

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Научно-исследовательский институт системных исследований РАН

ТРУДЫ НИИСИ РАН

ТОМ 3 N 2

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СЛОЖНЫХ ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ:**

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ПРИКЛАДНЫЕ АСПЕКТЫ

МОСКВА
2013

Редакционный совет НИИСИ РАН:

В.Б. Бетелин (председатель),
О.М. Белоцерковский, Е.П. Велихов, В.А. Галатенко, В.Б. Демидович (отв. секретарь),
П.П. Кольцов, Б.В. Крыжановский, А.Г. Кушнirenко, А.Г. Мадера, М.В. Михайлюк,
В.Я. Панченко, В.П. Платонов, В.Н. Решетников

Главный редактор журнала:

В.Б. Бетелин

Научные редакторы тома:

П.П. Кольцов, Б.В. Крыжановский, А.Г. Мадера, В.Г. Редько

Тематика номера:

Оптико-нейронные технологии, моделирование и информационные технологии

Журнал публикует оригинальные статьи по следующим областям исследований:
математическое и компьютерное моделирование, обработка изображений, визуализация,
системный анализ, методы обработки сигналов, информационная безопасность,
информационные технологии, высокопроизводительные вычисления, оптико-нейронные
технологии, микро- и нанoeлектроника

The topic of the issue:

Optical-neural technologies, modeling and information technologies

The Journal publishes novel articles on the following research areas: mathematical and computer modeling, system analysis, image processing, visualization, signal processing, information security, information technologies, high-performance computing, optical-neural technologies, micro- and nanoelectronics

Заведующий редакцией: Ю.Н. Штейников

Издатель: Российская академия наук, НИИСИ РАН,
117218, Москва, Нахимовский проспект 36, к. 1

СОДЕРЖАНИЕ

1. ОПТИКО-НЕЙРОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Нейроинформатика

<i>Я. М. Карандашев, Б. В. Крыжановский.</i> Метод трансформации матрицы в задаче квадратичной бинарной оптимизации.....	5
<i>Л.Б. Литинский, М.Ю. Мальсагов.</i> Модель Хопфилда с мультипликативной матрицей связи и порогами	17
<i>В.Г. Редько, Т.И. Шарипова.</i> Использование метода нейронного газа для моделирования поискового поведения агентов	22
<i>В.М. Крыжановский, М.Ю. Мальсагов.</i> Поиск ближайшего соседа в хемминговом пространстве высокой размерности иерархическим нейро-классификатором.....	26
<i>В.Л. Дунин-Барковский.</i> Временной подход к анализу импульсных модуляций.....	32
<i>И.А. Смирнитская.</i> Сравнение функций обонятельной и вкусовой сенсорных систем в осуществлении поведенческого выбора.....	37

Биологически инспирированные модели

<i>В.Л. Дунин-Барковский, Я.М. Карандашев, К.П. Соловьева.</i> Об архитектуре вычислительных процессов в мозге.....	43
<i>В.Г. Редько, О.В. Редько.</i> Модель формирования простого вида импринтинга в процессе обучения и эволюции автономных агентов.....	50
<i>В.Г. Редько, З.Б. Сохова.</i> Многоагентная модель прозрачной рыночной экономической Системы.....	61
<i>В.Б. Котов, К.П. Соловьева.</i> Моделирование нейронов генерирующих периодические залпы импульсов на основе внутриклеточной динамики концентрации кальция	66
<i>К.П. Соловьева, В.Б. Котов.</i> Нейросетевая модель дыхательной ритмики с учётом процессов, связанных с эндоплазматическим ретикулом	78
<i>В.Г. Редько.</i> Моделирование когнитивной эволюции – перспективное направление междисциплинарных исследований	88

Информационная оптика

<i>Б.В. Крыжановский, А.О. Меликян.</i> Расчет оптических свойств серебра в рамках модифицированной модели Тауца-Лоренца	95
--	----

II. ТЕХНОЛОГИЯ И ПРОИЗВОДСТВО СУБМИКРОННЫХ СБИС

<i>К.К. Смирнов, А.Г. Сухов, А.С. Цимбалов. Проблемы применения металлополимерных корпусов BGA</i>	<i>99</i>
--	-----------

III. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

<i>М.Ж.Акжолов, И.Г.Лебо, А.Г.Мадера. Об эффективности распараллеливания процессов при решении уравнений газовой динамики с помощью суперкомпьютерного комплекса МВС-100К.....</i>	<i>104</i>
--	------------

<i>М.Л.Бахмутский. Два алгоритма фильтрации, сглаживания и выделения тренда зашумленных больших временных рядов: Алгоритм 2.....</i>	<i>107</i>
--	------------

<i>П.И.Кандалов. Тепловое моделирование компонентов электронных модулей.....</i>	<i>118</i>
--	------------

<i>И.Г. Лебо. Моделирование гидродинамической неустойчивости на границах ускоренного слоя</i>	<i>122</i>
---	------------

Метод трансформации матрицы в задаче квадратичной бинарной оптимизации

Я. М. Карандашев, Б. В. Крыжановский¹

1 - доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН

В работе рассматривается задача бинарной минимизации квадратичного функционала. Для её решения предлагается новый алгоритм, основанный на трансформации матрицы. Исходная матрица, на которой построен функционал, заменяется на нововведённую микс-матрицу. Такое изменение целевой функции приводит к резкому увеличению эффективности алгоритма минимизации: вероятность отыскания глобального минимума возрастает как $\exp(\alpha N)$, где N – размерность задачи; спектр энергий находимых минимумов сильно сдвигается в глубокую сторону так, что среднее по спектру значение отличается от энергии глобального минимума всего лишь на 4% - 6% (в зависимости от типа матриц).

1. Введение

Настоящая работа направлена на повышение эффективности процедуры случайного поиска, применяемой при решении задач бинарной минимизации. Это класс задач, решение которых сводится к минимизации квадратичного функционала $E(S)$:

$$E(S) = -\frac{1}{N^2 \sigma_T} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij} s_i s_j, \quad (1)$$

построенного на заданной $N \times N$ -матрице T в N -мерном конфигурационном пространстве состояний $S = (s_1, s_2, \dots, s_N)$ с дискретными переменными $s_i = \pm 1$, $i = \overline{1, N}$; σ_T - стандартное отклонение матричных элементов T_{ij} . Матрицу T без ограничения общности будем полагать симметричной ($T_{ij} = T_{ji}$) с нулевой диагональю ($T_{ii} = 0$). Нормировка на σ_T обеспечивает корректность сравнения результатов для различных матриц [1].

Задача минимизации в конфигурационном пространстве кардинально отличается от той же задачи в непрерывном пространстве с вещественными переменными, когда она может быть решена с применением известных вычислительных процедур. Во-первых, в случае бинарных переменных квадратичный функционал является многоэкстремальным, даже если матрица T является положительно-определённой. При этом число локальных минимумов растёт экспоненциально с ростом размерности пространства. Во-вторых, задача бинарной минимизации в общем случае является NP-сложной, т.е. в общем случае нет полиномиального алгоритма её решения.

Известно, что задача квадратичной бинарной оптимизации равносильна задаче о максимальном разрезе (MAX-CUT) из теории графов. Для некоторых классов графов (планарные графы, графы не содержащие K_5 (полный граф из пяти вершин), слабо двудольные графы, графы с неотрицательными

весами) существуют полиномиальные алгоритмы решения этой задачи. Из этого следует, что задача квадратичной бинарной оптимизации для 2D модели Изинга (двумерная спиновая решётка, где имеется взаимодействие только между ближайшими соседями) в случае непериодических граничных условий и в отсутствие внешнего магнитного поля сводится к задаче MAX-CUT на планарном графе и, таким образом, полиномиально разрешима. Полиномиально разрешима также двумерная решётка с периодическими граничными условиями, если связи имеют вид $\pm J$. Для гауссовых связей вопрос до сих пор открыт. Как только мы добавляем в систему внешнее поле, т.е. линейный член в (1), задача становится NP-сложной для всех типов взаимодействий. Для трёхмерной кубической решётки задача является NP-сложной даже в отсутствие внешнего поля (подробнее смотрите работу [2]).

Для решения NP-сложных задач предложены алгоритмы ε -аппроксимации, т.е. полиномиальные алгоритмы, дающие решение, отличающееся лишь на ε от энергии глобального минимума. Выдающимся результатом здесь является работа [3], в которой был предложен алгоритм, который за полиномиальное время даёт решение задачи MAX-CUT со значением, составляющим не менее 0.878 от величины максимального разреза, т.е. отличающимся менее чем на 13% от оптимума. С другой стороны, как следует из работы [4], в предположении $P \neq NP$, не существует полиномиального алгоритма, который доказуемо даёт решение со значением разреза, составляющим хотя бы 98% от оптимального.

Исследование алгоритмов ε -аппроксимации привело к открытию методов сведения задачи бинарной оптимизации к линейному и полуопределённому программированию (так называемые LP- и SDP-релаксация). Такой подход активно используется для поиска верхних и нижних границ в методе ветвей и границ. Это позволило существенно сузить полный перебор и найти точное решение, пусть не за полиномиальное, но за умеренное время, для более широкого круга задач. Например, в

работе [2] описан алгоритм, основанный на LP-релаксации, позволяющий за несколько минут рабочего времени обычного компьютера находить основное состояние для задач 2D и 3D моделей Изинга с периодическими граничными условиями и гауссовыми связями для размерности задачи вплоть до нескольких тысяч. В работах [5-6] описаны методы SDP-релаксации задачи MAX-CUT, позволяющие решать задачи с более плотными матрицами связей, чем у 2D и 3D решёток. Однако размер задач, с которыми данный алгоритм справляется, существенно уменьшается с увеличением плотности ненулевых матричных элементов.

Для решения задач больших размерностей, а также с более плотными матрицами (например, модель твёрдого тела Шеррингтона-Киркпатрика) применяются эвристические методы. Самыми простыми и потому наиболее популярными эвристиками являются локальные одношаговые алгоритмы поиска.

В настоящей работе в качестве основной процедуры локальной минимизации выбрана асинхронная динамика модели Хопфилда [7], которая является ядром большинства известных алгоритмов бинарной минимизации. Модель описывает систему из N спинов, взаимодействие которых задается функционалом энергии $E(S)$. Стандартная (асинхронная) динамика минимизации состоит в следующем: вычисляется величина локального поля $h_i \sim -\partial E(S) / \partial s_i$, действующего на произвольно выбранный i -й спин:

$$h_i = \sum_{j \neq i}^N T_{ij} s_j \quad (2)$$

Если спин направлен вдоль поля ($h_i s_i \geq 0$), то его состояние не изменяется. Если спин находится в неустойчивом состоянии ($h_i s_i < 0$), то он разворачивается вдоль поля, принимая состояние $s_i = \text{sgn } h_i$. Эта процедура последовательно применяется ко всем спинам до тех пор, пока система не конвергирует в устойчивое состояние. Подчеркнем, что в каждый момент времени обновляется состояние только одного спина. В этом отличие асинхронной динамики от синхронной, в которой состояния всех спинов обновляются одновременно. Описываемая динамика есть не что иное, как спуск по энергетической поверхности $E(S)$, являющийся полным аналогом покоординатного градиентного спуска в непрерывном пространстве. Уменьшение энергии при каждом перевороте неустойчивого спина гарантирует нам, что процесс, описываемый асинхронной динамикой, за конечное число шагов приводит систему в устойчивое положение с минимумом энергии. Конечно, найденный минимум скорее всего окажется локальным, в то время как нам бы хотелось найти самый глубокий (глобальный) минимум функционала. Стандартным приёмом здесь является случайный поиск (SRS), суть которого состоит в многократном повторении описанных выше спусков из различных случайных стартовых конфигураций.

Несмотря на простоту алгоритма, спуск из одной случайной конфигурации требует приблизительно $O(N^2)$ операций для полносвязной матрицы (как в модели Шеррингтона-Киркпатрика) и $O(N)$ для разреженных матриц (как в модели Эдвардса-Андерсона). Количество локальных минимумов с ростом N экспоненциально увеличивается, а значит, экспоненциально уменьшается вероятность обнаружения глобального минимума. Несмотря на указанные трудности, эвристические методы широко применяются для решения задач бинарной оптимизации. Успешное применение модели Хопфилда к задаче коммивояжера [8], инициировало широкие исследования аналогичных подходов к решению задач теории графов [9], нейросетевой оптимизации обработки изображений [10] и ряду других приложений [11-23]. Анализ причин подобного успеха проведен в работе [14], где показано, что при случайном поиске вероятность отыскания какого-либо минимума экспоненциально возрастает с ростом глубины этого минимума. В частности, при случайной инициализации нейросети она с наибольшей вероятностью конвергирует в состояние, соответствующее глобальному минимуму [24-25]. С несколько меньшей вероятностью она конвергирует в один из локальных минимумов, сравнимых по глубине с глобальным. А вероятность конвергенции в относительно неглубокие локальные минимумы экспоненциально мала. Такое соотношение вероятностей означает, что система с подавляющей вероятностью находит если не оптимальное решение (глобальный минимум), то одно из субоптимальных решений (локальный минимум).

Обычно эффективность процедуры случайного поиска пытаются повысить видоизменяя динамику спуска по поверхности, описываемой функционалом $E(S)$. Хороший обзор методов дан в работах [16-18]. В отличие от такого подхода, в настоящей работе предлагается изменять не динамику спуска по поверхности, а трансформировать саму поверхность так, чтобы увеличился радиус области притяжения глобального минимума (равно как и других минимумов, сравнимых с глобальным по глубине). Мы предлагаем трансформировать поверхность смешивая исходную матрицу T с матрицей T^2 . Варьируя соотношение смешиваемых матриц, мы можем контролировать углубление и смещение минимумов в пространстве, добиваясь экспоненциального по N роста скорости отыскания глобального минимума. На этой основе построен предлагаемый здесь алгоритм минимизации ММ (Mix-Matrix algorithm).

Эффективность предложенного двухэтапного алгоритма апробирована на разных типах матриц: i). полносвязные матрицы модели Шеррингтона-Киркпатрика с равномерным либо нормальным распределением матричных элементов (SK-модель); ii). разреженные матрицы моделей Эдвардса-Андерсона (2D EA и 3D EA модели, описывающие двумерные и трехмерные спиновые решетки с периодическими граничными условиями, в которых взаимодействие отлично от нуля только между ближайшими соседями

в решётке и описывается нормально распределенными матричными элементами).

Строгое обоснование эффективности предлагаемого алгоритма возможно только для матриц SK-модели. Применение алгоритма для другого типа матриц будет эвристическим.

Структура статьи следующая. В секции 2 показывается, что вероятность отыскания минимума при случайном поиске экспоненциально возрастает с ростом глубины минимума. В секции 3 описываются способ построения микс-матрицы и алгоритм минимизации на её основе. В секции 4 показаны основные результаты работы алгоритма. Секция 5 посвящена обсуждению полученных результатов.

2. Область притяжения минимума

В данном разделе мы покажем, что с ростом глубины минимума растет радиус бассейна притяжения и, соответственно, возрастает вероятность его отыскания при случайном поиске. Для простоты изложения мы введем понятие глубины минимума, которую мы обозначим через $\gamma \equiv |E| \sqrt{N}$.

Пусть $S_0 = (s_1^{(0)}, s_2^{(0)}, \dots, s_N^{(0)})$ - конфигурация, соответствующая некоторому минимуму $E_0 = E(S_0)$. Совокупность точек, находящихся на расстоянии n (по Хеммингу) от S_0 , назовём n -окрестностью точки S_0 . Тогда, объём области притяжения минимума (число всех точек пространства, стартуя с которых спускаемся в S_0) задается выражением:

$$V = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \binom{N}{n} P_n \quad (3)$$

где P_n - вероятность попадания из n -окрестности в минимум S_0 , которую мы оценим ниже.

Рассмотрим произвольную точку S_n в n -окрестности минимума S_0 , полагая что точка S_n не является локальным минимумом. В конфигурации S_n имеется хотя бы один спин (i -ый спин), направление которого противоположно направлению действующего на него локального поля $h_i(S_n)$. Состояние такого спина неустойчиво и он должен развернуться вдоль поля $h_i(S_n)$. Переворот этого спина переведет систему в $(n-1)$ -окрестность, если направление поля $h_i(S_n)$ совпадает с направлением эталона $s_i^{(0)}$. В противном случае система перейдет в $(n+1)$ -окрестность, т.е. отдалится от минимума.

Вычислим вероятность перехода из n -окрестности в $(n-1)$ -окрестность, которая совпадает с вероятностью события $h_i(S_n)s_i^{(0)} > 0$. В Приложении А показано, что произведение $h_i(S_n)s_i^{(0)}$ представляет собой нормально распределенную величину со средним $(N-2n)|E_0|$ и дисперсией $N\sigma_T^2$. Соответственно, для искомой вероятности получим $\Pr\{h_i(S_n)s_i^{(0)} > 0\} = \Phi(\gamma_n)$, где:

$$\Phi(\gamma_n) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\gamma_n} e^{-\frac{1}{2}z^2} dz, \quad \gamma_n = \gamma(1-2n/N) \quad (4)$$

$\gamma = |E_0| \sqrt{N}$ - глубина минимума S_0 . Тогда выражение для вероятности конвергенции из n -окрестности в минимум S_0 примет вид:

$$P_n = \Phi(\gamma_n) \cdot \Phi(\gamma_{n-1}) \cdot \dots \cdot \Phi(\gamma_1). \quad (5)$$

Подставляя это выражение в (3), используя соотношение Стирлинга и переходя от суммирования к интегрированию по переменной $x = n/N$ для объема области притяжения получим:

$$V = \sqrt{2N} \int_0^{0.5} \frac{e^{NF(x)}}{\sqrt{\pi x(1-x)}} dx, \quad (6)$$

где

$$F(x) = -x \ln x - (1-x) \ln(1-x) + \int_0^x \ln[\Phi(\gamma_z)] dz, \quad (7)$$

где $\gamma_z = \gamma(1-2z)$.

Интеграл (6) оценим методом перевала. Приравняв производную $F(x)$ к нулю, получим уравнение для седловой точки x_0 :

$$\frac{x_0}{1-x_0} = \Phi[\gamma(1-2x_0)] \quad (8)$$

и выражение (6) преобразуется к виду:

$$V = 2e^{NF(x_0)} \quad (9)$$

Для простоты в предэкспоненте выражения (9) опущен несущественный множитель, слабо отличающийся от единицы на всем интервале изменений величины γ .

Величина x_0 фактически представляет собой радиус области притяжения минимума, поскольку объем области с точностью до несущественного коэффициента совпадает с x_0^N . Анализ выражений (8)-(9) показывает, что с ростом глубины минимума радиус области притяжения возрастает. Одновременно экспоненциально возрастает и объем области притяжения. Чтобы убедиться в этом, получим из (8)-(9) более простые оценочные выражения. Эксперимент показывает, что глубина среднестатистического минимума $\bar{\gamma}$ отличается от глубины глобального минимума γ_0 всего лишь на 10-15%. Кроме того, величины $\bar{\gamma}$ и γ_0 слабо меняются в зависимости от типа матрицы (см. Таблицу 1). Это позволяет для относительно глубоких минимумов ($\bar{\gamma} < \gamma \leq \gamma_0$) представить функцию $x_0 = x_0(\gamma)$ в виде разложения в окрестности значения $\bar{\gamma}$, которое наиболее легко определяется в эксперименте. Ограничиваясь линейным членом разложения, получим оценочное выражение:

$$x_0 \approx \bar{x} + k \bar{x} (\gamma - \bar{\gamma}) \quad (10)$$

где $\bar{x}$ - радиус притяжения для минимума среднестатистической глубины $\bar{\gamma}$, а k - коэффициент, слабо зависящий от типа матрицы (см. Таблицу 1).

Таблица 1. Экспериментальные значения величин, характеризующих область притяжения, для матриц трёх типов моделей 2D EA, 3D EA и SK.

	γ_0	$\bar{\gamma}$	x_0	$\bar{x}$	$\frac{\ln(P_0)}{N}$	$\frac{\ln(\bar{P})}{N}$	k
2DEA	1.31	1.09	0.383	0.377	-0.125	-0.142	0.091
3DEA	1.38	1.15	0.385	0.379	-0.118	-0.138	0.088
SK	1.51	1.36	0.387	0.384	-0.111	-0.121	0.076

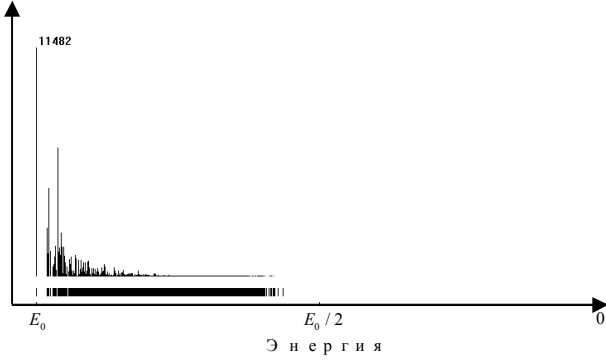


Рис. 1. Распределение числа попаданий в различные минимумы для одной случайной матрицы $N = 100$, число стартов 10^6 . По оси абсцисс – значение функционала, E_0 соответствует энергии глобального минимума. По оси ординат – число попаданий. Число попаданий в глобальный минимум составило 11482. Полоса внизу отображает плотность найденных минимумов

Аналогично, проводя в (9) разложение в окрестности величины $\bar{\gamma}$, для вероятности отыскания минимума $P(\gamma) = V / 2^N$ получим:

$$P(\gamma) = \bar{P} e^{kN(\gamma - \bar{\gamma})} \quad (11)$$

где $\bar{P} = P(\bar{\gamma})$ есть вероятность отыскания минимума среднестатистической глубины $\bar{\gamma}$.

В Таблице 1 приведены экспериментально определенные значения характерных параметров, позволяющие провести численную оценку для полученных теоретических выражений. Взяв для примера некоторый среднестатистический минимум с $\bar{\gamma} = 1.36$, характерный для SK-матриц, получаем $\bar{x} \approx 0.384$ и $k \approx 0.076$. Это означает, что при случайном поиске большая часть точек, из которых система конвергирует в данный минимум, расположена в его n -окрестности, где $n \approx 0.384N$. Соответственно, вероятность отыскания минимума глубины γ задается выражением $P \approx \bar{P} e^{0.076N(\gamma - \bar{\gamma})}$. Как видим, чем глубже минимум, тем больше вероятность его отыскания, причём зависимость экспоненциальная. Данная зависимость выполняется не строго, а лишь в статистическом смысле. При небольших значениях N её можно подтвердить экспериментально (см. рис. 1). При больших размерностях ($N \geq 1000$) нет возможности проверить данную экспоненциальную зависимость, поскольку случайным поиском не удаётся попасть в один и тот же минимум более одного

раза даже при достаточно большом ($10^6 - 10^8$) числе стартов.

