

ОТ РЕДАКЦИИ

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».

В статье А. Б. Свириденко об оценке числа итераций для сильно полиномиальных алгоритмов линейного программирования рассматривается метод из класса методов активных ограничений для решения линейных программ (ЛП). Метод двухфазный, причем вторая фаза — аналог двойственного симплекс-метода, а первая фаза строит задачу, эквивалентную исходной. Предложенный метод на второй фазе заметно экономит количество арифметических операций по сравнению с симплекс-методом. Метод работает на вырожденных задачах. Работа является естественным продолжением серии работ, опубликованных в нашем журнале в разные годы.

Статья Т. В. Яковлевой о статистическом распределении фазы квазигармонического сигнала посвящена задаче оценки фазы и отношения «сигнал – шум» для гармонического сигнала в условиях гауссова шума. Анализ проводится на основании классического подхода — метода максимального правдоподобия, для чего сначала корректно получена функция правдоподобия с двумя параметрами. Для решения задачи поиска максимума правдоподобия применена эвристика — неизвестный параметр сдвига фазы заменен своим средним значением и дальше по классике получена оценка отношения «сигнал – шум». Однако при применении такой эвристики единственность максимума функции правдоподобия уже не гарантируется, но подтверждается моделированием. В работе сочетаются теоретические и эвристические методы, а также компьютерное моделирование для решения поставленной автором задачи.

В статье А. Ю. Морозова и Д. Л. Ревизникова о параметрической идентификации динамических систем на основе внешних интервальных оценок фазовых переменных рассматривается интерполяционный подход к решению интервальных задач параметрической идентификации динамических систем для случая, когда экспериментальные данные представлены внешними интервальными оценками. В своей работе авторы представили решаемую задачу как минимизацию расстояния между модельным решением и экспериментальными данными в пространстве границ интервальных оценок параметров модели. Получено выражение для градиента целевой функции. На широком наборе задач показаны работоспособность и эффективность разработанного метода.

Статья М. Ю. Рябчикова и Е. С. Рябчиковой об идентификации модели объекта при наличии неизвестных возмущений с широким частотным диапазоном на основе перехода к приращениям сигналов и отбора данных посвящена методу идентификации адекватных в статистическом смысле моделей со стационарными параметрами. Предлагается возможность вычленения трендовых составляющих ВЧ и НЧ вида. Отмечаются затруднения, вызываемые априорным наличием неизвестных возмущений с неопределенными частотными свойствами, приводящие к чрезмерно высокой размерности задачи. Один из предлагаемых авторами подходов сводится к представлению данных за отдельные периоды времени в виде последовательного набора приращений относительно начального момента времени и тем самым интегрирования неизвестных возмущений посредством введения единого параметра для каждого отобранного интервала времени. По мнению авторов, такая процедура способствует снижению размерности поисковой задачи и минимизирует вычислительные затраты определения параметров стационарности модели. Полученная декомпозиция усредняет влияние приращений значений входных сигналов на выход и может быть приемлема для определенного диапазона соотношений периодов трендов и времени экспозиции. Предложенный метод эффективен при анализе систем с относительно

небольшим числом настроечных параметров. Это существенно затрудняет получение решения из агрегированных массивов больших данных. Видится перспектива применения подобного подхода для декомпозиции интерпретируемых компонентов гибридных моделей.

Статья О. В. Решетниковой об определении модельной скорости звука для решения задачи о плоском сдвиговом течении жидкости методом гидродинамики сглаженных частиц (SPH) посвящена вопросам, связанным с точностью метода SPH. В качестве модельной задачи рассмотрено установившееся ламинарное течение жидкости в плоском канале. Рассмотрено влияние на качество решения данной задачи методом SPH выбранного ядра сглаживания и взятого параметра дискретизации. Получены значения параметров дискретизации, минимизирующих численную ошибку решения. Выбор параметров дискретизации среды при расчетах с использованием SPH обычно является во многом интуитивным, поэтому рассмотренный в работе подход к исследованию численной схемы представляют интерес, так как наглядно показывает, откуда возникают различные ошибки, связанные с дискретизацией, какие из них являются принципиально устранимыми, а какие неизбежны для данного метода. Выполненный в работе анализ существенно опирается на простой характер движения частиц, на стационарность этого движения и в итоге на простоту и повторяемость топологии окружения каждой частицы.

В статье М. Х. Бештокова о численном решении интегро-дифференциальных уравнений влагопереноса дробного порядка с оператором Бесселя рассматривается вопрос построения разностной схемы для численного решения уравнений влагопереноса и получения для них априорных оценок аппроксимации и устойчивости. Устойчивость исследуется обычным для таких задач методом энергетических неравенств. В статье подробно описана разностная схема, проанализированы ее свойства. Получены единственность, устойчивость, а также сходимость решения разностной задачи к решению исходной дифференциальной задачи со скоростью, равной порядку аппроксимации разностной схемы.

