

Национальный исследовательский университет "ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ"

Московский институт электроники и математики
им. А.Н.Тихонова Национального исследовательского
университета "ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ"

Материалы конференции

Межвузовская научно-техническая конференция
студентов, аспирантов и молодых специалистов
имени Е.В. Арменского



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

МОСКОВСКИЙ ИНСТИТУТ ЭЛЕКТРОНИКИ И МАТЕМАТИКИ им. А.Н.Тихонова
НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»



SuperJob

**Межвузовская научно-техническая
конференция студентов, аспирантов
и молодых специалистов
имени Е.В. Арменского**

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Москва 2018г.

ББК 2+3

Н 34

Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов им. Е.В. Арменского. Материалы конференции. - М. ~: МИЭМ НИУ ВШЭ, 2018. – 304.

ISBN 978-5-94768-079-9

В материалах конференции студентов, аспирантов и молодых специалистов представлены тезисы докладов по следующим направлениям: математика и компьютерное моделирование; информационно-коммуникационные технологии; автоматизация проектирования, банки данных и знаний, интеллектуальные системы; компьютерные образовательные продукты; информационная безопасность; электроника и приборостроение; производственные технологии, нанотехнологии и новые материалы; инновационные технологии цифровой экономики; инновационные технологии в дизайне.

Материалы конференции могут быть полезны для преподавателей, студентов, научных сотрудников и специалистов, специализирующихся в области прикладной математики, информационно-коммуникационных технологий, электроники, дизайна.

Редакционная коллегия: Е.А. Крук, С.А. Аксенов, С.М. Авдошин, У.В. Аристова, Г.Г. Бондаренко, Л.С. Восков, А.А. Елизаров, М.В. Карасев, Э.С. Клышинский, А.Б. Лось, Н.С. Титкова

Издание осуществлено с авторских оригиналов.

ISBN 978-5-94768-079-9

© Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», 2018 г.
© Авторы, 2018г.

тров. Данные методы дают ограниченное представление о характере фрагментации молекулы пептида [2, 3].

В нашем случае мы используем матрицу весов для перехода от экспериментального пептида, представленного вектором $s \in R_+^N$, к теоретическому спектру, записанному в виде бинарного вектора $h \in \{0,1\}^N$.

Модификация ограниченной машины Больцмана

Для создания матрицы весов используется генеративный вероятностный алгоритм – ограниченная машина Больцмана (RBM) [4].

Однако, оригинальные методы обучения RBM оказываются неэффективными в силу того, что используют MCMC для генерации скрытого слоя h . Для нас это означает, что h станет «мусорным» при обновлении весов по стандартному правилу $\Delta w_{ij} = \eta(E[v_i h_j] - E[v_i h_j]^\infty)$.

В связи с этим, инновационность нашего подхода заключается в аппроксимации h теоретическими спектрами из базы данных, а также в инициализации $P(v, h) \sim P(v, v)$.

Заключение

Таким образом, разработанный подход представляет собой более точный метод идентификации данных масс-спектрометрии, который в перспективе способен помочь биологам-экспериментаторам в совершенствовании процесса фрагментации пептидов.

Список литературы:

1. Jimmy K. Eng, Ashley L. McCormack, John R. Yates III; An approach to correlate tandem mass spectral data of peptides with amino acid sequences in a protein database, Elsevier Volume 5, Issue 11, (1994)
2. Tsur D, Tanner S, Zandi E, Bafna V, Pevzner PA; Identification of post-translational modifications via blind search of mass-spectra. In: Proceedings/IEEE Computational Systems Bioinformatics Conference, CSB, USA. (2005)
3. Cormen, T.H., Leiserson, C.E., and Rivest, R.L. Introduction to Algorithms. MIT Press, Cambridge, MA (1991)
4. Asja Fischer and Christian Igel; An Introduction to Restricted Boltzmann Machines, Alvarez et al. (Eds.): CIARP 2012, LNCS 7441, pp. 14–36 (2012)

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АЛГОРИТМА ВАНГ-ЛАНДАУ

М.А. Фадеева
НИУ ВШЭ,

департамент прикладной математики
МИЭМ НИУ ВШЭ

Аннотация

Представлены предварительные результаты исследования свойств марковского случайного блуждания по спектру энергии с вероятностью Ванг-Ландау. Численно оценена зависимость размера спектральной щели от размера решетки системы.