В данном разделе мы получили два результата, которые мы будем использовать для построения алгоритма случайного поиска. Во-первых, радиус области притяжения минимума напрямую зависит от его глубины: чем глубже минимум, тем больше его радиус области притяжения. На практике для глубоких минимумов эту зависимость можно приближённо считать линейной. Во-вторых, показано, что вероятность отыскания минимума растёт экспоненциально с ростом его глубины.

3. Алгоритм минимизации

В этом разделе мы опишем предлагаемый алгоритм минимизации. Главным его элементом является трансформация энергетической поверхности функционала, проводимая таким образом, чтобы глубокие минимумы исходного функционала стали ещё глубже. Тем самым мы достигнем экспоненциального увеличения вероятности нахождения глубоких минимумов при случайном поиске.

Трансформировать описываемую квадратичной формой $E(S)$ поверхность можно только трансформируя матрицу, на которой она построена. Заменим матрицу в выражении функционала (1) на новую матрицу, которую мы назовём микс-матрицей:

$$M = \frac{1}{\sigma_T} (1 - z)T + \frac{1}{\sigma_{2T}} zT^2, \quad (12)$$

где T^2 - матрица, получаемая возведением матрицы T в квадрат с последующим обнулением диагональных элементов, σ_T и σ_{2T} - среднеквадратичное отклонение элементов матриц T и T^2 соответственно. При изменении параметра z от 0 до 1 происходит переход от матрицы $M = T$ к матрице $M = T^2$. Соответственно, поверхность, описываемая функционалом $E(S)$, трансформируется в поверхность, описываемую функционалом $E_z(S)$:

$$E_z(S) = -\frac{1}{\sigma_M N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N M_{ij} s_i s_j \quad (13)$$

где $\sigma_M = \sigma_T \sqrt{z^2 + (1 - z)^2}$ - стандартное отклонение элементов матрицы M , диагональные элементы матрицы M строго равны нулю ($M_{ii} = 0$). Минимизация функционала (13) производится так же, как в стандартном алгоритме случайного поиска. Вычисляется величина действующего на произвольно выбранный i -й спин $h_i^{(z)} = \sum M_{ij} s_j$ и если спин находится в неустойчивом состоянии ($h_i^{(z)} s_i < 0$), то его состояние обновляется в соответствии с решающим правилом $s_i = \text{sgn } h_i^{(z)}$. Эта процедура последовательно применяется ко всем спинам до тех пор, пока сеть не конвергирует в устойчивое состояние, соответствующее минимуму функционала $E_z(S)$.

Ниже мы покажем, что при такой трансформации функционала, глобальный минимум и другие глубокие минимумы исходного функционала станут глубже. Разумеется, побочным эффектом такой трансформации является то, что минимумы сдвигаются в пространстве. Однако будет показано, что сдвиг глобального минимума невелик.

Прежде чем перейти к последующему анализу отметим [1], что форма минимума задается двумя параметрами: средним значением квазиэнергии $\lambda = h_i s_i / \sqrt{N}$ (т.е. глубиной минимума) и ее дисперсией σ_λ^2 . Соответственно, все последующие выражения будут содержать эти два независимых параметра. В произвольной точке вдали от минимума величина λ может принимать как положительные, так и отрицательные значения, и ее дисперсия максимальна $\sigma_\lambda^2 = 1$. В минимуме величина λ может быть только положительной ($h_i s_i > 0$, $i=1, N$) и величина σ_λ^2 уменьшается до значений $\sigma_\lambda^2 \approx 0.5$.

3.1 Углубление минимума

Покажем что трансформация (12) приводит к углублению минимума. Рассмотрим энергию $E_{z0} = E_{z0}(S_0)$ в точке S_0 . Из (13) после ряда преобразований получаем:

$$E_{z0} = E_0 \frac{1 - z + zA}{\sqrt{(1-z)^2 + z^2}}, \quad A = \frac{\sigma_\lambda^2 + \gamma^2 - 1}{\gamma} \sqrt{q/(q-1)} \quad (14)$$

где q – число отличных от нуля элементов в строке матрицы T ($q = N-1$ в SK-модели и $q = 4$ в модели 2D EA). Аналогичные вычисления показывают, что дисперсия углубления $\sigma^2(E_{z0}/E_0)$ стремится к нулю с ростом размерности как $1/N$. Нетрудно заметить, что углубление имеет место только для достаточно глубоких минимумов, удовлетворяющих соотношению $\gamma^2 > 1 - \sigma_\lambda^2$. Мелкие минимумы ($\gamma^2 < 1 - \sigma_\lambda^2$) в результате трансформации становятся еще более мелкими.

Из (14) следует, что имеется оптимальное значение параметра z

$$z_{opt} = \frac{A}{1+A} \quad (15)$$

при котором углубление достигает максимального значения:

$$(E_{z0}/E_0)_{opt} = \sqrt{1+A^2} \quad (16)$$

Для матриц 2D EA имеем $\gamma \approx 1.31$, $\sigma_\lambda \approx 0.69$ и из (15)-(16) находим $z_{opt} \approx 0.51$, $(E_{z0}/E_0)_{opt} \approx 1.45$. Аналогично, для SK-модели $\gamma \approx 1.51$, $\sigma_\lambda \approx 0.76$, значит $z_{opt} \approx 0.55$, $(E_{z0}/E_0)_{opt} \approx 1.59$. Видим, что оптимальное значение z находится где-то вблизи 0.5.

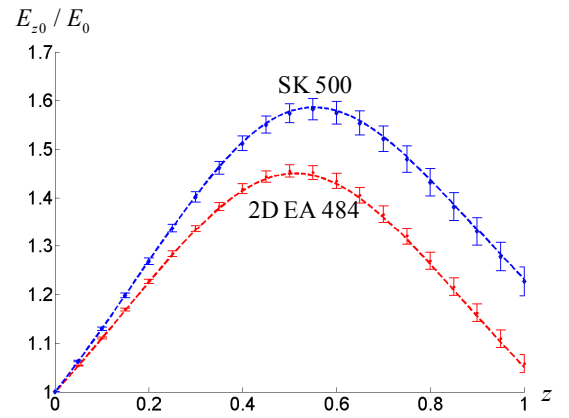


Рис. 2 Увеличение глубины глобальных минимумов в зависимости от параметра z . Маркеры с планками – экспериментальные кривые: SK 500 – для $N = 500$ модели Шеррингтона-Киркпатрика; 2D EA 484 – для матриц 2D модели Эдвардса-Андерсона размерности $N = 22 \times 22$. Штриховые линии – теоретические, построенные по формуле (14) с параметрами $\gamma \approx 1.51$, $\sigma_\lambda \approx 0.76$ для SK 500, и $\gamma \approx 1.31$, $\sigma_\lambda \approx 0.69$ для 2D EA 484.

Эксперимент подтверждает полученные соотношения. На рис. 2 показана характерная картина углубления на примере глобального минимума. Как видим, трансформация приводит к увеличению глубины: почти на 60% для полностью связанных матриц SK-модели при $z \approx 0.55$ и примерно на 45% для разреженных матриц модели 2D EA при $z \approx 0.51$.

3.2 Сдвиг минимума

Оценим насколько сдвинется минимум при трансформации поверхности. Среднюю величину сдвига можно представить в виде

$$\bar{d} = N \cdot P, \quad (17)$$

где $P = \text{Pr} \{ h_i^{(z)} s_i^{(0)} < 0 \mid h_i s_i^{(0)} > 0 \}$ – вероятность того, что направления спина s_i и локального поля $h_i^{(z)}$ не совпадают для микс-матрицы, при условии, что они совпадают при исходной матрице. Для искомой вероятности (см. Приложение А) получаем:

$$P = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\lambda \Phi(\gamma/\sigma_\lambda)} \int_0^\infty dx e^{-\frac{(x-\gamma)^2}{2\sigma_\lambda^2}} \left[1 - \Phi\left(\frac{\alpha x + \sigma_\lambda^2 - 1}{\sigma_\lambda^2}\right) \right], \quad (18)$$

где $\alpha = \left[(1-z)\sqrt{(q-1)/q} + z\gamma \right] / z$, $\Phi(\cdot)$ – интеграл вероятностей. Отметим, что при $z \rightarrow 0$ интеграл в (18) стремится к нулю, т.е. сдвига нет, поскольку функционал $E_{z0}(S)$ совпадает с исходным $E(S)$. Еще более важно отметить, что наименьшие сдвиги ожидаются для наиболее глубоких минимумов.

Как и следовало ожидать, формула (18) описывает монотонное увеличение величины $\bar{d}$ с ростом z . Это подтверждается экспериментом (см. рис. 3). Более того, с ростом z возрастают и флуктуации величины сдвига d . Это ожидаемый результат, поскольку аналогичные (17)-(18) вычисления показывают, что дисперсия сдвига описывается выражением $\sigma^2(d) = \bar{d}$.

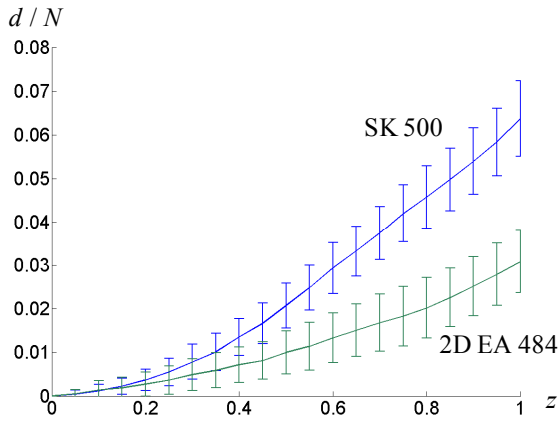


Рис. 3. Сдвиг минимума как функция от z . Маркеры с планками погрешностей получены экспериментально для двух типов матриц: SK 500 - для $N=500$ модели Шеррингтона-Киркпатрика; 2D EA 484 - для матриц 2D модели Эдвардса-Андерсона размерности $N=22 \times 22$.

Как показывает эксперимент (см. рис. 3), максимальный сдвиг глобального минимума, достигаемый при $z=1$, не превышает величины $\bar{d}_{\max} = 0.06N$ для полностью связанных матриц SK-модели и величины $\bar{d}_{\max} = 0.03N$ для разреженных матриц модели 2D EA. Оптимальные значения, достигаемые при $z=z_{\text{opt}}$, приблизительно в 3 раза меньше: $\bar{d}_{\text{opt}} = 0.015N$ для SK-модели и $\bar{d}_{\text{opt}} = 0.01N$ для модели 2D EA.

3.3 Описание алгоритма

Как было показано выше, трансформация функционала приводит к существенному (до 45-60%) увеличению глубины глобального минимума. Тем самым, вероятность отыскания минимума экспоненциально по N увеличивается. Однако, при этом происходит незначительный сдвиг минимума в пространстве на расстояние $\bar{d} \sim 0.01N - 0.02N$. Чтобы скорректировать этот сдвиг, мы предлагаем следующий алгоритм минимизации, состоящий из двух шагов:

1) На первом шаге из случайной точки выполняется спуск по поверхности $E_z(S)$ и находится конфигурация $S_m^{(z)}$, соответствующая минимуму функционала $E_z(S)$.

2) Второй шаг включает коррекцию: из точки $S_m^{(z)}$, мы спускаемся по поверхности $E(S)$ до ближайшего минимума S_m функционала $E(S)$.

4. Результаты

Для проверки эффективности предложенного алгоритма в процессе численных экспериментов строилась микс-матрица при значениях z от 0 до 1 с интервалом $\Delta z = 0.05$. Результаты экспериментов усреднялись по ансамблю из 50 матриц. Каждый эксперимент включал в себя по $N_{\text{runs}} = 10^6$ стартов.

Каждый старт приводил к некоторому локальному минимуму. Мы следили за средней энергией $\bar{E}$ найденных минимумов, за вероятностью попадания в интервал энергий $E \in [-1; -0.99]$, близких к глобальному (за -1 принята энергия глобального минимума E_0), а также за вероятностью отыскания глобального минимума (при малых размерностях $N \leq 500$). В экспериментах помимо описанной выше микс-матрицы (12) мы также попробовали использовать микс-матрицу типа $M = aT + bT^3$.

4.1 Типы матриц

Эффективность предложенного двухэтапного алгоритма была проверена для разных видов случайных матриц: полностью связанных матриц SK-модели и разреженных матриц моделей 2D EA и 3D EA. Отыскание глобального минимума функционала энергии $E(S)$ для данных типов матриц является NP-сложной задачей (исключение составляет 2D EA - модель, для которой этот вопрос ещё окончательно не решён). Как следствие, нахождение основного состояния (глобального минимума) возможно лишь для небольших размерностей. Для нахождения основных состояний SK матриц, мы решали задачу разными алгоритмами (SRS, возведение матриц в степень [1], GRA-алгоритм [26]), проводили большое количество стартов и выбрали самые глубокие найденные минимумы в качестве «основных» состояний. Пользуясь таким подходом, с большой степенью уверенности можно сказать, что нам удалось найти основные состояния для матриц размерности вплоть до $N=500$. Для 2D и 3D EA матриц основные состояния были взяты с сайта сервера спинового стекла¹, который находит их с помощью branch and cut метода [2].

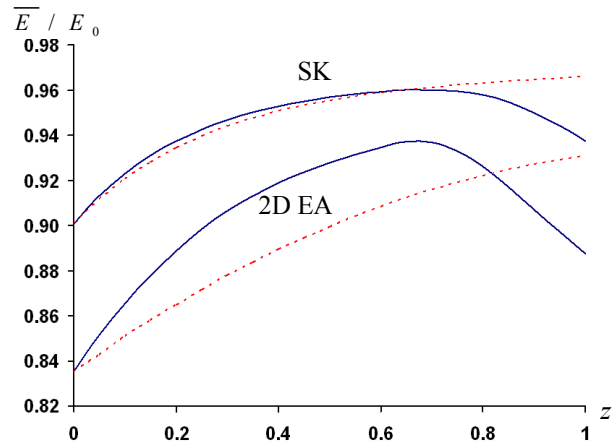


Рис. 4. Среднее значение энергии локальных минимумов, найденных с помощью алгоритма MM. Пунктирные линии – микс-матрица с T^3 , сплошные – микс-матрица с T^2 . Два типа матриц – SK и 2D EA. Величина средней энергии $\bar{E}$ поделена на энергию глобального минимума E_0 и примерно одинакова для разных N .

¹ Spin Glass Server. URL <http://www.informatik.uni-koeln.de/spinglass/>

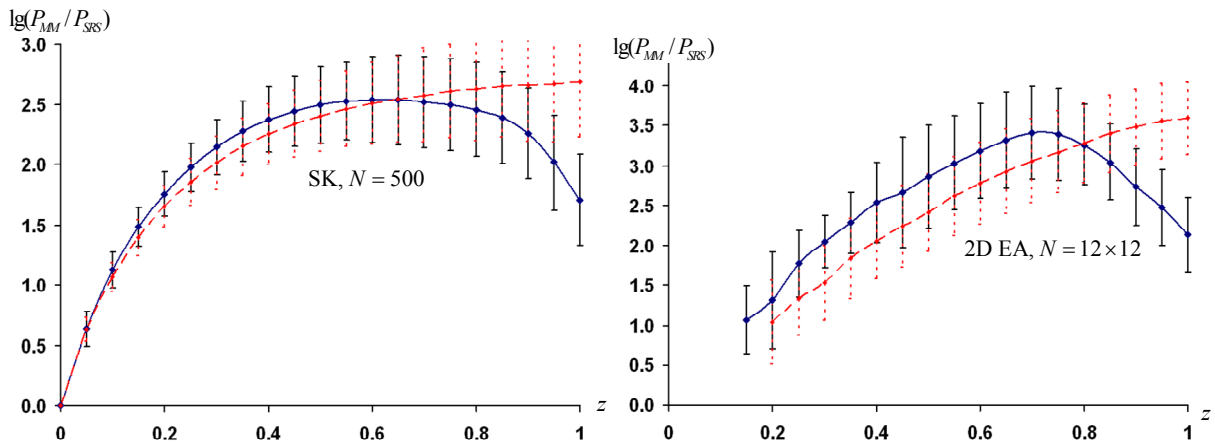


Рис. 5. Логарифм отношения вероятностей попадания в интервал энергий $[-1, -0.99]$. Пунктирные линии – mix -матрица с T^3 , сплошные – mix -матрица с T^2 . Слева: результат для матриц SK размерности $N = 500$ ($P_{SRS} \approx 3 \cdot 10^{-5}$). Справа: результат для матриц 2D EA размерности $N = 144$ ($P_{SRS} \approx 2.6 \cdot 10^{-7}$), при малых z на некоторых матрицах алгоритм не находил глобальных минимумов, поэтому точки отсутствуют.

4.2 Средняя энергия минимумов

На рис. 4 показано как меняется средняя энергия $\bar{E}$ найденных минимумов при различных z . Интересно отметить, что величина $\bar{E}/E_0$ не зависит от размерности задачи, а зависит лишь от типа матрицы. Причём, результаты для 3D Изинга сливаются с результатами для 2D Изинга и потому не приведены на графике.

Как видно из рис. 4, с ростом z средняя энергия $\bar{E}$ приближается к E_0 . Для mix -матрицы с примесью T^2 наблюдается максимум при $z \approx 0.7$, хотя максимальное углубление минимумов (см. раздел 3) достигается при $z = 0.51 - 0.55$. Для микс-матрицы с T^3 рост средней энергии $\bar{E}$ монотонный вплоть до $z = 1$. Более того, можно продолжить увеличивать z дальше за 1 и обнаружить что пик $\bar{E}$ приходится примерно на $z = 1.2$. Впрочем, величина $\bar{E}$ при $z = 1.2$ всего лишь на доли процента отличается от значения $\bar{E}$ при $z = 1$ (не показано).

Самым важным является то, что независимо от размерности задачи наш алгоритм позволяет находить минимумы, отличающиеся от энергии глобального минимума всего лишь на несколько процентов. Так, для матриц двумерной и трёхмерной модели EA алгоритм SRS ($z = 0$) даёт минимумы с энергией на 17% хуже глобального, в то время как алгоритм MM (при $z = 0.7$) даёт минимумы отличающиеся от энергии глобального минимума лишь на 6.5 - 7% (см. табл. 2). Аналогично, для матриц SK модели, алгоритм SRS не доходит до глобального минимума примерно на 10%, в то же время средняя энергия минимумов, получаемых алгоритмом MM при $z = 0.7$, оказывается лишь на 4% меньше энергии глобального минимума (см. табл. 2).

4.3 Вероятность попадания в $[-1; -0.99]$

На рис. 5 показано во сколько раз увеличивается вероятность нахождения минимумов с энергией отличающейся от глобальной меньше чем на 1%. Для демонстрации мы выбрали максимально возможные размерности задач, с которыми мы ещё можем справиться с помощью обычного случайного поиска. Для матриц 2D EA уже при размерности $N = 12 \times 12$ вероятность отыскания минимумов с энергией $E \in [-1; -0.99]$ алгоритмом SRS не больше чем $P_{SRS} = 3 \cdot 10^{-7}$. Для SK матриц максимальная размерность $N = 500$ (вероятность $P_{SRS} = 3 \cdot 10^{-5}$). Вероятность получаемую при помощи алгоритма MM мы обозначили как P_{MM} . Как видно из рис. 5, разница между P_{MM} и P_{SRS} даже при относительно небольшой размерности задачи составляет примерно 3 порядка.

Интересно, что для SK матриц ход кривых на рис. 5 для mix -матриц с T^2 и T^3 практически совпадает, и лишь при $z > 0.7$ кривые начинают расходиться. Для матриц 2D EA имеет место другая картина: mix -матрица с T^2 имеет явное преобладание вплоть до $z \approx 0.8$, после чего начинает преобладать mix -матрица с T^3 .

Видно также (рис. 5), что с ростом z начинает увеличиваться дисперсия, показанная на рисунке планками стандартного отклонения, что потенциально может привести к нестабильности алгоритма, т.е. для некоторых задач трансформация функционала может привести не к улучшению поиска, а наоборот, к ухудшению. С ростом размерности N дисперсия должна спадать, а отношение P_{MM} к P_{SRS} резко увеличиваться. Однако это трудно продемонстрировать из-за того, что величины P_{MM} и P_{SRS} с ростом N уменьшаются экспоненциально и нет возможности их экспериментальной оценки.

4.4 Предел больших размерностей

Интересно посмотреть работу предложенного алгоритма для матриц, для которых мы не знаем глобального минимума и даже экстенсивный случайный поиск с огромным числом стартов нам в этом не помогает. Для этой цели мы выбрали матрицы 3-х мерной модели Эдвардса-Андерсона. Были взяты четыре размерности $N = L \times L \times L$ при $L = 5, 8, 10$ и 20 . В эксперименте определялась плотность вероятности $P(\gamma)$, где $P(\gamma)d\gamma$ есть вероятность отыскания минимума с глубиной в интервале $[\gamma, \gamma + d\gamma]$. На рис. 6 показаны графики плотности вероятности, полученные SRS-алгоритмом и ММ-алгоритмом (при $z = 0.7$). При достаточно больших N полученные кривые хорошо аппроксимируются гауссианом

$$P(\gamma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(\gamma - \bar{\gamma})^2}{2\sigma^2}\right] \quad (19)$$

с параметрами $\bar{\gamma}$ и σ , показанными в таблице 2.

