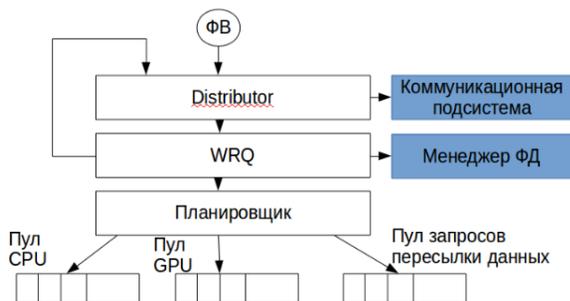


Рис. 5. Архитектура менеджера ФВ с поддержкой модуля динамического планирования нагрузки

ФВ на исполнение на CPU или GPU согласно алгоритму динамического планирования нагрузки. При назначении ФВ для исполнения на GPU входные данные автоматически копируются в память GPU. Предлагаемая архитектура менеджера ФВ с поддержкой модуля динамического планирования нагрузки приведена на рис. 5.

В архитектуру менеджера ФВ добавлен новый модуль, заменяющий пул потоков, исполняющих ФВ. Модуль состоит из планировщика, пула запросов копирования данных и пулов ФВ, назначенных для исполнения на CPU и GPU. Архитектура модуля и менеджера ФВ с поддержкой модуля распределения нагрузки позволяет применять различные алгоритмы распределения нагрузки. Модуль также является заменяемым.

Планировщик для каждого ФВ принимает решение о назначении ФВ на GPU или CPU в зависимости от текущей загрузки вычислительного устройства и наличия реализации ФВ для исполнения на вычислительном устройстве. В случае, если в памяти вычислительного устройства находится не все множество входных ФД для назначенного ФВ, создается запрос на асинхронное копирование недостающих данных в память вычислительного устройства. Запрос затем помещается в пул запросов на копирование данных. Запросы выполняются асинхронно одним рабочим потоком. После окончания выполнения запроса ассоциированный с ним ФВ помещается в пул ФВ, назначенных на исполнение согласно указанию планировщика. После окончания выполнения ФВ на GPU его выходные ФД остаются в памяти GPU. В дальнейшем при назначении для исполнения на

GPU ФВ, входные ФД которого уже находятся в памяти GPU, их копирование не производится, что уменьшает накладные расходы на копирование данных между CPU и GPU. При необходимости ФД могут быть скопированы в оперативную память также с помощью механизма запросов на копирование данных. Память GPU освобождается в случае, если входные ФД, назначенного для исполнения на GPU ФВ, не помещаются в памяти GPU, а также в случае, если после отработки ФВ, назначенного для исполнения на GPU, в памяти GPU недостаточно свободного места для размещения выходных ФД. При освобождении памяти ФД, не помеченные как удаленные сборщиком мусора, копируются в оперативную память, если они там отсутствуют. При этом для каждого ФД, порожденного исполнительной системой LuNA, в любой момент выполнения фрагментированной программы известен факт нахождения его копий в оперативной памяти и в памяти GPU.

Описанный алгоритм позволяет экономить на пересылках данных в случае, если ФД находятся в памяти вычислительного устройства, для выполнения на котором текущий ФВ был назначен. Алгоритм не обеспечивает оптимального распределения ресурсов, однако практически не вносит дополнительных накладных расходов на принятие решения о назначении ФВ для исполнения на вычислительном устройстве.

3. Тестирование. Разработанный модуль был встроен в систему LuNA. Проведено сравнение производительности системы со встроенным модулем и вовлечением в вычисления GPU и без использования GPU. В качестве тестовой задачи выбрана задача параллельного умножения плотных матриц ввиду простоты реализации фрагментированного алгоритма. На рис. 6 представлены результаты тестирования. По оси абсцисс отложено произведение размера подматрицы (ФД) на число подматриц, по оси ординат — время выполнения.

В вычислениях, выполняемых с помощью системы LuNA, удалось использовать GPU, поддерживающие технологию Nvidia CUDA. Это подтверждается приростом производительности при использовании разработанного модуля распределения нагрузки между GPU и CPU.

Заключение. Разработана архитектура модуля динамического планирования нагрузки для системы LuNA. Разработан алгоритм динамического распределения нагрузки между CPU и GPU для системы LuNA в соответствии с поставленными требованиями и разра-

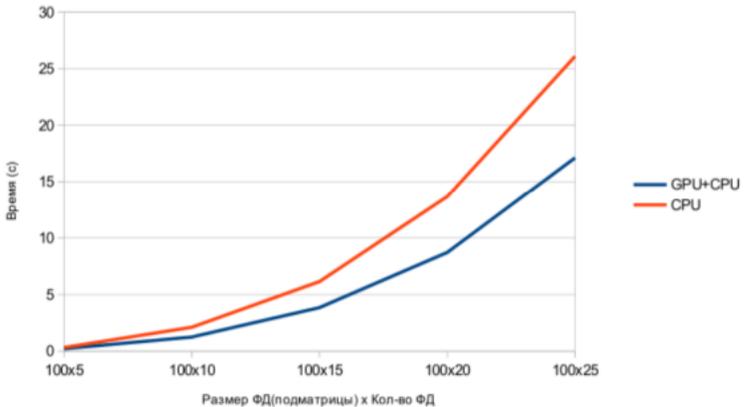


Рис. 6. Результаты тестирования

ботанной архитектурой модуля. Модуль позволяет вовлекать в вычисления, проводимые с помощью системы LuNA, GPU, построенные по технологии Nvidia CUDA. Модуль был реализован и встроен в систему LuNA. В планы входит разработка интеллектуального модуля распределения нагрузки между CPU, GPU и ускорителями Intel Xeon Phi для системы LuNA, учитывающего особенности фрагментированной программы при распределении нагрузки.

Научный руководитель — д-р тех. наук, проф. В. Э. Малышкин.

Список литературы

- [1] [Electron. resource]. <https://www.khronos.org/opencv/>.
- [2] [Electron. resource]. <http://www.openacc.org/>.
- [3] [Electron. resource]. <http://openmp.org/wp/>.
- [4] Malyshev V. E., Perepelkin V. A. LuNA fragmented programming system, main functions and peculiarities of run-time subsystem // Proc. of the 11th conference on parallel computing technologies, LNCS 6873. Springer, New York, 2011. P. 53–61.

Беляев Николай Алексеевич — магистрант Новосибирского государственного технического университета; инженер Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; e-mail: bl0ckzer01@gmail.com

Задачи нечеткого моделирования сетей

К. Е. Гарбузов

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

УДК 519.6

Рассмотрено использование нечеткой логики в моделировании телекоммуникационных сетей. Проведен обзор основных понятий из теории нечеткой логики, которые можно положить в основу новых методов для исследования сложных структур. Рассмотрена задача “нечеткого предсказания” для модели транспортной сети с потоками и приведен алгоритм ее возможного решения.

Ключевые слова: телекоммуникационные сети, транспортные сети, нечеткая логика, нечеткое число.

Введение. Задача оценки надежности телекоммуникационной сети по известным параметрам занимает очень важную нишу в современном проектировании. В подавляющем большинстве случаев используется вероятностный подход, который, однако, имеет некоторые ограничения. В частности, иногда объем доступных статистических данных бывает недостаточным или приходится полагаться на мнение экспертов, которые не готовы предоставить точную информацию. Кроме того, другие классические задачи, связанные с транспортными сетями, тоже опираются на точные значения входных параметров (пропускные способности, стоимости), что не всегда можно сопоставить с реальной ситуацией, если речь идет о моделировании конкретной транспортной сети. Другим подходом является использование нечетких чисел, позволяющих использовать богатый инструментарий нечеткой логики при решении таких задач [1–4]. Различные виды представления нечеткости дают удобные способы задания параметров модели в рамках конкретной проблемы. Кроме того, такой метод позволяет ставить новые задачи, возможно, не имеющие смысла при классическом подходе. В контексте данной работы речь в первую очередь идет о так называемой теории приближенных

вычислений, или нечеткой логике в широком смысле. Основным понятием этой теории является нечеткое множество, определяемое при помощи характеристической функции. В частности, рассматривается особый вид таких множеств — треугольные числа, для которых вводятся специальные операции, используемые при вычислениях.

1. Основные определения. Пусть U — множество в классическом понятии. Тогда нечетким множеством A назовем такую совокупность пар:

$$A = \{ \langle x, \mu_A(x) \rangle : x \in U \}$$

где $\mu_A(x)$ — функция принадлежности множества U , принимающая любые значения на отрезке $[0, 1]$.

Треугольным нечетким числом называется тройка действительных чисел вида $\langle \delta_l, c, \delta_r \rangle$, которые определяют функцию принадлежности следующим образом:

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 1 - \frac{c-x}{\delta_l}, & x \in [c - \delta_l, c] \\ 1 - \frac{x-c}{\delta_r}, & x \in (c, c + \delta_r] \\ 0, & \end{cases}$$

При этом будем полагать $\langle 0, c, 0 \rangle$ действительным числом.

Операции над треугольными числами могут быть определены множеством различных способов в зависимости от потребностей модели. В данной задаче определим сложение и вычитание следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{1l}, c_1, \delta_{1r} \rangle + \langle \delta_{2l}, c_2, \delta_{2r} \rangle &= \langle \delta_{1l} + \delta_{2l}, c_1 + c_2, \delta_{1r} + \delta_{2r} \rangle, \\ \langle \delta_{1l}, c_1, \delta_{1r} \rangle - \langle \delta_{2l}, c_2, \delta_{2r} \rangle &= \langle \delta_{1l} + \delta_{2r}, c_1 - c_2, \delta_{1r} + \delta_{2l} \rangle. \end{aligned}$$

Это широко распространенный способ проведения мягких вычислений над треугольными числами. Легко заметить, что треугольные числа со сложением такого вида обладают свойствами ассоциативности и коммутативности, причем $\langle 0, 0, 0 \rangle$ является нейтральным элементом, однако такое задание операции вычитания не позволяет определить через нее обратные элементы, поэтому мы имеем дело с моноидом треугольных чисел. Кроме того, такие операции позволяют оставить за числами вида $\langle 0, c, 0 \rangle$ значение обычных вещественных чисел (в отличие, например, от поля треугольных чисел,

где операции умножения и сложения определяются при помощи изоморфизма \mathbb{R} на \mathbb{R}^+). Недостатком такого подхода является быстрый рост размытости при большом числе операций, что неприемлемо для некоторых алгоритмов.

Операции сравнения, в свою очередь, задаются в виде:

$$\langle \delta_{1l}, c_1, \delta_{1r} \rangle < \langle \delta_{2l}, c_2, \delta_{2r} \rangle \leftrightarrow c_1 + \frac{\delta_{1r} - \delta_{1l}}{4} < c_2 + \frac{\delta_{2r} - \delta_{2l}}{4}.$$

Величины в правой части определения имеют смысл “центра массы” треугольного числа, таким образом, при сравнении двух нечетких параметров учитываются не только их центры, но и границы разброса значений.

Под транспортной сетью понимается ориентированный граф $G = \langle V, E \rangle$, в котором каждое ребро $(u, v) \in E$ имеет неотрицательную пропускную способность $c(u, v) \geq 0$ и поток $f(u, v)$, в данном случае представленные треугольными нечеткими числами. В качестве источника s и стока t без ограничения общности примем первую и последнюю вершины. Кроме того, в рассматриваемой задаче присутствует неотрицательный вес $d(u, v)$ единицы потока по каждому ребру (вещественное число) [5, 6].

Несложно показать, что в терминологии нечетких треугольных чисел выполняются теоремы о равенстве потоков, проходящих через произвольный разрез, потоку из источника и теорема Форда — Фалкерсона о равенстве максимального потока минимальной пропускной способности разрезов. Задача о потоке минимальной стоимости заданной мощности заключается в поиске самого дешевого способа передачи определенного количества потока d через транспортную сеть:

$$\begin{aligned} \sum_{u,v \in V} w(u,v) f(u,v) &\rightarrow \min, \\ f(u,v) &\leq c(u,v), \\ f(u,v) &= -f(v,u), \\ \sum_{v \in V} f(u,v) &= 0 \quad \forall u \in V, \\ \sum_{v \in V} f(s,v) &= d, \end{aligned}$$

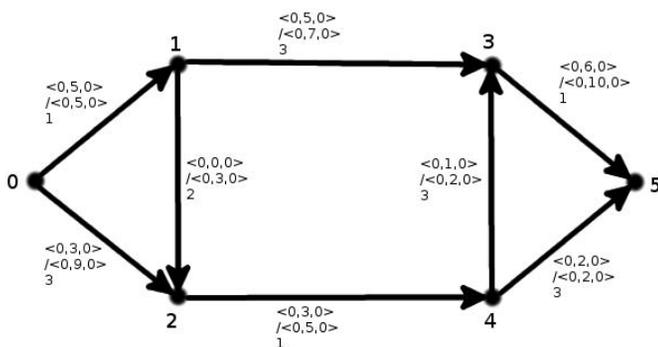


Рис. 1. Начальное распределение потоков

2. Задача “нечеткого предсказания”. Неформальное описание задачи “нечеткого предсказания” состоит в следующем: в заданной модели транспортной сети с фиксированной текущей величиной потока (необязательно максимально возможной) добавляются ребра с заданной пропускной способностью и потоком. Нужно найти, каким образом изменится распределение потоков по всей сети. При этом следует учитывать, что пропускные способности и потоки задаются нечеткими числами (в данном случае треугольными числами с определенными выше операциями).

Практический смысл этой задачи можно объяснить следующим образом. В существующую транспортную сеть с точно известными пропускными способностями каналов и большой статистикой по потокам нужно добавить одну или несколько новых связей между узлами (построить мост, проложить магистраль и т. д.). При этом известна возможная пропускная способность этого нового канала, и эксперты предсказывают приблизительное значение потока по этому пути, исходя из различных соображений, начиная с текущей загруженности сети, заканчивая интуицией. Поскольку это только предположение, параметры будут обладать некоторой размытостью, что можно хорошо описать нечеткими числами. Далее решается задача “нечеткого предсказания” и делается вывод о целесообразности строительства новых транспортных развязок.

На рис. 1 показан пример начального распределения потоков в транспортной сети. Первый параметр — текущий поток, второй —

пропускная способность, третий — стоимость пропускания единицы потока по ребру. Следует заметить, что все пропускные способности и потоки в начальных данных обсуждаемой задачи — треугольные числа с нулевыми размытостями, т. е. аналоги обычных чисел. Величина потока в данном случае равна $\langle 0, 8, 0 \rangle$.

Разработанный алгоритм решения задачи основан на широко известном алгоритме Басакера — Гоуэна для нахождения потока заданной величины с минимальной стоимостью. Модификации заключаются в адаптации алгоритма для работы с нечеткими числами и учитывании обязательного сохранения потока на зафиксированных ребрах. Неформальное описание алгоритма следующее:

Шаг 0. Подготовка исходной сети: зануление потоков, приравнивание пропускной способности новых ребер заданным значениям величин потоков (текущие потоки при этом полагаются равными $\langle 0, 0, 0 \rangle$). Текущая величина потока $V' = 0$. Новые ребра помечаются.

Шаг 1. Построение графа G_f модифицированных стоимостей по следующим правилам:

- а) множество вершин G_f совпадает со множеством вершин G ;
- б) если в графе G $f(u, v) > \langle 0, 0, 0 \rangle$, $f(u, v) < c(u, v)$, то в G_f между вершинами u и v строится прямое ребро с весом $d(u, v)$ и обратное с весом $-d(u, v)$;
- в) если в графе G $f(u, v) = \langle 0, 0, 0 \rangle$, то в G_f между вершинами u и v строится прямое ребро с весом $d(u, v)$;
- г) если в графе G $f(u, v) = c(u, v)$, то в G_f между вершинами u и v строится обратное ребро с весом $-d(u, v)$.

Шаг 2. Поиск кратчайшего пути в графе G_f , проходящего через одно из ненасыщенных помеченных ребер. На соответствующем пути в G находится величина $\epsilon = \min \{c(u_i, v_i) - f(u_i, v_i), f(u_j, v_j), V - V'\}$ (пары с индексами i отвечают прямым ребрам в графе G_f , а пары с индексами j — обратным).

Шаг 3. $V' + = \epsilon$. Если $V' = V$, то Шаг 4, иначе Шаг 1.

Шаг 4. В помеченных ребрах пропускная способность и поток приравниваются целевому.

На рис. 2 показано распределение потоков после добавления нового ребра между вершинами 2 и 3.

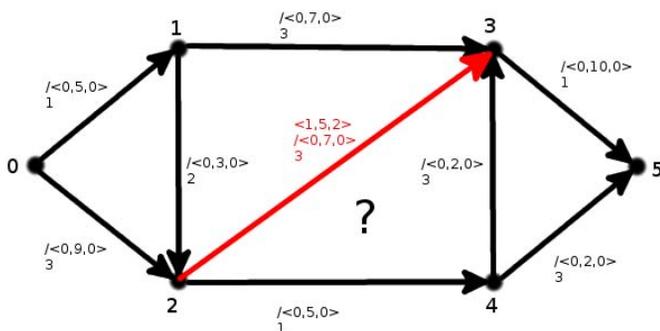


Рис. 2. Распределение потоков после добавления нового ребра

Кратчайший путь в модифицированном графе стоимостей находится с помощью алгоритма Беллмана — Форда. Следует заметить, что у треугольных чисел, границы которых выходят на отрицательную полуось, функция принадлежности равна нулю на этих “недостижимых” значениях.

Приведенный алгоритм был реализован на языке C++ с использованием библиотеки Boost для упрощения работы с матрицами. Тестирование проводилось на случайно сгенерированных сетях с 10–15 вершинами. В дальнейшем планируется проверка алгоритма на моделях реальных транспортных сетей.

Заключение. Использование нечетких моделей позволяет ставить новые задачи, которые не всегда можно корректно сформулировать в рамках классических подходов [7]. В качестве других примеров таких проблем можно привести задачу определения наиболее информативных элементов в сложной структуре или задачу нечеткой укладки в гиперсети.

Научный руководитель — д-р. техн. наук А. С. Родионов.

Список литературы

- [1] Zadeh L. A. Fuzzy logic and the calculi of fuzzy rules and fuzzy graphs // Multiple-Valued Logic. 1996. N 1. P. 1–38,
- [2] Zadeh L. A. A note on Z-numbers // Information Sciences. 2011. V. 181, iss. 14. P. 2923–2932.

-
- [3] Mordeson J., Nair P. Fuzzy graphs and fuzzy hypergraphs. 2000.
 - [4] Бернштейн Л. С., Боженюк А. В. Нечеткие графы и гиперграфы. М.: Научный мир, 2005.
 - [5] Heineman G. T., Pollice G., Selkow S. Chap. 8: Network Flow Algorithms. Algorithms in a Nutshell. Oreilly Media. 2008. P. 226–250. ISBN 978-0-596-51624-6.
 - [6] Ravindra K. Ahuja, Thomas L. Magnanti, James B. Orlin. Network flows: Theory, algorithms and applications. Prentice Hall. 1993. ISBN 0-13-617549-X.
 - [7] Garbuzov K., Rodionov A. S. Some problems of fuzzy modeling of telecommunications networks // Proc. of the Intern. conf. on mathematical methods, mathematical models and simulation in science and engineering (MMSSE 2015).

*Гарбузов Кирилл Евгеньевич — аспирант Института
вычислительной математики и математической
геофизики СО РАН; e-mail: kirill.e.garbuzov@gmail.com*

Исследование эффективности вариационного усвоения данных на примере задачи химической кинетики

А. А. Гришина, А. В. Пененко*

Новосибирский государственный университет

*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

УДК 519.6

На примере системы Робертсона исследуется эффективность применения алгоритмов вариационного усвоения данных. Эта система описывает изменение концентраций трех веществ в ходе трех химических реакций. Численное решение прямой задачи, полученное с помощью алгоритма QSSA, разделяющего реакции по скоростям, использовалось в качестве “данных измерений”, поступающих в систему во время поиска численного решения в задаче усвоения. В этой задаче требовалось определить динамику концентраций всех реагентов по поступающей неполной информации об одном из веществ. В работе описан и реализован алгоритм 3Dvar, исследовано поведение численного решения в зависимости от частоты поступления “данных измерений”, а также величины искусственно вносимого “шума”. Построен и реализован алгоритм вариационного усвоения данных с целью коррекции численного решения для более точного выполнения закона сохранения суммарной массы реагентов.

Ключевые слова: вариационное усвоение данных, метод сопряженных множителей Лагранжа, минимизация целевого функционала, система Робертсона, химическая кинетика, Quasi Steady-State Approximation, 3Dvar.

Введение. Задачи прогнозирования разномасштабных быстро изменяющихся во времени процессов возникают при математическом

Работа выполняется при финансовой поддержке программы Президиума РАН (гранты I.33П и II.2П/I.3-3), проекта МК-8214.2016.1 и Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 14-01-00125).

моделировании в атмосферной химии, биологии, медицине. Они могут быть описаны параболическим уравнением конвекции — диффузии — реакции, характеризующим перенос вещества, а также взаимодействие между реагентами [1]. При этом, если имеется возможность наблюдать за исследуемым процессом и измерять используемые при моделировании величины, можно применить методы усвоения данных. Они заключаются в совместном использовании математической модели и поступающих в реальном времени данных наблюдений. Такой подход может улучшить качество прогноза — численного решения, построенного на основе только математической постановки, так как при поступлении данных наблюдений производится коррекция численного решения, и дальнейший прогноз может стать точнее.

Таким образом, в задачах усвоения данных решается последовательность связанных обратных задач с различными наборами данных измерений, которые поступают в реальном времени. В отличие от обратных задач, в которых дополнительная информация о системе имеется к моменту начала вычислений, в задачах усвоения данных может потребоваться получить прогноз решения еще до поступления первых измерений.

В работе задача усвоения данных поставлена для системы Робертсона — системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающей взаимодействие веществ в результате только химических реакций, без учета конвекции и диффузии. В качестве поступающих “данных наблюдений” в первом сценарии взято численное решение прямой задачи, а в следующем сценарии в него дополнительно вводится “шум”. В работе был применен метод вариационного усвоения данных *3Dvar* для исследования возможности прогнозирования полной картины процесса по поступающим неполным “данным наблюдений”.

В работе также построен и применен алгоритм вариационной коррекции получаемого численного решения с целью более точного выполнения закона сохранения суммарной массы реагентов.

1. Постановка прямой задачи. На промежутке времени $0 \leq t \leq T$, где $T > 0$ — вещественное число, соответствующее границе интервала по времени, рассмотрим систему Робертсона, описывающую взаимодействие трех веществ в ходе трех химических реакций. Она представима в виде нелинейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -k_1 y_1 + k_2 y_2 y_3, \\ \dot{y}_2 = k_1 y_1 - k_2 y_2 y_3 - k_3 y_2^2, \\ \dot{y}_3 = k_3 y_2^2, \end{cases} \quad (1.1)$$

где

$$k_1 = 0.04, \quad k_2 = 10^4, \quad k_3 = 3 \cdot 10^7, \quad (1.2)$$

k_j ($j = 1, 2, 3$) — константа скорости i -й химической реакции; y_i ($i = 1, 2, 3$) — искомые значения концентраций реагентов.

Система Робертсона является классическим примером жесткой задачи [2]. В ней, согласно (1.2), отношение констант скоростей реакций, характеризующих скорость протекания каждого из трех рассматриваемых взаимодействий, имеет порядок 10^9 , что является характерной особенностью систем уравнений в химической кинетике и обуславливает их жесткость.

Начальные условия имеют вид:

$$y_1(0) = 1, \quad y_2(0) = 0, \quad y_3(0) = 0. \quad (1.3)$$

Численное решение прямой задачи будет выступать в качестве “данных измерений” концентрации одного из веществ и участвовать в постановке задачи усвоения данных.

2. Решение прямой задачи. Для получения численного решения прямой задачи использовался метод Quasy-Steady-State Approximation (QSSA), который также называется экспоненциальным методом Рунге — Кутты. Он подразумевает разделение реакций по скорости протекания на быстрые, медленные и средние. В силу предварительного представления правой части системы ОДУ в виде суммы неотрицательных операторов продукции P и деструкции D можем записать уравнение:

$$\dot{\vec{y}} = -D(\vec{y}) \cdot \vec{y} + P(\vec{y}). \quad (2.1)$$

Метод дает неотрицательное решение уравнения (2.1), что важно для задач химической кинетики при поиске концентраций веществ. Для системы (1.1) на шаге j в принятых обозначениях имеем

$$D(\vec{y}^j) \cdot \vec{y}^j = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 y_3^j + k_3 y_2^j & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1^j \\ y_2^j \\ y_3^j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1^j \\ D_2^j \\ D_3^j \end{pmatrix},$$

$$P(\vec{y}^j) = \begin{pmatrix} k_2 y_2^j y_3^j \\ k_1 y_1^j \\ k_3 y_2^{2j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_1^j \\ P_2^j \\ P_3^j \end{pmatrix},$$

где $j = 0, \dots, N - 1$ — шаг по времени, значение концентраций веществ на котором предполагается вычисленным ранее или известным из начальных условий; N — число интервалов разбиения исходного временного промежутка.

Метод QSSA имеет следующий вид:

$$y_i^{j+1} = \begin{cases} y_i^j + P_i^j dt, & \text{если } D_i^j \cdot dt < \varepsilon_{min}, \\ \frac{P_i^j}{D_i^j}, & \text{если } D_i^j \cdot dt > \varepsilon_{max}, \\ e^{-D_i^j dt} \cdot y_i^j + \frac{1 - e^{-D_i^j dt}}{D_i^j} \cdot P_i^j dt, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Здесь ε_{min} — число, приводимое для проверки, что при вычислении не возникнет деления на близкое к машинному нулю число; ε_{max} — константа, при превышении которой правая часть будет близка к стационарному значению для соответствующего y_i , а именно: $y_i^{j+1} = y_i^j$ (имея в виду уравнение (2.1), которое преобразуется к виду $0 = \dot{y}_i = -D(y_i^j) \cdot y_i^j + P(y_i^j)$, можно заменить его на $0 = -D(y_i^j) \cdot y_i^{j+1} + P(y_i^j)$ и выразить $y_i^{j+1} = P(y_i^j)/D(y_i^j)$); dt — значение шага по времени.

Итак, при $T = 1, N = 10^4$ система (1.1)–(1.3), не имеющая аналитического решения, с обезразмеренным временем, при численном решении по формуле метода QSSA (2.2) имеет вид, показанный на рис. 1.