Статья А. П. Черняева о приближенной модели осесимметричного течения несжимаемой жидкости в бесконечно длинном круглом цилиндре, стенки которого составлены из упругих колец, основанной на решениях уравнения Кортевега – де Фриза, посвящена построению модели кровеносного сосуда в виде набора не связанных между собой, но расположенных близко друг к другу колец так, что жидкость между ними не протекает. Предложенная модель описывается тремя уравнениями: уравнением неразрывности, законом сохранения количества движения и уравнением состояния. В работе рассмотрена процедура сведения уравнений к уравнению Кортевега – де Фриза (КдФ), которая изучалась Дж. Лэмом в книге «Введение в теорию солитонов». Представлен и проанализирован ряд решений, полученных при таком подходе. Кроме того, в разделе «Дискуссия» обсужден ряд работ разных авторов, посвященных различным моделям кровотока.

В статье З. М. Маликова, Ф. Х. Назарова и М. Э. Мадалиева о численном исследовании турбулентного потока Тейлора – Куэтта рассматривается течение, возникающее внутри неподвижного цилиндра вокруг вращающегося внутреннего цилиндра. Исследование проводилось на основе двухмерного моделирования на базе осредненных уравнений Навье – Стокса (RANS) и новой двухжидкостной модели, предложенной авторами ранее в ряде работ. В статье проведено сравнение численных результатов, полученных при использовании различных подходов к моделированию турбулентного потока. Показана эффективность использования двухжидкостного подхода как к описанию моделируемого потока, так и при численной реализации модели.

Статья P. Vaidehi и J. Sasikumar о нелинейном моделировании колебательной вязкоупругой жидкости с переменной вязкостью посвящена моделированию нестационарного МГД течения в канале с теплоизлучающими волнистыми стенками. Учтен случай колебательного течения. Авторы преобразуют УЧП в систему нелинейных ОДУ. Задача для этой системы решается методом гомотопических возмущений. Полученное решение используется для анализа влияния различных параметров модели на профили скорости, температуры и концентрации. Показано, что фи-

зические параметры, определяющие поток жидкости, существенно влияют на результирующие профили потока, за исключением некоторых случаев. Кроме того, в работе получено полуаналитическое решение нелинейной задачи для течения неньютоновской жидкости.

Статья Д. С. Лукьянцева, Н. Т. Афанасьева, А. Б. Танаева и С. О. Чудаева о численно-аналитическом моделировании гравитационного линзирования электромагнитных волн в случайно-неоднородной космической плазме посвящена моделированию траекторных характеристик электромагнитных волн различных частотных диапазонов в гравитационном поле группы астрофизических объектов с учетом окружающей плазмы. Численно-аналитическое моделирование проводилось на основе приближения геометрической оптики и метода возмущений. В статье приведены результаты моделирования траекторной картины распространения электромагнитных волн с учетом воздействий полей тяготения космических объектов и рефракционного рассеяния волн на неоднородностях окружающей плазмы.

В статье А. В. Сергиенко, С. С. Акименко, А. А. Карпова и А. В. Мышлявцева об оценке влияния простейшего типа многочастичных взаимодействий на примере решеточной модели адсорбционного слоя рассматривается идея использования не только двухчастичных, но и многочастичных потенциалов. Авторы провели оценку влияния многочастичных взаимодействий на общую энергию системы в модели моноцентрической адсорбции молекул на треугольной решетке с учетом ближайших взаимодействий. Расчеты проводились с помощью метода трансфер-матрицы и программного комплекса Materials Studio. Был получен ряд термодинамических характеристик при ненулевых температурах. В качестве примера приведена атомистическая модель адсорбционного слоя тримезиновой кислоты.

В статье Г. В. Кривовичева о конечно-разностных схемах расщепления для системы уравнений одномерной гемодинамики предложена конечно-разностная схема для одной из одномерных постановок задачи о течении вязкой несжимаемой жидкости в упругой трубке. Для решения данной задачи на сегодняшний день использовано большое количество различных численных методов, однако предлагаемая схема применяется к данной задаче, по всей видимости, впервые. Это подтверждается и довольно обширным обзором других работ в данной области. Предложенная схема имеет второй порядок точности по пространству на полубесконечном интервале. Проведено сравнение со схемами Лакса – Вендрофа, Лакса – Фридрихса и MUSCL. Продемонстрированы применение схемы для модельных случаев, включающих бифуркацию сосуда, состоящую из трех элементов, а также дихотомически ветвящееся дерево из 31 и 63 элементов.