Как видим, вследствие трансформации спектр минимумов сдвигается в сторону глобального минимума в среднем на $\Delta\bar{\gamma} = 0.14$. Это весьма существенный сдвиг: расстояние от пика до глобального минимума уменьшается более чем в 2.5 раза. Наиболее отчетливо это заметно при больших размерностях, поскольку с ростом размерности ширины пиков уменьшаются как $1/\sqrt{N}$. Для сравнения отметим, что уже при $N \geq 10^3$ ни в одном из экспериментов алгоритм SRS не мог найти минимум хотя бы той же глубины, что и средняя глубина минимумов $\bar{\gamma}_{z=0.7} \approx 1.29$, находимых с помощью ММ алгоритма. Это легко понять, поскольку для алгоритма SRS вероятность отыскать минимум с глубиной $\gamma > \bar{\gamma}_{z=0.7}$ можно оценить с помощью (19) в виде:

$$\Pr_{SRS}(\gamma \geq \bar{\gamma}_{z=0.7}) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi N}} e^{-0.023N} \quad (20)$$

что при $N \geq 10^3$ дает значение $\Pr_{SRS} < 10^{-12}$. Фактически это означает, что при $N > 10^3$ алгоритм ММ по скорости отыскания достаточно глубоких минимумов ($\gamma > 0.96\gamma_0$) более чем на 12 порядков превосходит стандартный алгоритм SRS.

В таблице 2 приведены значения параметров, описывающих спектральное распределение (19), для 3-х типов матриц: 2D EA, 3D EA и SK, а также приведены асимптотические формулы для глубины глобального минимума γ_0 , средней глубины $\bar{\gamma}$ и полуширины спектра σ находимых минимумов при больших N .

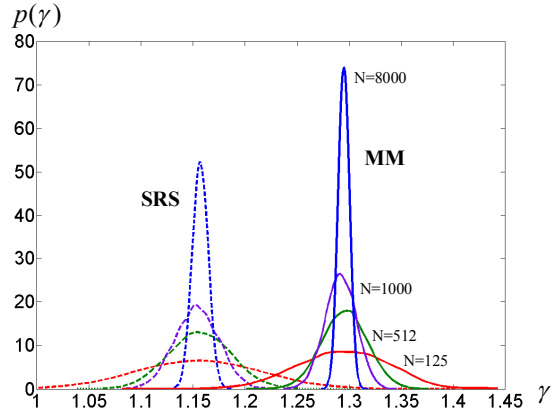


Рис. 6. Плотности распределения минимумов, полученных алгоритмом SRS ($z = 0$) – штриховые линии, и с помощью ММ алгоритма ($z = 0.7$) – сплошные линии. Результаты для 3D EA модели размерности $N = L^3$ для $L = 5, 8, 10, 20$. По оси абсцисс отложена величина $\gamma \equiv |E|\sqrt{N}$, поскольку при такой нормировке энергии положение пиков не зависит от размерности.

4.5. Сравнение с алгоритмами для задачи MAXCUT

Известной особенностью NP-полных задач является их сводимость друг к другу за полиномиальное по N число шагов. В качестве одного из примеров такого сведения мы приведём здесь взаимосвязь рассмотренной нами задачи квадратичной бинарной оптимизации и задачи о максимальном разрезе графа (MAX-CUT). Суть задачи о максимальном разрезе в следующем: для заданного взвешенного неориентированного графа $G(V, W)$ требуется найти такое разбиение его вершин V на два непересекающихся подмножества V_1 и V_2 , чтобы сумма весов ребёр соединяющих вершины из разных подмножеств была максимальна, т.е. $\max_{V_1, V_2} \sum_{u \in V_1} \sum_{v \in V_2} w_{uv}$.

Вводя переменные $s_i = +1$ для вершин находящихся в первом подмножестве и $s_j = -1$ для вершин во втором подмножестве, получим

$$\sum_{u \in V_1} \sum_{v \in V_2} w_{uv} = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_{ij} (1 - s_i s_j),$$

где N – число вершин в графе. Как видим, максимизация этого функционала сводится к минимизации функционала (1), построенного на матрице $T_{ij} = -w_{ij}/4$.

Таблица 2.
Сводная таблица результатов

Модель 2D EA					
		SRS ($z = 0$)		MM ($z = 0.7$)	
N	γ_0	$\bar{\gamma}$	σ	$\bar{\gamma}$	σ
10x10	1.316 ± 0.031	1.099 ± 0.023	0.058	1.234 ± 0.028	0.037
12x12	1.319 ± 0.025	1.096 ± 0.021	0.049	1.234 ± 0.022	0.033
14x14	1.313 ± 0.023	1.098 ± 0.017	0.041	1.230 ± 0.019	0.026
16x16	1.313 ± 0.021	1.098 ± 0.013	0.035	1.229 ± 0.018	0.023
22x22	1.314 ± 0.009	1.098 ± 0.010	0.026	1.227 ± 0.009	0.017
32x32	1.314 ± 0.009	1.099 ± 0.008	0.018	1.229 ± 0.007	0.012
$N \rightarrow \infty$	$1.31 \pm 0.3 / \sqrt{N}$	$1.09 \pm 0.2 / \sqrt{N}$	$0.57 / \sqrt{N}$	$1.23 \pm 0.2 / \sqrt{N}$	$0.37 / \sqrt{N}$
Модель 3D EA					
		SRS ($z = 0$)		MM ($z = 0.7$)	
N	γ_0	$\bar{\gamma}$	σ	$\bar{\gamma}$	σ
5x5x5	1.376 ± 0.028	1.155 ± 0.015	0.059	1.294 ± 0.023	0.039
8x8x8	1.388 ± 0.012	1.157 ± 0.009	0.029	1.296 ± 0.010	0.020
10x10x10	1.387 ± 0.005	1.154 ± 0.006	0.021	1.292 ± 0.006	0.014
20x20x20	нет данных	1.157 ± 0.002	0.007	1.295 ± 0.002	0.005
$N \rightarrow \infty$	$1.38 \pm 0.3 / \sqrt{N}$	$1.15 \pm 0.2 / \sqrt{N}$	$0.65 / \sqrt{N}$	$1.29 \pm 0.2 / \sqrt{N}$	$0.44 / \sqrt{N}$
Модель SK					
		SRS ($z = 0$)		MM ($z = 0.7$)	
N	γ_0	$\bar{\gamma}$	σ	$\bar{\gamma}$	σ
100	1.472 ± 0.038	1.325 ± 0.025	0.072	1.413 ± 0.041	0.043
200	1.496 ± 0.024	1.347 ± 0.014	0.055	1.436 ± 0.026	0.035
500	1.510 ± 0.012	1.368 ± 0.006	0.036	1.448 ± 0.010	0.023
$N \rightarrow \infty$	$1.51 \pm 0.3 / \sqrt{N}$	$1.36 \pm 0.2 / \sqrt{N}$	$0.76 / \sqrt{N}$	$1.44 \pm 0.3 / \sqrt{N}$	$0.47 / \sqrt{N}$

Нам было интересно сравнить эффективность нашего алгоритма MM с алгоритмами, наиболее хорошо зарекомендовавшими себя для решения задачи MAX-CUT [27]. В частности, это алгоритмы: Scatter Search [28] и CirCut [29]. В [27] выложены наборы задач MAX-CUT и результаты для этих алгоритмов, протестированных на данных наборах на компьютере примерно той же вычислительной мощности что и наш (процессор Intel 3.06 GHz).

Сравнение результатов показано в Таблице 3. В первом столбце показаны названия матриц. Это матрицы того же сорта, что и матрицы 3D EA с периодическими (тороидальными) граничными условиями. Первые две задачи с гауссовыми связями T_{ij} , следующие две со связями $T_{ij} = \pm 1$. Размерность задач $N = L \times L \times L$ при $L = 15$ и 8. Второй и третий

столбцы показывают результаты (значение разреза и время в секундах), приведенные в [27] для алгоритмов Scatter Search и CirCut. В последнем столбце показаны усреднённые значения наилучших разрезов, найденные нашим алгоритмом за 10^4 стартов.

Как видно из таблицы, наш алгоритм находит решение, сравнимое с одним из алгоритмов (CirCut или SS) и не более чем на 3% хуже другого, при том что CirCut и SS затрачивают в 20-100 раз больше времени. Наилучший результат оказался для 4-ой задачи, где наш алгоритм также нашёл в некоторых запусках решение 454, соответствующее лучшему из SS и CirCut. Более того, при увеличении числа стартов, удалось найти решение с величиной разреза 456, которое не было до сих пор получено другими алгоритмами.

Таблица 3.

Сравнительная таблица по решению 4-х примеров задач MAXCUT.

Problem	Scatter Search		CirCut		Mix-Matrix $z=0.7, 10^4$ стартов	
	Obj Val	time	Obj Val	time	Obj Val	time
tours3-15	281 029 888	1023	268 519 648	788	$(2.73 \pm 0.004) \cdot 10^8$	8.8
tours3-8	40 314 704	65	41 684 814	53	$(4.10 \pm 0.010) \cdot 10^7$	2.3
tours3-15-50	2 964	333	2 895	427	$2\,889.7 \pm 4.6$	8.9
tours3-8-50	442	48	454	38	451.9 ± 1.3	2.2

5. Обсуждение и заключение

В работе показано, что использование микс-матрицы приводит к трансформации энергетической поверхности, в результате которой глубокие минимумы становятся существенно глубже, а мелкие – становятся еще мельче или вовсе исчезают. В результате такой трансформации радиус области притяжения у любого глубокого минимума возрастает пропорционально его глубине. Как следствие, экспоненциально по N возрастает вероятность отыскания этого минимума. На этой основе предложен новый двухэтапный алгоритм случайного поиска ММ, который по эффективности и скорости отыскания глобального минимума значительно (экспоненциально по N) превышает качество работы стандартного алгоритма случайного поиска.

Следует отметить, что углубление минимума – это вероятностный процесс. Как следует из (14) с ростом параметра смещения z флуктуации величины E_{z0}/E_0 увеличиваются (см. рис. 2). Это означает, что для какой-то доли исследуемых матриц трансформация приведет к негативному результату – минимум станет мельче и вероятность его отыскания резко уменьшится. Действительно, такой эффект наблюдался в работе [30], где трансформация поверхности осуществлялась путем возведения исходной матрицы в степень $k = 2, 3, 4, 5$ (функционал (13) строился на матрице $M = T^k$). Предложенный в [30] алгоритм, несмотря на отличные усредненные характеристики, в случае матриц небольшой размерности ($N \sim 100$) демонстрировал отсутствие стабильности при поиске глобального минимума: для 30% матриц вероятность отыскания глобального минимума снижалась до нуля из-за исчезновения на трансформированном функционале минимума вблизи S_0 . Предложенный здесь алгоритм ММ свободен от таких недостатков по двум причинам. Во-первых, уменьшение параметра z до значения $z_{opt} \sim 0.5 - 0.7$ приводит к уменьшению флуктуации величины E_{z0}/E_0 и, следовательно, вероятность негативного результата экспоненциально по N уменьшается (напомним, что дисперсия величины E_{z0}/E_0 спадает как $1/N$). Во-вторых, сдвиг

минимума в пространстве при $z = z_{opt}$ в несколько раз меньше, чем при $z = 1$, что также положительно сказывается на стабильности и качестве работы алгоритма. Более того, при $z = z_{opt}$ алгоритм демонстрирует не только высокую стабильность, но и самые высокие свои показатели.

Стандартный алгоритм локальной оптимизации SRS приводит к минимумам, отличающимся по энергии от глобального минимума на 10% для полностью связанных матриц (SK) и на 17% для разреженных матриц типа матриц модели Изинга (2D и 3D EA). В то же время предложенный нами алгоритм ММ, модифицирующий энергетическую поверхность функционала с помощью микс-матрицы, приводит к нахождению минимумов, отличающихся по энергии от глобального минимума лишь на 4% для полностью связанных матриц и на 6.5-7% для разреженных матриц (табл. 2).

Существенным аргументом в пользу алгоритма ММ является то, что с ростом размерности задачи средняя энергия находимых минимумов не меняется, а происходит лишь сужение дисперсии распределения находимых минимумов (см. рис. 6). Это означает, что наш алгоритм даёт гарантированный выигрыш по энергии на 6.6% для полностью связанных матриц и на 12% для разреженных матриц по сравнению с SRS. При этом время работы увеличивается менее чем в два раза, поскольку состоит из двух последовательных шагов, на каждом из которых выполняется локальный поиск (не считая затрат на возведение матрицы в квадрат, которое нужно произвести один раз вначале). Отличительной чертой алгоритма ММ является его простота.

Mix-Matrix алгоритм может быть напрямую применён к задаче MAXCUT (см. п. 4.5) и показывает высокую конкурентоспособность по сравнению с другими известными алгоритмами для этой задачи. Сравнение с алгоритмами CirCut и Scatter Search показал, что алгоритм ММ даже за 10000 стартов (2с времени для задач с $N = 8^3$ и 8с для задач с $N = 15^3$) показывает результаты, сравнимые с одним из этих алгоритмов и не более чем на 3% хуже результата другого алгоритма, при том что CirCut и Scatter Search тратят на порядки большее время (см. табл. 3).

Ещё раз отметим, что ядром нашего алгоритма является не модификация локального алгоритма

поиска, а трансформация энергетической поверхности функционала. Это означает, что алгоритм ММ можно значительно улучшить, заменив используемую здесь асинхронную динамику модели Хопфилда на более эффективную.

Работа поддержана грантом РФФИ № 12-07-00295 и проектом 2.1 ОНИТ РАН.

Приложение

I. Следуя [31] вычленим из матрицы T слагаемое T_0 , ответственное за образование минимума S_0 . Для этого представим T в виде:

$$T = T_0 + T_1, \quad (21)$$

где

$$T_0 = r_0 \sigma_T S_0^+ S_0, \quad T_1 = T - T_0 \quad (22)$$

Вес r_0 может быть найден из условия отсутствия корреляции между элементами матриц T_0 и T_1 . Рассчитав ковариацию матричных элементов и положив ее равной нулю, для величины r_0 получим:

$$r_0 = -E_0 \quad (23)$$

Дисперсии элементов матриц T_0 и T_1 имеют вид $\sigma_0^2 = r_0^2 \sigma_T^2$ и $\sigma_1^2 = \sigma_T^2 - \sigma_0^2$, подтверждающий, что случайную матрицу T удалось представить как сумму двух независимых случайных матриц T_0 и T_1 . Кроме того, из (21)-(23) вытекает выражение $S_0 T_1 S_0^+ = 0$, показывающее, что вклад в энергию E_0 от T_1 строго равен нулю, т.е. минимум в S_0 обусловлен исключительно вкладом от T_0 . Для простоты в дальнейшем будем полагать $\sigma_T = 1$ и опускать из выражений.

II. Пользуясь соотношениями (21)-(23), выпишем выражение для локального поля, действующего на i -ый спин в конфигурации S_n из n -окрестности S_0 :

$$h_i(S_n) = (N - 2n) |E_0| s_i^{(0)} + \sum_{j \neq i} T_{ij} s_j \quad (24)$$

В силу случайности матрицы T_1 , сумма в (24) может рассматриваться как нормально распределенная величина с нулевым средним и дисперсией равной N . С учетом этого, несложно получить выражение для вероятности $\Pr\{h_i(S_n) s_i^{(0)} > 0\}$, из которого заменой $|E_0| \sqrt{N}$ на γ получаем формулу (4).

III. Для расчета фигурирующей в (17)-(18) вероятности $P = \Pr\{s_i^{(0)} h_i^{(z)} < 0 | h_i s_i^{(0)} > 0\}$ запишем микс-матрицу в виде:

$$M = (1 - z)(T_0 + T_1) + \frac{z}{\sqrt{N}} (T_0^2 + T_0 T_1 + T_1 T_0 + T_1^2), \quad (25)$$

Тогда величины $\lambda_i = h_i s_i^{(0)} / \sqrt{N}$ и $\lambda_i^{(z)} = h_i^{(z)} s_i^{(0)} / \sqrt{N}$ можно представить в виде:

$$\lambda_i = \gamma + \xi_i \quad (26)$$

$$\lambda_i^{(z)} = (1 - z)\lambda_i + z(\gamma\lambda_i + \eta_i)\sqrt{q/(q-1)} \quad (27)$$

где

$$\xi_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j \neq i} (T_1)_{ij} s_i^{(0)} s_j^{(0)} \quad (28)$$

$$\eta_i = \frac{1}{N} \sum_{j \neq i} (T_1^2)_{ij} s_i^{(0)} s_j^{(0)} \quad (29)$$

- нормально распределенные величины со средними $\bar{\xi} = 0$ и $\bar{\eta} = \sigma_\lambda^2 - 1$ и стандартными отклонениями $\sigma_\xi = \sigma_\lambda$ и $\sigma_\eta = \sigma_\lambda^2$, соответственно. С учётом этого получим:

$$\Pr\{\lambda_i^{(z)} < 0 | \lambda_i > 0\} = \frac{1}{\Phi(\gamma/\sigma_\lambda)} \int_0^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}\sigma_\lambda} e^{-\frac{(x-\gamma)^2}{2\sigma_\lambda^2}} \int_{-\infty}^{-\alpha x} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}\sigma_\eta} e^{-\frac{(y-\eta)^2}{2\sigma_\eta^2}} \quad (30)$$

где $\alpha = \left[(1-z)\sqrt{(q-1)/q} + z\gamma \right] / z$. Отсюда заменой переменных интегрирования получаем выражение (18).

Литература

1. Y.M. Karandashev, B.V. Kryzhanovsky. Binary optimization: efficient increasing of global minimum basin of attraction. Optical Memory & Neural Networks (Information Optics), v. 19, no. 2, 2010, pp. 110-125.
2. F. Liers, M. Junger, G. Reinelt, and G. Rinaldi. Computing Exact Ground States of Hard Ising Spin Glass Problems by Branch-and-Cut. Published in: New Optimization Algorithms in Physics. Wiley 2004, pp. 47-68.
3. M.X. Goemans and D.P. Williamson. 878-approximation Algorithms for MAXCUT and MAX2SAT. ACM Symposium on Theory of Computing (STOC) (1994).
4. M. Bellare, O. Goldreich and M. Sudan. Free Bits, PCPs and Non-approximability. Towards Tight on Foundations of Computer Science, IEEE Computer Society, 1995, pp. 422-431.
5. F. Rendl, G. Rinaldi, and A. Wiegele. Solving Max-Cut to Optimality by Intersecting Semidefinite and Polyhedral Relaxations. Math. Programming, v. 121, no. 2, 2010, p. 307.
6. Wiegele A: Nonlinear Optimization Techniques Applied to Combinatorial Optimization Problems. Dissertation, Oktober 2006, i-x, pp. 1-131.
7. J.J. Hopfield. Neural Networks and physical systems with emergent collective computational abilities. // Proc.Nat.Acad.Sci.USA. vol.79, 1982, pp.2554-2558.
8. J.J. Hopfield, D.W. Tank. Neural computation of decisions in optimization problems. // Biological Cybernetics, vol.52,1985, pp.141-152; J.J.Hopfield, D.W.Tank. Computing with neural circuits: A Model. Science, vol. 233, 1986, pp.625-633.
9. Y. Fu, P.W. Anderson. Application of statistical mechanics to NP-complete problems in combinatorial optimization. J. of Physics A, v.19, 1986, pp.1605-1620.
10. T. Poggio, F. Girosi. Regularization algorithms for learning that are equivalent to multilayer networks. // Science 247, 1990, pp.978-982.
11. S. Mulder and D. Wunsch II. A Million City Traveling Salesman Problem Solution by Divide and Conquer Clustering and Adaptive Resonance Neural Networks. // Neural Networks vol.16, No.5-6, 2003, pp.827-832.
12. F. Wu and P.K.S. Tam. A neural network methodology of quadratic optimization. // International Journal of Neural Systems, vol. 9, No. 2, 1999, pp.87-93.

13. G. Pinkas, R. Dechter. Improving Connectionist Energy Minimization. // *Journal of Artificial Intelligence Research*, vol.3 (1995), 1995, pp.23-48.
14. B.V. Kryzhanovskii, B.M. Magomedov, A.L. Mikaelyan. A Relation Between the Depth of a Local Minimum and the Probability of Its Detection in the Generalized Hopfield Model. *Doklady Mathematics*, vol.72, N3, 2005, pp. 986-990.
15. B. Kryzhanovsky, B. Magomedov. Application of domain neural network to optimization tasks. // *Lecture Notes in Computer Science ICANN'2005*. LNCS 3697, Part II, 2005, pp.397-403.
16. New Optimization Algorithms in Physics. A.K. Hartmann and H. Rieger (Eds.), Wiley-VCH, Berlin (2004)
17. W. Duch, J. Korczak. Optimization and global minimization methods suitable for neural networks. KMK UMK Technical Report 1/99; *Neural Computing Surveys* (1998). <http://www.is.umk.pl/~duch/cv/papall.html>
18. A.K. Hartmann, H. Rieger. *Optimization Algorithms in Physics*. Wiley-VCH, Berlin (2001).
19. L.B. Litinskii. Eigenvalue problem approach to discrete minimization. // W.Duch et al. (Eds.): *ICANN 2005*, LNCS 3697, 2005, pp. 405-410.
20. K.A. Smith. *Neural Networks for Combinatorial Optimization: A Review of More Than a Decade of Research*. // *INFORMS Journal on Computing* v.11 (1), 1999, pp.15-34.
21. G. Joya, M. Atencia and F. Sandoval. Hopfield Neural Networks for Optimization: Study of the Different Dynamics.// *Neurocomputing*, v.43(1-4), 2002, pp. 219-237.
22. L.B. Litinskii, B.M. Magomedov. Global Minimization of a Quadratic Functional: Neural Networks Approach.// *Pattern Recognition and Image Analysis* v. 15(1), 2005, pp. 80-82.
23. S. Boettcher. Extremal Optimization for Sherrington-Kirkpatrick Spin Glasses. // *Eur. Phys. Journal B*. 46, 2005, pp. 501.
24. B.V. Kryzhanovsky, B.M. Magomedov, A.B. Fonarev. On the Probability of Finding Local Minima in Optimization Problems. // *Proc. of Int. Joint Conf. on Neural Networks IJCNN-06*, 2006, pp.5888-5892.
25. B.V. Kryzhanovsky, V.M. Kryzhanovsky. The shape of a local minimum and the probability of its detection in random search. *Lecture Notes in Electrical Engineering*. Filipe, Joaquim; Ferrier, Jean-Louis; Andrade-Cetto, Juan (Eds.) Vol. 24, 2009, pp.51-61.
26. J. Houdayer, O.C. Martin. Hierarchical approach for computing spin glass ground states. *Phys.Rev E*, V. 64, 056704 (2001)
27. <http://www.opticom.es/maxcut>
28. R. Marti, A. Duarte, M. Laguna. Advanced Scatter Search for the Max-Cut Problem. *INFORMS Journal on Computing* v.01, n.21, 2009, pp. 26-38.
29. S. Burer, R.D.C. Monteiro, Y. Zhang. Rank-Two Relaxation Heuristics for Max-Cut and Other Binary Quadratic Programs. *SIAM Journal on Optimization*, v.12, 2000, pp.503-521.
30. I. Karandashev, B. Kryzhanovsky. Increasing the attraction area of the global minimum in the binary optimization problem. *Journal of Global Optimization*. DOI: 10.1007/s10898-012-9947-7 (2012)
31. B.V. Kryzhanovsky. Expansion of a matrix in terms of external products of configuration vectors. *Opt. Mem. & Neural Networks*, v. 17, No. 1, 2008, pp. 62-68.