3. Постановка задачи усвоения данных. Смоделируем ситуацию, когда известен вид системы, описывающей реакцию некоторых веществ, но не известны начальные условия. Имеется возможность наблюдать за исследуемым процессом, а именно: в реальном времени, в процессе счета появляется информация об одном из реагентов в дискретные моменты времени s . Ставится задача исследования динамики концентраций всех реагентов в процессе реакции по поступающим данным об одном веществе.

Итак, пусть помимо вида системы Робертсона (1.1)–(1.2) при неизвестных значениях начальных концентраций $y_i(0)$ ($i = 1, 2, 3$) и известной дополнительной информации

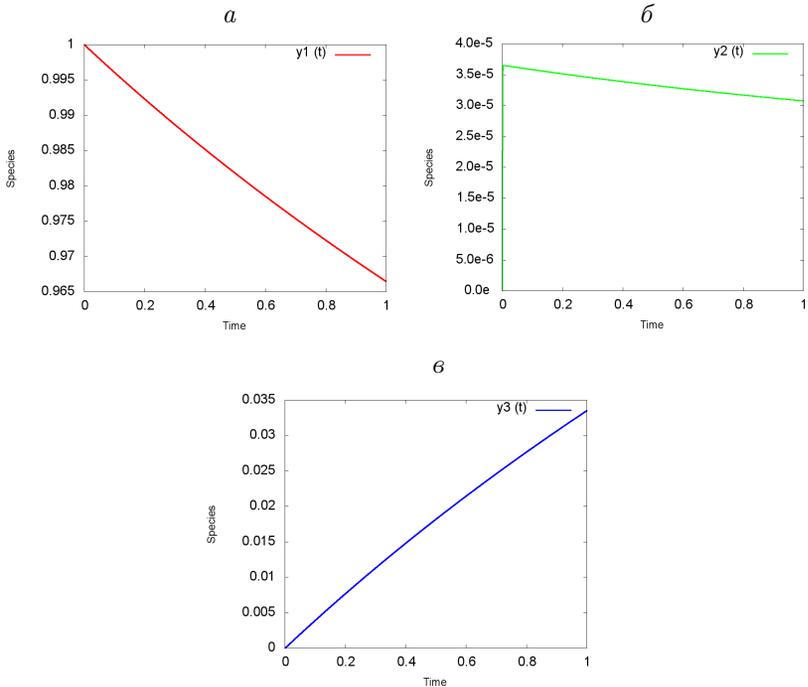


Рис. 1. Концентрации реагентов в системе Робертсона при численном решении методом QSSA:

$$a - y_1(t); \text{ б} - y_2(t); \text{ в} - y_3(t)$$

$$H^s(\vec{y}) = \Psi^s, k = 1, 2 \text{ или } 3, \quad (3.1)$$

где s ($0 \leq s \leq N$) — верхний индекс оператора “наблюдений” H^s (будем его также называть “оператором измерений”) и вектора “измерений” Ψ^s , показывающий, в какие моменты времени проводятся “измерения”; H^s — оператор измерений, переводящий вектор неизвестных концентраций \vec{y} в величину, значения которой “измерялись” (в данном случае оператор H^s выделяет из трех компонент вектора концентраций компоненту, значения которой измеряются в конкретном сценарии); Ψ^s — поступающие во время счета данные “измерений”, т. е. значения одной из выбранных компонент вектора концентраций; $1 \leq k \leq 3$ — номер измеряемой компоненты.

На всем временном промежутке $[0, T]$ необходимо найти значения концентраций y_i^j ($i = 1, 2, 3; j = 0, \dots, N$).

4. Решение задачи усвоения. Метод 3Dvar. В работе задача усвоения решена методом 3Dvar [3]. На каждом следующем шаге по времени $j + 1$ ($j = 0, \dots, N$), согласно методу, реализуются этапы:

1. Получение фонового прогноза решения y^p (здесь и далее для наглядности опустим векторные обозначения) по имеющейся математической модели U (метод QSSA) при известном решении y^j на предыдущем шаге по времени j :

$$y^p = U(y^j).$$

2. Поиск минимума целевого функционала \mathcal{J} , описывающего квадратичное отклонение поступающих “измерений” Ψ от соответствующих значений компонент искомого решения y^{j+1} , а также отклонение искомого решения y^{j+1} от прогноза y^p , полученного по имеющейся модели. Норма выбрана как квадратный корень из скалярного произведения в пространстве \mathbb{R}^3 (3 — по числу переменных в системе) с весовыми матрицами — матрицей ковариаций погрешностей “измерений” B^{-1} и матрицей ковариаций погрешностей модели R^{-1} :

$$\mathcal{J} = \|H^{j+1}y^{j+1} - \Psi^{j+1}\|_{B^{-1}}^2 + \|y^{j+1} - y^p\|_{R^{-1}}^2 \longrightarrow \min_{y^{j+1}}.$$

Матрицы ковариаций могут описывать дополнительные взаимосвязи между реагентами, а именно влияние погрешности вычислений или “измерений” одних концентраций на аналогичные погрешности других концентраций. В работе они приняты единичными, т. е. описанные погрешности принимаются независимыми.

Если $j + 1 = s$, оператор “измерений” H^{j+1} имеет вид диагональной матрицы, единичный элемент которой стоит в строке, соответствующей номеру “измеренной” субстанции, остальные элементы нулевые. При этом, если в сценарии “измеряется” вещество y_k ($1 \leq k \leq 3$), то

$$\Psi_i^{j+1} = \begin{cases} 0, & i \neq k, \\ y_k, & i = k. \end{cases} \quad (4.1)$$

Если $j + 1 \neq s$, т. е. на шаге $j + 1$ не проводились “измерения”, матрица H^{j+1} и вектор “измерений” Ψ^{j+1} нулевые.

Нахождение минимума введенного выпуклого целевого функционала \mathcal{J} проводится с помощью приравнивания к нулю его производной Фреше и выражения искомого вектора y^{j+1} ($j = 0, \dots, N$), а в случае $j = 0$ решение y^0 полагается равным “данным измерений” в начальный момент времени для “измеряемой” компоненты и нулевым для остальных компонент. Выражение для шагов $j = 0, \dots, N$ принимает вид:

$$y^{j+1} = (H^* B^{-1} H + R^{-1})^{-1} (H^* B^{-1} \Psi + R^{-1} y^p).$$

По построению данный метод корректирует решение y^{j+1} только в моменты поступления “данных наблюдений” (при $j + 1 = s$), направляя далее траектории решения ближе к “наблюдаемым” значениям. Однако алгоритм не предполагает коррекции на предыдущих шагах по времени с учетом поступающих данных, из-за чего в решении могут возникнуть скачки.

На интервале $[0, 1]$, $N = 10^4$ решение задачи усвоения y_{i3Dvar} имеет относительную погрешность

$$\left| \frac{y_{i3Dvar} - y_{i_{model}}}{y_{i3Dvar}} \right|, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.2)$$

по сравнению с принятым за “точное” решение численным результатом решения методом QSSA $y_{i_{model}}$ задачи (1.1)–(1.3) (рис. 2).

Если таким образом усваивать данные о первом веществе, траектории решения восстановятся полностью, так как начальное состояние (1.3) задано точно. Этот факт подтверждает отсутствие ошибок в реализации данной схемы усвоения. В подтверждение этого приведен график, отражающий нулевые относительные погрешности всех веществ в данном случае (рис. 2,а).

Если усваивать данные только о втором веществе, относительная погрешность велика и решение не воспроизводится, однако, считая известным третье вещество, без дополнительной информации об y_1 и y_2 можно восстановить динамику изменения концентрации y_3 с точностью до 10^{-4} по отношению к “точному решению”. Компоненты y_1 и y_2 при этом остаются неизменно нулевыми, а их относительные погрешности во избежание деления на ноль имеют вид

$$\left| \frac{y_{i3Dvar} - y_{i_{model}}}{y_{i_{model}}} \right|, \quad i = 1, 2,$$

и равны единице (рис. 2,б).

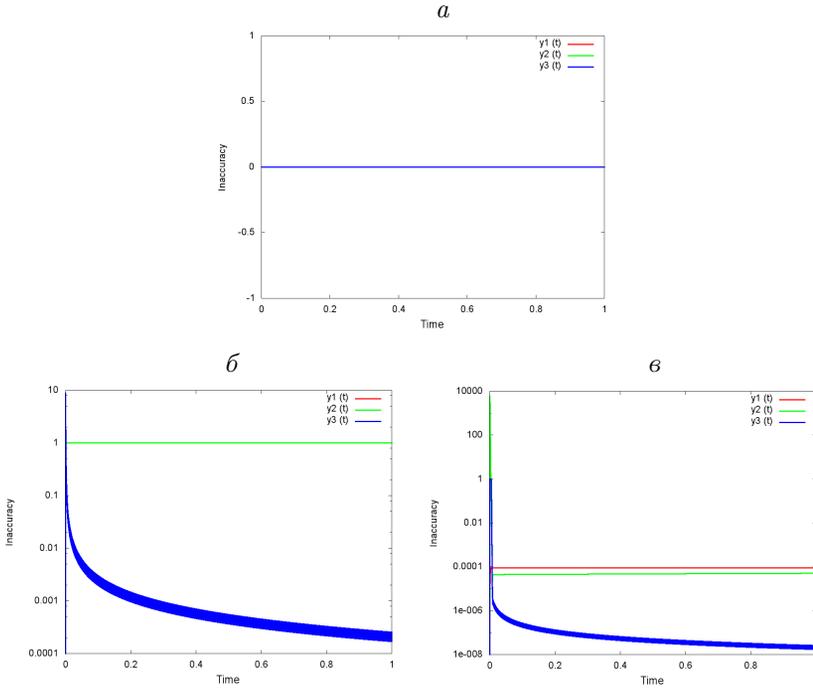


Рис. 2. Относительная погрешность (4.2) решения задачи усвоения данных методом 3Dvar по сравнению с принятым за “точное решение” численным результатом:
 а — относительная погрешность при усвоении данных о первом веществе; б — усвоение данных о третьем веществе при начальных данных $y_1^0 = y_2^0 = 0$; в — то же при $y_1^0 = y_2^0 = 1$

Чтобы добиться ненулевых значений y_1 и y_2 при усвоении информации о третьем веществе, был проведен эксперимент, в котором начальные концентрации “неизмеряемых” веществ задавались единичными. В этом случае удалось улучшить результат и уменьшить относительные погрешности в первом и втором веществах до порядка 10^{-5} , при этом погрешность первого вещества больше погрешности второго, в третьем веществе погрешность уменьшилась до 10^{-7} , что показано на рис. 2,в.

5. Решение задачи усвоения с “зашумленными” данными “измерений”. В работе реализован сценарий, когда в качестве “данных измерений” Ψ^s о концентрации одного из веществ поступало не решение прямой задачи методом QSSA, а “зашумленное” решение прямой задачи.

В решение прямой задачи была введена стандартно нормально распределенная погрешность по формуле

$$\tilde{y}_i = y_i + \xi \cdot y_i \cdot \frac{p}{100\%}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (5.1)$$

где y_i — имеющееся решение прямой задачи; ξ — стандартно нормально распределенная случайная величина; p — величина погрешности “измерений” в процентах.

На том же интервале $[0; 1]$ при $N = 10^4$ будут решаться три задачи усвоения данных о веществе y_k ($k = 1, 2, 3$). Поступающие “данные измерений” будут, в отличие от (4.1), иметь вид

$$\Psi_i^{j+1} = \begin{cases} 0, & i \neq k, \\ \tilde{y}_k, & i = k. \end{cases} \quad (5.2)$$

Проводились численные эксперименты с различной частотой поступления данных (последовательно предполагалось, что “измерения” будут проводиться в 10; 25 и 50 % точек по времени от всех рассматриваемых точек, в которых необходимо найти решение задачи усвоения), а также с различной величиной вносимой погрешности $p = 1; 5; 10\%$.

Однозначной зависимости между частотой поступления “данных измерений с шумом”, величинами вносимой погрешности и точностью решения установить не удалось, однако в целом погрешность решения уменьшалась при решении задачи усвоения, что видно на рис. 3.

6. Проблема сохранения материального баланса. Вариационная коррекция решения. При решении прямой задачи (1.1)–(1.3) методом QSSA было замечено, что не выполняется закон сохранения массы, т. е. суммарная концентрация веществ не остается неизменной при численном решении. Зависимость относительной погрешности суммарной концентрации на том же рассматриваемом промежутке $[0, 1]$ при различных значениях числа точек разбиения ($N = 10^{-3}; 10^{-4}; 10^{-5}; 10^{-6}$) имеет вид (рис. 4):

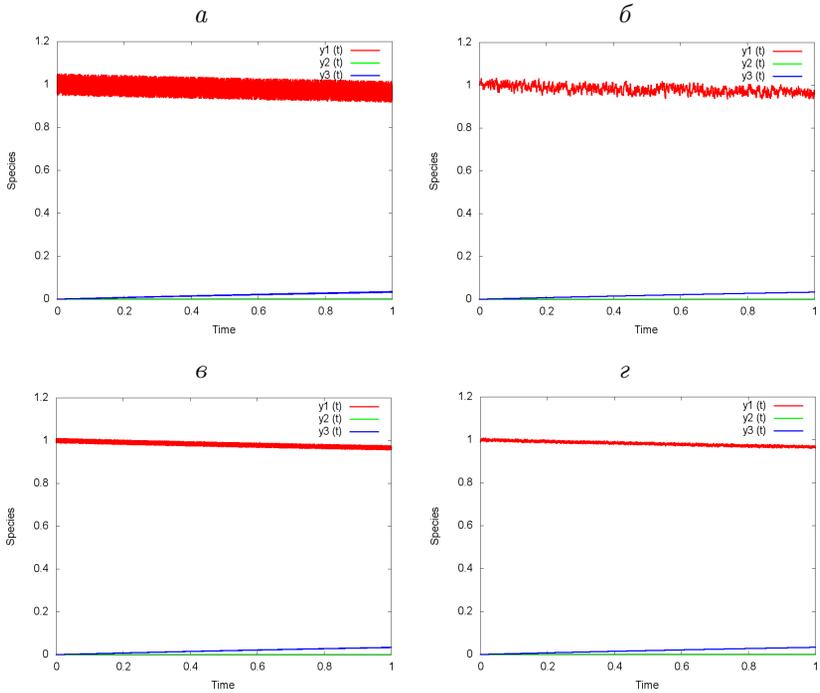


Рис. 3. Сравнение численного решения системы Робертсона \tilde{y}_i с внесенной погрешностью по формуле (5.1) и решения y_{i3Dvar} задачи усвоения данных (1.1)–(1.2), (3.1), (5.2) при известной дополнительной информации о первом веществе \tilde{y}_1 в 50% от всех точек по времени:

- а* – \tilde{y}_i ($i = 1, 2, 3$) при внесении “шума” величиной 5%;
- б* – y_{i3Dvar} ($i = 1, 2, 3$) – решение задачи усвоения при внесении “шума” величиной 5%;
- в* – \tilde{y}_i ($i = 1, 2, 3$) при внесении “шума” величиной 1%;
- г* – y_{i3Dvar} ($i = 1, 2, 3$) – решение задачи усвоения при внесении “шума” величиной 1%

$$\frac{|(y_1^j + y_2^j + y_3^j) - (y_1^0 + y_2^0 + y_3^0)|}{(y_1^0 + y_2^0 + y_3^0)} = \frac{|M(y^j) - M(y^0)|}{M(y^0)}, \quad j = 0, \dots, N.$$

Тем не менее, шаг невозможно уменьшать бесконечно, и, чтобы добиться большей точности выполнения закона сохранения массы, предлагается вариационный подход к коррекции численного решения.

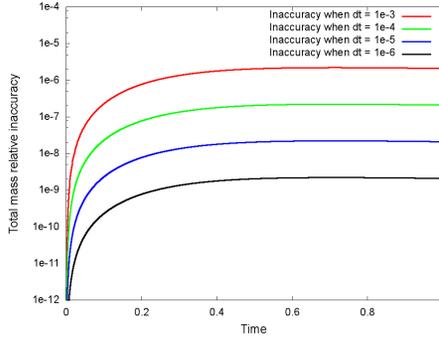


Рис. 4. Погрешность суммарной массы реагентов

В исходную модель вычислений U включим “функцию управления” \vec{r} :

$$\vec{y}^{j+1} = U(\vec{y}^j) + \vec{r}^{j+1}, \quad j = 0, \dots, N-1. \quad (6.1)$$

При таком введении “функции управления” она имеет смысл погрешности аппроксимации. Будем минимизировать квадратичное отклонение суммарной концентрации на каждом шаге по времени $M(\vec{y}^j)$ от начальной $M_0 = M(\vec{y}^0)$ методом регуляризации Тихонова [4] при ограничениях (6.1). Для этого минимизируем функционал

$$\mathcal{J}_M(\vec{y}^{j+1}, \vec{r}^{j+1}) = (M(\vec{y}^{j+1}) - M(\vec{y}^0))^2 + \alpha \|\vec{r}^{j+1}\|^2,$$

где α — параметр регуляризации; положим его далее равным единице.

Методом сопряженных множителей Лагранжа будем находить минимум функционала \mathcal{J}_M . Для этого невязку между суммарной концентрацией на шаге j и общей начальной концентрацией запишем в терминах функционалов, а сама функция Лагранжа примет вид (далее для наглядности будем опускать векторные обозначения):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_M(\vec{y}^{j+1}, \vec{r}^{j+1}, \vec{y}^*) &= \mathcal{L}_M(y^{j+1}, r^{j+1}, y^*) = \\ &= (M(y^{j+1}) - M(y^0))^2 + \alpha \|r^{j+1}\|^2 + \langle y^{j+1} - U(y^j) - r^{j+1}, y^* \rangle, \end{aligned}$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle$ — скалярное произведение в пространстве \mathbb{R}^3 ; y^* — вектор сопряженных множителей Лагранжа; квадрат разности

$$\begin{aligned} (M(y^{j+1}) - M(y^0))^2 &= \left(\left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} y_1^{j+1} \\ y_2^{j+1} \\ y_3^{j+1} \end{pmatrix} \right\rangle - M_0 \right)^2 = \\ &= \left((1, 1, 1) \cdot \begin{pmatrix} y_1^{j+1} \\ y_2^{j+1} \\ y_3^{j+1} \end{pmatrix} - M_0 \right)^2 = (y_1^{j+1} + y_2^{j+1} + y_3^{j+1} - M_0)^2. \end{aligned}$$

Метод Лагранжа подразумевает необходимость приравнять к нулю производные функции Лагранжа по ее переменным (здесь производные также понимаются в смысле Фреше). Производная функционала $(M(y^{j+1}) - M(y^0))^2$ имеет вид:

$$\frac{\partial(My^{j+1} - M_0)^2}{\partial y^{j+1}} = 2 \left[(1, 1, 1) \begin{pmatrix} y_1^{j+1} \\ y_2^{j+1} \\ y_3^{j+1} \end{pmatrix} - M_0 \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

Приравнивание к нулю производных Фреше функции Лагранжа приводит к системе уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}_M}{\partial y^{j+1}} = \frac{\partial(My^{j+1} - M_0)^2}{\partial y^{j+1}} + y^* = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}_M}{\partial y^*} = y^{j+1} - U(y^j) - r^{j+1} = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}_M}{\partial r^{j+1}} = 2 \alpha r^{j+1} - y^* = 0. \end{cases}$$

После исключения r^{j+1} и подстановки производной (6.2) решение системы будет иметь вид:

$$y^{j+1} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{\alpha} & \frac{1}{\alpha} & \frac{1}{\alpha} \\ \frac{1}{\alpha} & 1 + \frac{1}{\alpha} & \frac{1}{\alpha} \\ \frac{1}{\alpha} & \frac{1}{\alpha} & 1 + \frac{1}{\alpha} \end{pmatrix}^{-1} \cdot U(y^j) + \frac{1}{\alpha} M_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

На рис. 5 представлены суммарная масса веществ до и после вариационной коррекции (рис. 5,а), отклонение получаемой мас-

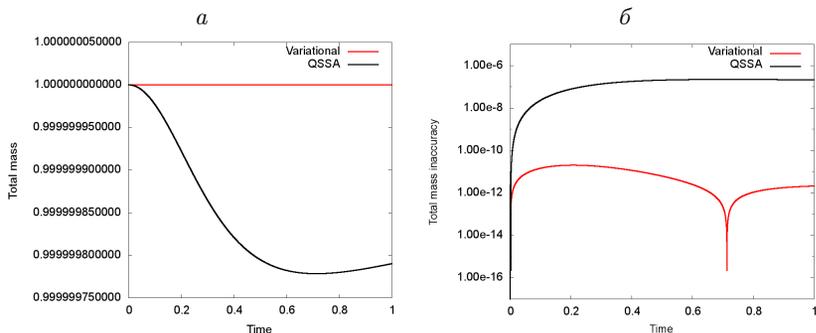


Рис. 5. Применение вариационной коррекции при $\alpha = 1$:
 а — суммарная масса веществ до и после коррекции (графики QSSA и Variational, соответственно); б — отклонение суммарной массы от начальной до и после коррекции (графики QSSA и Variational, соответственно)

сы веществ от начальной при единичном параметре регуляризации (рис. 5, б). Интервал интегрирования: $t_0 = 0$, $t_N = 1$, $N = 10^4$.

На рис. 5, а видно, что если при решении без коррекции суммарная масса была меньше единицы, что можно трактовать как потерю вещества при численном решении, то при вариационной коррекции, судя по графику на рис. 5, а, суммарная масса сохраняется. Для оценки порядка относительной погрешности суммарной концентрации по отношению к начальной до и после вариационной коррекции приведен рис. 5, б.

Суммарная концентрация веществ без коррекции меньше начальной. При коррекции суммарная масса сначала убывает, а затем, возрастая, вблизи $t = 0.7136$, становится больше начальной массы. В целом, удалось достичь более точного выполнения закона сохранения массы, так как ее относительная погрешность уменьшилась от 10^{-7} до 10^{-11} . Однако было выявлено, что для вещества, концентрация которого возрастает от нуля с минимальной скоростью, могут появляться отрицательные концентрации. В таком случае параметр α можно представить в виде вектора и регулировать влияние функции управления \vec{r} на вещества, концентрации которых минимальны в текущий момент времени. При таком управлении учитывается характер влияния параметра регуляризации на решение системы.

Заключение. В работе изучен подход вариационного усвоения данных к решению задач химической кинетики на примере системы Робертсона, описывающей взаимодействие трех веществ и обладающей свойством жесткости.

После решения прямой задачи для системы Робертсона методом QSSA был описан и применен алгоритм вариационного усвоения данных 3Dvar с целью исследования возможности восстановления траекторий решения в фазовом пространстве по поступающей неполной информации об одном реагенте. В сценарии, когда условно имелись “данные измерений” концентрации первого вещества, удалось восстановить полную картину процесса. В случае усвоения “данных наблюдений” о концентрации третьего вещества удалось восстановить динамику только “измеряемого” вещества, а концентрации остальных не восстановились.

В ходе рассмотрения сценария, при котором в усваиваемые данные вводилась погрешность, была исследована зависимость получаемого численного решения задачи усвоения при различных значениях частоты поступления “данных наблюдений” и величины “измерительного шума”. В ходе численных экспериментов получено, что относительная погрешность численного решения по сравнению с решением, которое было принято за “точное”, для “измеряемого” вещества в худшем случае оставалась того же порядка, что и у поступающих данных об этом веществе.

В работе при численном решении прямой задачи было отмечено нарушение закона сохранения материального баланса. Для коррекции погрешности суммарной массы веществ по отношению к их начальной суммарной массе был построен и применен алгоритм вариационной коррекции. В результате удалось достичь более точного выполнения закона сохранения массы: относительная погрешность уменьшилась на 4 порядка в проведенном эксперименте.

Таким образом, вариационное усвоение данных путем совместного использования математической модели процесса и поступающих в реальном времени данных наблюдений может позволить корректировать погрешности измерений, а также погрешности, возникающие при проверке численного решения на соответствие законам сохранения.

Научные руководители: д-р физ.-мат. наук, проф. В. В. Пененко, канд. физ.-мат. наук А. В. Пененко.

Список литературы

- [1] Пененко В. В. Вариационные методы усвоения данных и обратные задачи для изучения атмосферы, океана и окружающей среды // СибЖВМ. 2009. Т. 12. С. 421–434.
- [2] Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. С. 11–12, 28–30.
- [3] Navon I. M. Data assimilation for numerical weather prediction: A Review / PARK, SEON KI, Xu, Liang (Eds.). Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag. 2009. N 1. P. 22–24.
- [4] Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.

*Гришина Анастасия Александровна — магистрант
Новосибирского государственного университета;
e-mail: a.a.grishina17@gmail.com;*

*Пененко Алексей Владимирович — канд. физ.-мат. наук,
ст. науч. сотр. Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН; e-mail: a.penenko@yandex.ru.*

Об одном алгоритме моделирования асимптотически периодически коррелированных случайных процессов на основе неоднородных пуассоновских точечных потоков

Н. А. Каргаполова

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

УДК 519.6

Рассмотрен алгоритм моделирования одного класса асимптотически периодически коррелированных случайных процессов, построенный на основе кусочно-постоянного восполнения неоднородных пуассоновских точечных потоков. Приведены аналитические выражения, описывающие одномерное распределение процесса и его корреляционную функцию.

Ключевые слова: стохастическое моделирование, периодически коррелированный случайный процесс, пуассоновский поток.

Введение. При решении различных прикладных задач в климатологии и метеорологии, океанологии, гидрологии, агрометеорологии, популяционной биологии, радиофизике, при исследовании телекоммуникационных и компьютерных сетей различного назначения, при изучении влияния ветровых и температурных характеристик на строительные конструкции, а так же в других областях науки с использованием методов статистического моделирования требуются реалистичные модели процессов. Используемые модели должны адекватно описывать характерные особенности рассматриваемых процессов и согласовываться с данными наблюдений. Во многих задачах одной из наиболее существенных особенностей исследуемых реальных процессов является наличие у них суточного и годового хода. Таким образом, для их моделирования должны быть исполь-

зованы те модели, которые позволяют строить реализации процесса, обладающие аналогичными осциллирующими свойствами. Существует достаточно много алгоритмов моделирования случайных процессов с периодическими свойствами. Так, например, периодически коррелированные случайные процессы дискретного аргумента можно моделировать с помощью алгоритмов, основанных на использовании неоднородных марковских цепей, однородных векторных марковских цепей и стационарных векторных процессов [1–3]. Периодически коррелированные процессы непрерывного аргумента можно моделировать с использованием их спектрального представления [4] и различных классов неоднородных точечных потоков [5].

