

ТАВРИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАТИКИ И МАТЕМАТИКИ

№ 3 (56) ' 2022

МЕЖДУНАРОДНОЕ НАУЧНО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗДАНИЕ
КРЫМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. В. И. ВЕРНАДСКОГО

ОСНОВАН В 2002 ГОДУ

ISSN 1729-3901

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций Российской Федерации. Свидетельство о регистрации средства массовой информации ПИ №ФС77-61826 от 18.05.2015.

Включен в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук ВАК РФ 28.12.2018 по группам специальностей: 01.01.02 «Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление», 01.01.06 «Математическая логика, алгебра и теория чисел», 01.01.09 «Дискретная математика и математическая кибернетика», 05.13.17 «Теоретические основы информатики», 1.1.1 «Вещественный, комплексный и функциональный анализ», 1.1.9 «Механика жидкости, газа и плазмы», 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», 2.3.1 «Системный анализ, управление и обработка информации» (физико-математические науки).

Индексируется в базе РИНЦ (https://elibrary.ru/title_about.asp?id=48863).

Статьи проходят рецензирование в соответствии с требованиями к рецензируемым научным журналам.



Math-Net.Ru

T AURIDA
J OURNAL OF
C OMPUTER SCIENCE THEORY AND
M ATHEMATICS

2022, No. 3

INTERNATIONAL THEORETICAL RESEARCH EDITION, PEER-REVIEWED JOURNAL
V. I. VERNADSKY CRIMEAN FEDERAL UNIVERSITY

FOUNDED IN 2002

The State Registration Certificate
ПИ № ФС77-61826 (18.05.2015)

ISSN 1729-3901

Key title: Tavriceskij vestnik informatiki i matematiki

УЧРЕДИТЕЛЬ — ФГАОУ ВО «КРЫМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. В. И. ВЕРНАДСКОГО»

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ:

АБЛАМЕЙКО С. А., акад. НАН Беларуси, проф., д. т. н.	МЕСТЕЦКИЙ Л. М., проф., д. т. н.
АПАТОВА Н. В., проф., д. пед. н.	МУРАВНИК А. Б., д. ф.-м. н.
ВАТУЛЯН А. О., проф., д. ф.-м. н.	ПОЛОВИНКИН И. П., доц., д. ф.-м. н.
ВОРОНЦОВ К. В., проф., д. ф.-м. н.	РАЙГОРОДСКИЙ А. М., доц., д. ф.-м. н.
ДЕМИДЕНКО Г. В., проф., д. ф.-м. н.	РОХЛИН Д. Б., проф., д. ф.-м. н.
ЕРУСАЛИМСКИЙ Я. М., проф., д. т. н.	СОЛОВЬЕВ А. Н., доц., д. ф.-м. н.
ЗАГРЕБНОВ В. А., проф., д. ф.-м. н.	СТОНЯКИН Ф. С., проф., д. ф.-м. н.
ЗАДОРОВИЧ В. Г., проф., д. ф.-м. н.	УТКИН А. В., в. н. с., д. т. н.
КАЛИНИЧЕНКО В. А., проф., д. ф.-м. н.	ЦИБУЛИН В. Г., доц., д. ф.-м. н.
КАРАПЕТАНЦ А. Н., проф., д. ф.-м. н.	ЧЕРНОВА Т. А., доц., д. т. н.
КРАВЧЕНКО В. В., проф., д. т. н.,	ЧИЛИН В. И., проф., д. ф.-м. н.
КРАСНОПРОШИН В. В., проф., д. т. н.,	

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

МУРАТОВ М. А., проф., д. ф.-м. н. — **главный редактор**
РУДЕНКО Л. И., доц., к. ф.-м. н. — **заместитель главного редактора**
АНАФИЕВ А. С., доц., к. ф.-м. н. — **ответственный редактор**
БЛЫЩИК В. Ф., доц., к. ф.-м. н. — **редактор сайта журнала**
германчук М. С., к. ф.-м. н. — **секретарь журнала**
ЗАКОРА Д. А., проф., д. ф.-м. н.
КОЗЛОВА М. Г., доц., к. ф.-м. н. — **ответственный секретарь**
ЛУКЬЯНЕНКО В. А., доц., к. ф.-м. н. — **научный редактор**
ПАПКОВ С. О., проф., д. ф.-м. н.
ЯРОШЕНКО А. А., проф., д. ф.-м. н.

АДРЕС РЕДАКЦИИ:

Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского
пр-т Академика Вернадского, 4, г. Симферополь, Республика Крым, Российская Федерация, 295007

ДЛЯ ПЕРЕПИСКИ:

Таврический вестник информатики и математики
пр-т Академика Вернадского, 4, г. Симферополь, Республика Крым, Российская Федерация, 295007
Тел. гл. редактора: +7 (978) 782-31-99
Тел. редакции: +7 (978) 837-82-77
e-mail (гл. редактор): mustafa_muratov@mail.ru
e-mail (для переписки): article@tvim.su
сайт журнала: www.tvim.su

Журнал публикует оригинальные и обзорные статьи по вопросам теоретической и прикладной информатики и математики

Ведущие тематические разделы:

Функциональный анализ и его приложения	Машинное обучение, распознавание и извлечение закономерностей
Интегральные и дифференциальные уравнения, математическая физика и динамические системы	Дедуктивные системы и базы знаний
Спектральные и эволюционные задачи	Знаниеориентированные и гибридные математические модели принятия решений
Математические проблемы гидродинамики, жидкости и газа, теория упругости	Синтез моделей принятия решений при неполной начальной информации
Дискретная оптимизация	Системный анализ, управление и обработка информации
Математическая логика, теория алгоритмов и теория сложности вычислений	Вычислительная математика и математическое моделирование

© V. I. VERNADSKY CRIMEAN FEDERAL UNIVERSITY

EDITORIAL COUNCIL:

Sergey ABLAMEYKO, Prof., EngD	Leonid MESTETSKIY, Prof., EngD
Natalia APATOVA, Prof., EdD	Andrey MURAVNIK, Dr. Phys.-Math.
Alexander VATULIAN, Prof., Dr. Phys.-Math.	Igor POLOVINKIN, Assoc. prof., Dr. Phys.-Math.
Konstantin VORONTSOV, Prof., Dr. Phys.-Math.	Andrey RAIGORODSKY, Assoc. prof., Dr. Phys.-Math.
Gennady DEMIDENKO, Prof., Dr. Phys.-Math.	Dmitry ROKHLIN, Prof., Dr. Phys.-Math.
Yakov YERUSALIMSKY, Prof., EngD	Arkady SOLOVYOV, Assoc. prof., Dr. Phys.-Math.
Valentin ZAGREBNOV, Prof., Dr. Phys.-Math.	Fedor STONYAKIN, Prof., Dr. Phys.-Math.
Vladimir ZADOROZHNY, Prof., Dr. Phys.-Math.	Anton UTKIN, Senior Researcher, EngD
Vladimir KALINICHENKO, Prof., Dr. Phys.-Math.	Vyacheslav TSIBULIN, Assoc. prof., Dr. Phys.-Math.
Alexey KARAPETYANTS, Prof., Dr. Phys.-Math.	Tatyana CHERNOVA, Assoc. prof., EngD
Vladislav KRAVCHENKO, Prof., EngD	Vladimir CHILIN, Prof., Dr. Phys.-Math.
Viktor KRASNOPROSHIN, Prof., EngD,	

EDITORIAL BOARD:

Mustafa MURATOV, Prof., Dr. Phys.-Math. — **Editor-in-Chief**
Lyudmila RUDENKO, Assoc. prof., Cand. Phys.-Math. — **Vice Chief Editor**
Ayder ANAFIYEV, Assoc. prof., Cand. Phys.-Math. — **Managing Editor**
Vladimir BLYSCHIK, Assoc. prof., Cand. Phys.-Math. — **The Editor of the Cite**
Maria GERMANCHUK, Cand. Phys.-Math. — **Secretary**
Dmitry ZAKORA, Prof., Dr. Phys.-Math.
Margarita KOZLOVA, Assoc. prof., Cand. Phys.-Math. — **Executive Secretary**
Vladimir LUKYANENKO, Assoc. prof., Cand. Phys.-Math. — **Science editor**
Stanislav PAPKOV, Prof., Dr. Phys.-Math.
Alexander YAROSHENKO, Prof., Dr. Phys.-Math.

OFFICE ADDRESS:

V. I. Vernadsky Crimean Federal University
Vernadsky Avenue, 4, Simferopol, Crimea, 295007, Russian Federation

JOURNAL SITE: www.tvim.info

FOR CORRESPONDENCE:

Taurida Journal of Computer Science Theory and Mathematics,
Faculty of Mathematics and Computer Science Theory, Taurida Academy of Vernadsky CFU
Vernadsky Avenue, 4, Simferopol, Crimea, 295007, Russian Federation

Tel. +7 978 782 31 99 — editor-in-chief

+7 978 837 82 77 — office

Email: mustafa_muratov@mail.ru — editor-in-chief

article@tvim.info — for correspondence

Taurida Journal of Computer Science Theory and Mathematics is a peer-reviewed journal, published by V.I. Vernadsky Crimean Federal University. The journal publishes research papers in the fields of computer science and mathematics.

THEMATIC SECTIONS:

Algorithm Theory, Mathematical Logic, Discrete Optimization, Complexity Theory, Calculus Mathematics, Machine Learning, Pattern Recognition, Data Mining, Deductive Systems and Knowledge Bases, Decision Making Models, Mathematical Modeling, Numerical Analysis, Software Suites, Systems Analysis, Control, and Information Processing.

Functional Analysis and Applications, Integral and Differential Equations, Dynamic Systems, Spectral and Evolutional Tasks, The Mathematical Problems of Hydrodynamics, Fluid, Gas, and Plasma Mechanics.

СОДЕРЖАНИЕ

Гребенева А. А., Лукьяненко В. А. Некоторые задачи феноменологического уравнения спинового горения	7
Козлова М. Г., Германчук М. С. Разработка гибридной системы рекомендаций	30
Лукьяненко В. А., Лукьяненко Д. В., Редкокош К. И. Восстановление параметров в моделях магнитной восприимчивости	53
Лукьянова Е. А., Прочитанский М. С., Лукьянова М. Е. Распределенные системы в среде динамического моделирования	69
Макаров О. О. Метаэвристики в близких задачах маршрутизации типа многих коммивояжеров	80
Рефераты	103
Список авторов номера	107

TABLE OF CONTENTS

Grebeneva A. A., Lukianenko V. A. Some problems of the phenomenological equation of spin combustion	7
Kozlova M. G., Germanchuk M. S. The development of a hybrid recommendation system	30
Lukianenko V. A., Lukianenko D. V., Redkokosh K. I. Parameter recovery in magnetic susceptibility models	53
Lukyanova E. A., Prochitanskiy M. S., Lukyanova M. E Distributed Systems in a Dynamic Modeling Environment	69
Makarov O. O. Metaheuristics in related routing problems such as many traveling salesmen	80
Abstracts	103
Authors	107

УДК: 517.957, 517.928.7

MSC2010: 35K61, 35C07, 35C15, 35C20

НЕКОТОРЫЕ ЗАДАЧИ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ СПИНОВОГО ГОРЕНИЯ

© А. А. Гребенева, В. А. Лукьяненко

КРЫМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. В. И. ВЕРНАДСКОГО

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ПРОСП. АКАДЕМИКА ВЕРНАДСКОГО, 4, СИМФЕРОПОЛЬ, 295007, РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

E-MAIL: agrebeneva2001@gmail.com, art-inf@yandex.ru

SOME PROBLEMS OF THE PHENOMENOLOGICAL EQUATION OF SPIN COMBUSTION.

Grebeneva A. A., Lukianenko V. A.

Abstract. The model of spin combustion, generalization of the Ja. B. Zeldovich model with a pseudo-differential operator $(-\Delta)^\alpha$, $0 < \alpha < 1$ is investigated. The equation is a singularly perturbed nonlinear parabolic equation of the Van-der-Pol's type.

Spin combustion modes were discovered as new non-stationary effects by Zeldovich, who developed the theory of burning condensed systems with solid-phase products. In auto-oscillating combustion, the front of the reaction remains flat and moves at an oscillating rate about the average. In the spin regimes on the surface of the burning sample, there are rotating reactions along the front.

The article reviews the basic models of the theory of combustion of condensed systems. The mathematical model of the phenomenological equation of spin combustion was proposed by Zeldovich together with A. P. Aldushin and B. A. Malomed. Spatial non-stationary effects of burning hollow cylinder with radius R were investigated by them. The research in the field of theoretical foundations of mathematical modeling of combustion modes belongs to Ivleva and Merzhanov. Their model consists of the equation of thermal conductivity and kinetic equation. The results of experimental, numerical and analytical studies of the burning surface spins are presented in the works by B. V. Novozhilov.

The article considers a model of spin burning on a real axis. The integral representation of the problem by Fourier transformation is constructed. For comparison, a model of gas-free spin combustion on the entire plane and corresponding to it an integral representation of the problem with Neumann conditions are given.

In the study of the combustion model on a real axis with periodic conditions on a spatial variable and its spectral problem, the consistency with the combustion model in a circumference, which corresponds to the spin modes of combustion of a thin-walled cylinder, has been established. By using discrete Fourier transform, the problem in the form of a nonlinear integral equation of convolution type is obtained.

For bounded areas, the operator methods of mathematical physics have been used to estimate non-linear cubic components. The operator form of the problem of spin combustion is presented, it is proved that its operator is a generator of the holomorphic semigroup. The type of the semigroup can be specified by studying the spectrum of the operator.

The local solvability of the problem for bounded areas has been proven.

Of interest is the model of spin combustion on the real axis with a delay on the spatial variable or time.

Keywords: *nonlinear equation, nonstationary effects, rotating waves, bifurcation analysis, integral representation*

ВВЕДЕНИЕ

Изучение теории детонации, так называемого «быстрого горения», позволило открыть новые нестационарные эффекты: автоколебательные и спиновые режимы распространения зоны экзотермической реакции. При автоколебательном горении фронт реакции, оставаясь плоским, перемещается с осциллирующей около среднего значения скоростью. В спиновых режимах на поверхности горящего образца наблюдаются бегущие вдоль фронта очага реакции. Интерес в первую очередь представляет явление спина, первоисследователем которого является Я. Б. Зельдович [1], развивший теорию горения конденсированных систем.

Еще в работе [2] была предпринята попытка построить упрощенную математическую модель спинового горения — двумерную задачу о распространении волны горения. Данная модель безгазового горения тонкой полубесконечной цилиндрической трубы позволяет исследовать стационарные режимы, одномерные автоколебательные волны горения и двумерные нестационарные процессы.

В работе [3] была исследована устойчивость стационарных режимов работы цилиндрического реактора с внутренней подачей относительно малых возмущений температуры и положения зоны реакции.

Теоретические основы математического моделирования режимов сгорания изложены в [4], где модель состоит из уравнения теплопроводности и кинетического уравнения:

$$c\rho_0 \frac{\partial T}{\partial t} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial h^2} \right) + \rho_0 Q \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \begin{cases} k_0(1 - \eta) \exp \left[-\frac{E}{RT} \right], & \eta < 1, \\ 0, & \eta \neq 1, \end{cases}$$

где r — радиус, φ — полярный угол, h — высота слоя.

Описанная двумерная модель учитывает температуру для нескольких слоев пористой порошковой среды:

$$\begin{aligned}\frac{\partial T}{\partial t} &= k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + f, \\ \frac{\partial A}{\partial t} &= L \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} \right).\end{aligned}\quad (2)$$

Анализируя устойчивость фронта реакции для уравнений (1) и (2), в работах Зельдовича и Баренблатта [5], [6], как визуальную особенность распада фронта термомодиффузионного пламени на небольшие тепловые структуры, были введены в расчет характерные модели малых возмущений:

$$x = f(y, t) = \varepsilon \exp[iky + i\omega t + \varphi t] \sim \varepsilon \exp[\varphi t] \sin(ky), \quad (3)$$

где $f(y, t)$ — поверхность распространения фронта горения, k — количество волн поперечного возмущения, ω — круговая частота для времени термохимической индукции, φ — снижение температуры нагревательной зоны Майкельсона.

В работе [7] исследовалась устойчивость волн горения предварительно смешанной смеси в модели Зельдовича-Линьяна в адиабатическом пределе в двух пространственных измерениях. Показано, что для числа Льюиса, большего или меньшего единицы, возникают либо волновая, либо ячеечная неустойчивости. Уменьшение параметра рекомбинации, соответствующего соотношению характерных времен реакций ветвления и рекомбинации, делает волны горения более устойчивыми за счет увеличения области значений параметров устойчивых решений бегущей волны. Показано, что повышение температуры окружающей среды оказывает аналогичный стабилизирующий эффект на волны горения. Получено, что эффект изменения числа Льюиса для радикалов более сложен и зависит от режима рекомбинации, а при пересечении критических значений параметров возникновения неустойчивости рождаются либо пульсирующие, либо ячеистые двумерные решения. Изучены свойства этих решений.

Рассматриваются волны детонации для упрощённых уравнений Чепмана-Жуге (СЖ) и уравнения Зельдовича-Неймана-Деринга (ZND) для сферически симметричных уравнений Эйлера [8]. Скорость реакции модели СЖ бесконечна, в то время как скорость реакции модели ZND конечна. Для модели сгорания ZND

$$(u + zq)_t + f(u)_x + \frac{u}{x} = 0 \quad (4)$$

с краевыми условиями Римана

$$\begin{cases} (u, z)(x, 0) = (0, 1), & x > 0, \\ u(0, t) = 0, & t > 0 \end{cases} \quad (5)$$

взрывная волна — это процесс сгорания, инициируемый током перед сжатием. Для того, чтобы исследовать взрыв, рассматривается задача о свободных границах для угловой области

$$\begin{aligned} u_t + f(u)_x + \frac{u}{x} &= kqe^{-k[t-i(x)]}, \\ u = 0, \quad x = 0, \quad t > 0, \\ \frac{u}{f(u) - f(0)} &= i'(x), \quad t = i(x), \quad x > 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где $t = i(x)$ ($i(0) = 0$) — неизвестная кривая, представляющая путь сжатия.

При устремлении $k \rightarrow +\infty$ решения (u_k, z_k) модели ZND совпадают с решениями (u, z) модели горения CJ:

$$(u, z)(x, t) = \begin{cases} (0, 0), & 0 \leq x \leq f'(0)t, \\ \left(u\left(\frac{x}{t}\right), 0\right), & f'(0)t \leq x \leq f'(u_{CJDT})t, \\ (0, 1), & x > f'(u_{CJDT})t, \end{cases}$$

где $f'(u_{CJDT}) = \frac{f(u_{CJDT}) - f(0)}{u_{CJDT} - q}$, CJDT — детонационная волна Чепмена-Жуге.

В работе [9] В. М. Гендугов исследовал модифицированную модель стационарной идеальной детонации Зельдовича-Неймана-Деринга (ZND) с плоской одномерной структурой, включающей ударную волну и непрерывную зону горения с одной независимой реакцией. В традиционной схеме Я. Б. Зельдовича горючая смесь предполагается смесью совершенных газов, а реакция, не удовлетворяющая кинетической формулировке закона действующих масс, завершается так, что продукты детонации являются инертной средой. В этих приближениях установлено, что идеальная детонация не зависит от структуры волны и распространяется в режиме CJ, т. е. имеет относительно потока продуктов детонации скорость, равную замороженной скорости звука.

Анализ устойчивости этой модели к пространственным возмущениям показал, что модель неустойчива и имеет сингулярную особенность в точке CJ и может быть

описана следующей системой:

$$\begin{aligned} \rho_0 u_0 &= \rho_0 D = \rho u = K, \\ \frac{dp}{dx} &= \frac{K^2}{\rho^2} \frac{d\rho}{dx}, \\ \frac{dh}{dx} &= \frac{K^2}{\rho^3} \frac{d\rho}{dx}, \\ \rho &= \rho(h, \rho, c_i) = \frac{pc_p m}{R(h + Q)}, \\ K \frac{dc_i}{dx} &= m_i (v_i'' - v_i') \varepsilon. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь $p, \rho, h, s, \varepsilon$ — давление, плотность, энтальпия, энтропия и скорость реакции смеси; x — координата; u — скорость потока относительно ударной волны; R — абсолютная газовая постоянная; N — число компонент смеси; i — номер компоненты; c_{pi} , h, m_i, c_i — теплоемкость при постоянном давлении, энергия образования, молекулярная масса и массовая концентрация i -ой компоненты; v_i'', v_i' — стехиометрические коэффициенты i -ой компоненты до и после реакции;

$$\frac{1}{m} = \sum_{i=1}^N \frac{c_i}{m_i}; \quad Q = - \sum_{i=1}^N \frac{c_i h_i}{m_i}; \quad c_p = \sum_{i=1}^N \frac{c_{pi} c_i}{m_i}.$$

Для определения устойчивости системы (7) построена функция Ляпунова. Проведенные исследования модифицированной модели ZND выявили возможность построения решений для двух типов самоподдерживающихся детонационных волн с устойчивыми по Ляпунову зонами горения — для слабой и сильной детонаций. При этом скорость слабой детонации относительно равновесного потока продуктов детонации, не зависящая от структуры волны, соответствует равновесной скорости звука. Сильная же детонация является недосжатой и распространяется в режиме СЖ. Именно на этот режим выходят пересжатые детонационные волны и детонация с примыкающей волной разрежения. Отметим также, что предположение о равенстве теплоемкостей компонент смеси или о том, что смесь является совершенным газом, ограничивает модель, исключая решение для сильной детонации.

Результаты экспериментальных, численных и аналитических исследований сгорания поверхностных спинов представлены в [10]. При сжигании наблюдается небольшое пятно реакции, движущееся по поверхности цилиндрического образца. Это приводит к новой концепции двух типов спинов. Первый — очень ярко выраженный нелинейный феномен, полученный экспериментально. Второй представляет собой лишь результат теоретических исследований, проводимых главным образом в

рамках теории бифуркации и никогда не наблюдаемых в эксперименте. Существует значительное несоответствие между количественной характеристикой двух типов спинов.

В статье сформулирован аналитический метод для приближенного описания сильного сгорания на поверхности. В двумерной модели предполагается, что как негоревшее топливо, так и продукты сгорания являются твердыми, и конденсированная фаза экзотермической реакции происходит на цилиндрической поверхности с центром сгорания, проникающим в образец на небольшую глубину. Таким образом, поскольку движение спинового пятна почти перпендикулярно вектору средней скорости волны сгорания, двумерная задача может быть сведена к простой одномерной задаче, которая похожа на задачу одновременного сгорания с потерями тепла.

Выяснены условия наступления режима спинового горения. Даны аналитические выражения для различных величин, включая скорость спина распространения, среднюю скорость волны и температурный профиль. Они зависят от диаметра цилиндра и потерь тепла. По мере увеличения диаметра на поверхности цилиндра появляются два или более центров химической реакции (многоцентровое вращение).

Аппроксимирующая теория сильного спина описывается уравнением

$$\kappa \frac{d^2 T}{dz^2} - v \frac{dT}{dz} + q_1 - q_2 - q_3 - q_4 = 0, \quad (8)$$

где $q_1 = \frac{u}{z}(T_a - T)$ — конвективный энергетический поток, $q_2 = a \frac{\kappa}{z^2} \left(T - \frac{T}{a} \right)$ — потери тепла в смеси, $q_3 = a_1 \frac{\kappa}{z^2} (T - T_b)$ — тепловые потери в продуктах сгорания, $q_4 = \frac{\kappa}{h^2} (T - T_a)$ — тепловые потери в окружающей среде; a, a_1 — соответствующие коэффициенты тепловых потерь, z — шаг спина (вращения).

В 2020 году был завершен эксперимент NASA (Saffire), который показал, что в условиях микрогравитации горение имеет две фазы: длительная депрессивная фаза, так называемое «холодное горение» и быстрое горение в хаотически расположенных «горячих точках» [11].

Ранее математическая модель феноменологического уравнения спинового горения была предложена Я. Б. Зельдовичем совместно с А. П. Алдушиным и Б. А. Маломедом [12], [13]. Тогда же были исследованы возникающие пространственные нестационарные эффекты горения полого цилиндра радиуса R :

$$\ddot{\xi} + \xi = 2\varepsilon \left[\dot{\xi} \left(1 - \frac{4}{3} \xi^2 \right) + \frac{\lambda^2}{4\pi^2} \Delta \dot{\xi} + \frac{\beta \lambda}{2\pi} \sqrt{-\Delta \dot{\xi}} \right]. \quad (9)$$

Здесь $\xi = \xi(x, t)$ — функция, описывающая фронт распространения реакции горения; $0 < \varepsilon \ll 1$ — инкремент неустойчивости, $\lambda > 0$ — корреляционная длина теплопроводности связей между соседними участками фронта, $\beta > 0$ — коэффициент нелокальной связи участков фронта. Точка означает дифференцирование по времени, а Δ — одномерный лапласиан.

Уравнение представляет собой сингулярно возмущенное нелинейное параболическое уравнения ван-дер-полевского типа.

Методом квазинормальных форм динамика спиновых волн или, что тоже самое, решений типа бегущих волн задачи (1) исследовалась в [14]. Критерий устойчивости бегущих волн был найден в работах Е. П. Белана и его соавторов [15], [16]. Ими же получен, так называемый, принцип 1:2 взаимодействия, а также установлено явление высокомодовой буферности [17].

Вопросы существования и устойчивости периодических решений автономной параболической системы дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом и малой диффузией на окружности рассмотрены в работе [18].

Емкий обзор работ по проблематике горения был приведен в [19].

Ранее авторами были рассмотрены модели спинового горения, когда зона распространения реакции вся плоскость и тонкостенный цилиндр [20], [21]. При этом рассматривается обобщение модели (1), в которой вместо оператора $\sqrt{-\Delta}$ использовался псевдодифференциальный оператор $(-\Delta)^\alpha$, $0 < \alpha < 1$. Задача для тонкого кольца $R < r < R + \delta$ при $\delta \rightarrow 0$ (см. [22]) сводится к задаче на окружности. Построено интегральное представление решения для окружности (тонкостенного цилиндра), а также исследована устойчивость приближенных периодических решений.

Дальнейшее изложение будет относиться к обобщенной модели феноменологического горения, согласующейся с экспериментами.

1. МОДЕЛЬ СПИНОВОГО ГОРЕНИЯ НА ВЕЩЕСТВЕННОЙ ОСИ

Рассмотрим модель безгазового спинового горения, когда область распространения реакции вещественная ось $x \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \ddot{u} + u &= 2\varepsilon [\dot{u}(1 - \mu\dot{u}^2) - \rho^{-2}(-\Delta)\dot{u} + \beta\rho^{-1}(-\Delta)^\alpha\dot{u}], \quad 0 < \alpha < 1, \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad \dot{u}(x, 0) = u_1(x), \end{aligned} \quad (10)$$

где $\rho = \frac{2\pi}{\lambda}$.

В образах Фурье $U(\xi, t) = (\mathcal{F}u)(\xi, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} u(x, t) e^{-i\xi x} dx$ задача (10) представима в виде следующего уравнения

$$\ddot{U} + U = 2\varepsilon [1 - \rho^{-2}\xi^2 + \beta\rho^{-1}\xi^{2\alpha}] \dot{U} - 2\varepsilon G(\xi, t), \quad (11)$$

с начальными условиями

$$U(\xi, 0) = U_0(\xi), \quad \dot{U}(\xi, 0) = U_1(\xi), \quad (12)$$

где $G(\xi, t) = (\mathcal{F}\mu\dot{u}^3)(\xi, t)$, $\mu = \frac{4}{3}$ в модели Зельдовича.

Введем обозначения

$$q(\rho, \xi) = 1 - \rho^{-2}\xi^2 + \beta\rho^{-1}\xi^{2\alpha}. \quad (13)$$

Рассмотрим линеаризованное уравнение (11):

$$\ddot{U} - 2\varepsilon q \dot{U} + U = 0. \quad (14)$$

Представляя зависимость от времени t через $U(\xi, t) = V(\xi)e^{\omega t}$, получим характеристическое уравнение относительно ω :

$$\omega^2 - 2\varepsilon q \omega + 1 = 0.$$

Запишем ω в виде $\omega = Re\omega + iIm\omega = \omega_1 + i\omega_2$ и подставим в характеристическое уравнение, приравняв коэффициенты при действительной и мнимой частях:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 - \omega_2^2 - 2\varepsilon q \omega_1 + 1 &= 0, \\ (\omega_1 - \varepsilon q)\omega_2 &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Из второго уравнения системы следует, что либо $\omega_2 = 0$, либо $\omega_1 = \varepsilon q$ (или одновременно).

Если $\omega_2 = 0$, то $\omega_{1,j} = \varepsilon q \pm \sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}$, $j = 1, 2$. При $\varepsilon^2 q^2 - 1 > 0$ решением (14) будет функция вида

$$U(\xi, t) = e^{\varepsilon q t} \left(V_1(\xi) e^{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1} t} + V_2(\xi) e^{-\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1} t} \right).$$

Если $\varepsilon^2 q^2 - 1 < 0$, то ω_1 является мнимым, что противоречит $\omega_1 = Re\omega$.

Если $\omega_1 = \varepsilon q$, то $\omega_{2,j} = \pm \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}$, $j = 1, 2$. При $1 - \varepsilon^2 q^2 > 0$ справедливо следующее представление:

$$U(\xi, t) = e^{\varepsilon q t} \left(V_1(\xi) \cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t + V_2(\xi) \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t \right).$$

И, наконец, при $\varepsilon^2 q^2 - 1 = 0$ решением (14) будет функция вида $U(\xi, t) = e^{\varepsilon q t} (V_1(\xi) + V_2(\xi)t)$.

Если одновременно $\omega_2 = 0$ и $\omega_1 = \varepsilon q$, то из первого уравнения (15) получим, что $\varepsilon q = \pm 1$. Это соответствует рассмотренному выше случаю, когда $\varepsilon^2 q^2 - 1 = 0$.

Таким образом достаточно исследовать три представления решения.

1.1. Представление решения. При $\varepsilon^2 q^2 - 1 > 0$ однородное решение (14) $U(\xi, t) = V_1(\xi)e^{\omega_{1,1}t} + V_2(\xi)e^{\omega_{1,2}t} = V_1(\xi)U_1(\xi, t) + V_2(\xi)U_2(\xi, t)$, где $\omega_{1,1} = \varepsilon q + \sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}$, $\omega_{1,2} = \varepsilon q - \sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}$, а частное неоднородное найдем с помощью метода вариации произвольной постоянной: $V_j = V_j(\xi, t)$, $j = 1, 2$; получим систему из двух связанных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{V}_1 U_1 + \dot{V}_2 U_2 = 0, \\ \omega_{1,1} \dot{V}_1 U_1 + \omega_{1,2} \dot{V}_2 U_2 = -2\varepsilon G. \end{cases} \quad (16)$$

Тогда $\dot{V}_1 = \frac{2\varepsilon G}{(\omega_{1,2} - \omega_{1,1})U_1}$, $\dot{V}_2 = -\frac{2\varepsilon G}{(\omega_{1,2} - \omega_{1,1})U_1}$, где $\omega_{1,2} - \omega_{1,1} = -2\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}$.

Откуда

$$V_1(\xi, t) = -\int_0^t \frac{\varepsilon G(\xi, \tau)}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}} e^{-\omega_{1,1}\tau} d\tau, \quad V_2(\xi, t) = \int_0^t \frac{\varepsilon G(\xi, \tau)}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}} e^{-\omega_{1,2}\tau} d\tau.$$

Тогда частное решение представимо в виде:

$$U_ч(\xi, t) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}} \int_0^t (e^{\omega_{1,2}(t-\tau)} - e^{\omega_{1,1}(t-\tau)}) G(\xi, \tau) d\tau.$$

Общему решению соответствует выражение

$$U(\xi, t) = V_1(\xi)e^{\omega_{1,1}t} + V_2(\xi)e^{\omega_{1,2}t} - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}} \int_0^t e^{\varepsilon q(t-\tau)} sh \sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}(t-\tau) G(\xi, \tau) d\tau. \quad (17)$$

Найдем коэффициенты V_1, V_2 из начальных условий (12):

$$U(\xi, 0) = V_1 + V_2 = U_0,$$

$$\dot{U}(\xi, 0) = V_1 \omega_{1,1} + V_2 \omega_{1,2} = U_1.$$

После преобразований получим, что $V_1 = \frac{U_1 - \omega_{1,2} U_0}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}}$, $V_2 = \frac{\omega_{1,1} U_0 - U_1}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}}$.