Введение

Алгоритм Ванг-Ландау используется для вычисления плотности состояний спектра энергии (DOS) [1,2]. Алгоритм достаточно популярен (существует более тысячи статей о применении и модификации алгоритма) и активно используется в разных областях статистической физики. В данной работе акцент сделан на изучении времени перемешивания на последнем этапе алгоритма. Результаты носят предварительный характер. Моделирование производилось на одномерной и двумерной моделях Изинга.

Идея алгоритма Ванг-Ландау основана на представлении статистической суммы в виде:

$$Z = \sum_{k=1}^{N_E} g(E_k) e^{-E_k/k_B T} \quad (1)$$

где $g(E_k)$ количество состояний с энергией E_k , k_B – константа Больцмана, T – температура.

На последних итерациях алгоритма, плотность состояний близка к точному значению [3]. Случайное блуждание по спектру энергии характеризуется матрицей переходов:

$$T(E_k, E_m) = P_{WL}(E_k, E_m) P(E_k, E_m) \quad (2)$$

$P_{WL}(E_k, E_m)$ вероятность Ванг-Ландау [1,2] принять состояние с энергией E_m , $P(E_k, E_m)$ – вероятность за один шаг перейти с конфигурации с энергией E_k на конфигурацию с энергией E_m [3].

Нас интересует время перемешивания Марковского случайного блуждания по спектру энергии, при переходе с одного энергетического уровня на другой с вероятностью Ванг-Ландау. Известно, что время перемешивания Марковского процесса обратно пропорционально спектральной щели G , которая вычисляется как $G = |\lambda_1 - \lambda_2|$, где λ_1, λ_2 – старшие собственные значения матрицы переходов $T(E_k, E_m)$ [4].

Время перемешивания в одномерной модели Изинга

Рассматривается одномерная модель Изинга [5] из L спинов σ_i с периодическими граничными условиями. Энергия модели вычисляется как $E = \sum_{i=1}^L J \sigma_i \sigma_{i+1}$ и $\sigma_{L+1} = \sigma_1$. Для упрощения, положим $J = 1$.

Элементы матрицы переходов для одномерной модели Изинга можно найти, используя выражение: $T(E_k, E_{k+1}) = T(E_{k+1}, E_k) = C_{L-2}^{2k} / \max(C_L^{2k}, C_L^{2k+2})$ [3].

Мы посчитали матрицы переходов для систем в диапазоне от $L=4$ до $L=100$, нашли их старшие собственные значения λ_1, λ_2 , и нашли спектральную щель G . Ее зависимость от L в дважды логарифмическом масштабе отображена на рис. 1. Видно, что зависимость носит степенной характер, по результатам линейной аппроксимации коэффициент наклона равен $-2.19(2)$. Получается, что время перемешивания $T_m = 1/G$ алгоритма Ванг-Ландау для одномерной модели Изинга пропорционально $T_m \propto L^{2.19}$

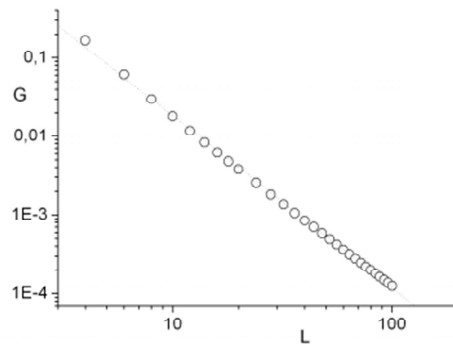


Рис.1. Зависимость спектральной щели G от размера системы L для одномерной модели Изинга

Время перемешивания в двумерной модели Изинга

Для вычисления элементов матрицы перехода для двумерной модели Изинга можно использовать вероятности Ванг-Ландау $P_{WL}(E_k, E_m)$ с точными значениями плотности состояний [6].