В данной статье рассмотрен еще один алгоритм моделирования случайных процессов с периодическими свойствами, основанный на использовании процедуры кусочно-постоянного восполнения неоднородных пуассоновских потоков. Схожий алгоритм был предложен Г. А. Михайловым для моделирования стационарных процессов [6]. Отметим, что предложенный алгоритм позволяет моделировать только асимптотически периодически коррелированный, а не периодически коррелированный процесс. Напомним, что случайный процесс ξ_t является асимптотически периодически коррелированным с периодом T , если

$$\begin{aligned} \forall \varepsilon > 0 \exists T_1 : \forall t > T_1 \forall h > 0 \\ |E\xi_t - E\xi_{t+T}| < \varepsilon, \quad |D\xi_t - D\xi_{t+T}| < \varepsilon, \\ |corr(\xi_t, \xi_{t+h}) - corr(\xi_{t+T}, \xi_{t+h+T})| < \varepsilon. \end{aligned}$$

Однако при численных экспериментах можно “отбросить” начальные значения построенного процесса и считать оставшуюся часть смоделированной реализации приближенной реализацией периодически коррелированного процесса.

1. Алгоритм. Пусть $\lambda(t)$ — неотрицательная ограниченная по модулю периодическая функция с периодом T . Определим точечный поток $\{\tau_k\}$ следующим образом:

$$\tau_0 = 0, \quad \tau_k = \sum_{i=1}^k \eta_i, \quad k = 1, 2, \dots,$$

где η_i — независимые неотрицательные случайные величины, распределенные с плотностями

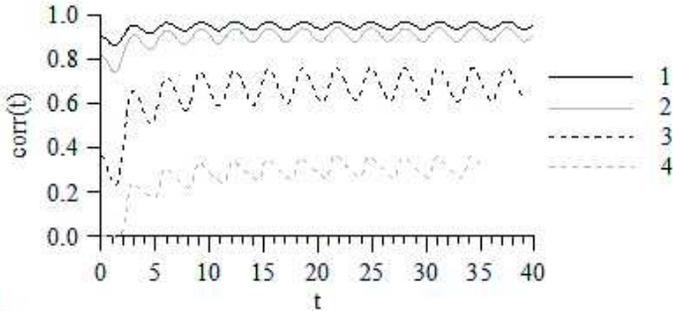


Рис. 1. Корреляционная функция $\text{corr}(\xi_t, \xi_{t+h})$ процесса ξ_t при фиксированных значениях h :
 1 — $h = 0, 1$; 2 — $h = 0, 2$; 3 — $h = 1, 1$; 4 — $h = 5$

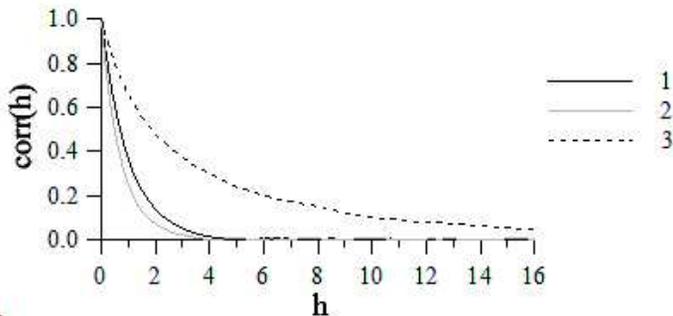


Рис. 2. Корреляционная функция $\text{corr}(\xi_t, \xi_{t+h})$ процесса ξ_t при фиксированных значениях t :
 1 — $t = 0$; 2 — $t = 1$; 3 — $t = 3$

$$f_i(x) = \lambda(\tau_{i-1}) e^{-\lambda(\tau_{i-1})x}.$$

Нестационарный кусочно-постоянный процесс ξ_t ($t \geq 0$) построим согласно следующему алгоритму:

1. Моделируется последовательность $\{\tau_k\}$.
2. Для каждого интервала $[\tau_{i-1}; \tau_i)$ ($i = 1, 2, \dots$) полагаем $\xi_t = \nu_i$, где ν_i — независимые случайные величины с заданной функцией одномерного распределения $F(x)$ и конечным вторым моментом.

Пример. На рис. 1, 2 приведены графики оценок корреляционной функции $\text{corr}(\xi_t, \xi_{t+h})$ как функции одной переменной при фикс-

сированном значении другой переменной при $F(x) = \Phi_{0,1}$, $\lambda(t) = 0.9 \sin 2t + 1$. Оценка проводилась по 10^4 реализаций.

2. Свойства процесса. Из способа построения процесса ξ_t следует, что его одномерное распределение не зависит от t и определяется функцией распределения $F(x)$.

Очевидно, что при $t = 0$ выполняется равенство

$$\text{corr}(\xi_0, \xi_{0+h}) = P(\tau_1 > h) = P(\eta_1 > h) = \exp(-\lambda(0)h).$$

Опишем корреляционную функцию $\text{corr}(\xi_t, \xi_{t+h})$ построенного процесса ξ_t при $t > 0$, $h > 0$. Пусть μ , σ^2 — математическое ожидание и дисперсия случайной величины с функцией одномерного распределения $F(x)$. Поскольку

$$E\xi_t\xi_{t+h} = p\xi_t^2 + (1-p)\xi_t\xi_{t+h} = pE\xi_t^2 + (1-p)E\xi_tE\xi_{t+h} = p\sigma^2 + \mu^2,$$

то

$$\text{corr}(\xi_t, \xi_{t+h}) = \frac{E\xi_t\xi_{t+h} - E\xi_tE\xi_{t+h}}{\sqrt{D\xi_t}\sqrt{D\xi_{t+h}}} = p,$$

где

$$\begin{aligned} p &= P(\exists k : \tau_k \leq t, t+h < \tau_{k+1}) = \sum_{k=0}^{\infty} P(\tau_k \leq t, t+h < \tau_{k+1}) = \\ &= P(\tau_0 \leq t, t+h < \tau_1) + \sum_{k=1}^{\infty} P(\tau_k \leq t, t+h < \tau_{k+1}) = \\ &= P(t+h < \eta_1) + \sum_{k=1}^{\infty} P(\tau_k \leq t, t+h < \tau_{k+1}) = \\ &= \exp(-\lambda(0)[t+h]) + \sum_{k=1}^{\infty} P(\tau_k \leq t, t+h < \tau_{k+1}). \end{aligned}$$

Используя формулу полной вероятности, можно получить, что для $k \geq 1$ выполняется цепочка равенств

$$P(\tau_k \leq t, t+h < \tau_{k+1}) = P\left(\sum_{i=1}^k \eta_i \leq t, \sum_{i=1}^{k+1} \eta_i > t+h\right) =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^t \left[P \left(\sum_{i=2}^k \eta_i \leq t - t_1, \sum_{i=2}^{k+1} \eta_i > t + h - t_1 \mid \eta_1 = t_1 \right) \times \right. \\
&\quad \left. \times \lambda(0) \exp(-\lambda(0) t_1) \right] dt_1 = \\
&= \int_0^t \dots \int_0^{t-t_1-\dots-t_{k-1}} \left[\begin{aligned} &\lambda(0) \lambda(t_1) \dots \lambda(t_{k-1}) \times \\ &\times \exp \left(\begin{aligned} &-\lambda(0) t_1 - \dots - \lambda(t_{k-1}) t_{k-1} \\ &-\lambda(t_k) [t + h - t_1 - \dots - t_k] \end{aligned} \right) \end{aligned} \right] \times \\
&\quad \times dt_k \dots dt_1.
\end{aligned}$$

Подробный вывод этой цепочки равенств приведен в [7]. Теоретическое доказательство асимптотической периодической коррелированности процесса ξ_t с использованием приведенных выше формул является затруднительным. Однако численные эксперименты показывают, что процесс ξ_t этим свойством обладает. Численные эксперименты также показывают, что это свойство асимптотической периодической коррелированности процесса ξ_t сохраняется при замене экспоненциальных плотностей $f_i(x)$ на произвольное семейство плотностей $g_i(x, \lambda(t))$ ($x > 0$) с периодическим параметром $\lambda(t)$, т. е. фактически при замене пуассоновского потока потоком Пальма.

Отметим, что если при решении прикладной задачи требуется моделировать кусочно-постоянный процесс с заданной корреляционной функцией, то приходится решать обратную задачу: по известной корреляционной функции необходимо определить параметры точечного потока (пуассоновского или пальмовского). В большинстве случаев аналитическое решение такой задачи отсутствует, однако можно находить приближенное решение этой задачи численными методами.

Список литературы

- [1] Derenok K. V., Ogorodnikov V. A. Numerical simulation of significant long-term decreases in air temperature // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 2008. Vol. 23, No 3. P. 223–277.
- [2] Ogorodnikov V. A., Prigarin S. M. On stochastic interpolation of discrete random processes and fields // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 1996. Vol. 11, No 1. P. 49–69.
- [3] Kargapolova N. A., Ogorodnikov V. A. Inhomogeneous Markov chains with periodic matrices of transition probabilities and their application

- to simulation of meteorological processes // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 2012. Vol. 27, No 3. P. 213–228.
- [4] Медвяцкая А. М. Спектральная модель одного класса периодически коррелированных процессов // Труды конф. молодых ученых ИВМиМГ СО РАН. Новосибирск, 2015. [Электрон. ресурс.]. http://elibrary.ru/download/elibrary_26651699_47236459.pdf.
- [5] Ogorodnikov V. A., Derenok K. V., Tolstykh U. I. Special numerical models of discrete random series // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 2010. Vol. 25, No 4. P. 359–373.
- [6] Михайлов Г. А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло. М: Наука, 1987. 238 с.
- [7] Ogorodnikov V. A., Sereseva O. V., Kargapolova N. A. Stochastic models of piecewise-constant and piecewise-linear non-Gaussian processes based on Poisson flows // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 2016. Vol. 31, No 3. P. 179–185.

*Каргаполова Нина Александровна — кан. физ.-мат. наук,
науч. сотр. Института вычислительной
математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: nkargapolova@gmail.com*

Трассировка лучей и расчет геометрического расхождения для триангулированной трехмерной модели среды

А. В. Кириленко

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН
Новосибирский государственный университет

УДК 519.6

Работа посвящена расчету траектории луча, а также кинематических и динамических характеристик вдоль него. В качестве основной задачи взята прямая кинематическая задача сейсмологии, численное решение которой необходимо для реализации метода нелинейной лучевой томографии. Выведены явные формулы для расчета времени пробега луча, геометрического расхождения, а также производных точки выхода луча на поверхность и направляющего вектора по углам выхода. Реализован и адаптирован алгоритм лучевой пристрелки, который позволяет с высокой точностью попасть из заданного источника в заданный приемник.

Ключевые слова: лучевой метод, прямая кинематическая задача, геометрическое расхождение, трассировка лучей, триангуляция Делоне.

Введение. В ходе полевых работ геофизики получают данные о скоростном строении среды, которые в дальнейшем должны быть интерпретированы. В основе интерпретации лежит анализ, осуществляемый кинематическими методами. На основе интерпретации делается первоначальное предположение о строении среды, которое в дальнейшем корректируется с помощью кинематических и статических поправок. Чтобы проверить корректность сделанных предположений часто прибегают к некоторому тесту на состоятельность построенной модели, а именно к численному решению прямой кинематической задачи (в дальнейшем ПКЗ).

В основе алгоритма решения ПКЗ, который описан в данной работе, лежит широко известный лучевой метод. Построенный алгоритм позволяет эффективно решать прямую кинематическую задачу в кусочно–линейной модели среды. В ходе разработки алгоритма особое внимание было уделено численному решению применительно к реальной модели ортогональной площадной расстановки.

Составляющими компонентами алгоритма стало нахождение таких кинематических характеристик волнового поля, как траектории лучей и времена вдоль них. К динамическим характеристикам волнового поля, вычисление которых реализовано в алгоритме, можно отнести лучевое расхождение и его составляющие. Нужно также отметить, что в качестве источника был выбран точечный источник сферического типа.

1. Постановка ПКЗ. Рассматривается среда без внутренних границ с заданной скоростной моделью. На дневной поверхности задана сетка приемников; точечный источник может находиться как на поверхности, так и быть заглубленным. Второй случай отвечает ситуации, когда источник находится в скважине.

Требуется рассчитать траектории лучей и времена вдоль них из заданного источника в заданную сетку приемников на поверхности [1].

2. Триангуляция Делоне. Для описания алгоритма трассировки луча потребуется определение триангуляции Делоне в трехмерном случае. Дадим определение триангуляции Делоне в двумерном случае, а затем распространим его на более общий трехмерный.

Триангуляцией будем называть планарный граф, все внутренние области которого являются треугольниками [2].

Выпуклая триангуляция — это триангуляция, для которой минимальный многоугольник, охватывающий все построенные треугольники, является выпуклым.

Будем говорить, что триангуляция удовлетворяет условию Делоне, если внешность окружности, описанной вокруг любого построенного треугольника, содержит все заданные точки триангуляции за исключением вершин треугольника.

Триангуляция называется *триангуляцией Делоне*, если она выпуклая и удовлетворяет условию Делоне (рис. 1).

Все определения очевидным образом переносятся на трехмерный случай заменой треугольника на тетраэдр, а окружности — на сферу.

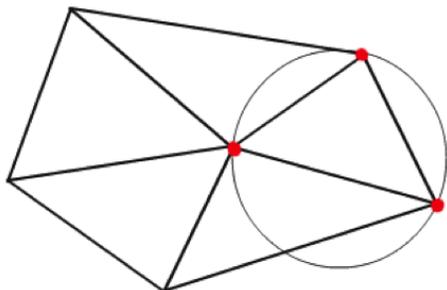


Рис. 1. Пример триангуляции Делоне

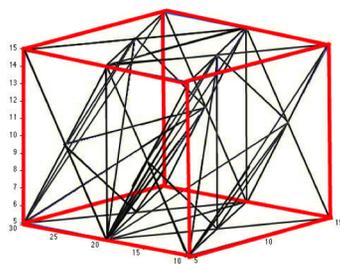


Рис. 2. Разбиение параллелепипеда на тетраэдры с помощью триангуляции Делоне в 3D

В качестве модели рассматриваемой среды был выбран параллелепипед без внутренних границ. Заметим, что эта модель среды полностью удовлетворяет условиям, которые поставлены в прямой кинематической задаче сеймики. Далее с помощью триангуляции Делоне в трехмерном случае разбиваем параллелепипед на тетраэдры (рис. 2).

Стоит отметить, что разбиение исходного параллелепипеда на тетраэдры имеет целью сделать скорость в среде непрерывной, так как она автоматически “склеивается” по граням тетраэдра.

3. Трассировка луча через параллелепипед. Представление рассматриваемого параллелепипеда в виде конечного числа параллелепипедов с помощью триангуляции Делоне позволило свести

задачу о трассировке луча через всю среду к задаче о трассировке луча через произвольный тетраэдр.

Постановка задачи 1. Пусть заданы вершины тетраэдра $M_i = (x_i, y_i, z_i)$ ($i = \overline{1,4}$) и скорости в них ϑ_i , $i = \overline{1,4}$, соответственно. В точке M_0 в тетраэдр входит луч с направлением $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Требуется определить координаты точки выхода и направление, в котором луч выходит из тетраэдра.

Для решения данной задачи предлагается реализовать алгоритм, описанный схемой 1. Следует заметить, что каждый пункт предложенной схемы является самостоятельной задачей, требующей отдельного описания.

Схема 1.

Шаг 1. Определяем тетраэдр, которому принадлежит источник.

Шаг 2. Осуществляем трассировку луча через найденный тетраэдр и определяем точку и направление выхода луча из тетраэдра.

Шаг 3. Если найденная точка лежит на границе всей рассматриваемой области, то процесс останавливается, иначе переход на Шаг 1.

Очевидно, что результат реализации схемы — координаты точки выхода луча за пределы рассматриваемой области, а также направление, в котором луч покидает область. На основе полученной информации можно сделать вывод о том, какие лучи выходят на дневную поверхность.

4. Трассировка луча через тетраэдр. Заметим, что постановка задачи 1 очень близка к реальной ситуации. Здесь входные данные — это скорости только в вершинах тетраэдра, т. е. речь не идет о непрерывных данных, что вполне согласовано с информацией, которой обладают геофизики после осуществления полевых работ.

Чтобы восстановить скорость внутри произвольного тетраэдра, делается предположение о ее линейности. Это позволяет вычислять скорость по формуле:

$$\vartheta = ax + by + cz + d, \quad (4.1)$$

где a, b, c, d — неизвестные постоянные величины, которые можно найти как решения системы из четырех уравнений, полученной подстановкой координат вершин тетраэдра (x_i, y_i, z_i) , и скоростей в них ϑ_i , ($i = \overline{1,4}$).

Теоретическим обоснованием алгоритма трассировки луча через тетраэдр, в котором скорость — линейная функция координат, является утверждение:

Утверждение 1. *В среде с линейной скоростью траекторией луча является окружность.*

Доказательство. Приведем доказательство для двумерного случая, которое очевидным образом распространяется на трехмерный случай путем перехода в новую систему координат, в которой ось Oz направляется по градиенту скорости (\mathbf{g}), а ось Ox направляется по $[\mathbf{g} \times \mathbf{r}] \times \mathbf{g}$.

Рассмотрим дифференциальное уравнение луча в двумерном случае:

$$\begin{cases} \dot{x} = \sin \theta, \\ \dot{z} = \cos \theta, \\ \dot{\theta} = \frac{\vartheta_z}{\vartheta} \cdot \sin \theta. \end{cases} \quad (4.2)$$

Учитывая, что скорость имеет вид $\vartheta = \vartheta_z z + \vartheta_0$, докажем, что величина $p = \frac{\sin \theta}{\vartheta}$ является инвариантом вдоль луча. Более того, p — инвариант, независимо от того, является ли скорость линейной или нет. Действительно, продифференцировав p по x , приходим к следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(\frac{\sin \theta}{\vartheta} \right) &= \frac{\cos \theta}{\vartheta} \dot{\theta} - \frac{\sin \theta}{\vartheta^2} \vartheta_z \cdot \dot{z} = \\ &= \frac{\cos \theta}{\vartheta} \left(\frac{\vartheta_z}{\vartheta} \sin \theta \right) - \frac{\sin \theta}{\vartheta^2} \vartheta_z \cos \theta = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, $\dot{\theta} = \text{const}$. В то же время $\dot{\theta}$ — кривизна траектории луча, а это значит, что луч является окружностью. В частном случае, если скорость постоянная, то траектория луча есть ни что иное, как прямая линия.

Доказательство окончено.

На основании доказанного Утверждения 1, а также вида уравнения для вычисления скорости внутри тетраэдра, можно сделать вывод о том, что траекторией луча в тетраэдре является окружность.

Для реализации алгоритма трассировки луча через среду, описанного в Схеме 1, необходимо параметрическое уравнение луча внутри тетраэдра. Обладая данным уравнением, можно с заданной

точностью найти точку выхода луча из тетраэдра, а также направляющий вектор луча в ней. На основании утверждения о том, что в среде с линейной скоростью траектория луча — плоская окружность, из дифференциальной системы уравнений луча получаем его параметрическое выражение:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r} \frac{\sin(ks)}{k} - \frac{1 - \cos(ks)}{k^2} \cdot \frac{\mathbf{r} \times [\mathbf{g} \times \mathbf{r}]}{\vartheta_0}, \quad (4.3)$$

где $k = \frac{1}{R} = \frac{|\mathbf{g} \times \mathbf{r}|}{\vartheta_0}$ — кривизна, $\vartheta = \vartheta_0 + \mathbf{g} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ — скорость. В данном случае луч параметризован длиной дуги s .

5. Формула для вычисления времени перемещения между двумя точками среды с линейной скоростью. Было показано, что траектория луча в среде с линейной скоростью есть окружность. Поэтому, переходя в плоскость луча, можем свести трехмерную постановку задачи о нахождении времени перемещения между двумя точками к двумерному случаю.

Постановка задачи 2. *Найти время перемещения вдоль луча между двумя точками $M_0(x_0, z_0)$ и $M_1(x_1, z_1)$ в среде с линейной скоростью $\vartheta(x, z) = ax + bz + c$.*

Известно, что для линейной среды центр луча O , соединяющего точки M_0 и M_1 , лежит на прямой $\vartheta(x, z) = 0$. Осуществляя поворот и сдвиг осей, переходим в систему координат (ξ, η) с центром в точке O , где ось ξ совпадает с прямой $\vartheta(x, z) = 0$, а ось η направляем в сторону положительных скоростей (рис. 3)

Дополнительно полагаем, что $(\xi_1 - \xi_0) > 0$, где $M_0(\xi_0, \eta_0)$ и $M_1(\xi_1, \eta_1)$ — координаты исходных точек в новой системе. Если обозначить $G = \sqrt{a^2 + b^2}$, то скорость в новой системе координат примет вид $\vartheta = G\eta$, а точки M_0 и M_1 будут лежать на полуокружности $\eta = \sqrt{R^2 - \xi^2}$. Тогда время перемещения вдоль луча между рассматриваемыми точками вычисляется по формуле

$$\tau(M_0, M_1) = \int_{\xi_0}^{\xi_1} \frac{ds}{\vartheta} = \frac{R}{G} \int_{\xi_0}^{\xi_1} \frac{d\xi}{R^2 - \xi^2} = \frac{1}{G} \ln \frac{\eta_1 R - \xi_0}{\eta_0 R - \xi_1}. \quad (5.1)$$

Если учесть равенства $\xi_0^2 + \eta_0^2 = \xi_1^2 + \eta_1^2 = R^2$, то после ряда преобразований получаем:

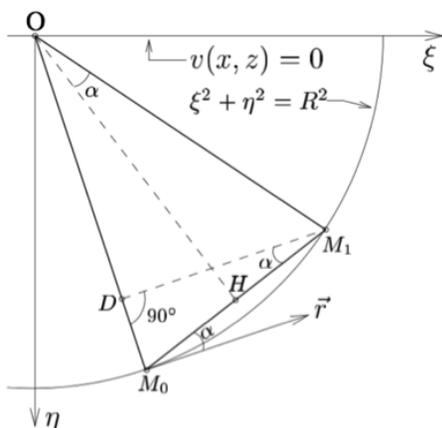


Рис. 3. Плоскость луча

$$\frac{\eta_1 R - \xi_0}{\eta_0 R - \xi_1} = \frac{R(\xi_1 - \xi_0) - [\xi_0(\xi_1 - \xi_0) + \eta_0(\eta_1 - \eta_0)]}{R(\xi_1 - \xi_0) + [\xi_0(\xi_1 - \xi_0) + \eta_0(\eta_1 - \eta_0)]}. \quad (5.2)$$

В то же время можно заметить, что имеют место следующие равенства :

$$\xi_0(\xi_1 - \xi_0) + \eta_0(\eta_1 - \eta_0) = \overline{OM_0} \cdot \overline{M_0M_1} = -Rd \sin \alpha, \quad (5.3)$$

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\xi_1 - \xi_0}{\eta_1 + \eta_0} = G \frac{\xi_1 - \xi_0}{\vartheta(M_1) + \vartheta(M_0)}. \quad (5.4)$$

Здесь введено обозначение $d = |\overline{M_0M_1}|$. На основании соотношений (5.1)–(5.4) с помощью элементарных преобразований находим явное выражение для времени перемещения вдоль луча между двумя точками $M_0(x_0, z_0)$ и $M_1(x_1, z_1)$:

$$\tau(M_0, M_1) = \frac{1}{G} \ln \frac{\sqrt{1 + \left(\frac{2}{d}\right)^2 \frac{\vartheta(M_0)\vartheta(M_1)}{G} + 1}}{\sqrt{1 + \left(\frac{2}{d}\right)^2 \frac{\vartheta(M_0)\vartheta(M_1)}{G} - 1}}. \quad (5.5)$$

6. Лучевое расхождение. Классическое определение геометрического расхождения можно найти в работах [1, 2]. Дадим альтернативное определение для полного геометрического расхождения по аналогии с понятием полной гауссовой кривизны поверхности.

Будем рассматривать гладкую параметризацию $\Phi(\alpha, \beta)$ участка поверхности единичной сферы в некоторой окрестности точки $n_0 = \Phi(\alpha_0, \beta_0)$, определенную в области $D \subset \mathbb{R}^2$. Положим, что каждому направлению $\mathbf{n} = \Phi(\alpha, \beta)$ для $(\alpha, \beta) \in D$ отвечает луч, уравнение которого можно записать в так называемых лучевых координатах следующим образом: $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t, \alpha, \beta)$, где t — время перемещения вдоль луча, отсчитываемое от источника, $0 \leq t \leq T$. Функцию $\mathbf{r}(t, \alpha, \beta)$ можно считать дважды непрерывно дифференцируемой в области:

$$G = (t_0, t_1) \times D = \{(t, \alpha, \beta) : t \in (t_1, t_2), (\alpha, \beta) \in D\}, \quad t_1 \leq t_2 \leq T. \quad (6.1)$$

Если зафиксировать $(\alpha, \beta) \in D$, то функция $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t, \alpha, \beta)$ как функция времени $t \in (t_1, t_2)$ будет иметь вид отрезка луча с направляющим вектором $\mathbf{n} = \Phi(\alpha, \beta)$ в источнике. Если зафиксировать значение $t \in (t_1, t_2)$, то множество точек $\{\mathbf{r}(t, \alpha, \beta) : (\alpha, \beta) \in D\}$ является участком поверхности фронта волны, проходящим через точку среды $\mathbf{r}(t, \alpha_0, \beta_0)$, параметризованным двумя параметрами (α, β) .

