Московский институт электроники
и математики им. А.Н.Тихонова

НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
"ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ"

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

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

2019

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»

ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ
малых форм предприятий в научно-технической сфере

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

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Москва 2019 г.

ББК 2+3
Н 34

Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов им. Е.В. Арменского. Материалы конференции. - М. ~: МИЭМ НИУ ВШЭ, 2019. – 278 стр.

ISBN 978-5-94768-074-4

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, информационной безопасности и дизайна.

Издание осуществлено с авторских оригиналов.

ISBN 978-5-94768-074-4

СПИНОВЫЕ МОДЕЛИ С ДИНАМИЧЕСКИ ИЗМЕНЯЕМОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ

К.О. Загвоздина
Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», департамент прикладной математики МИЭМ НИУ ВШЭ

Аннотация

Данное исследование посвящено задаче определения влияния двух решётчатых моделей конформационного пространства и пространства последовательностей белковых макромолекул (модели Изинга и НР-модели) на геометрические свойства случайных блужданий без самопересечений. Анализ проведён на основе средних квадратов радиуса и радиуса инерции. Максимальная длина последовательности $N_{max} = 10$.

Введение

Целью данной работы является получение функциональной зависимости средних от длины блуждания и сравнение результатов расчёта статмеханических средних для двух выбранных моделей. Основной задачей данной работы был расчёт средних радиусов и радиусов инерции с использованием различных моделей учёта энергий взаимодействий элементов конформации. В первой части работы выбранные средние показатели вычисляются как арифметические средние по всем блужданиям заданной длины на простой кубической решётке, что соответствует пределу бесконечно большой температуры. Во второй части работы предыдущие результаты сравниваются со статмеханическими средними, в которых внутренняя энергия конформации вычисляется двумя способами.

Геометрические свойства блужданий без самопересечений

Для каждого сгенерированного случайного блуждания без самопересечений заданной длины N получены значения двух величин: квадрата радиуса

$$R^2 = (\vec{r_N} - \vec{r_0})^2$$

и квадрата радиуса инерции [1]

$$R_g{}^2 = \frac{1}{2\,(N+1)^2} \sum_{i,j=0}^{N} (\vec{r_i} - \vec{r_j})^2,$$

где $\vec{r_i}$ – радиус-вектор каждого –го узла случайного блуждания.

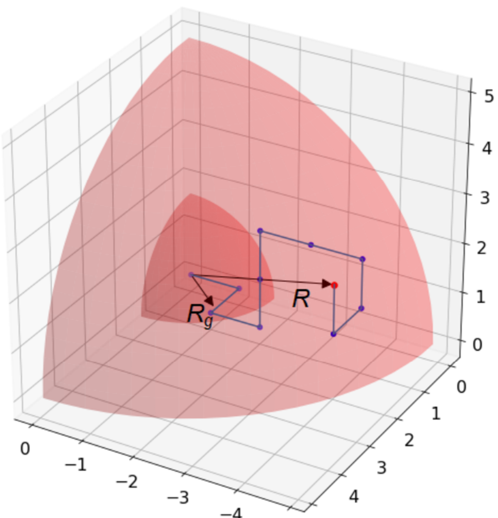

Рис.1. Графическая иллюстрация значений радиуса и радиуса инерции для заданного случайного блуждания

Соответствующие результаты описываются зависимостями (см. рис. 2, 3)

$$< R^2 >_N \sim N^{1+0.214}$$

с погрешностью $err < 0.029$, а

$$< R_g{}^2 >_N \sim N^{1+0.127}$$

с погрешностью $err < 0{,}0693$.