Мы нашли матрицы переходов для систем размером $L=4, 6, 8, 10, 12, 14$ и 16 , аналогично одномерному случаю, нашли их собственные значения и значение спектральной щели. Результаты отображены на рис. 2. Обнаружено, что время перемешивания в алгоритме Ванг-Ландау для двумерной модели пропорционально $T_m \propto L^{4.28}$. Стоит отметить, что сходимость спектра матрицы переходов медленная. И с ростом размера системы L уменьшается. Например, собственное значение λ_2 достигло устойчивого значения только после 10^6 Ванг-Ландау шагов для системы

размером $L=4$, после 10^8 для системы $L=8$, и после 10^{12} для системы размером $L = 12$.

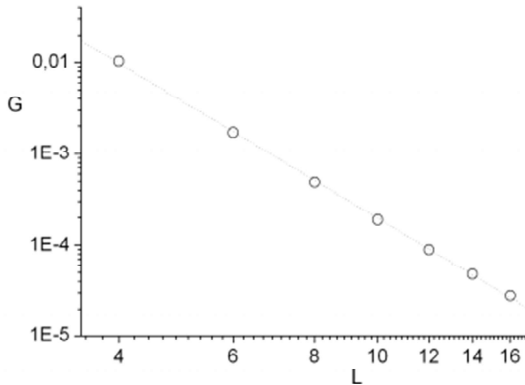


Рис.2. Зависимость спектральной щели G от размера системы L для двумерной модели Изинга

Заключение

В ходе работы была обнаружена степенная зависимость размера спектральной щели G от размера системы L для одномерной и двумерной модели Изинга. Полученные предварительные результаты будут в дальнейшем полезны для улучшения эффективности алгоритма 1/t-Ванг-Ландау [7,8].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 14-21-00158.

Список литературы:

1. F. Wang, D. P. Landau, Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states, Phys. Rev. Lett. 86, 2050 (2001)
2. F. Wang, D. P. Landau, Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram, Phys. Rev. E 64, 056101 (2001)
3. L. Yu. Barash, M. A. Fadeeva, and L. N. Shchur, Control of accuracy in the Wang-Landau algorithm, Phys. Rev E 96, 043307 (2017).
4. S. Boyd, P. Diaconis, L. Xiao, Fastest mixing Markov chain on a graph, SIAM Review 46, 667 (2004).
5. E. Ising, Beitr`ag z`ur theorie des ferromagnetismus, Z. Physik 31 253 (1925)
6. P. D. Beale, Exact distribution of energies in the two-dimensional Ising model, Phys. Rev. Lett. 76, 78 (1996)
7. R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, Phys. Rev. E 75, 046701 (2007).
8. R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, J. Chem. Phys. 127, 184105 (2007).

СРАВНЕНИЕ РАБОТЫ БИБЛИОТЕК ДЛЯ БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ FFTW И EML НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ СЕРВЕРЕ С ПРОЦЕССОРАМИ ЭЛЬБРУС 4-С И ЭЛЬБРУС 8-С

Д.О. Дергунов
НИУ ВШЭ,
департамент прикладной математики
МИЭМ НИУ ВШЭ,
ОИВТ РАН

Аннотация

Работа посвящена исследованию эффективности работы алгоритмов дискретного преобразования Фурье (ДПФ) библиотек fftw и eml на вычислительном сервере с процессорами Эльбрус 4-С. И Эльбрус 8-С