Зафиксируем значение времени $t \in (t_0, t_1)$. Тогда каждой области $P \subset D$ соответствует область $\Omega = \Phi(P)$ на поверхности единичной сферы и область $\Sigma = \{\mathbf{r}(t, \alpha, \beta) : (\alpha, \beta) \in P\}$ на поверхности фронта волны. Предел отношения площадей $S(S)$ и $S(W)$ при стягивании области P в точку (α, β) существует для каждой точки $(\alpha, \beta) \in D$ ввиду сделанных предположений о гладкости функций Φ и \mathbf{r} . Поэтому по определению можно положить в точке $M = \mathbf{r}(t, \alpha, \beta)$

$$L^2(M) = \lim_{d(P) \rightarrow 0} \frac{S(\Sigma)}{S(\Omega)} = \frac{|\mathbf{r}'_\alpha(t, \alpha, \beta) \times \mathbf{r}'_\beta(t, \alpha, \beta)|}{|\Phi'_\alpha(t, \alpha, \beta) \times \Phi'_\beta(t, \alpha, \beta)|}.$$

Выражение $|\Phi'_\alpha \times \Phi'_\beta|$ есть не что иное, как модуль вектора, ортогонального поверхности единичной сферы в точке $\mathbf{n} = \Phi(\alpha, \beta)$. Оно может быть вычислено по формуле:

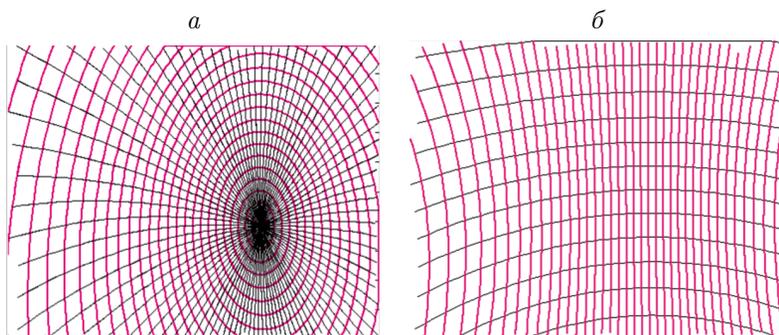


Рис. 4. Координатные линии при фиксированном значении угла:
a — координатная сетка с особенностью;
б — координатная сетка без особенности

$$|\Phi'_\alpha \times \Phi'_\beta| = |\mathbf{n}(\Phi'_\alpha \times \Phi'_\beta)| = \begin{vmatrix} \Phi_1 & \Phi_2 & \Phi_3 \\ \frac{\partial \Phi_1}{\partial \alpha} & \frac{\partial \Phi_2}{\partial \alpha} & \frac{\partial \Phi_3}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial \Phi_1}{\partial \beta} & \frac{\partial \Phi_2}{\partial \beta} & \frac{\partial \Phi_3}{\partial \beta} \end{vmatrix}. \quad (6.1)$$

7. Координатные линии на дневной поверхности. Для получения опорной сетки координатных линий на дневной поверхности прибегнем к параметризации сферическими координатами θ и φ направляющего вектора в источнике. Выберем некоторый шаг дискретизации h (можно взять $h = 1^\circ$). Зафиксируем один из углов и, меняя другой с шагом h , получаем координатную линию. Повторив процедуру несколько раз, получим сетку координатных линий на дневной поверхности. На рис. 4 *a*, *б* приведены примеры получаемых опорных сеток на дневной поверхности. Одним цветом выделены координатные линии, которые соответствуют постоянным значениям фиксированного угла.

На рис. 4 *a* показаны координатные линии с особенностью, которая заключается в сгущении координатных линий к одной точке. С помощью незначительного изменения параметризации, а именно поворота оси Oz на $\pi/2$, удается исключить эту особенность (рис. 4, *б*).

8. Производные точки выхода на поверхность по углу выхода. Для реализации метода лучевой пристрелки помимо опорной сетки координатных линий необходимо рассчитать производные точки выхода на поверхность по углам выхода. Далее представлена схема расчета данных производных. Более того, будут выведены формулы для расчета производных направляющего вектора по углам выхода \mathbf{r}'_{θ} и \mathbf{r}'_{φ} , которые также необходимы для вычисления геометрического расхождения.

Напомним условные обозначения, которые использовались ранее: \mathbf{r} — направляющий вектор, \mathbf{x}_0 — начальная точка, \mathbf{g} — градиент скорости.

Заметим, что имеет место следующее равенство:

$$\mathbf{r} \times [\mathbf{g} \times \mathbf{r}] = \mathbf{g} - \mathbf{r}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}). \quad (8.1)$$

Дифференцируя уравнение луча (4.3), получаем:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{r} \cos(ks) - \frac{\mathbf{r} \times [\mathbf{g} \times \mathbf{r}] \sin(ks)}{\vartheta_0 k}, \quad (8.2)$$

$$\ddot{\mathbf{x}} = - \left[k\mathbf{r} \sin(ks) + \frac{\mathbf{r} \times [\mathbf{g} \times \mathbf{r}] \cos(ks)}{\vartheta_0} \right]. \quad (8.3)$$

Поскольку был выбран точечный источник сферического типа, то $\mathbf{r} = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, \sin \theta)$. Далее полагаем, что $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0(\theta, \varphi)$ и $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\theta, \varphi)$. В точке луча на очередной грани значение параметра s будем считать функцией $s(\theta, \varphi)$, определяемой неявно соотношением

$$G(x(s(\theta, \varphi), \theta, \varphi)) = 0 \Rightarrow s'_{\theta} = - \frac{\nabla G \cdot \mathbf{x}'_{\theta}}{\nabla G \cdot \dot{\mathbf{x}}}, \quad (8.4)$$

где $G(x) = 0$ — уравнение очередной грани.

Начальная точка луча в новой среде будет иметь вид $\mathbf{x}_0(\theta, \varphi) = \mathbf{x}_0(s(\theta, \varphi), \theta, \varphi)$, следовательно, справедливо следующее выражение для производной точки выхода:

$$\frac{\partial \mathbf{x}_0}{\partial \theta} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial s} \cdot s'_{\theta} + \mathbf{x}'_{\theta}. \quad (8.5)$$

Направляющий вектор в начальной точке очередного звена луча имеет вид $\mathbf{r}(\theta, \varphi) = \dot{\mathbf{x}}(s(\theta, \varphi), \theta, \varphi)$, поэтому производная направляющего вектора по полярному углу выхода равна

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = \ddot{\mathbf{x}} \cdot s'_\theta + \dot{\mathbf{x}}'_\theta. \quad (8.6)$$

Чтобы воспользоваться приведенными выше формулами, необходимы выражения для \mathbf{x}'_θ и \mathbf{x}''_θ , которые получаются простым дифференцированием формул (4.3) и (8.2) по углу θ . Аналогичные рассуждения можно провести для производных точки выхода на поверхность и направляющего вектора по азимутальному углу φ .

Итак, после входа в очередной блок следует определить производные $\frac{\partial \mathbf{x}_0}{\partial \theta}$ и $\frac{\partial \mathbf{x}_0}{\partial \varphi}$, а также \mathbf{r}'_θ и \mathbf{r}'_φ $\mathbf{r}(\theta, \varphi)$ и производить расчет в новом блоке.

9. Метод лучевой пристрелки. Для численного решения двухточечных краевых задач обычно применяют метод лучевой пристрелки. Описание данного метода можно найти в классических работах [1, 2, 5], а также в современных работах [6]. Идея метода состоит в уточнении первого решения с помощью изменения его аргументов. Далее будет приведен алгоритм решения задачи, имеющей следующую постановку.

Постановка задачи 3. Даны координаты приемника R и точечного источника S . Необходимо определить углы в источнике таким образом, чтобы длина отрезка, соединяющего точку выхода луча на дневную поверхность и приемник R , не превосходила наперед заданной величины ε .

Алгоритм 1.

1. Выбираем произвольный узел M^* построенной ранее опорной сетки координатных линий. Тем самым зафиксированы θ^* и φ^* , которые необходимо задать в источнике, чтобы попасть в данный узел. Проведем вектор $\overline{M^*R}$, а также векторы $\overline{M^*M_i}$ ($i = \overline{1, 3}$), соединяющие точку M^* и соседние вершины криволинейного четырехугольника. Осуществляем переход по тому из трех векторов, который составляет наименьший угол с $\overline{M^*R}$. Повторяя данную операцию, за конечное число шагов приходим в узел M^{**} криволинейного четырехугольника, содержащего точку R . Точка M^{**} есть искомое первое решение, которому соответствуют θ^{**} и φ^{**} .

2. На данном шаге уточним θ^{**} и φ^{**} так, чтобы оказалось верным следующее неравенство: $\|M^{**} - R\| \leq \varepsilon$. Для этого осуществим “пристрелку” из M^{**} , решая следующую систему:

$$\begin{cases} x(\theta + \Delta\theta, \varphi + \Delta\varphi) - x(\theta, \varphi) = \Delta x, \\ y(\theta + \Delta\theta, \varphi + \Delta\varphi) - y(\theta, \varphi) = \Delta y, \end{cases} \quad (9.1)$$

где $\theta^{**} = \theta + \Delta\theta$, $\varphi^{**} = \varphi + \Delta\varphi$. Для решения данной системы организуем ньютоновский итерационный процесс:

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial \theta} \Delta\theta + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \Delta\varphi = \Delta x, \\ \frac{\partial y}{\partial \theta} \Delta\theta + \frac{\partial x}{\partial \varphi} \Delta\varphi = \Delta y. \end{cases} \quad (9.2)$$

Решаем данную систему методом Крамера и находим неизвестные $(\Delta\theta, \Delta\varphi)$. Далее пересчитываем производные и снова решаем систему. Таким образом, за достаточно небольшое число итераций достигается наперед заданная точность ε .

10. Численный эксперимент. В качестве конкретной модели среды был выбран параллелепипед без внутренних границ, который имеет следующие параметры:

$$\{5 \leq x \leq 15 \text{ км}, 10 \leq y \leq 30 \text{ км}, 5 \leq z \leq 15 \text{ км}\}.$$

В качестве скоростной модели среды выбрана нелинейная функция

$$\vartheta = 1 + 0.05x + 0.1y + 0.05z + 0.05 \sin(0.05\pi x) (\text{км/с}).$$

Источник заглублен и имеет следующие координаты: $x = 10$ км, $y = 17$ км, $z = 15$ км. Приемник расположен на дневной поверхности $x = 9$ км, $y = 22$ км, $z = 5$ км.

На рис. 5, *a*, *b* представлены координатные линии на дневной поверхности, которые получаются изменением углов θ и φ в источнике последовательно на 1° .

Реализовав итерационный процесс, который был описан в Алгоритме 1, получаем численные результаты, приведенные в таблице.

Из представленной таблицы видно, что для достижения приемлемой точности $\varepsilon = 10^{-3}$ потребовалось сделать 165 итераций, хотя предполагалось, что достаточно будет ограничиться 3–6 итерациями. Подобное различие ожидаемого и полученного числа выстрелов требует объяснения.

Проведем координатную линию возле приемника и посчитаем производные вдоль нее. Оказывается, в окрестности приемника производная точки выхода на поверхность по углу θ претерпевает разрыв (рис. 6).

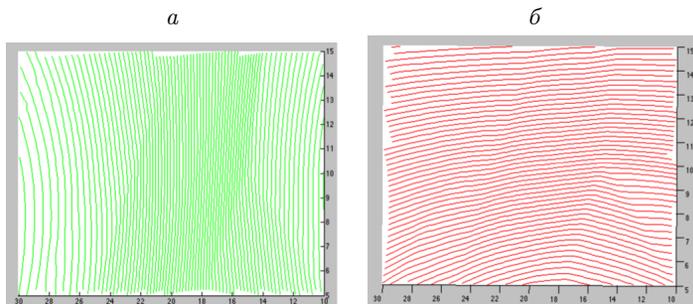


Рис. 5. Координатные линии при изменении углов θ и φ :
 $a - \theta = \text{const}$, $\varphi \in [0^\circ, 360^\circ]$; $b - \varphi = \text{const}$, $\theta \in [-90^\circ, 90^\circ]$

Таблица 1

Исследование коррекции погрешности измерений

Номер выстрела	X	Y	Расстояние до мишени, км	Время, сек
0	8.97911452	22.005888	0.021699670	3.155860
4	8.9802081	22.005581	0.020563768	3.1557429
8	8.98157786	22.005197	0.019141179	3.155595
16	8.9840394	22.0045058	0.016584414	3.1553303
32	8.9880198	22.0033870	0.012449761	3.1549017
64	8.99325036	22.0019139	0.007015741	3.1543388
128	8.99785778	22.0006111	0.002227700	3.1538427
165	8.9989163	22.0003103	0.001127228	3.1537419

Если построить двумерную поверхность, соответствующую $x'_\theta(\theta, \varphi)$, то окажется, что число точек, в которых производная претерпевает разрыв, достаточно велико (рис. 7).

Вывод. На основании проведенного эксперимента можно сделать вывод о том, что применение данного алгоритма без предварительного сглаживания скоростной модели является некорректным и может привести к ошибочным численным результатам.

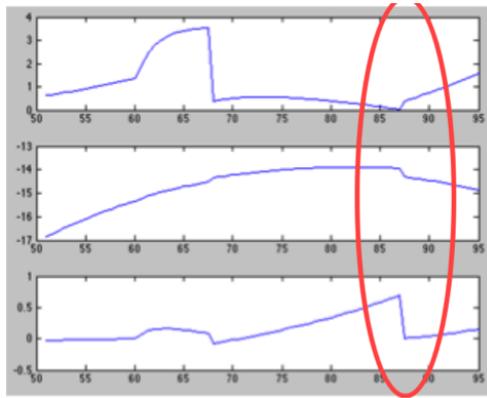


Рис. 6. Производные координат точки выхода по θ

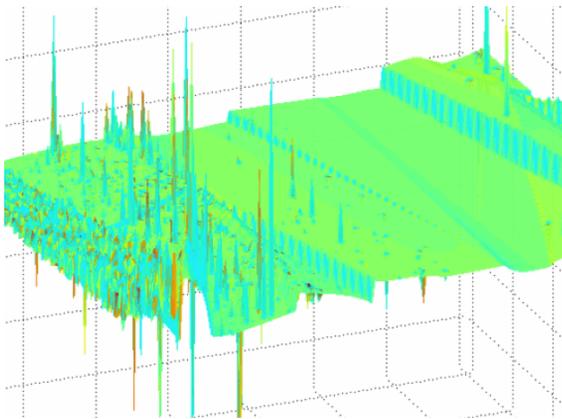


Рис. 7. Двумерная поверхность $\mathbf{x}'_{\theta}(\theta, \varphi)$

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. А. С. Белоносов

Список литературы

- [1] Алексеев А. С., Белоносова А. В., Белоносов А. С., Цецохо В. А. Об алгоритмах решения двумерных и трехмерных обратных кинематических задач сейсмоки // Труды Междунар. конф. по вычислительной

математике “МКВ-2004”. Ч. 1. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2004.

- [2] Скворцов А. В. Триангуляция Делоне и ее применение // Томск: Изд-во Том. гос. ун-та, 2002. С. 7–11.
- [3] Петрашень Г. И. Элементы динамической теории распространения сейсмических волн. Вопросы динамической теории распространения сейсмических волн : Сб. науч. тр. / АН СССР, Мат. ин-т им. В. А. Стеклова, Ленингр. отд-ние, ЛГУ. Л., 1959. №3. С. 11–106.
- [4] Алексеев А. С., Гельчинский Б. Я. О лучевом методе вычисления полей волн в случае неоднородных сред с криволинейными границами раздела. : : Сб. науч. тр. / АН СССР, Мат. ин-т им. В. А. Стеклова, Ленингр. отд-ние, ЛГУ. Л., 1959. №3. С. 107–160.
- [5] Алексеев А. С., Бабич В. М. О лучевом методе вычисления интенсивности волновых фронтов // Изв. АН СССР. Сер.: Геофиз. 1958. №1. С. 17–31.
- [6] Rawlinson N., Sambridge M. Seismic traveltime tomography crust and lithosphere. 2003. P. 17–22.

*Кириленко Александр Владимирович — магистрант
Новосибирского государственного университета;
e-mail: alexkirnsu@gmail.com*

Стохастический и градиентный подход к численному решению обратной задачи для простейшей математической модели инфекционного заболевания с запаздыванием

В. А. Латышенко, О. И. Криворотько*

Новосибирский государственный университет

*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

УДК 519.633.2

Численно исследована простейшая математическая модель инфекционного заболевания, состоящая из четырех обыкновенных дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом, разработанная акад. Г. И. Марчуком. Продемонстрированы результаты численных расчетов, полученные методом Рунге — Кутты — Фельберга. Определение параметров модели (обратная задача) заключается в нахождении минимума соответствующего целевого функционала. Решение обратной задачи получено с помощью комбинации двух методов: генетического алгоритма (алгоритм, основанный на механизме естественного отбора) и градиентного метода (минимальных ошибок). Для работы с градиентным методом получен явный вид градиента целевого функционала, связанного с решением соответствующей сопряженной задачи. Продемонстрированы и обсуждены результаты численных расчетов.

Ключевые слова: система уравнений с запаздывающим аргументом, математическая модель Г. И. Марчука, метод Рунге — Кутты, обратная задача, генетический алгоритм, градиентный метод, определение параметров иммунного ответа.

Введение. В настоящее время бурно развивается математическое моделирование в иммунологии. Важным открытием явилось установление того факта, что иммунный ответ связан с характером защиты организма от бактериальных и вирусных атак. Поэтому познание механизма иммунного ответа дает ключ к пониманию процесса развития заболевания и к методам его эффективного лечения.

Модели, описывающие иммунный ответ, состоят из одного или нескольких обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с запаздывающими аргументами, которые решаются различными численными методами, такими как метод шагов, который сводит обыкновенные дифференциальные уравнения с запаздыванием к уравнениям без запаздывания [3], явный и неявный метод Эйлера, метод наименьших квадратов, непрерывные методы [4], обладающими большой степенью общности и др [5]. В работе используется численный метод Рунге — Кутты — Фельберга четвертого порядка аппроксимации [6].

1. Постановка задачи и численный алгоритм ее решения.

Рассмотрим задачу Коши для дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом следующего вида (ограничимся случаем одного запаздывания):

$$\begin{aligned} \frac{dy(t)}{dt} &= f(t, y(t), y(t - \tau)), \quad t_0 \leq t \leq t_0 + T, \\ y(s) &= \varphi(s), \quad s \in [t_0 - \tau, t_0]. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Отметим, что задача Коши (1.1) имеет решение, если f и φ непрерывны, и это решение единственно, если функция $f(t, y(t), y(t - \tau))$ удовлетворяет условию Липшица по второму аргументу при t , близких к s [3].

Для численного решения задачи Коши (1.1) используем метод Рунге — Кутты — Фельберга четвертого порядка аппроксимации.

Пусть задан отрезок $[t_0, t_0 + T]$; $N_t + 1$ — число точек на заданном отрезке, $h_t = \frac{t_0 - (t_0 + T)}{N_t}$ — шаг сетки; τ — величина запаздывания.

Для того чтобы найти решение $y(t)$ задачи (1.1), перепишем ее в эквивалентной форме:

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= f(t, y(t), z(t)), \quad y \in \mathbb{R}^N, \quad z \in \mathbb{R}^N, \quad t_0 \leq t \leq t_0 + T, \\ z(t) &= y(t - \tau), \\ y(s) &= \varphi(s), \quad s \in [t_0 - \tau, t_0]. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Если $t \in [t_0, t_0 + \tau]$, то функция $z(t)$ в системе (1.2) известна, т. е. $z(t) = \varphi$, где φ — вектор начальных данных. Тогда $y(t)$ находится известным методом Рунге — Кутты четвертого порядка аппроксимации [7]:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(i)} &= y_n^{(i)} + \frac{1}{6}(k_1^{(i)} + 2k_2^{(i)} + 2k_3^{(i)} + k_4^{(i)}), \quad i = 1, \dots, M; \\ k_1^{(i)} &= h_t f_i(t_n, y_n), \quad k_2^{(i)} = h_t f_i(t_n + \frac{h_t}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_1), \\ k_3^{(i)} &= h_t f_i(t_n + \frac{h_t}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_2), \quad k_4^{(i)} = h_t f_i(t_n + h_t, y_n + k_3). \end{aligned}$$

Теперь, когда известны значения в узлах сетки при $t \in [t_0, t_0 + \tau]$, нужно посчитать $y(t)$ на оставшемся отрезке, т. е. при $t \in [t_0 + \tau, T]$.

Функция $z(t)$ на отрезке $t \in [t_0 + \tau, T]$ известна из предыдущих вычислений. Действительно, $z(t) = y(t - \tau)$, где все $y(t - \tau)$ посчитаны на предыдущем шаге. Поэтому используем метод Рунге — Кутты четвертого порядка аппроксимации.

2. Пример реализации алгоритма Рунге — Кутты — Фельберга. Рассмотрим реализацию метода на конкретной математической модели простейшего инфекционного заболевания, предложенной Г. И. Марчуком [1]:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= (\beta - \gamma F(t))V(t); \quad t \in (0, T), \\ \frac{dF}{dt} &= \rho C(t) - (\mu_f + \eta \gamma V(t))F(t), \\ \frac{dC}{dt} &= \xi(m)\alpha F(t - \tau)V(t - \tau) - \mu_c(C(t) - C^*), \\ \frac{dm}{dt} &= \sigma V(t) - \mu_m m(t) \end{aligned} \quad (2.1)$$

с начальными данными:

$$V(0) = V^0, \quad C(0) = C^*, \quad F(0) = \frac{\rho C^*}{\mu_f}, \quad m(0) = 0. \quad (2.2)$$

Здесь $V(t)$ — концентрация патогенных размножающихся антигенов; $F(t)$ — концентрация антител; $C(t)$ — концентрация плазматических клеток; $m(t)$ — характеристика пораженного органа; $\alpha, \beta, \gamma, \rho, \mu_f, \eta, \xi(m), \mu_c, \sigma, \mu_m, C^*$ — постоянные величины (характеристики конкретного организма), значения которых приведены в табл. 1 [8].

В численных расчетах используется функция, которая отвечает за производительность выработки антител

$$\xi(m) = \begin{cases} 1, & m \in (0, m^*], \\ 1 + \frac{m-m^*}{m^*-1}, & m \in (m^*, 1) \end{cases}$$

при $m^* = 0.3$.

2.1. *Моделирование в тяжелой форме заболевания.* Подставим в систему (2.1) начальные данные и оценки параметров для моделирования острой пневмонии из табл. 1.

На рис. 2.1 представлены распределения функций $V(t), F(t), C(t)$ и $m(t)$ для запаздывания $\tau = 3$ дня (для среднестатистического 18-летнего инфицируемого). Отметим, что на 25-й день начинает увеличиваться концентрация плазматических клеток $C(t)$, поэтому возрастает количество антител $F(t)$, которые реагируют с антигенами, что приводит к убыванию функции $V(t)$. В связи с этим на 25-й день масса пораженного органа $m(t)$ уменьшается.

При увеличении параметра запаздывания τ организм может не справиться с болезнью, что повлечет летальный исход. В силу этого ослабим характеристики заболевания.

2.2. *Моделирование легкой формы заболевания.* Изменим параметры из табл. 1 острой пневмонии, а именно, уменьшим коэффициент размножения антигенов $\beta = 0, 2$ и увеличим число образующихся новых клеток $\alpha = 5 \cdot 10^{-10}$. Таким образом, на рис. 2.2 представлены графики для запаздывания $\tau = 3$ дня.

Отметим, что организм идет на поправку быстрее, чем при тяжелой форме заболевания (на 22-й день, а не на 25-й).

Следовательно, важно уметь определять параметр запаздывания и характеристики заболевания по известным функциям $V(t), F(t), C(t)$ и $m(t)$ для составления индивидуального плана лечения пациента [9].

Таблица 1

Значения параметров в системе (2.1) в случае острой пневмонии

Параметр	Физический смысл	Размерность	Оценка
α	Коэффициент, учитывающий вероятность встречи антиген — антитело, возбуждение каскадной реакции и число образующихся новых клеток	мл/(моль·сут)	$5 \cdot 10^{-11}$
β	Коэффициент размножения антигенов	1/сут	0.35
γ	Коэффициент, связанный с вероятностью нейтрализации антигена антителами при встрече с ним	мл/(моль·сут)	$8.5 \cdot 10^{-14}$
μ_c	Коэффициент, равный обратной величине времени жизни плазматических клеток	1/сут	0.5
ρ	Скорость производства антител одной плазматической клеткой	1/сут	$7 \cdot 10^3$
η	Количество антител, необходимых для нейтрализации одного антигена	шт.	20
μ_f	Коэффициент, обратно пропорциональный времени распада антител	1/сут	0.05
σ	Скорость поражения органов-мишеней антигеном	мл/(моль·сут)	$9 \cdot 10^{-9}$
V^0	Начальная доза поражения	моль/мл	10^3
C^*	Постоянный уровень плазматических клеток в здоровом организме	клеток/мл	$2.85 \cdot 10^3$
μ_m	Скорость регенерации органа-мишени	1/сут	0.4

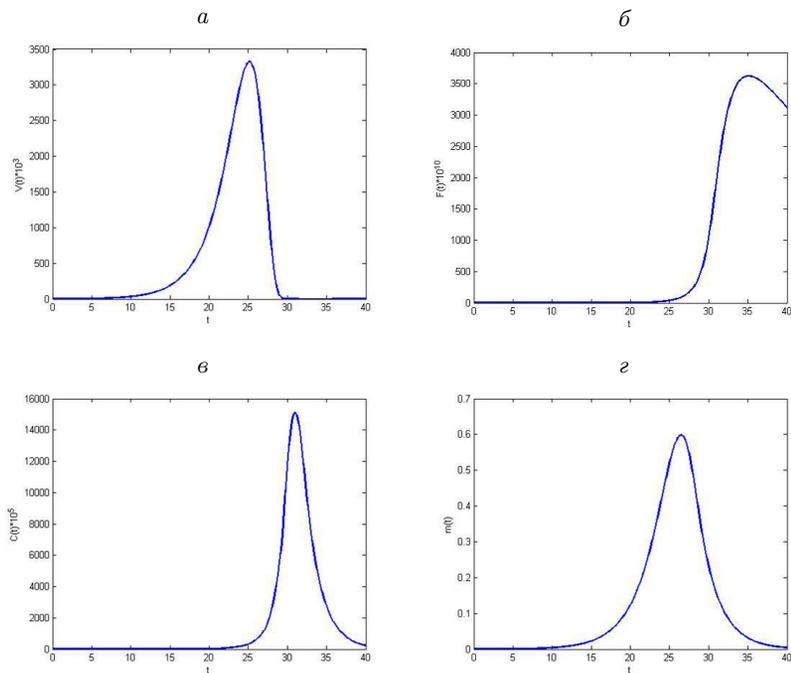


Рис. 2.1. Графики функций при $\tau = 3$ день
в случае острой пневмонии:

a — распределение антигена; $б$ — концентрация антител, реагирующих с антигеном; $в$ — концентрации плазматических клеток; $г$ — характеристики пораженного органа

3. Определение параметров иммунного ответа и инфекционного заболевания. Для начала сведем исходную математическую модель (2.1) к системе без запаздывания.