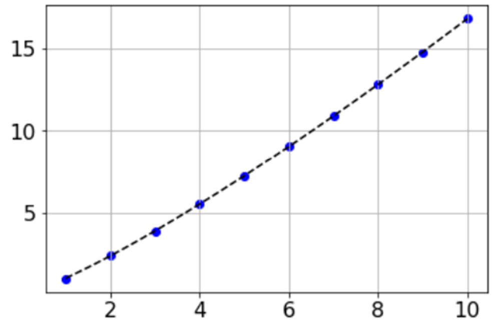

Рис.2. Средний квадрат радиуса для $N \in [1, 10]$

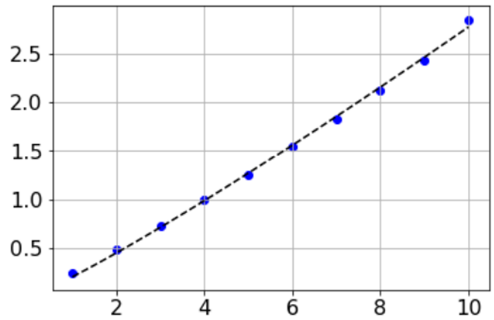

Рис.3. Средний квадрат радиуса инерции для $N \in [1, 10]$

Спиновые модели на случайном блуждании

Конформацией называется случайное блуждание без самопересечений, в узлах которого определены спиновые переменные. В данной работе выбрано две модели определения энергий взаимодействия между узлами таких случайных блужданий.

Для начала рассмотрим НР-модель [2]. Здесь в энергию конформации дают вклад только топологические связи НН, энергия взаимодействия которых равна $-\varepsilon, \varepsilon > 0$. Таким образом, в данной модели имеет место притяжение между некоторыми мономерами. Статмеханическое среднее величины A тогда вычисляется по формуле [2]

$$< A > = \frac{1}{Z} \sum A(i) e^{-m_i \varepsilon / T}, \qquad Z = \sum e^{-m_i \varepsilon},$$

где m_i – количество топологических соседей НН i-й конформации, сумма берётся по всем конформациям.

Рассмотрим теперь модели Изинга [3]. Здесь считаем, что энергия взаимодействия топологических соседей i и j

$$E = -\varepsilon\, S_i S_j, \qquad S_k = \begin{cases} 1, \text{если } H - k - \text{ый элемент}, \\ -1, \text{если } P - k - \text{ый элемент}. \end{cases}$$

Таким образом, в модели Изинга мономеры могут как притягиваться, так и отталкиваться. Тогда статмеханическое среднее величины A тогда вычисляется по формуле

$$< A > = \frac{1}{Z} \sum A(i) e^{-E_i / T}, \qquad Z = \sum e^{-E_i},$$

где E_i – суммарная внутрення энергия связей -й конформации, сумма берётся по всем конформациям.

Из определения этих моделей возникает вопрос влияния взаимодействия между узлами на геометрические свойства случайных блужданий.

Во всех моделях полагаем постоянную Больцмана равной единицу без ограничения точности.

Усреднение производилось по всем конформациям заданной длины. В силу больших объёмов вычислений (для $N = 10$ необходимо выполнить расчёты для 9,3 млрд конформаций) удалось провести расчёты статмеханических средних для $N \in [1, 6]$ (радиус) и для $N \in [1, 6]$ (радиус инерции). Результаты этих расчётов и их сравнение с ранее полученными результатами представлены на рис. 5 и 6. Отношение ε/T примем равным единице.

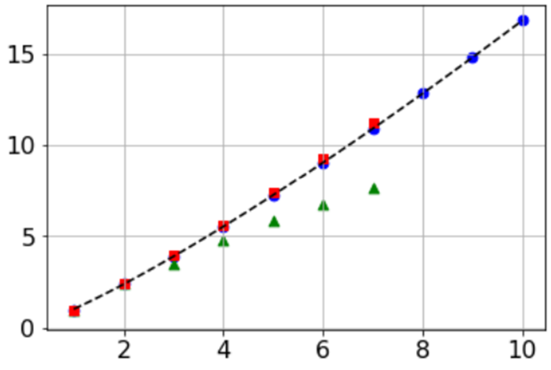

Рис.5. Средний квадрат радиуса, красный – HP-модель, зелёный – модель Изинга

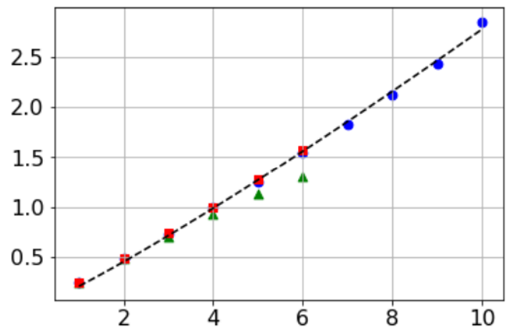

Рис.6. Средний квадрат радиуса инерции, красный – HP-модель, зелёный – модель Изинга

Таким образом, для данного соотношения свойства случайных блужданий с внутренними взаимодействиями согласно HP-модели соответствуют свойствам случайных блужданий без взаимодействий (с бесконечной температурой), случайные блуждания с взаимодействиями согласно модели Изинга свои свойства меняют.