Matrix Transformation Method in Quadratic Binary Optimization

I. M. Karandashev, B. V. Kryzhanovsky

Abstract. The paper deals with the binary minimization of a quadratic functional. A new algorithm using matrix transformation is proposed to cope with the problem. The matrix that gave birth to the functional is replaced by a new mix-matrix. This change of the objective function brings about a sharp increase in the minimization algorithm efficiency: the chances to find a global minimum grow as $\exp(\alpha N)$ where N is the dimensionality of the problem, and the energy spectrum of minima being found shifts considerably to the deep side so that the average of the spectrum differs from the energy of the global minimum by only 4-6% (subject to the type of matrix).

Модель Хопфилда с мультипликативной матрицей связи и порогами

Л.Б. Литинский¹, М.Ю. Мальсагов¹

¹ - кандидат физико-математических наук

Для нейронных сетей типа модели Хопфилда в качестве памяти сети обычно рассматривают ее основное состояние – множество конфигурационных векторов, доставляющих глобальный минимум энергетическому функционалу. Для сети с мультипликативной матрицей связи и специальными значениями порогов можно аналитически описать зависимость основного состояния от свободных параметров задачи. Удастся конструировать сети с многократно вырожденным основным состоянием: память такой сети может на порядок превосходить размерность задачи. Обсуждаются возможности и ограничения метода.

1. Введение

Рассмотрим нейронную сеть Хопфилдова типа с мультипликативной матрицей связи $M_{ij} = (1 - \delta_{ij})u_i u_j$, $i, j = 1, \dots, p$. Здесь δ_{ij} – символ Кронекера, p – размерность пространства, действительные числа u_i являются координатами нормированного вектора $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_p)$: $\|\mathbf{u}\|^2 = p$. Единственной неподвижной точкой такой сети является конфигурация, бинарные координаты которой получаются обрезанием по знаку координат вектора $\mathbf{u}$:

$\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_p)$ – неподвижная точка $\Leftrightarrow s_i \equiv \text{sgn}(u_i)$.

Множество неподвижных точек кардинально изменится, если для той же матрицы связи определить динамику с ненулевыми порогами T_i , причем пороги взять пропорциональными величинам u_i :

$$\begin{cases} J_{ij} = f(x)M_{ij}, & T_i = g(x)u_i, \\ s_i(\tau + 1) = \text{sgn}\left(\sum_{j=1}^p J_{ij}s_j(\tau) + T_i\right). \end{cases} \quad (1)$$

Коэффициенты пропорциональности $f(x)$ и $g(x)$ являются функциями внешнего параметра x и сами выступают в роли свободных параметров модели, а $s_i(\tau)$ есть i -я координата конфигурационного вектора $\mathbf{s}(\tau)$ в момент времени τ . Оказывается, можно исчерпывающим образом описать основное состояние такой сети – набор конфигураций, доставляющих глобальный минимум энергетическому функционалу (термин заимствован из физики). Заметим, что именно основное состояние обычно рассматривают в качестве памяти сети: так обстоит дело и для Хейббовской матрицы, и для проекционной матрицы связи [1]. Таким образом, варьируя значения внешних параметров в данной модели можно в значительной степени управлять памятью сети.

Для модели (1) удастся аналитически описать зависимость основного состояния от внешних параметров f, g, x и $\mathbf{u}$. Кратко полученные результаты состоят в следующем. При фиксированном векторе $\mathbf{u}$ все множество 2^p конфигураций $\mathbf{s}$

распадается на наборы конфигураций, равноудаленных от вектора $\mathbf{u}$. Будем называть такие наборы конфигураций *эквидистантными классами*. Оказывается, только эквидистантный класс целиком может быть основным состоянием сети: при определенных условиях все конфигурации из какого-то эквидистантного класса (и только они) доставляют энергетическому функционалу глобальный минимум. Вектором $\mathbf{u}$ определяется состав и число эквидистантных классов. Условия, при которых тот или иной класс является основным состоянием, определяются величинами $f(x)$ и $g(x)$.

Сильной стороной данного подхода является то, что специально подбирая вектор $\mathbf{u}$ можно сделать основное состояние многократно вырожденным. Основное состояние будет при этом состоять из очень большого числа конфигураций – полиномиально большого по размерности задачи. Иными словами, можно создавать сети с очень большой памятью. Слабой стороной метода является то, что не удастся сделать основным состоянием *произвольный* набор конфигураций. Основное состояние не может состоять из совершенно случайных конфигураций, поскольку все конфигурации из эквидистантного класса являются равноудаленными от вектора $\mathbf{u}$. В этом и состоит главное ограничение нашего подхода. В конце статьи обсуждаются возможные пути его преодоления.

В следующем разделе излагаются основные полученные результаты и их краткое обоснование. Кроме того, рассматривается один конкретный пример. В заключительном разделе анализируются возможности и ограничения метода, а также его перспективы.

2. Главные результаты

Для сети (1) энергия состояния $\mathbf{s}$ дается выражением

$$\begin{aligned} E(\mathbf{s}) &\sim -\left(\sum_{i,j=1}^p J_{ij}s_i s_j + 2\sum_{i=1}^p T_i s_i\right) = \\ &= -\left(f(x)(\mathbf{u}, \mathbf{s})^2 + 2g(x)(\mathbf{u}, \mathbf{s})\right). \end{aligned}$$

Через $(\mathbf{u}, \mathbf{s})$ обозначено скалярное произведение p -мерных нормированных векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{s}$: $(\mathbf{u}, \mathbf{s}) = \sum_{i=1}^p u_i s_i$. В дальнейшем будет удобнее искать не минимумы энергии $E(\mathbf{s})$, а максимумы обратной величины $F(\mathbf{s}) = -E(\mathbf{s})$:

$$F(\mathbf{s}) = f(x)(\mathbf{u}, \mathbf{s})^2 + 2g(x)(\mathbf{u}, \mathbf{s}) \rightarrow \max. \quad (2)$$

1) Классы Σ_k . Функционал $F(\mathbf{s})$ принимает одно и то же значение на всех конфигурациях, скалярное произведение которых с вектором $\mathbf{u}$ одинаково см. (2). Введем косинус угла между векторами $\mathbf{s}$ и $\mathbf{u}$:

$$\cos w = (\mathbf{s}, \mathbf{u}) / p.$$

Когда $\mathbf{s}$ пробегает 2^p возможных конфигураций, $\cos w$ совсем необязательно принимает 2^p различных значений. Пронумеруем различные значения косинуса в порядке их убывания, начав нумерацию с 0:

$$\cos w_0 > \cos w_1 > \dots > 0 > \dots > \cos w_{t-1} > \cos w_t. \quad (3)$$

Число различных значений косинуса $t+1$ не превосходит 2^p . Обозначим через Σ_k класс конфигураций, косинус угла которых с вектором $\mathbf{u}$ равен $\cos w_k$:

$$\Sigma_k = \{\mathbf{s} : (\mathbf{s}, \mathbf{u}) = p \cdot \cos w_k\}, \quad k = 0, 1, \dots, t. \quad (4)$$

Ясно, что все конфигурации из класса Σ_k удалены от вектора $\mathbf{u}$ на одно и то же расстояние, и что не существует других конфигураций, удаленных от $\mathbf{u}$ на то же самое расстояние.

Таким образом, при любом значении x функционал $F(\mathbf{s})$ (2) принимает $t+1$ значений, и для отыскания основного состояния необходимо отыскать наибольшую среди $t+1$ величин

$$F_k \sim f(x) \cos^2 w_k + 2 \frac{g(x)}{p} \cos w_k, \quad k = 0, 1, \dots, t. \quad (5)$$

Число классов Σ_k и их состав определяются исключительно вектором $\mathbf{u}$, а значения величин F_k при фиксированных f, g и x определяются косинусами $\cos w_k$, которые пропорциональны $(\mathbf{s}, \mathbf{u})$. Мы ограничимся рассмотрением векторов $\mathbf{u}$ только с неотрицательными координатами, поскольку результаты для случая, когда некоторые u_i отрицательны, автоматически получаются из результатов для вектора $\mathbf{u}$ с $u_i \geq 0$ (см. ниже). До конца статьи будем считать, что u_i неотрицательны и упорядочены по возрастанию:

$$0 \leq u_1 \leq u_2 \leq \dots \leq u_p.$$

Легко сообразить, что последовательность косинусов (3) обладает зеркальной симметрией относительно своей середины:

$$\cos w_k = -\cos w_{t-k}, \quad \Sigma_k = -\Sigma_{t-k}, \quad \forall k \leq t.$$

Если число различных классов четно ($t+1 = 2l$), значения косинусов сначала убывают до своего наименьшего положительного значения $\cos w_{l-1}$, а затем косинусы становятся отрицательными:

$$\begin{aligned} \cos w_0 &> \cos w_1 > \dots > \cos w_{l-1} > 0 > \cos w_l = \\ &= -\cos w_{l-1} > \dots > \cos w_{t-1} = \\ &= -\cos w_1 > \cos w_t = -\cos w_0. \end{aligned}$$

Ни один из косинусов этой последовательности не равен 0. Напротив, для четного $t = 2l$ один из косинусов (3) равен 0, а последовательность имеет вид:

$$\begin{aligned} \cos w_0 &> \dots > \cos w_{l-1} > \cos w_l = 0 > \cos w_{l+1} = \\ &= -\cos w_{l-1} > \dots > \cos w_t = -\cos w_0; \end{aligned}$$

в этом случае конфигурации из «среднего» класса Σ_l ортогональны вектору $\mathbf{u}$.

Для примера построим несколько первых классов Σ_k , когда для координат вектора $\mathbf{u}$ справедливы соотношения: $0 < u_1 < u_2 = u_3 < u_4 < \dots < u_p$, причем $2u_2 < u_4$. Класс Σ_0 состоит из конфигураций, ближайших к вектору $\mathbf{u}$ - следовательно, $\Sigma_0 = \{\mathbf{e}\}$, где $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)$; соответствующий косинус равен: $\cos w_0 = \sum_{i=1}^p u_i / p$. Класс Σ_1 состоит из конфигураций, удаленных от вектора $\mathbf{u}$ чуть дальше, чем конфигурации из класса Σ_0 . В наших условиях это дает: $\Sigma_1 = \{(-1, 1, \dots, 1)\}$, а $\cos w_1 = \cos w_0 - 2u_1 / p$. Следующий класс состоит из двух конфигураций: $\Sigma_2 = \{(1, -1, 1, \dots, 1), (1, 1, -1, \dots, 1)\}$, причем $\cos w_2 = \cos w_0 - 2u_2 / p$. Класс Σ_3 также состоит из двух конфигураций: $\Sigma_3 = \{(-1, -1, 1, \dots, 1), (-1, 1, -1, \dots, 1)\}$, и $\cos w_3 = \cos w_0 - 2(u_1 + u_2) / p$. Класс Σ_4 состоит из одной конфигурации: $\Sigma_4 = \{(1, -1, -1, 1, \dots, 1)\}$, $\cos w_4 = \cos w_0 - 4u_2 / p$, равно как и следующий класс $\Sigma_5 = \{(1, 1, 1, -1, \dots, 1)\}$, $\cos w_5 = \cos w_0 - 2u_4 / p$ - и так далее. Чтобы распределить все конфигурации по классам Σ_k и установить число $t+1$ различных классов, необходимо расположить в порядке возрастания все 2^p возможных сумм $\sum_{i=1}^p \varepsilon_i u_i$, где коэффициенты ε_i равны либо 0, либо 1. Эта задача эквивалентна известной комбинаторной проблеме number partitioning problem [2]. Для целей настоящей статьи нет необходимости заниматься решением этой задачи в общем случае.

Другой пример. Нетрудно описать распределение конфигураций по эквидистантным классам, когда в качестве вектора $\mathbf{u}$ выступает конфигурация $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)$: $\mathbf{u} = \mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)$. Легко сообразить, что в этом случае косинусы принимают $p+1$ различных значений:

$$\cos w_k = 1 - 2k/p, \quad k = 0, 1, \dots, p, \quad (6)$$

а k -й класс состоит из тех конфигураций, у которых ровно k координат отрицательны. Введем для таких классов специальное обозначение:

$$\Sigma_k^{(e)} = \left\{ \mathbf{s} : (\mathbf{s}, \mathbf{e}) = \sum_{i=1}^p s_i = p - 2k \right\}, \quad k = 0, 1, \dots, p. \quad (7)$$

Число конфигураций в классе $\Sigma_k^{(e)}$ равно C_p^k , а число различных классов равно $p+1$.

В дальнейшем в качестве вектора $\mathbf{u}$ нередко будет использоваться тот или иной конфигурационный вектор σ . (Конфигурация σ общего вида отличается от $\mathbf{e}$ тем, что некоторые ее координаты σ_i отрицательны.) Опираясь на классы $\Sigma_k^{(e)}$ легко пояснить, как устроены эквидистантные классы $\Sigma_k^{(\sigma)}$. Класс $\Sigma_k^{(\sigma)}$ получается из класса $\Sigma_k^{(e)}$ (7) по координатным перемножением всех конфигураций класса $\Sigma_k^{(e)}$ с конфигурацией σ :

$$\Sigma_k^{(\sigma)} = \{\tilde{s} : \tilde{s}_i = s_i \sigma_i, \text{ где } s \in \Sigma_k^{(e)}\}, k = 0, 1, \dots, p.$$

Ясно, что и число различных значений косинусов, и сами их значения, определяются выражениями (6).

2) Функции $f(x), g(x)$. Обсудим теперь роль функций $f(x)$ и $g(x)$. Совокупность величин $\{F_k(x)\}_0^t$ (5) представляет собой семейство функций от x . Та функция $F_l(x)$, которая при данном значении x превосходит все остальные функции, определяет основное состояние Σ_l :

если для данного x выполняется $F_l(x) > F_k(x) \forall k \neq l$, то Σ_l - основное состояние.

Пусть в точке x_0 функция $F_l(x)$ превосходит остальные функции: $F_l(x_0) > F_k(x_0) \forall k$. Если $f(x)$ и $g(x)$ непрерывны, то в общем случае при небольшом изменении x функция $F_l(x)$ будет по-прежнему превосходить все остальные функции. Иными словами, класс Σ_l будет оставаться основным состоянием и в небольшой окрестности точки x_0 . По мере дальнейшего изменения x функция $F_l(x)$ практически неизбежно пересечется с другой функцией – скажем, с $F_n(x)$. После пересечения именно $F_n(x)$ станет превосходить все остальные функции. В точке пересечения $F_l(x)$ и $F_n(x)$ основное состояние скачком «перепрыгнет» из класса Σ_l в класс Σ_n : произойдет перестройка основного состояния $\Sigma_l \rightarrow \Sigma_n$. Конечно, точки перестройки основного состояния определяются конкретным видом функций $f(x), g(x)$ и косинусами (3). Однако кое что о том, как именно происходят перестройки основного состояния, можно вывести из самых общих соображений.

Преобразуем формулы (5), вынеся за скобки $f(x)$ и дополнив выражение в скобках до полного квадрата. С точностью до несущественных слагаемых получаем:

$$F_k \sim f(x) [\cos w_k - \gamma(x)]^2, k = 0, 1, \dots, t, \quad (8)$$

$$\text{где } \gamma(x) = -\frac{g(x)}{p \cdot f(x)}.$$

Для начала рассмотрим случай положительных значений $f(x)$: $f(x) > 0$. В этом случае для отыскания наибольшего F_k необходимо максимизировать по k модуль выражение в квадратных скобках:

$$\max_k |\cos w_k - \gamma(x)|. \quad (9)$$

Если $\gamma(x)$ отрицательно, то максимум модуля (9) обеспечивается наибольшим значением косинуса и, следовательно, решением задачи (9) будет $k = 0$. Основным состоянием при этом будет класс Σ_0 . Напротив, если $\gamma(x)$ положительно, то максимум модуля (9) обеспечивается наименьшим значением косинуса. В этом случае решением задачи (9) будет $k = t$, а основным состоянием будет класс $\Sigma_t = -\Sigma_0$. Итак, при положительных значениях $f(x)$ основным состоянием сети является либо класс Σ_0 (если $g(x)$ больше нуля), либо класс Σ_t (если $g(x)$ отрицательно).

Теперь проанализируем случай отрицательных значений $f(x)$: $f(x) < 0$. В этом случае для отыскания наибольшего F_k необходимо минимизировать по k модуль выражения в квадратных скобках в (8). Вообще говоря, сделать это нетрудно: необходимо просто определить тот $\cos w_k$, который является ближайшим к текущему значению функции $\gamma(x)$ из (8). Соответствующий класс Σ_k будет основным состоянием сети. Проиллюстрируем сказанное с помощью рисунка 1.

На рис. 1 по оси ординат отложены условные значения $\cos w_k$ для $k = l-1, l$ и $l+1$. Монотонно убывающая кривая изображает схематический график функции $\gamma(x)$. Через c_k обозначена полусумма двух последовательных значений косинуса:

$$c_k = \frac{\cos w_{k-1} + \cos w_k}{2}, k = 1, 2, \dots, t. \quad (10)$$

Значение переменной x , при котором $\gamma(x)$ равно c_k , обозначено через x_k :

$$\gamma(x_k) = c_k \Leftrightarrow x_k = \gamma^{-1}(c_k). \quad (11)$$

Пусть в начальный момент переменная x принадлежит интервалу (x_l, x_{l+1}) : $x_l < x < x_{l+1}$. Для любого значения x из этого интервала именно $\cos w_l$ является ближайшим к $\gamma(x)$. Таким образом, решением задачи (9) будет $k = l$, а основным состоянием сети будет класс Σ_l . Это верно для всех значений x из интервала (x_l, x_{l+1}) . По мере возрастания (убывания) переменной x ее значение рано или поздно перевалит через точку x_{l+1} (x_{l-1}); основное состояние при этом перескочит в класс Σ_{l+1} (Σ_{l-1}) - и так далее.

Мы видим, что при $f(x) < 0$ и непрерывной функции $\gamma(x)$ перестройки основного состояния сопровождаются изменением номера основного состояния на 1: $\Sigma_k \rightarrow \Sigma_{k \pm 1}$. Имеется своего рода «непрерывность» в зависимости номера основного состояния от изменения параметра x . Критические значения переменной x , в которых происходят перестройки основного состояния, вычисляются по формулам (10)-(11).

Можно организовать «разрывное» управление перескоками основного состояния $\Sigma_k \rightarrow \Sigma_l$, чтобы номера классов k и l различались больше чем на 1. Для этого надо использовать либо разрывную функцию $g(x)$, либо тот факт, что когда значение $f(x)$ становится положительным, основное состояние из любого класса Σ_k прыгает либо в класс Σ_0 , либо в класс Σ_l .

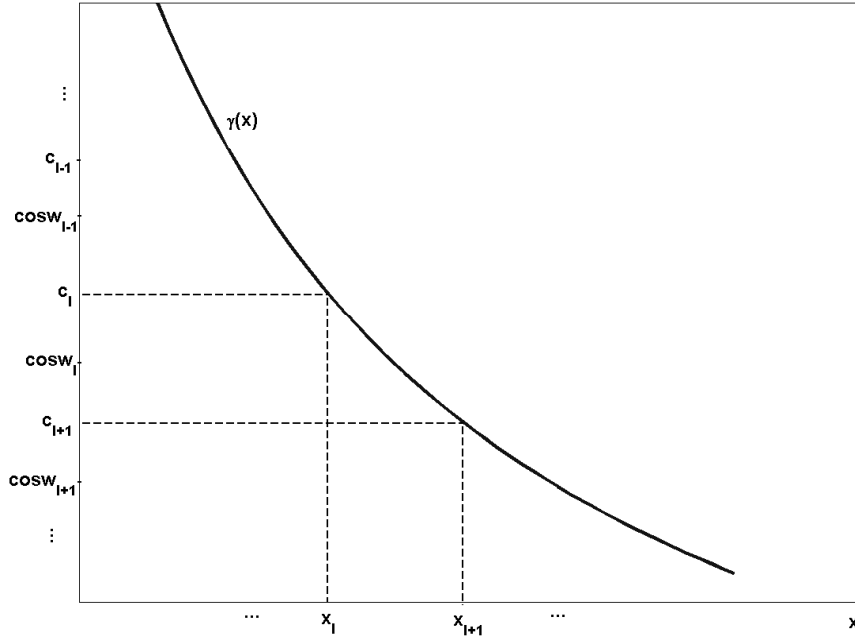


Рис. 1. Графический метод решения задачи (9) – см. текст статьи.

3) Пример. Чтобы придать этим рассуждениям более конкретный вид, рассмотрим функции $f(x)$ и $g(x)$ специального вида: $f(x) = 1 - 2x$, $g(x) = q(1 - x)$, $q \geq 1$. В работе [3] изучалась модель, которая в точности описывается нашей схемой именно с такими функциями $f(x)$ и $g(x)$. В этом случае $F_k(x)$, $k = 0, \dots, t$ (5) принимают вид:

$$F_k(x) = (q + p \cos w_k)^2 - 2xqp \cos w_k (q + p \cos w_k).$$

Конкурирующие друг с другом функции $F_k(x)$ представляют собой семейство прямых линий, структуру которого нетрудно изучить. В результате получаем следующее утверждение [3].