3.1. *Сведение к математической модели без запаздывания.* Для приведения математической модели (2.1) к системе без запаздывания разложим функции $F(t - \tau)$ и $V(t - \tau)$ в ряд Тейлора до первого порядка $F(t - \tau) \simeq F(t) + \tau F'(t)$, $V(t - \tau) \simeq V(t) + \tau V'(t)$ и заменим первые производные соответствующими уравнениями модели. Тогда задача Коши (2.1)–(2.2) принимает вид:

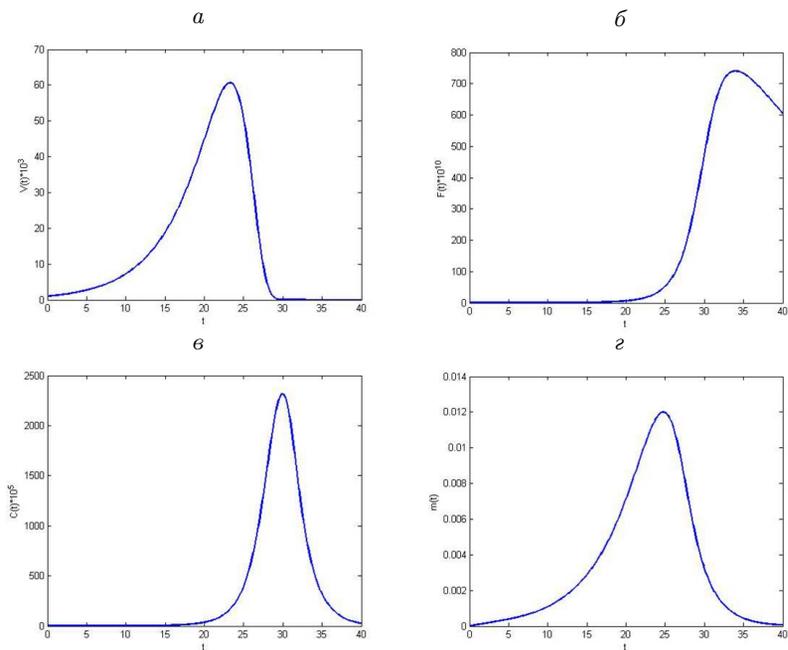


Рис. 2.2. Графики функций при $\tau = 3$ день
в случае легкой формы пневмонии:

a — распределение антигена; *б* — концентрация антител, реагирующих с антигеном; *в* — концентрация плазматических клеток; *г* — характеристика пораженного органа

$$\begin{aligned}
 \frac{d\tilde{V}}{dt} &= (\beta - \gamma\tilde{F}(t))\tilde{V}(t), \quad t \in (0, T), \\
 \frac{d\tilde{F}}{dt} &= \rho\tilde{C}(t) - (\mu_f + \eta\gamma\tilde{V}(t))\tilde{F}(t), \\
 \frac{d\tilde{C}}{dt} &= \xi\alpha(\tilde{F}(t)\tilde{V}(t) - \tau\tilde{F}(t)(\beta - \gamma\tilde{F}(t))\tilde{V}(t) - \\
 &\quad - \tau\tilde{V}(t)(\rho\tilde{C}(t) - (\mu_f + \eta\gamma\tilde{V}(t))\tilde{F}(t))) - \mu_c(\tilde{C}(t) - C^*), \\
 \frac{d\tilde{m}}{dt} &= \sigma\tilde{V}(t) - \mu_m\tilde{m}(t)
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

с начальными данными:

$$\tilde{V}(0) = V^0, \quad \tilde{C}(0) = C^*, \quad \tilde{F}(0) = \frac{\rho C^*}{\mu_f}, \quad \tilde{m}(0) = 0. \quad (3.2)$$

3.2. *Постановка обратной задачи.* Под обратной задачей понимается задача определения коэффициентов прямой задачи по некоторой дополнительной информации.

Обозначим через Φ^k решение прямой задачи (2.1)–(2.2) при заданных параметрах в k точках, равномерно распределенных на отрезке $[0, T]$, т. е.

$$\tilde{u}(t_k; q) = \Phi^k, \quad k = 1, \dots, K. \quad (3.3)$$

Обратная задача (3.1)–(3.3) состоит в определении вектора параметров $q = (\tau, \alpha, \beta, \gamma, \sigma, \rho, \eta, \mu_c, \mu_f, \mu_m) \in R^{10}$ по дополнительным измерениям (3.3). Отметим, что функция $m(t)$ может быть определена напрямую (например, по томографическим снимкам), а определение концентраций $V(t), C(t), F(t)$ является непростой задачей.

Определим оператор обратной задачи следующим образом [10]:

$$\begin{aligned} A : \mathcal{P} &\rightarrow R^k \\ q &\rightarrow u(t_k; q). \end{aligned}$$

Таким образом, задача может быть записана в операторном виде:

$$A(q) = \Phi, \quad \Phi = (\Phi^1, \Phi^2, \dots, \Phi^k)^T. \quad (3.4)$$

Решение обратной задачи (3.1)–(3.3) будем находить, минимизируя целевой функционал:

$$J(q) = \|A(q) - \Phi\|^2 = \sum_{k=0}^K |u(t_k; q) - \Phi^{(k)}|^2. \quad (3.5)$$

3.3. *Генетический алгоритм численного решения обратной задачи.* Для нахождения минимума целевого функционала (3.5) используем генетический алгоритм (ГА) — эвристический алгоритм поиска, используемый для решения задач оптимизации и моделирования путем случайного подбора, комбинирования и вариации искомым параметров с использованием механизмов, аналогичных естественному отбору в природе.

Пусть q_t — точное решение задачи (3.1)–(3.3), $\varepsilon = 10^{-4}$ — условие остановки ГА и $\min J(q) = 100$. ГА численного решения задачи минимизации (3.5) включает следующие шаги [11]:

Шаг 1. Генерируем начальную популяцию (набор начальных аппроксимаций решений обратной задачи (3.1)–(3.3)).

Пусть k пробегает отрезок от 1 до L , т. е. $k = 1, \dots, L$; L — число потомков:

— строим генотип q_k , состоящий из 10 параметров. Каждое значение выбирается случайно на отрезке $[q_t - 0, 3 \cdot q_t; q_t + 0, 3 \cdot q_t]$. Из полученных потомков q_k составляем матрицу;

— потомка с наименьшим значением функционала J помещаем на первую строку матрицы.

Шаг 2. Пусть k пробегает отрезок от 2 до L , т. е. $k = 2, \dots, L$ (лучшего (первого) потомка скрещиваем с остальными).

а) *Скрещивание.* Двух потомков получаем по формулам:

$$\begin{aligned} q_{k1} &= (\alpha_1 + m_1(\alpha_1 - \alpha_k); \dots; \tau_1 + m_1(\tau_1 - \tau_k)), \\ q_{k2} &= (\alpha_1 + m_2(\alpha_1 - \alpha_k); \dots; \tau_1 + m_2(\tau_1 - \tau_k)), \end{aligned}$$

где m_1, m_2 выбраны случайным образом на отрезке $[-0.25; 1.25]$.

б) *Мутация.* У каждого потомка два случайно выбранных параметра мутируют, т. е. снова генерируются.

в) Подставляем найденные векторы в систему (3.1), находим значения $\tilde{u}(t; q_{k1})$ и $\tilde{u}(t; q_{k2})$.

г) Считаём $J(q_{k1}), J(q_{k2})$ по формуле (3.5).

д) *Отбор.* Среди подсчитанных функционалов находим функционал с минимальным значением, и соответствующие ему параметры помещаем на k -ю сточку матрицы. Если полученный функционал к тому же меньше текущего минимального, то присваиваем ему значение $\min J(q)$.

Шаг 3. Если $\min J(q) > \varepsilon$, то выполняем Шаг 2б, иначе переходим на шаг 4.

Шаг 4. Вывести q_k .

3.4. *Численные эксперименты по решению обратной задачи.* Для каждого параметра составляем отрезок допустимых значений. В нашем случае это 30% от точного значения (Шаг 1,а алгоритма). Допустим, точное значение параметра τ равно 1. Выбирая из получившегося отрезка случайное число, генерируем начальную популяцию, с которой в дальнейшем работает генетический алгоритм по схеме, описанной в п. 4.3. Дополнительную информацию Φ^k (формула 3.4) получаем каждые 8 дней, начиная с 5-го.

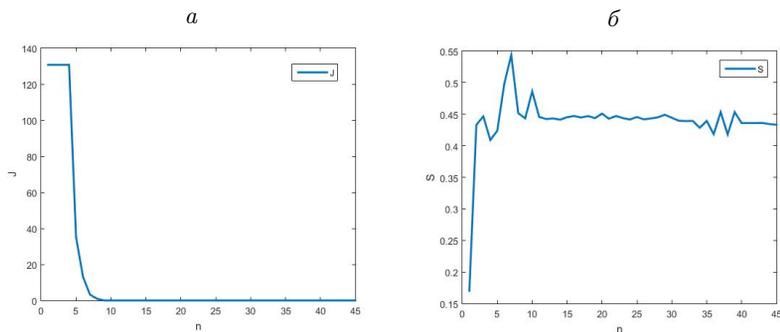


Рис. 3.1. Графики изменения значений:
 а — функционала; б — относительной ошибки

На рис. 3.1 представлены графики зависимости значения функционала J от номера итерации n и зависимость значения относительной ошибки S от номера итерации n . Относительная ошибка вычисляется по формуле:

$$S = \sum_{i=1}^{10} \frac{(q_i - q_{t_i})^2}{q_{t_i}^2}, \quad (3.6)$$

где q_i, q_{t_i} — текущее и точное значения i -го параметра, соответственно.

Из табл. 2 значений параметров видно, что, например, σ, η, μ_f далеки от точных значений, а параметры γ, ρ, μ_c и μ_m зафиксировались на верхней или нижней границе отрезка и не изменяются.

Рассмотрим графики изменения количества размножающихся антигенов $V(t)$, антител $F(t)$, плазматических клеток $C(t)$, массы пораженной части органа $m(t)$ при полученном наборе параметров (рис. 3.2).

Заметим, что графики концентрации антигенов, антител и плазматических клеток при полученном ГА векторе параметров достаточно далеки от точного решения, а график характеристики массы пораженной части органа $m(t)$ почти не изменился. Вспомним, что последняя описывается уравнением $\dot{m} = \sigma V(t) - \mu_f m(t)$. Отсюда следует, что параметры σ и μ_f слабо чувствительны к ошибкам в функциях модели и измерениям. Их “плохое” восстановление влияет

Таблица 2

Значения параметров, полученные ГА

Параметр	Точное значение	Начальное значение	Полученное значение	Относительная ошибка
τ	1	0,9785	0,9926	0,0074
α	$5 \cdot 10^{-11}$	$5,8644 \cdot 10^{-11}$	$5,0571 \cdot 10^{-11}$	$0,0114 \cdot 10^{-11}$
β	0,35	0,36574	0,36601	0,04
γ	$8,5 \cdot 10^{-14}$	$10,555 \cdot 10^{-14}$	$11 \cdot 10^{-14}$	$0,29 \cdot 10^{-14}$
σ	$9 \cdot 10^{-9}$	$8,3352 \cdot 10^{-9}$	$8,44 \cdot 10^{-9}$	$0,062 \cdot 10^{-9}$
ρ	$7 \cdot 10^3$	$4,9 \cdot 10^3$	$4,9 \cdot 10^3$	$0,3 \cdot 10^3$
η	20	20,462	14,71	0,2645
μ_c	0,5	0,35	0,35	0,3
μ_f	0,05	0,050016	0,0514	0,028
μ_m	0,4	0,52	0,52	0,3

на решение задачи незначительно, и в дальнейшем можно эти два параметра не приближать.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о недостаточной эффективности ГА. Для уточнения восьми параметров $\tau, \alpha, \beta, \gamma, \rho, \mu_f, \eta, \mu_c$, полученных с помощью ГА, воспользуемся градиентным методом.

3.5. *Градиентный метод численного решения обратной задачи.* Градиентный метод решения задачи минимизации функционала $J(q)$, вычисляемого по формуле 3.5, заключается в определении приближенного решения уравнения

$$q_{j+1} = q_j - d_j(2A'(q_j)^*(A(q_j) - \Phi)), \quad d_j > 0, \quad (3.7)$$

где $d_j = \frac{2J(q_j)}{\|J'(q_j)\|^2}$ — параметр оптимизации метода минимальных ошибок [10], $J'(q_j) = 2A'(q_j)^*(A(q_j) - \Phi) \in R^8$ — градиент целевого функционала $J(q)$, удовлетворяющий соотношению [9]:

$$J'(q) = - \int_0^T \Psi(t)^T P_q(X(t), q) dt.$$

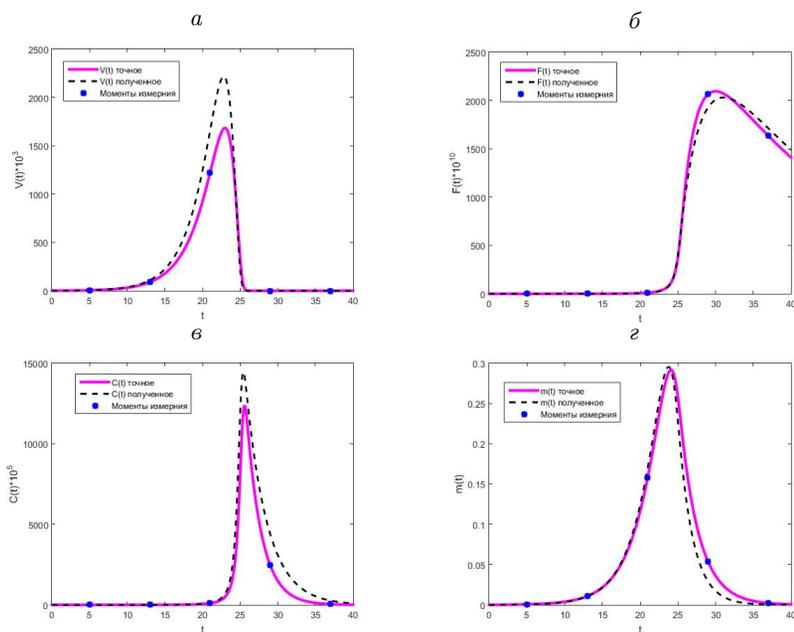


Рис. 3.2. Графики функций (сплошная линия — при точном решении обратной задачи, пунктирная — при полученном ГА решении обратной задачи (3.1)–(3.3); точки — изменения обратной задачи (3.3)): *а* — распределение антигена $V(t)$; *б* — концентрация антител, реагирующих с антигеном $F(t)$; *в* — концентрация плазматических клеток $C(t)$; *г* — характеристики пораженной части органа $m(t)$

Здесь $P_q(X(t), q)$ — матрица Якоби:

$$P_q = \begin{pmatrix} \frac{dP_1}{dq_1} & \cdots & \frac{dP_1}{dq_8} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{dP_4}{dq_1} & \cdots & \frac{dP_4}{dq_8} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & V(t) & -\zeta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\eta\zeta_2 & C(t) & -\gamma\zeta_2 & 0 & -F(t) \\ -\xi\alpha\zeta_1 & \xi(\zeta_2 - \tau\zeta_1) & -\zeta_4 & \zeta_4(F + \eta) & -\zeta_3VC & \gamma\zeta_4 & C^* - C & \zeta_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь $\zeta_1 = F(t)V(t)(\beta - \gamma F(t)) + V(t)(\rho C(t) - (\mu_f + \eta\gamma V(t))F(t))$; $\zeta_2 = F(t)V(t)$; $\zeta_3 = \xi\alpha\tau$ и $\zeta_4 = \zeta_2\zeta_3$; $P(X(t), q)$ — непрерывно дифференцируемые функции, описывающие правую часть в математической модели (3.1); $\Psi(t) = (\Psi_1(t), \Psi_2(t), \Psi_3(t), \Psi_4(t))^T$ — решение сопряженной задачи:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\Psi_1(t)}{dt} = -((\beta - \gamma F(t))\Psi_1(t) - \eta\gamma F(t)\Psi_2(t) + \\ + (\xi\alpha F(t)(1 + \tau(-\beta + \mu_f + \gamma(F(t) + 2\eta V(t)))) - \xi\alpha\tau\rho C(t))\Psi_3(t) + \\ + \sigma\Psi_4(t)), \quad t \in \bigcup_{k=0}^K (t_k, t_{k+1}), \quad t_0 = 0, \quad t_{K+1} = T; \\ \frac{d\Psi_2(t)}{dt} = (\gamma V(t)\Psi_1(t) + (\mu_f + \eta\gamma V(t))\Psi_2(t) - \\ - (\xi\alpha V(t)(1 + \tau(-\beta + \mu_f + \gamma(2F(t) + \eta V(t))))\Psi_3(t)); \\ \frac{d\Psi_3(t)}{dt} = -(\rho\Psi_2(t) - (\xi\alpha\tau\rho V(t) + \mu_c)\Psi_3(t)); \\ \frac{d\Psi_4(t)}{dt} = \mu_m\Psi_4(t); \\ \Psi(T) = 0; \quad [\Psi]_{t=t_k} = 2(X(t_k; q) - \Phi^{(k)}), \quad k = 1, \dots, K. \end{array} \right.$$

В нашем случае $J'(q) \in \mathbb{R}^8$ имеет вид:

$$J'_1(q) = - \int_0^T (\Psi_3(t)\xi\alpha(F(t)V(t)(\gamma F(t) - \beta + \mu_f + \eta\gamma V(t)) - \rho V(t)C(t)))dt,$$

$$J'_2(q) = - \int_0^T (\Psi_3(t)\xi(F(t)V(t)(1 + \tau(\gamma F(t) - \beta + \mu_f + \eta\gamma V(t))) - \\ - \tau\rho V(t)C(t)))dt,$$

$$J'_3(q) = - \int_0^T (\Psi_1(t)V(t) - \Psi_3(t)\xi\alpha\tau F(t)V(t))dt,$$

$$J'_4(q) = - \int_0^T (-\Psi_1(t)V(t)F(t) - \Psi_2(t)\eta F(t)V(t) + \Psi_3(t)(\tau V(t)F(t)(\xi\alpha F(t) + \eta V(t)))) dt,$$

$$J'_5(q) = - \int_0^T (\Psi_2(t)C(t) - \Psi_3(t)\xi\alpha\tau V(t)C(t)) dt,$$

$$J'_6(q) = - \int_0^T (-\Psi_2(t)\gamma V(t)F(t) + \Psi_3(t)\xi\alpha\tau\gamma V^2(t)F(t)) dt,$$

$$J'_7(q) = - \int_0^T (\Psi_3(t)(C^* - C(t))) dt,$$

$$J'_8(q) = - \int_0^T (-\Psi_2(t)F(t) + \Psi_3(t)\xi\alpha\tau V(t)F(t)) dt.$$

Отметим, что условия слабой сходимости сформулированы в работе В. В. Васина [12].

Введем обозначение I^* — множество решений уравнения

$$S(q) \equiv A'(q)^*(A(q) - \Phi) = 0, \quad T(q) \equiv q - d_j \left(2A'(q)^*(A(q) - \Phi) \right).$$

Теорема 1. Пусть оператор S удовлетворяет утверждению

$$q_j \rightarrow q, \quad A'(q_j)^*(A(q_j) - \Phi) \rightarrow 0 \Rightarrow q \in I^*,$$

оператор T соответствует условию

$$\|T(q) - z\|^2 \leq \|q - z\| - \nu \|T(q) - z\|^2, \quad \nu > 0,$$

где $z \in \text{Fix}(T) \neq \emptyset$, $\text{Fix}(T)$ — множество неподвижных точек оператора T . Тогда итерационная последовательность (3.7) сходится к решению уравнения (3.4) и верна оценка $\sum_{n=0}^{\infty} |q_{j+1} - q_j|^2 \leq |q_0 - q|^2 / \nu$, где q — точное решение уравнения (3.4).

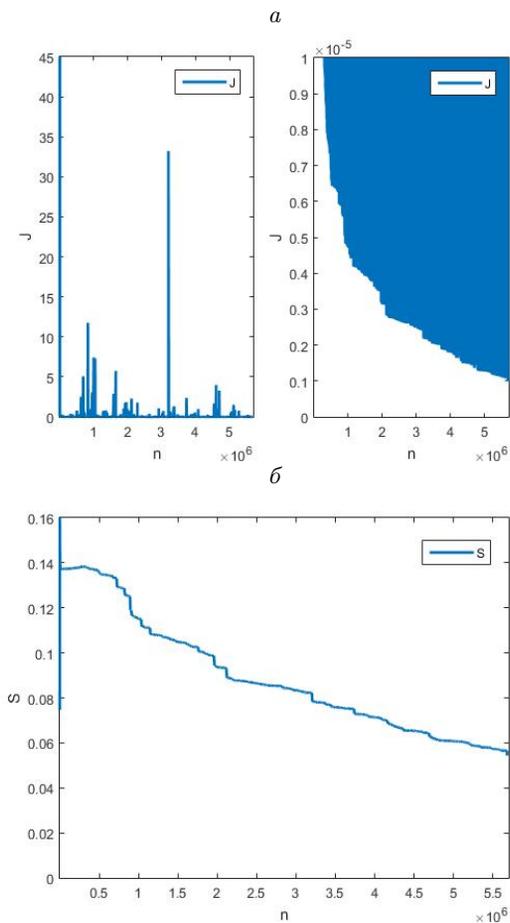


Рис. 3.3. Графики изменения значения: функционала (а); относительной ошибки (б)

3.6. *Численные расчеты решения обратной задачи комбинацией двух методов.* Для определения приближенного решения градиентным методом (соотношение 3.7) за q_0 берем параметры, полученные ГА. Положим $\varepsilon = 10^{-7}$. Пользуясь формулами из п. 4.5, получаем графики зависимости значений функционала J и относительной ошибки S , рассчитанной по формуле (3.6), от числа итераций n (рис. 3.3).

Таблица 3

Значения параметров, полученные комбинацией ГА
и градиентного метода

Параметр	Точное значение	Начальное значение для ГА	Полученное ГА значение (начальное для градиентного метода) 1224 итерации	Полученное значение комбинарованным методом, 5680310 итерации	Относительная ошибка
τ	1	1, 18	1, 1293	1, 0231	0, 0231
α	$5 \cdot 10^{-11}$	$4, 96 \cdot 10^{-11}$	$5, 11 \cdot 10^{-11}$	$5, 10 \cdot 10^{-11}$	$0, 02 \cdot 10^{-11}$
β	0, 35	0, 34	0, 373	0, 351	0, 0028
γ	$8, 5 \cdot 10^{-14}$	$8, 9 \cdot 10^{-14}$	$10, 2 \cdot 10^{-14}$	$9, 06 \cdot 10^{-14}$	$0, 65 \cdot 10^{-14}$
ρ	$7 \cdot 10^3$	$5, 91 \cdot 10^3$	$6, 9 \cdot 10^3$	$6, 9 \cdot 10^3$	$0, 014 \cdot 10^3$
η	20	19, 4	16, 4	16, 4	0, 18
μ_c	0, 5	0, 492	0, 403	0, 467	0, 066
μ_f	0, 05	0, 0525	0, 0534	0, 0523	0, 046

Отметим, что число итераций для ГА составило 1224, а в случае градиентного метода — 5 679 086. Общее число итераций комбинарованного метода $n = 5\,680\,310$. Графики функционала приведены в разных диапазонах. Видно, что функционал J колеблется (рис. 3.3, *a*, слева), но постепенно уменьшается (рис. 3.3, *a*, справа), а относительная ошибка S монотонно убывает (рис. 3.3, *b*), что согласуется с Теоремой 1 о сходимости градиентного метода. Значение параметров приведены в табл. 3.

Видно, что значения параметров, найденные с помощью комбинарованного метода, точнее, чем параметры, найденные генетическим

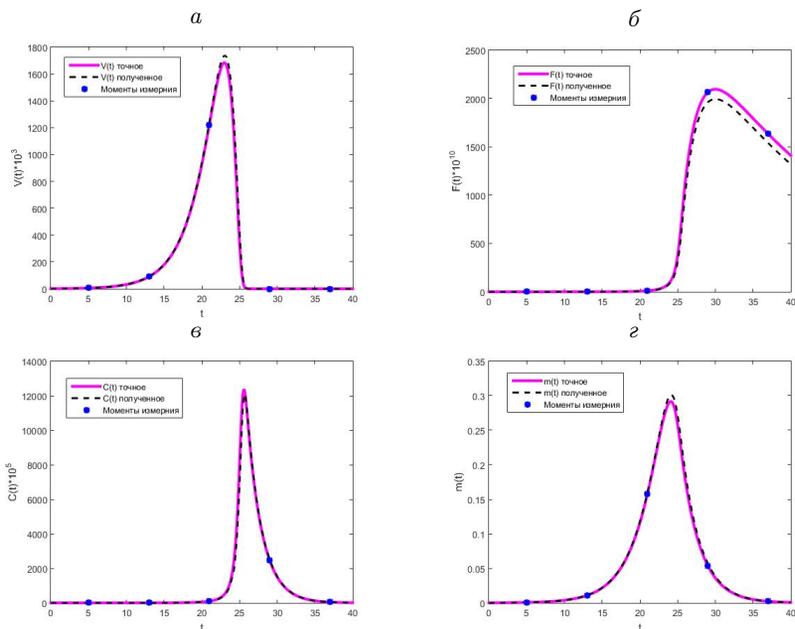


Рис. 3.4. Графики функций (сплошная линия — при точном решении обратной задачи; пунктирная линия — при полученном комбинированном методе решения обратной задачи (3.1)–(3.3); точками отмечены изменения (3.3) обратной задачи):
 а — распределение антигена $V(t)$; б — концентрация антител, реагирующих с антигеном $F(t)$; в — концентрация плазматических клеток $C(t)$; г — характеристики пораженной части органа $m(t)$

алгоритмом (табл. 2). Несмотря на то что значения вероятности нейтрализации антигена антителами при встрече с ним γ и количество антител, необходимых для нейтрализации одного антигена η , плохо восстановлены, решение прямой задачи достаточно близко к точному (рис. 3.4). Следовательно, комбинированный метод более эффективен для данной модели, чем только генетический алгоритм.