Тогда общее решение уравнения (11):

$$\begin{aligned} U(\xi, t) = & \frac{U_1(\xi) - \omega_{1,2} U_0(\xi)}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}} e^{\omega_{1,1}t} + \frac{\omega_{1,1} U_0(\xi) - U_1(\xi)}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}} e^{\omega_{1,2}t} - \\ & - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}} \int_0^t e^{\varepsilon q(t-\tau)} sh \sqrt{\varepsilon^2 q^2 - 1}(t-\tau) G(\xi, \tau) d\tau. \end{aligned}$$

1.2. Представление решения в случае комплексных корней, когда $\varepsilon^2 q^2 - 1 < 0$. Общее решение однородного уравнения: $U(\xi, t) = e^{\varepsilon qt} \left(V_1(\xi) \cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t + V_2(\xi) \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t \right)$. Тогда частное решение представимо как $U(\xi, t) = V_1(\xi, t)U_1(\xi, t) + V_2(\xi, t)U_2(\xi, t)$, где $U_1(t) = e^{\varepsilon qt} \cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t$, $U_2(t) = e^{\varepsilon qt} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t$. После подстановки в (11), аналогично предыдущему случаю, получим, что

$$\dot{V}_1 = \frac{2\varepsilon G(\xi, \tau) e^{-\varepsilon qt} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}}, \quad \dot{V}_2 = -\frac{2\varepsilon G(\xi, \tau) e^{-\varepsilon qt} \cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}}.$$

Откуда частное решение

$$U_{\text{ч}}(\xi, t) = \frac{2\varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} \int_0^t e^{\varepsilon q(t-\tau)} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} (t - \tau) G(\xi, \tau) d\tau.$$

Общему решению соответствует выражение

$$U(\xi, t) = e^{\varepsilon qt} (V_1(\xi) \cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t + V_2(\xi) \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t) + \frac{2\varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} \int_0^t e^{\varepsilon q(t-\tau)} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} (t - \tau) G(\xi, \tau) d\tau. \quad (18)$$

Согласно начальным условиям (12):

$$V_1(\xi) = U_0(\xi), \quad V_2(\xi) = \frac{U_1(\xi) - U_0(\xi)\varepsilon q}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}}.$$

Тогда общему решению уравнения (11) соответствует нелинейное интегральное уравнение в образах Фурье:

$$U(\xi, t) = e^{\varepsilon qt} (U_0(\xi) \cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t + \frac{U_1(\xi) - U_0(\xi)\varepsilon q}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t) + \frac{2\varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} \int_0^t e^{\varepsilon q(t-\tau)} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} (t - \tau) G(\xi, \tau) d\tau. \quad (19)$$

1.3. Представление решения в случае, когда $\varepsilon^2 q^2 - 1 = 0$. Частное решение ищем в виде $U(\xi, t) = e^{\varepsilon qt} (V_1(\xi, t) + V_2(\xi, t)t) = V_1 U_1 + V_2 U_2$, где $U_1 = e^{\varepsilon qt}$, $U_2 = e^{\varepsilon qt} t$.

При подстановке в (11), получим систему из двух связанных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{V}_1 U_1 + \dot{V}_2 U_2 = 0, \\ \varepsilon q \dot{V}_1 U_1 + (1 + \varepsilon qt) \dot{V}_2 U_1 = -2\varepsilon G. \end{cases} \quad (20)$$

Тогда $\dot{V}_1 = 2\varepsilon e^{-\varepsilon qt} G(\xi, t)t$, $\dot{V}_2 = -2\varepsilon e^{-\varepsilon qt} G(\xi, t)$, откуда

$$V_1(\xi, t) = 2\varepsilon \int_0^t e^{-\varepsilon q\tau} G(\xi, \tau)\tau d\tau, \quad V_2(\xi, t) = -2\varepsilon \int_0^t e^{-\varepsilon q\tau} G(\xi, \tau)d\tau.$$

Тогда частное решение представимо в виде

$$U_q(\xi, t) = -2\varepsilon \int_0^t (t - \tau)e^{\varepsilon q(t-\tau)} G(\xi, \tau)d\tau,$$

когда общее можно найти по формуле

$$U(\xi, t) = V_1 e^{\varepsilon qt} + V_2 e^{\varepsilon qt} t - 2\varepsilon \int_0^t (t - \tau)e^{\varepsilon q(t-\tau)} G(\xi, \tau)d\tau.$$

Из начальных условий следует, что $V_1 = U_0$, $V_2 = U_1 - \varepsilon q U_0$. Тогда

$$U(\xi, t) = (1 - \varepsilon qt)e^{\varepsilon qt} U_0(\xi) + te^{\varepsilon qt} U_1(\xi) + 2\varepsilon \int_0^t (t - \tau)e^{\varepsilon q(t-\tau)} G(\xi, \tau)d\tau.$$

Рассмотрим наиболее интересный случай (19) из п. 1.2.

Возвратимся к исходной функции $u(x, t)$, применяя обратное преобразование Фурье $u(x, t) = (\mathcal{F}^{-1}U)(\xi, \tau)$ к случаю комплексных корней.

Запишем (19) в виде

$$U(\xi, t) = K_1(\xi, t)U_0(\xi) + K_2(\xi, t)U_1(\xi) + 2\varepsilon \int_0^1 K_3(\xi, \tau)G(\xi, \tau)d\xi.$$

Теорема 1. Задача Коши для нелинейного уравнения спинового горения представима в виде нелинейного интегрального уравнения типа свертки

$$u(x, t) = \int_{\mathbb{R}} (k_1(x-\xi, t)u_0(\xi) + k_2(x-\xi, t)u_1(\xi))d\xi + 2\mu\varepsilon \int_0^t \int_{\mathbb{R}} k_3(x-\xi, t)u^3(\xi, \tau)d\xi d\tau, \quad (21)$$

$$k_j(x, t) = \mathcal{F}^{-1}\{K_j(\xi, t)\}(x, t), \quad j = 1, 2, 3; \quad K_1(\xi, t) = e^{\varepsilon qt} \left[\cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t - \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} \right];$$

$$K_2(\xi, t) = K_3(\xi, t) = e^{\varepsilon qt} \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}}; \quad q = 1 - \rho^{-2}\xi^2 + \beta\rho^{-1}\xi^{2\alpha}.$$

Более подробно выкладки приведем для задачи на \mathbb{R}^2 .

2. МОДЕЛЬ СПИНОВОГО ГОРЕНИЯ НА ВСЕЙ ПЛОСКОСТИ

Аналогично рассматривается случай, когда область распространения фронта реакции вся плоскость \mathbb{R}^2 :

$$\ddot{u} + u = 2\varepsilon \left[\dot{u} (1 - \mu \dot{u}^2) + \frac{\lambda^2}{4\pi^2} \Delta \dot{u} + \frac{\beta\lambda}{2\pi} (-\Delta)^\alpha \dot{u} \right], \quad t > 0, \quad x, y \in \mathbb{R}, \quad (22)$$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y), \quad \dot{u}(x, y, 0) = u_1(x, y). \quad (23)$$

Для решения задачи (2)-(3) во всем пространстве применим двойное преобразование Фурье:

$$U(\xi, \eta, t) = (\mathcal{F}u)(\xi, \eta, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} u(x, y, t) e^{i(x\xi + \eta y)} dx dy. \quad (24)$$

Теорема 2. Задача Коши (2)-(3) для нелинейного уравнения спинового горения представима в виде нелинейного интегрального уравнения вида

$$\begin{aligned} u(x, y, t) = & \int_{\mathbb{R}^2} (k_1(x - \xi, y - \eta, t)u_0(\xi, \eta) + k_2(x - \xi, y - \eta, t)u_1(\xi, \eta)) d\xi d\eta - \\ & - 2\mu\varepsilon \int_0^t \int_{\mathbb{R}^2} k_3(x - \xi, y - \eta, t) \dot{u}^3(\xi, \eta, \tau) d\xi d\eta d\tau, \end{aligned} \quad (25)$$

где $k_j(x, y, t) = \mathcal{F}^{-1} \{K_j(\xi, \eta, t)\}(x, y, t)$, $j = 1, 2, 3$; $\xi = \rho \cos \theta$, $\eta = \rho \sin \theta$;

$$K_1(\xi, \eta, t) = e^{\varepsilon q t} \left[\cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t - \varepsilon q \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} \right];$$

$$K_2(\xi, \eta, t) = K_3(\xi, \eta, t) = e^{\varepsilon q t} \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}}; \quad q = 1 - \frac{\lambda^2}{4\pi^2} (\xi^2 + \eta^2) + \frac{\lambda\beta}{2\pi} (\xi^2 + \eta^2)^\alpha.$$

Доказательство. Для реакции во всем пространстве применим двойное преобразование Фурье (24). Тогда для (2)-(3) получим задачу Коши с коэффициентами, зависящими от параметров $\xi, \eta \in \mathbb{R}$:

$$LU \equiv U_{tt} - 2\varepsilon \left(1 - \frac{\lambda^2}{4\pi^2} (\xi^2 + \eta^2) + \frac{\lambda\beta}{2\pi} (\xi^2 + \eta^2)^\alpha \right) U_t + U = 2\varepsilon G(\xi, \eta, t), \quad (26)$$

$$U(\xi, \eta, 0) = U_0(\xi, \eta), \quad U_t(\xi, \eta, 0) = U_1(\xi, \eta),$$

где $G(\xi, \eta, t)$ обозначено преобразование Фурье $\mathcal{F}(-\mu \dot{u}^3)$, $\mu = \frac{4}{3}$.

Обозначим через $q(\rho) = 1 - \lambda^2(\xi^2 + \eta^2) + \lambda\beta(\xi^2 + \eta^2)^\alpha = 1 - \lambda^2\rho^2 + \lambda\beta\rho^{2\alpha}$, в полярной системе координат $\xi = \rho \cos \theta$, $\eta = \rho \sin \theta$.

Зависимость от t выберем в виде $U(\xi, \eta, t) = C(\xi, \eta)e^{\omega t}$, тогда характеристическое уравнение линейной части имеет вид:

$$\omega^2 - 2\varepsilon q\omega + 1 = 0. \quad (27)$$

Пусть $\varepsilon = 0$. Тогда:

$$\omega^2 + 1 = 0 \Rightarrow \omega = \pm i.$$

Решение примет вид:

$$U(\xi, \eta, t) = C_1(\xi, \eta) \cos t + C_2(\xi, \eta) \sin t. \quad (28)$$

Для корней характеристического уравнения (27):

$$\omega_{1,2} = \varepsilon q(\rho) \pm \sqrt{\varepsilon^2 q^2(\rho) - 1} \quad (29)$$

возможны три случая:

1. Корни кратные и действительные, если $\varepsilon^2 q^2(\rho) - 1 = 0$.
2. Корни различные и действительные, если $\varepsilon^2 q^2(\rho) - 1 > 0$.
3. Корни комплексные, если $\varepsilon^2 q^2(\rho) - 1 < 0$.

Первые два случая соответствуют затухающим (или растущим) решениям. Наибольший интерес представляют комплексные корни вида

$$\omega = Re\omega + iIm\omega = \omega_1 + i\omega_2. \text{ В полярной системе координат } \omega_1 = \varepsilon q(\rho), \omega_2 = \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2(\rho)}.$$

В случае комплексных корней (29) для характеристического уравнения (27) общее решение однородного уравнения (5) $LU = 0$ имеет вид:

$$\begin{aligned} U(\xi, \eta, t) &= e^{\omega_1 t} (C_1(\xi, \eta) \cos \omega_2 t + C_2(\xi, \eta) \sin \omega_2 t) = \\ &= C_1(\xi, \eta) U_1(\xi, \eta, t) + C_2(\xi, \eta) U_2(\xi, \eta, t), \end{aligned}$$

где $U_1(\xi, \eta, t) = e^{\omega_1 t} \cos \omega_2 t$ и $U_2(\xi, \eta, t) = e^{\omega_1 t} \sin \omega_2 t$ соответственно равны.

Тогда частное решение представимо в виде:

$$U_{\text{ч}} = C_1(t) e^{\omega_1 t} \cos \omega_2 t + C_2(t) e^{\omega_1 t} \sin \omega_2 t = C_1(t) U_1(t) + C_2(t) U_2(t).$$

Подставляя в (5), получим систему уравнений относительно $C_1(t)$, $C_2(t)$:

$$\begin{cases} C_1' U_1 + C_2' U_2 = 0 \\ C_1' U_1' + C_2' U_2' = 2\varepsilon G, \end{cases}$$

где $U_1' = e^{\omega_1 t} (\omega_1 \cos \omega_2 t - \omega_2 \sin \omega_2 t)$, $U_2' = e^{\omega_1 t} (\omega_1 \sin \omega_2 t + \omega_2 \cos \omega_2 t)$.

Найдем вид частного решения:

$$\begin{aligned}
 U_{\text{ч}}(t) &= 2\varepsilon \int_0^t \frac{U_1(\xi, \eta, \tau)U_2(\xi, \eta, t) - U_2(\xi, \eta, \tau)U_1(\xi, \eta, t)}{U_1U_2' - U_2U_1'} G(\xi, \eta, \tau) d\tau = \\
 &= 2\varepsilon \int_0^t \frac{e^{\omega_1(\xi, \eta)(t-\tau)} \sin(\omega_2(\xi, \eta)(t-\tau))}{\omega_2(\xi, \eta, \tau)} G(\xi, \eta, \tau) d\tau.
 \end{aligned}$$

Найдем коэффициенты C_1, C_2 из начальных условий:

$$U(\xi, \eta, 0) = C_1 = U_0(\xi, \eta),$$

$$U_t(\xi, \eta, 0) = C_1\omega_1 + C_2\omega_2 = U_1(\xi, \eta).$$

Тогда общее решение уравнения (3):

$$\begin{aligned}
 U(\xi, \eta, t) &= U_0 e^{\varepsilon q t} \cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t + \frac{U_1 - \varepsilon q U_0}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} e^{\varepsilon q t} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t + \\
 + 2\varepsilon \int_0^t \frac{e^{\varepsilon q(t-\tau)} \sin(\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}(t-\tau))}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} G(\xi, \eta, \tau) d\tau &= U_0 \left(e^{\varepsilon q t} \cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\varepsilon q}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} e^{\varepsilon q t} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t \right) + U_1 \frac{e^{\varepsilon q t} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} + \\
 &\quad + 2\varepsilon \int_0^t \frac{e^{\varepsilon q(t-\tau)} \sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}(t-\tau)}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} G(\xi, \eta, \tau) d\tau.
 \end{aligned}$$

Представление решения задачи Коши (5) с правой частью $2\varepsilon G(\xi, \eta, t)$ можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
 U(\xi, \eta, t) &= U_0(\xi, \eta)K_1(\xi, \eta, t) + U_1(\xi, \eta)K_2(\xi, \eta, t) + \\
 &\quad + 2\varepsilon \int_0^t K_3(\xi, \eta, \tau)G(\xi, \eta, \tau) d\tau,
 \end{aligned} \tag{30}$$

где $K_1(\xi, \eta, t) = e^{\varepsilon q t} \left[\cos \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t - \varepsilon q \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} \right];$

$$K_2(\xi, \eta, t) = K_3(\xi, \eta, t) = e^{\varepsilon q t} \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}}.$$

Применив к (30) обратное преобразование Фурье, с учетом теоремы о свертке $\mathcal{F}^{-1}\{KG\} = k * g$ [24], получим искомое представление (4).

В операторном виде $u = A(\dot{u}^3) + f$, где f отвечает начальным условиям и внешнему воздействию, A — оператор с ядром

$$k_3(x, y, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}_2} e^{\varepsilon q t} \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2}} e^{-i(x\xi + y\eta)} d\xi d\eta.$$

Для его вычисления перейдем к полярным координатам: $\xi = \rho \cos \theta$, $\eta = \rho \sin \theta$. Согласно [23] интегральное представление функции Бесселя $J_0(r\rho) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i\rho(x \cos \theta + y \sin \theta)} d\theta$, где $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$. Откуда $k_3(x, y, t) = \int_0^{\infty} e^{\varepsilon q(\rho)t} \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q^2(\rho)} t}{b(\rho)} J_0(r\rho) \rho d\rho$.

Если $u_0(x, y) = 0$, $u_1(x, y) = 0$, получаем нелинейное уравнение $u = A(\dot{u}^3)$ или $\dot{u} = A_t(\dot{u}^3)$, или, обозначив $v = \dot{u}$, получим уравнение $v = A_t v^3$ удобное для применения итерационных методов.

3. ПЕРИОДИЧЕСКИЙ СЛУЧАЙ УРАВНЕНИЯ СПИНОВОГО ГОРЕНИЯ

Рассмотрим модель безгазового спинового горения, когда область распространения реакции вещественная ось $x \in \mathbb{R}$ с периодическими условиями по пространственной переменной:

$$\begin{aligned} \ddot{u} + u &= 2\varepsilon [\dot{u} (1 - \mu \dot{u}^2) - \rho^{-2}(-\Delta)\dot{u} + \beta \rho^{-1}(-\Delta)^\alpha \dot{u}], \quad 0 < \alpha < 1, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \\ u(x + 2\pi, t) &= u(x, t), \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad \dot{u}(x, 0) = u_1(x), \end{aligned} \tag{31}$$

где $\rho = \frac{2\pi}{\lambda}$.

Задача на вещественной оси $x \in \mathbb{R}$ с условиями периодичности эквивалентна задаче на окружности, которая соответствует спиновым режимам горения тонкостенного цилиндра радиуса R [22].

Определим действие дробной степени лапласиана $(-\Delta)^\alpha$ с помощью действия оператора $-\Delta$ или с помощью дискретного преобразования Фурье W :

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(t) e^{inx} = Wu, \\ u_n &= W^{-1}u. \end{aligned}$$

Так как $(-\Delta)u = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(t)n^2e^{-inx}$, то действие дробного лапласиана определяется следующим образом:

$$(-\Delta)^\alpha \dot{u} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \dot{u}_n(t)n^{2\alpha}e^{inx}.$$

В образах Фурье для функций $u_n(t)$ получим:

$$Lu_n \equiv \ddot{u}_n - 2\varepsilon \left(1 - \frac{\lambda^2 n^2}{4\pi^2} + \frac{\beta\lambda}{2\pi} n^{2\alpha}\right) \dot{u}_n + u_n = 2\varepsilon g_n(t),$$

где $g_n = W^{-1}G$, $G(x, t) = -\sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{inx} = -\frac{4}{3}\dot{u}^3$.

Для уравнения $Lu_n = 0$ соответствующее характеристическое уравнение:

$$\omega_n^2 - 2\varepsilon q_n \omega_n + 1 = 0, \quad (32)$$

где $q_n = 1 - \frac{\lambda^2 n^2}{4\pi^2 R} + \frac{\beta\lambda}{2\pi} n^{2\alpha}$.

Построим решение задачи (31) для комплексных корней характеристического уравнения (32):

$$(\omega_{1,2})_n = \varepsilon \left(1 - \frac{\lambda^2 n^2}{4\pi^2} + \frac{\beta\lambda}{2\pi} n^{2\alpha}\right) \pm i\sqrt{1 - \varepsilon^2 \left(1 - \frac{\lambda^2 n^2}{4\pi^2} + \frac{\beta\lambda}{2\pi} n^{2\alpha}\right)^2},$$

где $(\omega_{1,2})_n = \text{Re}\omega_n \pm i\text{Im}\omega_n$, $\text{Re}\omega_n = \varepsilon q_n$, $\text{Im}\omega_n = \sqrt{1 - \varepsilon^2 q_n^2}$.

Лемма 2.

Решение начально-краевой задачи (31) для комплексных корней представимо в виде

$$u(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (K_1(x-s)u_0(s) + K_2(x-s)u_1(s)) ds - 2\mu\varepsilon \int_0^t \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} K_3(x-s, t-\tau)\dot{u}^3(s, \tau) ds d\tau, \quad (33)$$

где $(k_1)_n(t) = \frac{(\omega_2)_n e^{(\omega_2)_n t} + (\omega_1)_n e^{(\omega_1)_n t}}{(\omega_2)_n - (\omega_1)_n}$, $(k_2)_n(t) = \frac{e^{(\omega_2)_n t} + e^{(\omega_1)_n t}}{(\omega_2)_n - (\omega_1)_n}$,

$(k_3)_n(t) = \frac{\sin \sqrt{1 - \varepsilon^2 q_n^2} t}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 q_n^2}} e^{\varepsilon q_n t}$, $K_j(x, t) = W(k_j)_n(x, t)$, $j = 1, 2$,

$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} K_3(x-s, t-\tau)\dot{u}^3(s, \tau) ds d\tau = W(k_3)_n g_n$, $\varepsilon^2 q_n^2 - 1 < 0$.

Представление (33) позволяет находить вид приближенного решения в зависимости от параметров. Если искать решение уравнения (33) методом центральных многообразий, то приходим к утверждению работы [22] об асимптотическом представлении решения и его устойчивости.

4. РАЗРЕШИМОСТЬ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ОГРАНИЧЕННОЙ ОБЛАСТИ

Одним из важных вопросов является исследование разрешимости задачи феноменологического уравнения (существование и единственность) в случае круговых областей Ω (окружность, круг, кольцо) или произвольных ограниченных с гладкой границей.

Задачу спинового горения в ограниченной области $\Omega \in \mathbb{R}^2$ можно записать в виде следующей системы уравнений

$$\begin{aligned} \dot{u} &= v, \\ \dot{v} &= -u + 2\varepsilon \left[v \left(1 - \frac{4}{3}v^2 \right) - \frac{\lambda^2}{4\pi^2} (-\Delta)v + \frac{\beta\lambda}{2\pi} (-\Delta)^\alpha v \right]. \end{aligned} \quad (34)$$

Определим $A_0 v := -\Delta v$, $\mathcal{D}(A_0) = \left\{ v \in L_2(\Omega) : v \in C^\infty(\bar{\Omega}), \frac{\partial v}{\partial n} = 0(\partial\Omega) \right\}$. Обозначим через A расширение по Фридрихсу оператора A_0 . $A = A^* \geq 0$; $\{\lambda_k(A)\}$, $\{u_k(A)\}$, $k = 1, 2, \dots$ — система собственных значений и собственных функций оператора A , образующая ортонормированный базис в $L_2(\Omega)$, $\lambda_1 = 0$.

Обозначая через $\rho = \frac{2\pi}{\lambda}$ бифуркационный параметр, при $\xi = (u, v)^T$ система (34) запишется в виде задачи Коши для эволюционного нелинейного уравнения

$$\begin{aligned} \frac{d\xi}{dt} &= -\mathcal{A}\xi + \mathcal{N}(\xi), \quad t > 0, \\ \xi(0) &= \xi^0, \end{aligned} \quad (35)$$

где $\xi^0 = \begin{pmatrix} u^0 \\ v^0 \end{pmatrix}$, $\mathcal{A} := \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & B \end{pmatrix}$, $B := 2\varepsilon[\rho^{-2}A - \beta\rho^{-1}A^\alpha - I]$, $\mathcal{D}(B) = \mathcal{D}(A)$, $D(\mathcal{A}) = L_2(\Omega) \times D(A)$, $\mathcal{N}(\xi) := \begin{pmatrix} 0 \\ 8 \\ -\varepsilon\frac{8}{3}v^3 \end{pmatrix}$, $D(N) = L_2(\Omega) \times L_2(\Omega)$.

Покажем, что оператор B замкнут. Оператор A^α — A -ограничен (существует $a > 0$: $\|A^\alpha\| \leq a\|A\|$). Спектр A дискретен и $\lambda_1(A) = 0$. Для оператора Лапласа $A = -\Delta$ с условиями Неймана это условие выполняется. Тогда оператор $\rho^{-2}A - \beta\rho^{-1}A^\alpha$ самосопряжен и замкнут. Оператор I ограничен. Следовательно, $B = 2\varepsilon[\rho^{-2}A - \beta\rho^{-1}A^\alpha - I]$ замкнут. Множество собственных значений $\{\lambda_k\}$ с собственными функциями $\{u_k(A)\}$ — ортономированный в $L_2(\Omega)$ базис. Спектр

$\sigma(B) = \{2\varepsilon(\rho^{-2}\lambda_k - \beta\rho^{-1}\lambda_k^2 - 1)\}_{k=1}^{\infty}$, нижняя грань оператора B вычисляется по формуле

$$-\gamma := \min_k \{2\varepsilon [\rho^{-2}\lambda_k(A) - \beta\rho^{-1}\lambda_k^{\alpha}(A) - 1]\} \quad (\gamma > 0). \quad (36)$$

Следовательно,

$$(Bv, v) \geq -\gamma(v, v) \quad \forall v \in D(A).$$

Итак, $\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -B \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$ замкнутый, как сумма замкнутого $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -B \end{pmatrix}$ и ограниченного $\begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$.

Приведем оценку для нелинейного слагаемого $\mathcal{N}(\xi) = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{8}{3}\varepsilon v^3 \end{pmatrix}$.

$$\|\mathcal{N}(\xi_1) - \mathcal{N}(\xi_2)\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{8}{3}\varepsilon(v_1^3 - v_2^3) \end{pmatrix} \right\|^2 = \frac{64\varepsilon^2}{9} \|v_1^3 - v_2^3\|_{L_2(\Omega)}^2, \quad v_i = v(\xi_i), \quad i = 1, 2.$$

$$\begin{aligned} \|v_1^3 - v_2^3\|_{L_2(\Omega)} &= \left(\int_{\Omega} |v_1 - v_2|^2 \cdot (v_1^2 + v_1v_2 + v_2^2)^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \leq \sup_{\Omega} |v_1^2 + v_1v_2 + v_2^2| \cdot \|v_1 - v_2\|_{L_2} \leq \\ &\leq \frac{3}{2} \sup(|v_1|^2 + |v_2|^2) \|v_1 - v_2\|_{L_2} \leq a(\|v_1\|_{L_{\infty}}^2 + \|v_2\|_{L_{\infty}}^2) \|v_1 - v_2\|_{L_2}. \end{aligned}$$

Докажем секториальность оператора $\mathcal{A} := \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & B \end{pmatrix}$. Для этого оценим действительную и мнимую части:

$$Re(\mathcal{A}\xi, \xi) = (Bv, v) \geq -\gamma\|v\|^2,$$

$$|Im(\mathcal{A}\xi, \xi)| = 2|Im(u, v)| \leq 2\|u\| \cdot \|v\|.$$

Для любого $\delta > 0$, $\varepsilon > 0$ справедливо:

$$\begin{aligned} Re(\mathcal{A}\xi, \xi) - \delta|Im(\mathcal{A}\xi, \xi)| &\geq -\gamma\|v\|^2 - 2\delta\|u\| \cdot \|v\| \geq \left| 2\|u\| \cdot \|v\| \leq \frac{1}{\varepsilon}\|u\|^2 + \varepsilon\|v\|^2 - 2\delta\|u\| \cdot \|v\| \right| \leq \\ &\leq -\gamma\|v\|^2 - \frac{\delta}{\varepsilon}\|u\|^2 - \delta\varepsilon\|v\|^2 = \\ &= - \left[(\gamma + \delta\varepsilon)\|v\|^2 + \frac{\delta}{\varepsilon}\|u\|^2 \right] = - \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4\delta^2}}{2} \|\xi\|^2 = -\gamma(\delta) \|\xi\|^2, \end{aligned}$$

где $2\|u\| \cdot \|v\| \leq \frac{1}{\varepsilon}\|u\|^2 + \varepsilon\|v\|^2 \quad \forall \varepsilon > 0$, где $\varepsilon = \frac{2\delta}{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4\delta^2}}$, $\frac{\delta}{\varepsilon} = \gamma + \delta\varepsilon$.

Тогда

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}((\mathcal{A} + \gamma(\delta))\xi, \xi) - \delta|\operatorname{Im}((\mathcal{A} + \gamma(\delta))\xi, \xi)| &\geq 0, \\ \frac{|\operatorname{Im}((\mathcal{A} + \gamma(\delta))\xi, \xi)|}{\operatorname{Re}((\mathcal{A} + \gamma(\delta))\xi, \xi)} &\leq \frac{1}{\delta}, \\ \mathcal{W}\left(\mathcal{A} + \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4\delta^2}}{2}\right) &\subset S\left(\overline{\operatorname{arctg}\frac{1}{\delta}}\right), \end{aligned}$$

где \mathcal{W} — числовая область значений оператора \mathcal{A} со сдвигом $\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4\delta^2}}{2}$ и сектором $\operatorname{arctg}\frac{1}{\delta}$.

Отсюда следует, что огибающую семейства кривых $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ можно построить только в области $\{x \leq 0\}$. В области $\{x \geq 0\}$ это будет полоса $\{x \geq 0, |y| \leq 1\}$.

Тогда $F(x, y, \delta) = y - \frac{1}{\delta} \left(x + \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4\delta^2}}{2} \right):$

$$\begin{cases} y = \frac{1}{\delta} \left(x + \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4\delta^2}}{2} \right) \\ \frac{1}{\delta^2} \left(x + \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4\delta^2}}{2} \right)^2 - \frac{1}{\delta} \left(\frac{8\gamma}{4\sqrt{\gamma^2 + 4\delta^2}} \right) = 0, \end{cases}$$

откуда $\left(x + \frac{\delta}{2}\right)^2 \cdot \left(\frac{\delta}{2}\right)^{-2} + y^2 = 1$.

Докажем максимальность оператора \mathcal{A} . Она следует из того, что $\rho(A) \cap \{\lambda < -\gamma\} \neq \emptyset$ (т. е. существует хотя бы одна регулярная точка на $\operatorname{Re}\lambda < 0$): $\mathcal{A} + \lambda I = \begin{pmatrix} \lambda & -I \\ I & B + \lambda \end{pmatrix}$.

Проведя факторизацию Шура-Фробениуса

$$A + \lambda I = \begin{pmatrix} I & -\mathcal{R}_\lambda(B) \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda + \mathcal{R}_\lambda(B) & 0 \\ 0 & B + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ \mathcal{R}_\lambda(B) & I \end{pmatrix},$$

делаем вывод, что существует регулярная точка $\lambda + \mathcal{R}_\lambda(B) \gg 0, B + \lambda \gg 0$ при $\lambda > \gamma$.

Таким образом, оператор $-\mathcal{A}$ — генератор голоморфной полугруппы $U(t)$:

$$\|U(t)\| \leq M e^{-\gamma t}, \quad \forall t \geq 0.$$

Тип полугруппы может быть уточнен через исследование спектра \mathcal{A} .

Из полученных оценок следует

Утверждение 2. Задача безгазового спинового горения (34) для ограниченных областей локально разрешима.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведен обзор по различным математическим моделям теории горения, начиная с теоретических основ, заложенных еще Т. П. Ивлевой и А. Г. Мержановым, заканчивая современными исследованиями и работами авторов.

Основной является модель спинового горения с псевдодифференциальным оператором $(-\Delta)^\alpha$, $0 < \alpha < 1$, которая обобщает модель, предложенную Я. Б. Зельдовичем совместно с А. П. Алдушиным и Б. А. Маломедом на окружности. В работе задача исследуется на \mathbb{R} , \mathbb{R}^2 и на \mathbb{R} в классе периодических функций. Уравнение на вещественной оси \mathbb{R} сравнивается с модель безгазового спинового горения на всей плоскости и соответствующее ей интегральное представление задачи, полученное с использованием преобразования Фурье по пространственным переменным.

Для модели с периодическими условиями по пространственной переменной установлена согласованность с моделью горения на окружности, которая соответствует спиновым режимам горения тонкостенного цилиндра. Для последней с помощью дискретного преобразования Фурье получено представление задачи в виде нелинейного интегрального уравнения типа свертки.

