

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

Статья Митина А. Л., Калашникова С. В., Янковского Е. А., Аксёнова А. А., Жлуктова С. В. и Чернышева С. А. о методических аспектах численного решения задач внешнего обтекания на локально-адаптивных сетках с использованием пристеночных функций посвящена актуальным вопросам применения локально-адаптивных неструктурированных расчетных сеток и пристеночных функций для численного моделирования турбулентных течений около летательных аппаратов, а также возможности и эффективности применения технологии сглаживания диффузионных потоков и формулы Брэдшоу для турбулентной вязкости в качестве мер, повышающих точность решения аэродинамических задач. Рассматривается решение осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса, которые замыкаются стандартной моделью турбулентности. Для оценки возможностей рассматриваемых методов и технологий проведены расчеты и сравнения результатов для тестового случая, который основан на экспериментальных исследованиях в трансзвуковой аэродинамической трубе. Расчеты выполнены в программном комплексе FlowVision. Проведен анализ эффективности применения технологии сглаживания диффузионных потоков и формулы Брэдшоу в качестве мер, повышающих точность решения аэродинамических задач на локально-адаптивных сетках с применением пристеночных функций. Исследованные в данной работе подходы направлены на сокращение временных затрат и вычислительных ресурсов, необходимых для выполнения аэродинамических расчетов, что в ряде задач прикладной аэродинамики является критически важным.

В статье Рукавишника А. В. и Рукавишника В. А. о методе численного решения одной стационарной задачи гидродинамики в конвективной форме в L -образной области построен специальный метод конечных элементов для нахождения приближенного обобщенного решения. В работе рассмотрены стационарные течения вязкой жидкости в конвективной форме в L -образной области, описываемые уравнениями Навье–Стокса и линеаризованные с помощью итераций Пикара. Работа является естественным продолжением большой серии работ, восходящих еще к 1989 году, одна из которых была опубликована в нашем журнале в первом номере за 2019 год. В работе показано, что предложенный метод прост в реализации и для достижения заданной точности не требует сгущения сетки.

Статья Диденко Д. В., Никанорова О. Л. и Рогожкина С. А. о расчетном исследовании запаса до всплытия тепловыделяющей сборки быстрого натриевого реактора посвящена численному моделированию течения жидкого натрия в упрощенной 3D-модели тепловыделяющей сборки. Проводятся два исследования — стационарное и нестационарное. Стационарные расчеты имеют целью определение коэффициента запаса до всплытия тепловыделяющей сборки (ТВС). В нестационарном исследовании рассчитываются силы, действующие на ТВС при скачкообразном повышении давления на входе в расчетную модель. Расчеты проводятся в ПК FlowVision. В нестационарных расчетах используются технология подвижного тела и технология динамической адаптации FlowVision.

В статье Садина Д. В. о приложении гибридного метода крупных частиц к расчету взаимодействия ударной волны со слоем газозвеси рассмотрено моделирование неоднородного уравнения переноса с источником и выполнен анализ устойчивости линейной гибридной схемы. В работе представлено строгое математическое исследование метода решения задачи движения

двухфазной среды и проиллюстрировано приложение метода к решению задачи движения скачка уплотнения в газе и его взаимодействия с ограниченным слоем газозвеси.

Статья Потапова И. И. и Силаковой Ю. Г. об исследовании процесса роста амплитуды донных волн в реках и каналах посвящена аналитическому описанию роста амплитуды донных волн при отсутствии роста их длины. Представленные результаты демонстрируют, что предложенная в работе модель развития донных волн качественно и количественно согласуется с экспериментальными данными в диапазонах, в которых можно пренебречь перекошенностью донных волн. Работа является естественным продолжением серии работ, некоторые из которых были опубликованы в нашем журнале в пятом номере за 2015 год, первом номере за 2018 год и третьем номере за 2019 год.

В статье Степина Ю. П., Леонова Д. Г., Папилиной Т. М. и Степанкиной О. А. о системном моделировании, оценке и оптимизации рисков функционирования распределенных компьютерных систем рассматриваются принципы оценок рисков в системах распределенных вычислений применительно к задаче массового обслуживания, ориентированной на предоставление клиентам вычислительных ресурсов в облаке. Даются классификация рисков и оценка вероятности каждого из них через вероятности событий, которые представляют опасность потерь. Для каждого такого события требуется оценить размер ожидаемых финансовых потерь. На основе оценок отдельных рисков строится целевая функция для оптимизации заказа. Целевая функция минимизируется путем варьирования состава технического, программного и организационного обеспечения. В целевой функции используются весовые коэффициенты для учета каждого из рисков.