Теорема. Когда x неограниченно возрастает от начального значения 0, основное состояние сети последовательно совпадает с классами Σ_k (4):

$$\Sigma_0 \rightarrow \Sigma_1 \rightarrow \Sigma_2 \rightarrow \dots \rightarrow \Sigma_{k_{\max}}.$$

Перестройка $\Sigma_{k-1} \rightarrow \Sigma_k$ происходит в критической точке

$$x_k = \frac{q/p + (\cos w_{k-1} + \cos w_k)/2}{q/p + \cos w_{k-1} + \cos w_k}, \quad k = 1, 2, \dots, k_{\max},$$

и пока $x \in (x_k, x_{k+1})$ основным состоянием сети является класс Σ_k . Номер $k_{\max}$ последней перестройки основного состояния определяется требованием положительности знаменателя $q/p + \cos w_{k-1} + \cos w_k$: как только знаменатель станет отрицательным, перестройки прекратятся. Если $q/p > 2$, то произойдут все возможные

перестройки основного состояния: $k_{\max} = t$. Если в качестве вектора $\mathbf{u}$ выступает конфигурационный вектор σ , то других неподвижных точек, отличных от основного состояния, у сети не будет.

Обратим внимание на то, что в формулировке Теоремы состав классов Σ_k никак не конкретизирован: классы состоят из конфигураций, равноудаленных от данного вектора $\mathbf{u}$. После того, как вектор $\mathbf{u}$ задан и классы Σ_k определены, изменение параметра x сопровождается перескоками основного состояния из одного эквидистантного класса в другой. Можно показать, что независимо от вектора $\mathbf{u}$ самая первая перестройка основного состояния $\Sigma_0 \rightarrow \Sigma_1$ происходит после $1/2$: $x_1 > 1/2$. Кроме того, $k_{\max}$ всегда не меньше, чем $p/2$, а $x_{k_{\max}} > 1$. Множитель q позволяет здесь регулировать общее число перестроек основного состояния.

3. Обсуждение и выводы

Результаты, полученные в предыдущем разделе, позволяют в значительной степени управлять основным состоянием сети. Рассмотрим p -мерный гиперкуб с длиной ребра 2 и центром, помещенным в

начало координат. Конфигурации $\mathbf{s}$ совпадают с вершинами этого гиперкуба. Направим вектор $\mathbf{u}$ вдоль одного из симметричных направлений гиперкуба. Для каждого такого $\mathbf{u}$ 2^p конфигураций $\mathbf{s}$ распределятся по симметричным «пучкам», объединяющим равноудаленные от вектора $\mathbf{u}$ конфигурации. Каждый такой пучок является одним из классов Σ_k , и с помощью описанного выше приема может быть сделан основным состоянием сети (1). В частности, можно создавать сети, основное состояние которых состоит из очень большого числа конфигураций; например, число конфигураций в классе $\Sigma_k^{(e)}$ (7) равно C_p^k .

Некоторые координаты вектора $\mathbf{u}$ могут равняться 0. Пусть, например, $u_1 = 0$. Тогда к одному классу вместе с конфигурацией $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_p)$ будет принадлежать и конфигурация $\mathbf{s}' = (-s_1, s_2, \dots, s_p)$. Иными словами, наличие у вектора $\mathbf{u}$ нулевой координаты приводит к удвоению числа конфигураций в каждом классе Σ_k . На этот случай заключительное утверждение Теоремы обобщается: если *ненулевые координаты* вектора $\mathbf{u}$ одинаковы, то основным состоянием исчерпывается множество неподвижных точек сети.

Полная классификация возникающих здесь возможностей пока не получена. Необходимо перебрать все симметричные направления $\mathbf{u}$ в гиперкубе, и в каждом случае упорядочить вершины по расстоянию до вектора $\mathbf{u}$. Здесь могут оказаться полезными методы теории групп [4].

Слабой стороной данного подхода является то, что конфигурации, объединенные в основное состояние, не могут быть произвольными. По построению они находятся на одинаковом расстоянии от вектора $\mathbf{u}$, и, следовательно, расположены симметрично относительно этого вектора. Мы надеемся, что с помощью следующих приемов можно будет избавиться от тотальной «эквидистантности» основного состояния.

Во-первых, можно ввести в конструкцию не один вектор $\mathbf{u}$, а несколько векторов. Пусть, например, имеется вектор $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_p)$, $\|\mathbf{v}\|^2 = p$, и, подобно (1), рассмотрим нейронную сеть:

$$\begin{cases} J_{ij} = f(x)((1 - \delta_{ij})(u_i u_j + v_i v_j)), & T_i = g(x)(u_i + v_i), \\ s_i(\tau + 1) = \text{sgn}\left(\sum_{j=1}^p J_{ij} s_j(\tau) + T_i\right). \end{cases} \quad (12)$$

Если векторы $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ являются конфигурациями, то оказывается, что пока x меньше первой точки перестройки x_1 , основным состоянием будут сами исходные конфигурации $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$. Если же $x > x_1$, основным состоянием будет набор конфигураций, равноудаленных как от $\mathbf{u}$, так и от $\mathbf{v}$. Других неподвижных точек у сети (12) не будет. Эти результаты подтверждены компьютерным экспериментом и вызывают осторожный оптимизм.

Во-вторых, можно «развязать» в выражении (1) пороги T_i и числа u_i , с помощью которых строится мультипликативная матрица M_{ij} . Воспользуемся введенным выше вектором $\mathbf{v}$ и рассмотрим нейронную сеть

$$\begin{cases} J_{ij} = f(x)(1 - \delta_{ij})u_i u_j, & T_i = g(x)v_i, \\ s_i(\tau + 1) = \text{sgn}\left(\sum_{j=1}^p J_{ij} s_j(\tau) + T_i\right). \end{cases}$$

Предварительные рассмотрения показывают, что ее основное состояние образовано конфигурациями из классов Σ_k , ближайшими к разности векторов $\mathbf{u} - \mathbf{v}$. Иными словами, этот прием позволяет уйти от тотальной симметричности основного состояния. Эти результаты требуют проверки и дальнейших исследований.

Работа выполнялась при поддержке грантами РФФИ 12-07-00259 и 13-01-00504.

Литература

1. J. Hertz, A. Krogh, R. Palmer. Introduction to the Theory of Neural Computation. Massachusetts: Addison-Wesley, 1991.
2. S. Mertens, A Physicist's Approach to Number Partitioning. // *Theoret. Comput. Sci.* – 265, 2001. P. 79-108.
3. L.B. Litinskii High-symmetry Hopfield-type neural networks. *Theoretical and Mathematical Physics*, – 118. 1999. P. 107-127,
4. M.W. Davis. The geometry and topology of Coxeter groups. Princeton: Princeton University Press, 2007.

A Hopfield-type neural network with multiplicative connection matrix using thresholds

L.B. Litinsky, M.Yu. Malsagov

Abstract. The memory of Hopfield-type neural nets is understood as the ground state of the net – a set of configurations providing a global energy minimum. The use of thresholds allows good control over the ground state. It is possible to build networks with the degeneracy of the ground state exceeding considerably the dimensionality of the problem (that is, the net memory can be much greater than the dimensionality of the problem). The paper considers the potentials and limitations of the approach.

Использование метода нейронного газа для моделирования поискового поведения агентов

В.Г. Редько¹, Т.И. Шарипова²

1- доктор физико-математических наук, 2- аспирант

Представлены результаты по моделированию поведения автономного агента, система управления которого основана на использовании метода растущего нейронного газа. Приведены результаты моделирования поведения агента в одномерном и двумерном лабиринтах.

1. Введение

В работе [1] исследовалось поведение модельного организма (агента), имеющего потребности питания, безопасности, накопления знаний. При этом использовался метод растущего во времени нейронного газа. Суть этого метода состоит в следующем.

Имеется сеть связанных между собой нейронов, узлов сети. Каждый нейрон-узел запоминает определенную сенсорную информацию S_i (вектор памяти нейрона), где i – номер нейрона. Нейроны имеют веса, модифицируемые путем обучения. Нейронная сеть управляет поведением агента. Текущая сенсорная информация на входе системы управления агента $S(t)$ сравнивается со всеми векторами памяти нейронов S_i , и ищется k -й нейрон, для которого расстояние между $S(t)$ и S_k минимально (t – дискретное время). Если для этого нейрона расстояние между $S(t)$ и S_k меньше определенного порога, то вектор S_k немного приближается к вектору $S(t)$ и k -й нейрон становится активным. Если это расстояние больше порога, то создается новый нейрон-узел, который в своей памяти запоминает текущую сенсорную информацию $S(t)$.

Связи между нейронами сети формируются при переходе между нейронами. Например, когда создается новый нейрон, то формируется связь между нейроном, который был активен в предыдущий такт времени, и новым нейроном.

Если сенсорная информация определяет положение агента в пространстве, то несложно организовать перемещение агента в соответствии с запомненной сенсорной информацией. В этом случае предварительно происходит блуждание агента по пространству. При этом веса нейронов формируются методом обучения с подкреплением [2]. Чем более благоприятно место организма в пространстве, тем больше вес нейрона, вектор S_i которого определяет данную точку в пространстве. После предварительного блуждания по пространству формируется нейронная сеть со связями между нейронами. Движение агента может управляться такой нейронной сетью следующим образом. Каждый такт времени агент находится в точке пространства, соответствующей вектору S_i активного нейрона. Далее анализируются все связи

этого нейрона, и выбирается нейрон, который связан с данным активным нейроном и имеет наибольший вес среди таких нейронов. Затем происходит переход от данного нейрона к выбранному нейрону с большим весом. При этом агент перемещается в пространстве в точку с координатами, соответствующими новому выбранному нейрону. Новый нейрон становится активным.

В настоящей работе строится и анализируется модель поведения агента, использующая метод растущего нейронного газа. В отличие от работы [1], в которой исследовалось довольно сложное поведение агентов с рядом потребностей и мотиваций, настоящая модель уделяет особое внимание на анализе специфики блуждания агента в одномерном и двумерном пространстве. Также особое внимание уделяется процессам формирования растущего нейронного газа при таком блуждании.

2. Модель динамики агента

2.1. Одномерный случай

Строим модель динамики агента, считая, что агент должен решать две основные задачи: 1) изучение пространства, в котором находится агент, 2) поиск источника пищи.

При этом используем метод отжига [3] следующим образом. В начальные моменты времени t агент преимущественно совершает случайное блуждание, при этом формируется сеть нейронного газа. В дальнейшем вероятность случайного блуждания постепенно уменьшается, и при достаточно больших временах t происходит четко определенное (детерминированное) движение в пространстве в соответствии с весами нейронов.

Основные предположения одномерной модели состоят в следующем:

1. Рассматривается агент, который может двигаться в одномерном пространстве x .
2. Имеется коридор длиной L с источником питания. Задача агента – исследование коридора и поиск источника пищи.
3. Источник пищи имеет небольшой размер d .
4. Агент имеет ресурс $R(t)$, который увеличивается при нахождении источника пищи.

5. Агент функционирует в дискретном времени t . Каждый такт времени агент совершает движение, при этом его координата x изменяется на некоторую величину $\Delta x(t)$.

6. Когда координата агента совпадает с источником пищи, ресурс агента за один такт времени увеличивается на величину Δr .

7. Агент имеет свою систему управления, на сенсорный вход которой поступает координата агента $x(t)$.

8. Система управления агента задается растущей нейронной сетью. На вход активного нейрона подается текущая координата агента $x(t)$.

9. Каждый нейрон имеет память, он запоминает определенную координату x_i , в данном случае вектор памяти S_i имеет одну компоненту, равную x_i .

10. Имеется два режима динамики агента: 1) режим случайного движения и 2) режим детерминированного перемещения, перемещения в соответствии весами узлов-нейронов нейронного газа.

11. Каждый такт времени выбирается первый или второй режим. Причем вероятность выбора первого режима, т.е. режима случайного поиска в начале функционирования агента близка к 1, а дальнейшем эта вероятность постепенно уменьшается и происходит переход к детерминированному движению в соответствии с весами нейронов. Таким образом, реализуется метод отжига: при малых временах t агент движется случайно, при больших временах – детерминировано.

12. В режиме случайного поиска после перемещения агента его координата становится равной $x(t)$. Определяется нейрон, в памяти которого хранится координата x_k , наиболее близкая к $x(t)$. Если расстояние $|x_k - x(t)|$ меньше порога Th , то величина x_k в памяти нейрона немного сдвигается, приближаясь к $x(t)$. Если $|x_k - x(t)| > Th$, то формируется новый нейрон, в памяти которого записывается текущая координата $x(t)$.

13. При появлении нового нейрона формируется связь от предыдущего активного нейрона к новому. За счет случайного поиска формируется достаточно большая нейронная сеть, так что в дальнейшем в режиме детерминированного перемещения будут осуществляться переходы между нейронами, которые связаны между собой.

14. В режиме детерминированного перемещения определяются веса всех «контактных» нейронов, которые связаны с текущим активным, и среди этих контактных нейронов находится предпочтительный, имеющий наибольший вес. Этот нейрон становится активным в следующий такт времени. Координата агента становится равной координате, хранящейся в памяти предпочтительного нейрона.

15. При переходе от нейрона к нейрону в обоих режимах производится обучение. При обучении меняются веса нейронов методом обучения с подкреплением [2], а именно меняется вес того нейрона, который был активным в момент $t-1$:

$$\Delta W_{t-1} = \alpha [r_{t-1} + \gamma W_t - W_{t-1}], \quad (1)$$

где W_{t-1} и W_t – веса нейронов, активных в моменты времени $t-1$ и t , α – скорость обучения, γ – дисконтный фактор, r_{t-1} – величина подкрепления, полученного в момент времени $t-1$. $r_{t-1} = \Delta r$, если в момент $t-1$ координата агента совпадает с источником пищи, либо $r_{t-1} = 0$ в противном случае.

Использовались следующие параметры моделирования: длина коридора $L = 100$, центр источника пищи расположен посередине коридора при $x = 50$, размер источника пищи $d = 10$, увеличение ресурса агента от источника пищи $\Delta r = 1$, порог сравнения координат x_k и $x(t)$ равен $Th = 1$, скорость обучения $\alpha = 0.1$, дисконтный фактор $\gamma = 0.9$, характерное время уменьшения вероятности выбора режима случайного поиска равно 1000 тактов времени, характерное перемещение агента при случайном поиске равно 10.

Результаты моделирования для одномерного случая представлены на рис. 1-4. Рис. 1 показывает зависимость координаты агента от времени. Видно, что сначала агент совершает случайные движения. При больших временах t агент приближается к источнику пищи, а в конце расчета практически остается на месте возле источника. Естественно, что ресурс агента, пополняемый при его питании, с течением времени возрастает (рис. 2).

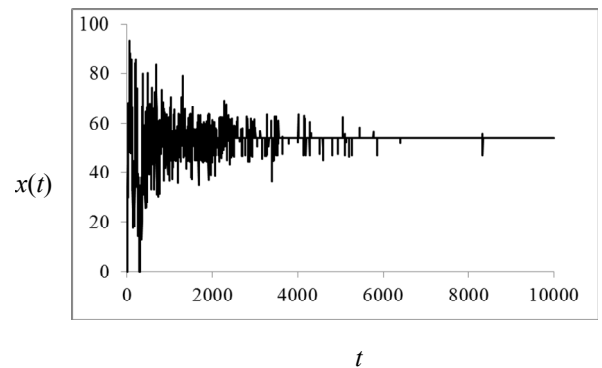


Рис. 1. Зависимость координаты агента от времени

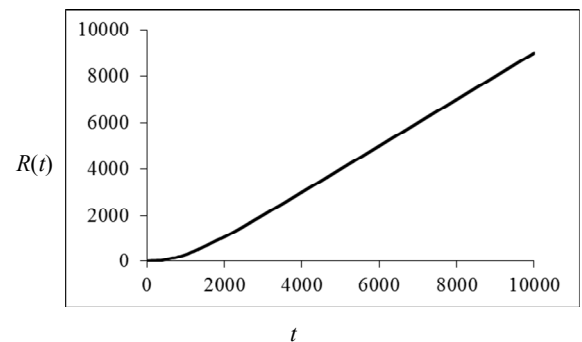


Рис. 2. Зависимость ресурса агента от времени

Динамика веса W_t текущего нейрона, активного в момент времени t , показана на рис. 3.

Зависимость весов нейронов W_i от координаты нейрона x_i после обучения, т.е. в конце расчета, показана на рис. 4. Чем дальше x_i находится от источника пищи, тем меньше вес соответствующего нейрона.

Представленные результаты показывают, что построенная модель обеспечивает нетривиальный вариант режима обучения с подкреплением, который обеспечивает рост весов подходящих нейронов и самостоятельное нахождение источника пищи агентом.

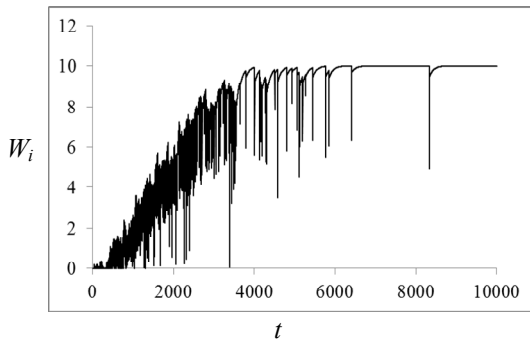


Рис. 3. Вес активного нейрона в зависимости от времени

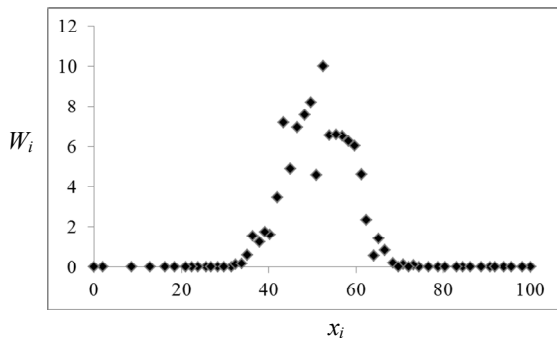


Рис. 4. Зависимость веса нейрона W_i от его координаты x_i для обученного агента

2.2. Двумерный случай

Для этого случая рассматривалось поведение агента, аналогичное изложенному выше. Новые аспекты модели состоят в следующем.

1. Рассматривается агент, который может двигаться в двумерном пространстве x, y .

2. Имеется лабиринт с источником питания. Используемый при моделировании лабиринт показан на рис. 5. Лабиринт состоит из нескольких прямоугольных участков, «комнат». Агент движется внутри лабиринта. Задача агента – исследование лабиринта и поиск источника пищи.

3. Источник пищи имеет зону действия – подобласть двумерного лабиринта.

4. Агент имеет ресурс, который увеличивается при нахождении источника пищи.

5. Агент функционирует в дискретном времени t . Каждый такт времени агент совершает движение, при этом его координаты x, y изменяются на некоторые величины $\Delta x(t), \Delta y(t)$ соответственно.

6. Когда координата агента совпадает с зоной действия источника пищи, ресурс агента за один такт времени увеличивается на величину Δr .

7. Агент имеет свою систему управления, на сенсорный вход которой поступает координаты агента $x(t), y(t)$.

8. Система управления агента задается растущей нейронной сетью. На вход активного нейрона подается текущие координаты агента $x(t), y(t)$.

9. Каждый нейрон имеет память, он запоминает определенные координаты x_i, y_i в данном случае вектор памяти S_i имеет шесть компонент: четыре расстояния до стенок лабиринта, находящихся спереди, сзади, слева и справа от агента, а также координаты агента x_i, y_i .

10. Имеется два режима динамики агента: 1) режим случайного движения и 2) режим детерминированного перемещения, перемещения в соответствии весами узлов-нейронов нейронного газа.

11. Каждый такт времени выбирается первый или второй режим. Причем вероятность выбора первого режима, т.е. режима случайного поиска в начале функционирования агента близка к 1, а дальнейшем эта вероятность постепенно уменьшается и происходит переход к детерминированному движению в соответствии с весами нейронов. Таким образом, реализуется метод отжига: при малых временах t агент движется случайно, при больших временах – детерминировано.

12. В режиме случайного поиска после перемещения агента его координаты становятся равными $x(t), y(t)$. Определяются параметры комнаты (длина, ширина), в которой находится агент. Если параметры комнаты изменились, то формируется новый нейрон, в памяти которого записываются расстояния до стенок лабиринта и координаты.

13. При появлении нового нейрона формируется связь от предыдущего активного нейрона к новому.

14. В режиме детерминированного перемещения определяются веса всех «контактных» нейронов, которые связаны с текущим активным, и среди этих контактных нейронов находится предпочтительный, имеющий наибольший вес. Этот нейрон становится активным в следующий такт времени. Координата агента становится равной координате, хранящейся в памяти предпочтительного нейрона.

Использовались следующие основные параметры моделирования: увеличение ресурса агента от источника пищи $\Delta r = 1$, характерное время уменьшения вероятности выбора режима случайного поиска равно 1000 тактов времени.

Результаты моделирования динамики агента для двумерного случая представлены на рис. 5.

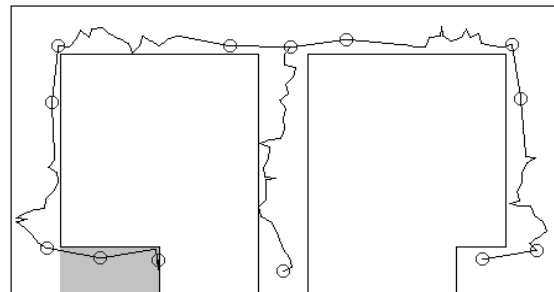


Рис. 5. Движение агента по двумерному лабиринту. Траектория движения агента показана изломанной линией, точки, характеризующие сильное изменение окружающей обстановки отмечены кружками, источник пищи показан серым фоном.

Анализ полученных результатов показал, что агент успешно анализирует лабиринт и находит источник

пищи, после этого ресурс агента растет. Кроме того, показана возможность резкого сокращения размеров нейронной сети, в которой достаточно запоминать только те точки пространства, в которых сильно меняется окружающая ситуация (в данном случае это соответствует сильному изменению размеров комнаты).

3. Заключение

Таким образом, построена модель поведения агента, система управления которого формируется на основе метода растущего нейронного газа. Разработан метод обучения с подкреплением для растущей нейронной сети; проанализирован этот метод для одномерного и двумерного случая. Для двумерного случая построен вариант модели растущего нейронного газа, в котором радикально сокращается число узлов-нейронов за счет того, в нейронах запоминаются не все точки, в которых побывал агент,

а только те, в которых радикально меняется окружающая среда.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 13-01-00399.

Литература

1. M.V. Butz, E. Shirinov, K. Reif Self-organizing sensorimotor maps plus internal motivations yield animal-like behavior // *Adaptive Behavior*. – V. 18. No. 3-4. 2010. P. 315-337.
2. Р.С. Саттон, Э.Г. Барто Обучение с подкреплением. М.: Бином, 2011.
3. S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt, M.P. Vecchi Optimization by simulated annealing // *Science*. – V. 220. No. 459. 1983. P. 671–680.