Показано, что исходная задача может быть записана в операторной форме и доказано для ограниченной области, что ее оператор является генератором голоморфной полугруппы. Исследованы условия максимальности, секториальности оператора. Откуда следует локальная разрешимость задачи для ограниченных областей.

Дальнейший интерес представляет рассмотрение задачи спинового горения на вещественной оси с запаздыванием по пространственной переменной или по времени. Исследование соответствующих спектральных задач и построение решения итерационным методом на базе интегрального представления.

Авторы благодарят Д. А. Забору за ценные советы и обсуждение вопроса локальной разрешимости для ограниченных областей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алдушин, А. П., Зельдович, Я. Б., Маломед, Б. А. К феноменологической теории спинового горения // ДАН СССР. — 1980. — Т. 251, №5. — С. 1102–1106.
ALDUSHIN, A., ZELDOVICH, J. & MALOMED, B. (1980) A Remark on the Phenomenological Theory of Spin Combustion. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*. 251 (5). Pp. 1102–1106.
2. Ивлева, Т. П., Мержанов, А. Г., Шкадинский, К. Г. Математическая модель спинового горения // Докл. АН СССР. — 1978. — Т. 239, №5. — С. 1086–1088.

- IVLEVA, T., MERZHANOV, A. & SCHKADINSKY, K. (1978) Mathematical model of spin combustion. *Sov. Phys. Dokl.* 239 (5). Pp. 1086–1088.
3. Бабаджанян, А. С., Вольперт, В. А., Вольперт, Вл. А., Давтян, С. П., Меграбова, И. Н Устойчивость фронтальных режимов протекания экзотермической реакции при радиально-симметричной подаче реагентов // Черноголовка. — 1989. — С. 27–36.
- BABADJANIAN, A. & VOLPERT, V. (1978) Formation of a layered product after a combustion wave. *Physics of combustion and explosion.* Pp. 27–36.
4. Ivleva, T. & MERZHANOV, A. (2003) Three-dimensional modes of unsteady solid-flame combustion. *Chaos (Woodbury, N.Y.).* 13 (1). Pp. 80–86.
5. Зельдович, Я. Б. Теория горения и детонации газов / Я. Б. Зельдович. — Москва; Ленинград: АН СССР, 1944. — 71 с.
- ZELDOVICH, J. (1944) *Theory of combustion and detonation of gases.* Moscow: Nauka.
6. BARENBLATT, G., ZELDOVICH, J. & ISTRATOV, I. (1962) On thermal-diffusive stability of a laminar flame. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics.* 4. Pp. 21–26.
7. GUBERNOV, A., KOLOBOV, A., POLEZHAEV, H. & SIDHU, H. (2012) Stability of combustion waves in the Zeldovich–Linan model. *Combustion and Flame.* 159 (3). Pp. 1185–1196.
8. CHEN, H., LAI, G. & SHENG, W. (2020) Detonation wave solution to the simplified combustion model for the spherically symmetric Euler equations. *AMS Subject Classification.* Pp. 15.
9. Гендугов, В. М. Модифицированная модель Зельдовича-Неймана-Деринга и ее особенности // Вестн. моск. ун-та. Сер. 1, Математика. Механика. — 2008. — 1. — С. 58–65.
- GENDUGOV, V. (2008) Modified Zeldovich-Neumann-Dering model and its features. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 1, Mathematic.* 1. Pp. 58–65.
10. NOVOSHILOV, B. (1993) The theory of surface spin combustion. *Pure & Appl. Chem.* 65 (2). Pp. 309–316.

11. BHARAT, N, MISHRA, D. & GUNDAWAR, M. (2020) Effect of Heat Loss on Propagation Limits of Combustion Fronts. *Combustion Science and Technology*. 192 (3). Pp. 391–415.
12. Алдушин, А. П., Маломед, Б. А. Феноменологическое описание нестационарных неоднородных волн горения // Физ. гор. и взрыва. — 1981. — 17(1). — С. 3–12.
ALDUSHIN, A. & MALOMED, B. (1981) Phenomenological description of non-stationary inhomogeneous combustion waves. *Physics of combustion and explosion*. 17 (1). Pp. 3–12.
13. Зельдович, Я. Б., Маломед, Б. А. Сложные волновые режимы в распределенных динамических системах (обзор) // Известия высших учебных заведений. — 1982. — XXV(6). — С. 591–618.
ZELDOVICH, J. & MALOMED, B. (1982) Complex wave modes in distributed dynamic systems (overview). *Izvestiya vischich uchebnich zavedenii*. XXV (6). Pp. 591–618.
14. Мищенко, Е. Ф. Автоволновые процессы в нелинейных средах с диффузией / Е. Ф. Мищенко, В. А. Садовничий, А. Ю. Колесов, Н. Х. Розов. — М.: Физматлит, 2005. — 432 с.
MISCHENKO, E., SADOVNICHY, V., KOLESOV, A. AND ROZOV, N. (2005) *Autowave processes in nonlinear media with diffusion*. Moscow: Fizmatlit.
15. Белан, Е. П. О динамике бегущих волн феноменологического уравнения спинового горения // Дифференциальные уравнения. — 2005. — 41. — С. 857.
BELAN, E. (2005) On the dynamics of the phenomenological equation of spin combustion. *Differential equations*. 41. Pp. 857.
16. Самойленко, А. М., Белан, Е. П. Динамика бегущих волн феноменологического уравнения спинового горения // Доклады РАН. — 2006. — 406(6). — С. 738–741.
SAMOILENKO, A. & BELAN, E. (2006) Dynamics of traveling waves of the phenomenological equation of spin combustion. *Reports of the Russian Academy of Sciences*. 406 (6). Pp. 738–741.
17. Колесов, А. Ю., Розов, Н. Х. Явление буферности в теории горения // ДАН. — 2004. — 396(2). — С. 170–173.
KOLESOV, A. & ROZOV, N. (2004) The buffer phenomenon in combustion theory. *Dokl. Math.* 396 (2). Pp. 170–173.

18. Клевчук І. І. Біфуркація автоколивань параболічних систем із аргументом, що запізнюється, та малою дифузією // Нелінійні коливання. — 2016. — 19(3). — С. .
KLEVCHUK, I. (2016) Bifurcation of self-oscillations of parabolic systems with a recognizable argument and small diffusion. *Nonlinear oscillations*. 19 (3). Pp. .
19. BUCKMASTER, J., CLAVIN, P. & LINAN, A. (2005) Combustion theory and modeling. *Proceedings of the Combustion Institute*. 30 (1). Pp. 1–19.
20. Хазова, Ю. А., Гребенева, А. А. Периодическое решение уравнения спинового горения // Международная конференция И. Г Петровского: Тезисы докладов. — 2022. — С. 193–194.
KHAZOVA, YU. & GREBENEVA, A. (2022) Periodic solution of the spin combustion equation. *International Conference dedicated to I. G. Petrovskii, XXIV Joint Session*. Pp. 193–194.
21. Гребенева, А. А., Хазова, Ю. А. Некоторые задачи спинового горения // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сборник трудов Международной научной конференции, Воронеж, 12–14 декабря 2022 года. — 2022. — С. 37–42.
GREBENEVA, A. & KHAZOVA, YU. (2022) Spin combustion regimes. *Applied mathematics and informatics in the modern world. Materials of the All-Russian Scientific and Practical Conference in Krasnodar*. Pp. 37–42.
22. Хазова, Ю. А., Гребенева, А. А. Анализ устойчивости и формы приближенных периодических решений уравнения спинового горения // Таврический вестник информатики и математики. — 2022. — 1(56). — С. 75–87.
KHAZOVA, YU. & GREBENEVA, A. (2022) Analysis of stability and form of approximate periodic solutions of the equation of spin combustion. *TVIM*. 1 (56). Pp. 75–87.
23. KORENEV, B. (1971) *An Introduction to the Theory of Bessel Functions*. Moscow: Nauka.
24. GAKHOV, F. & CHERSKY, YU. (1978) *Convolution Type Equations*. Moscow: Nauka.

УДК: 004.02, 004.051, 004.415.2

MSC2010: 68T99

РАЗРАБОТКА ГИБРИДНОЙ СИСТЕМЫ РЕКОМЕНДАЦИЙ

© М. Г. Козлова, М. С. Германчук

КРЫМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. В. И. ВЕРНАДСКОГО

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ПРОСП. АКАДЕМИКА ВЕРНАДСКОГО, 4, СИМФЕРОПОЛЬ, 295007, РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

E-MAIL: *kozlovamg@cfuv.ru, germanchukms@cfuv.ru*

THE DEVELOPMENT OF A HYBRID RECOMMENDATION SYSTEM.

Kozlova M. G., Germanchuk M. S.

Abstract. Recommender systems are programs for finding objects that respond to user's interests. Most often, recommender systems are used in Internet networks for commercial purposes. To attract users to the website, the recommender system is adapted to their tastes and preferences. "Intelligence-of recommendations allows users to find information that interests the them. Based on the type of objects, the audience coverage, the method of obtaining information about objects and users, as well as the required accuracy and completeness of the recommendations, methods and algorithms on which the system of recommendations is based are selected. The most common methods include statistical methods, collaborative filtering techniques, content filtering methods, contextual methods and hybrid methods. Each of these methods has its advantages and disadvantages. Some of the problems that are involved with developing recommender systems are difficult to solve within a single method, so hybrid recommender systems are of interest. The optimal combination of methods allows to develop the most effective system of recommendations. For example, combining collaborative filtering and content filtering takes advantage of these methods individually. Content filtering compares the content of objects with the interests of the user, but does not take into account the quality of these objects. In collaborative filtering recommendations are made depending on the ratings of users ratings (estimates). Therefore, the user will not be offered objects with a low rating. Also, collaborative filtering gives the user atypical objects that are not included in the list of interests of the user, but could please him. Thus, the problem of limiting the range of interests of the user is solved. The content filtering method, in turn, solves the problem of new objects. If the object has not been rated by any user yet, it will not be included in any list of collaborative filtering recommendations. However, if you add an object to the database and specify some information about it in the form of text (or if the object itself is text), content filtering will be able to identify the most similar objects and recommend it to users who chose such objects. The purpose of the work: to identify the main problems of recommender systems and methods of their solution; to develop a hybrid system of recommendations, using as the basic methods of collaborative filtering

and content filtering; using metrics of accuracy and completeness, to determine the most effective method of composition methods.

Keywords: *hybrid recommender system, collaborative filtering techniques, content filtering method, accuracy and completeness criteria*

ВВЕДЕНИЕ

Системы рекомендаций (СР) — это программы для поиска объектов, которые отвечают интересам пользователя. В частности, в СР прогнозируются оценки, которые с наибольшей вероятностью данный пользователь поставит определенному объекту.

Чаще всего СР используются в Интернет-сетях для коммерческих целей. Для привлечения пользователя на веб-сайт система рекомендаций адаптируется под его вкусы и предпочтения. «Интеллектуальность» выдачи рекомендаций позволяет находить информацию, которая интересует пользователя.

Исходя из типа объектов, охвата аудитории, способа получения информации об объектах и пользователях, а также требуемой точности и полноты рекомендаций, выбираются методы и алгоритмы, на основе которых строится СР. К наиболее распространенным методам относят: статистические методы, метод коллаборативной фильтрации (КФ), методы фильтрации по содержанию (ФС), контекстные методы, гибридные и др.

Каждый из перечисленных методов имеет свои преимущества и недостатки. Некоторые проблемы, связанные с разработкой СР, трудно решить, используя один метод, поэтому интерес представляют гибридные СР. Оптимальное комбинирование методов позволяет разработать наиболее эффективную СР. Например, в объединении КФ и ФС реализуются преимущества, присущие данным методам по отдельности. В методе ФС сравнивается содержание объектов с интересами пользователя, но не учитывается качество этих объектов. В КФ вырабатываются рекомендации в зависимости от рейтинга оценок, поставленных пользователями. Следовательно, пользователю не будут предлагаться объекты с низким рейтингом. Также КФ выдает пользователю нетипичные объекты, которые не входят в список интересов пользователя, но могли бы ему понравиться. Таким образом, решается проблема ограничения круга интересов пользователя.

Метод ФС, в свою очередь, позволяет решить проблему новых объектов. Если объект еще не оценил никто из пользователей, то он не попадет ни в один список рекомендаций КФ. Но если при добавлении объекта в базу данных указывать о нем какую-то информацию в виде текста (или если этот объект сам является текстовым),

то ФС сможет определить наиболее похожие на него объекты и рекомендовать его пользователям, которые выбирали подобные объекты.

Цель работы: выделить основные проблемы СР и методы их решения; разработать гибридную СР, используя в качестве базовых методы коллаборативной фильтрации и фильтрации по содержанию; используя метрики точности и полноты, определить наиболее эффективный способ композиции методов.

1. ОБЗОР РЕЗУЛЬТАТОВ ПО РАЗРАБОТКЕ СИСТЕМ РЕКОМЕНДАЦИЙ

Отметим, что уже более 25 лет ведутся исследования по разработке и усовершенствованию СР. Чтобы сделать их наиболее точными и быстрыми, используются различные методы и алгоритмы; без изучения СР в настоящее время не обходится ни один курс машинного обучения. Одними из первых учитывать предпочтения пользователей стали разработчики цифрового видеомэгнитофона TiVo, автоматически записывающего интересные для пользователя передачи. В основу системы рекомендаций был предложен так называемый метод коллаборативной фильтрации, который учитывал сходство предпочтений пользователей. Если на различных устройствах TiVo различные пользователи выбирали, как правило, для просмотра одни и те же программы, а потом один пользователь начинал регулярно смотреть какую-либо новую передачу, то эту передачу рекомендовали и другим пользователям. Сбор данных для выработки рекомендаций достигался с помощью учета, какие кнопки и в какое время нажимал пользователь. Данные отправлялись на центральный сервер, где и подсчитывались результаты [1].

В разработку СР огромный вклад внесла компания проката DVD дисков Netflix. Компания активно занималась усовершенствованием коллаборативной фильтрации, устраивая открытые соревнования на лучший алгоритм выдачи рекомендаций [2].

Со временем стало очевидно, что для качественной рекомендации недостаточно одной лишь коллаборативной фильтрации. Поэтому многие ведущие компании перешли к методам, использующим содержание объектов или их качественное описание. Например, при рекомендации фильма учитывался не только его рейтинг среди других пользователей, но и жанр, режиссер, год выхода, страна-производитель и т. д.

Следующим шагом для развития систем рекомендаций стало открытие, что для пользователя имеет значение не только фильтрация по предпочтениям пользователей со схожими вкусами, но и собственное ситуационное настроение и окружение. То есть СР должна учитывать контекст, в котором вырабатывается рекомендация.

Это совершенно новый подход, учитывающий поведение пользователя и являющийся наиболее интерактивным.

Исследования по теме СР, классификацию, подробное описание алгоритмов можно найти в работах [3–6]. Углубленный анализ алгоритмов коллаборативной фильтрации содержится в работах [7, 8, 10]. Об оценке эффективности систем рекомендаций изложено в статье [9]. Из отечественных авторов вклад в изучение систем рекомендаций внесли К. В. Воронцов, Ю. С. Нефедова, Е. А. Кольчугина [11–13]. О современных направлениях в разработке систем рекомендаций можно найти информацию на портале Хабрахабр.

2. МЕТОД КОЛЛАБОРАТИВНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ

Метод коллаборативной фильтрации основывается на оценках количества просмотров, при этом содержимое объектов и профиль пользователя не влияют на результат. Для того, чтобы предложить пользователю список рекомендаций, КФ определяет его «соседей» по интересам и использует их оценки для других объектов. Таким образом, идея КФ заключается в том, что пользователи, которым прежде нравились одинаковые объекты, в будущем также будут одинаково оценивать другие объекты. Благодаря этому предположению СР может с высокой вероятностью определять, какую оценку пользователь поставит некоторому объекту [14]. *Преимущества метода:* для каждого пользователя вырабатываются индивидуальные рекомендации; учитывается качество объектов; для работы метода необходимы только данные об оценках пользователей. *Недостатки метода:* невозможно выдать рекомендацию новым пользователям и рекомендовать новые объекты; проблема масштабируемости и разреженности данных.

Рассмотрим memory-based алгоритм, основанный на сходстве пользователей [3, 14, 15]. Пусть $U=(u_1, u_2, \dots, u_n)$ — множество всех пользователей, $O=(o_1, o_2, \dots, o_m)$ — множество всех объектов. Отношение пользователя $u \in U$ к объектам можно определить в виде вектора оценок $r_u=(r_{u_1}, r_{u_2}, \dots, r_{u_n})$, который представляет собой точку в пространстве M^n , где M — множество оценок, допустимых в используемой шкале. Пусть R — матрица оценок всех пользователей для всех объектов:

$$R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1m} \\ r_{21} & r_{22} & \dots & r_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{n1} & r_{n2} & \dots & r_{nm} \end{pmatrix}$$

Строки матрицы — векторы оценок пользователей из множества U , столбцы — оценки объектам из множества O . Каждый элемент матрицы r_{ij} ($i = \overline{1, n}, j = \overline{1, m}$), представляет собой оценку пользователя u_i объекта o_j .

Чтобы найти приближенную оценку \hat{r}_{ij} , которую пользователь u_i поставит объекту o_j , необходимо выполнить следующие операции:

1. Найти множество пользователей U_j , уже оценивших объект o_j . Для каждого пользователя из множества U_j определить насколько его оценки совпадают с оценками пользователя u_i . В работе используется косинусная мера схожести:

$$\text{sim}(u_i, u_k) = \cos(r_{u_i}, r_{u_k}) = \frac{r_{u_i} r_{u_k}}{\|r_{u_i}\|_2 \|r_{u_k}\|_2} = \frac{\sum_{j=1}^m (r_{ij} r_{kj})}{\sqrt{\sum_{j=1}^m r_{ij}^2} \sqrt{\sum_{j=1}^m r_{kj}^2}} \in [0, 1], \quad (1)$$

Альтернативой мере схожести (1) являются расстояние Хемминга, расстояние Евклида, коэффициент корреляции Пирсона, коэффициент Жаккара и другие.

2. Из множества U_j выбрать наиболее похожих на u_i пользователей.

3. Определить оценку \hat{r}_{ij} , используя оценки выбранных пользователей, которые они поставили объекту o_j . Обычно используют оценку:

$$\hat{r}_{ij} = \bar{r}_{u_i} + \frac{\sum_{u \in U_{\text{sim}}} (r_{u_i} - \bar{r}_u) \cdot \text{sim}(u_i, u)}{\sum_{u \in U_{\text{sim}}} |\text{sim}(u_i, u)|}, \quad (2)$$

где \bar{r}_{ij} — средняя оценка пользователя u_i (соответственно \bar{r}_u — средняя оценка пользователя u).

Для составления рекомендации необходимо найти оценки для всех объектов, которые пользователь еще не оценил. Затем нужно вывести объекты с максимальными прогнозируемыми оценками.

3. МЕТОД ФИЛЬТРАЦИИ ПО СОДЕРЖИМОМУ

Методы фильтрации по содержанию основываются на сравнении объектов по их содержанию (или описанию) с интересами пользователя. Если пользователь высоко оценил какой-либо объект, то он скорее всего заинтересуется и другими схожими по содержанию объектами. *Преимущества методов:* каждому пользователю выдаются индивидуальные рекомендации, учитываются интересы пользователя, возможность распределять объекты по тематикам. *Недостатки методов:* сложность работы с нетекстовыми объектами; не учитывается качество объектов; со временем устанавливаются некоторые «границы интересов» пользователя и рекомендуется только та информация, которая попадает в эту базу предпочтений [16].

Методы, основанные на содержимом, подходят для рекомендации текстовых документов и объектов, описанных с помощью текста (например, можно использовать

аннотации, рецензии, комментарии, теги). Отличительной особенностью является то, что полученные рекомендации всегда учитывают интересы пользователя.

Основная идея фильтрации по содержимому: определить профиль пользователя и найти объекты, которые ему соответствуют. Если профиль пользователя и содержание объектов – это множества ключевых слов, то их близость определяется с помощью коэффициентов сходства двух множеств (коэффициент Жаккара, коэффициент Дайса и др.). Пусть KW_1 и KW_2 – два множества ключевых слов. Тогда коэффициент Жаккара примет вид:

$$jaccard(KW_1, KW_2) = \frac{|KW_1 \cap KW_2|}{|KW_1 \cup KW_2|}, \quad (3)$$

4. СПОСОБЫ КОМБИНИРОВАНИЯ В СИСТЕМАХ РЕКОМЕНДАЦИЙ

Следуя [14], выделим следующие способы совместного использования методов.

1. Монолитная структура комбинации методов. В СР с монолитной структурой несколько методов обработки данных объединяются в один модуль. Методы неразрывно связаны между собой и выдают один общий список рекомендаций.

2. Параллельная структура комбинации методов. В таких СР данные о пользователях и объектах поступают отдельно в каждый модуль. Разные методы разрабатывают рекомендации независимо друг от друга.

3. Конвейерная структура комбинации методов. Конвейерная организация СР предполагает последовательную обработку данных различными методами и алгоритмами. Результат работы каждого метода используется в вычислениях следующих по очереди методов.

Способ комбинирования методов выбирается для каждого набора методов отдельно в зависимости от их типа и задач СР.

Для разрабатываемой гибридной СР была выбрана параллельная структура комбинации методов. Архитектура системы схематично изображена на рис. 1.

Каждым методом, независимо друг от друга, вычисляются рекомендации для заданного пользователя. Метод КФ получает на вход массив оценок R и высчитывает для заданного пользователя приближенные оценки объектов, которые еще не были оценены. Результатом работы первого метода является упорядоченный по убыванию массив рекомендаций, включающий в себя название объектов и их оценки.

Для метода ФС на вход подается массив оценок данного пользователя и массив ключевых слов KW . Результатом работы второго метода является массив рекомендаций, где объекты расположены в порядке убывания полезности для пользователя.

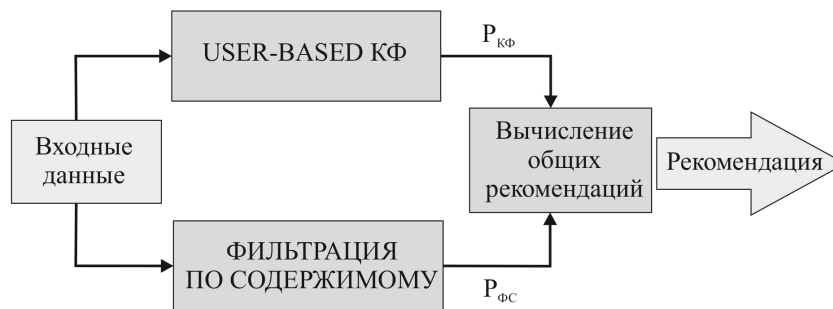


Рис. 1. Архитектура СР

Далее элементы полученных массивов и поступают в блок вычисления общих рекомендаций. Окончательный список рекомендаций составляется одним из следующих способов:

- возвращаются все полученные рекомендации (объединение списков рекомендаций);
- возвращаются объекты, попавшие в оба списка рекомендаций (пересечение списков рекомендаций);
- среди рекомендаций выбираются объекты с наивысшей средней оценкой по всем модулям;
- для каждого метода устанавливается свое пороговое значение, отсеивающее объекты с низким рейтингом.

Таким образом, СР основывается не только на сходстве пользователей, но и на интересах конкретного пользователя. В список рекомендаций попадают объекты с высоким прогнозируемым рейтингом, близкие по содержанию к интересам пользователя, неожиданные рекомендации и новые объекты, которые еще никто не оценил.

5. ТЕСТИРОВАНИЕ

5.1. Критерии точности и полноты системы рекомендаций

Данный способ оценивания эффективности СР используется в тех случаях, когда нужно оценить разницу между реальными группами объектов и группами, образованными СР [17]. В таких системах под группами обычно подразумеваются два набора объектов: P — положительные (полезные) и N — отрицательные (бесполезные). Следовательно, можно выделить четыре типа исходов (ошибок или их отсутствия) для рекомендации r некоторого объекта obj , которые представлены в табл. 1.

Сравнивая величины tp , tn , fp , fn можно получить различные показатели эффективности для СР:

Таблица 1. Результаты прогнозирования

	$obj \in P$	$obj \in N$
$r_{obj} \in P$	Верно положительные (tp)	Ложно положительные (fp)
$r_{obj} \in N$	Ложно отрицательные (fn)	Верно отрицательные (tn)

- точность (precision): $P = \frac{tp}{(tp+fp)}$, $P \in [0; 1]$;
- полнота (recall): $R = \frac{tp}{(tp+fn)}$, $R \in [0; 1]$.

Точность показывает, сколько в списке рекомендаций действительно полезных объектов по отношению ко всему списку рекомендаций. Полнота же отражает, все ли действительно полезные объекты пошли в список рекомендаций. Практика показывает, что критерии точности и полноты противоречивы. Как правило, при увеличении точности полнота понижается, и наоборот. Однозначно определить качество работы системы невозможно по той причине, что тестовая выборка не содержит оценок для всех объектов. Поэтому судить о её эффективности можно только отследив, попали ли объекты из тестовой выборки в список рекомендованных объектов.

Для тестирования были использованы базы данных веб-сайта MovieLens, собранные GroupLensResearch. Объектами в CP выступают кинофильмы, ключевыми словами объектов – жанры и «тэги» к фильмам, а шкала оценивания равна от 1 до 5. База данных содержит 100 000 оценок от 943 пользователей для 1682 фильмов. Данные были разделены на обучающую (80 000 оценок) и тестовую (20 000 оценок) выборки. Прежде чем давать оценку точности и полноты всей гибридной системы рекомендаций, следует отдельно оценить методы, которые в нее входят: метод коллаборативной фильтрации и метод фильтрации по содержанию.

5.2. Оценка эффективности метода КФ

При использовании метода КФ на вход передается массив оценок и имя (id) пользователя. Процедура КФ рассчитывает для пользователя прогнозируемые оценки объектов, которые еще не оценены. При вычислении оценок используются оценки k ближайших соседей по интересам пользователя. Результатом работы этого метода является упорядоченный по убыванию список рекомендаций, включающий в себя название объектов и их прогнозируемые оценки. В массив рекомендаций входят только те объекты, оценки которых выше или равны параметру $rmin$ (минимальной положительной оценке).

Эффективность данного метода зависит от количества оценок и пользователей в базе данных, а также от количества ближайших соседей пользователя k и минимальной положительной оценки $rmin$. На рис. 2 изображена зависимость точности

и полноты КФ от параметров k (зеленым цветом – круги) и $rmin$ (синим цветом – ромбы).

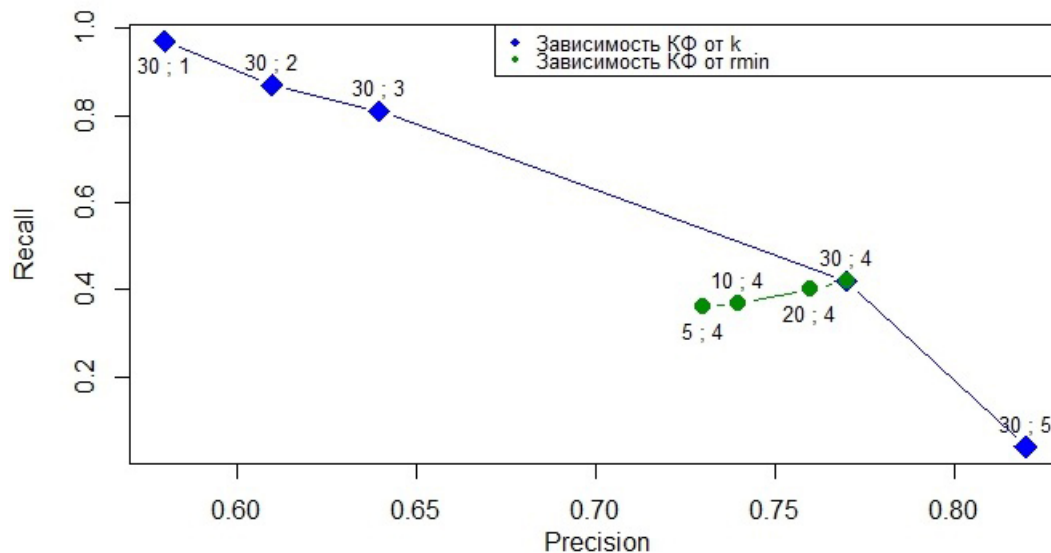


Рис. 2. Зависимость точности и полноты метода КФ от параметров ($k; rmin$)

Полученные оценки точности $P=0.77$ и полноты $R=0.42$ показали, что наилучший результат получен при $k=30$ и $rmin=4$. Если понизить $rmin=3$, то значительно падает точность рекомендаций $P=0.64$, а полнота наоборот становится в два раза выше $R=0.81$. Остальные наборы параметров приводят либо к крайне низкой точности, либо система выдает слишком мало рекомендованных объектов, что следует из низкого значения полноты.

5.3. Оценка эффективности метода ФС

В методе ФС на вход подается массив оценок пользователя и массив ключевых слов KW . Результатом работы данного метода является список рекомендаций, где объекты расположены в порядке убывания полезности для пользователя. В список рекомендаций попадают только те объекты, чья близость к интересам пользователя превышает заданный порог $\delta \in [0, 1]$, умноженный на максимально близкое расстояние, полученное для данного пользователя. Также на результат влияет параметр $rmin$, по которому находится список ключевых слов пользователя. Если пользователь оценил объект выше, чем $rmin$, то ключевые слова объекта заносятся в интересы пользователя.

На рис. 3 синим цветом (точками в форме ромбов) отображена зависимость точности и полноты от значения δ при $rmin=3$, зеленым цветом (круги) при $rmin=4$ и красным цветом (квадраты) при $rmin=5$.

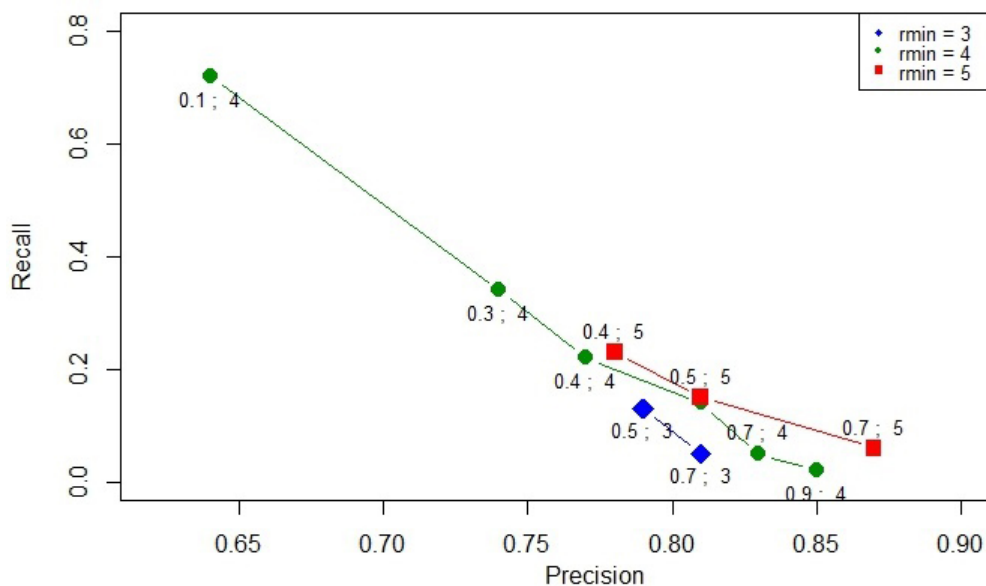


Рис. 3. Зависимость точности и полноты метода ФС от параметров (δ ; $rmin$)

Полученные оценки $P=0.87$, $R=0.1$ показали, что самой высокой точности (при ненулевой полноте) ФС достигает при значениях $\delta=0.7$; $rmin=5$. Также приемлемый результат $P=0.78$, $R=0.23$ получен при $\delta=0.5$; $rmin=5$. Время выполнения алгоритма метода ФС зависит от количества ключевых слов у пользователя и объектов.