Статья Ососкова Г. А., Бакиной О. В., Баранова Д. А., Гончарова П. В., Денисенко И. И., Жемчугова А. С., Нефедова Ю. А., Нечаевского А. В., Никольской А. Н., Щавелева Е. М., Ван Л., Сунь Ш. и Чжан Я. о нейросетевой реконструкции треков частиц для внутреннего CGEM-детектора эксперимента BES-III посвящена описанию двух перспективных методов распознавания треков заряженных частиц в экспериментах физики высоких энергий. Эти методы базируются на двух нейросетевых алгоритмах, использующих методы глубокого обучения, для локальной, рассматривающей каждый трек в отдельности, и глобальной, учитывающей все треки в событии, реконструкции треков. Представлены оценки точности предложенных методов и перспективы их дальнейшего развития.

Статья Гребёнкина И. В., Алексеенко А. Е., Гайворонского Н. А., Игнатова М. Г., Казеннова А. М., Козакова Д. В., Кулагина А. П. и Холодова Я. А. о применении ансамбля нейросетей и методов статистической механики для предсказания связывания пептида с главным комплексом гистосовместимости посвящена созданию нового алгоритма нейросетевой классификации связывания пептидов с различными аллелями главного комплекса гистосовместимости (ГКГС) человека. В работе предлагается модификация популярной нейросетевой модели NetMHCpan-4.0, хорошо зарекомендовавшая себя для предсказания связывания определенной аллели ГКГС с пептидом. В модификацию входят техника сборки ансамбля предсказательных моделей и включение в исходный набор данных оценки сродства, полученной из модели Поттса, являющейся обобщением модели Изинга.

В статье Якушевич Л. В. «От однородного к неоднородному электронному аналогу ДНК» рассматривается неоднородная линия Джозефсона. Эквивалентная схема такой линии содержит четыре типа ячеек: А-, Т-, G- и С-ячейки, каждая из которых состоит из трех элементов — емкости, индуктивности и джозефсоновского контакта. Организация элементов электронной модели соответствует последовательности азотистых оснований в последовательности ДНК. Автором получены аналитические выражения, устанавливающие связь параметров электронной модели с параметрами ДНК. В отличие от моделей молекулярной динамики, работа с которыми подразумевает достаточно сложные компьютерные эксперименты, физическая модель, предложенная автором и позволяющая моделировать физику процессов, допускает аналитическое решение и ясную физическую интерпретацию. Статья представляет собой продолжение серии работ автора, посвященных физическим моделям функционирования ДНК, одна из которых была опубликована в нашем журнале в пятом номере за 2017 год.

Статья Яковлева А. А., Абакумова А. И., Костюшко А. В. и Маркеловой Е. В. о цитокинах как индикаторах состояния организма при инфекционных заболеваниях посвящена анализу данных по динамике цитокинов при экспериментальной инфекции и построению и исследованию модели возможного влияния цитокинов на течение болезни. В работе приводятся описание проводимого эксперимента, специфика и методики обработки данных, анализируются развитие пневмонии и лечение несколькими препаратами при бактериальном заражении мышей. Авторы исследуют взаимную динамику цитокинов для трех групп мышей в процессе проведения эксперимента.

Ильясов Д. В., Молчанов А. Г., Глаголев М. В., Суворов Г. Г. и Сирин А. А. в своей статье о моделировании нетто-экосистемного обмена диоксида углерода сенокоса на осушенной торфяной почве рассматривают анализ динамики составляющих углеродного баланса осушенных торфяников и развитие модели для описания временной изменчивости экосистемного дыхания и нетто-экосистемного обмена между исследуемыми торфяниками и атмосферой. Проблема исследования углеродного цикла является чрезвычайно важной для современной экологии, прежде всего в контексте необходимости адекватного определения составляющих углеродного баланса для разных типов растительных сообществ в целях более точного прогноза современной климатической изменчивости. Статья включает экспериментальную и модельную части.