Выводы. Таким образом, в работе исследована прямая и обратная задачи для простейшей математической модели инфекционного заболевания, разработанной Г. И. Марчуком, с применением стоха-

стических и детерминистских численных методов; разработан программный код реализации алгоритмов на языке СИ⁺⁺.

Решение обратной задачи получено с помощью комбинации двух методов: генетического алгоритма и градиентного метода. Для этого получен явный вид градиента целевого функционала, связанного с решением соответствующей сопряженной задачи. Из проведенных численных экспериментов можно сделать следующие выводы:

1. Параметр скорости поражения и регенерации органа-мишени незначительно влияют на течение болезни.

2. Случайность выбора значений (коэффициенты для скрещивания, начальная популяция и мутирующие параметры) в ГА влияют на полученное решение обратной задачи.

3. Комбинированный метод с более высокой точностью определяет параметры модели.

Научные руководители: О. И. Криворотько, чл.-корр. РАН, д-р физ.-мат. наук, проф. С. И. Кабанихин.

Список литературы

- [1] Марчук Г.И. Математическое моделирование в иммунологии. Вычислительные методы и эксперименты. 3-е издание перераб. и доп. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит.; 1991.
- [2] Kuang Y. Delay differential equations with applications in population dynamics. Academic Press, 1993.
- [3] Эльсгольц Л. Э., Норкин С. Б. Введение в теорию дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. М.: Наука, 1971.
- [4] Tavemini L. One-step methods for the numerical solution of Volterra functional differential equations // SIAM J. Numer. Analysis. 1971. V. 8. P. 786–795.
- [5] Демиденко Г. В., Лихошвай В. А. О дифференциальных уравнениях с запаздывающим аргументом // Сиб. матем. журн. 2005. Т. 46. № 3. С. 538–552.
- [6] Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир. 1980.
- [7] Демидович Б. П., Марон И. А., Шувалова Э. З. Численные методы анализа. 3-е изд. М.: Наука, 1967.

- [8] Sannikova T. Analysis of infectious mortality by means of the individualized risk model // *Mathematical Modeling of Biological Systems*. 2008. V. 2. P. 169–181.
- [9] Ильин А. И., Кабанихин С. И., Криворотько О. И. Об определении параметров моделей, описываемых системами нелинейных дифференциальных уравнений // *Сибирские электронные математические известия*. 2014. Т. 11. С. 62–76.
- [10] Кабанихин С. И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное изд-во, 2008.
- [11] Панченко Т. В. Генетические алгоритмы. Астрахань: ИД Астраханский университет, 2007.
- [12] Васин В. В. О сходимости методов градиентного типа для нелинейных уравнений // *Доклады РАН*. 1998. Т. 359, № 1. С. 7–9.

*Латышенко Варвара Александровна — магистрант
Новосибирского государственного университета;
e-mail: Latushenko_varia@mail.ru;*

*Криворотько Ольга Игоревна — мл. науч. сотр. Института
вычислительной математики и математической
геофизики СО РАН; e-mail: olga.krivorotko@sscc.ru*

Нестационарные и асимптотически стационарные кусочно-линейные процессы на пуассоновских потоках и некоторые их свойства

О. В. Сересева

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

УДК 519.6, 551.501

Рассмотрены алгоритмы численного моделирования кусочно-линейного процесса на пуассоновских потоках точек. Приведены результаты исследования нестационарного процесса на пуассоновских потоках, значения которого в опорных точках являются суммой независимо одинаково распределенных величин (с последовательно увеличивающимся числом слагаемых) с произвольным номерным распределением. Также описаны и приведены некоторые результаты для асимптотически стационарного кусочно-линейного процесса с независимыми одинаково распределенными случайными величинами в пуассоновских опорных точках.

Ключевые слова: кусочно-линейные процессы, пуассоновский поток точек, численное моделирование кусочно-линейных процессов.

Введение. В данной работе рассмотрены алгоритмы численного моделирования кусочно-линейного процесса на пуассоновских потоках точек. Первый алгоритм для нестационарного процесса. Нестационарность такого процесса обусловлена способом задания случайных величин в узловых точках в виде суммы независимых одинаково распределенных величин с последовательно увеличивающимся числом слагаемых. Как частный случай можно подобрать такие параметры распределения случайных величин, для которых

кусочно-линейный процесс будет стационарным. В работе представлены основные математические результаты исследования процесса такого типа, описывающие вероятностные свойства характеристик пуассоновского потока точек, определяющих процесс, а также точные выражения для математического ожидания и дисперсии самого кусочно-линейного процесса. Показано, что математическое ожидание и дисперсия являются асимптотически линейными функциями.

Во второй части работы описан асимптотически стационарный кусочно-линейный процесс с независимыми одинаково распределенными случайными величинами в пуассоновских опорных точках. Для рассматриваемого процесса вычислены некоторые его вероятностные характеристики (математическое ожидание, дисперсия, коэффициенты асимметрии и эксцесса) и показано их поведение в асимптотике.

1. Нестационарные кусочно-линейные процессы на пуассоновских потоках. В работах [1, 2] рассматривались некоторые подходы, связанные с использованием кусочно-линейных негауссовских процессов применительно к моделированию ценовых рядов и исследованию торговых алгоритмов на основе этих моделей. В случае, когда корреляционные связи достаточно слабы, как это наблюдается в ценовых рядах, целесообразно аппроксимировать реальный случайный процесс некоторыми кусочно-линейными функциями. Узловые точки кусочно-линейной функции образуют поток точек, распределения интервалов между которыми, а также распределения значений процесса в них можно использовать в качестве входных характеристик для модели.

Для численного статистического моделирования кусочно-линейных процессов, которые могут быть использованы при описании некоторых реальных процессов, необходимо задавать вероятностные характеристики для моделирования потока опорных точек и распределения случайных величин в этих опорных точках.

Рассмотрим кусочно-линейный случайный процесс $Y(t)$, аналогичный рассмотренному в работах [3–5]:

$$\begin{aligned} Y(t) &= (Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1}) \frac{t - S_{\nu(t)-1}}{S_{\nu(t)} - S_{\nu(t)-1}} + Y_{\nu(t)-1} = \\ &= (Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1}) Q(t) + Y_{\nu(t)-1}, \quad S_{\nu(t)-1} \leq t < S_{\nu(t)}, \quad (1) \end{aligned}$$

где целочисленная случайная величина

$$\nu(t) = \min\{n \geq 1 : S_n \geq t\} \in [0, \infty), \quad t > 0.$$

Здесь $S_0 = 0$, $S_{\nu(t)} = \sum_{i=1}^{\nu(t)} X_i$, $\nu(t) \geq 1$, X_i — независимые положительные случайные величины с экспоненциальной плотностью распределения $f(x) = \lambda e(-\lambda x)$ ($x \geq 0$) и параметром λ , а величины $Y_{\nu(t)}$, описывающие процесс в узловых точках, заданы в следующем виде:

$$Y_0 = \alpha_0, \quad Y_{\nu(t)} = \sum_{i=0}^{\nu(t)} \alpha_i, \quad \nu(t) \geq 1, \quad (2)$$

где α_i — независимые между собой и от X_i одинаково распределенные случайные величины с произвольной плотностью одномерного распределения $g(y)$ и математическим ожиданием $E[\alpha_0] = E[\alpha_i] = \mu$, $i = \overline{1, \nu(t)}$.

Выражение (1) для $Y(t)$ может быть использовано для численного моделирования некоторых типов нестационарных процессов, реализации которых представляют собой кусочно-линейные функции.

Случайная величина $Q(t)$, входящая в (1) и описывающая относительную длину левой $[S_{\nu(t)-1}, t]$ части интервала $[S_{\nu(t)-1}, S_{\nu(t)}$], при рассматриваемом случайном блуждании имеет функцию распределения [3]

$$H(t, u) = \Pr\{Q(t) \leq u\} = (1 - u)e^{-\lambda t/u} + u, \quad 0 < u \leq 1$$

и плотность распределения

$$h(t, u) = 1 - e^{-\lambda t/u} + \lambda \frac{t}{u} \left(\frac{1}{u} - 1 \right) e^{-\lambda t/u}.$$

Начальный момент $E[Q^k(t)]$ порядка $k = 1, 2, \dots$ случайной величины $Q(t)$ имеет вид:

$$E[Q^k(t)] = \frac{1}{k+1} (1 - e^{-\lambda t} (\lambda t + 1) + (\lambda t)^k (1 + k + \lambda t) \Gamma[1 - k; \lambda t]),$$

$$k = 1, 2, \dots,$$

где $\Gamma[a, z] = \int_z^{\infty} x^{a-1} e^{-x} dx$ — неполная гамма-функция.

Выпишем выражение для математического ожидания $E[Y(t)]$ процесса $Y(t)$ вида (1), для которого процесс в узловых точках задан в виде (2).

Используя равенство $E\nu(t) = \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{(\lambda t)^{n-1}}{(n-1)!} e^{-\lambda t} = 1 + \lambda t$ (см. [6]) и независимость величин $\alpha_{\nu(t)}$, $Q(t)$, входящих в выражение (1) для процесса $Y(t)$, имеем:

$$\begin{aligned} E[Y(t)] &= E[(Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Q(t) + Y_{\nu(t)-1}] = E[\alpha_{\nu(t)} Q(t) + \sum_{i=0}^{\nu(t)-1} \alpha_i] = \\ &= E[\alpha_{\nu(t)}]E[Q(t)] + E\left[\sum_{i=0}^{\nu(t)-1} \alpha_i\right] = \mu E[Q(t)] + E[\nu(t)] E[\alpha_i] = \\ &= \mu E[Q(t)] + \mu E[\nu(t)] = \mu (E[Q(t)] + \lambda t + 1). \end{aligned}$$

Таким образом, математическое ожидание $E[Y(t)]$ процесса $Y(t)$ вида (1), для которого процесс в узловых точках задан в виде (2), имеет вид:

$$E[Y(t)] = \mu (E[Q(t)] + \lambda t + 1). \quad (3)$$

Отметим, что при $t \rightarrow \infty$ функция $E[Y(t)]$ (3) эквивалентна функции $E[Y(t)] = \mu(\lambda t + 1.5)$ и является линейной.

Дисперсия $D[Y(t)]$ процесса $Y(t)$ (1), для которого процесс в узловых точках задан в виде (2), имеет вид:

$$\begin{aligned} D[Y(t)] &= E[\alpha_0^2](1 + \lambda t + E[Q^2(t)]) + \mu^2(2\lambda t + \lambda^2 t^2 + 2\lambda t \Gamma[0, \lambda t] - \\ &- \frac{e^{-\lambda t}}{3}(2 + 5\lambda t + \lambda^2 t^2 - e^{\lambda t}(2 + 3\lambda t - \lambda^2 t^2(6 + \lambda t)Ei[-\lambda t]))) - \\ &- \mu^2((E[Q(t)] + \lambda t + 1))^2, \quad (4) \end{aligned}$$

где $Ei(x) = -\int_{-x}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt$ — интегральная показательная функция.

При $t \rightarrow \infty$ функция $D[Y(t)]$ (4) эквивалентна функции $D[Y(t)] = E[\alpha_0^2](\lambda t + \frac{4}{3})$.

2. Асимптотически стационарные кусочно-линейные процессы на пуассоновских точечных потоках. В работах [7, 8] был рассмотрен класс кусочно-постоянных процессов, в которых узловые

точки на временной оси представляют собой поток Пальма, а значениями процесса в узловых точках являются независимые величины с заданной функцией распределения. Одномерное распределение такого процесса в любой точке временной оси совпадает с заданным распределением в опорных точках, а корреляционная функция принадлежит классу произвольных выпуклых функций. Далее рассматривается модификация этого процесса, которая состоит в том, что вместо кусочно-постоянного рассматривается кусочно-линейный процесс с независимыми одинаково распределенными случайными значениями в опорных точках.

Рассмотрим кусочно-линейный процесс $Y(t)$ вида

$$\begin{aligned} Y(t) &= (Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1}) \frac{t - S_{\nu(t)-1}}{S_{\nu(t)} - S_{\nu(t)-1}} + Y_{\nu(t)-1} = \\ &= (Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Q(t) + Y_{\nu(t)-1}, \quad S_{\nu(t)-1} \leq t < S_{\nu(t)}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь, как и прежде,

$$S_0 = 0, \quad S_{\nu(t)} = \sum_{i=1}^{\nu(t)} X_i, \quad \nu(t) \geq 1,$$

X_i — независимые положительные случайные величины с экспоненциальной плотностью распределения $f(x) = \lambda e(-\lambda x)$ ($x \geq 0$) и параметром λ .

Отличие процесса $Y(t)$ вида (5) от процесса, описанного в п. 1 (1), состоит в том, что вместо аддитивных случайных величин $Y_{\nu(t)}$ вида (2) в опорных точках $S_{\nu(t)}$ величины $Y_{\nu(t)}$: $Y_0 = \alpha_0$, $Y_{\nu(t)} = \alpha_{\nu(t)}$ $\nu(t) \geq 1$ в (5) являются независимыми между собой и от X_i случайными величинами с произвольным одномерным распределением $G(y)$.

Обозначим начальный момент порядка k случайной величины $Y_{\nu(t)}$ в (5) как

$$E[Y_{\nu(t)}^k] = E[Y_0^k] = \mu_k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (6)$$

а дисперсию случайной величины $Y_{\nu(t)}$ в (5) запишем в виде

$$D[Y_{\nu(t)}] = D[Y_0] = \sigma^2. \quad (7)$$

Далее, обозначим через $m_k(t) = E[Y^k(t)]$ ($k = 1, 2, \dots$) начальный момент порядка k случайного процесса $Y(t)$ вида (5).

Вычислим первые четыре начальных момента $m_1(t)$, $m_2(t)$, $m_3(t)$, $m_4(t)$ процесса $Y(t)$ вида (5), учитывая ранее введенные обозначения (6), (7). Первый начальный момент процесса (5) совпадает с его математическим ожиданием и имеет вид:

$$\begin{aligned} m_1(t) &= E[Y(t)] = E[(Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Q(t) + Y_{\nu(t)-1}] = \\ &= E[Y_{\nu(t)}]E[Q(t)] - E[Y_{\nu(t)-1}]E[Q(t)] + E[Y_{\nu(t)-1}] = E[Y_{\nu(t)-1}] = \mu_1. \end{aligned}$$

Таким образом, математическое ожидание процесса $Y(t)$ вида (5) есть математическое ожидание случайной величины $Y_{\nu(t)}$ в опорных точках $S_{\nu(t)}$.

Второй начальный момент $m_2(t)$ процесса $Y(t)$ определяется выражением:

$$\begin{aligned} m_2(t) &= E[Y^2(t)] = E[(Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Q(t) + Y_{\nu(t)-1}]^2 = \\ &= E[((Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Q(t))^2] + 2E[(Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Y_{\nu(t)-1}Q(t)] + \\ &+ E[Y_{\nu(t)-1}^2] = E[Y_{\nu(t)}^2Q^2(t) - 2Y_{\nu(t)}Y_{\nu(t)-1}Q^2(t) + Y_{\nu(t)-1}^2Q^2(t)] + \\ &+ 2E[Y_{\nu(t)}Y_{\nu(t)-1}Q(t) - Y_{\nu(t)-1}^2Q(t)] + \mu_2 = \\ &= E[(Y_{\nu(t)}^2 + Y_{\nu(t)-1}^2)Q^2(t)] - 2(E[Y_{\nu(t)}])^2E[Q^2(t)] + \\ &+ 2(E[Y_{\nu(t)}])^2E[Q(t)] - 2E[Y_{\nu(t)-1}^2]E[Q(t)] + E[Y_{\nu(t)-1}^2] = \\ &= 2E[Y_{\nu(t)}^2]E[Q^2(t)] - 2(E[Y_{\nu(t)}])^2E[Q^2(t) - Q(t)] - \\ &- 2E[Y_{\nu(t)-1}^2]E[Q(t)] + \mu_2 = 2E[Y_{\nu(t)}^2]E[Q^2(t) - Q(t)] - \\ &- 2(E[Y_{\nu(t)}])^2E[Q^2(t) - Q(t)] + \mu_2 = \\ &= 2(\mu_2 - \mu_1^2)E[Q^2(t) - Q(t)] + \mu_2. \end{aligned}$$

Третий начальный момент $m_3(t)$ процесса $Y(t)$ определяется выражением:

$$\begin{aligned} m_3(t) &= E[Y^3(t)] = E[(Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Q(t) + Y_{\nu(t)-1}]^3 = \\ &= E[Y_{\nu(t)-1}^3 - 3Y_{\nu(t)-1}^2Q(t) + 3Y_{\nu(t)-1}Q^2(t) - Y_{\nu(t)-1}^3Q^3(t) + \\ &+ 3Q(t)Y_{\nu(t)-1}^2Y_{\nu(t)} - 6Q^2(t)Y_{\nu(t)-1}Y_{\nu(t)} + 3Q^3(t)Y_{\nu(t)-1}^2Y_{\nu(t)} + \\ &+ 3Q^2(t)Y_{\nu(t)-1}Y_{\nu(t)}^2 - 3Q^3(t)Y_{\nu(t)-1}Y_{\nu(t)}^2 + Q^3(t)Y_{\nu(t)}^3] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= E[Y_{\nu(t)-1}^3]E[1 - 3Q(t) + 3Q^2(t) - Q^3(t)] + \\
&+ E[Y_{\nu(t)-1}^2 Y_{\nu(t)}]E[3Q(t) - 6Q^2(t) + 3Q^3(t)] + \\
&+ E[Y_{\nu(t)-1} Y_{\nu(t)}^2]E[3Q^2(t) - 3Q^3(t)] + E[Q^3(t) Y_{\nu(t)}^3] = \\
&= E[Y_{\nu(t)}^3]E[1 - 3Q(t) + 3Q^2(t) - Q^3(t) + Q^3(t)] + \\
&+ E[Y_{\nu(t)-1}^2 Y_{\nu(t)}]E[3Q(t) - 6Q^2(t) + 3Q^3(t) + 3Q^2(t) - 3Q^3(t)] = \\
&= \mu_3 E[1 - 3Q(t) + 3Q^2(t)] + \mu_2 \mu_1 E[3Q(t) - 3Q^2(t)] = \\
&= \mu_3 + 3\mu_3 E[Q^2(t) - Q(t)] - 3\mu_2 \mu_1 E[Q^2(t) - Q(t)] = \\
&= \mu_3 + 3(\mu_3 - \mu_2 \mu_1) E[Q^2(t) - Q(t)].
\end{aligned}$$

Четвертый начальный момент $m_4(t)$ процесса $Y(t)$ определяется выражением:

$$\begin{aligned}
m_4(t) &= E[Y^4(t)] = E[(Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Q(t) + Y_{\nu(t)-1}]^4 = \\
&= E[Y_{\nu(t)-1}^4 - 4Q(t)Y_{\nu(t)-1}^3 + 6Q^2(t)Y_{\nu(t)-1}^2 - \\
&- 4Q^3(t)Y_{\nu(t)-1} + 2Q^4(t)Y_{\nu(t)-1} + 4Q(t)Y_{\nu(t)-1}^3 Y_{\nu(t)} - \\
&- 12Q^2(t)Y_{\nu(t)-1}^2 Y_{\nu(t)} + 16Q^3(t)Y_{\nu(t)-1} Y_{\nu(t)} - \\
&- 8Q^4(t)Y_{\nu(t)-1} Y_{\nu(t)} + 6Q^2(t)Y_{\nu(t)-1}^2 Y_{\nu(t)}^2 - \\
&- 12Q^3(t)Y_{\nu(t)-1} Y_{\nu(t)}^2 + 6Q^4(t)Y_{\nu(t)-1} Y_{\nu(t)}^2] = \\
&= \mu_4 E[1 - 4Q(t) + 6Q^2(t) - 4Q^3(t) + 2Q^4(t)] + \\
&+ 4\mu_3 \mu_1 E[Q(t) - 3Q^2(t) + 4Q^3(t) - 2Q^4(t)] + \\
&+ 6\mu_2^2 E[Q^2(t) - 2Q^3(t) + Q^4(t)].
\end{aligned}$$

Математическое ожидание $E[Y(t)]$, дисперсия $D[Y(t)]$, коэффициент асимметрии $\gamma_1[Y(t)]$ и коэффициент эксцесса $\gamma_2[Y(t)]$ процесса $Y(t)$ вида (5) определяются следующими выражениями:

$$E[Y(t)] = \mu_1,$$

$$D[Y(t)] = \sigma^2 (2(E[Q^2(t)] - E[Q(t)]) + 1),$$

$$\begin{aligned}
\gamma_1[Y(t)] &= \frac{1}{D^{3/2}[Y(t)]} (\mu_3 + 3E[Q^2(t) - Q(t)](\mu_3 - 3\mu_2 \mu_1 + \mu_1^3) - \\
&- 3\mu_2 \mu_1 + 2\mu_1^3),
\end{aligned}$$

$$\gamma_2[Y(t)] = \frac{1}{D^2[Y(t)]} (\mu_4 E[1 - 4Q(t) + 6Q^2(t) - 4Q^3(t) + 2Q^4(t)] +$$

$$\begin{aligned}
& + 4\mu_3\mu_1 E[Q(t) - 3Q^2(t) + 4Q^3(t) - 2Q^4(t)] + \\
& 6\mu_2^2 E[Q^2(t) - 2Q^3(t) + Q^4(t)] - 12E[Q^2(t) - Q(t)](\mu_1\mu_3 - 2\mu_1^2\mu_2 + \mu_1^4) + \\
& 6\mu_1^2\mu_2 - 4\mu_1\mu_3 - 3\mu_1^4) - 3.
\end{aligned}$$

Заметим, что

$$\begin{aligned}
\lim_{t \rightarrow 0} m_2(t) &= \mu_2; & \lim_{t \rightarrow \infty} m_2(t) &= \mu_2 - \frac{1}{3}(\mu_2 - \mu_1^2); \\
\lim_{t \rightarrow 0} m_3(t) &= \mu_3; & \lim_{t \rightarrow \infty} m_3(t) &= \frac{1}{2}(\mu_3 + \mu_2\mu_1); \\
\lim_{t \rightarrow 0} m_4(t) &= \mu_4; & \lim_{t \rightarrow \infty} m_4(t) &= \frac{1}{5}(2\mu_4 + 2\mu_3\mu_1 + \mu_2^2); \\
\lim_{t \rightarrow 0} D[Y(t)] &= \sigma^2; & \lim_{t \rightarrow \infty} D[Y(t)] &= \frac{2}{3}\sigma^2; \\
\lim_{t \rightarrow 0} \gamma_1[Y(t)] &= \frac{1}{\sigma^3}(\mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3); \\
\lim_{t \rightarrow \infty} \gamma_1[Y(t)] &= \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2}\sigma^3}(\mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 3\mu_1^3); \\
\lim_{t \rightarrow 0} \gamma_2[Y(t)] &= \frac{1}{\sigma^4}(\mu_4 - 4\mu_1\mu_3 + 6\mu_1^2\mu_2 - 3\mu_1^4) - 3; \\
\lim_{t \rightarrow \infty} \gamma_2[Y(t)] &= \frac{9}{20\sigma^4}(2\mu_4 - 8\mu_1\mu_3 + \mu_2^2 + 10\mu_1^2\mu_2 - 5\mu_1^4) - 3.
\end{aligned}$$

Из приведенных формул видно, что процесс $Y(t)$ вида (5) для рассмотренных распределений величин $Y_{\nu(t)}$ является асимптотически стационарным по математическим ожиданиям, дисперсиям, асимметрии и эксцессу. В отличие от кусочно-постоянных процессов, рассмотренных в работах [1, 2], одномерное распределение такого процесса (5) в любой точке временной оси не совпадает с заданным распределением в опорных точках.

В табл. 1 приведены значения математического ожидания, среднеквадратического отклонения (с.к.о.), коэффициентов асимметрии и эксцесса для процесса $Y(t)$ вида (5) при $t \rightarrow \infty$ и для величин $Y_{\nu(t)}$, распределенных равномерно на интервале $[-1; 1]$.

В табл. 2 приведены значения математического ожидания, среднеквадратического отклонения (с.к.о.), коэффициентов асимметрии и эксцесса для процесса $Y(t)$ вида (5) при $t \rightarrow \infty$ и для величин $Y_{\nu(t)}$, имеющих показательное распределение с параметром $\lambda = 1$.

Таблица 1

Значения величин $Y_{\nu(t)}$ и процесса $Y(t)$ вида (5) при $t \rightarrow \infty$

	Мат. ожидание	С.к.о.	Асимметрия	Эксцесс
$Y_{\nu(t)}$	0	0.57735	0	6
$Y(t)$ при $t \rightarrow \infty$	0	0.471405	0	8.1

Таблица 2

Значения величин $Y_{\nu(t)}$ и процесса $Y(t)$ вида (5) при $t \rightarrow \infty$

	Мат. ожидание	С.к.о.	Асимметрия	Эксцесс
$Y_{\nu(t)}$	1	1	2	6
$Y(t)$ при $t \rightarrow \infty$	1	0.816497	2.75568	5.55

Автор выражает искреннюю благодарность гл. науч. сотр. ИВМиМГ СО РАН В. А. Огородникову за ценные критические замечания и внесенные предложения, а также Л. Я. Савельеву за плодотворное сотрудничество на протяжении ряда лет.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук В. А. Огородников.

Список литературы

1. Сересева О. В. Численные стохастические модели ценовых рядов // Труды конференции молодых ученых ИВМиМГ СО РАН. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2005. С. 146–154.
2. Artemiev S. S., Novikov A. V., Ogorodnikov V. A. Mathematical aspects of computer-aided share trading // Russian J. of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2002. N 4. P. 331–348.
3. Савельев Л. Я., Огородников В. А., Сересева О. В. Стохастическая модель кусочно-линейного процесса // Вестник Сыктывкарского университета. 2007. Сер. 1, вып. 7. С. 67–76.
4. Сересева О. В. Стохастическая модель кусочно-линейного процесса на пуассоновском потоке // Вычислительные технологии. 2008. Т. 13. Спец. вып. 4. С. 114–119.
5. Ogorodnikov V. A., Saveliev L. Ya., Sereseva O. V. Computation stochastic models of piecewise random processes // Russian Journal of

Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2007. Vol. 22, N 3. P. 505–514.

6. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 2. М: Мир, 1984.