Usage of method neural gas for modeling searching behavior of agents

V.G. Red'ko, T.I. Sharipova

Abstract. The current work describes results of modeling of behavior of the autonomous agent. The control system of the agent is based on the method of growing neuron gas. Computer simulations model the behavior of agent in one-dimensional and two-dimensional labyrinths.

Поиск ближайшего соседа в хемминговом пространстве высокой размерности иерархическим нейро-классификатором

В.М. Крыжановский¹, М.Ю. Мальсагов¹

1 – кандидат физико-математических наук

В работе представлен алгоритм, являющийся расширением бинарного дерева поиска на случай, когда входной вектор содержит искажения. Узлами дерева являются персептроны. Отличительной особенностью алгоритма является итеративный поиск решения и наличие критерия останова.

1. Введение

Задача идентификации образа широко известна и имеет большое практическое приложение. Сформулировать ее можно следующим образом. Запишем в некоторую систему M образов размерности N . Затем на вход системы подается один из этих образов (искаженный или нет). Система должна сказать нам, какой из записанных в нее образов соответствует входному вектору (либо наиболее близок к нему). В зависимости от требований пользователя от системы можно потребовать выдавать различные ответы: найти все образы одинаково близкие к входному вектору; найти один из наиболее близких; найти один из образов, расположенных в некоторой окрестности от входного вектора и т.д. Каждая из этих подзадач является расширением области решений другой.

Эти задачи могут быть осложнены еще и тем, что функция близости пользователю не известна. В этом случае приходится в процессе обучения по примерам неявно ее найти. В настоящей работе предлагается алгоритм, имеющий древовидную структуру – иерархический классификатор (ИК). Различные архитектуры ИК исследовались в работах [1-3]. Эти работы объединяет отсутствие функции близости и их направленность на повышение вероятности распознавания. Мы же рассматриваем случай, когда близость векторов измеряется Хемминговым расстоянием, а при построении алгоритма во главе угла было поставлено достижение максимального быстродействия алгоритма в ущерб возрастающим требованиям к оперативной памяти необходимой для хранения синаптических коэффициентов. Еще одним существенным отличием нашего подхода является итеративность процесса распознавания, позволяющего приблизиться к «абсолютной» надежности (при некоторых значениях свободных параметров вероятность ошибки алгоритма настолько мала, что ее не удается экспериментально измерить).

Этот алгоритм представляется нами впервые, поэтому работа построена таким образом, чтобы максимально полно и доступно изложить идею алгоритма. В конце статьи можно будет найти небольшое количество экспериментальных

результатов, характеризующих алгоритм. В приложении приведено описание персептрона [4], используемого в узлах дерева.

2. Постановка задачи

Предлагаемый в данной работе алгоритм решает следующую задачу. Имеется M бинарных паттернов размерности N :

$$\mathbf{X}_\mu \in R^N, x_{\mu i} \in \{\pm 1\}, \mu \in \overline{1, M}. \quad (1)$$

На вход системы подается некоторый бинарный вектор $\mathbf{X}$. Необходимо найти первый попавшийся (любой) эталонный вектор $\mathbf{X}_\mu$, принадлежащий заданной окрестности входного вектора $\mathbf{X}$. Это условие математически выражается следующим образом:

$$\forall \mathbf{X}_\mu : \mathbf{X} \mathbf{X}_\mu \geq (1 - 2b_{\max})N. \quad (2)$$

Здесь $b_{\max} \in [0; 0.5)$ – наперед заданная константа, которая определяет размер этой окрестности.

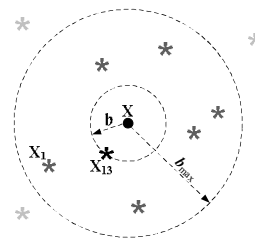


Рис. 1. Постановка задачи

На рисунке 1 изображено графическое представление рассматриваемой задачи. Звездочками обозначено относительное расположение паттернов. Точки, лежащие в пределах внешней окружности, удовлетворяют условию (2). Например, паттерн $\mathbf{X}_1$ может быть признан решением поставленной задачи, не смотря на то, что он наиболее удален от $\mathbf{X}$.

Как будет показано ниже, предлагаемый алгоритм статистически решает более сложную задачу. А именно, нахождение наиболее близкого к входному вектору паттерна:

$$\mathbf{X}_k : \mathbf{X}\mathbf{X}_k = \max_{\mu} \{ \mathbf{X}\mathbf{X}_{\mu} \}. \quad (3)$$

Близость векторов определяется Хемминговым расстоянием. Решению этой задачи на рисунке 1 соответствует паттерн $\mathbf{X}_{13}$.

В настоящей статье рассматривается случай, когда в качестве эталонных векторов принимаются сгенерированные случайным образом биполярные векторы. Компоненты эталонов генерируются независимо друг от друга, принимают значения +1 и -1 с равной вероятностью (плотное кодирование). Это, в будущем (не в настоящей статье), даст возможность получать аналитические оценки характеристик алгоритма, таких как вычислительная сложность, помехоустойчивость и т.п.

3. Идея алгоритма

Суть алгоритма заключается в последовательном сужении области поиска (Рис.2). Сначала все множество паттернов разбивается на два непересекающихся подмножества. Из этих подмножеств выбирается то, в котором предположительно содержится входной вектор. Затем это подмножество делится еще на два непересекающихся подмножества и снова выбирается одно, которому может принадлежать входной вектор. Эта процедура продолжается пока в каждом подмножестве не останется по одному паттерну. Тогда входной вектор ассоциируется с одним из оставшихся паттернов.

Разбиение пространства на подмножества и поиск множества, содержащего конкретный вектор, легко и быстро выполняет простой персептрон с решающим правилом – «победитель получает все». На рис. 2 за каждый сектор/область отвечает персептрон, обученный на паттернах соответствующего подмножества. Их можно объединить в древовидную структуру. Корнем дерева является персептрон, обученный на всем множестве паттернов. Каждый из

выходов корневого персептрона указывает на узел дерева следующего уровня. Персептрон этого узла-потомка обучен на подмножестве паттернов, которые соответствовали одному выходу корневого персептрона. Спуск по какой-либо ветке этого дерева приводит к одному из паттернов, который и будет считаться ответом. На каждом этапе спуска по дереву выбирается та ветка, которой соответствует выход персептрона с максимальным сигналом. Важно отметить, что на каждый узел подается один и тот же входной вектор $\mathbf{X}$, а не результат работы персептрона с предыдущего узла.

4. Обучение

При исследовании алгоритма использовались случайные паттерны. Все паттерны можно считать равнозначными, и каким образом разбивать их на подмножества не имеет особого значения. При обучении дерева деление множества паттернов всегда происходило на две равные части.

Процесс обучения и распознавания персептрона в узле подробно описан в приложении. Каждый персептрон в узле дерева содержит N входных нейронов и 2 выходных нейрона.

Алгоритм обучения всего дерева состоит из последовательного обучения персептронов, образующих узлы дерева. Он сводится к следующему рекуррентному алгоритму:

1. Персептрон обучается на некотором текущем подмножестве паттернов $\|A\| = m \leq M$.
2. Множество A делится на два непересекающихся подмножества A_L и A_R :

$$\begin{aligned} A_L \cap A_R &= \emptyset, A_L \cup A_R = A, \\ \|A_L\| &= \|A_R\| = \|A\|/2 \end{aligned} \quad (4)$$

3. Если $\|A_L\| = 2$ ($\|A_R\| = 2$), то выход из текущей итерации.
4. Рекуррентно повторяем этот алгоритм для

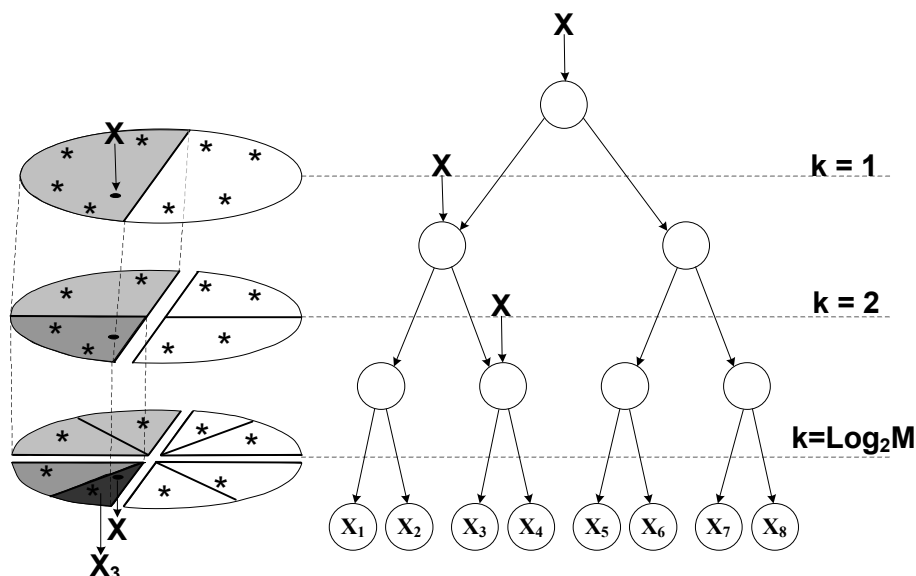


Рис. 2. Идея алгоритма

подмножества A_L (шаги 1 – 5).

5. Рекуррентно повторяем этот алгоритм для подмножества A_R (шаги 1 – 5).

Итак, согласно описанному выше алгоритму построения дерева корневой персептрон обучен на всех M паттернах. Потомки корневого узла обучаются на $M/2$ паттернов каждый. Узлы на i -ом уровне обучаются на $M/2^{i-1}$ паттернах, $i = 1, 2, \dots, k$, $k = \log_2 M$ – число уровней в дереве.

Сразу можно оценить число операций при обучении всего дерева. Чтобы обучить персептроны на одном уровне дерева необходимо проделать $2MN$ операций. Тогда, общее число операций при обучении дерева составит

$$\Theta = 2MN \log_2 M. \quad (5)$$

5. Алгоритм поиска

Прежде чем приступить к описанию алгоритма поиска, стоит ввести несколько понятий, которые используются в алгоритме.

Пул проигравших. Когда на персептрон подается входной вектор $\mathbf{X}$, то на выходах формируется сигнал некоторой величины. Выход с максимальным сигналом считается победителем, все остальные – проигравшие. В пуле проигравших, соответственно, сохраняются величина сигнала проигравшего выхода, а так же координаты узла, связанного с этим выходом.

Пул ответов. После того, как алгоритм приходит к какому-либо решению (лепесток дерева), в пуле ответов сохраняются номер паттерна, на который содержится в лепестке, и величина сигнала на выходе персептрона, соответствующего этому решению. Таким образом, каждому паттерну соответствует свой лепесток в дереве.

Критерий остановки поиска. Если алгоритм дошел до лепестка дерева, и величина сигнала превысила некоторое пороговое значение, то поиск останавливается. То есть должно выполняться условие (2).

Координаты узла – это уникальный идентификатор, позволяющий однозначно определить узел дерева.

Спуск по дереву – последовательный переход от узла к узлу до тех пор, пока не будет достигнут лепесток. Алгоритм перехода таков:

1. Входные нейроны персептрона, соответствующего текущему узлу дерева, инициализируются входным вектором $\mathbf{X}$. Вычисляются величины сигналов на выходах персептрона h_L и h_R .
2. Определяем выход с максимальным по модулю сигналом и узел-потомок связанный с этим выходом – потомок-победитель. Модуль величины сигнала проигравшего выхода и координаты соответствующего узла-потомка помещаются в пул проигравших.
3. Если дошли до лепестка дерева, то переходим к шагу 5, иначе – шаг 4.
4. Для потомка-победителя повторяется этот алгоритм (шаги 1 – 4).

5. Результат помещается в пул ответов. На этом алгоритм спуска останавливается.

Теперь можно сформулировать наш алгоритм. В ходе его работы многократно выполняется спуск по различным веткам дерева до тех пор, пока не будет выполнен критерий останова. Поэтапно алгоритм можно представить следующим образом:

1. Выполняется *спуск по дереву* со стартового узла до лепестка (первый спуск начинается с корневого узла). В ходе спуска заполняется *пул проигравших* и *пул ответов*.
2. Для лепестка проверяем критерий останова (2), т.е. превышает ли заданный порог модуль скалярного произведения входного вектора $\mathbf{X}$ на паттерн, соответствующий лепестку. Если условие критерия выполнено, то переход к шагу 4. В противном случае переход к шагу 3.
3. Если условие критерия не выполнено, то в пуле проигравших находим узел с максимальным по модулю сигналом и повторяем шаги 1 – 3, выбрав этот узел в качестве стартового.
4. В пуле ответов находим паттерн с максимальным по модулю сигналом – это решение алгоритма.

6. Пример работы алгоритма

Рассмотрим на примере работу алгоритма. На рисунке 3 изображена пошаговая работа алгоритма для дерева, построенного на восьми паттернах ($M = 8$). Шаг 1: на корень дерева (узел 0) подается входной вектор $\mathbf{X}$. На выходах корневого персептрона формируются сигналы h_L и h_R . Пусть $|h_L| > |h_R|$, тогда в *пул проигравших* помещается величина h_R и координаты узла-потомка, связанного с правым выходом (узел 2). Шаг 2: входной вектор $\mathbf{X}$ подается на узел-победитель (узел 1). Вновь определяется победитель, а проигравший помещается в пул (например, h_{LL} и узел 3). Шаг 3: дойдя до лепестков дерева, в *пул ответов* помещаются паттерны ($\mathbf{X}_3$ и $\mathbf{X}_4$), соответствующие лепесткам, и величины сигналов $h_{LRL} \equiv \mathbf{X}\mathbf{X}_3$ и $h_{LRR} \equiv \mathbf{X}\mathbf{X}_4$. Затем проверяется, удовлетворяют ли полученные паттерны условию критерия (2). В настоящем примере критерий (2) не был выполнен, поэтому алгоритм продолжает работу. Шаг 4: если ни один паттерн не подошел, то в пуле проигравших выбирается узел с наибольшим по модулю сигналом (например, узел 2 с сигналом h_R). Шаг 5: с этого узла (узел 2) повторяется спуск по дереву до лепестков, а пул проигравших пополняется новыми элементами. При этом пара $(h_R; 2)$ удаляется из пула проигравших. Здесь $|h_{RL}| < |h_{RLR}|$ и $(1 - 2b_{\max})N < |h_{RLR}|$, т.е. для паттерна $\mathbf{X}_6$ выполняется критерий (2), следовательно, паттерн $\mathbf{X}_6$ признается решением и алгоритм останавливается. Если в ходе работы алгоритма критерий не сработает ни разу, то в качестве ответа системы будет признан паттерн из пула ответов с наибольшим по модулю сигналом.

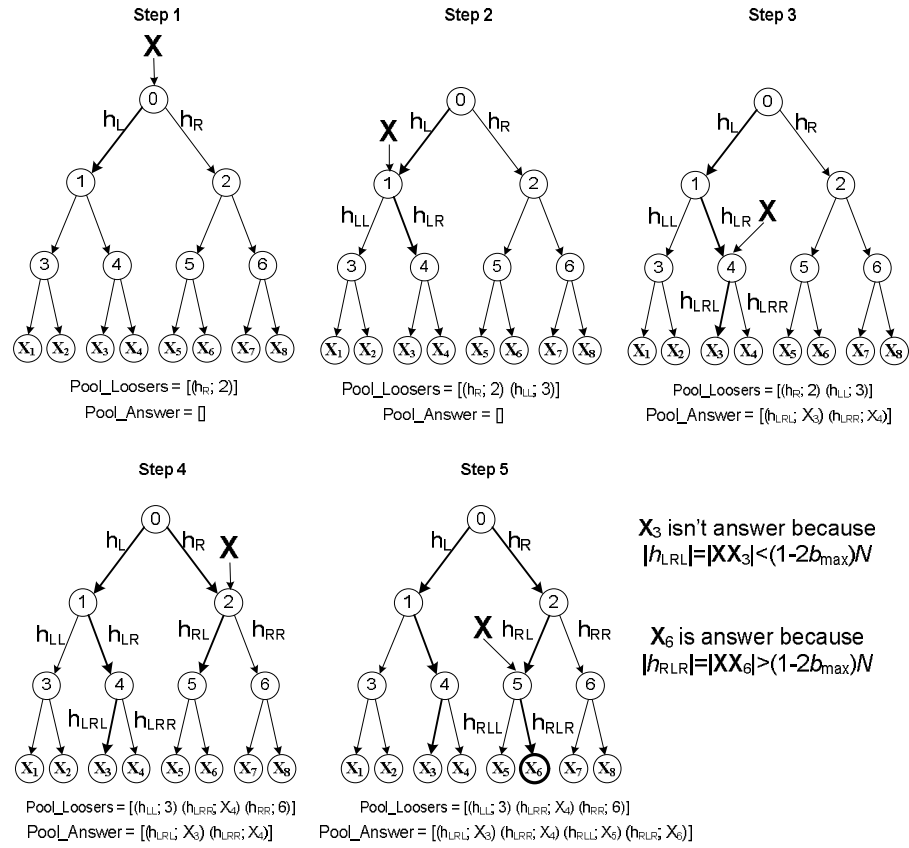


Рис. 3. Пример работы алгоритма

7. Результаты моделирования

В начале посмотрим, какова надежность описанного алгоритма. На рисунке 4а показана зависимость вероятности ошибки работы алгоритма от загрузки M/N при фиксированном $N = 128$ и $b_{\max} = 0.31$. Ошибка нормирована на максимально допустимую вероятность ошибки $P_{\max}$, при которой работа алгоритма считается удовлетворительной. В данной работе допустимая ошибка была выбрана в

искаженных бит $b = 0$), а верхняя кривая построена для случая, когда входной вектор был получен в результате инверсии 30% бит одного из эталонных векторов, на котором была обучена система. Как видно из графика, при загрузке менее $4N$ и искажениях $b \leq 0.3$ алгоритм укладывается в установленные ограничения, а при $M = 4N$ наличие искажений приводит к неудовлетворительной работе алгоритма.

Представленный алгоритм имеет один свободный параметр – $b_{\max}$ (рис. 1). Этот параметр задает диапазон допустимых искажений, которые может содержать

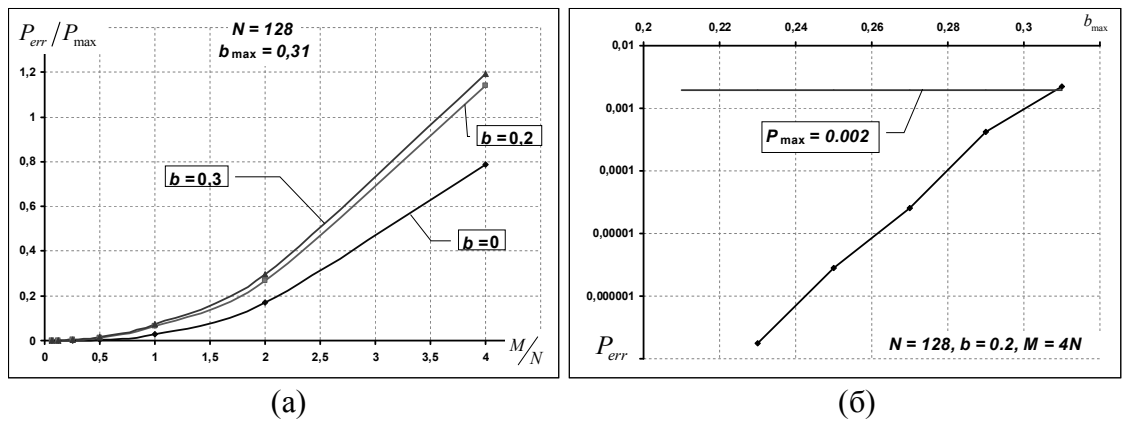


Рис. 4. Вероятность ошибки алгоритма

виде $P_{\max} = 1/M$. На графике представлено три кривые для разных уровней искажений: нижняя кривая соответствует ошибке системы, когда на вход предъявляются паттерны без искажений (т.е. доля

входной вектор (т.е. $b \leq b_{\max}$). Если же $b > b_{\max}$, то критерий (2) ни разу не сработает и все ветви дерева будут обойдены, т.е. рассматриваемый алгоритм будет эквивалентен алгоритму полного перебора, но будет

выполнено в двое больше скалярных произведений. Понижение $b_{\max}$ приводит к экспоненциальному снижению вероятности того, что критерий (2) ошибочно сработает. Следовательно, не разумно задавать $b_{\max}$ больше необходимого. Так, например, если известно, что входные векторы будут содержать не более 20% искаженных бит, то разумно задать $b_{\max} = 0.2$. Действительно, как видно из рисунка 4б незначительное снижение $b_{\max}$ с 0.31 до 0.29 приводит к понижению вероятности ошибки алгоритма более

0.14N (максимальной загрузки, когда используется обучающее правило Хебба). Возникает вопрос, как он вообще работает? Ответ – плохо: с вероятностью 57% корневой элемент выбирает правильную ветку дерева, но даже столь незначительного перекося в сторону правильной ветки достаточно, чтобы дерево работало эффективно, т.к. надежность узлов экспоненциально растет в ходе спуска по дереву. Это позволяет шаг за шагом уточнять ответ, а дополнительные итерации в случае ошибочного выбора ветки для спуска всегда подкорректируют результат.

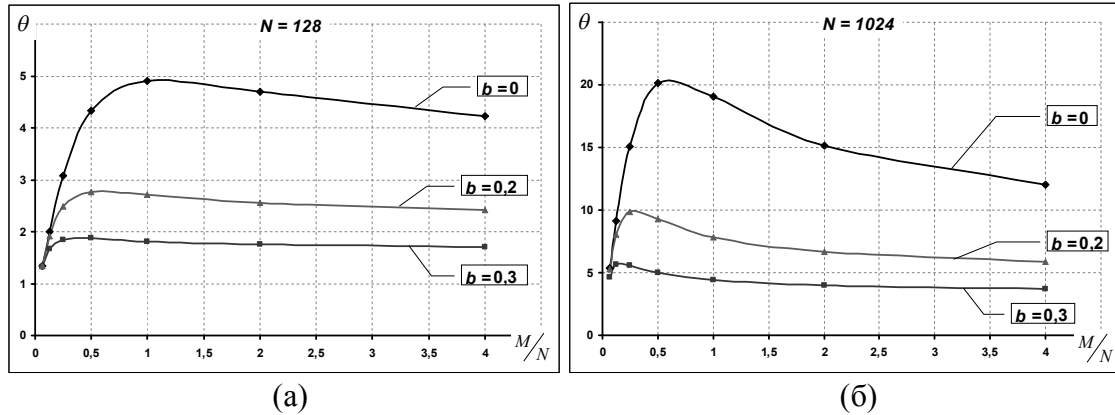


Рис. 5. Ускорение алгоритма

чем на порядок. Если же задать $b_{\max} = 0.2$, то не представляется возможности экспериментально измерить вероятность ошибки алгоритма (потребуется несколько месяцев машинного времени).