В статье Ха Т. Д. и Цибулина В. Г. о мультистабильных сценариях для дифференциальных уравнений, описывающих динамику системы хищников и жертв, рассматриваются и обсуждаются результаты некоторого подхода к описанию и исследованию традиционной модели динамики биологического сообщества, состоящего из популяций двух видов «жертв» и популяций двух видов «хищников». Развивается авторская методология исследования такой системы. Эта методология сводится к определению условий, а фактически — требований к коэффициентам модели, при которых рассматриваемая система уравнений оказывается косимметричной. Затем исследуется полученная косимметричная система. Продемонстрировано существование комбинаций параметров модели, при которых реализуется двухпараметрическое семейство стационарных состояний. В результате анализа выявлены условия реализации мультистабильных сценариев.

Статья Шмидта Ю. Д., Ивашины Н. В. и Озеровой Г. П. о моделировании межрегиональных миграционных потоков клеточными автоматами, в которой представлена модель оценки и прогноза миграционных потоков, реализованная в виде соответствующих компьютерных программ и апробированная на данных по Приморскому краю. В работе приводится подробный обзор существующих подходов к оценке и моделированию миграционных потоков и дается сравнение авторской модели с другими аналогичными подходами. Достигнута высокая точность прогнозов, полученных при данном подходе.

В статье Шиняевой Т. С. о динамике активности в виртуальных сетях рассматриваются весьма актуальные модели, используемые для описания динамики распространения эпидемий на сетевых структурах. Представлены результаты моделирования динамики распространения эпидемий на безмасштабных сетях для модели Винера–Розенблюта и SIRS (заболевание, заражение, иммунитет/гибель). На смоделированных данных для дискретной модели SIRS на полном графе показано, что с ростом вероятности потери иммунитета выздоровевшей особью одновременно со снижением вероятности того, что заболевшая особь выздоровеет, увеличивается число инфицированных. Показана схожесть динамик изменения доли восприимчивых, инфицированных и переболевших особей для непрерывной модели SIRS и дискретной модели SIRS на безмасштабной сети. Также приведены сочетания параметров для моделей Винера–Розенблюта и дискретной SIRS, которые соответствуют визуально похожим динамикам численности инфицированных.

Кириллюк И. Л. и Сенько О. В. в своей статье об оценке качества кластеризации панельных данных с использованием методов Монте-Карло (на примере данных российской региональной экономики) рассматривают решение задачи кластеризации 79 регионов России, описываемых набором предварительно приведенных показателей экономического развития, меняющихся во времени. Для определения степени сходства между многомерными рядами используются пока-

затели, вычисляемые на основе их динамики. Авторы предлагают метод оценивания статистической значимости результатов группирования, основанный на статистическом моделировании (методе Монте-Карло). Для этого случайным образом, в соответствии с заданным распределением, генерируются псевдовыборки, имитирующие реальные данные при условии предполагаемой статистической однородности. При этом предлагается использовать модель белого шума и процесс случайного блуждания. Достоверность кластеризации реальных данных оценивается путем сравнения индексов качества группировки с квантилями распределения соответствующих индексов, полученных при МК-моделировании: достоверная группировка должна резко отличаться от результатов, полученных в предположении отсутствия кластеров.

В статье Ирхина И. А., Булатова В. Г. и Воронцова К. В. об аддитивной регуляризации тематических моделей с быстрой векторизацией текста предлагается новый способ быстрого вычисления тематических векторных представлений текстовых документов в задаче вероятностного тематического моделирования. Максимизация правдоподобия в таких задачах обычно реализуется итерационным процессом, называемым EM-алгоритмом, в котором поочередно вычисляются приближения двух матриц, Φ и Θ . Если выбор числа итераций матрицы Φ имеет четкие критерии по его определению, то для числа итераций, необходимых для получения оценки матрицы Θ , это не так. В статье предложен способ вычисления матрицы Θ через матрицу Φ за один проход. Для этого авторы выводят новый набор уравнений для решения задачи тематического моделирования. Полученную модель сравнивают с ее аналогами и демонстрируют ее преимущество по всем выбранным метрикам качества на широко известном наборе данных — 20NewsGroups.

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*