В статье Н. С. Фиалко, М. М. Ольшевеца и В. Д. Лахно о численном исследовании модели Холстейна в разных термостатах рассматривается одно из актуальных направлений нанобиоэлектроники — моделирование движения зарядов вдоль молекулы ДНК. Важный аспект этих модельных исследований — имитация температуры окружения. Авторы представили результаты моделирования динамики заряда в гамильтоновой системе поляронной модели Холстейна, когда начальная температура имитируется только распределением скоростей и смещений сайтов с тепловой энергией. При проведении исследований были использованы новейшие методы математического моделирования, компьютерной графики, а также были привлечены вычислительные мощности k-60 ЦКП ИПМ им. В. М. Келдыша РАН.

Статья В. А. Федорова, Е. Г. Холиной и И. Б. Коваленко о молекулярной динамике протофиламентов тубулина и влиянии таксола на их изгибную деформацию посвящена исследованию влияния связывания тубулина с распространенным химиопрепаратом таксолем, а также естественными нуклеотидами гуанозиндифосфата (ГДФ) и гуанозинтрифосфата (ГТФ). На основе недавно опубликованных атомных структур были построены молекулярно-динамические (МД) модели комплексов тетрамера тубулина с ГДФ/ГТФ/ГДФ+таксол и проведены достаточно длительные расчеты. В исследовании впервые применен анализ 3D-геометрии внутри- и междимерных углов изгиба и скручивания для определения соответствующих гармонических жесткостей, с использованием метрики, введенной авторами в их более ранней публикации 2019 г. В ре-

зультате МД-моделирования получены не только численные оценки, но и качественные выводы, которые соответствуют экспериментальным наблюдениям. В частности, было показано, что основные деформации приходятся на внутри-, а не междимерные взаимодействия. Присутствие таксола уменьшало жесткость тетрамера тубулина на скручивание, что, возможно, объясняет молекулярный механизм воздействия таксола на динамику микротрубочек.

Статья В. Д. Гулеенковой, Д. М. Ершовой, А. К. Цатуряна и Н. А. Кубасовой о молекулярно-динамическом исследовании влияния мутаций в молекуле тропомиозина на свойства тонких нитей сердечной мышцы посвящена построению и анализу молекулярно-динамической модели комплекса фибриллярного актина с тропомиозином. Цель исследования — определить взаимосвязь между структурой тропомиозина дикого типа и его мутантных форм и механическими характеристиками тонких нитей сердечной мышцы. В статье изучаются два вида мутаций в тропомиозине, ранее охарактеризованных в литературе: двойная стабилизирующая замена D137L/G126R и кардиомиопатическая замена S215L. В работе используется новая структура области перекрытия соседних молекул тропомиозина, что позволяет улучшить соответствие между экспериментальными данными, приведенными в литературе, и предсказываемыми моделью характеристиками тонкой нити сердечной мышцы. Более того, демонстрируется, что построенная модель способна по крайней мере на качественном уровне объяснить влияние точечных мутаций на свойства актин-тропомиозинового комплекса, что дает надежду на то, что подход будет полезен для анализа и других точечных мутаций с целью, например, оценки их патогенности.

В статье О. Л. Ждановой, Г. П. Неверовой и Е. Я. Фрисмана о динамике планктонного сообщества с учетом трофических характеристик зоопланктона рассматривается четырехкомпонентная математическая модель планктонного сообщества. В модели принимается во внимание конкуренция между разными группами фитопланктона. Зоопланктон в модели представлен хищными и нехищными типами. Авторы анализируют сценарии потери устойчивости нетривиального равновесия и возникновения при этом различных динамических режимов функционирования исследуемой системы. Модель не привязана к какому-либо конкретному водоему; это предполагает общность полученных в статье результатов. Авторами показана, в частности, практическая невозможность долговременного прогноза динамики планктонного сообщества, по крайней мере в рамках рассматриваемой в статье системы.

Статья Н. А. Моисеева, Д. И. Назаровой, Н. С. Семиной и Д. А. Максимова об обнаружении точек разворота на финансовых данных с помощью методов глубокого машинного обучения посвящена применению одной из весьма бурно развивающихся сейчас технологий, а именно нейронных сетей. Это вполне обоснованный выбор, так как, с одной стороны, резко возрос объем изучаемой информации, с другой — столь же резко возросли возможности современных технологий. Авторы статьи успешно разработали и обучили нейронную сеть, которая способна эффективно обнаруживать точки разворота на различных финансовых временных рядах. Предложенный подход к формированию входных признаков на основе математического ожидания и стандартного отклонения позволяет получить более точные результаты по сравнению с другими методами. Очень интересен подход, при котором результатом поиска точек разворота является вероятность их появления в конкретном месте тренда, а не двоичный признак типа «да»/«нет». Приведены результаты эксперимента, которые показывают, что предложенная модель демонстрирует достаточно высокую точность и стабильность результатов на различных типах временных рядов, включая нестационарные и содержащие шум. Апробация описанной модели на реальных данных делает результаты работы не только теоретически достоверными, но и практически значимыми.

Мы надеемся, что данный материал позволит 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*