Теперь взглянем на быстроедействие алгоритма. Для сравнения был выбран *метод полного перебора* как наиболее надежный, хотя и достаточно медленный. Сам метод довольно прост: входной вектор скалярно перемножается со всеми паттернами; затем выбирается паттерн, у которого скалярное произведение с входным вектором было максимальным.

На рис. 5а и рис. 5б показаны зависимости ускорения алгоритма от загрузки системы при различных уровнях искажений b входного вектора X . Здесь ускорение – это во сколько раз число операций в методе полного перебора превышает число операций предлагаемого алгоритма. Во-первых, видим, что с ростом искажений работа алгоритма замедляется. Это связано с тем, что приходится обходить все больше и больше ветвей дерева с тем, чтобы найти ответ. Во-вторых, с ростом размерности N задачи растет ускорение алгоритма.

Предлагаемый алгоритм разрабатывался для решения задачи идентификации сетевых атак, характеризуемой следующими параметрами $N = 10^5$ и $M = 10^5$. Столь высокие параметры не позволяют применять метод прямого перебора, многослойные персептроны, обучаемые методом обратного распространения ошибки, и другие классические решения из-за чрезмерной вычислительной сложности.

Внимательный читатель может заметить, что на корневой элемент дерева ложится наибольшая нагрузка. Так в рассмотренных выше экспериментах загрузка корневого персептрона существенно выше

Заключение

В работе представлен итеративный иерархический алгоритм. Этот алгоритм является расширением бинарного дерева поиска на случай, когда входной вектор содержит искажения.

Эксперименты показали, что предложенный алгоритм позволяет надежно распознавать паттерны при шумах до 30% и больших загрузках $M/N > 1$. При этом предложенный алгоритм работает в несколько раз быстрее, чем алгоритм полного перебора. С ростом размерности распознаваемых паттернов N выигрыш по скорости увеличивается.

Приложение

Персептрон, применяемый в данной работе, состоит из двух слоев, где каждый нейрон входного слоя связан со всеми нейронами выходного слоя. Первый слой состоит из N биполярных нейронов; второй слой состоит из $q = 2$ биполярных нейронов. Синаптические связи, идущие к каждому выходу, обучаются на своем подмножестве паттернов по обобщенному правилу Хебба:

$$W_{ij} = \sum_{i=1}^q \sum_{\mu=(i-1)M/q}^{iM/q} y_{\mu} x_{\mu j} \quad (6)$$

Здесь W_{ij} – связь, идущая от j -ого входного нейрона к i -ому выходному нейрону; $y_{\mu} = \{\pm 1\}$ – знак, с которым обучается μ -ый паттерн (генерируется случайным образом).

При поступлении входного вектора $\mathbf{X}$ на входные нейроны, на i -ом выходе определяется локальное поле по формуле

$$h_i = \sum_{j=1}^N W_{ij} x_j. \quad (7)$$

Затем определяется выход с наибольшим значением по модулю локальным полем. Этот выход признается победителем.

Вычислительная сложность при распознавании одного паттерна персептроном составляет порядка $\Theta_{perc} \approx 2Nq$ операций, где q - число выходных нейронов персептрона.

Вероятность ошибки распознавания такого персептрона составит

$$P_{err} \approx \frac{1}{\gamma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\gamma^2}{2}}, \quad \gamma^2 = \frac{N}{M} q. \quad (8)$$

Емкость памяти персептрона, распознающего паттерны с допустимой вероятностью ошибки P_{max} можно оценить выражением

$$M < \frac{Nq}{\ln(P_{max} \sqrt{2\pi})}. \quad (9)$$

Литература

1. I.T. Podolak, A. Roman Theoretical foundations and experimental results for a hierarchical classifier with overlapping clusters // *Computational Intelligence*. doi: 10.1111/j.1467-8640.2012.00469.x, 2012.
2. D. Casasent, Y.-C. Wang. A hierarchical classifier using new support vector machines for automatic target recognition // *Neural Networks*, – vol.18, 2005, pp. 541–548.
3. S.A. Dolenko, Yu.V. Orlov, I.G. Persiantsev et al. The Perceptron-Based Hierarchical Structure of Classifiers Constructed by the Adaptive Method // *Pattern Recognition and Image Analysis*, – vol.7, 1997, pp. 18-22.
4. Boris Kryzhanovsky, Vladimir Kryzhanovskiy, Leonid Litinskii. Machine Learning in Vector Models of Neural Networks // *Advances in Machine Learning II. Dedicated to the memory of Professor Ryszard S. Michalski*. Koronacki, J., Ras, Z.W., Wierzbach, S.T. (et al.) (Eds.), Series “Studies in Computational Intelligence”. Springer. ISSN: 1860-949X, SCI 263, 2010, pp. 427–443.
5. B.V. Kryzhanovsky, V.M. Kryzhanovsky, B.M. Magomedov, A.L. Mikaelian Vector perceptron as fast search algorithm // *Optical Memory & Neural Network*, – vol. 13, No. 2, 2004, pp. 103-108.

Nearest neighbor search in hemming space of high dimensionality by hierarchical neuron-classifier

V.M. Kryzhanovsky, M.Yu. Malsagov

Abstract. The paper offers an algorithm that extends the binary tree search algorithm so that it can deal with distorted input vectors. Perceptrons are the tree nodes. The algorithm features an iterative solution search and stopping criterion.

Временной подход к анализу импульсных модуляций

В.Л. Дунин-Барковский

доктор физико-математических наук, профессор

Для анализа процессов, связанных с передачей непрерывных сигналов различными видами импульсных модуляций, в настоящее время в основном используются спектральный и операционный подходы. Вместе с тем в теории неимпульсных линейных систем наряду с этими методами находит применение временной метод анализа, основанный на теореме Дюамеля. В настоящей статье предпринята попытка развить временной подход для анализа реакции линейных систем на модулирование последовательности импульсов /АИМ, ВИМ/.

1. Введение

Импульсные модуляции применяются во многих технологических информационно-управляющих системах. [1]. Они характерны также для естественных нейронных систем [2, 3]. В настоящей заметке описывается один из возможных подходов к анализу таких модуляций, основанный на использовании асимптотических разложений [4].

2. Амплитудно-импульсная модуляция

Ниже будет многократно использоваться формула суммирования рядов Эйлера-Маклорена [4, 5]. Приводим ее в удобной для наших целей форме:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^n \phi(\alpha \cdot h) &= \frac{1}{h} \int_0^{nh} \phi(x) dx + \\ &+ \frac{1}{2} (\phi(0) + \phi(n \cdot h)) + \\ &+ \sum_{j=1}^{k-1} \frac{B_{2j}}{(2j)!} \cdot h^{2j-1} \cdot \frac{d^{2j-1}}{dx^{2j-1}} \phi(x) \Big|_0^{nh} + \\ &+ n \cdot h^{2k} \cdot \frac{B_{2k}}{(2k)!} \cdot \frac{d^{2k}}{dx^{2k}} \phi(x) \Big|_{x=x_0} \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\phi(x)$ – произвольная, “достаточно гладкая” функция; B_{2j} – числа Бернулли; k – произвольное целое число; n – целое число; h – постоянная и $\Phi(x) \Big|_a^b = \Phi(b) - \Phi(a)$.

Применим формулу (1) к выражению, определяющему реакцию линейной системы на последовательность равноотстоящих друг от друга импульсов, модулированных по амплитуде. В том случае, когда форма импульсов одна и та же, реакция определяется следующим образом [1]:

$$g(t) = \sum_{\alpha} f(\alpha \cdot T_i) \cdot h(t - \alpha T_i) \quad (2)$$

где $g(t)$ – сигнал на выходе линейной системы, $f(t)$ – модулирующий сигнал, $h(t)$ – отклик линейной сис-

темы на одиночный импульс единичной амплитуды, суммирование распространяется на все импульсы, поступившие в систему; T_i – такт модуляции.

Если последовательность импульсов ограничена, $-n \leq \alpha \leq n$, то, применяя к (2) формулу (1), получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=-n}^n f(\alpha \cdot T_i) \cdot h(t - \alpha T_i) &= \\ \frac{1}{T_i} \cdot \int_{-nT_i}^{nT_i} f(\tau) \cdot h(t - \tau) d\tau &+ \\ + \frac{1}{2} f(-n \cdot T_i) \cdot h(t + n \cdot T_i) &+ \\ + \frac{1}{2} f(n \cdot T_i) \cdot h(t - n \cdot T_i) &+ \\ + \sum_{i=1}^{k-1} T_i^{2j-1} \cdot \frac{B_{2i}}{(2j)!} \cdot \frac{\partial^{2j-1}}{\partial \tau^{2j-1}} (f(\tau) \cdot h(t - \tau)) \Big|_{-nT_i}^{nT_i} &+ \\ (2n+1) \cdot T_i^{2k} \cdot \frac{B_{2k}}{(2k)!} \cdot \frac{\partial^{2k}}{\partial \tau^{2k}} (f(\tau) \cdot h(t - \tau)) \Big|_{t=\tau_{nk}}, \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $k > 1$ и $-n \cdot T_i \leq \tau_{nk} \leq n \cdot T_i$.

Отклик линейной системы $g(t)$ на бесконечную последовательность импульсов, $-\infty < \alpha < \infty$, определяется следующим образом:

$$g(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\alpha=-n}^n f(\alpha \cdot T_i) \cdot h(t - \alpha \cdot T_i) \quad (4)$$

Рассмотрим случай, когда $f(t)$ – функция с ограниченным спектром, а $h(t) = \frac{\sin \omega_0 \tau}{\omega_0 \tau}$ – импульсная характеристика идеального фильтра низких частот с граничной частотой ω_0 . Заметим, что при этом

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} f(-nT_i) \cdot h(t + nT_i) + f(nT_i) \cdot h(t - nT_i) \right) = 0$$

и, таким образом, (4) в сочетании с (3) дает:

$$\begin{aligned} g(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau) \cdot \frac{\sin \omega_0(t - \tau)}{\omega_0(t - \tau)} d\tau \\ &+ \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{k-1} T_i^{2j-1} \cdot \frac{B_{2j}}{(2j)!} \cdot \\ &\frac{\partial^{2j-1}}{\partial \tau^{2j-1}} \left(f(\tau) \cdot \frac{\sin \omega_0(t - \tau)}{\omega_0(t - \tau)} \right) \Big|_{-nT_i}^{nT_i} + \\ &+ \lim_{n \rightarrow \infty} (2n+1) \cdot T_i^{2k} \cdot \frac{B_{2k}}{(2k)!} \cdot \\ &\frac{\partial^{2k}}{\partial \tau^{2k}} \left(f(\tau) \cdot \frac{\sin \omega_0(t - \tau)}{\omega_0(t - \tau)} \right) \Big|_{\tau=\tau_{nk}} \end{aligned} \quad (5)$$

Если ω_{2p} – граничная частота спектра $f(t)$ удовлетворяет условию

$$\omega_{2p} < \omega_0, \quad (6)$$

то первый член правой части (5) легко вычисляется, причём

$$\frac{1}{T_i} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau) \cdot \frac{\sin \omega_0(t - \tau)}{\omega_0(t - \tau)} d\tau = \frac{\pi}{\omega_0 T_i} \cdot f(t).$$

Можно доказать (см. Приложение), что при выполнении неравенства

$$T_i < \frac{\pi}{\omega_0} \quad (7)$$

все члены правой части (5), кроме первого, равны нулю. Таким образом, временной подход позволяет установить следующий факт:

$$g(t) = \frac{\pi}{\omega_0 T_i} \cdot f(t) \quad (8)$$

если выполняются условия (6) и (7).

Этот факт является в известном смысле обобщением теоремы Котельникова [6], в которой равенство (8) доказывается в предположении, что

$$T_i = \frac{\pi}{\omega_0}. \text{ Отличие достаточно принципиально, т.к.}$$

из функций $\frac{\sin \omega_0(t - nT_i)}{\omega_0(t - nT_i)}$ при $T_i = \frac{\pi}{\omega_0}$ лишь одна

отлична от нуля в любой тактовой точке $t = kT_i$, что делает равенство (8) очевидным, по крайней мере, в этих точках. При $T_i \neq \frac{\pi}{\omega_0}$ заранее не ясно даже,

существуют ли точки, в которых выполняется (8). Отметим еще, что доказанное нами утверждение “известно” в теории в том смысле, что при выполнении (6) и (7) спектры функций $f(t)$ и $g(t)$ совпадают. Однако доказательства этого утверждения [1] принципиально не дают возможности определить фазовые сдвиги частотных составляющих сигнала на входе и выходе канала связи, т.е. не позволяют судить о степени “поточечного совпадения” функ-

ций $f(t)$ и $g(t)$.

Следует обратить внимание также на то, что ограниченность спектра $f(t)$ существенно используется в доказательстве только при исчислении интеграла в (5), а затем используется лишь тот факт, что для функций с ограниченным спектром выполняется условие (16) (см. Приложение).

3. Время-импульсная модуляция

При этих видах модуляции выражение для отклика линейной системы на последовательность импульсов имеет вид:

$$g(t) = \sum_{\alpha} h(t - t_{\alpha}); \quad \alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9)$$

где моменты t_{α} определяются способом модуляции и значениями модулирующей функции.

К выражениям типа (9) формула (1) непосредственно не применима, поскольку она требует, чтобы значения суммируемой функции брались в равноотстоящих точках. Однако оказывается, что (9) можно преобразовать так, чтобы воспользоваться (1). В самом деле, пусть способ модуляции позволяет выбрать функцию $t_f(a)$ непрерывного аргумента a , зависящую от $f(t)$, так что $t_f(a) = t_{\alpha}$ для целочисленных значений α . Тогда (9) представимо в виде

$$g(t) = \sum_{\alpha} h(t - t_f(\alpha)) = \sum_{\alpha} H_f(t, \alpha) \quad (10)$$

где слагаемые $H_f(t, a)$ представляют собой значения функции $H_f(t, a) = h(t - t_f(a))$, взятые в равноотстоящих точках отсчета. Если выбор функции $t_f(a)$ удачен (т.е. функция $H(t, a)$ получается достаточно гладкой), для суммирования (10) можно применить (1).

Покажем, как можно выбрать $t_f(a)$ для ЧИМ-П второго рода и к каким выражениям приводит суммирование (10) при сделанном выборе.

Моменты появления импульсов при ЧИМ-П связаны со значениями модулирующей функции $f(t)$ соотношением:

$$\int_{t_{\alpha-1}}^{t_{\alpha}} f(\tau) d\tau = \sigma \quad (11)$$

так что $t(0) = 0$, σ – постоянная, параметр модуляции; выражение справедливо лишь для положительных функций $f(t)$.

(В работе [7] выражение (11) определяет так называемую прямую ЧИМ, но к тому же виду замкнутой переменных приводится выражение для моментов генерации импульсов при ЧИМ-П, полученное в [1]).

Из (11) следует, что в частотно-импульсной посылке, соответствующей модуляции сигналом $f(t)$

на отрезке $[0, t]$ содержится $\alpha_f(t) = \left\lceil \frac{1}{\sigma} \int_0^t f(\tau) d\tau \right\rceil$

импульсов ($[x]$ – целая часть x). Положим

$$a_f(t) = \frac{1}{\sigma} \int_0^t f(\tau) d\tau \quad (12)$$

тогда функцию $a_f^{-1}(a)$, обратную к $a_f(t)$, можно выбрать в качестве определенной выше функции $t_f(a)$, поскольку $a_f^{-1}(a) = t_a \cdot t_f(a)$, полученная таким образом, определена однозначно и является функцией “столь же гладкой”, что и $f(t)$, т.к. $f(t) > 0$.

Теперь отклик линейной системы на частотно-модулированную последовательность импульсов с помощью (1) запишется в виде

$$g(t) = \int_{T_-}^{T_+} h(t - a_f^{-1}(a)) da + \frac{1}{2} \lim_{n \rightarrow \infty} (h(t - t_{-n}) + h(t - t_n)) \quad (13)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{k-1} \frac{B_{2j}}{(2j)!} \cdot \sigma^{2j-1} \cdot G_{2j-1}^{fh}(t - \tau) \Big|_{\tau=t_{-n}}^{\tau=t_n} +$$

$$+ \lim_{n \rightarrow \infty} (2n+1) \cdot \frac{B_{2k}}{(2k)!} \cdot \sigma^{2k} \cdot G_{2k}^{fh}(t - \tau_{k,n})$$

Здесь функции G_m^{fh} определяются только сигналом $f(t)$, функцией $h(t)$ и индексом m ; $t_{-n} \leq \tau_{kn} \leq t_n$; $T_{\pm} = \lim_{n \rightarrow \infty} t_{\pm n}$.

Первый член правой части (13) легко преобразуется:

$$\int_{T_-}^{T_+} h(t - a_f^{-1}(a)) da = \frac{1}{\sigma} \int_{T_-}^{T_+} f(\tau) h(t - \tau) d\tau, \quad (12)$$

если учесть, что вследствие

$$\frac{d}{da} (a_f^{-1}(a)) = \frac{\sigma}{f(a_f^{-1}(a))}.$$

Если принять $h(t) = \frac{\sigma}{\sigma_0} \cdot h_0(t)$, то (13) можно окончательно представить в виде:

$$g(t) = \frac{1}{\sigma_0} \int_{T_-}^{T_+} f(\tau) \cdot h_0(t - \tau) d\tau + \frac{\sigma}{\sigma_0} \cdot \left[\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} (h(t - t_{-n}) + h(t - t_n)) + \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{k-1} \frac{B_{2j}}{(2j)!} \cdot \sigma^{2j-1} \cdot G_{2j-1}^{fh}(t - \tau) \Big|_{\tau=t_{-n}}^{\tau=t_n} + \lim_{n \rightarrow \infty} (2n+1) \cdot \frac{B_{2k}}{(2k)!} \cdot \sigma^{2k} \cdot G_{2k}^{fh}(t - \tau_{k,n}) \right] \quad (14)$$

Это выражение может оказаться полезным для приложений, поскольку оно представляет отклик линейной системы в виде главного члена, соответствующего подаче непрерывного сигнала и члена порядка $\frac{\sigma}{\sigma_0}$, обусловленного импульсной модуляцией (уменьшение σ означает увеличение несущей частоты модуляции).

Приложение

Исследование остаточных членов при разложении отклика идеального фильтра нижних частот на амплитудно-модулированную последовательность импульсов по формуле Эйлера-Маклорена.

Пусть выполнены условия (6) и (7). Докажем, что в этом случае все члены правой части (5), кроме первого, равны нулю.

Для доказательства положим в (5) $k=k(n)$, так чтобы

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{k(n)}{n} = 0 \quad \text{и} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} n \cdot q^n = 0 \quad \text{при} \quad q < 1 \quad (15)$$

(Достаточно принять, например, $k(n) = \lfloor \sqrt{n} \rfloor$).

В силу ограниченности спектра $f(t)$ имеем:

$$\left| \frac{d^k f(t)}{dt^k} \right| = \left| \int_{-\omega_{2p}}^{\omega_{2p}} F(\omega) \cdot \omega^k \cdot e^{i\omega t} dt \right| \leq C_f \cdot \omega_{2p} \quad (16)$$

где $F(\omega)$ – комплексный спектр функции $f(t)$, $C_f > 0$ – константа.

В соответствии с (16):

$$\left| \frac{d^k}{dt^k} \left(\frac{\sin \omega_0(t - \tau)}{\omega_0(t - \tau)} \right) \right| \leq C_s \cdot \omega_0^k,$$

поэтому

$$\left| \frac{d^k}{d\tau^k} \left(f(\tau) \cdot \frac{\sin \omega_0(t - \tau)}{\omega_0(t - \tau)} \right) \right| = \left| \left(f(\tau) + \frac{\sin \omega_0(t - \tau)}{\omega_0(t - \tau)} \right)^{\{k\}} \right| \leq C_{\partial} \cdot 2^k \cdot \omega_0^k \quad (17)$$

(C_s, C_{∂} – константы, $(\dots)^{\{k\}}$ – обозначение Лейбница для k -той производной произведения двух функций), в силу (6) и (7). Теперь можно вычислить последний член правой части (5):

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[(2n+1) \cdot \frac{B_{2k(n)}}{(2k(n))!} \cdot T_i^{2k(n)} \cdot \frac{\partial^{2k(n)}}{\partial \tau^{2k(n)}} \left(f(\tau) \cdot \frac{\sin \omega_0(t - \tau)}{\omega_0(t - \tau)} \right) \right] \leq$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (2n+1) \cdot \frac{|B_{2k(n)}|}{(2k(n))!} \cdot C_{\partial} \cdot (2\omega_0 T_i)^{2k(n)} \leq$$

$$\leq \left[\lim_{n \rightarrow \infty} 2(2n+1) \cdot C_{\partial} \cdot \left(\frac{T_i \cdot \omega_0}{\pi} \right)^{2k(n)} \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|B_{2k(n)}|}{(2k(n))!} \cdot (2\pi)^{2k(n)} \right] = 0$$

(использованы условия (6), (7), (15) и тот факт, что

$$\frac{1}{2} \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{|B_{2m}| \cdot (2\pi)^n}{(2m)!} = 1 \quad [4]).$$

Исследуем теперь ряд:

$$z(n, T_i, \omega_0, t) =$$

$$\left[\sum_1^{k(n)-1} \frac{B_{2j}}{(2j)!} \cdot T_i^{2j-1} \cdot \frac{\partial^{2j-1}}{\partial \tau^{2j-1}} \left(f(\tau) \cdot \frac{\sin \omega_0(t-\tau)}{\omega_0(t-\tau)} \right) \right]_{\tau=n \cdot T_i}^{\tau=-n \cdot T_i}.$$

Предварительно заметим, что

$$\left(\frac{\sin \omega_0 \tau}{\omega_0 \tau} \right)^{(2j-1)} = \left[-\frac{(2j-1)!}{(\omega_0 \tau)^{2j}} \cdot \omega_0^{2j-1} \cdot \left(C_j(\omega_0 \tau) \cdot \sin \omega_0 \tau - S_j(\omega_0 \tau) \cdot \cos \omega_0 \tau \right) \right],$$

где

$$C_j(x) = 1 - \frac{x^2}{2} + \dots + (-1)^{j-1} \cdot \frac{x^{2(j-1)}}{(2(j-1))!},$$

$$S_j(x) = x - \frac{x^3}{6} + \dots + (-1)^{j-1} \cdot \frac{x^{2j-1}}{(2j-1)!}.$$

Отсюда получаем неравенство:

$$\left| \left(\frac{\sin \omega_0 \tau}{\omega_0 \tau} \right)^{(2j-1)} \right| \leq \frac{(2j-1)!}{|\omega_0 \tau|^{2j}} \cdot \omega_0^{2j-1} \cdot \left(1 + |\omega_0 \tau| + \dots + \frac{|\omega_0 \tau|^{2j-1}}{(2j-1)!} \right) = \frac{\omega_0^{2j-1}}{|\omega_0 \tau|} \cdot \left(\frac{(2j-1)!}{|\omega_0 \tau|^{2j-1}} + \frac{(2j-1)!}{1! \cdot |\omega_0 \tau|^{2j-2}} + \dots + 1 \right) \leq \omega_0^{2j-1} \cdot \frac{2j}{|\omega_0 \tau|},$$

если $|\omega_0 \tau| \geq 2k(n) > 2j$.