Введение

Микропроцессоры Эльбрус 4-С и Эльбрус 8-С построены в соответствии с архитектурой “Эльбрус”, особенность которой заключается в том, что анализ зависимостей и оптимизация порядка операций происходят на уровне компиляции. Поступающие на вход процессору “широкие команды” [1] могут заключать в себе до 23 (4-С) и 25 (8-С) операций, выполняемых за один такт. Данную особенность можно использовать в задачах с большим количеством подзадач, которые можно выполнять параллельно. Ярким примером задачи с большим количеством операций, которые можно выполнить параллельно, является алгоритм Кули-Тьюки БПФ. Библиотеки eml и fftw содержат реализацию алгоритма Кули-Тьюки быстрого преобразования Фурье (БПФ) для вектора размерности $N = 2^m$, выполняющих ДПФ за $O(N * \log(N))$ операций [2].

Принципы работы библиотек

Библиотеки eml и fftw имеют схожий подход в выполнении БПФ, происходящего в 2 этапа. Первый заключается в создании “плана”, который можно использовать многократно для векторов одинаковой размерности $N = 2^m$. Затем для выполнения алгоритма соответствующей функции нужно передать входной вектор и подготовленный “план”.

Библиотека fftw предлагает 3 флага для инициализации алгоритма: FFTW_ESTIMATE, FFTW_MEASURE, FFTW_PATIENT. Они отличаются временем подготовки (от быстрого к медленному) и временем выполнения подготовленного алгоритма (от медленного к быстрому). eml предлагает только один вариант для инициализации алгоритма.

Исследование эффективности библиотек

Измерение времени работы алгоритма заключается в измерении времени подготовки “плана” и измерении однократного применения алгоритма по отдельности. Рассмотрено одномерное ДПФ над входным вектором действительных чисел размерности от 2^2 до 2^{24} и вектором комплексных чисел на выходе. В качестве входных сигналов были приняты белый, розовый и красный шумы. По полученным результатам измерений построена зависимость времени работы алгоритмов от размерности входного вектора.

Анализ результатов работы на микропроцессоре Эльбрус 4-С показал, что время, затраченное на подготовку “плана” для реализации алгоритма eml значительно меньше, чем fftw в любом из режимов, для представленных размеров входного вектора (рис. 1). Тем не менее, для малых значений входного вектора (от 2^2 до 2^{12}) алгоритм eml затратил больше времени, чем fftw в любом из режимов, для векторов размером 2^{13} и 2^{14} все алгоритмы показывают схожую производительность (рис. 2). С дальнейшим ростом N eml показывает меньший темп роста времени выполнения, чем любой из режимов fftw (рис. 2). Также стоит заметить, что по-разному подготовленные алгоритмы fftw крайне незначительно различаются по времени выполнения (рис. 2), при этом имеют различия по времени подготовки для размера входного массива больше 16 (рис. 1).

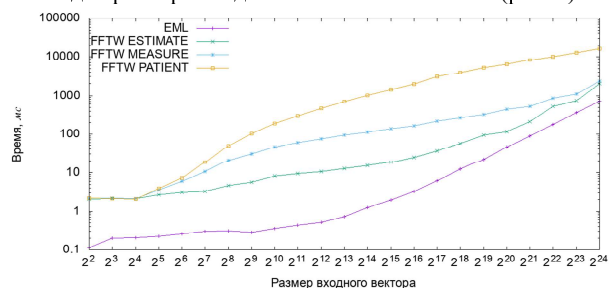


Рис.1. Время подготовки “плана” для входного вектора размера от 2^2 до 2^{24} библиотекой eml и библиотекой fftw с различными флагами на микропроцессоре Эльбрус 4-С.

**Межвузовская научно-техническая конференция студентов,
аспирантов и молодых специалистов им.Е.В.Арменского.
Материалы конференции.**

ISBN 978-5-94768-079-9



9 785947 680799

Подписано в печать 10.02.2018г. Формат 60x84/8. Бумага офсетная №2.

Печать ризография. Усл.печ.л. 38. Уч.-изд.л. 34,2. Тираж 100 экз.

Европейский центр по качеству