7. Михайлов Г. А. Моделирование случайных процессов и полей на основе точечных потоков Пальма // Докл. АН СССР. 1982. Т. 3, № 3. С. 531–535.

8. Михайлов Г. А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло. М: Наука, 1986. [Engl. transl.: Springer-Verlag, 1992].

*Сересева Ольга Владимировна — канд. физ.-мат. наук,
мл. науч. сотр. Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН; e-mail: seresseva@mail.ru*

Исследование угловых характеристик поляризованного излучения на основе численного статистического моделирования

Н. В. Трачёва

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

УДК 519.245;519.676

Численно исследованы угловое распределение интенсивности $\Phi(\mu, H)$ и угловое распределение степени поляризации $p(\mu, H)$ для проходящего через слой, а также для отраженного слоем излучения. В данном исследовании применен “метод рандомизированных ортогональных разложений”. Искомые плотности углового распределения в рассматриваемом случае представлены в виде разложения по системе стандартных функций, ортонормированных с некоторым весом. Возможность применения численного статистического моделирования определяется тем, что коэффициенты разложения представляют собой математические ожидания взвешенных случайных значений стандартных функций.

Ключевые слова: степень поляризации, поляризованное излучение, метод Монте-Карло, статистическое моделирование.

Введение. Рассматривается математическая модель односкоростного процесса переноса частиц, в основе которой лежит цепь Маркова “столкновений”, разделенных “свободными пробегами”, которые имеют неоднородное экспоненциальное распределение с коэффициентом $\sigma(r)$ ($r \in R^3$).

Для описания поляризационных свойств света используется 4-мерный вектор Стокса $(\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}, \Phi^{(3)}, \Phi^{(4)})^\top$, компоненты которого определяют интенсивность, степень и плоскость поляризации, а

также степень эллиптичности излучения. Математическая модель переноса поляризованного излучения строится на основе феноменологического предположения о том, что в результате рассеяния ассоциируемый с “фотоном” вектор Стокса преобразуется заданной матрицей рассеяния (см., например, [1, 2]).

Рассмотрим стационарное интегро-дифференциальное уравнение переноса излучения с поляризацией вида

$$\omega \nabla \Phi(r, \omega) + \sigma \Phi(r, \omega) = \int_{\Omega} \sigma_s P(\omega', \omega) \Phi(r, \omega') d\omega' + \mathbf{f}_0(r, \omega),$$

где $\Phi = (\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}, \Phi^{(3)}, \Phi^{(4)})^T$ — вектор-функция плотности потока частиц (“векторных фотонов”), иначе, вектор-функция интенсивности излучения; Ω — пространство единичных векторов направления, $\omega \in \Omega$, $r \in D \subset \mathbb{R}^3$; $P(\omega', \omega)$ — матричная функция рассеяния, $\sigma = \sigma(r)$ — полное сечение, $\sigma = \sigma_s + \sigma_c$, σ_c — сечение поглощения, σ_s — сечение рассеяния; $\mathbf{f}_0 = (f_0^{(1)}, f_0^{(2)}, f_0^{(3)}, f_0^{(4)})^T$ — вектор-функция плотности распределения источника частиц. Матрица $P(\omega', \omega)$ определяется соотношением $P(\omega', \omega) = L(\pi - i_2)R(\omega', \omega)L(-i_1)$, где $L(\cdot)$ — специальная матрица поворота; $R(\cdot)$ — матрица рассеяния; i_1 — угол между плоскостью ω' , s и плоскостью рассеяния ω, ω' ; i_2 — угол между плоскостью рассеяния ω, ω' и плоскостью ω, s ; $s = (0, 0, 1)$ (см., например, [1]).

1. Постановка задачи. Пусть n_r — нормаль к поверхности F ($r \in F$). Поток энергии рассеянного излучения через элемент dF поверхности F в телесном угле $d\omega$ около направления ω равен $\Phi^{(1)}(r, \omega) |\mu| dF d\omega$, где $\mu = (n_r, \omega)$ — косинус широтного угла, $d\omega = d\mu d\phi$, ϕ — азимутальный угол, $\Phi^{(1)}$ — первая компонента вектор-функции Стокса.

Угловая плотность $\Phi_s(r, \mu)$ распределения по μ потока излучения в точке $r \in F$ равна

$$\Phi_s(r, \mu) = |\mu| \int_0^{2\pi} \Phi^{(1)}(r, \omega) d\phi.$$

Полный поток P излучения, приходящего в полусфере $\Omega_+ = \{\omega : (n_r, \omega) > 0\}$, (освещенность поверхности) в точке r равен

$$P = \int_{\Omega_+} \Phi^{(1)}(r, \omega) \mu d\omega = \int_0^1 \Phi_s(r, \mu) d\mu. \quad (1)$$

В частном случае $\Phi^{(1)}(r, \omega) \equiv \Phi^{(1)}(r)$, излучение изотропно, а угловое распределение излучения на поверхности F с нормированной плотностью $f_0(\mu) = \Phi_s(r, \mu)/P = 2\mu$ ($\mu \in (0, 1)$) — распределение Ламберта, при этом $P = \pi\Phi^{(1)}(r)$.

Степень поляризации излучения в предположении малости третьей и четвертой компоненты вектора Стокса определяется следующим соотношением: $p(r, \omega) \approx \frac{\Phi^{(2)}(r, \omega)}{\Phi^{(1)}(r, \omega)}$.

Рассмотрим плоский слой рассеивающего вещества $0 < z < H$ и источник излучения на границе $z = 0$, направленный вдоль оси Oz : $\mathbf{I}_0(\omega) = \delta(\omega - \mathbf{e}_z)(1, 0, 0, 0)^\top$.

Вектор-функция $\Phi_s(h, \mu)$ углового распределения по μ потока рассеянного излучения на поверхности $z = h$ ($0 < h \leq H$) равна

$$\Phi_s(h, \mu) = |\mu| \int_0^{2\pi} \Phi(h, \omega) d\phi \equiv |\mu| \Phi_h(\mu),$$

где $\mu = \omega_z$, причем $\mu \in (0, 1)$ соответствует выходящему из слоя $0 < z < h$ излучению, а $\mu \in (0, -1)$ — входящему излучению.

Пусть $\mu \in (0, 1)$, тогда перепишем

$$\Phi_s(x) = x \Phi_h(x), \quad x \in (0, 1).$$

Пусть $\psi_i(x)$ — система ортонормированных на интервале $(0, 1)$ с весом x полиномов, т. е.

$$\int_0^1 x \psi_i(x) \psi_j(x) dx = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Известно (см., например, [3]), что при определенных условиях компоненты вектор-функции $\Phi_s(x)$ представимы в виде рядов, равномерно сходящихся на любом подинтервале $[a, b] \subset (0, 1)$, т. е.:

$$\Phi_s(x) = x \sum_{i=0}^{\infty} \mathbf{a}_i \psi_i(x) \approx x \sum_{i=0}^n \mathbf{a}_i \psi_i(x) = x \Phi_n(x), \quad (2)$$

где

$$\mathbf{a}_i = \int_0^1 \Phi_{\mathbf{s}}(x) \psi_i(x) dx.$$

Методом Монте-Карло оценим коэффициенты \mathbf{a}_i разложения (2).

2. Построение численной оценки. Искомые базисные полиномы $\psi_i(x)$ можно получить нормировкой полиномов $\tilde{\psi}_i(x)$, полученных заменой переменных $y = 2x - 1$ из полиномов $\tilde{\tilde{\psi}}_i(y)$, ортогональных с весом $y + 1$ на отрезке $(-1, 1)$, которые представляют собой частный случай полиномов Якоби (см., например, [4]).

Полученные полиномы $\psi_i(x)$ имеют следующий явный вид

$$\psi_i(x) = \sqrt{2i+2} \sum_{k=0}^i \frac{(-1)^k (2i+1-k)}{(i-k)k(i+1-k)} x^{i-k}.$$

Для вычисления коэффициентов \mathbf{a}_i ортогонального разложения (2) применяется весовая векторная оценка “по столкновениям” $\xi_i = (\xi_i^{(1)}, \xi_i^{(2)}, \xi_i^{(3)}, \xi_i^{(4)})^\top$ [1]:

$$\mathbf{a}_i = E \xi_i, \quad \xi_i = \sum_{k=2}^{N_t} \mathbf{Q}_k \psi_i(\mu_k) \Delta_s(z_k),$$

которая строится на цепи Маркова $\{x_k\}$, где $x_k = (z_k, \omega_k)$, z_k — z -координата точки столкновения, $z_0 = 0$; ω_k — направление частицы перед столкновением, $\omega_1 = \mathbf{e}_z$; $\mu_k = (\omega_k, \mathbf{e}_z)$;

$$\Delta_s(z_k) = \begin{cases} 1, & \text{если } z_k > h \text{ и } z_{k-1} < h, \\ 0, & \text{иначе} \end{cases},$$

т. е. Δ_s — индикатор пересечения частицей поверхности $z = h$ в направлении с $\mu_k > 0$, N_t — случайный номер последнего столкновения.

Считаем, что вне рассматриваемого слоя $0 < z < H$ цепь столкновений обрывается с вероятностью единица.

Направление рассеяния ω_k в точке z_{k-1} моделируется согласно элементу R_{11} матрицы рассеяния $R(\omega_{k-1}, \omega_k)$. Векторный вес $\mathbf{Q}_k = (Q_k^{(1)}, Q_k^{(2)}, Q_k^{(3)}, Q_k^{(4)})^\top$ вычисляется с помощью выражений

$$\mathbf{Q}_1 = q_1 (1, 0, 0, 0)^\top,$$

$$\mathbf{Q}_k = q_k P(\omega_{k-1}, \omega_k) \mathbf{Q}_{k-1} / R_{11}(\omega_{k-1}, \omega_k), \quad k \geq 2,$$

где q_k — скалярный вес, для определения его значения используется модификация метода Монте-Карло моделирования длины пробега и учета поглощения (“без поглощения”, “без вылета” и т. д.) [1].

Оценка ξ_h полного потока P_h рассеянного излучения (освещенности) на поверхности $z = h$, $0 < h \leq H$ в соответствии с (1) имеет вид:

$$\xi_h = \sum_{k=2}^{N_t} Q_k^{(1)} \Delta_s(z_k), \quad E\xi_h = P_h.$$

Рандомизированная проекционная оценка $\tilde{\Phi}_n(x)$ функции $\Phi_h(x)$, согласно (2), строится следующим образом:

$$\Phi_h(x) \approx \sum_{i=0}^n \alpha_i \psi_i(x) = \Phi_n(x) \approx \tilde{\Phi}_n(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_i \psi_i(x),$$

где

$$\alpha_i = E_N \xi_i \equiv \frac{1}{N} \sum_{m=0}^N \xi_i^{(m)},$$

$\xi_i^{(m)}$ — реализация случайной величины ξ_i на m -й траектории, $E\alpha_i = E\xi_i = \alpha_i$, $E\tilde{\Phi}_n(x) = \Phi_n(x)$.

Дисперсия случайной вектор-функции $\tilde{\Phi}_n(x)$ покомпонентно равна

$$\begin{aligned} D\tilde{\Phi}_n(x) &= \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \text{cov}(\alpha_i, \alpha_j) \psi_i(x) \psi_j(x) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \text{cov}(\xi_i, \xi_j) \psi_i(x) \psi_j(x) = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=0}^n D\xi_i \psi_i^2(x) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{0 \leq i < j \leq n} \text{cov}(\xi_i, \xi_j) \psi_i(x) \psi_j(x) \right). \end{aligned}$$

Здесь и далее операции D , cov , умножения и возведения в квадрат четырехмерных векторов понимаются покомпонентно. Так, $\text{cov}(\xi_i, \xi_j)$ — покомпонентная ковариация векторных оценок ξ_i и ξ_j , т. е. вектор $\{\text{cov}(\xi_j^{(l)}, \xi_j^{(l)})\}$ ($l = 1, \dots, 4$), компоненты которого статистически оцениваются по формуле

$$\text{cov}_N(\xi_i, \xi_j) \equiv \frac{1}{N} \sum_{m=0}^N \xi_i^{(m)} \xi_j^{(m)} - \alpha_i \alpha_j.$$

Статистическая оценка дисперсии $D\tilde{\Phi}_n(x)$ имеет вид:

$$D_N \tilde{\Phi}_n(x) = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=0}^n D_N \xi_i \psi_i^2(x) + 2 \sum_{0 \leq i < j \leq n} \text{cov}_N(\xi_i, \xi_j) \psi_i(x) \psi_j(x) \right),$$

где

$$D_N \xi_i = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^N \xi_i^{(m)2} - \alpha_i^2.$$

В качестве оценки степени поляризации $p(x)$ рассмотрим $\tilde{p}_n(x) = \frac{\tilde{\Phi}_n^{(2)}(x)}{\tilde{\Phi}_n^{(1)}(x)}$. Дисперсия $D\tilde{p}_n(x)$, как отношение двух случайных оценок асимптотически, при $N \rightarrow \infty$ равна

$$D\tilde{p}_n(x) = \frac{1}{(\tilde{\Phi}_n^{(1)}(x))^2} \left(D_N \tilde{\Phi}_n^{(2)}(x) - 2 \frac{\tilde{\Phi}_n^{(2)}(x)}{\tilde{\Phi}_n^{(1)}(x)} \text{cov}_N(\tilde{\Phi}_n^{(1)}(x), \tilde{\Phi}_n^{(2)}(x)) + \left(\frac{\tilde{\Phi}_n^{(2)}(x)}{\tilde{\Phi}_n^{(1)}(x)} \right)^2 D_N \tilde{\Phi}_n^{(1)}(x) \right) + o(N^{-1}).$$

5. Численные результаты. При проведении численных расчетов использовалась матрица молекулярного (Рэлеевского) рассеяния

$$R(\mu) = \begin{pmatrix} 3(1 + \mu^2)/8 & -3(1 - \mu^2)/8 & 0 & 0 \\ -3(1 - \mu^2)/8 & 3(1 + \mu^2)/8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3\mu/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3\mu/4 \end{pmatrix}.$$

Численно исследовалось влияние поляризации на интегральный поток P_H , проходящий через слой излучения, на коэффициенты разложения a_i из (2), а также исследовалось угловое распределение степени поляризации $p(\mu)$.

Моделирование без "поглощения" проводилось для 10^9 траекторий и слоев оптической толщины от $H = 5$ до $H = 10$.

Таблица 1

Влияние поляризации на поток P_H

H	P_H	$\sigma_N(P_H), \%$	\mathbf{P}_H	$\sigma_N(\mathbf{P}_H), \%$
Прямое рассеяние				
5	0,25558	0,00541	0,25547	0,08535
10	0,14755	0,00757	0,15574	6,20853
Обратное рассеяние				
5	0,73767	0,00189	0,73622	0,03534
10	0,85240	0,00131	0,84636	0,43601

Таблица 2

Влияние поляризации на коэффициенты α_i . $H = 5$

i	α_i	$\sigma_N(\alpha_i), \%$	$\boldsymbol{\alpha}_i$	$\sigma_N(\boldsymbol{\alpha}_i), \%$
Прямое рассеяние				
1	0,25315	0,03233	0,26430	0,46156
2	-0,01343	0,61495	-0,00786	14,21289
Обратное рассеяние				
1	0,06247	0,08165	0,11254	0,41950
2	-0,01976	0,25743	-0,01069	3,96134

В табл. 1 приведены оценки потоков \mathbf{P}_H с учетом поляризации и P_H — без учета, а также их среднеквадратичные отклонения $\sigma_N(\mathbf{P}_H)$ и $\sigma_N(P_H)$, соответственно. Отметим, что статистически значимого отклонения оценок потока излучения, прошедшего через слой, в отличие от случая, рассмотренного в [5], не зафиксировано. Это связано с недостаточно большой выборкой. Для обратно рассеянного излучения значения оценок потока статистически различимы.

В табл. 2, 3 приведены значения оценок коэффициентов $\boldsymbol{\alpha}_i$ и α_i с учетом поляризации и без, нормированные на полный поток излучения, а также оценки соответствующих среднеквадратичных отклонений $\sigma_N(\boldsymbol{\alpha}_i)$ и $\sigma_N(\alpha_i)$. После нормировки $\alpha_0 \equiv a_0 = \sqrt{2}$, что согласуется с Ламбертовским излучением, для которого $\alpha_0 = \sqrt{2}$,

Таблица 3

Влияние поляризации на коэффициенты a_i . $H = 10$

i	α_i	$\sigma_N(\alpha_i), \%$	α_i	$\sigma_N(\alpha_i), \%$
Прямое рассеяние				
1	0,26812	0,03999	0,20888	55,82428
2	-0,00446	2,43927	0,04372	153,41325
Обратное рассеяние				
1	0,09002	0,05229	0,13202	2,91486
2	-0,01781	0,26448	-0,01689	31,45234

$\alpha_i = 0$ при $i > 0$. Результаты представлены для слоев оптической толщины $H = 5, 10$. Для слоя $H = 5$, как для прямого, так и для обратного излучения, получено, что значения коэффициентов разложения (2) статистически различимы. Для слоя $H = 10$ статистически значимого различия не получено в связи с достаточно большой среднеквадратической погрешностью, что, в свою очередь, связано с недостаточно большой модельной выборкой.

Отметим также, что коэффициенты разложения (2) очень быстро убывают с ростом номера i . Следовательно, последующие члены разложения мало значимы.

На рис. 1, *a, б* приведены полученные графики углового распределения первой компоненты вектора Стокса $\Phi_n^{(1)}(\mu)$ для слоев оптической толщины $H = 5, 10$ в случаях прямого и обратного излучения.

Рис. 2, *a, б* демонстрирует полученные графики углового распределения второй компоненты вектора Стокса $\Phi_n^{(2)}(\mu)$ для слоев оптической толщины $H = 5, 10$ в случаях прямого и обратного излучения.

На рис. 3, *a, б* приведены графики углового распределения степени поляризации $p(\mu)$ для слоев оптической толщины $H = 5, 10$ в случае прямого и обратного излучения.

На рис. 4, *a, б*, 5, *a, б* показаны полученные среднеквадратические отклонения оценки степени поляризации $p(\mu)$ для слоя оптической толщины $H = 5$ в случаях прямого и обратного излучения.

Заключение. В данном исследовании применяется “метод рандомизированных ортогональных разложений”, с помощью которого

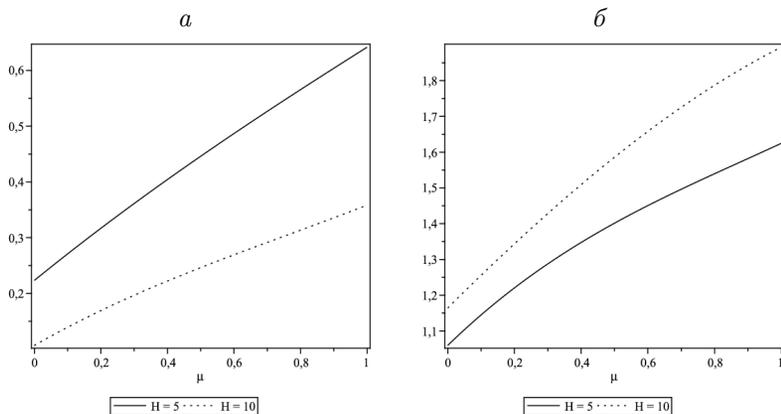


Рис. 1. Угловое распределение первой компоненты вектора Стокса $\Phi_n^{(1)}(\mu)$; сплошная линия соответствует $H = 5$, пунктирная — $H = 10$:
 а — прямое излучение; б — обратное излучение

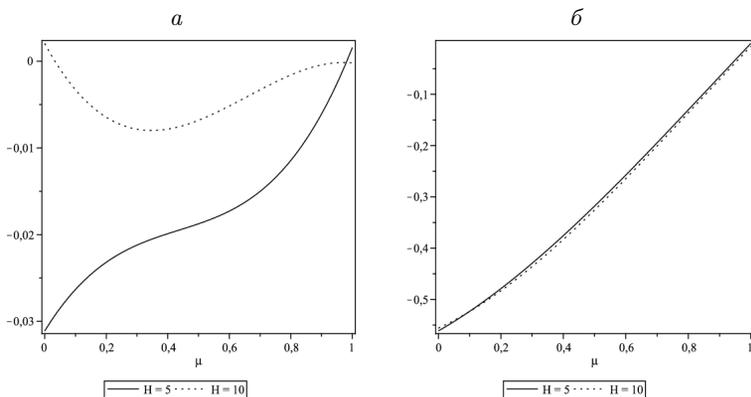


Рис. 2. Угловое распределение второй компоненты вектора Стокса $\Phi_n^{(2)}(\mu)$; сплошная линия соответствует $H = 5$, пунктирная — $H = 10$:
 а — прямое излучение; б — обратное излучение

проведено численное исследование изменения углового распределения интенсивности прямого и обратного излучений. Полученные числен-

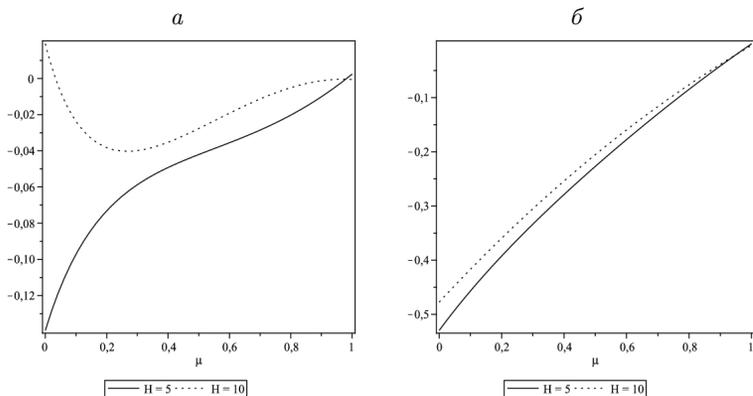


Рис. 3. Угловое распределение степеней поляризации $p(\mu)$; Сплошная линия соответствует $H = 5$, пунктирная — $H = 10$:
 а — прямое излучение; б — обратное излучение

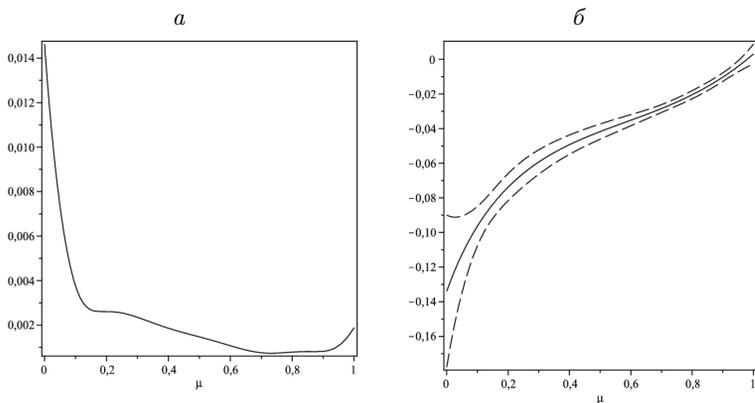


Рис. 4. Среднеквадратическая погрешность для $p(\mu)$;
 прямое излучение; $H = 5$:
 а — поведение среднеквадратического отклонения;
 б — степень поляризации $p(\mu) \pm 3\sigma$

ные результаты свидетельствуют о том, что излучение отличается от Ламбертовского, для которого $a_i = 0$ при $i > 0$.

Также в работе исследовался вопрос влияния поляризации на математическую радиационную модель. Численно показано, что влия-

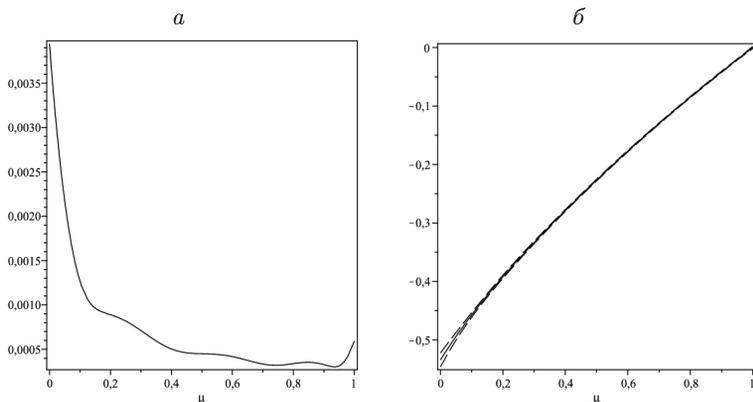


Рис. 5. Среднеквадратическая погрешность для $p(\mu)$;
 обратное излучение; $H = 5$:
 а — поведение среднеквадратического отклонения;
 б — степень поляризации $p(\mu) \pm 3\sigma$

ние поляризации на плотность потока R_H излучения, выходящего из слоя, возрастает с ростом оптической толщины слоя. Для коэффициентов разложения плотности углового распределения вылетающих частиц a_i также было численно показано, что влияние поляризации является статистически значимым и возрастает с ростом оптической толщины слоя.

Изложенные выше результаты свидетельствуют о том, что абсолютные величины коэффициентов α_i быстро убывают, поэтому можно использовать меньшее число членов разложения (2).

Представлены профили углового распределения степени поляризации $p(\mu)$ для слоев оптической толщины $H = 5$ и Рэлеевской матрицы рассеяния. Также была проведена оценка среднеквадратичной погрешности полученных оценок.

Список литературы

- [1] Марчук Г. И., Михайлов Г. А., Назаралиев М. А. и др. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976. 284 с. [Engl. transl.: Springer-Verlag, 1980].
- [2] Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960. 519 с.

- [3] Алексич Г. Проблемы сходимости ортогональных рядов. М.: ИИЛ, 1963. 360 с.
- [4] Крылов В. И. Приближенное вычисление интегралов. М.: Наука, 1967. 500 с.
- [5] Михайлов Г. А., Трачева Н. В., Ухинов С. А. Алгоритм метода Монте-Карло для оценки углового распределения рассеянного поляризованного излучения на основе ортогонального разложения // Доклады Академии наук. 2015. Т. 464, № 4. С. 401. DOI:10.7868/S0869565215280063.