Заключение

В результате исследования найдена функциональная зависимость рассчитанных средних от длины блуждания, произведены расчёты средних с использованием различных моделей и проведено их сравнение. Автор выражает благодарность гранту РФФИ №19-07-01117.

Список литературы:

1. Teraoka A. A., Teraoka I. Polymer solutions: an introduction to physical properties. – John Wiley & Sons, 2002.
2. Lau K. F., Dill K. A. A lattice statistical mechanics model of the conformational and sequence spaces of proteins // Macromolecules. – 1989. – Т. 22. – №. 10. – С. 3986-3997.
3. Janke W. Monte Carlo methods in classical statistical physics // Computational Many-Particle Physics. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2008. – С. 79-140.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМБИНИРОВАННОГО РЕШЕНИЯ ТРЕХИНДЕКСНОЙ ЗАДАЧИ О НАЗНАЧЕНИЯХ

Л.А. Тюнтяева

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, кафедра информатики и автоматизации научных исследований

Аннотация

В данной работе исследуется трехиндексная аксиальная задача о назначениях с декомпозированной матрицей стоимостей. Для её решения используется алгоритм метода ветвей и границ с несколькими стратегиями ветвления (в глубину, в ширину, по минимальной верхней оценке, по минимальной нижней оценке и т. д.) и несколькими вариантами подсчета нижних оценок (симплекс метод, потоковый алгоритм).

Введение

Трехиндексная аксиальная задача о назначениях – частный случай многоиндексных задач о назначениях, являющихся NP – трудными. Данная задача имеет широкий спектр приложений [1,2,3,4], что говорит об её актуальности.

Задачи данного исследования – реализовать алгоритм метода ветвей и границ с разными стратегиями ветвления и возможностью выбора алгоритма подсчёта нижних оценок для решения задачи; провести вычислительный эксперимент с решением задач разных размерностей; исследовать полученные результаты. Цель исследования - поиск наилучшей (с точки зрения затраченного времени) комбинации параметров алгоритма (стратегий ветвления, выбора алгоритма подсчёта нижних оценок) для решения поставленной задачи.

В первом разделе представлены формальное описание и математическая модель поставленной задачи.

Второй раздел посвящён описанию алгоритмов, реализованных для решения поставленной задачи.

В третьем разделе представлены результаты вычислительного эксперимента и сделаны выводы.

Формальная постановка задачи

Условие поставленной задачи звучит так: есть исполнители, работы и орудия труда, которыми исполнители могут пользоваться при исполнении работ. Заданы зарплаты от назначения исполнителей на работы при использовании того или иного орудия труда. Надо так назначить исполнителей на работы, чтобы:

- каждый исполнитель получил не более одной работы и не более одного орудия труда;
- каждую работу делал не более, чем один исполнитель, не более, чем одним орудием труда;
- каждое орудие труда использовалось не более, чем одним исполнителем для выполнения не более, чем одной работы;
- суммарная стоимость назначений была минимальной.

Критерии иограничения математической модели задачи представлены ниже:

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} c_{ijk}\, x_{ijk} \to min \quad (1)$$

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} (m_{ij}^{1} + m_{jk}^{2} + m_{ik}^{3})\, x_{ijk} \to \min \quad (1')$$

$$\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} x_{ijk} = 1, \forall i \in I \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} x_{ijk} = 1, \forall j \in J \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_{ijk} = 1, \forall k \in K \quad (4)$$

$$x_{ijk} \in \{0,1\}, \forall i \in I, \forall j \in J, \forall k \in K \quad (5)$$