

Мы продолжаем серию редакционных статей, направленных на то, чтобы дать читателям более объемное представление о материалах, представленных в журнале. Этот номер содержит пять тематических разделов: «Математические основы и численные методы моделирования», «Численные методы и основы их реализации», «Модели в физике и технологии», «Анализ и моделирование сложных живых систем» и «Модели экономических и социальных систем».

Статья Алкусы М. С. о некоторых стохастических методах зеркального спуска для условных задач онлайн-оптимизации посвящена задаче выпуклой оптимизации на множестве, заданном выпуклым негладким липшицевым ограничением. Минимизируется среднее арифметическое большого числа негладких выпуклых липшицевых функционалов. Такая задача называется автором задачей онлайн-оптимизации. Рассматриваемый в статье подход вполне традиционен. Предлагаемые алгоритмы являются рандомизацией алгоритмов, предложенных ранее в препринте, опубликованном ранее в arxiv.org группой авторов, включающих автора рассматриваемой статьи. Основной проблемой липшицевых методов оптимизации является оценка констант Липшица. Вместо точных хотя бы в теории констант в квадратичном случае, в общем случае приходится либо использовать мажоранты, учитывающие ее максимальное значение на всем множестве решений, либо разбивать множество решений на части и использовать локальные мажоранты. В случае так называемой онлайн-оптимизации проблема определения мажорант стохастических субградиентов значительно усложняется, так как зависит от заранее неизвестной выборки параметров функционалов. Проблема получения таких мажорант и сложность ее решения в статье не обсуждаются. Рандомизация ранее предложенного алгоритма проводится в статье на основе обобщения конструкции последовательного спуска по случайно выбранному направлению. При этом конкретный стохастический закон выбора направления задан неявно в виде условий, содержащих априорную оценку константы Липшица.

Статья Басалаева А. В., Клосса Ю. Ю., Любимова Д. Ю., Князева А. Н., Шувалова П. В., Щербакова Д. В. и Нахапетяна А. В. о проблемно-моделирующей среде численного решения уравнения Больцмана на кластерной архитектуре для анализа газокINETических процессов в межэлектродном зазоре термоэмиссионных преобразователей посвящена математическому моделированию поведения радионуклидов в полости межэлектродного зазора многоэлементного электрогенерирующего канала. Рассмотрены две конструктивные схемы такого канала. Применяется газокINETический подход и используется один из вариантов прямого метода решения кINETического уравнения. В работе описан построенный программный комплекс, позволяющий производить расчеты на кластерной архитектуре, и проанализирована эффективность алгоритма распараллеливания.

В статье Усанова М. С., Кульберга Н. С. и Морозова С. П. о разработке алгоритма анизотропной нелинейной фильтрации данных компьютерной томографии с применением динамического порога рассматриваются вопросы разработки алгоритма фильтрации данных для подавления шумов и повышения информативности изображений. Авторами представлен алгоритм анизотропной нелинейной фильтрации, использующий данные из окрестности каждой точки изображения для снижения шумов в ней, а также приведены результаты тестирования алгоритма как на данных с медицинских фантомов, так и на томограммах реальных пациентов. Использование динамического порога для фильтрации данных позволяет алгоритму подавления шумов адаптироваться к локальным особенностям изображения. В работе показано, что применение данного подхода существенно повышает качество подавления шумов для случаев, когда в одном изображении содержатся существенно разные ткани (например, лёгочные ткани и мягкие ткани).

В статье Тарасова А. Э. и Сердобинцева Е. В. о моделирование движения рельсового экипажа в кривой в SimpackRail рассматривается возможность определения показателей динами-

ческих качеств железнодорожного подвижного состава с использованием готового программного обеспечения в области компьютерного моделирования — SimpackRail. Авторы уже имеют определенный задел в области исследования динамических свойств рельсовых экипажей, в том числе настоящая статья основана на ранее полученных ими результатах. В работе хорошо описана математическая модель, используемая для компьютерного моделирования, которая основана на картографических данных. Продемонстрированы результаты компьютерного моделирования по измерению непогашенного ускорения и приведен их сравнительный анализ с результатами натурального эксперимента (испытаний). В своей работе авторы используют методику средних значений абсолютных максимумов и рекомендуют ее для учета случайного характера динамических процессов.

Статья Шабанова А. Э., Петрова М. Н. и Чикиткина А. В. о многослойной нейронной сети для определения размеров наночастиц в задаче лазерной спектроскопии посвящена задаче оценивания распределения наночастиц по размерам, которая сведена к решению задачи линейной регрессии. Задача является неустойчивой к возмущениям математической модели, традиционно для ее решения используют методы регуляризации. В статье для оценки размеров наночастиц применен метод искусственной нейронной сети и результат его применения сравнивается с результатами методов регуляризации. Имеется множество примеров, в которых применение нейросетей приводит к результатам, превышающим результаты применения традиционных математических методов. В работе аккуратно описаны эксперимент и его математическая модель, даны описания примененных в работе методов регуляризации и построенной авторами нейросети. Дано сравнение полученных результатов. Большая ошибка нейросетевого метода при анализе результатов исследования смеси из частиц двух размеров обусловлена, видимо, малой информативностью измерений. Косвенно об этом свидетельствует то, что оценка на основании линейной модели сопровождается большой погрешностью и не позволила обнаружить наличие частиц двух размеров.