5.4. Оценка эффективности гибридной СР

Так как КФ и ФС должны дополнять друг друга, то изначально была выбрана параллельная организация алгоритмов. В список рекомендаций попадают объекты с высоким прогнозируемым рейтингом, объекты, которые близки по содержанию к интересам пользователя, неожиданные рекомендации и новые объекты, которые еще никто не оценил. Оценки точности и полноты для получения общего списка рекомендаций путем объединения результатов КФ и ФС отображены на рис. 4 зелеными точками в форме кругов. Лучший результат относительно точности $P=0.78$, $R=0.34$ получен при $k=30$, $rmin()=5$, $rmin()=4.5$, $\delta=0.4$; относительно полноты $P=0.74$, $R=0.52$.

Если же находить рекомендации как пересечение списков КФ и ФС, то значительно возрастает точность рекомендаций, а полнота наоборот уменьшается. Например, при различных параметрах δ ; $rmin()$ получены показатели (рис. 4 — синие ромбы): $P=0.88$, $R=0.09$; $P=0.84$, $R=0.15$; $P=0.82$, $R=0.2$.

Полученные оценки означают, что гибридная СР выдает достаточно точные рекомендации и хорошо отфильтровывает «бесполезные» объекты. Однако, под фильтр

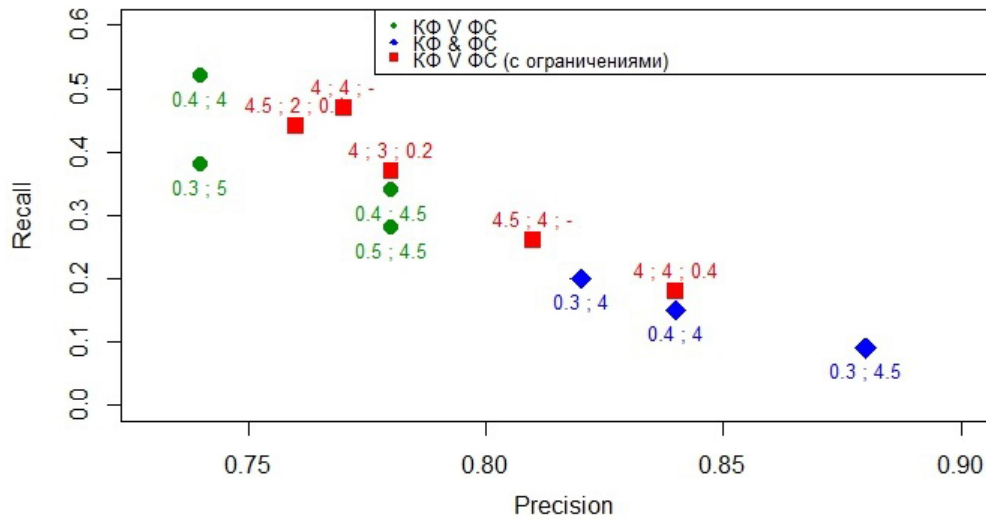


Рис. 4. Зависимость точности и полноты СР от параметров (δ ; $rmin()$) и способа организации методов

попадает и большое число интересных пользователю объектов, на что указывает низкое значение полноты СР.

Дальнейшая оптимизация гибридной СР произведена, исходя из предположения: если при составлении списков рекомендаций КФ и ФС удалить из списка КФ объекты, которые далеки от интересов пользователя (по ФС), а из списка ФС удалить объекты с низким рейтингом (по КФ), то в результате должен получиться более «чистый» общий список рекомендаций. При этом, если КФ и ФС не могут дать ответ по какому-либо объекту (если он новый или абсолютно нет схожих ключевых слов с пользователем), то объект не удаляется из списка.

Полученные результаты для данного способа объединения методов превышают остальные и по точности, и по полноте (рис. 4 — красные квадраты). Первое число на графике — $rmin()$, второе — порог $rmin()$ для модуля ФС, третье — порог δ для модуля КФ. Значение δ на всех примерах равно 0.4, $k=30$.

Недостатком данного способа организации методов является самая низкая скорость выдачи рекомендаций для пользователя.

6. ТЕСТИРОВАНИЕ

При разработке и тестировании гибридной СР выявлена следующая проблема: чем больше объектов и пользователей в системе, тем больше времени занимает процесс выдачи рекомендаций. К тому же, пользователи не могут оценить все объекты в системе, поэтому матрица оценок всегда является очень разреженной (содержит

огромное количество пустых значений). Оба этих фактора отрицательно сказываются на качестве рекомендаций и эффективности СР.

6.1. Масштабируемость

Одним из способов повысить масштабируемость СР является применение алгоритмов кластеризации. С её помощью множество пользователей/объектов делятся на кластеры. Тогда необходимо лишь запоминать свойства, присущие каждому кластеру (в виде вектора оценок), и проверять, насколько близок пользователь к каждому из них.

Алгоритмы кластеризации позволяют выявить структуру данных, найти сходство между элементами (объектами, пользователями) посредством вычисления их расстояния от других элементов в пространстве признаков (например, профиль пользователя, просмотренные фильмы). Если элементы «близки» друг к другу, то их можно объединить в один кластер [11].

Существует множество алгоритмов кластеризации. Одним из самых популярных является алгоритм k -средних (k -means), который разделяет элементы на k кластеров. Первоначально элементы распределяются по этим кластерам в произвольном порядке. Затем для каждого кластера вычисляется *центр масс* (или просто центр) как функция его элементов. После этого проверяется расстояние каждого элемента кластера от центра этого кластера. Если по результатам этой проверки элемент оказывается ближе к другому кластеру, то он перемещается в этот кластер. После проверки всех расстояний для всех элементов центры кластеров вычисляются заново. При достижении устойчивого состояния (в процессе очередной итерации элементы не перемещались) набор считается кластеризованным надлежащим образом и алгоритм останавливается.

Алгоритм k -средних [11]:

1⁰ сформировать начальное приближение центров всех кластеров $y \in Y$:

μ_y — наиболее удалённые друг от друга объекты выборки;

2⁰ повторять

3⁰ отнести каждый объект к ближайшему центру (аналог E-шага):

$$y_i := \arg \min_{y \in Y} \rho(x_i; \mu_y);$$

4⁰ вычислить новое положение центров (аналог M-шага):

$$\mu_{y_i} := \frac{\sum_{i=1}^l [y_i = y] f_j(x_i)}{\sum_{i=1}^l [y_i = y]}, \quad y \in Y, \quad j = 1, \dots, n;$$

5⁰ пока y_i не перестанут изменяться.

В качестве начального приближения рекомендуется выделить k наиболее удалённых точек выборки: первые две точки выделяются по максимуму всех попарных расстояний; каждая следующая точка выбирается так, чтобы расстояние от неё до ближайшей уже выделенной было максимально.

Существует множество других разновидностей кластеризации, в том числе теория адаптивного резонанса (Adaptive Resonance Theory), нечеткая кластеризация методом C -средних (Fuzzy C-means), вероятностная кластеризация с помощью EM -алгоритма (Expectation-Maximization) и т. д.

6.2. Использование пакета Surprise (Python3)

В пакет Surprise включено множество алгоритмов, выборок данных для разработки СР и проверки её эффективности. Для построения простейшей СР достаточно указать [18]:

```
from surprise import KNNWithMeans
from surprise import Dataset
from surprise import evaluate, print_perf

# Загружаем выборку movielens-100k,
# и делим её на 3 части для cross-validation.
data = Dataset.load_builtin('ml-100k')
data.split(n_folds=3)

# Используем алгоритм коллаборативной фильтрации KNNWithMeans
algo = KNNWithMeans()

# Находим оценки эффективности.
perf = evaluate(algo, data, measures=['RMSE', 'MAE'])

print_perf(perf)
```

В результате получим:

	Fold 1	Fold 2	Fold 3	Mean
RMSE	0.9574	0.9506	0.9587	0.9556
MAE	0.7536	0.7491	0.7562	0.7530

Метод `split()` автоматически делит выборку `movielens-100k` на три части, а функция `evaluate()` запускает процедуру `cross-validation()` и считает точность СР по заданным мерам (в данном случае RMSE и MAE).

В таблице 2 перечислены алгоритмы прогнозирования оценок, реализованные в пакете Surprise.

Таблица 2. Алгоритмы прогнозирования оценок

random_pred.NormalPredictor	Алгоритм, возвращающий случайную оценку, основанную на нормальном распределении
knns.KNNBasic	Алгоритм коллаборативной фильтрации
knns.KNNWithMeans	Алгоритм коллаборативной фильтрации с учетом средних оценок пользователей
knns.KNNBaseline	Алгоритм коллаборативной фильтрации с учетом базового рейтинга
matrix_factorization.SVD	Алгоритм SVD (SVD++)
matrix_factorization.SVDpp	Усложненный алгоритм SVD++, в котором учитываются неявные оценки
matrix_factorization.NMF	Алгоритм коллаборативной фильтрации, основанный на факторизации неотрицательных матриц
slope_one.SlopeOne	Простой, но точный алгоритм коллаборативной фильтрации
co_clustering.CoClustering	Алгоритм коллаборативной фильтрации, основанный на кластеризации

Для определения точности каждого из алгоритмов воспользуемся классом GridSearch пакета Surprise. С его помощью можно проверить точность алгоритма на различных комбинациях значений параметров и найти лучшую. Подробную информацию об этом классе можно найти в документации пакета Surprise [18].

Для отображения результатов была использована библиотека ggplot2 языка R, предназначенная для построения двумерных графиков и диаграмм [19].

6.3. Алгоритм CoClustering (основанный на алгоритме коллаборативной фильтрации и методе кластеризации k -средних)

Данный алгоритм является реализацией алгоритма, описанного в [19]. Пользователям и объектам назначаются некоторые кластеры C_u , C_i и некоторые со-кластеры C_{ui} . Оценка \hat{r}_{ui} задается как:

$$\hat{r}_{ui} = \bar{C}_{ui} + (\mu_u - \bar{C}_u) + (\mu_i - \bar{C}_i),$$

где \bar{C}_{ui} — средняя оценка со-кластера C_{ui} , \bar{C}_u — средняя оценка кластера C_u , а \bar{C}_i — средняя оценка C_i -го кластера. Если информации о пользователе нет, то оценка равна $\hat{r}_{ui} = \mu_i$. Если неизвестна информация об объекте, то оценка равна $\hat{r}_{ui} = \mu_u$. Если нет ни информации о пользователе, ни об объекте, то оценка равна $\hat{r}_{ui} = \mu$.

Кластеры назначаются, используя метод, основанный на методе k -средних.

Параметры алгоритма:

- n_cltr_u (int) – число кластеров пользователей;
- n_cltr_i (int) – число кластеров объектов;
- n_epochs (int) – число итераций оптимизации.

Проверим точность данного метода с помощью оценки RMSE (среднеквадратичная ошибка — Root Mean Square Error). При проверке использована выборка movielens-100k. На рис. 5 изображены результаты тестирования в виде трех графиков (на первом графике параметр n_epoch равен 5, на втором — 10, на третьем — 20. На горизонтальной оси отображены значения параметра n_cltr_u , на вертикальной — n_cltr_i . На пересечении n_cltr_u и n_cltr_i находятся значения критерия точности RMSE. Чем меньше диаметр круга и чем он темнее, тем лучше показатель.

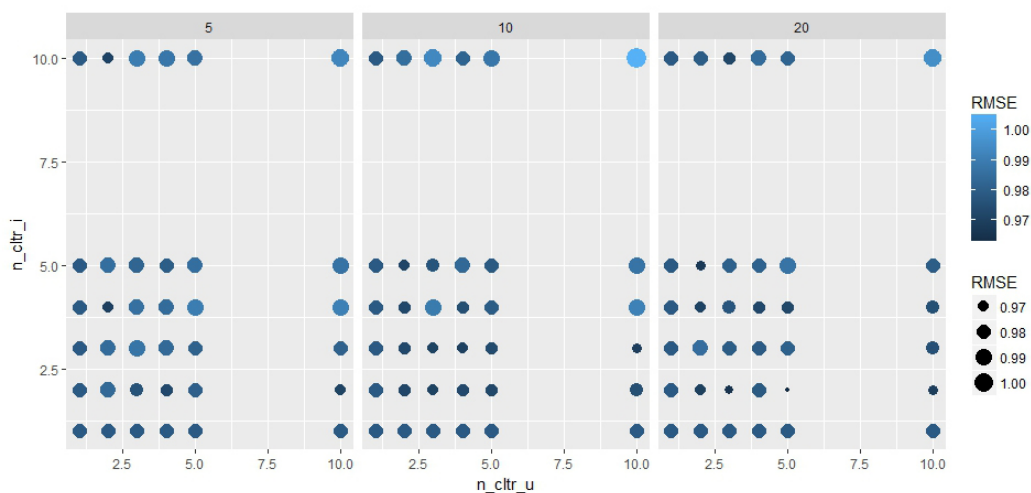


Рис. 5. Точность алгоритма CoClustering по RMSE

Таким образом, наилучшим набором параметров на данной выборке является: $n_cltr_u = 5$, $n_cltr_i = 2$, $n_epoch = 20$. $RMSE = 0.9621$.

6.4. Разреженность данных

Кроме Memory-based алгоритмов КФ, основанных на анализе имеющихся оценок и создающих рекомендации с помощью статистических методов, существуют также Model-based алгоритмы, в основе которых лежит анализ модели данных, основанной на оценках пользователей. Такая модель представляет собой некоторое описание предпочтений пользователя, сходства товаров и различные закономерности. Чтобы выдать рекомендации, система проходит два этапа: обучение модели и вычисление рекомендаций на основе полученной модели. Этот метод позволяет системе быстро

получать рекомендации в реальном времени, т. к. основные вычислительные затраты происходят в момент обучения модели в отложенном режиме. Такие алгоритмы могут быть основаны на вероятностном подходе, кластерном анализе, анализе скрытых факторов, сингулярном разложении и др. Далее рассмотрим метод сингулярного разложения (SVD).

Алгоритм SVD [20]. Как правило матрица оценок R в СР является сильно разреженной. Для работы с такими матрицами удобно пользоваться методом сингулярного разложения, с помощью которого можно понизить размерность матрицы: $R=UDV^T$, где R — матрица большого размера $N \times M$, но малого ранга f , ее можно разложить в произведение матрицы $N \times f$ и матрицы $f \times M$, тем самым резко сократив число параметров с $N \times M$ до $(N + M) \times f$.

Алгоритм SVD дает оптимальное приближение, если в матрице D просто оставить ровно f первых диагональных элементов, а остальные обнулить:

$$X = UDV^T = U \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_k \end{pmatrix} V^T \approx U \begin{pmatrix} \sigma_1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \sigma_f & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} V^T$$

В диагональной матрице D , которая стоит в середине сингулярного разложения, элементы упорядочены: $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_k$, поэтому обнулить последние элементы означает обнулить наименьшие элементы. А f подбирается, исходя из значений сингулярных элементов матрицы (диагональных элементов матрицы D), при этом желательно отбрасывать как можно больше самых малых по значению элементов. В случае СР каждый пользователь представляется вектором из f факторов U_i , а каждый объект — вектором из f факторов V_j . Далее, чтобы предсказать рейтинг пользователя i объекту j , берем их скалярное произведение $U_i^T V_j$.

Матрица предпочтений пользователя сильно разрежена, поэтому определить пользователей значительно похожих на целевого пользователя очень сложно. В ряде работ используется замена нулевых значений средними рейтингами или наиболее вероятными значениями, выделение принципиальных элементов [23, 24]. М. Ргюг показал, что использование только множества принципиальных элементов снижает размерность матрицы и делает вычисление более эффективным [24]. Предлагалось воспользоваться методом ФС для замены нулевых элементов ненулевыми, которые определяются как среднее арифметическое рейтингов элементов, подобных целевым

по тематике и оцененных пользователями или как средние рейтингов элементов, похожих на элементы по тематике и определенных на всем множестве профилей [25].

Введем так называемые базовые предикторы b_{ia} , которые складываются из базовых предикторов отдельных пользователей b_i , и отдельных объектов b_a , а также просто общего среднего рейтинга по базе μ :

$$b_{ia} = \mu + b_i + b_a,$$

где μ — средний рейтинг по базе; b_i — средний рейтинг каждого i пользователя; b_a — средний рейтинг каждого объекта a .

Для определения только базовых предикторов необходимо найти такие μ , b_i , b_a , для которых b_{ia} лучше всего приближают имеющиеся рейтинги. Затем можно будет добавить собственно факторы, представляющие продукты и пользователей. Поскольку теперь, когда сделана поправка на базовые предикторы, остатки будут сравнимы между собой, можно получить значения для факторов:

$$\dot{r}_{ia} = \mu + b_i + b_a + v_a^T u_i,$$

где v_a — вектор факторов, представляющий продукт a ; u_i — вектор факторов, представляющий пользователя i .

Чтобы исходную задачу сформулировать более точно, нужно найти наилучшие предикторы, которые приближают величину \dot{r}_{ia} . Лучшими будут те предикторы, которые дают минимальную ошибку, определяемую следующим образом:

$$L(\mu, b_i, b_a, v_a, u_i) = \sum_{(i,a) \in D} (r_{ia} - \dot{r}_{ia})^2 = \sum_{(i,a) \in D} (r_{ia} - (\mu + b_i + b_a + v_a^T u_i))^2.$$

Функцию $L(\mu, b_i, b_a, v_a, u_i)$ минимизируем градиентным спуском. Для компенсации эффекта переобучения добавляется параметр регуляризации. Иными словами, накладывается штраф за слишком большие значения обучаемых переменных. Например, можно просто добавить в функцию ошибки сумму квадратов всех факторов и предикторов. В результате функция ошибки выглядит как

$$b, q, r = \arg \min_{b, q, r} \sum_{(i,a)} (r_{ia} - (\mu + b_i + b_a + v_a^T u_i))^2 + \alpha \left(\sum_i b_i^2 + \sum_a b_a^2 + \|v_a\|^2 + \|u_i\|^2 \right),$$

где α — параметр регуляризации.

Для каждой из оптимизируемых переменных, получим простые правила для градиентного (стохастического) спуска:

$$b_i \leftarrow b_i + \gamma(e_{ia} - b_i),$$

$$\begin{aligned} b_a &\leftarrow b_a + \gamma(e_{ia} - b_a), \\ v_{aj} &\leftarrow v_{aj} + \gamma(e_{ia}u_{ij} - v_{aj}), \\ u_{ij} &\leftarrow u_{ij} + \gamma(e_{ia}u_{ij} - u_{ij}) \end{aligned}$$

для всех j , где $e_{ia} = r_{ia} - \hat{r}_{ia}$ — ошибка на данном тестовом примере, а γ — скорость обучения. Эта модель называется SVD++.

В пакете Surprise реализовано два вида алгоритма SVD++: обычный и усложненный. В усложненном алгоритме учитываются неявные оценки. Прогнозируемая оценка r_{ai} вычисляется по формуле:

$$\hat{r}_{ia} = \mu + b_i + b_a + v_a^T \left(u_i + |I_i|^{-\frac{1}{2}} \sum_{j \in I_i} y_j \right),$$

где y_j означает новый набор факторов, который фиксирует неявные оценки. Неявные оценки описывают тот факт, что пользователь u_i оценил объект j независимо от величины оценки.

Среди параметров алгоритма присутствуют:

- `n_factors` — число факторов (100);
- `n_epochs` — число итераций процедуры градиентного спуска;
- `init_mean` — математическое ожидание нормального распределения для факторов при инициализации (0);
- `init_std_dev` — дисперсия нормального распределения (0.1);
- `lr_all` — скорость обучения алгоритма;
- `reg_all` — параметр регуляризации.

Проверим точность алгоритмов SVD() и SVDpp() с помощью оценки RMSE, изменяя параметры `n_epochs`, `lr_all` и `reg_all` (рис. 6, 7). На первом графике параметр `n_epoch` равен 5, на втором — 10, на третьем — 20. На горизонтальной оси отображены значения параметра `lr_all`, на вертикальной — `reg_all`. На пересечении `lr_all` и `reg_all` находятся значения критерия точности RMSE. Чем меньше диаметр круга и чем он темнее, тем лучше показатель.

Таким образом, наилучшим набором параметров на данной выборке для алгоритма SVD() является:

- `n_epochs = 20`, `lr_all = 0.008`, `reg_all = 0.1`. RMSE = 0.9429.

Для алгоритма SVDpp() наилучшим набором параметров является:

- `n_epochs = 20`, `lr_all = 0.005`, `reg_all = 0.02`. RMSE = 0.9347.

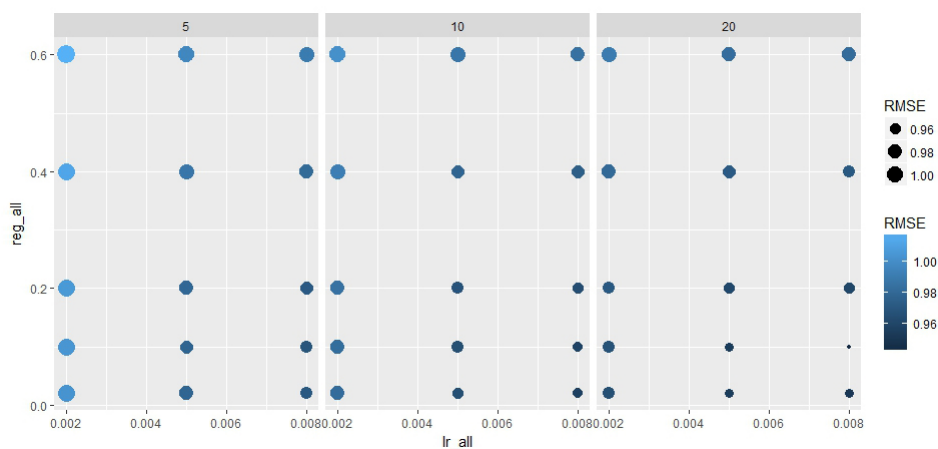


Рис. 6. Точность алгоритма SVD() по оценке RMSE

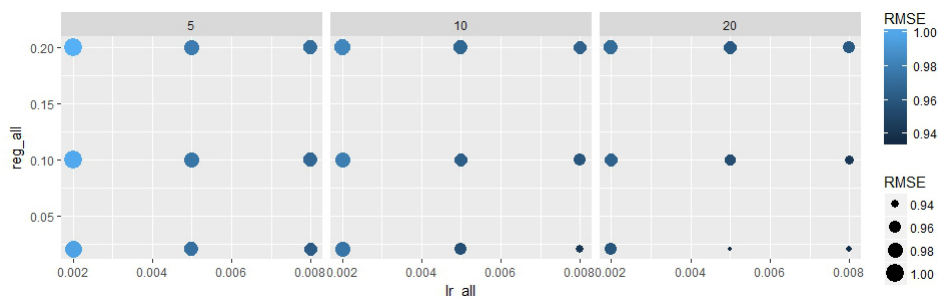


Рис. 7. Точность алгоритма SVDpp() по оценке RMSE

Для сравнения: точность по RMSE реализованного в модуле КФ составляла 0.959, что говорит о том, что метод SVD более точно представляет данные. При этом главное его преимущество — выигрыш во времени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для разработки гибридной СР были использованы два метода: КФ и ФС. Метод КФ, при наличии достаточного количества информации в базе данных, позволяет с высокой точностью определить, какую оценку пользователь поставит некоторому объекту, исходя из схожести его интересов с интересами других пользователей. Метод ФС позволяет определить наиболее предпочтительное содержание объектов для пользователя и выбирает ближайшие к нему объекты. Идея объединить данные методы в одну СР возникла из их различия по алгоритмам, преимуществам, а также спискам рекомендаций, которые они формируют. При этом устраняется значительная часть недостатков, присущая обоим методам.

В разработке выбраны и использованы доступные программные продукты. Проанализирована гибридная СР, предоставляющая пользователям индивидуальные рекомендации, исходя из их оценок и содержания объектов. Из полученных оценок точности и полноты для разных наборов параметров можно сделать вывод, что СР способна выдавать достаточно точные рекомендации (от 80 %), если не требуется получить полный список полезных объектов. Если необходимо получить наиболее полные рекомендации, то показатель точности падает до 65–75 %. Значения параметров, приводящие к максимальным результатам: $k=30$, $rmin()=4$, $rmin()=5$, $\delta \in [0.4; 0.5]$. Наивысшая точность получена при пересечении КФ и ФС, наивысшая полнота — при объединении. Способ объединения списков рекомендаций ФС и КФ с ограничениями позволяет повысить оба показателя.

СР выдает достаточно качественные рекомендации, если требуется получить объекты, которые с большой вероятностью понравятся пользователю, и минимум «бесполезных» объектов. Для получения всех «полезных» объектов в СР необходимо внедрять дополнительные алгоритмы и методы, т.к. в процессе фильтрации отбрасывается множество объектов, которые могут заинтересовать пользователя.

Так как в настоящее время количество данных в Интернете очень быстро возрастает, то современные СР должны быть масштабируемыми, т. е. справляться с увеличением нагрузки при добавлении новой информации. Чтобы увеличить скорость выдачи рекомендаций большая часть вычислений должна происходить в фоновом режиме (заранее). Одним из способов снизить количество вычислений, является кластеризация пользователей и объектов, а также использование метода сингулярного разложения для построения модели.

В дальнейшем планируется ввести использование параллельного вычисления и работы с большими данными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пройдл, А. История систем рекомендаций // Теле-Спутник. — 2015, № 3. — С. 48–50.
PROIDL, A. (2015) History of recommender systems. *Tele-Sputnik*. 3. Pp. 48–50.
2. Шалаев, С. Эволюция рекомендательных сервисов [Электронный ресурс]. — Режим доступа:
http://firma.ru/data/articles/5006/?view_comments=yes
SHALAEV, S. (2015) *Evolution of recommender services*. [Online] Available from:
http://firma.ru/data/articles/5006/?view_comments=yes.

3. MELVILLE, P. Recommender Systems [Электронный ресурс] / P. MELVILLE, V. SINDHWANI // Encyclopedia of Machine Learning. — Chapter No: 00338. — 22-4-2010. — Режим доступа:
<http://www.prem-melville.com>
4. ADOMAVICIUS, G. Toward the next generation of recommender systems: A survey of the state-of-the-art and possible extensions / G. ADOMAVICIUS, A. TUZHILIN // IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering. — 2005, 17(6). — С. 734–749.
5. SU, X. A survey of collaborative filtering techniques [Электронный ресурс] / X. SU, T. KHOSHGOFTAAR // Advances in Artificial Intelligence. — 2009. — P. 1–20. — Режим доступа:
<https://www.hindawi.com/journals/aai/2009/421425/>
6. RICCI, F. Recommender Systems Handbook / F. RICCI, L. ROKACH, B. SHAPIRA. — New York: Springer Science+Business Media, 2015. — 842 с.
7. BREESE, J. S. Empirical Analysis of Predictive Algorithms for Collaborative Filtering / J. S. BREESE, D. HECKERMAN, C. KADIE // Appears in Proceedings of the Fourteenth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence. — Madison, Wisconsin, 1998. — С. 43–52.
8. HERLOCKER, J. L. An Algorithmic Framework for Performing Collaborative Filtering / J. Herlocker, J. KONSTAN, A. BORCHERS, J. RIEDL // Proceedings of the 22nd annual international ACM SIGIR conference on Research and development in information retrieval. — New York: ACM, 1999. — С. 230–237.
9. HERLOCKER, J. L. Evaluating collaborative filtering recommender systems / J. L. Herlocker, J. A. KONSTAN, L. G. TERVEEN, J. T. RIEDL // ACM Transactions on Information Systems. — 2004, 22(1). — С. 5–53.
10. SARWAR, B. Item-Based Collaborative Filtering Recommendation Algorithms / B. SARWAR, G. KARYPIS, J. KONSTAN, J. RIEDL // Proceedings of the 10th international conference on World Wide Web. — New York: ACM, 2001. — С. 285–295.
11. Воронцов, К. В. Математические методы обучения по прецедентам (теория обучения машин) [Электронный ресурс] / К. В. Воронцов. — Режим доступа:
<http://www.machinelearning.ru/wiki/images/6/6d/Voron-ML-1.pdf>
VORONTSOV, K. (2005) *Mathematical methods of teaching by precedents (Machine Learning Theory)*. [Online] Available from:
<http://www.machinelearning.ru/wiki/images/6/6d/Voron-ML-1.pdf>.

12. Нефедова, Ю. С. Архитектура гибридной рекомендательной системы GEFEST (Generation–Expansion–Filtering–Sorting–Truncation) / Ю. С. Нефедова // Системы и средства информатики. — 2012, 22(2). — С. 176–196.
NEFEDOVA, U. S. (2012) Hybrid recommender system architecture GEFEST (Generation–Expansion–Filtering–Sorting–Truncation). *Systems and means of Informatics*. 22(2). Pp. 176–196.
13. Кольчугина, Е. А. Метод коллаборативной фильтрации для масштабируемых рекомендательных систем [Электронный ресурс] / Е. А. Кольчугина, В. А. Макарь // Современные научные исследования и инновации. — 2012. — № 6. — Режим доступа:
<http://web.snauka.ru/issues/2012/06/14316>
KOLCHUGINA, E. A., MAKAR, V. A. (2012) *The Method of Collaborative Filtering for Scalable Recommender Systems*. [Online] Available from:
<http://web.snauka.ru/issues/2012/06/14316>.
14. Constructing a Hybrid Recommender System / V. Y. Ignat'ev, D. V. Lemtyuzhnikova, D. I. Rul', I. L. Ryabov // Journal of Computer and Systems Sciences International. — 2018. — Vol. 57, No. 6. — P. 921-926. — DOI 10.1134/S1064230718060060.
15. LIU L. Summary of recommendation system development. / L. LIU // J. Phys.: Conf. Ser., — 2019, 1187, 052044. — DOI 10.1088/1742-6596/1187/5/052044
16. WEI W. Recommendation systems overview (Building recommendation systems with TensorFlow). — 2021. [Online] Available from:
<https://www.youtube.com/watch?v=BthUPVwA59s>.
17. Амелькин, С. А. Оценка эффективности рекомендательных систем [Электронный ресурс] / С. А. Амелькин // Труды 14-й Всероссийской научной конференции «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» – RCDL-2012, Переяславль-Залесский. — 2012. — Режим доступа:
<http://ceur-ws.org/Vol-934/paper44.pdf>
AMELKIN, S. A. (2012) *Evaluating the Effectiveness of Recommender systems*. [Online] Available from:
<http://ceur-ws.org/Vol-934/paper44.pdf>.
18. Getting Started // Surprise [Электронный ресурс]. — Режим доступа:
http://surprise.readthedocs.io/en/stable/getting_started.html

19. Ggplot Documentation // Create Elegant Data Visualisations Using the Grammar of Graphics [Электронный ресурс]. — Режим доступа:
<https://www.rdocumentation.org/packages/ggplot2/versions/3.0.0>
20. GEORGE, T. A scalable collaborative filtering framework based on co-clustering [Электронный ресурс] / T. GEORGE, S. MERUGU. — Режим доступа:
<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.113.6458&rep=rep1&type=pdf>
21. Королева, Д. Е. Анализ алгоритмов обучения коллаборативных рекомендательных систем [Электронный ресурс] / Д. Е. Королева, М. В. Филиппов // Инженерный журнал: наука и инновации. — 2013. — № 6. — Режим доступа:
<http://engjournal.ru/catalog/it/hidden/816.html>
KOROLEVA, D. E., Philippov, M. V. (2013) *Analysis of Learning Algorithms for Collaborative Recommender Systems*. [Online] Available from:
<http://engjournal.ru/catalog/it/hidden/816.html>.
22. Шумейко, Е. А. Разработка и оценка эффективности гибридной системы рекомендаций / Е. А. Шумейко, М. Г. Козлова // МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ, МОДЕЛИРОВАНИЕ, ОБРАЗОВАНИЕ. Сборник научных трудов научно-практической конференции МИКМО-2017 и Таврической научной конференции студентов и молодых специалистов по математике и информатике. Таврическая академия (СП) ФГАОУ ВО «КФУ им. В. И. Вернадского»; Под ред. В.А. Лукьяненко. — 2017, 1. — С. 178–185.
SHUMEYKO, E. A., KOZLOVA, M. G. (2017) Development and evaluation of hybrid recommender system. *MATHEMATICS, COMPUTER SCIENCE, COMPUTER SCIENCE, MODELING, EDUCATION*. 1. Pp. 178–185.
23. BILLSUS, D. (Learning collaborative information filters) D. BILLSUS, M. PAZZANI. *Fifteenth International Conference on Machine Learning*. — Madison, USA. (1998). Pp. 46–54.
24. PRYOR, M. (The effects of singular value decomposition on collaborative filtering) M. PRYOR. *Dartmouth College CS Technical Report. PCS-TR 98-338*. (1998). Pp. .
25. MELVILLE, P. (Content-boosted collaborative filtering for improved recommendations) P. MELVILLE, R. MOONEY, R. NAGARAJAN. *18th National Conference on Artificial Intelligence (AAAI)*. (2002). Pp. 187–192.