*Трачёва Наталья Валерьевна — канд. физ. мат. наук,
науч. сотр. Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН;
e-mail: natatracheva@gmail.com*

Расчет и оценивание пропуска потока заданной величины в случайном графе

О. А. Ядыкина

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН
Новосибирский государственный университет

УДК 519.6

Рассмотрена задача расчета и оценивания надежности сети с точки зрения пропуска потока заданной величины между парой выделенных узлов. В качестве модели сети используется случайный граф с абсолютно надежными вершинами и ненадежными, независимо выходящими из строя, ребрами с ограничением на пропускную способность. Описан и реализован последовательный алгоритм принятия решений о надежности сети, основанный на методе факторизации и кумулятивном обновлении границ выбранного показателя. Рассмотрена возможность реализации многопоточного алгоритма принятия решений, а также приведены результаты численных экспериментов при распараллеливании на два ядра.

Ключевые слова: случайный граф, надежность, вероятность пропуска потока, кумулятивное обновление границ надежности, алгоритм.

Введение. В данной работе рассматривается такой важный показатель надежности сети как вероятность пропуска потока заданной величины между выделенной парой узлов. Указанная характеристика позволяет оценить возможность передачи заранее определенного объема информации между узлами связи даже в случае частичного разрушения сети.

В качестве модели сети используется случайный граф (СГ) с абсолютно надежными вершинами и ненадежными, независимо выходящими из строя, ребрами.

Для расчета и оценивания надежности СГ решено использовать кумулятивное обновление оценок показателя надежности. Данный

подход является новым и был впервые рассмотрен в работе для оценивания другой характеристики — вероятности связности случайного графа, а позднее, в статье, и для средней вероятности попарной связности вершин СГ. Суть предлагаемого алгоритма заключается в пошаговом обновлении точных нижней (LB) и верхней (UB) границ вычисляемого показателя и сравнении их с заданным пороговым значением надежности R_0 . Если $LB \geq R_0$, то сеть надежна, если $UB < R_0$, то сеть признается ненадежной.

Для расчета границ надежности и направленного разрушения графа используется метод факторизации, а для определения необходимости изменения текущих границ — метод поиска максимального потока Форда — Фалкерсона. Основное достоинство комбинирования указанных методов заключается в возможности с приемлемыми затратами вычислительных ресурсов на основе точных вычислений получить ответ на вопрос о надежности сети относительно заданных требований к сети.

1. Постановка задачи. Рассматривается система сетевой структуры, в качестве модели которой используется случайных граф с абсолютно надежными вершинами (моделирующими узлы сети) и ненадежными, независимо выходящими из строя, ребрами (моделирующими каналы связи с учетом ограничений на пропускную способность).

Под показателем надежности будем понимать вероятность пропуска потока заданной величины между выделенной парой узлов. Основными требованиями к сети являются: заданный объем информации, который необходимо передать от источника к стоку, и пороговое значение надежности, при котором сеть считается надежной.

Требуется разработать эффективный алгоритм, который на основе заданных требований будет принимать решение о надежности сети по выбранному показателю.

Основные обозначения: $G(V, E)$ — случайный граф с $|V| = n$ вершинами и $|E| = m$ ребрами; e_{ij} — ребро инцидентное вершинам v_i и v_j ; c_{ij} — пропускная способность ребра e_{ij} ; $FP(G, S, T)$ — вероятность пропуска потока заданной величины между вершинами S и T .

Входные данные. На вход подается случайный граф $G = (V, E, c, p, S, T)$ со следующими параметрами на каждом ребре: c_{ij} —

пропускная способность ребра $e_{ij} \in E$; p_{ij} — вероятность существования ребра $e_{ij} \in E$.

Фиксируются вершины источник S и сток T .

Задаются требования к сети: f_0 — объем информации (или поток), который необходимо передать через сеть от источника к стоку; FP_0 — пороговое значение надежности, при котором сеть можно считать надежной.

Начальные данные (инициализация).

$UB := 1$ — верхняя граница (оценка) показателя надежности,

$LB := 0$ — нижняя граница (оценка) показателя надежности.

Результат. Решение о состоянии сети: “Сеть надежна” или “Сеть ненадежна”.

1.1. *Основная идея алгоритма.* В основе алгоритма лежит метод факторизации для организации учета разрушений графа и расчета границ показателя надежности. Для случайного графа с заданными параметрами выполняется последовательное ветвление по выбранному ребру с выполнением двух процедур: удаление ребра и онадеживание. Онадеженное ребро — это ребро с нулевой вероятностью отказа.

При онадеживании ребер изменяется нижняя граница, а при удалении — верхняя по следующим формулам:

$$LB+ = P(H)I(S), \tag{1.1}$$

$$UP- = P(H)(1 - I(S)), \tag{1.2}$$

где $P(H)$ — вероятность реализации графа, полученного в процессе редукции на текущем шаге, а $I(S)$ — булева функция, равная единице, если заданный пороговый поток f_0 меньше максимального потока в графе:

$$I(S) = \begin{cases} 1, & \text{при } f_{max} \geq f_0, \\ 0, & \text{при } f_{max} < f_0. \end{cases} \tag{1.3}$$

При этом максимальный поток f_{max} рассчитывается либо для текущего графа, полученного удалением ребра, либо для графа, состоящего только из онадеженных ребер графа, который получен после онадеживания очередного ребра. В данной работе решено использовать алгоритм Форда — Фалкерсона для поиска f_{max} .

После каждого обновления оценок по формулам (1.1), (1.2) необходимо проверить возможность принятия решений:

– $FP_0 < UB$: выводится результат “сеть ненадежна” и завершается работа алгоритма, если пороговое значение надежности стало больше верхней границы;

– $FP_0 \geq LB$: выводится результат “сеть надежна” и завершается работа алгоритма, если пороговое значение достигло нижней границы надежности.

Запишем алгоритм по шагам:

Шаг 1. Выбираем ребро e_{ij} в графе G .

Шаг 2. Удаляем выбранное ребро, получив граф $H = G \setminus \{e_{ij}\}$.

Шаг 2.1. Если поток нельзя передать через полученный граф H , то опускаем верхнюю границу надежности (UB).

Шаг 2.1.1. Если верхняя граница стала меньше порогового значения, сеть ненадежна.

Шаг 2.1.2. Иначе завершить Шаг 2.

Шаг 2.2. Если поток можно передать через граф, то переходим на Шаг 1 для графа $G = H$.

Шаг 3. Удаляем выбранное ребро, получив граф $H = G / \{e_{ij}\}$.

Шаг 3.1. Если поток можно передать только по надежным ребрам полученного графа, то поднимаем нижнюю границу (LB).

Шаг 3.1.1. Если нижняя граница достигла порогового значения, сеть надежна.

Шаг 3.1.2. Иначе завершить Шаг 3.

Шаг 3.2. Если поток нельзя передать по надежным ребрам, то переходим на Шаг 1 для графа $G = H$.

Блок-схема, описывающая алгоритм, показана на рис. 1

Таким образом, последовательность действий алгоритма имеет древовидную структуру (представляет собой дерево принятия решений). В корневом узле находится граф, заданный на вход, со всеми его атрибутами и параметрами. По правой ветке выполняется онадеживание выбранного ребра, по левой — удаление. Процесс ветвления (работа с графом, полученным в процессе редукции) заканчивается в следующих случаях:

1. Если поток можно передать только по надежным ребрам полученного графа, при этом текущий граф был получен онадеживанием выбранного ребра.

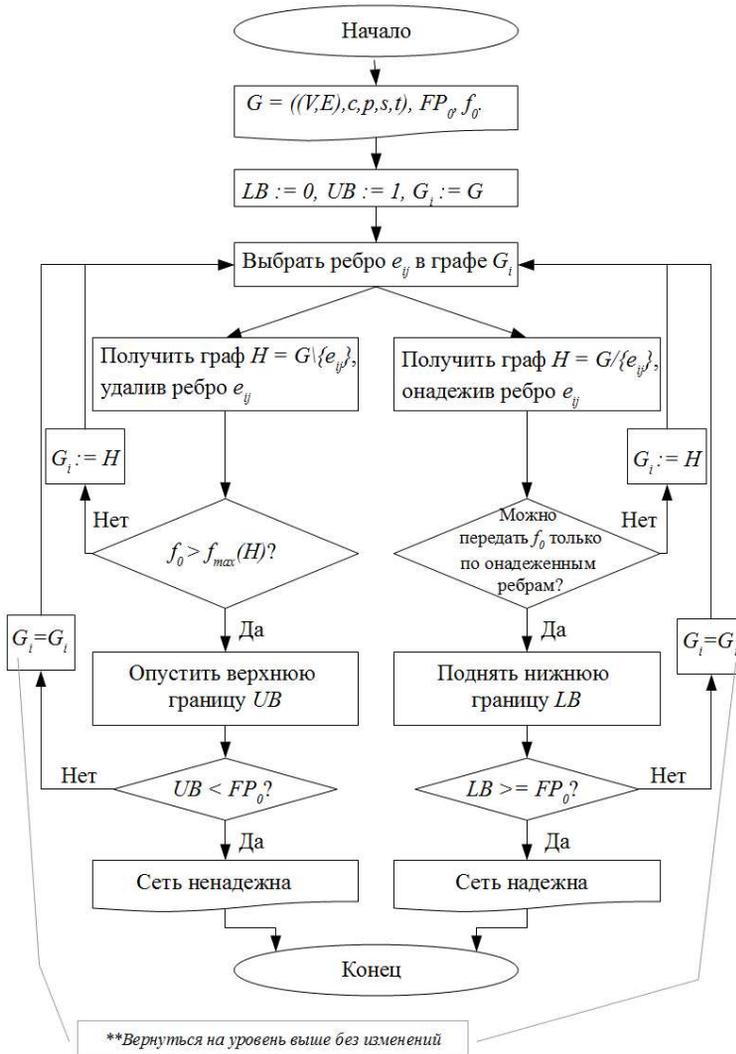


Рис. 1. Блок-схема алгоритма

2. Если поток заданной величины нельзя пропустить через граф, полученный удалением выбранного ребра, т. е. если

- пропускных способностей оставшихся ребер не достаточно для передачи потока заданной величины;
- полученный граф является несвязным;
- не осталось ребер для удаления и онадеживания.

Третий пункт фактически недостижим из-за существования первых двух, так как благодаря использованию метода факторизации точные границы сходятся к точному значению показателя надежности раньше или в тот момент, когда рассмотрены все возможные варианты разрушения графа.

1.2. *Реализованные оптимизации алгоритма.* Для ускорения работы алгоритма ветвление будет выполняться не по произвольному ребру, а по ребрам из найденных (s, t) -путей, где s — источник, а t — сток. Для этого можно воспользоваться одним из вариантов:

1. Найти все пути от источника к стоку, при этом одно ребро может принадлежать разным путям.

2. Найти все дополняющие пути от источника к стоку в процессе поиска максимального потока с помощью алгоритма Форда — Фалкерсона.

В данной работе рассмотрен второй вариант. Его преимущество в том, что после каждого удаления ребра запускается алгоритм Форда — Фалкерсона, который для внутренних целей находит все дополняющие (s, t) -пути, которые можно сохранять без потери скорости вычислений.

Основной недостаток множества таких цепей состоит в том, что оно не совпадает с множеством всех путей от источника к стоку, а значит после каждого удаления ребра это множество необходимо перезаписывать. Из-за этого нет возможности применять некоторые оптимизации, связанные с анализом текущего состояния всех путей от S к T .

Определив предпочтительный вариант, для удаления очередного ребра в предложенном алгоритме будем выбирать по одному ребру из каждого пути, начиная от источника. В то время как для онадеживания рассматриваются последовательно все ребра в одной цепи, прежде чем перейти к следующей цепи.

Дополнительно после каждого удаления ребра для ускорения поиска максимального потока будут исключаться висячие вершины, если они не являются источником или стоком, вместе с инцидентными им ребрами.

2. Последовательный алгоритм принятия решений Таким образом, алгоритм с учетом перечисленных оптимизаций имеет вид:

Шаг 1. Найти множество L всех дополняющих путей от источника к стоку $l_i = \{e_{ij}\}$ и максимальный поток f_{max} в графе G с помощью алгоритмам Форда — Фалкерсона.

Шаг 2. Если $f_{max} < f_0$, то выводим результат “Граф ненадежен”, иначе переходим на Шаг 3.

Шаг 3. Запустить последовательно удаление Шаг 3.1 и онадживание ребра Шаг 3.2 с параметрами: $G = G$ — граф, полученный в процессе ветвления; $P(G) = 1$ — вероятность реализации (получения) графа G ; $G_{trust} = \{e_{ij}\} = \emptyset$ — граф, состоящий только из онадженных ребер графа G ; $L = L$ — множество дополняющих цепей от источника к стоку; $n = 0$ — порядковый номер цепи $l_n \in L$; $m = 0$ — порядковый номер элемента-ребра $e_{ij} \in l_n$.

Шаг 3.1. Удаление выбранного ребра e_m в графе G .

Шаг 3.1.1. Если ребро e_m онаджено и является последним в цепи l_n , то

— $m = 0, n = n + 1$ — выбрать первое ребро в следующей цепи,

— перейти на Шаг 3.1.3.

Шаг 3.1.2. Если ребро e_m онаджено и не последнее в цепи l_n , то

— $m = m + 1, n = n$ — выбрать следующее ребро в текущей цепи,

— перейти на Шаг 3.1.3.

Шаг 3.1.3. Удалить ребро e_m в графе G , получаем граф $G \setminus \{e_m\} = G_i$.

Шаг 3.1.4. Найти все дополняющие пути L_i и максимальный поток f_{max} в графе G_i .

Шаг 3.1.5. Вычислить вероятность получения графа по формуле $P(G_i) = P(G)p_{ij}$.

Шаг 3.1.6. Если поток f_0 можно пропустить через граф G_i , то перейти на Шаг 3 с параметрами (идем в глубину) $G = G_i, P(G) = P(G_i), G_{trust} = G_{trust}$ (граф не изменился в процессе удаления ребра), $L = L_i, n = 0, m = 0$.

- Шаг 3.1.7. $UB- = P(G_i)$
- Шаг 3.1.8. Если $FP_0 > UB$, то вывести результат “Граф ненадежен” и завершить работу алгоритма.
- Шаг 3.1.9. Иначе закончить функцию удаления (переходим на Шаг 3.2. для графа G переданного на вход – возвращаемся на уровень выше).
- Шаг 3.2. Онадеживание выбранного ребра e_m в графе G
- Шаг 3.2.1. Если ребро e_m онадежено и является последним в цепи l_n , то
– $m = 0, n = n + 1$ – выбрать первое ребро в следующей цепи,
– перейти на Шаг 3.2.3.
- Шаг 3.2.2. Если ребро e_m онадежено и не последнее в цепи l_n , то
– $m = m + 1, n = n$ – выбрать следующее ребро в текущей цепи,
– перейти на Шаг 3.2.3.
- Шаг 3.2.3. Онадежить ребро в графе G , получаем граф $G/\{e_{ij}\} = G_i$.
- Шаг 3.2.4. Записать матрицу G_{trust} для онадеженных ребер в графе G_i .
- Шаг 3.2.5. Вычислить максимальный поток f_{max} для графа G_{trust} .
- Шаг 3.2.6. Вычислить вероятность получения графа по формуле $P(G_i) = P(G)p_{ij}$.
- Шаг 3.2.7. Если поток f_0 нельзя пропустить через граф G_{trust} , то перейти на Шаг 3 с параметрами (идем в глубину) $G = G_i; P(G) = P(G_i); L = L$ – множество цепей, полученное на вход функции онадеживания; если e_m – последнее ребро в цепи l_n , то $m = 0, n = n + 1$, иначе $m = m + 1, n = n$.
- Шаг 3.2.8. Иначе $LB+ = P(G_i)$.
- Шаг 3.2.9. Если $FP_0 \leq LB$, то вывести результат “Граф надежен” и завершить работу алгоритма.
- Шаг 3.2.10. Выход из функции онадеживания (поднимаемся на уровень выше)

В данном алгоритме возможны два варианта использования функций онадеживания и удаления. С учетом особенностей последо-

вательного запуска функций в программной реализации получается, что алгоритм может работать двумя разными способами:

1. Сначала последовательно выполнять удаления ребер, т. е. пробежать все листья по левой стороне, после чего поднимаясь выполнять онадеживания ребер.

2. И наоборот: сначала онадеживать ребра, пробегая по всем листьям справа, после чего, возвращаясь на шаг назад, выполнять удаление.

От выбора последовательности напрямую зависит время выполнения программы, что будет представлено в экспериментах.

3. Многопоточный алгоритм принятия решений. Так как в процессе работы алгоритма рассматриваются две альтернативные гипотезы существования и отсутствия ребра, то, представляя последовательность действий в виде дерева (как на представленной выше блок-схеме), можно использовать эту особенность для добавления многопоточности в программную реализацию.

Пусть доступны два потока, которые будут работать на разных ядрах. Первому потоку будет передан граф, полученный после удаления ребра в исходном графе, после чего поток будет выполнять последовательный алгоритм принятия решений “через удаление”. Второму потоку будет предоставлен граф, полученный после онадеживания ребра в исходном графе, после чего он будет выполнять последовательный алгоритм “через онадеживание”. Переменные LB и UB границ показателя надежности являются глобальными, а значит доступны для изменения всем потокам.

Для большего количества потоков разделение выполняются аналогичным образом.

В данном исследовании рассмотрена эффективность многопоточного алгоритма только на двух ядрах, в дальнейшем планируется оценить эффективность на большем количестве ядер, но после некоторых усовершенствований для улучшения взаимодействия между потоками. Кроме того, необходимо добавить перераспределение потоков, завершивших работу, на оставшийся пул доступных процессов.

4. Результаты экспериментов.

4.1. *Эффективность последовательного алгоритма принятия решений.* Проведено сравнение результатов работы последовательного алгоритма принятия решений и алгоритма поиска точного ре-

Таблица 1

Результаты работы алгоритмов с $p = 0,99$ и $c = 15$

Требования к сети		FP	Алгоритм поиска точн. решения, с	Последов. алгоритм принятия решений, с		Результат
f_0	FP_0			удаление	онадеж.	
Для графа G_1						
20	0,995 >	0,96018	4,23	0,038	0,451	False
	0,960 <	0,96018	4,23	0,585	0,431	True
	0,900 <	0,96018	4,23	1,509	0,51	True
15	0,9999 >	0,9998	40,496	0,048	0,277	False
	0,990 <	0,9998	40,496	0,457	0,354	True
	0,900 <	0,9998	40,496	0,504	0,034	True
Для графа G_2						
20	0,995 >	0,96017	250,627	0,045	0,241	False
	0,960 <	0,96017	250,627	2,489	2,226	True
	0,900 <	0,96017	250,627	2,643	0,179	True
15	0,9999 >	0,9997	> 1 часа	0,43	1,757	False
	0,998 <	0,9997	> 1 часа	2,530	1,805	True
	0,900 <	0,9997	> 1 часа	2,017	0,67	True

шения показателя надежности методом факторизации. В данной работе (табл. 1) представлены результаты для графов с топологией решетки 4×4 (16 вершин, 24 ребра, G_1) и 4×5 (20 вершин, 31 ребро, G_2) с равнонадежными ребрами (все ребра имеют надежность p) и пропускной способностью c , при этом в левом верхнем углу находится источник, а в правом нижнем — сток.

Алгоритм принятия решений, независимо от последовательности действий “через удаление” или “через онадеживание”, показывает преимущество перед поиском точного значения показателя в случае увеличения путей для передачи заданного потока f_0 от источника к стоку.

Более того, при увеличении размерности графа алгоритм принятия решений показал значительное превосходство перед поиском точного решения.

Подтверждается предположение о разнице во времени счета двух вариантов работы последовательного алгоритма: “через онадеживание” и “через удаление”. Если на вход передан надежный граф, то последовательный алгоритм через онадеживание завершит вычисления раньше алгоритма через удаление, и наоборот, последовательный алгоритм через удаление выдаст результат быстрее для ненадежного графа.

Это связано с особенностью сравнения порогового значения надежности и вычисляемых границ. При онадеживании изменяется только нижняя граница, которая стремится снизу к точному результату, в то время как при удалении опускается верхняя граница, сходящаяся к точному результату, а значит и к пороговому результату, сверху. Следовательно, если граф надежен, то для завершения алгоритма должно выполняться условие $LB \geq FP_0$, достижимое при онадеживании. И если граф ненадежен, то необходимо получить истинность условия $UB < FP_0$, которое достигается при удалении ребер.

Эксперт может только предположить является ли сеть надежной для выбора последовательности перед запуском алгоритма, при этом, если он ошибся, алгоритм будет работать несколько дольше. Из чего следует потребность в параллельной реализации алгоритма хотя бы на двух ядрах.

4.2. *Эффективность многопоточного алгоритма принятия решений.* В табл. 2 представлены результаты работы многопоточного алгоритма в сравнении с работоспособностью последовательного алгоритма принятия решений. Результаты представлены для графа — решетки 5×5 (25 вершин, 40 ребер, G_3). Пропускная способность этого графа равна $c_{ij} = 15$. Ребра являются равнонадежными с вероятностью $p_{ij} = 0,99$.

Параллельный алгоритм показывает незначительное ухудшение по сравнению с лучшим вариантом последовательного алгоритма, но в ряде случаев значительно превосходит худший вариант последовательного, как например в третьей строке. Неоспоримым преимуществом многопоточного потока является отсутствие потребности в мнении эксперта. Более того, в ряде случаев параллельный алгоритм

Таблица 2

Результаты последовательного и многопоточного алгоритмов

Требования к сети		FP	Последовательный алгоритм, с.		Многопоточн. алгоритм на 2 ядра, с.	Результат
f_0	FP_0		удал.	онадеж.		
20	0,995	0,9602	0,061	0,070	0,067	False
	0,970	0,9602	51,050	46,199	36,03	False
	0,9601	0,9602	51,663	50,554	18,783	True
	0,940	0,9602	50,064	26,073	40,356	True
	0,900	0,9602	69,185	1,037	4,316	True
15	0,9999	0,99979	0,38	34,803	0,060	False
	0,989	0,99979	41,441	36,686	37,551	True
	0,976	0,99979	40,006	30,781	31,348	True
	0,950	0,99979	40,422	5,979	6,021	True

показывает уменьшение времени счета относительно всех вариантов последовательного алгоритма.

4.3. *Сходимость границ показателя надежности.* Покажем сходимость границ LB и UB к точному значению показателя надежности.

На рис. 1. представлен график изменения нижней и верхней границ показателя надежности FP в зависимости от шага алгоритма N (номер итерации) для графа с топологией решетка размером 3×3 , у которого все ребра равнонадежные.

На рис. 2 представлен график изменения границ для графа с топологией решетка размером 4×4 с равномерным распределением на отрезке $[0.5, 1]$ вероятностей существования ребер p_{ij} .

Вследствие того что расчет UB и LB основан на точном методе факторизации, эти границы сходятся к точному значению показателя надежности, что и подтверждают представленные графики. А значит, и результат работы алгоритма также является точным, так как основан на рассмотрении текущих значений границ.

Заключение. В работе приведены результаты, полученные с использованием кумулятивных оценок вероятности пропуска потока

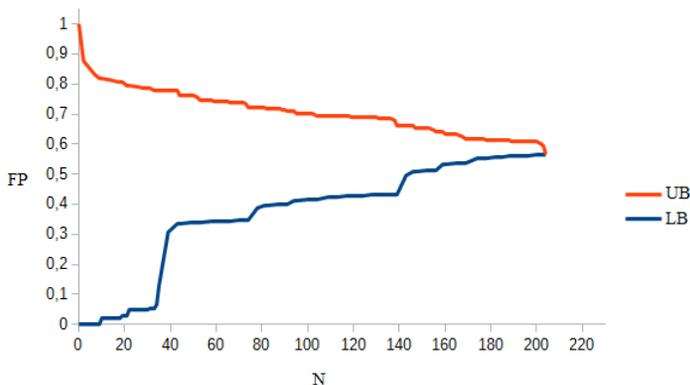


Рис. 1. Пример сходимости границ к точному решению вероятности пропуска потока заданной величины $f_0 = 20$; граф — решетка 3×3 , $p_{ij} = 0,65$, $c_{ij} = 20$

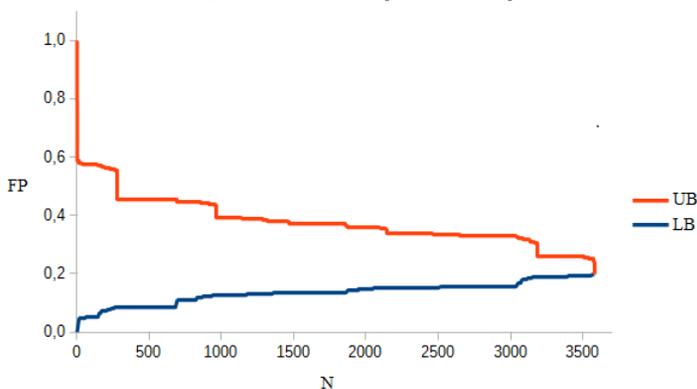


Рис. 2. Пример сходимости границ к точному решению вероятности пропуска заданного потока $f_0 = 20$; граф — решетка 4×4 , $p_{ij} \in [0.5, 1]$, $f_{ij} = 15$

заданной величины между выделенной парой узлов в случайном графе для принятия решения о его надежности по этому критерию. Экспериментально показана эффективность использования разработанного алгоритма в сравнении с алгоритмом поиска точного решения.

Целью дальнейших исследований является усовершенствование многопоточного алгоритма принятия решений и анализ его эффективности на большем числе ядер. Кроме того, требуется оптимизация как последовательного, так и параллельного алгоритмов с целью учета структурных особенностей графов, в частности, наличия в них цепей, мостов, точек сочленения и проч.

Научный руководитель — д-р техн. наук А. С. Родионов

Список литературы

- [1] Satyanarayana A., Chang M. K. Network reliability and the factoring theorem // Networks. 1983. V. 13. P. 107–120.
- [2] Won J.-M., Karray F. Cumulative update of all-terminal reliability for faster feasibility decision // IEEE Trans. Reliability. 2010. V. 59, N 3. P. 551–562.
- [3] Rodionov A., Migov D., Rodionova O. Improvements in the efficiency of cumulative updating of all-terminal network reliability // IEEE Trans. Reliability. 2012. V. 61, N 2. P. 460–465.
- [4] Rodionov A., Migov D., Rodionova O. Exact bounds for average pairwise network reliability // Proceedings of the 7th International conference on ubiquitous information management and communication, Kota Kinabalu, Malaysia. 2013. P. 1–6.

Ядыкина Ольга Андреевна — магистрант Новосибирского государственного университета; e-mail: artyuha.o@gmail.com