В статье Буглака А. А., Помогаева В. А. и Кононова А. И. о расчете спектров поглощения комплексов серебра с тиолятами рассматривается крайне узкий вопрос расчета спектров в комплексах тиолятов серебра. Тем не менее работы такого рода демонстрируют, как вообще работают современные вычислительные методы квантовой химии с координационными соединениями металлов с высокими порядковыми номерами. Авторы сравнивают эффективность различных теоретических методов оптимизации геометрии и расчета спектров поглощения. На результаты этой работы можно ориентироваться всем, кто работает с координационными, а также металлоорганическими соединениями, причем не обязательно с серебром.

В статье Бессонова Н. М., Бочарова Г. А., Бушнита А. и Вольперта В. А. о гибридных моделях в биомедицинских приложениях представлен обзор работ, в основном собственных, по моделированию динамики клеточных популяций с использованием дискретно-непрерывных гибридных подходов, при этом клетки рассматриваются как дискретные объекты, а вещества, влияющие на их поведение, описываются в терминах их концентраций с помощью либо обыкновенных дифференциальных уравнений (для внутриклеточных концентраций), либо с помощью уравнений в частных производных (для внеклеточных концентраций). В статье продемонстрировано успешное применение этого подхода для ряда биомедицинских приложений.

В статье Коганова А. В., Ракчеевой Т. А. и Приходько Д. И. об экспериментальном выявлении мысленных вычислений человека на основе алгебры разной ассоциативности рассматривается задача, имеющая большое значение для исследований в области инженерной психологии. Прежде всего она касается вопросов, связанных со способностью человека обрабатывать последовательную и параллельную информацию. Эти вопросы возникают в связи с проблемой принятия решений в условиях дефицита времени и наличия шума. В работе рассматриваются ментальные вычисления, основанные на представлении ассоциативной и неассоциативной алгебр. При этом ассоциативная алгебра представлена как распознавание рисунков конечного набора символов, среди которых определяется недостающий символ из базового набора символов. В этом случае, как было показано, осуществляется в основном параллельная обработка

информации. Неассоциативная алгебра реализована на основе представления обработки информации путем упорядочивания символов в зависимости от характера их семантической взаимосвязи. В этом случае осуществляется в основном последовательная обработка информации. В работе были исследованы временные характеристики обработки информации человеком как на основе ассоциативной алгебры, так и на основе неассоциативной алгебры. Были также исследованы вопросы перехода с последовательного на параллельный ментальный счет в связи с ростом сложности задачи.

В статье Кетовой К. В., Романовского Ю. М. и Русяка И. Г. о математическом моделировании динамики человеческого капитала рассматривается интересная проблема — формализации понятия «человеческий капитал» и анализируется характер его динамики в Российской Федерации. В статье приводятся интересные результаты модельных оценок динамики и прогноза демографических показателей и предлагается оригинальная экономико-математическая модель динамики человеческого капитала. В условиях развития современной экономики человеческий капитал является одним из главных факторов экономического роста, поэтому разработка методик расчета величины человеческого капитала является востребованной задачей современной экономики. При моделировании динамики человеческого капитала рассматриваются три составляющие: образовательная, составляющая здоровья и культурная (духовная) составляющая. Для описания эволюции составляющих человеческого капитала используется уравнение типа уравнения переноса. Объемы инвестиций в составляющие человеческого капитала определяются на основе расходных статей бюджета с учетом временного жизненного цикла демографических элементов. Приведена методика расчета динамики. Представлены результаты расчетов по динамике человеческого капитала для Российской Федерации, на основании которых сделан вывод о том, что величина человеческого капитала нарастала до 2008 года, далее стабилизировалась, а после 2014 года стала спадать.

Статья Орловой Е. В. о модели оперативного оптимального управления распределением финансовых ресурсов предприятия посвящена оптимизации финансовой деятельности предприятия по некоторым параметрам бухгалтерского учета с учетом стохастического характера движения денежных средств. При постановке задачи остается совершенно непонятно, как соотносится оптимизация производственной и финансовой деятельности. По всей видимости, в модели принимается, что на предприятии производственная деятельность осуществляется максимально эффективно вне контекста финансовой деятельности (что сложно представить, но для модели, наверное, допустить можно). Именно при этом условии решается задача оптимально сбалансировать притоки и оттоки денежных средств в рамках особенностей финансовой системы организации. Модель строится из предположения, что только определенные рассогласования в финансовой системе снижают эффективность производственной деятельности. Но в реальности легко представить ситуацию, когда оптимизация финансовых ресурсов по критериям, предлагаемым автором, может вступить в противоречие с оптимизацией производственной составляющей.

Мы надеемся, что данный материал позволит нашим читателям лучше ориентироваться в этом номере журнала и привлечет более пристальное внимание к какой-либо из опубликованных статей.

*С уважением от имени редакции,
Н. Митин*