УДК: 51-73+54.03

MSC2010: 00A72, 37M05, 93A30

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ В МОДЕЛЯХ МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

© В. А. Лукьяненко, Д. В. Лукьяненко, К. И. Редкокош

КРЫМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. В. И. ВЕРНАДСКОГО

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ПРОСП. АКАДЕМИКА ВЕРНАДСКОГО, 4, СИМФЕРОПОЛЬ, 295007, РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

E-MAIL: art-inf@yandex.ru, lukianenko_dmitry@mail.ru, kirillF13@yandex.ru

PARAMETER RECOVERY IN MAGNETIC SUSCEPTIBILITY MODELS.

Lukianenko V. A., Lukianenko D. V., Redkokosh K. I.

Abstract. The paper is devoted to the recovery of parameters in magnetic susceptibility models. One of the problems of magnetochemistry is the construction of the theory of exchange interactions, allowing to identify, investigate and explain the causes of magnetic ordering in crystals; to study the relationship of parameters of exchange interactions with peculiarities of electronic structure and chemical bonds in studied compounds.

The fundamental importance and relevance of this study is determined by the need to study the physical properties of new magnetic materials and is aimed at studying the most common effects and interactions that form the quantum states of matter.

The practical significance of magnetochemical research consists in the systematic study of the magnetic properties of different groups of compounds on the basis of transition metal complexes, and the construction of models of the type of compounds suitable in applications.

New results of parameter recovery in magnetochemistry models for studying chemical compounds according to experimental data that are measurements of the temperature dependence of magnetic susceptibility were obtained in this article. Dependencies obtained from the Heisenberg-Dirac-Van-Fleck model were applied.

The corresponding materials of paramagnetic complexes of transition metals were used as components in molecular electronic and photochemical devices for storing and transferring information, as converters of solar energy.

Theoretical concepts of magnetic susceptibility were obtained depending on the spin characteristics of compounds that contain the desired parameters. Basing on experimental data and minimizing quadratic functionals, the dependence parameters were found. Their coincidence with the well-known results was shown.

Formulas for clusters of dimensions 3 and 4 have been derived, methods of parameter recovery for solving magnetochemical problems have been described and their application has been demonstrated, and an algorithm for solving the opposite problem has been presented.

The aim of the article is to study the methods of recovery of dependencies in the solution of magnetochemical problems, as well as to develop an algorithm that allows the experimental data to establish the type of connection to be investigated.

Keywords: *nonlinear equation, nonstationary effects, rotating waves, bifurcation analysis, integral representation*

ВВЕДЕНИЕ

Задачи, требующие восстановления параметров, часто встречаются в различных исследованиях, проводимых над метаматематической моделью процесса или явления. Как отмечал А. А. Ляпунов [1]: математическое моделирование — это опосредованное практическое или теоретическое исследование объекта, при котором непосредственно изучается не сам интересующий нас объект, а некоторая вспомогательная искусственная или естественная система (модель), находящаяся в некотором объективном соответствии с познаваемым объектом.

Одной из таких задач является задача восстановления параметров в моделях исследования химических соединений по экспериментальным данным [2]. Раздел, занимающийся исследованием таких задач, называется магнетохимией. Д. Г. Келлерман [3] выделил наиболее актуальные задачи, решаемые методами магнетохимии:

1. Определение степени окисления ионов переходных металлов, изучение дефектов соединений.
2. Определение структуры координационного узла молекулы комплексного соединения.
3. Обнаружение следов ферромагнитных примесей (не всегда удается определить другими методами).

Магнетохимия является развивающейся наукой на стыке физики и химии. Однако, работы, рассматривающие математическую проблематику восстановления зависимостей, недостаточно представлены в отечественной литературе.

Одной из задач магнетохимии является построение теории обменных взаимодействий, позволяющих выявить, исследовать и объяснить причины магнитного упорядочения в кристаллах; изучить связь параметров обменных взаимодействий с особенностями электронной структуры и химических связей в изучаемых соединениях.

Фундаментальная значимость и актуальность данного исследования определяется необходимостью изучения физических свойств новых магнитных материалов и направлена на изучение наиболее общих эффектов и взаимодействий, формирующих квантовые состояния материи.

Практическая значимость исследований по магнетохимии состоит в систематическом изучении магнитных свойств различных групп соединений на основе комплексов переходных металлов, построении моделей типа соединений пригодных в приложениях.

Целью исследования является применение методов восстановления зависимостей решения задач магнетохимии, а также разработка алгоритмов, позволяющих по экспериментальным данным устанавливать тип исследуемого соединения.

Для этого необходимо: систематизировать теоретические положения магнетизма и магнетохимии и актуализировать модели магнетизма обменных кластеров; описать методы исследования магнитных свойств соединений, необходимых для установления магнитных свойств соединений с различными спиновыми характеристиками; разработать алгоритмы восстановления параметров зависимостей.

Объектом исследования выступают задачи, методы и алгоритмы восстановления параметров моделей по экспериментальным данным.

1. ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ С РАЗЛИЧНЫМИ СПИНОВЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

В исследовании магнитных свойств вещества определяются магнитные эффекты, которые намного слабее эффектов, обусловленных электронами, приблизительно в 1000 раз. Поэтому они обычно не сказываются заметным образом на статических магнитных свойствах, существенных с химической точки зрения. Однако магнетохимический метод это эффективный инструмент исследования структуры и электронного строения вещества.

Магнетохимия является разделом физической химии, в котором изучается зависимость между магнитными свойствами и химическим строением веществ, а также влияние магнитного поля на химические свойства веществ и на их реакционную способность. Термин «магнетохимия» часто используется как краткий аналог выражения — исследование химических соединений магнитными методами. Развитие магнетохимии тесно связано с именами П. Ланжевена, М. Кюри, Ф. Р. Вейсса, Б. Паскаля и Л. Полинга [4]. Одним из самых используемых методов в магнетохимии — метод статической магнитной восприимчивости.

Н. Е. Домрачева в [5] отмечала, что наиболее широкое и многообразное применение метод статической магнитной восприимчивости получил в области исследования парамагнитных комплексов переходных металлов. Включение атома металла в структуру дендримерной макромолекулы приводит к созданию новых материалов со специфическими свойствами, такими как: способность поглощать видимый

свет, проявлять люминесценцию, генерировать мультиэлектронные окислительно-восстановительные процессы. Такие материалы могут найти применение как компоненты в молекулярных электронных и фотохимических устройствах для хранения и переноса информации, как преобразователи солнечной энергии.

В качестве примера рассмотрим системы с использованием фуллерена и гидразона. В статье А. Н. Гусева, А. С. Мазинова, А. И. Шевченко и др. [6] исследовались свойства тонкопленочной гетероструктуры на основе фуллерена C_{60} и гидразона. Отмечено, что добавление гидразона позволяет значительно усилить оптоэлектронные свойства тонкопленочной структуры фуллерена C_{60} : возрастание силы тока под действием оптического излучения увеличилось с 5 до 29 раз.

Р. Карлин выделял несколько причин интенсивного развития метода статической магнитной восприимчивости [7].

Во многих случаях по величине эффективного магнитного момента можно надежно и быстро определять степень окисления металлов, а иногда и симметрию координационной сферы центрального атома. Температурная зависимость магнитной восприимчивости позволяет судить не только о важных деталях строения ближайшей координационной сферы металла, но и о характере взаимодействия металл-лиганд (лиганд — атом, ион или молекула, связанный с другим атомом — акцептором с помощью донорно-акцепторного взаимодействия). Кроме того, метод оказался эффективным в исследовании полиядерных комплексных соединений особого типа — так называемых обменных кластеров.

Основы современной теории магнитных свойств соединений переходных и редкоземельных элементов были заложены еще в классической работе Ван-Флека [8].

Дальнейший прогресс в этой области связан с совершенствованием теории и с выяснением механизмов таких тонких эффектов, как орбитальное сокращение, отклонение g -фактора от чисто спинового значения и т.д. Развитие теории сопровождалось и в значительной мере стимулировалось экспериментальными исследованиями. Особенности магнитных свойств комплексных соединений могут служить иллюстрацией целого ряда положений современной теории электронного строения соединений.

Свойства магнетизма комплексов также используются в теории лигандов [9]. Согласно В. Т. Калининскому и Ю. В. Ракиткину абсолютно любое вещество реагирует на приложенное внешнее магнитное поле. Оно намагничивается, т. е. приобретает магнитный момент. Реакция вещества на магнитное поле характеризуется восприимчивостью, которая входит в соотношение $M = \chi H$, где M — намагниченность, или магнитный момент единицы объема, а H — приложенное магнитное поле.

П. Е. Казин и И. В. Кульбакин [10] отметили, что магнитную восприимчивость можно рассматривать как количественную меру отклика вещества на внешнее магнитное поле.

Для получения достоверной объективной информации о магнитных свойствах важное значение имеют измерения температурной зависимости магнитной восприимчивости. В начальный период развития магнетохимии измеряли магнитную восприимчивость главным образом при одной температуре и затем превращали найденное значение с помощью формулы Кюри в число магнетонов Бора. Такой «магнитный» анализ может быть эффективным только в том случае, если известно, что магнитная восприимчивость следует закону Кюри, что бывает крайне редко. Поэтому в современных условиях проводят измерение температурной зависимости магнитной восприимчивости в широком интервале температур.

При описании магнитных свойств наиболее широко используется модель изотропного обмена Гейзенберга–Дирака–Ван-Флека (ГДВФ), согласно которой магнитные свойства взаимодействующих парамагнитных центров во внешнем магнитном поле H можно описать спиновым гамильтонианом:

$$E = -2 \sum_i \sum_j J_{ij} S_i S_j + \beta \sum_i g_i S_i H,$$

где S_i, S_j — спиновые операторы парамагнитных центров; J_{ij} — эффективный параметр обменного взаимодействия, g_i — g -факторы парамагнитного центра.

Первое слагаемое определяет энергию обменного взаимодействия между парамагнитными центрами, второе слагаемое есть зеемановское взаимодействие магнитного момента с внешним магнитным полем H . При таком подходе гамильтониан системы зависит лишь от спиновых переменных парамагнитных центров, в то время как информация об электронном строении и природе магнитных орбиталей содержится в параметре J_{ij} , расчет которого представляет собой самостоятельную квантово-механическую задачу.

Основная идея Ван-Флека состояла в том, что он записал энергию i -го энергетического уровня системы с учётом влияния внешнего магнитного поля H в виде:

$$E_i = E_i^0 + H E_i^{(1)} + H^2 E_i^{(2)} + \dots \quad (1)$$

Величины $E_i^{(1)}$ и $E_i^{(2)}$, появляющиеся в первом и втором порядке теории возмущений, называются коэффициентами зеемановского взаимодействия первого и второго порядка соответственно. E_i^0 — энергия i -го уровня в отсутствии поля.

В работе [11] исследовались кристаллические структуры и магнитные свойства тройных спиральных биядерных комплексов с диазиновыми лигандами. Магнитная

восприимчивость комплексов 1 и 2 была измерена в диапазоне температур 5 – 300 K и показана на рис. 1-2, соответственно. При 300 экспериментальные значения $\chi_M T$ составляют 2.23 и 2.04 моль⁻¹ K для 1 и 2 и соответствуют значению только для двух высокоспиновых ионов Ni(II). При охлаждении продукты $\chi_M T$ монотонно уменьшаются, а значения χ_M непрерывно увеличиваются до максимумов 0.099 моль⁻¹ при 10 и 0.054 моль⁻¹ при 17 для 1 и 2, соответственно. Эти наблюдения указывают на то, что между ионами Ni(II), связанными тройными N – N мостиками, действует антиферромагнитное взаимодействие.

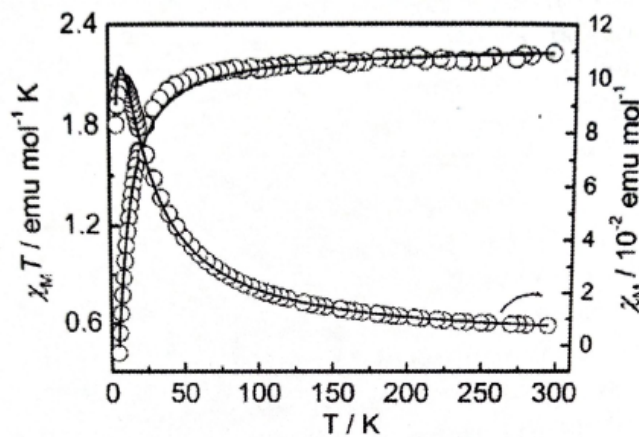


Рис. 1. График зависимости χ_M и $\chi_M T$ от T для комплекса 1. Сплошные линии представляют наилучшее соответствие экспериментальным данным [11].

Данные были приведены в соответствие с выражением, полученным из гамильтониана изотропной спиновой связи $H = -J\tilde{S}_1\tilde{S}_2$

$$\chi_M = \frac{2Ng^2\beta^2}{kT} \frac{1 + 5 \exp(2J/kT)}{3 + 5 \exp(2J/kT) + \exp(-J/kT)}$$

Моделирование привело к $J = -2.97$ при $g = 2.13$ и $J = -5.40$ см при $g = 2.07$ для 1 и 2 соответственно.

Для магнитной восприимчивости было получено выражение

$$\chi_M = \frac{2Ng^2\beta^2}{kT} \frac{55 + 30 \exp^{5x} + 14 \exp^{9x} + 5 \exp^{12x} + \exp^{14x}}{11 + 9 \exp^{5x} + 7 \exp^{9x} + 5 \exp^{12x} + 3 \exp^{14x} + \exp^{15x}},$$

где $x = J/kT$. Приемлемые данные (рис. 2) получены при $J = 1.24$ см⁻¹ и $g = 2.0$.

В [12] исследована структурная и магнитная восприимчивость октаэдрического комплекса Mn^{III}-оксо-пиразолида.

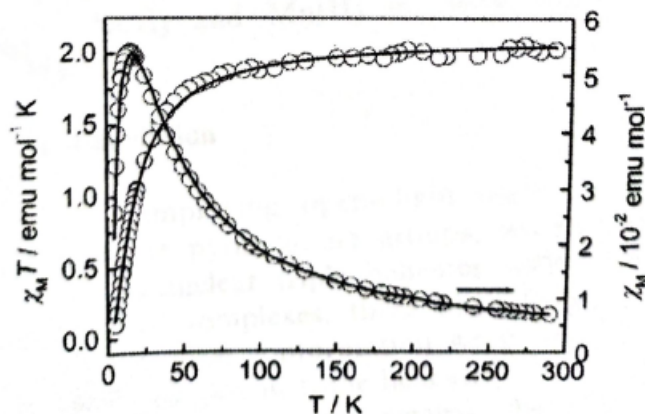


Рис. 2. График зависимости χ_M и $\chi_M T$ от T для комплекса 2. Сплошные линии представляют наилучшее соответствие экспериментальным данным [11].

В. Т. Калинин и Ю. В. Ракиткин [9] рассматривали пары обменно-связанных орбитально-невырожденных ионов со спинами S_1 , S_2 и изотропными g-факторами $g_1 = g_2 = g$ и получили формулу для магнитной восприимчивости димера (сложной молекулы, составленной из двух более простых молекул).

Сразу установим, что влияние обменного взаимодействия приводит к формированию состояний с полным спином S , имеющим энергию

$$E(J, S) = -J[S(S + 1) - S_1(S_1 + 1) - S_2(S_2 + 1)]. \quad (2)$$

Причем $S = S_1 + S_2, S_1 + S_2 - 1, \dots, |S_1 - S_2|$.

Также (2) называется изотропным гамильтонианом спина.

Подставив (1) в выражение для грамм-атомной статической восприимчивости: $\chi = \frac{N}{H} \frac{\partial U}{\partial H}$, где U — свободная энергия Гельмгольца, N — число Авогадро, H — приложенное магнитное поле, получим формулу для молярной восприимчивости димера без учета температурно-независимого парамагнетизма:

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2}{2 \cdot 3kT} \frac{\sum_S S(S + 1)(2S + 1) \exp(-E(J, S)/kT)}{\sum_S (2S + 1) \exp(-E(J, S)/kT)}, \quad (3)$$

где g — множитель Ланде, β — магнетон Бора, k — постоянная Больцмана, T — температура.

Уравнение (3) является основным для расчета магнитной восприимчивости димеров с орбитально-невырожденными парамагнитными ионами. Теоретические уравнения для частных случаев получаются в результате подстановки в (2) и (3) соответствующих значений S_1, S_2 .

Аналогичным образом было выведено уравнение Ван-Флека для тримеров в случае высокой симметрии ($J_1 = J_2 = J_3, S_1 = S_2 = S_3$). Определим значения S . Для этого сложим любые два спина (например, S_2 и S_3) в промежуточный момент S_{23} :

$$S_{23} = S_2 + S_3, \text{ принимающий значения:}$$

$$S_{23} = S_2 + S_3, S_2 + S_3 - 1, \dots, |S_2 - S_3|.$$

Все дозволённые значения полного спина S : $S = S_1 + S_{23} = S_1 + S_2 + S_3$, находятся в результате сложения S_1 с каждым из значений S_{23} :

$$S = S_1 + S_{23}, S_1 + S_{23} - 1, \dots, |S_1 - S_{23}|.$$

Обменный гамильтониан принимает вид:

$$E = -J[S(S+1) - 3S_1(S_1+1)]. \quad (4)$$

А после подстановки (4) в уравнение Ван-Флека получим:

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2 \sum_S \sum_{S_{23}} S(S+1)(2S+1) \exp(-E/kT)}{3 \cdot 3kT \sum_S \sum_{S_{23}} (2S+1) \exp(-E/kT)}. \quad (5)$$

2. МОДЕЛИ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

В зависимости от спиновых характеристик получены следующие результаты:

1. Для димера со спиновыми характеристиками $S_1 = \frac{1}{2}$ и $S_2 = \frac{1}{2}$:

$$S = 1, 0 : S = S_1 + S_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1, S_1 + S_2 - 1 = 1 - 1 = 0;$$

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2 \left(6e^{\frac{J}{2kT}}\right)}{2 \cdot 3kT \left(3e^{\frac{J}{2kT}} + e^{\frac{-3J}{2kT}}\right)}.$$

Подставляя известные константы ($k^{-1} = 1.4388$, $\frac{Ng^2\beta^2}{3k} = 0.125$) и приводя все единицы измерения к см^{-1} , получим выражение:

$$\chi_M = \frac{0.125g^2 \left(6e^{\frac{1.4388J}{2T}}\right)}{2T \left(3e^{\frac{1.4388J}{2T}} + e^{\frac{-3 \cdot 1.4388J}{2T}}\right)}. \quad (6)$$

В дальнейших формулах константы имеют такие же значения.

Формула (6) называется уравнением Блини-Бауэrsa [13]. В работе J. Kohout и J. Kratsmar-Smogrovic [14] такая зависимость была выведена для пары Cu-Cu, а также были восстановлены параметры для данного уравнения, в результате получено:

$$\chi_M = \frac{0.585}{T} \frac{1}{1 + 1/3 \exp(447/T)}. \quad (7)$$

и построена соответствующая кривая (рис. 3).

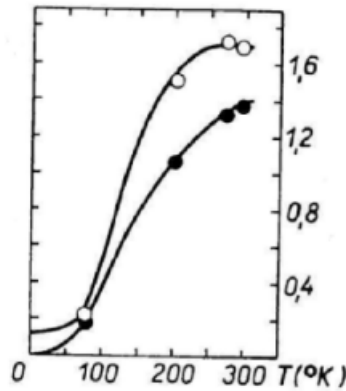


Рис. 3. График формулы (7) полученный в работе J. Kohout и J. Kratsmar-Smogrovic [14].

2. Для димера со спиновыми характеристиками $S_1 = 1$ и $S_2 = 1$:

$$S = 2, 1, 0 : S = S_1 + S_2 = 1 + 1 = 2, S_1 + S_2 - 1 = 2 - 1 = 1, S_1 + S_2 - 2 = 2 - 2 = 0;$$

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2 \left(30e^{\frac{2J}{kT}} + 6e^{\frac{-2J}{kT}} \right)}{2 \cdot 3kT \left(5e^{\frac{2J}{kT}} + 3e^{\frac{-2J}{kT}} + e^{\frac{-4J}{kT}} \right)}. \quad (8)$$

Димером с такими характеристиками может являться пара Ni-Ni, в статье M. J. Prushan, D. M. Tomezsko, S. Lofland [15] выводится аналогичная формула, проводится восстановление J и g , а также строятся кривые χ_M и $\chi_M T$ (рис. 4):

3. Для димера со спиновыми характеристиками $S_1 = \frac{3}{2}$ и $S_2 = \frac{3}{2}$:

$$S = 3, 2, 1, 0 : S = S_1 + S_2 = 3, S_1 + S_2 - 1 = 2, S_1 + S_2 - 2 = 1, S_1 + S_2 - 3 = 0;$$

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2 \left(84e^{\frac{9J}{2kT}} + 30e^{\frac{-3J}{2kT}} + 6e^{\frac{-11J}{2kT}} \right)}{2 \cdot 3kT \left(7e^{\frac{9J}{2kT}} + 5e^{\frac{-3J}{2kT}} + 3e^{\frac{-11J}{2kT}} + e^{\frac{-15J}{2kT}} \right)}. \quad (9)$$

S. Petit, G. Pilet, D. Luneau в своей работе [16] исследуют пару Co-Co и приходят к выводу формулы (9) при описании магнитных свойств этого соединения.

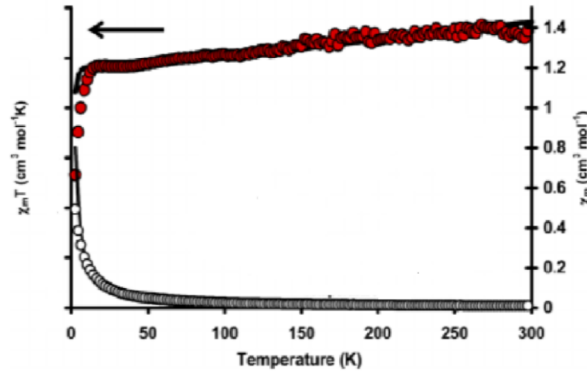


Рис. 4. График χ_M и $\chi_M T$ для Ni-Ni, М. J. Prushan, D. M. Tomezsko, S. Lofland [15].

4. Для димера со спиновыми характеристиками $S_1 = 1$ и $S_2 = \frac{1}{2}$:

$$S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2} : S = S_1 + S_2 = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}, S_1 + S_2 - 1 = \frac{1}{2};$$

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2 \left(15e^{\frac{J}{kT}} + \frac{3}{2}e^{\frac{2J}{kT}} \right)}{2 \cdot 3kT \left(4e^{\frac{J}{kT}} + 2e^{\frac{2J}{kT}} \right)}. \quad (10)$$

5. Для димера со спиновыми характеристиками $S_1 = \frac{3}{2}$ и $S_2 = 1$:

$$S = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2} : S = S_1 + S_2 = 1 + \frac{3}{2} = \frac{5}{2}, S_1 + S_2 - 1 = \frac{3}{2}, S_1 + S_2 - 2 = \frac{1}{2};$$

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2 \left(\frac{105}{2}e^{\frac{3J}{kT}} + 15e^{\frac{-2J}{kT}} + \frac{3}{2}e^{\frac{-5J}{kT}} \right)}{2 \cdot 3kT \left(6e^{\frac{3J}{kT}} + 4e^{\frac{-2J}{kT}} + 2e^{\frac{-5J}{kT}} \right)}. \quad (11)$$

6. Для димера со спиновыми характеристиками $S_1 = \frac{3}{2}$ и $S_2 = \frac{1}{2}$:

$$S = 2, 1, 0 : S = S_1 + S_2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} = 2, S_1 + S_2 - 1 = 1, S_1 + S_2 - 2 = 0;$$

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2 \left(30e^{\frac{3J}{2kT}} + 6e^{\frac{-5J}{2kT}} \right)}{2 \cdot 3kT \left(5e^{\frac{3J}{2kT}} + 3e^{\frac{-5J}{2kT}} + e^{\frac{-9J}{2kT}} \right)}. \quad (12)$$

7. Для тримера со спиновыми характеристиками $S_1 = S_2 = S_3 = \frac{1}{2}$:

$$S_{23} = 1, 0 : S = S_1 + S_{23} = \frac{3}{2}, S_1 + S_{23} - 1 = \frac{1}{2};$$

$$\chi_M = \frac{Ng^2\beta^2 \left(30e^{\frac{3J}{2kT}} + \frac{3}{2}e^{\frac{-3J}{2kT}} \right)}{3 \cdot 3kT \left(8e^{\frac{3J}{2kT}} + 2e^{\frac{-3J}{2kT}} \right)}. \quad (13)$$

В статье G. F. Kokoszka, F. Padula, A. S. Goldstein [17] уравнение (13) выводится для тримера Cu-Cu-Cu.

3. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ

Во всех вышеизложенных случаях функция χ_M зависит от T, J, g . T — температура (переменная величина), J — обменный параметр (неизвестный параметр), g — множитель Ланде (неизвестный параметр).

В соответствии с общей схемой требуется восстановить неизвестные параметры в модели по результатам эксперимента.

Варьируя неизвестные параметры J, g , необходимо приблизить теоретическую кривую к экспериментальным данным. Критерий близости будет зависеть от выбранного метода.

В следствии того, что множитель Ланде (g) входит в каждое из уравнений во второй степени и не может быть отрицателен, то можно выделить два ключевых различных случая: $g^2 \neq 0; J \neq 0$ (1 случай) и $g^2 \neq 0; J < 0$ (2 случай).

Возьмем в качестве примера димер со спиновыми характеристиками $S_1 = S_2 = 1$, χ_M для данного соединения имеет вид:

$$\chi_M = \frac{0.125g^2 \left(30e^{\frac{2 \cdot 1.4388J}{T}} + 6e^{\frac{-2 \cdot 1.4388J}{T}} \right)}{2T \left(5e^{\frac{2 \cdot 1.4388J}{T}} + 3e^{\frac{-2 \cdot 1.4388J}{T}} + e^{\frac{-4 \cdot 1.4388J}{T}} \right)}. \quad (14)$$

Качественные отличия между случаями 1 и 2, варьируя неизвестные параметры, заключается в появлении точки максимума во 2 случае. Наличие максимума на кривой температурной зависимости магнитной восприимчивости является отличительной особенностью димерных соединений, но максимумы на кривых χ_M могут наблюдаться и для кластеров других типов (тримеров, тетрамеров и т.д.).

Положение максимума однозначно связано со спинами ионов и значениями обменных параметров. Поэтому при температуре T_C (температура Кюри), при которой χ_M максимально, можно оценить значение обменного параметра, если спины ионов известны и факт димерности исследуемого соединения не вызывает сомнений.

Следует отметить, что точность определения J невелика. Поэтому предпочтительнее использовать методы, основанные на совмещении экспериментальной температурной зависимости магнитной восприимчивости с теоретическими кривыми.

В исследованиях [18]-[21] уравнение (14) получено для димера Ni-Ni, который является ферромагнетиком в широком диапазоне температур [22], а соли никеля при этом пара- или диамагнитны [23]. В результате, произведённых экспериментов получены экспериментальные данные, опираясь на которые и пользуясь выведенной ранее формулой (8) восстановлены неизвестные параметры: J — обменный параметр и g — множитель Ланде.

Для этого использовался метод наименьших квадратов, который основан на минимизации суммы квадратов отклонений искомым функций χ_M от экспериментальных значений функции y_k [11]:

$$\sum_{k=1}^n (\chi_M(T_k) - \tilde{\chi}_k)^2 \rightarrow \min,$$

где $\tilde{\chi}_k$ — экспериментальные данные при температуре T_k , $\chi_M(T_k)$ — значение искомой функции χ_M в точках T_k .

С помощью программного продукта Origin 2018 удалось восстановить параметры $J \approx 29.1^{-1}$ $g \approx 2.23$ рис. 5.

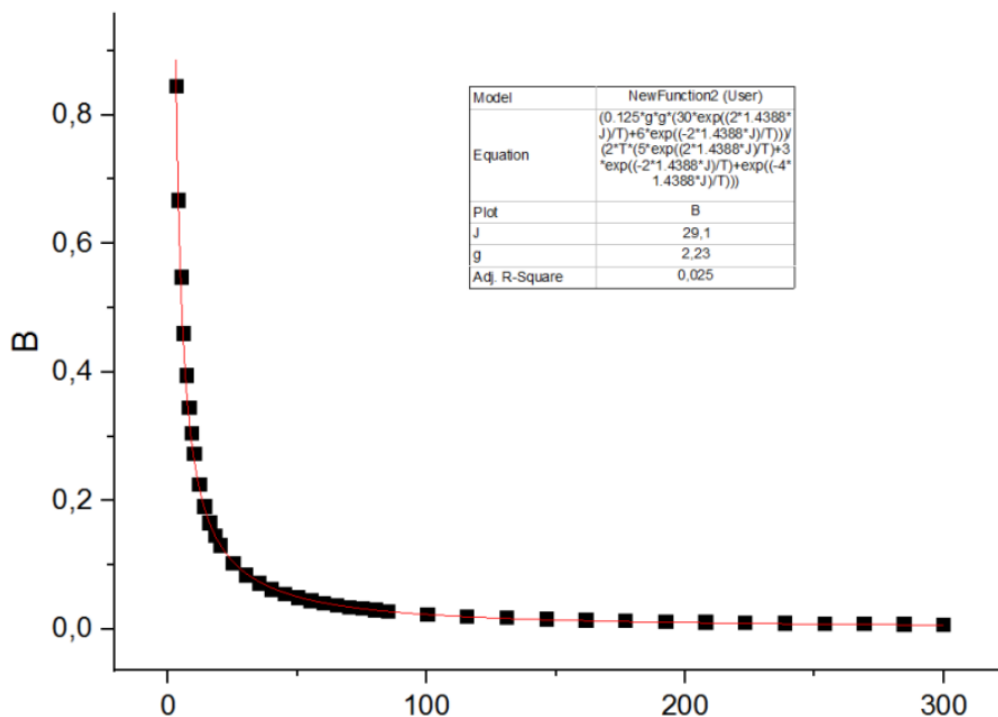


Рис. 5. График χ_{MS} восстановленными параметрами.

Восстановленные параметры близки к тем, что были получены в работе А. Bhattacharyya, P.K. Bhaumik, M. Das [18].

При достаточном количестве исходных данных модели и их малой погрешности к задаче восстановления параметров магнитной восприимчивости применим метод наименьших квадратов. В более общем случае необходимо применять методы регуляризации [24].

Рассмотрим обратную задачу, требующую разработки алгоритма, позволяющего определять спиновые характеристики неизвестного соединения по экспериментальным данным.

Исходными данными для этой задачи являются экспериментальные данные магнитной восприимчивости некоторого искомого соединения; измерения произведены при температурах T_1, T_2, \dots, T_n .

Для решения вычисляются значения χ_M в точках T_k ($k = 1, \dots, n$) для всех известных теоретических моделей (например (3), (5)-(13), с известными параметрами) и для каждой из моделей вычисляется следующее значение:

$$\omega_p = \sum_{k=1}^n (T_k - \chi_p(T_k))^2, \quad p = \overline{1, m},$$

где p — номер, приписанный каждой модели.

Из всех ω_p выбирается наименьшее, а соединение, соответствующее p модели, считается искомым соединением.

Однако в силу некорректности обратной задачи соединение, с соответствующими спиновыми характеристиками, принимается нами за искомое с некоторой долей сомнения (в задачах этого класса решение может быть не единственно).

В этом разделе были показаны теоретические модели магнитной восприимчивости, выведены формулы для кластеров размерности 3 и 4, изложены методы восстановления параметров при решении задач магнетохимии и продемонстрировано их применение, а также представлен алгоритм для решение обратной задачи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе дано теоретическое обоснование положений магнетохимии для построения моделей магнитной восприимчивости, которые применяются для изучения материалов парамагнитных комплексов переходных металлов (и др.). Такие материалы используются в современных устройствах электроники (преобразователи солнечной энергии).

Разработаны модели зависимостей и приведена методика восстановления параметров модели с помощью метода наименьших квадратов, показано что для случаев конкретных материалов параметры моделей совпадают с достаточной точностью.

В дальнейшем предполагается расширение исследований как по моделям (регуляризирующие алгоритмы), так и по данным экспериментов, проводимых в КФУ имени В. И. Вернадского.

Авторы выражают благодарность Гусеву А. Н. и Рудницкому О. И. за привлечение внимания к данной тематике и экспериментальные данные.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Новик, И. Б. О философских вопросах кибернетического моделирования / И. Б. Новик. — М.: Знание, 1964. — 40 с.
NOVIK, I. B. (1964) *Cybernetics: Philosophical and Sociological Problems*. Moscow: Znanie.
2. Икорский, В. Н. Магнетохимия: учебно-методическое пособие / В. Н. Икорский. — Новосибирск: Изд-во НГУ, 2012. — 47 с.
IKORSKY, V. N. (2012) *Magnetochemistry: educational and methodical manual*. Novosibirsk: Izd-vo NSU.
3. Келлерман, Д. Г. Магнетохимия: учебное пособие / Д. Г. Келлерман. — Екатеринбург: Изд-во УГУ, 2008. — 156 с.
KELLERMAN, D. G. (2008) *Educational manual*. Yekaterinburg: Izd-vo UMU.
4. Линник, Ю. В. Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории обработки наблюдений / Ю. В. Линник. — М.: Физматгиз, 1958. — 334 с.
LINNIK, Yu. V. (1958) *Method of Least Squares and Principles of the Theory of Observations*. Moscow: Fizmatglz.
5. Домрачева, Н. Е. и др. Железосодержащие жидкокристаллические дендримеры и их свойства. Структура и динамика молекулярных систем / Н. Е. Домрачева и др. — Казань: Изд-во КГУ, 2009. — 13 с.
DOMRACHEVA, N. E. (2009) *Ferrous liquid crystal dendrimers and their properties. Structure and dynamics of molecular systems*. Kazan: Izd-vo KSU.

6. Гусев, А. Н., Мазинов, А. С., Шевченко, А. И. и др. Исследование гетеропереходов на основе системы фуллерена и гидразона // Прикладная физика. — 2019. — № 6. — С. 48–53.
GUSEV, A. N., MAZINOV, A. S. & SCHEVCHENKO, A. I. (2019) Research of heterojunctions on the basis of the fullerene system and hydrazone. *Applied physics*. 6. Pp. 48–53.
7. Карлин, Р. Магнетохимия / Р. Карлин. — М.: Мир, 1989. — 400 с.
KARKIN, R. (1989) *Magnetochemistry*. М.: Mir.
8. VAN VLECK, J. H. (1932) *Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities*. Oxford: Oxford at the clarendon press.
9. Калинин, В. Т. Введение в магнетохимию / В. Т. Калинин, Ю. В. Ракиткин. — М.: Наука, 1980. — 302 с.
KALINNIKOV, V. T. & RAKITKIN, Y. V. (1980) *Introduction to magnetochemistry*. М.: Nauka.
10. Казин, П. Е. Методы исследования магнитных свойств материалов / П. Е. Казин, И. В. Кульбакин. — М.: Изд-во МГУ, 2011. — 34 с.
KAZIN, P. Y. & KULBAKIN, I. V. (2011) *Methods of research of magnetic properties of materials*. М.: Izd-v MSU.
11. YAN-FLEG, Y., EN-QING, G., CHEN-JIE, F. & ZHENG, H. (2005) Crystal structures and magnetic properties of triple helical binuclear complexes with bis(bidentate) diazine ligands. *Polyhedron*. V. 25 (14). Pp. 2778–2784.
12. BABIC-SAMARDZJA, K., BARAN, P. & BOCA, R. (2018) Structural and magnetic susceptibility study of an octanuclear Mn^{III} -охо-pyrazolido complex. *Polyhedron*. V. 149 (15). Pp. 142–147.
13. BLEANEY, B. & BOWERS, K. D. (1952) Anomalous Paramagnetism of Copper Acetate. *Proc. Roy. Soc. London Ser. A.* V. 214 (3). Pp. 451–465.
14. KOHOUT, J. & KRASTMAR-SMPGROVIC, J. (1968) Complexes with Organic Ligands (VII) Magnetic Properties of Copper (II) Acetate and Copper (II) Salicylate Complexes of Pyridine and Quinoline N- Oxides. *Chemické Zvesti*. V. 22. Pp. 481–492.

15. PRUSHAN, M. J. (2007) A nickel(II) di-12-phenolato bridged dinuclear complex: Weak antiferromagnetic interactions in nickel(II) dimers. *Inorganica Chimica Acta*. V. 360. Pp. 2245–2254.
16. PETIT, S. A (2007) Dinuclear cobalt(II) complex of calixarenes exhibiting strong magnetic anisotropy. *The Royal Society of Chemistry*. V. 40. Pp. 4582–4588.
17. KOKOSZKA, G. F. (1988) Magnetic interactions in a copper(II) trimer encapsulated in a molecular metal oxide cluster. *Inorganic Chemistry*. V. 1. Pp. 59–62.
18. BHATTACHARYYA, A. (2015) Synthesis, structure, magnetic property and self-assembly of two double end-on azide bridged ferromagnetic nickel(II) complexes with distinct bidentate blocking ligands: A combined experimental and theoretical study. *Polyhedron*. V. 101. Pp. 257–269.
19. ISHIKAWA, R. (2008) Intriguing assembled structure and properties of a novel dinuclear nickel(II) complex with an axially coordinated azide and methanol. *Journal of Molecular Structure*. V. 892. Pp. 220–224.
20. JPNG, W. S. (2013) Syntheses, crystal structures, circular dichroism, and magnetic properties of chiral dinuclear and polymeric nickel(II) compounds. *Polyhedron*. V. 52. Pp. 1206–1212.
21. SUBRATA, K. D. (2004) A novel dinuclear nickel (II) complex: spectroscopic and magnetic studies. *Inorganic Chemistry Acta*. V. 357. Pp. 1517–1522.
22. Киренский, Л. В. Магнетизм / Л. В. Киренский. — М.: АН СССР, 1967. — 196 с.
KIRENSKY, L. V. (1967) *Magnetism*. М.: Academy of Sciences of the USSR.
23. Вонсовский, С. В. Магнетизм. Магнитные свойства диа-, пара-, ферро-, антиферро- и ферримагнетиков / С. В. Вонсовский. — М.: Наука, 1971. — 1032 с.
VONSOVSKY, S. V. (1971) *Magnetism. Magnetic properties of dia-, para-, ferro-, antiferro- and ferrymagnetics*. М.: Science.
24. Вапник, В. Н. Алгоритмы и программы восстановления зависимостей / В. Н. Вапник. — М.: Наука, 1984. — 816 с.
VAPNIK, V. N. (1984) *Algorithms and dependency recovery programs*. М.: Nauka.

УДК: 519.673

MSC2010: 68M14, 68U20

РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ СИСТЕМЫ В СРЕДЕ ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© Е. А. Лукьянова, М. С. Прочитанский, М. Е. Лукьянова

КРЫМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. В. И. ВЕРНАДСКОГО

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ПРОСП. АКАДЕМИКА ВЕРНАДСКОГО, 4, СИМФЕРОПОЛЬ, 295007, РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

E-MAIL: *lukyanovaea@mail.ru*

DISTRIBUTED SYSTEMS IN A DYNAMIC MODELING ENVIRONMENT.

Lukyanova E. A., Prochitanskiy M. S., Lukyanova M. E

Abstract. This work is devoted to the consideration of modeling and research on the processes of the course of infectious diseases. The infectious process is one of the complex biological processes in nature, representing a serious danger to humanity and economic.

A common method for modeling a system of this type is to represent evolution of the system under study using a system of ordinary differential equations (ODEs), namely, the construction of analytical models — the SIR-model and its extensions. These models are widely used for modeling the process of the course of infectious diseases, since they allow to consider various aspects of the disease: the path of infection, the spatial distribution of the infection, the influence of geographical factors, and others. Also, these models allow you to implement various disease control strategies and quickly adapt the model to new requirements.

Today, in connection with large-scale threats of epidemic spread, it is relevant to build adequate predictive models and use modern effective software for the implementation, simulation and research of models of such systems.

In this regard, new software "Environment for Dynamic Modeling of Technical Systems SimInTech" is using to solve the problem of constructing, calculating and studying the expansion of the SIR-model by the example of modeling the patterns of the course of an infectious disease — Ebola virus fever.

Being an alternative to foreign analogues, such as Simulink, Scilab and others, software SimInTech allows you to simulate, calculate, research and synthesize various technical devices, including automation equipment and systems. Despite the fact that SimInTech is intended for modeling and calculation of technical systems and devices, while working with this software, SimInTech capabilities were discovered for modeling the process of the course of infectious diseases. It turned out that the simulation of such systems in SimInTech is possible thanks to the built-in programming language. To do this, using the tools of the built-in programming language SimInTech, the necessary user blocks were created and described, from which the model of the process of Ebola virus fever was formed.

In the process of building the model, it was revealed that when forming the SIR-type models the problem of an "algebraic loop" arises — the inputs of the blocks implicitly depend on their

outputs. It is proposed to solve this problem by means of SimInTech by introducing an additional block "Delay on the integration step" into the model structure.

A calculation model for the SIRDP-model of the spread of Ebola virus fever is constructed in the work and its simulation is performed.

Keywords: *modeling environment, Ebola Virus Disease, EVD, disturbed systems, ordinary differential equations, SIR-model and elaborations*

ВВЕДЕНИЕ

Сфера применения современных интеллектуальных технологий для описания и анализа систем реального мира постоянно расширяется, проявляясь в таких важных для человека областях, как медицина и здравоохранение. С точки зрения математического моделирования реальные объекты и явления представляют собой динамические системы, среди которых особый интерес представляют распределенные системы. В распределенных системах отношения местоположений элементов (или групп элементов) играют существенную роль с точки зрения функционирования системы, а, следовательно, и с точки зрения анализа и синтеза системы. Реальные системы, в том числе биологические системы, являются распределенными системами различного уровня сложности и внутренней организации. Одним из самых сложных биологических процессов в природе является инфекционный процесс, представляющий серьезную опасность для человечества и экономического развития.

Распространенным методом моделирования в этих сферах является представление закона эволюции исследуемой системы с помощью системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Моделями такого вида являются аналитические модели инфекционных заболеваний — SIR-модели. Идеи построения SIR-моделей возникли в начале XX века. В настоящее время разработано множество моделей, призванных детализировать SIR-модели и сделать возможным их практическое применение [1, 2, 4] для моделирования процесса протекания инфекционных заболеваний, поскольку позволяют учитывать различные аспекты заболеваний: пути заражения, вопрос пространственных характеристик распределения инфекции, влияние географических факторов и другие, а также позволяют внедрять различные стратегии контроля заболеваемости и быстро подстраивать модель под новые требования.

Сегодня в связи с масштабными угрозами распространения эпидемий актуальным является как построение адекватных прогнозирующих моделей, так и использование современных эффективных программных сред для реализации, симуляции и исследования моделей таких систем.

Цель работы: исследовать аппарат среды математического моделирования и симуляции SimInTech для построения, расчета и исследования расширения SIR-модели на примере моделирования закономерностей течения инфекционного заболевания — вирусной лихорадки Эбола.

1. МОДЕЛЬ РАСПРЕДЕЛЁННОЙ СИСТЕМЫ

Вирусная лихорадка Эбола впервые была обнаружена в 1976 году на территории Демократической Республики Конго, неподалеку от реки Эбола, откуда и берет свое название. С тех пор вспышки Эболы происходили уже более 25 раз на всей территории Африки. Вирус, прежде известный как геморрагическая лихорадка Эбола, является одним из самых смертоносных заболеваний для человека. В качестве модели распространения вирусной лихорадки Эбола рассмотрим модель, представленную в работе [?]. Согласно введённым категориям индивидов и категории P — концентрации вируса в окружающей среде, назовём её SIRDP-моделью. Она является расширением SIR-модели и учитывает большинство путей распространения вируса, естественные демографические процессы и другие важные аспекты заболевания, но при этом не является слишком громоздкой.

Схема SIRDP-модели показана на рис. 1. Информация о всех категориях и параметрах SIRDP-модели показана в таблице 1.

Рассматриваемая SIRDP-модель представляется с помощью системы ОДУ вида:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \pi - (\beta_1 I + \beta_2 D + \lambda P)S - \mu S \\ \frac{dI}{dt} &= (\beta_1 I + \beta_2 D + \lambda P)S - (\mu + \delta + \gamma)I \\ \frac{dR}{dt} &= \gamma I - \mu R \\ \frac{dD}{dt} &= (\mu + \delta)I - bD \\ \frac{dP}{dt} &= \sigma + \xi I + \alpha D - \eta P. \end{aligned} \tag{1}$$

Складывая первое, второе и третье уравнения системы (1), получим уравнение

$$\frac{dN}{dt} = \pi - \mu N - \delta I,$$

где $N = S + I + R$ — общая численность населения (живые индивиды).

Итак, количество восприимчивых индивидов S пополняется с постоянной скоростью π . Восприимчивые индивиды S заражаются в результате контактов β_1 с инфицированными I и контактов β_2 с умершими индивидами D . Восприимчивые

индивиды S так же заражаются при контакте с зараженной окружающей средой P со скоростью λ . Скорость гибели инфицированных индивидов I увеличивается на δ в следствии протекания болезни. Инфицированные индивиды I выздоравливают со скоростью γ . Умершие индивиды D могут быть захоронены со скоростью b . Восприимчивые S , инфицированные I и выздоровевшие индивиды R умирают естественной смертью со скоростью μ . Также инфицированные I и умершие индивиды D загрязняют окружающую среду P со скоростями ξ и α соответственно.

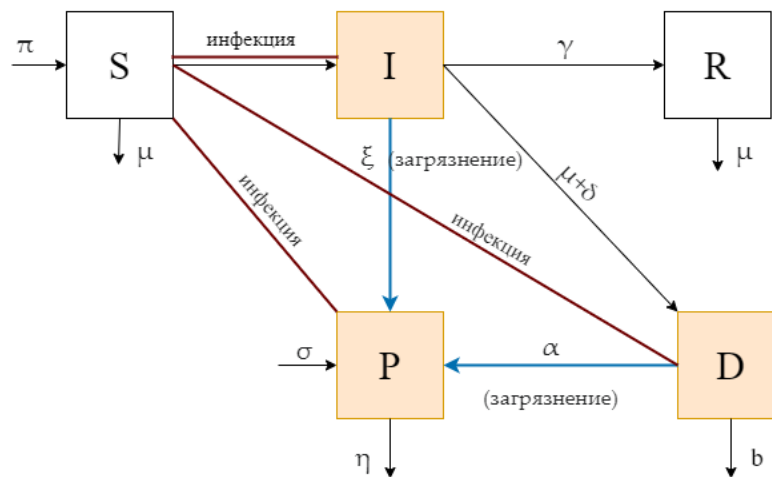


Рис. 1. Схема распространения вируса Эбола для SIRDP-модели

Таблица 1. Описание категорий и параметров SIRDP-модели

Символ	Описание
S	Восприимчивые индивиды
I	Инфицированные индивиды
R	Выздоровевшие индивиды
D	Зараженные вирусом и умершие индивиды
P	Патогены вируса Эбола в окружающей среде
π	Уровень пополнения восприимчивых индивидов (рождаемость)
η	Скорость исчезновения вируса из окружающей среды
ξ	Загрязнение окружающей среды инфицированными индивидами
α	Загрязнение окружающей среды умершими индивидами
δ	Уровень смертности в результате болезни
β_1	Коэффициент передачи вируса при контакте с инфицированными
β_2	Коэффициент передачи вируса при контакте с умершими
λ	Коэффициент передачи вируса при контакте с окружающей средой
γ	Скорость выздоровления инфицированных индивидов
μ	Уровень естественной смертности
$1/b$	Скорость захоронения умерших
σ	Скорость заражения окружающей среды

2. РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИ В ПРОГРАММНОЙ СРЕДЕ

Рассмотрим среду математического моделирования и симуляции SimInTech. Программное обеспечение «Среда динамического моделирования технических систем SimInTech», разработано коллективом МГТУ им. Н. Э. Баумана и ООО «ЗВ Сервис», и является альтернативой зарубежным аналогам (Simulink, Scilab, MATRIXX, и др.). Программное обеспечение SimInTech позволяет рассчитывать, моделировать, исследовать и синтезировать различные технические устройства (механические, гидравлические, электротехнические и другие, в том числе средства и системы автоматики). Расчетные математические модели в SimInTech создаются посредством функционально блочного программирования при помощи блоков, которые содержатся в различных библиотеках. Библиотеки блоков позволяют формировать в визуальном понятном виде для пользователя расчетные модели для решения задач в таких областях, как: теплогидравлика, релейная автоматика, электрика (в действующих и мгновенных значениях), баллистика летательных аппаратов, механика и др.

Среда динамического моделирования SimInTech имеет собственный встроенный скриптовый язык программирования, в котором с помощью операторов и функций можно решить, например, задачи расчета математических выражений и уравнений, работу над векторами и матрицами, управление отображением графических примитивов, реализацию простых алгоритмов управления для настройки и отладки моделей. Несмотря на то, что ПО SimInTech предназначено для моделирования и расчета технических систем и устройств, в ходе ознакомления и работы с данным ПО были обнаружены возможности SimInTech для моделирования сложных биологических процессов — процесса протекания инфекционных заболеваний. Оказалось, что моделирование таких систем в SimInTech возможно благодаря встроенному языку программирования. Для этого в работе с помощью средств встроенного языка программирования SimInTech были созданы и описаны необходимые пользовательские блоки, из которых и была сформирована модель.

Рассмотрим процесс построения в SimInTech расширения SIR-модели на примере представленной выше SIRDP-модели.

Для начала построения модели необходимо создать новый проект, в котором будет синтезирована модель. Модель формируется из блоков, моделирующих различные категории индивидов SIRDP-модели. Для описания каждого блока, в главном окне на вкладке «Динамические», необходимо выбрать блок «Язык программирования», и разместить его в рабочей области окна проекта. Окно нового проекта, с размещенным в нём блоком, показано на рис. 2.

Далее, переходим к редактированию блока:

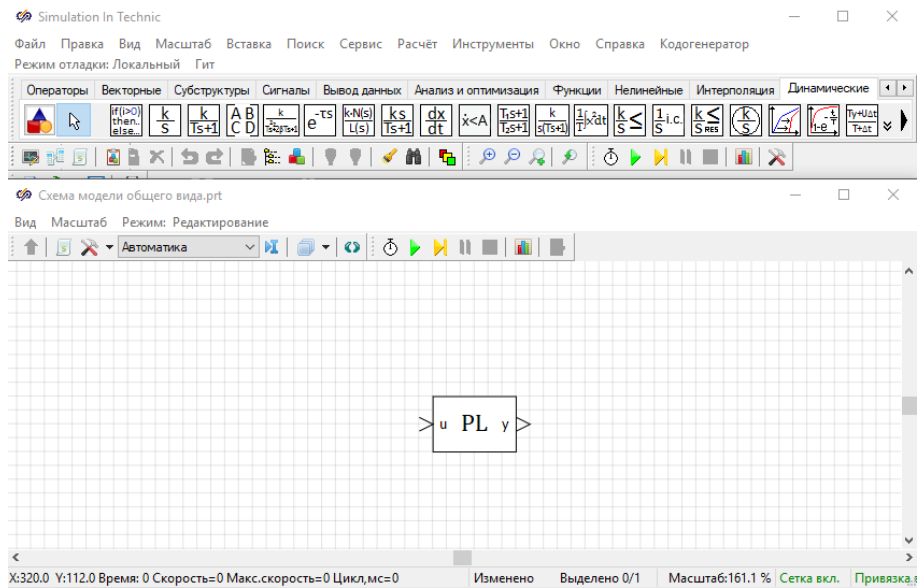


Рис. 2. Окно проекта с блоком «Язык программирования»

- 1) задаём входы блока с помощью команды `input` — значения других блоков системы, участвующих при расчете;
- 2) задаём выходы блока с помощью команды `output`;
- 3) с помощью команды `init` задаём начальные условия;
- 4) опишем основные вычисления, которые состоят из решения дифференциального уравнения, где в качестве неизвестного выступает x ;
- 5) в последней строке укажем, какие переменные присваиваются выходам блока, описанным в `output` (относительно этих переменных будет разрешено уравнение или система уравнений).

Редактор блока «Язык программирования», представляющего категорию восприимчивых индивидов S , показан на рис. 3.

После описания всех основных блоков, расстановки их в окне проекта и соединения соответствующих портов (входов и выходов) в модель следует добавить средства для визуализации результатов расчета модели. Для этого в главном окне на вкладке «Вывод данных», необходимо выбрать блок «Временной график», и разместить его в окне проекта.

Для определения глобальных констант (параметров модели) воспользуемся «редактором скрипта», проекта, показанным на рис. 4.

При запуске расчета модели, построенной по выше изложенному алгоритму, возникнет следующая проблема — «Ошибка: Найдена алгебраическая петля».

```

1 input I, D, P;
   output S;

   init x = S0;

   x' = -pi - (bt1*I + bt2*D + l*P)*x - mu*x;

   S = x;
    
```

Рис. 3. Блок категории восприимчивых индивидов S

```

1 initialization
   //константы
   const mu = 0.02;
   const del = 0.6;
   const g = 0.06;
   const _pi = 1;
   const b = 0.8;
   const xi = 0.04;
   const al = 0.04;
10  const eta = 0.03;
   const l = 0.02;
   const bt1 = 0.006;
   const bt2 = 0.012;
   const sig = 0.6;

   const N = 10;
   const S0 = N*0.98;
   const I0 = N*0.02;
   const R0 = 0;
20  const D0 = 0;
   const P0 = 1;

23  {...} ...
60  end;
    
```

Рис. 4. Окно «Скрипт»

Наличие в структурной схеме алгебраических петель означает, что входы блоков неявным образом (через другие блоки и линии связи) зависят от их выходов. В математической форме уравнение алгебраической петли выражается в виде неявной функции от выходов:

$$y = g(u, y, t).$$

Для устранения такой ошибки необходимо воспользоваться дополнительным блоком «Задержка на шаг интегрирования», (обозначается Δt) из библиотеки «Нелинейные». Данный блок необходимо установить в разрез алгебраической петли.

Окончательный вид сформированной модели с установленными в ней дополнительными блоками показан на рис. 5.

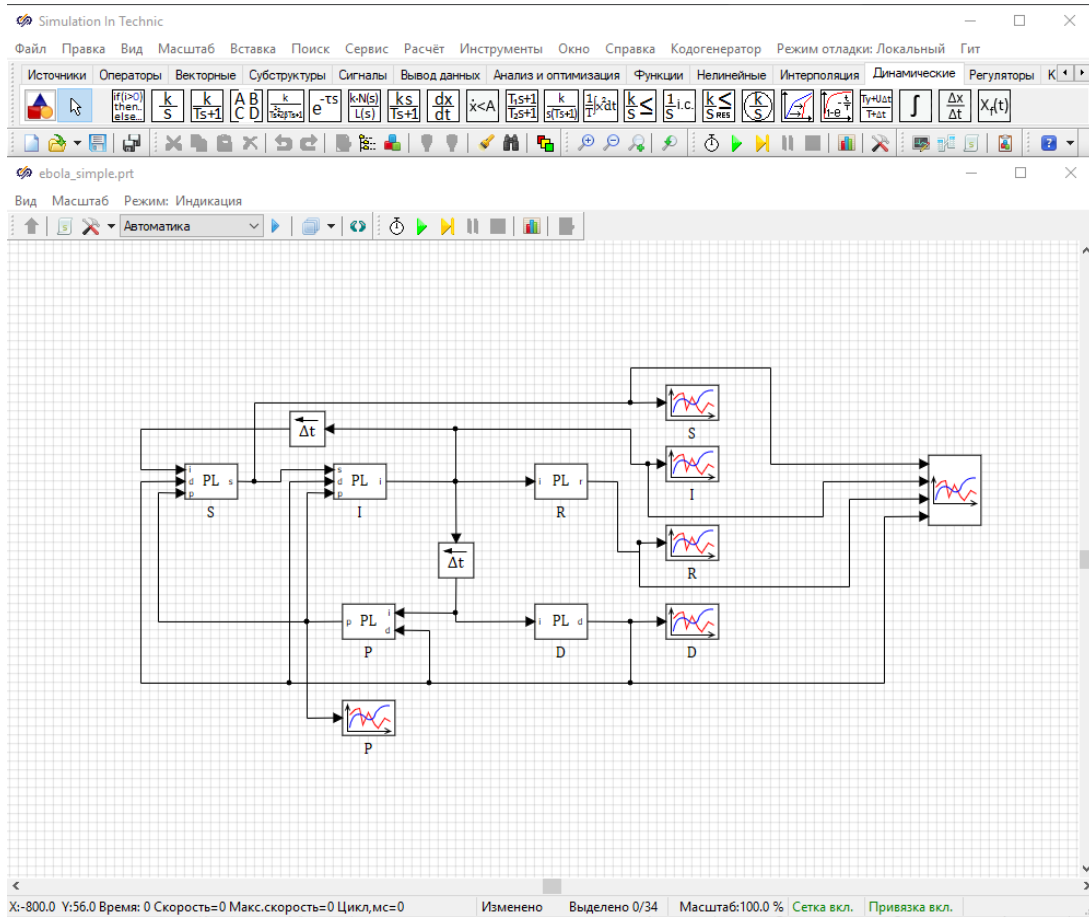


Рис. 5. Окно проекта с построенной моделью

После того, как модель задана, можно произвести ее симуляцию (расчет). Значения параметров выбраны исходя из фундаментальных исследований, посвященных лихорадке Эбола [5]–[10] и статистике из открытых интернет ресурсов [11, 12]. На рис. 6 представлены результаты симуляции при следующих значениях параметров:

$$\mu = 0.02, \delta = 0.6, \gamma = 0.06, \pi = 1,$$

$$b = 0.8, \xi = 0.4, \alpha = 0.4, \eta = 0.03,$$

$$\beta_1 = 0.006, \beta_2 = 0.012, \lambda = 0.02, \sigma = 0.6.$$

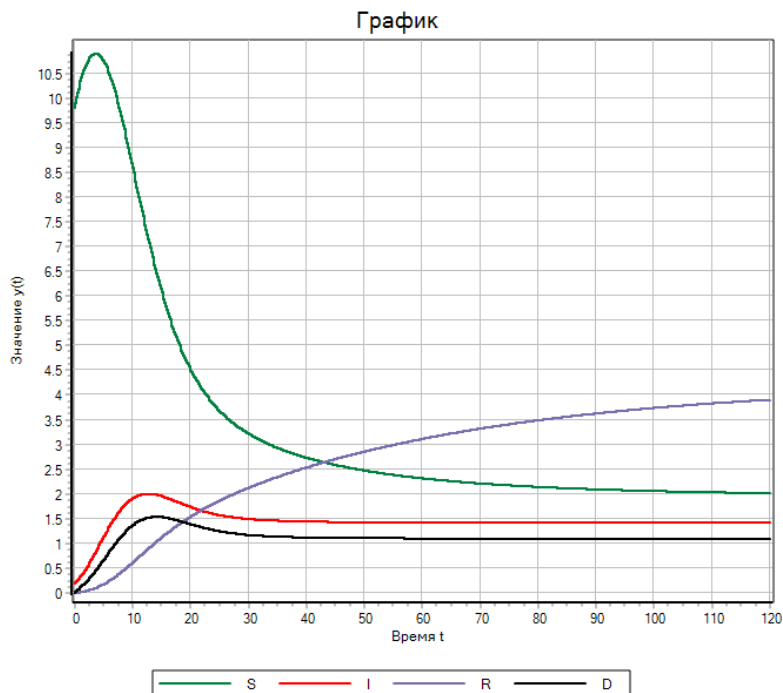


Рис. 6. Результаты симуляции

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрен подход к задаче моделирования и прогнозирования процесса распространения инфекционных заболеваний, основанный на использовании моделей типа SIR и новой отечественной среды динамического моделирования SimInTech. Установлено, что среда SimInTech, предлагаемая для работы с техническими системами и устройствами имеет возможности и для работы с такими биологическими процессами, как инфекционные. В работе в среде SimInTech реализован процесс протекания инфекционного заболевания — вирусной лихорадки Эбола, проведена его симуляция для значений параметров распространения вируса Эбола, являющимися реальными параметрами, используемыми в практике и теории врачей-эпидемиологов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Боев, Б. В. Компьютерное моделирование и прогнозирование эпидемий птичьего гриппа / Б. В. Боев, В. В. Макаров // Ветеринарная патология. — 2005, 3. — С. 49–58.
BOEV, B. & MAKAROV, V. (2005) Computer modeling and forecasting of bird flu epidemics. *Veterinary pathology*. №3. Pp. 49–58.

2. Bao, L. (2012) A new infectious disease model for estimating and projecting HIV/AIDS epidemics. *Sexually Transmitted Infections*. Vol. 88, Suppl. 2. Pp. 58–64.
3. Araz, O. M., Fowler, J. W., Lant, T. W., Jehn, M. (2009) A pandemic influenza simulation model for preparedness planning. *Proceedings of the 2009 Winter Simulation Conference*. DOI: 10.1109/WSC.2009.5429732. Pp. 1986–1995.
4. Berge, T. A., Lubuma, J. M. -S., Moremedi, G. M. , Morris, N., Kondera-Shava, R. (2016) Simple Mathematical Model for Ebola in Africa. *Journal of Biological Dynamics*. DOI: 10.1080/17513758.2016.1229817. Pp. PMID: 29067875.
5. Bibby, K., Casson, L. W., Stachler, E., Haas, C. N. (2015) Ebola virus persistence in the environment: state of the knowledge and research needs. *Environmental Science & Technology Letters*. DOI: 10.1021/ez5003715. Pp. 2–6.
6. Francesconi, P., Yoti, Z., Declich, S., Onok, P. A., Fabiani, M., Olango, J., Andraghetti, R., Rollin, P. E., Opira, C., Greco, D., Salmaso, S. (2003) Ebola hemorrhagic fever transmission and risk factors of contacts. *Emerging Infectious Diseases*. DOI: 10.3201/eid0911.030339. Pp. 1430–1437.
7. Leroy, E. M., Rouquet, P., Formenty, P., Souquaire, S., Kilbourne, A., Froment, J. -M., Bermejo, M., Smit, S. (2004) Multiple Ebola virus transmission events and rapid decline of central African wildlife. *Science*. 303. Pp. 387–390.
8. Leroy, E. M., Kumulungui, B., Pourrut, X., Rouquet, P. (2005) Fruit bats as reservoirs of Ebola virus. *Nature*. 438. Pp. 575–576.
9. Piercy, T. J., Smither, S. J., Steward, J. A. (2010) The survival of filoviruses in liquids, on solid substrates and in a dynamic aerosol. *Journal of Applied Microbiology*. 109. Pp. 1531–1539.
10. Youkee, D., Brown, C. S., Lilburn, P., Shetty, N., Brooks, T., Simpson, A., Bentley, N., Lado, M., Kamara, T. B., Walker, N. F., Johnson, O. (2015) Assessment of environmental contamination and environmental decontamination practices within an ebola holding unit. *PLOS One*. 10(12). Pp. .
11. Данные по вспышке Эболы 2014 года // GitHub [Электронный ресурс]. — Режим доступа:
<https://github.com/cmriivers/ebola>
GitHub. (2015) *Data for the 2014 Global Ebola outbreak*. [Online] Available from:
<https://github.com/cmriivers/ebola>.

-
12. Данные по вспышкам Эболы с 2004 по 2014 год // WHO.int [Электронный ресурс]. — Режим доступа:
<https://apps.who.int/gho/data/node ebola>
WHO.int. (2015) *Data for the Ebola outbreaks from 2004 to 2014*. [Online] Available from:
<https://apps.who.int/gho/data/node ebola>.

УДК: 004.023; 519.16

MSC2010: 90C27

МЕТАЭВРИСТИКИ В БЛИЗКИХ ЗАДАЧАХ МАРШРУТИЗАЦИИ ТИПА МНОГИХ КОММИВОЯЖЕРОВ

© О. О. Макаров

КРЫМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. В. И. ВЕРНАДСКОГО
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ПРОСП. АКАДЕМИКА ВЕРНАДСКОГО, 4, СИМФЕРОПОЛЬ, 295007, РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

E-MAIL: *fantom2.00@mail.ru*

METAHEURISTICS IN RELATED ROUTING PROBLEMS SUCH AS MANY TRAVELING SALESMEN.

Makarov O. O.

Abstract. Based on the proximity of routing problems in terms of meta-information, the paper presents the stage of forming databases for training an intelligent system to select metaheuristic algorithms for solving the multi-agent routing problem. The closeness of two routing problems is determined by the closeness of their mathematical models and the closeness of the fragments of a complex network involved in the solution. The description of the method of determining the proximity of two graphs based on finding the weighted metric distance between the vectors of metaheuristic parameters of the corresponding graphs is given.

A formal approach to solving the routing problem on the basis of proximity problems is described. The stages of forming the solution of the original problem and the close problem are shown.

The experiment confirming the hypothesis that the vectors of metaheuristic characteristics of close problems are at a small distance from each other is shown. Auxiliary experiments showing the maximum allowable difference between graphs at which they are considered close are also described. In addition, an experiment is presented to prove the hypothesis that a metaheuristic algorithm that works optimally for a particular problem will also work optimally for a close one.

The description of the structure of the intellectualized system for the choice of metaheuristics is given and the basic principles of the system's work are formed.

In the solution of multi-agent problems of the type of a traveling salesman of large dimensionality, a coordinated decomposition into local cluster routing problems is performed. Suitable algorithms are selected at the local level.

Experimental results of solving the traveling salesman problems using various metaheuristics on TSPLIB data are presented. Efficient route finding algorithms are identified. The experiment showed that most of the applied metaheuristics allow to find approximate or optimal solutions. A list of the best algorithms in terms of accuracy is given, which are planned to be used in the development of an intelligent system for selecting metaheuristics, taking into account the

specifics of the problem (network structure and complexity, accuracy, time). A combination of metaheuristics that can lead to optimal results is assumed.

Keywords: *traveling salesman problem, multiple traveling salesman problem, problem proximity, TSPLIB, metaheuristics, graph metadata*

ВВЕДЕНИЕ

Приближенное решение класса NP -трудных задач прикладной многоагентной маршрутизации ($NPmTSP$ (Multiple Traveling Salesman Problem, задача многих коммивояжеров)) будем связывать с процедурой сравнения класса исследуемых задач $Z \subset NPmTSP$ с близкими к ним задачами \tilde{Z} из подкласса полиномиально разрешимых задач ($\tilde{Z} \in PmTSP \subset NPmTSP$) или с представителями явно полиномиально неразрешимых из $NPmTSP$.

Для задач из $PmTSP$ известны экземпляры, решение которых можно найти точно — это лучшие представители для близких задач из $NPmTSP$, решаемых приближенно, за минимальное полиномиальное время. Самостоятельными являются задачи распознавания хороших эталонов полиномиально разрешимых задач и заведомо неразрешимых за разумное время. Близкой к рассматриваемой является работа [7], представленная на международной конференции ИОИ-14 (2022), в которой рассмотрена проблематика алгоритмической разрешимости NP -трудных задач.

Ставится задача описания NP -трудных задач, близких к полиномиально разрешимым или к практически неразрешимым. Здесь возникает проблема выбора и описания близости. Введение метрик для близких задач и для соответствующих пространств решений существенно зависит от специфики задач, свойств множества ограничений, целевых функций, геометрии соответствующих множеств [1, 3]. Регулярно применяемый комбинаторно-геометрический подход кроме наглядности связан с изучением комбинаторно-геометрических свойств NP -трудных задач и соответствующей интерпретацией алгоритмов решения [2]. В этом подходе рассматривается система «задача — алгоритм», которая исследовалась, начиная с работ Журавлева Ю.И. [5], в направлении получения оценок сложности задач и алгоритмов. Представляет интерес исследование классов близких задач в самых разных вариантах.

Подход, основанный на решении близких задач, опирается на систему «задача — близкая задача — алгоритм». В частности, для геометрического конструктивизма в [1] приводится ссылка на работу Моравека Й., в которой «формализуется класс алгоритмов, основанных на линейных сравнениях, и предпринимается попытка получения нижних оценок числа сравнений, необходимых для решения задачи». Здесь термины «сравнение», «близость» являются базовыми.

Для исследования труднорешаемой задачи, получения какой-либо информации о решении, может использоваться близкая простая (эталонная) задача, для которой имеется решение. Для этого исследуемую задачу включают в некоторое специальным образом построенное однопараметрическое семейство задач (гомотопирующее изучаемую задачу к эталонной), а затем это решение приближают по параметру к отыскиваемому решению исходной задачи. В работе [4] таким способом применен метод продолжения по параметру к исследованию различных классов экстремальных задач, в частности, к задачам математического программирования.

Экстремальные задачи на графовых структурах большой размерности предполагают сравнение с прецедентами; построение вспомогательных структур, удовлетворяющих заданным свойствам и обеспечивающих полиномиальную разрешимость. В реальности возникают задачи на сложных структурах (качественных и количественных) для объектов и взаимодействующих агентов. Исследуемым реальным объектам ставятся в соответствие модели, задачи, наборы ограничений, предписаний, оценки экспертов и пр. Объекты, как правило, являются многопризнаковыми. Соответствующие признаки при формализации переносятся на модели и задачи. Тем самым, выделение требуемого класса задач связывается со сравнениями на близость по многим признакам (параметрам, векторам). Необходимая близость обеспечивается выбором соответствующих метрик.

В частности, подходящим математическим инструментом являются разработанные Петровским А. Б. [9] теоретические и практические положения мультимножеств. Существует выбор различных способов выделения метрик (псевдо-метрик) на σ -алгебрах измеримых множеств и мультимножеств. Для рассматриваемой проблематики применимы различные разновидности иерархического и неиерархического кластерного анализа, в частности, для задач классификации и упорядочения многопризнаковых объектов, которые могут существовать в нескольких вариантах с отличающимися значениями количественных и качественных признаков. Рассмотренные подходы могут быть перспективными для выделения классов полиномиально разрешимых задач, близких к NP -трудным; позволяют строить цепочки задач, алгоритмические процедуры приближенного решения и сложностные карты NP -трудных задач.

Многоагентные задачи маршрутизации на сложных инфраструктурных сетях большой размерности для снижения сложности подвергаются декомпозиции. Например, сводятся к локальным задачам TSP_j (Traveling Salesman Problem, задача коммивояжера) на кластерах C_j , $j = 1, 2, \dots, m$, согласованным с маршрутами m

коммивояжеров. Поэтому основным этапом решения таких задач является наполнение базы метаэвристических алгоритмов для решения задач TSP_j . База алгоритмов встраивается в интеллектуализированную систему выбора метаэвристик по набору метаданных (метрических характеристик) близких задач.

Выбор подходящей метаэвристики для решения локальной задачи TSP_j становится важным, поскольку эти алгоритмы позволяют эффективно решать задачи оптимизации всех маршрутов. Отдельной задачей становится выбор оптимального алгоритма и метапараметров для каждой конкретной задачи. Эта проблема связана с большим разнообразием алгоритмов [14] и метаданных. Предполагается, что алгоритм, который хорошо работает на определенной, уже эффективно решенной задаче, также подойдет для подобной к ней задаче. В данном случае, если метаэвристика дает хороший результат на графе определенной структуры, то и на подобном графе она даст хорошие результаты.

В [14] приведен обзор исследований в области метаэвристик, которые представляют собой мощные методы решения задач оптимизации. Отмечаются значительные достижения в этой области и непрерывная разработка новых алгоритмов. Выявлены наиболее перспективные и эффективные метаэвристики, которые были предложены за последние двадцать лет, исключая классические подходы. Большая часть предложенных метаэвристик применима к задачам условной дискретной оптимизации, в частности к задачам псевдодвулевой условной оптимизации, то есть к задачам TSP и $mTSP$.

В статье [8] приводится детальный обзор способов решения близкой к $mTSP$ задачи $VRPTW$ (Vehicle Routing Problem with Time Windows, задача маршрутизации транспортных средств с временными окнами). За основу субоптимального решения принимается сумма маршрутов коммивояжеров на каждом из кластеров C_j . Из этого видно, что решение TSP_j применяется при решении более сложных задач оптимизации $mTSP$.

В [6] рассматривается алгоритм иерархической кластеризации для $HmTSP$ (Hierarchical multiple Traveling Salesman Problem, иерархическая задача многих коммивояжеров). Также приводится сравнительный анализ решателя Concorde и алгоритма имитации отжига для решения задач коммивояжера. Показано, что многоуровневая кластеризация для задач большой размерности, с последующим применением решателей TSP , способствует снижению сложности решения $mTSP$.

Приведем базовую часть результатов по формализации подхода решения многоагентных задач маршрутизации на основе кластеризации сети и выбору метаэвристики для задачи TSP на кластере по известной метаэвристике для близкой задачи TSP , а также по тестированию метаэвристик решения TSP на кластерах.

1. АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ МНОГОАГЕНТНОЙ МАРШРУТИЗАЦИИ ТИПА КОММИВОЯЖЕРА

Рассмотрим формализм, соответствующий подходу решения задач маршрутизации на основе близких задач (см. схему рис. 1).

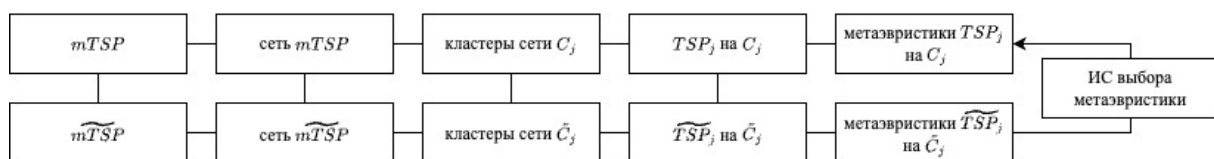


Рис. 1. Схема решения $mTSP$ по близкой задаче

Основным элементом схемы (рис. 1) является интеллектуализированная система по выбору метаэвристик (ИСМЭ). Выбор метаэвристик задачи TSP_j на кластере C_j , $j = \overline{1, m}$ осуществляется на основании близости задачи (TSP_j, C_j) к задаче $(TSP_{\tilde{j}}, C_{\tilde{j}})$ по набору метрических характеристик сети $mTSP$ и соответствующих TSP_j . Одним из факторов близости задач является гистограмма распределения дуг соответствующего графа сети. Управление выбором метаэвристики в этом случае осуществляется на основе близости гистограмм. На рис. 2 представлена структура ИСМЭ.

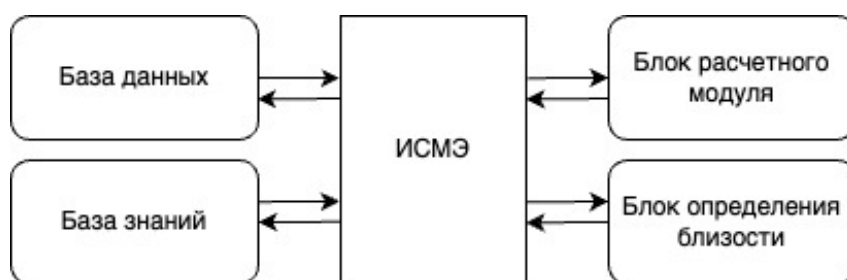


Рис. 2. Схема ИСМЭ

В системе ИСМЭ наиболее трудоемким этапом является наполнение базы метаэвристик, что, в свою очередь, связано с проведением экспериментов на большом наборе примеров графов сети. Рассмотрим более подробно этап выбора метаэвристик для задачи TSP_j на кластере сети C_j , $j = \overline{1, m}$.

При решении TSP возникает вопрос выбора оптимального алгоритма среди множества алгоритмов и набора параметров для получения наиболее близкого к лучшему маршрута за приемлемое время. Зачастую требуется применить несколько алгоритмов последовательно, например, запускается быстрый жадный алгоритм для первого приближения и затем другим алгоритмом производится улучшение этого решения. Естественно, возникает необходимость автоматизировать отбор композиций алгоритмов решения TSP и набора метаэвристических параметров. Далее представлен этап формирования базы данных для обучения интеллектуальной системы выбора алгоритма, основываясь на метаинформации задачи TSP и графа.

В связи с этим проводится вычислительный эксперимент для сравнительного анализа на тестовых наборах данных, для которых известны близкие к точным решения. Алгоритмы решения задачи многоагентной маршрутизации типа коммивояжера (многих коммивояжеров) опираются на метаэвристические алгоритмы решения TSP . Таким образом, в соответствии со схемой рис. 1, предлагаемая модель применима для $mTSP$, а также является основой для выбора алгоритмов решения $VRPTW$, описанной в [8].

Далее приведен список нескольких метаэвристических алгоритмов (из более чем 40 участвующих в эксперименте):

1. Best Known (BK) — лучшее известное на данный момент решение для набора данных, берется из библиотеки TSPLIB (Traveling Salesman Problem Library) [29].
2. Ant Colony Optimization (ACO) — метаэвристический алгоритм, основанный на поведении муравьев в поисках пищи. Алгоритм ACO для некоторых экземпляров TSP может находить качественные решения за разумное время, но его эффективность зависит от выбора параметров и конкретных характеристик исследуемого экземпляра TSP [10, 13, 26, 30].
3. Christofides ($Chris$) — алгоритм, основанный на комбинации минимального охватывающего дерева и идеального соответствия. Имеет временную сложность $O(n^3)$, где n — количество вершин. Алгоритм гарантировано выдает маршрут, который максимум в 1,5 раза длиннее оптимального, что делает его одним из самых эффективных эвристических алгоритмов для TSP [18, 28].
4. Concave Hull ($Concave$) — не предназначен специально для решения TSP . Он используется для нахождения вогнутой оболочки набора точек в двумерном пространстве. Имеет временную сложность $O(n/\log n)$, где n — количество точек [19].

5. Genetic — метаэвристический алгоритм оптимизации, основанный на принципах естественного отбора и генетики [25].
6. Greedy Randomized Adaptive Search Procedure (*GRASP*) — многозадачный алгоритм, который сочетает жадную конструктивную эвристику с методами локального поиска [22].
7. Greedy Karp-Steele Patching (*GKSP*) — улучшение традиционного жадного алгоритма [16].
8. Hopfield Network (*HN*) — алгоритм на основе нейронной сети, который используется для задач оптимизации, включая *TSP*. Алгоритм основан на сети взаимосвязанных вычислительных блоков (нейронов), где каждый нейрон соответствует вершине в *TSP*, а связи между нейронами представляют собой расстояния между вершинами [20, 21].
9. Iterated Search (*IS*) — алгоритм, основная идея которого заключается в использовании первичного решения и применении процедуры поиска для его улучшения. Этот процесс повторяется несколько раз, каждый раз начиная с наилучшего решения, найденного на данный момент. Процедуры поиска, используемые на каждой итерации, могут быть одинаковыми или разными и выбираются с учетом их сильных и слабых сторон [12].
10. Nearest Insertion (*NI*) — алгоритм, который начинает работу с первичного маршрута, включающего две вершины, а затем итеративно добавляет к маршруту новые вершины таким образом, чтобы минимизировать общую продолжительность маршрута [11].
11. Nearest Neighbour (*NN*) — алгоритм, который начинает работу с произвольной вершины, а затем многократно выбирает ближайший не посещенную вершину, пока все не будут посещены, что приводит к полному гамильтонову циклу [24].
12. Random Insertion (*RI*) — алгоритм, который начинается с выбора произвольной первичной вершины, а затем добавляет в маршрут вершину, которая находится ближе всего к начальной. Следующая вершина выбирается случайным образом из набора не посещенных и вставляется в маршрут в случайном месте, которое минимизирует увеличение общей длины маршрута [11].
13. Scatter Search (*SS*) — алгоритм, который начинается с создания первичной совокупности возможных решений с использованием эвристики построения, такой как ближайший сосед или случайная вставка. Затем эта популяция делится на несколько подгрупп, каждая из которых оптимизируется с использованием метода локального поиска. После чего лучшие решения из каждой подгруппы объединяются для создания разнообразного набора решений-кандидатов,

которые дополнительно оптимизируются с использованием метода локального поиска [13, 15, 17].

14. Sweep — конструктивный алгоритм, который начинается с выбора «центральной» точки в экземпляре *TSP*, например, геометрического центра вершин, а затем сортирует их в полярных координатах относительно этой точки. Затем алгоритм строит маршрут, соединяя вершины в отсортированном порядке [27].

2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Для обучения системы автоматического выбора алгоритма необходимо собрать базу данных результатов расчета для набора метаэвристических алгоритмов и построить систему определения метаданных. Приведем результаты расчетов для указанной выше части метаэвристических алгоритмов.

Как правило, рассмотренные алгоритмы содержат в себе некоторые пользовательские параметры, которые сильно влияют на результаты работы для конкретного графа. Так как выбор оптимальных параметров является отдельной трудоемкой задачей, в данном эксперименте он не производится. Вместо этого пользовательские параметры задаются средними общепринятыми значениями, а количество итераций задается в зависимости от размерности набора данных (чем больше размерность, тем больше итераций). Такой подход позволяет получить опорные результаты работы алгоритмов для любого набора данных. В качестве одной из библиотек метаэвристических алгоритмов используется `pyCombinatorial` [23]. Это библиотека Python, предоставляющая набор алгоритмов комбинаторной оптимизации и инструментов для решения задач. В ней представлены популярные алгоритмы комбинаторной оптимизации, включая метаэвристические. Важно отметить, что `pyCombinatorial` имеет открытый исходный код, значит, он доступен для изменения.

Разработанное приложение для расчетов имеет модульную структуру. Взаимодействие между модулями приложения реализовано за счет вызова функций. Схема программного продукта представлена на рис. 3.

Здесь «Главный модуль» является менеджером всего проекта, на вход этого блока подается список графов. Затем в «Главном блоке» происходит считывание данных графа, после чего считанные данные передаются в «Алгоритмический блок». «Алгоритмический блок» производит вызов заданного списка алгоритмов из библиотек, в данном случае это либо `pyCombinatorial`, либо «Библиотека алгоритмов». Модуль «Библиотека алгоритмов» содержит авторские реализации некоторых ранее рекомендовавших себя подходов. После того как «Алгоритмический блок» завершит



Рис. 3. Схема расчетного модуля

расчет, результат возвращается в «Главный блок» и записывается в файл. Модульный подход позволяет масштабировать приложение в зависимости от требований.

Для проведения эксперимента использовались датасеты из TSPLIB [29] — библиотеки эталонных примеров для *TSP*. Она состоит из коллекции данных для различных *TSP*, а также оптимальных или лучших известных решений для каждого экземпляра.

3. МЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГРАФА

Метрические характеристики графа представляют собой количественные показатели, используемые для измерения и анализа свойств графа. Они предоставляют информацию о расстояниях и связях между вершинами графа.

Понятие метаданные можно рассматривать как «данные о данных, которые вычисляются на основе данных». Они могут включать такую информацию, как размер или плотность графа, распределение степеней или показатели центральности узлов, коэффициент кластеризации или модульность структуры сообщества, а также любые другие сводные статистические данные или метрики, которые отражают важные свойства графа.

Метрические характеристики графа играют важную роль в анализе и сравнении различных типов графов, а также в решении различных задач, связанных с сетями, маршрутизацией и оптимизацией. Они позволяют качественно описывать и изучать

структуру и свойства графа, что способствует лучшему пониманию его характеристик, определяющих выбор алгоритмов решения соответствующих задач маршрутизации. В целом, метаданные графа являются источником информации для анализа и обнаружения скрытых закономерностей и структур в сложных сетях. Список извлекаемых метрических данных:

- 1) `is_directed` — является ли граф направленным;
- 2) `is_regular` — является ли граф регулярным;
- 3) `has_bridges` — наличие в графе мостов;
- 4) `is_chordal` — является ли граф хордовым;
- 5) `diameter` — диаметр графа;
- 6) `radius` — радиус графа;
- 7) `nodes` — количество вершин;
- 8) `edges` — количество ребер;
- 9) `count_max_cliques` — количество максимальных клик;
- 10) `max_weight_clique` — вес максимальной клики;
- 11) `density` — плотность графа;
- 12) `node_connectivity` — параметр связности узлов;
- 13) `count_triangles` — количество триангуляций;
- 14) `number_of_isolates` — количество изолированных вершин;
- 15) `s_metric` — s-метрика графа.

Метрические характеристики графа описывают его общую характерную структуру. Очевидно, что список реальных характеристик намного шире, он включает в себя качественные и экспертные оценки, которые сложно привести к числовому формату для расчетов в автоматизированной системе. Еще одной формой метрических характеристик являются сложные организованные данные, например, статистическое распределение дуг графа. Такие характеристики имеют многоуровневую структуру, которую невозможно обработать стандартными методами численного сравнения. В связи с этим приходится либо использовать сильно упрощенное значение, например, среднее расстояние по максимальному количеству вхождений диапазона, либо использовать какую-либо особенную стратегию для сравнения конкретной структуры характеристики.

Приведем алгоритм расчета важной метрической характеристики — статистики распределения весов дуг графа сети.

Алгоритм 1. Алгоритм подсчета статистики распределения весов в графе

Вход: Список точек на плоскости (*Points*), пользовательские параметры (*split_parts* — количество диапазонов для подсчета статистики).

Выход: Объект типа $\{ "statistic" : min_distance, "max_distance" : max_distance, "step" : step \}$, где *statistic* — список из *split_parts* элементов, в котором каждый элемент соответствует количеству весов, попавших в данный диапазон. *min_distance* — минимальный вес, *max_distance* — максимальный вес, *step* — шаг, на который отличаются диапазоны.

1. Инициализировать переменные $min_distance = inf$, $max_distance = -inf$, $statistic = [0_1, 0_2, \dots, 0_{split_parts}]$.
 2. Для каждой точки получить ее индекс в *Points*.
 3. Для каждой точки получить ее индекс *point1_index* в *Points*.
 - а) Для каждой точки, начиная с индекса $point1_index + 1$, получить ее индекс *point2_index* в *Points*.
 - (i) Вычислить расстояние *distance* между точками с индексами *point1_index* и *point2_index*.
 - (ii) Если полученное расстояние больше, чем *max_distance*
(A) Присвоить $max_distance = distance$.
 - (iii) Если полученное расстояние меньше, чем *min_distance*
(A) Присвоить $min_distance = distance$.
 4. Вычислить шаг $step = (max_distance - min_distance) / split_parts$.
 5. Для каждой точки получить ее индекс *point1_index* в *Points*.
 - а) Для каждой точки, начиная с индекса $point1_index + 1$, получить ее индекс *point2_index* в *Points*.
 - (i) Вычислить расстояние *distance* между точками с индексами *point1_index* и *point2_index*.
 - (ii) Вычислить индекс диапазона, в который попадает вес $index = distance // step$ (где $//$ — операция деления нацело).
 - (iii) Увеличить количество весов в диапазоне по индексу $statistic[index] + 1$.
 6. Вернуть объект типа: $\{ "statistic" : statistic, "min_distance" : min_distance, "max_distance" : max_distance, "step" : step \}$.
-

В данном алгоритме умышлено применяется дублирование кода обхода всех вершин графа. Дублирования можно было избежать путем добавления вспомогательного массива весов. В этом случае происходит огромная нагрузка на оперативную память при вычислении статистики распределения весов в полносвязных графах большой размерности (больше 10 000 вершин). Поэтому было принято решение повысить нагрузку на процессор и снизить нагрузку на оперативную память.

4. ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ БЛИЗОСТИ ЗАДАЧ

Определение степени близости задач является важной для работы системы рекомендаций по выбору метаэвристических алгоритмов. Если рассматривать множество метрических характеристик задачи маршрутизации как вектор в N -мерном пространстве, то появляется возможность находить метрическое расстояние между векторами, например, евклидово или косинусное расстояния. Тогда в определенных условиях две задачи тем ближе, чем меньше расстояние между их векторами метрических характеристик M .

При анализе компонент вектора метрических данных необходимо учитывать степень важности каждой компоненты (характеристики). Так как определенные характеристики более важны для описания структуры задачи, чем другие, то возникает иерархия этих данных. Этот факт необходимо учитывать при нахождении степени близости задач. Приоритет каждой из характеристик может изменяться в зависимости от условий, при которых происходит расчет близости. Как правило, приоритизация не является автоматизированной и задается экспертом для каждого отдельного случая.

Для нахождения степени близости задач предлагается взвешенный алгоритм нахождения расстояния между векторами из M . Алгоритм является модификацией классического метрического расстояния векторов. Задается весовой параметр w , определяющий важность значения компоненты M , находящейся на определенной позиции. В данном подходе значения каждого из признаков сортируются по убыванию степени важности в каждом из векторов. В качестве весовой выбирается убывающая последовательность $w_1 \geq w_2 \geq \dots \geq w_N \geq 0$, где $w_j \in [0, 1]$. Таким образом, функция близости имеет вид:

$$d(x, \tilde{x}) = \left(\sum_{i=1}^N w_i^2 (\tilde{x}_i - x_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1)$$

где x, \tilde{x} — векторы метрических характеристик, N — размерность вектора.

Такой подход позволяет учитывать факт неравноценности метрических характеристик M графов. Это связано с тем, что определенные характеристики конкретного графа лучше описывают структуру задачи, чем другие, которые имеют более локальное значение.

Алгоритм 2. Weighted distance

Вход: Два вектора x, \tilde{x} .

Выход: Взвешенное расстояние векторов $d(x, \tilde{x})$.

1. Найти расстояние d между векторами x, \tilde{x} по формуле (1).
 2. Вернуть найденное расстояние.
-

Для проверки гипотезы о соответствии малости метрического расстояния у двух близких задач проводится следующий эксперимент по алгоритму:

1. Взять тестовый граф G .
2. Сгенерировать новый близкий граф \tilde{G} , применив Алгоритм 3 к G .
3. Вычислить метрические характеристики M графа G и \tilde{M} графа \tilde{G} .
4. Вернуть расстояние между M и \tilde{M} по Алгоритму 2.

В данном эксперименте возмущение вносится по следующему алгоритму:

Алгоритм 3. Graph disturbance

Вход: Исходный граф G (вершины графа задаются координатами векторов из \mathbb{R}^l), мера возмущения eps .

Выход: Возмущенный граф \tilde{G} .

1. Получить массив векторов d размерности l случайных значений в диапазоне $[-1, 1]$.
 2. Умножить каждое значение из d на eps .
 3. Создать \tilde{G} как копию графа G .
 4. Сложить каждую точку из \tilde{G} с соответствующей точкой вектора из d .
 5. Вернуть найденный граф \tilde{G} .
-

Данный эксперимент подтверждает гипотезу о том, что метрические характеристики близких графов также близки.

Подобным образом проверяется гипотеза об оптимальности метаэвристического алгоритма для близких задач. Для подтверждения этой гипотезы был произведен эксперимент по следующей схеме:

1. Взять тестовый граф G , для которого уже известен оптимальный метаэвристический алгоритм A .
2. Сгенерировать новый граф \tilde{G} , применив Алгоритм 3 к G .
3. Найти оптимальную метаэвристику \tilde{A} для графа \tilde{G} .
4. Вернуть $A = \tilde{A}$.

Если эксперимент в большинстве случаев показывает, что $A \equiv \tilde{A}$, то гипотеза подтверждена.

На рис. 4 показано возмущение одного графа при различных значениях ϵ . Синим цветом отмечен изначальный граф, оранжевым — сгенерированный. Видно, что малые возмущения влекут за собой незначительное смещение точек, граф остается почти таким же как и был до возмущений. Но чем больше ϵ тем сильнее новый граф отдаляется от начального.

На рис. 5 приведены некоторые характерные случайно сгенерированные близкие графы, на которых проводился эксперимент. На данных рисунках сохранен масштаб исходных графиков, возмущение также применялось на исходном масштабе. Видно, что чем больше изначальная размерность, тем менее заметны возмущения при малых ϵ . Очевидным приемом для борьбы с таким эффектом является нормализация вершин перед возмущением. Это позволит рассматривать все вершины в одних пределах и, следовательно, возмущение всегда будет иметь одинаковый эффект. Но при таком подходе следует учитывать значения ϵ , так как при нормализации от -1 до 1 значение $\epsilon = 1$ уже является довольно таки значимым возмущением.

Также подобный эксперимент ставится для определения расстояния, когда графы перестают быть близкими:

Алгоритм 4. Graph max disturbance

Вход: Исходный граф G , мера возмущения ϵ , шаг подбора возмущения $step$.

Выход: Расстояние, при котором графы перестают быть близкими.

1. Взять тестовый граф G , для которого уже известен оптимальный метаэвристический алгоритм A .

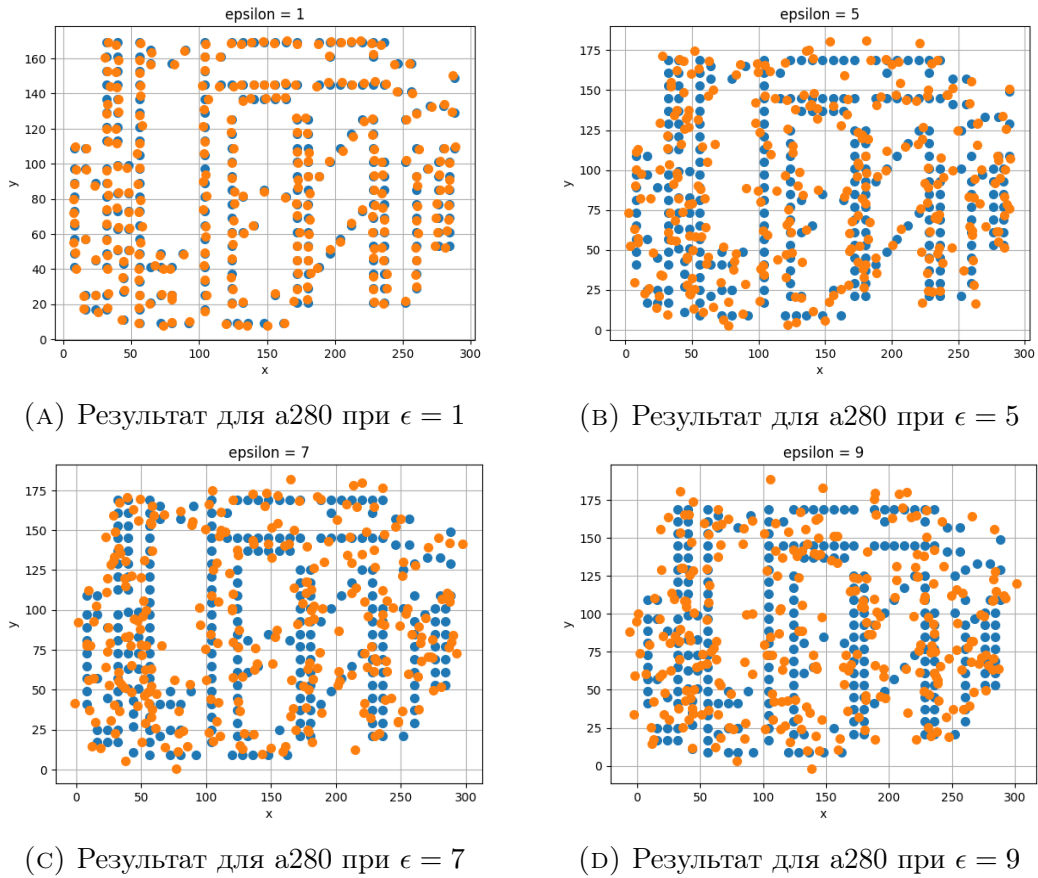


Рис. 4. Результаты работы алгоритма Graph disturbance

2. Сгенерировать новый граф \tilde{G} , применив Алгоритм 3 к G с параметром ϵ .
3. Найти оптимальную метаэвристику \tilde{A} для графа \tilde{G} .
4. Если $A \neq \tilde{A}$, то $\epsilon = \epsilon + step$ и перейти на шаг 2.
5. Вычислить метрические характеристики M графа G и \tilde{M} графа \tilde{G} .
6. Вернуть расстояние между M и \tilde{M} по Алгоритму 2.

В результате работы этого алгоритма находится минимальное расстояние с точностью ϵ , при котором графы перестают быть близкими.

Для проверки устойчивости решения при возмущении задачи предложен эксперимент:

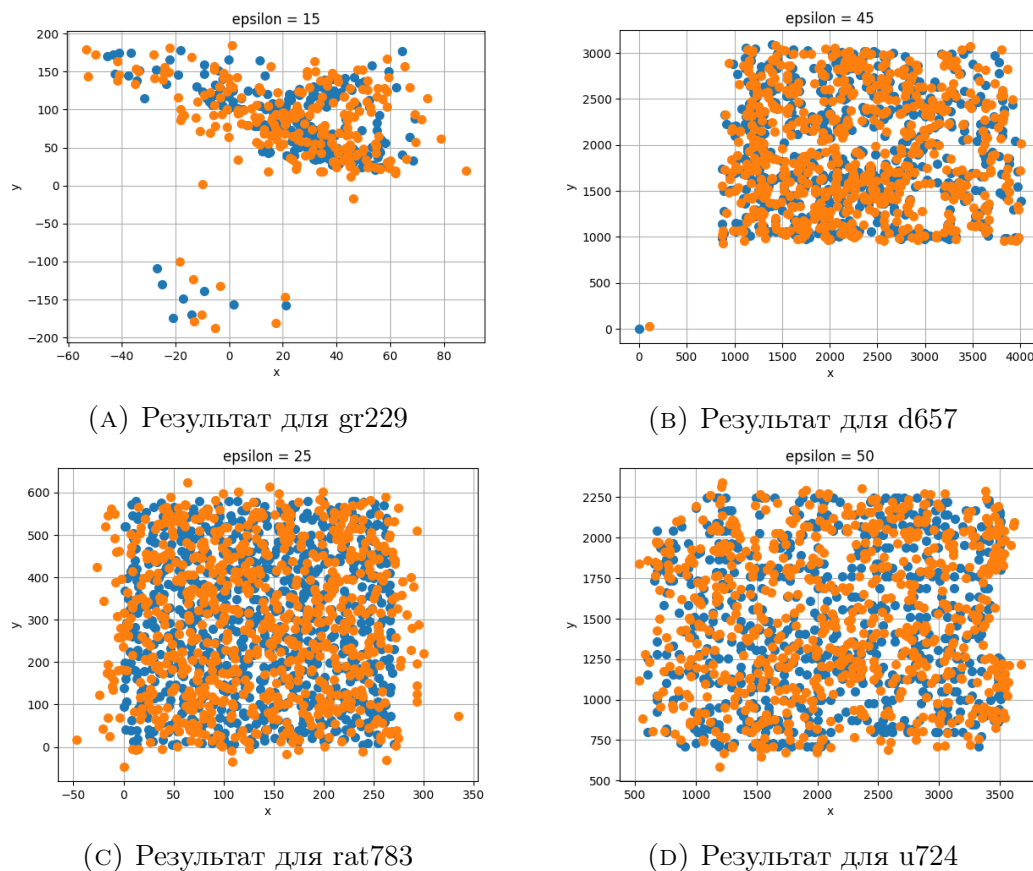


Рис. 5. Результаты работы алгоритма Graph disturbance

Алгоритм 5. Graph solution stability

Вход: Исходный граф G , оптимальное решение S , мера возмущения ϵ , шаг подбора возмущения $step$, окрестностей при которой решение считается устойчивым ω , количество итераций I .

Выход: Устойчивое ли решение на графе.

1. Инициализировать счетчик итераций $i = 0$.
2. Проверить количество итераций, если $i > I$, то перейти на шаг 7.
3. Сгенерировать новый граф \tilde{G} , применив Алгоритм 3 к G с параметром ϵ .
4. Найти оптимальное решение \tilde{S} для графа \tilde{G} , используя оптимальное решение S как начальное решение.
5. Увеличить счетчик итераций $i = i + 1$.

6. Если различие в решениях в пределах допустимой окрестности $\tilde{S} - S < \omega$, то $\epsilon = \epsilon + step$ и перейти на шаг 2. Если нет, то вернуть *False* и завершить процедуру.
7. Вернуть *True*.

В результате работы этого алгоритма определяется устойчивость полученного решения на I итерациях с точностью ω . Решение считается устойчивым, если различие в полученных решениях не превышает параметр ω .

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В результате эксперимента сформированы таблицы 1, 2 работы метаэвристических алгоритмов для набора графов из TSPLIB. В колонке «BK» находится лучшее известное решение для конкретного набора данных на текущий момент. Из таблиц видно, что разброс решений, полученных каждым из алгоритмов, не очень большой. Для определенного набора данных один из алгоритмов дает лучшее решение среди остальных.

Таблица 1. Результаты расчетов метаэвристик

ID	Graph	BK	ACO	Concave	GKSP	HN	IS	SS
1	eil51	426.0	429.53	441.23	442.13	436.07	431.10	434.24
2	berlin52	7542.0	7544.36	8325.96	7998.20	7544.36	7544.36	7716.68
3	st70	675.0	677.19	695.54	692.50	688.75	685.45	690.63
4	pr76	108159.0	108276.70	111159.94	118873.96	113197.86	108604.45	108879.74
5	eil76	538.0	559.89	566.01	575.77	563.04	551.96	559.07
6	gr96	513.0	517.97	517.49	525.25	518.89	513.85	520.72
7	rat99	1211.0	1239.79	1281.05	1274.80	1226.03	1268.71	1266.36
8	rd100	7910.0	8004.78	8167.40	8328.34	8066.22	8079.75	7910.39
9	kroB100	22141.0	22276.46	22407.52	22239.20	22284.28	22545.19	22472.90
10	kroD100	21294.0	21637.25	21777.24	22417.39	21637.04	21711.53	21630.23
11	kroA100	21282.0	21298.97	21481.30	21601.19	21294.39	21511.00	22473.64
12	kroC100	20749.0	20869.58	21109.46	21170.36	20786.89	21156.13	21249.13
13	kroE100	22068.0	22284.07	22912.52	22864.63	22302.16	22591.34	22141.83
14	eil101	629.0	659.44	656.47	678.41	664.16	659.26	668.60
15	lin105	14379.0	14382.99	0.0	15093.49	14824.21	14406.11	14828.13
16	pr107	44303.0	44346.18	0.0	47099.53	46009.39	45211.84	44857.32
17	pr124	59030.0	59208.55	0.0	60562.49	59864.32	59624.21	60088.84
18	bier127	118282.0	119302.01	122893.60	118404.78	120418.76	120358.78	124226.09
19	ch130	6110.0	6255.06	6502.65	6191.67	6252.02	6333.13	6245.31
20	pr136	96772.0	98203.23	0.0	99025.37	98542.50	98979.33	99084.31
21	gr137	706.0	710.27	722.77	740.62	720.41	720.62	731.56
22	pr144	58537.0	58535.22	0.0	58620.69	58602.32	58635.87	58604.90

Таблица 2. Результаты расчетов метаэвристик. Продолжение

ID	Chris	Sweep	NI	NN	RI	Genetic	GRASP
1	443.96	436.62	432.95	431.87	433.30	429.53	431.43
2	7868.36	7629.87	7658.95	7658.95	7544.36	7544.36	7619.15
3	696.19	677.10	687.97	684.17	678.62	690.63	682.57
4	113744.39	108795.13	109368.92	108879.74	108797.31	110703.54	108843.55
5	570.35	560.67	562.74	559.31	557.22	566.02	563.62
6	0.0	520.19	515.72	517.91	513.02	534.11	517.94
7	1303.40	1254.36	1245.85	1221.00	1240.96	1281.94	1244.65
8	8336.74	8117.18	8020.63	8120.04	7959.09	8268.31	8090.34
9	22994.26	22463.28	22237.12	22346.60	22292.04	22326.01	22594.86
10	21726.74	21851.71	21480.95	21551.93	21384.50	21778.30	21554.74
11	22126.62	21573.50	21481.93	21362.97	21366.77	21381.83	21285.44
12	21321.74	20898.61	21276.14	20996.57	20912.87	21268.11	20928.12
13	22794.99	22346.76	22401.59	22407.48	22211.17	22423.36	22471.43
14	664.48	667.00	661.31	652.09	660.09	650.79	661.23
15	15014.92	14429.07	14574.71	14501.77	14440.90	14931.06	14472.85
16	45317.79	44775.91	44566.63	44346.18	44548.22	44620.66	44689.76
17	59570.32	59315.40	59164.49	59086.80	59181.65	60088.84	59074.80
18	122143.48	119987.40	121388.37	119336.77	119605.90	123941.64	119402.13
19	0.0	6288.57	6341.17	6250.97	6171.82	6344.00	6260.02
20	98905.33	98526.00	101592.54	103459.46	97914.04	99807.24	99805.66
21	0.0	721.08	716.72	714.44	706.28	733.05	710.69
22	58810.93	58602.32	58862.85	58669.42	58535.22	58587.14	58604.90

В случае, когда алгоритм не смог найти решение в связи с достижением пределов допустимой памяти или другими ограничениями, в найденное расстояние устанавливается значение 0 и считается, что данный алгоритм не применим к такой структуре данных.

Оценка работы алгоритмов решения для каждого из наборов данных представлена на графике (рис. 6). Здесь отображена относительная оценка по всем полученным решениям:

$$\delta(d) = \frac{|d - d^*|}{d^*}. \quad (2)$$

Здесь d — результат из таблиц 1, 2, d^* — значение из столбца «BK» таблиц 1, 2 (d — найденное расстояние).

Предполагается, что лучшее известное решение меньше либо равно любому найденному в процессе эксперимента. Но если какой-либо алгоритм улучшит лучшее известное решение, то это будет заметно на графике, так как значение относительной оценки приблизится к нулю. Таким образом, чем точка ближе к нулю, тем более точное решение было найдено. Отдельно обрабатываются случаи когда алгоритм не смог отыскать решение, в таком случае на графике задается значение на несколько процентов худшее из всех представленных показателей.

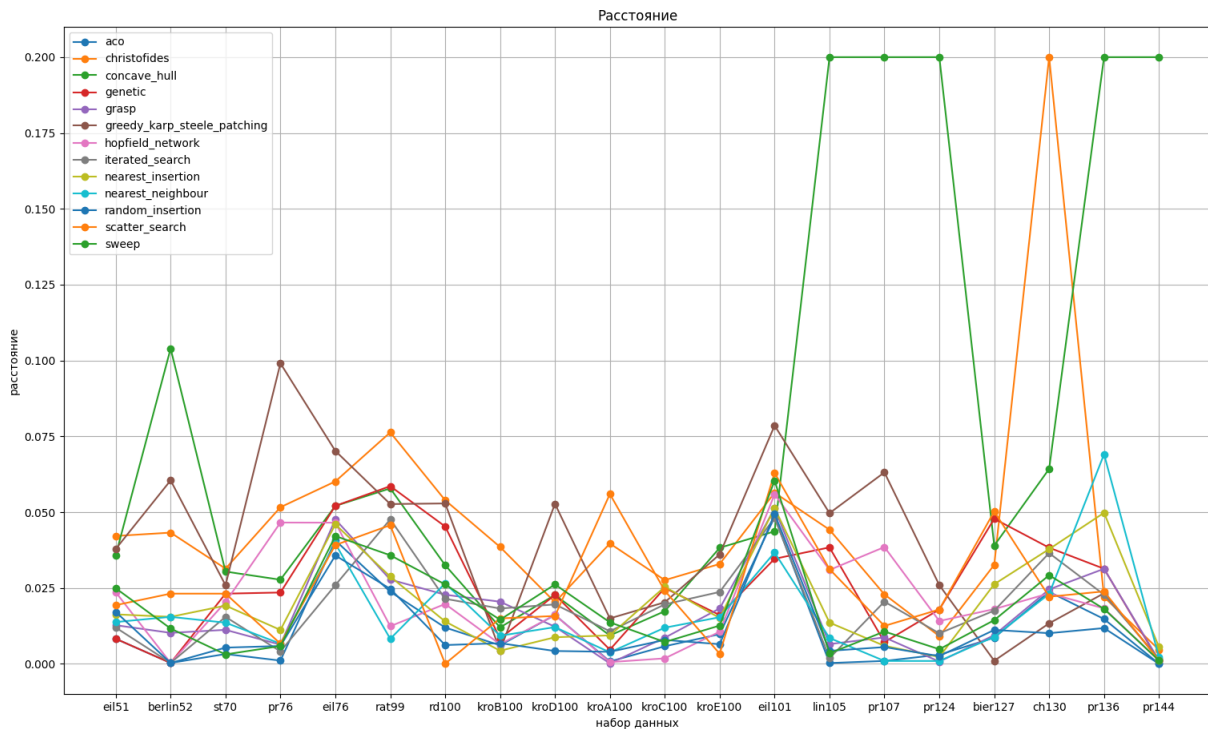


Рис. 6. Результаты работы алгоритмов

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлен подход по решению NP -трудных задач многоагентной маршрутизации, основанный на решении близких задач по схеме «задача — близкая задача — алгоритм». Снижение размерности исходной задачи основано на ее декомпозиции, согласованной с маршрутами коммивояжеров на кластерах. Для решения задачи коммивояжера на выделенном кластере осуществляется выбор метаэвристик. Для этого произведен численный эксперимент по решению локальных TSP с использованием широкого набора метаэвристик на множестве данных из библиотеки TSPLIB. Определены наиболее эффективные алгоритмы для нахождения оптимальных маршрутов.

Результаты эксперимента показали, что все примененные метаэвристики способны найти приближенные или оптимальные решения задачи коммивояжера на различных наборах данных. Однако, в зависимости от характеристик задачи, некоторые алгоритмы проявили себя более эффективно и точно, чем другие. При этом некоторые алгоритмы показывают лучший результат на нескольких тестовых наборах данных. Набор лучших алгоритмов и процентное соотношение от всех наборов данных следующие: Concave Hull 22%, ACO 12%, Christofides 12%, Scatter Search 9%, Sweep

5%, Iterated Search 5%, Nearest Neighbour 5%, Nearest Insertion 5%, Random Insertion 5%, *GRASP* 5%, Hopfield Network 5%, Genetic 5%, Greedy Karp-Steele Patching 5%.

Можно сделать вывод, что Concave Hull выдал лучшие результаты в 22% тестовых примеров из всей выборки, также хорошие результаты показали АСО и Christofides. На основе полученных результатов планируется использовать зависимость метаданных задачи от результатов и включить соответствующий модуль в интеллектуальную систему по выбору метаэвристик и их композиций. Рекомендуется выбирать метаэвристику в зависимости от особенностей задачи маршрутизации. Необходимо учитывать структуру и метрические характеристики сети, требования к точности решения и время выполнения. Комбинирование различных метаэвристик также может привести к получению лучших результатов.

В заключение автор выражает благодарность и большую признательность научному руководителю Козловой М.Г. за поддержку, помощь и научное руководство, а также автор благодарит Лукьяненко В.А. за помощь в работе и обсуждении результатов статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бондаренко, В. А. Геометрические конструкции и сложность в комбинаторной оптимизации / В. А. Бондаренко, А. Н. Максименко. — М.: Изд-во ЛКИ, 2008. — 184 с.
BONDARENKO, V. and MAKSIMENKO, A. (2008) *Geometric designs and complexity in combinatorial optimization*. Moscow: LKI Publishing House.
2. Гейл, Д. Соседние вершины на выпуклом многограннике // Линейные неравенства и смежные вопросы. — М.: ИЛ, 1959. — С. 355–362.
GALE, D. (1959) Neighboring vertices on a convex polyhedron. *Linear inequalities and related questions*. 2. Pp. 355–362.
3. Деза, М. М. Геометрия разрезов и метрик / М. М. Деза, М. Лоран. — М.: МЦНМО, 2001. — 736 с.
DEZA, M. M and Laurent, M. (2001) *Geometry of sections and metrics*. Moscow: ICNMO Publishing House.
4. Емельянов, С. В. Гомотопии экстремальных задач / С. В. Емельянов, С. К. Коровин, Н. А. Бобылев. — М.: Наука, 2001. — 350 с.
YEMELYANOV, S. V and Korovin, S. K and Bobylev, N. A (2001) *Homotopies of extreme problems*. Moscow: Nauka.

5. Журавлев, Ю. И. Избранные научные труды / Ю. И. Журавлев. — М.: Магистр, 1998. — 420 с.
ZURAVLEV, Y. I (1998) *Selected scientific works*. Moscow: Magister.
6. Козлова, М. Г., Лукьяненко, В. А., Макаров, О. О. Построение многоагентных маршрутов в сети с иерархией вершин // Вестник ВГУ. Системный анализ и информационные технологии. — 2023. — С. (Передана в редакцию).
KOZLOVA, M. & LUKYANENKO, V. & MAKAROV, O. (2023) Building multi-agent routes in a network with hierarchy of vertices. *Vestnik VSU. System Analysis and Information Technologies*. Pp. (Submitted to the Editor).
7. Лемтюжникова, Д. В., Лукьяненко, В. А. Проблематика исследования труднорешаемых задач // Интеллектуализация обработки информации: Тезисы докладов 14-й Международной конференции. — М.: Российская академия наук, 2022. — С. 437–442.
LEMTYUZHNIKOVA, D. & LUKYANENKO, V. (2022) Problematics of research of hard-to-solve problems. *Intellectualization of information processing: Abstracts of the 14th International Conference*. Pp. 437–442.
8. Лукьяненко, В. А., Лемтюжникова, Д. В., Макаров, О. О., Козлова, М. Г. Модели и алгоритмы многоагентной иерархической маршрутизации с временными окнами // Известия РАН. Теория и системы управления. — 2023. — С. (Передана в редакцию).
LUKYANENKO, V. & LEMTYUZHNIKOVA, D. & MAKAROV, O., KOZLOVA, M. (2023) Models and algorithms of multi-agent hierarchical routing with time windows. *Izvestiya RAN. Theory and Control Systems*. Pp. (Submitted to the Editor).
9. Петровский, А. Б. Пространства множеств и мультимножеств / А. Б. Петровский. — М.: Едиториал УРСС, 2003. — 248 с.
PETROVSKIY, A. (2003) *Sets and Multisets Spaces*. Moscow: Unitorial Urss.
10. Штовба, С. Д. Муравьиные алгоритмы // Exponenta Pro. Математика в приложениях. — 2003. — Т. 4. — С. 70–75.
STOVBA, S (2003) Ant algorithms. *Exponenta Pro. Math in Applications*. 4. Pp. 70–75.
11. ALIPOUR, M. & RAZAVI, S. (2019) A new local search heuristic based on nearest insertion into the convex hull for solving Euclidean TSP. *International Journal of Operational Research*. (34). Pp. 409–429.

12. ARCHETTI, C. & FEILLET, D. & MOR, A. & SPERANZA, M. (2018) An iterated local search for the Traveling Salesman Problem with release dates and completion time minimization. *Computers & Operations Research*. (98). Pp. 24–37.
13. BOURIDAH, A. & BELHADEF, H. (2020) A scatter search algorithm to configure service function chaining. *International Journal of Internet Technology and Secured Transactions*. (10(6)). Pp. 654–674.
14. DOKEROGLU, T. & SEVIN, E. & KUCUKYILMAZ, T. & COSAR, A. (2019) A survey on new generation metaheuristic algorithms. *Comput. Ind. Eng.*. (137). Pp. 6101–6167.
15. GE, J. & LIU, X. & LIANG, G. (2020) Research on vehicle routing problem with soft time windows based on hybrid tabu search and scatter search algorithm. *Computers, Materials & Continua*. (64(3)). Pp. 1945–1958.
16. GLOVER, F. & GUTIN, G. & YEO, A. & ZVEROVICH, A. (2001) Construction heuristics for the asymmetric TSP. *European Journal of Operational Research*. (129(3)). Pp. 555–568.
17. KALRA, M. & TYAGI, S. & CHAHAR, V. KAUR, M. & MASHWANI, W. & SHAH, H. & SHAH, K. (2021) A Comprehensive Review on Scatter Search: Techniques, Applications, and Challenges. *Mathematical Problems in Engineering*. Pp. 1–21.
18. KARLIN, A. & KLEIN, N. & OVEIS, G. (2020) A (slightly) improved approximation algorithm for metric TSP. *Proceedings of the 53rd Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*. Pp. 32–45.
19. KILIC, I. & MOSTARDA, L. & NOVEL, L. (2022) Concave Hull-Based Heuristic Algorithm For TSP. *Oper. Res. Forum*. (3(2)). Pp. 1–45.
20. LUO, Y. (2019) Design and Improvement of Hopfield network for TSP. *Proceedings of the 2019 International Conference on Artificial Intelligence and Computer Science*. Pp. 79–83.
21. MANDZIUK, J. (1996) Solving the travelling salesman problem with a hopfield-type neural network. *Demonstratio Mathematica*. (29(1)). Pp. 219–232.
22. NEUENFELDT, J. & GUIMARAES, L. (2019) A greedy randomized adaptive search procedure application to solve the travelling salesman problem. *International Journal of Industrial Engineering and Management*. (10(3)). Pp. 238–242.

23. pyCombinatorial // [Электронный ресурс]. — Режим доступа:
<https://github.com/Valdecy/pyCombinatorial>
24. KNOX, J. (1994) Tabu search performance on the symmetric traveling salesman problem. *Computers & Operations Research & Applic.*. (35). Pp. 867–876.
25. SCHOLZ, J. (2019) Genetic algorithms and the traveling salesman problem a historical review. *Proc. of the MInf Seminar at the Dept. of Computer Science of the Hamburg University of Applied Sciences*. Pp. 1–8.
26. SKINDEROWICZ, R. (2022) Improving Ant Colony Optimization efficiency for solving large TSP instances. *Applied Soft Computing*. (120). Pp. 1–28.
27. THAMMANO, A. & RUNGWACHIRA, P. (2021) Hybrid modified ant system with sweep algorithm and path relinking for the capacitated vehicle routing problem. *Heliyon*. (7(9)). Pp. 1–15.
28. TRAUB, V. (2020) Improving on Best-of-Many-Christofides for T-tours. *Operations Research Letters*. (48(6)). Pp. 798–804.
29. TSPLIB // [Электронный ресурс]. — Режим доступа:
<http://comopt.ifl.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95>
30. YAO, X., OU, Y. & ZHOU, K. (2021) TSP Solving Utilizing Improved Ant Colony Algorithm. *Journal of Physics: Conference Series*. (2129(1)). Pp. 12–26.

Гребенева А. А., Лукьяненко В. А. Некоторые задачи феноменологического уравнения спинового горения / А. А. Гребенева, В. А. Лукьяненко // Таврический вестник информатики и математики. — 2022. — № 3 (56). — С. 7–29.

УДК: 517.957, 517.928.7

В работе исследуется модель спинового горения, обобщение модели Зельдовича с псевдодифференциальным оператором $(-\Delta)^\alpha$, $0 < \alpha < 1$, на вещественной оси и соответствующее ей интегральное представление задачи. Для модели с периодическими условиями по пространственной переменной и ее спектральной задачи установлена согласованность с моделью горения на окружности, которая соответствует спиновым режимам горения тонкостенного цилиндра. С помощью дискретного преобразования Фурье получено представление задачи в виде нелинейного интегрального уравнения типа свертки. Для сравнения приводится модель безгазового спинового горения на всей плоскости, соответствующее ей интегральное представление задачи. Представлена операторная форма задачи и доказано, что соответствующий оператор является генератором голоморфной полугруппы. Доказана локальная разрешимость задачи для ограниченных областей.

Ключевые слова: нелинейное уравнение, нестационарные эффекты, бегущие волны, бифуркационный анализ, интегральное представление.

Козлова М. Г., Германчук М. С. Разработка гибридной системы рекомендаций / М. Г. Козлова, М. С. Германчук // Таврический вестник информатики и математики. — 2022. — № 3 (56). — С. 30–52.

УДК: 004.02, 004.051, 004.415.2

Работа посвящена проблеме разработки и оценке эффективности гибридной системы рекомендаций, разработанной на основе методов коллаборативной фильтрации и фильтрации по содержанию. В работе выделены основные проблемы систем рекомендаций, приведены методы их решения; описан процесс разработки гибридной системы рекомендаций. С помощью оценок точности и полноты определены оптимальные способ организации методов в системе рекомендаций и значения параметров.

Ключевые слова: гибридная система рекомендаций, метод коллаборативной фильтрации, метод фильтрации по содержанию, способы организации методов, критерии точности и полноты.

Лукьяненко В. А., Лукьяненко Д. В., Редкокош К. И. Восстановление параметров в моделях магнитной восприимчивости / В. А. Лукьяненко, Д. В. Лукьяненко, К. И. Редкокош // Таврический вестник информатики и математики. — 2022. — № 3 (56). — С. 53–68.

УДК: 51-73+54.03

В работе получены новые результаты восстановления параметров в моделях магнетохимии для исследования химических соединений по экспериментальным данным, которые представляют собой измерения температурной зависимости магнитной восприимчивости. Применяются зависимости, полученные из модели Гейзенберга-Дирака-Ван-Флека. Соответствующие материалы парамагнитных комплексов переходных металлов используются как компоненты в молекулярных электронных и фотохимических устройствах для хранения и переноса информации, как преобразователи солнечной энергии. Получены теоретические представления магнитной восприимчивости в зависимости от спиновых характеристик соединений, которые содержат искомые параметры. На базе экспериментальных данных и минимизации квадратичных функционалов найдены параметры зависимости. Показано их согласованность с известными результатами.

Ключевые слова: магнитная восприимчивость, свойства соединений, спиновые характеристики, восстановление параметров, численный эксперимент, модель Гейзенберга-Дирака-Ван-Флека.

Лукьянова Е. А., Прочитанский М. С., Лукьянова М. Е. Распределенные системы в среде динамического моделирования / Е. А. Лукьянова, М. С. Прочитанский, М. Е. Лукьянова // Таврический вестник информатики и математики. — 2022. — № 3 (56). — С. 69–79.

УДК: 519.673

В работе на примере моделирования закономерностей течения инфекционного заболевания — вирусной лихорадки Эбола показаны возможности программного обеспечения «Среда динамического моделирования технических систем SimInTech» для моделирования и исследования такого сложного биологического процесса, как инфекционный процесс.

Ключевые слова: среда динамического моделирования, вирусная лихорадка Эбола, распределённые системы, обыкновенные дифференциальные уравнения, SIR-модель и её расширения.

Макаров О. О. Метаэвристики в близких задачах маршрутизации типа многих коммивояжеров / О. О. Макаров // Таврический вестник информатики и математики. — 2022. — № 3 (56). — С. 80–102.

УДК: 004.023; 519.16

Основываясь на близости задач маршрутизации по метаинформации, в работе представлен этап формирования баз данных для обучения интеллектуализированной системы по выбору метаэвристических алгоритмов решения задачи многоагентной маршрутизации. Близость двух задач маршрутизации определяется близостью их математических моделей и близостью участвующих в решении фрагментов сложной сети. Приведено описание метода определения близости двух графов основанного на нахождении взвешенного метрического расстояния между векторами метаэвристических параметров соответствующих графов.

Описан формальный подход решения задачи маршрутизации на основе близких задач. Показаны этапы формирования решения оригинальной задачи и близкой.

Продемонстрирован эксперимент подтверждающий гипотезу о том, что векторы метрических характеристик у близких задач находятся на небольшом расстоянии друг от друга. Описаны вспомогательные эксперименты, показывающие максимальное допустимое различие между графами, при котором они считаются близкими. Приведен эксперимент, подтверждающий гипотезу о том, что метаэвристический алгоритм, работающий оптимально для определенной задачи, будет оптимально работать и для близкой.

Приводится описание структуры интеллектуализированной системы по выбору метаэвристик и сформированы основные принципы работы этой системы.

В решении многоагентных задач типа коммивояжера большой размерности производится согласованная декомпозиция на локальные кластерные задачи маршрутизации. На локальном уровне выбираются подходящие алгоритмы.

Приведены результаты экспериментов по решению задач коммивояжера с использованием различных метаэвристик на данных из TSPLIB. Определены эффективные алгоритмы нахождения маршрутов. Эксперимент показал, что большинство примененных метаэвристик позволяют находить приближенные или оптимальные решения. Приведен список лучших по отношению точности алгоритмов, которые планируется использовать в разработке интеллектуальной системы выбора метаэвристик,

с учетом особенностей задачи (структура и сложность сети, точность, время). Предполагается комбинирование метаэвристик, которое может привести к оптимальным результатам.

Ключевые слова: задача коммивояжера, задача нескольких коммивояжеров, близость задач, TSPLIB, метаэвристика, метаданные графа.

СПИСОК АВТОРОВ НОМЕРА

*Германчук Мария
Сергеевна*

к. ф.-м. н, доцент кафедры информатики Физико-технического института Крымского федерального университета им. В. И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

e-mail: german4uk@yandex.ru

*Гребенева Анастасия
Андреевна*

магистрант 1-го года обучения кафедры дифференциальных уравнений и геометрии Крымского федерального университета им. В. И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

e-mail: agrebeneva2001@gmail.com

*Козлова Маргарита
Геннадьевна*

к. ф.-м. н, доцент кафедры информатики Физико-технического института Крымского федерального университета им. В. И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

e-mail: art-inf@mail.ru

*Лукьяненко Владимир
Андреевич*

к. ф.-м. н, доцент кафедры дифференциальных уравнений и геометрии Крымского федерального университета им. В. И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

e-mail: art-inf@yandex.ru

*Лукьяненко Дмитрий
Владимирович*

студент Крымского федерального университета, г. Симферополь, Российская Федерация.

e-mail: lukianenko_dmitry@mail.ru

*Лукьянова Елена
Александровна*

к. ф.-м. н, доцент кафедры алгебры и функционального анализа, Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского.

e-mail: lukyanovaea@mail.ru

*Лукьянова Марина
Евгеньевна*

врач общей практики, Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского.

e-mail: lukyanova_maryna@mail.ru

*Макаров Олег
Олегович*

аспирант кафедры информатики Физико-технического института Крымского федерального университета им. В. И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

e-mail: fantom2.00@mail.ru

*Прочитанский
Максим
Станиславович*

магистр математики, Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

e-mail: max_pro_95@mail.ru

*Редкокош Кирилл
Игоревич*

магистрант 2-го года обучения кафедры прикладной математики Крымского федерального университета, г. Симферополь, Российская Федерация.

e-mail: kirillF13@yandex.ru

Распространяется бесплатно. Дата выхода в свет: 17.10.2023 .
Издательский дом ФГАОУ ВО «КФУ имени В. И. Вернадского».

Отпечатано с готового оригинал-макета заказчика. Заказ № ВВФР-000506 . Тираж 25 экз. Формат 60x90/16.
Усл. печ. ед. 5,8. Гарнитура «Times New Roman». Бумага офсетная.
Типография ИП Павлюков В. В., ИНН 250209756491. 295017, Республика Крым, г. Симферополь, ул. Рубцова, 44,
тел. +7 (978) 823-31-73, E-mail: zakaz@krimpoligraf.ru