Члены ряда $z(n, T_i, \omega_0, t)$ содержат производные от $\frac{\sin \omega_0 \tau}{\omega_0 \tau}$ в точках $\tau = t \pm n \cdot T_i$. При достаточно большом n в каждом фиксированном t можно считать, что $|t \pm T_i \cdot n| \approx n \cdot T_i$. В этом случае условие $|\omega_0 \tau| \geq 2k(n)$ превращается в условие $T_i \geq \frac{2k(n)}{\omega_0 \cdot n}$, которое всегда выполняется в силу (15) и того, что $T_i > 0$.

Таким образом, при достаточно больших n выполняются неравенства:

$$\left| \left(\frac{\sin \omega_0 \tau}{\omega_0 \tau} \right)^{(2j-1)} \right|_{\tau=t \pm n \cdot T_i} \leq \frac{2j}{\omega_0 \cdot n \cdot T_i} \cdot \omega_0^{2j-1}$$

для $j=2, 3, \dots, k(n)-1$. Исходя из них, а также учитывая (16) и (17), получим:

$$\left| \frac{B_{2j}}{(2j)!} \cdot T_i^{2j-1} \cdot \frac{\partial^{2j-1}}{\partial \tau^{2j-1}} \left(f(\tau) \cdot \frac{\sin \omega_0(t-\tau)}{\omega_0(t-\tau)} \right) \right|_{\tau=n \cdot T_i}^{\tau=-n \cdot T_i} \leq \frac{C_1}{n} \cdot 2j \cdot \frac{B_{2j}}{(2j)!} \cdot (2\omega_0 T_i)^{2j-1}$$

где $C_1 > 0$ – константа.

Теперь очевидно, что при достаточно больших n выполняется неравенство:

$$|z(n, T_i, \omega_0, t)| \leq \frac{C_2}{n} \cdot \sum_1^{k(n)-1} 2j \cdot \frac{|B_{2j}|}{(2j)!} \cdot (2\omega_0 T_i)^{2j-1},$$

($C_2 > 0$ – константа).

$$\text{Ряд } \sum_1^{\infty} 2j \cdot \frac{|B_{2j}|}{(2j)!} \cdot (2\omega_0 T_i)^{2j-1} \text{ сходится, если}$$

выполнено (7). В самом деле, как уже отмечалось,

$$\frac{1}{2} \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{|B_{2m}| \cdot (2\pi)^n}{(2m)!} = 1, \text{ т.е. при больших } j \text{ члены}$$

нашего ряда эквивалентны членам ряда

$$\sum_{j=1}^{\infty} 2j \cdot \left(\frac{\omega_0 \cdot T_i}{2\pi} \right)^{2j}, \text{ а поскольку последний сходится}$$

при условии (7), то в этом случае сходится также интересующий нас ряд.

В силу всего сказанного существуют такие числа N и $C > 0$, что при $n > N$ выполняется неравенство

$$|z(n, T_i, \omega_0, t)| \leq \frac{C}{n}, \text{ иными словами}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} z(n, T_i, \omega_0, t) = 0. \text{ Доказательство закончено.}$$

Идеей постановки задачи автор обязан М.Л. Цетлину (1924-1966). Автор искренне признателен А.Л. Мановцеву и Г.С. Эйдузу за ценные советы и замечания на разных этапах исследования и Г.А. Бесхлебновой за помощь в работе.

Литература

1. В.К. Батурин. Общая теория управления. – М.: Юнити-дата, 2012. С. 487.
2. D. Rasmussen, C. Eliasmith. Modeling Brain Function: Current Developments and Future Prospects. // *JAMA Neurol.* – 2013 Aug 26. doi: 10.1001
3. P. Dayan, L. Abbot Theoretical Neuroscience. Computational and Mathematical Modeling of Neural Systems. – Cambridge-London, MIT Press, 2005. P. 566.

4. Г.М. Фихтенгольц Курс дифференциального и интегрального исчисления. т. 3.— М.: Физматлит, 2001.

5. В.М. Вержбицкий Основы численных методов. — М.: Высшая школа, 2009, 840 с.

6. J.M. Whittaker Interpolatory function theory - // *Cambridge Tracts in math. and math. physics.* — №3, 1935.

7. О.М. Державин // *Автоматика и телемеханика.* — №4(74), 1967.

Temporal approach to analysis of impulse modulations

W.L. Dunin-Barkowski

Abstract. For analysis of transmission of continuous signals by different types of impulse modulations currently mostly spectral and operational approaches are applied. However, for analysis of continuous systems the temporal approach based on Duhamel's principle is used as well. The work presents an attempt to elaborate a temporal approach for an analysis of linear systems to modulated impulse sequences.

Сравнение функций обонятельной и вкусовой сенсорных систем в осуществлении поведенческого выбора

И.А. Смирнитская

кандидат физико-математических наук

Рассматривается подход к созданию алгоритмического описания работы нервной системы, в котором характер операций, выполняемых конкретными структурами нервной системы представлен как результат эволюционного изменения данной структуры. При этом изменение данной структуры происходит не изолированно, а как часть всего ансамбля нервной системы, и изменение этой, и всех остальных структур ансамбля обусловлено поведенческими требованиями. Рассмотрение представлено на примере части нервной системы, которую принято называть лимбической системой, главной функцией которой является выбор варианта поведения. Основные рассмотренные структуры – инсулярная, орбитофронтальная корковые области, базолатеральная часть миндалины.

1. Введение

Нервная система животных является автономным устройством управления поведением. Автономность означает, что большая часть нервной системы занята не управлением движениями животного, а выбором типа деятельности и его конкретной цели. Все это вместе называется поведенческим выбором.

При моделировании нервной системы существует опасность слишком унифицированного подхода к различным сенсорным модальностям, рассмотрению их как «неких» сенсорных входов, несущих «некоторую» информацию о внешнем мире, в то время как в ходе эволюции системы, анализирующие различные классы внешних воздействий, возникли для совершенно разных поведенческих целей. Учет этой специфичности поможет выстроить адекватное представление об устройстве нервной системы.

Попробуем сконструировать схему строения части нервной системы, анализирующей обонятельные и вкусовые сенсорные входы с точки зрения их представительства в поведенческом выборе.

2. Состав обонятельной системы

Обонятельная система состоит из двух частей: собственно обонятельной и вомероназальной [1,8]. Первая распознает любые летучие вещества. Вторая реагирует на небольшое количество особых нелетучих молекул, так называемых феромонов, и реакция на каждый из них точно определена. А именно, восприятие большинства феромонов инициирует без дополнительных проверок какую-либо, специфическую для каждого феромона, стадию репродуктивного поведения. Это поведение стереотипно. Считают, что вомероназальная обонятельная система возникла раньше обычного обоняния [2].

3. Формирование пищевого условного рефлекса включает вычисление ценности стимула

В реагировании животных на внешние сигналы различают врожденные реакции (например, поедание пищи), и приобретенные (например, команды выполняемые служебной собакой). Соответствующие внешние сигналы называют безусловными и условными стимулами. Подача безусловного стимула сразу, без проверки (если животное до того не объелось до отвала) запускает ответ на этот стимул. Отвечать на условные стимулы животное обучается только в результате опыта сочетания их с безусловными. Пусть, например, лабораторное животное обучается после включения лампочки нажимать на рычаг. Если после условного стимула животное случайно нажимает на рычаг, оно получает пищевое вознаграждение. После некоторого числа таких сочетаний животное будет нажимать на рычаг и без пищевого вознаграждения. Произошло обучение, животное запомнило, что свет лампочки предвещает еду. И тогда говорят, что этот сенсорный сигнал приобрел ценность. Ценность сенсорного сигнала равна ценности пищевого вознаграждения, которое он предвещает. Схема обучения показана на рис.1.

Из рис.1 мы видим, что зрительное и вкусовое представление стимулов, идущие в нервной системе каждый по своему пути, соединяются в одном модуле этой системы – орбитофронтальной коре. Поэтому про орбитофронтальную кору говорят, что в ней представлена ценность стимулов. Причем, ценность условного стимула определяется ценностью быстро следующего за ним безусловного стимула. (Известно, что животные хорошо обучаются, если безусловный стимул поступает с не слишком большой задержкой.)

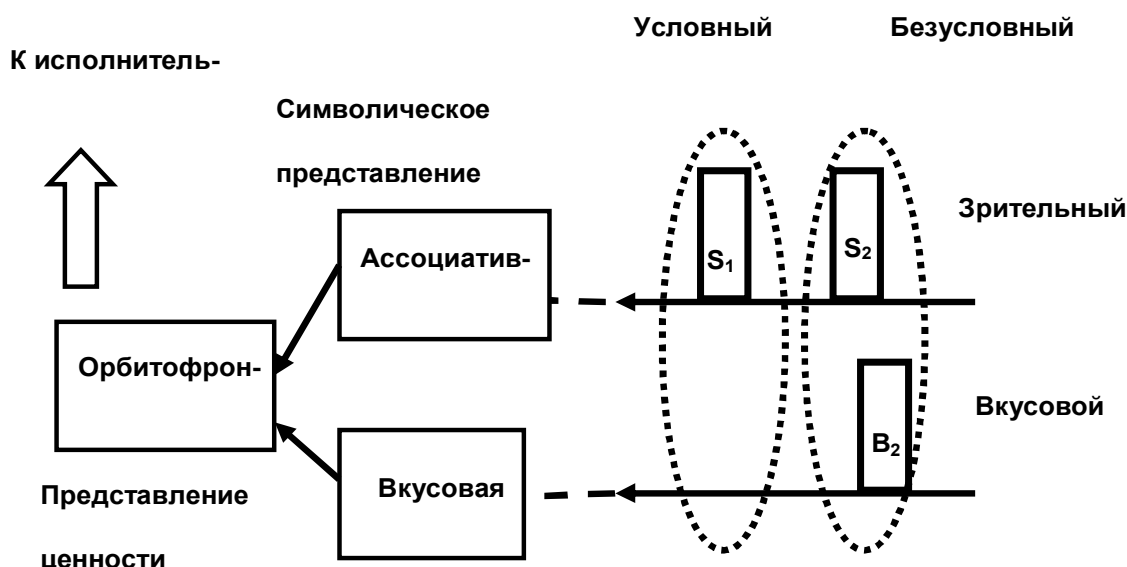


Рис. 1. Схема условнорефлекторного обучения. S_1 и S_2 – зрительное представление условного и безусловного стимулов. B_2 – пищевые характеристики безусловного стимула.

4.Обоняние и целенаправленное поведение

Обонятельная система аналогичным образом соединяет два своих входа [3], причем тот, который воспринимает феромоны, играет роль безусловного стимула, а тот, который анализирует любые летучие вещества – условного (рис.2).

Почему возможна такая аналогия? Реакция на безусловный стимул предопределена, животному не нужно проверять, стоит на него реагировать или нет. И именно так оно реагирует на феромон. Сочетание

вомероназального и условного стимулов приводит, например, к тому, что самка мыши начинает предпочитать подстилку (условный стимул), пропитанную мочой самца (содержащую феромоны – безусловный стимул) [4].

Вомероназальная система появилась для управления поведением путем близкого контакта (феромоны не летучи, их животное воспринимает, тесно прижавшись носом и сильно втягивая воздух). Но ассоциирование их с летучими запахами позволило животным различать половых партнеров издалека. Это явилось важным для выживания эволюционным преимуществом. Еще более важным оказалось дальнейшее ус-

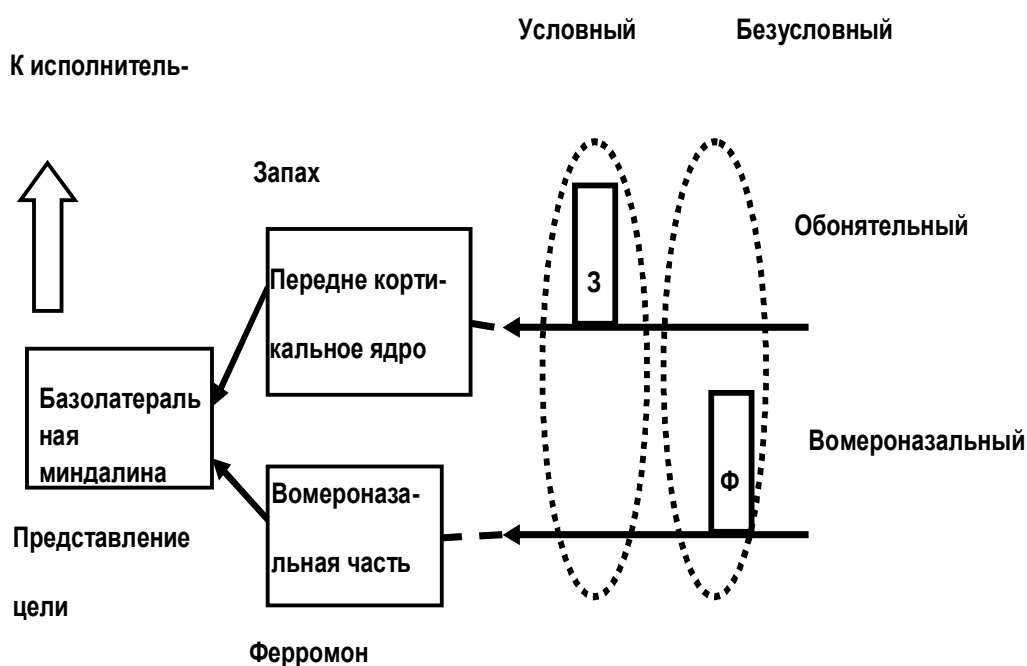


Рис. 2. Схема ассоциирования летучего запаха и феромона. 3 – запах стимула, Ф – феромон.

вершенствование обонятельной системы. Именно на базе обоняния развился комплекс структур височной области, включающий миндалину и гиппокамп, который является системой выбора поведенческой цели (теперь уже не только запаховой).

Подчеркнем, что запаховая цель не имеет координаты. Здесь не определяется время достижения цели. Важно только направление. Выбор цели состоит в непрерывной коррекции всего лишь одной переменной – направления движения, на основании другой переменной – интенсивности запаха. Можно предложить простейшую схему этого выбора. (рис.3) Важно подчеркнуть, что любое запоминание, в том числе выучивание условнорефлекторного ответа на стимул, связывает внешние, несущественные признаки объекта с существ-

Инсулярная кора состоит из двух подразделений [5]: первичной вкусовой коры – задняя инсулярная область (insula posterior), и вторичной вкусовой коры – передняя инсулярная область (anterior insula). Первичная вкусовая кора делится на три области: содержащую зернистый слой (granular insula), не содержащую зернистого слоя (agranular insula), и промежуточную (disgranular insula).

Область, **содержащая зернистый слой**, и промежуточная disgranular insula получают вход от структур, передающих вкусовые сигналы: вкусового таламуса (мелкоклеточная часть вентропостеро- медиального ядра) и парабрахияльного ядра моста, а также сигналы о движениях языка и рта от соматосенсорной коры. Также эти области получают сигналы от висцерально-

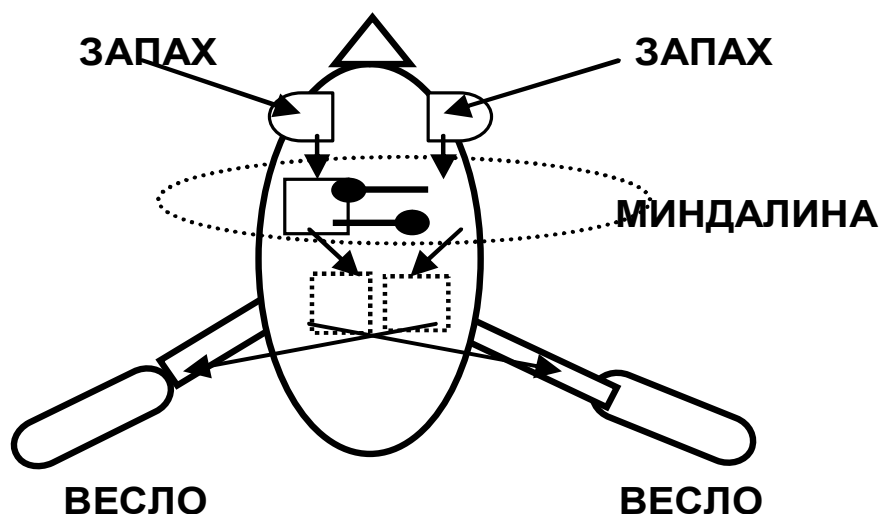


Рис. 3. Схема строения животного, имеющего два симметричных органа обоняния и два симметричных двигательных приспособления – весла. Запах поступает на примитивную схему вычитания заключенную в пунктирный овал (прообраз миндалины). От миндалины сигнал передается на структуры управляющие поворотом (два симметричных пунктирных квадрата – прообраз цингулярной коры). Стрелками показаны возбуждающие сигналы, как входные, так и управляющие движением. Линиями, оканчивающимися черными кружочками, обозначены тормозящие воздействия между симметричными отделами миндалины. Торможение пропорционально входному сигналу – интенсивности запаха. Такое устройство управления обеспечивает поворот в сторону более сильного запаха.

венными. В нашем случае - с пищевой ценностью при пищевом обучении и с наличием форомона при обонятельном обучении. При предъявлении условного стимула животное осуществляет выбор: необученное животное не реагирует на стимул, обученное совершает требуемое действие. Таким образом, запоминание является по большому счету промежуточным средством, необходимым для правильного поведенческого выбора.

5. Как выбирает инсула

Покажем, что у инсулярной коры две функции: собственно оценка пищевой ценности еды и инициация поглощения пищи, то есть, как и для организации произвольного условнорефлекторного действия здесь есть а) сенсорный компонент, б) присваивание ценности, и в) моторный компонент. Вторая функция: присваивание ценности произвольному стимулу, совершенные действия делегируется другим структурам.

го (вентропостеролатерального ядра) таламуса. На основании получаемых сенсорных сигналов эти области могут определить сиюминутную ценность поедания доставшейся животному еды. Однако окончательное решение может быть принято только с учетом прежнего опыта и внешних факторов (т.н. мотивационные влияния), сигналы о которых поступают **преимущественно в область не содержащую зернистого слоя** от медиальной префронтальной коры, миндалины, лимбического таламуса (медиодорсального ядра). Кроме того общим фоном для принятия решения служит состояние сытости или голодности организма, сигналы о котором идут от латеральной области гипоталамуса (центра голода и жажды) и поступают на все три области первичной вкусовой коры. Решение о ценности пищи формируется в результате обмена сигналами между всеми тремя областями первичной вкусовой коры.

Можно предположить, что древний прообраз инсулярной коры инициировал захват близкорасположенной пищи. Перемещения животного как целого (как в репродуктивном поведении) не требовалось.

Требовалось только решение захватывать или не захватывать пищу. Если же пища была проглочена, требовалось изменить состояние внутренней среды так, чтобы запустить переваривание и другие сопутствующие процессы. Именно поэтому современная вкусовая кора получает как сигналы о питательной ценности проглоченной пищи, так и висцеральные сигналы, и является центром, дающим команды об изменении внутренней среды организма. Считается, что решение о съедобности пищи (пищевой ценности) принимается в области *disgranular insula*, а об управлении висцеральными процессами в *granular insula* [5].

Вторичная вкусовая кора или передняя инсулярная область, не получает соматосенсорных, вкусовых и висцеральных входов от таламуса. Эти сигналы доходят до нее опосредованно, через заднюю инсулярную область. Передняя инсулярная область является частью (каудальным краем) орбитофронтальной коры. Известно, что орбитофронтальная кора является областью, вычисляющей ценность сенсорных сигналов [6]. Очевидно, что в области, присваивающей ценность произвольному стимулу, должны сходиться два типа сигналов: один – о вкусе и полезности стимула, другой – об такой характеристике стимула, которая позволит отли-

коре, откуда и поступает в латеральную область орбитофронтальной коры [10]. Чрезвычайно показательным является тот факт, что именно передняя инсулярная область считается вкусовой областью. Действительно, наше ощущение вкуса субъективно, оно не связано непосредственно с пищевой ценностью еды, ее горечью или сладостью, а скорее отражает наш жизненный опыт, то есть, связано с добавочными сигналами о виде пищи и приятных воспоминаниях [9]. В центральной области орбитофронтальной коры сигналы из каудальной и латеральной областей смешиваются. На рис.4 представлена схема этапов преобразования внешних сигналов в ходе вычисления пищевой ценности произвольного стимула.

5. Этапы эволюции поведенческого выбора

Из анализа строения и взаимосвязей обонятельной и вкусовой сенсорных систем можно сделать вывод о том, что эволюция использовала сложившуюся систему обонятельного выбора как основу устройства поведенческого выбора, в два приема подменив управляю-

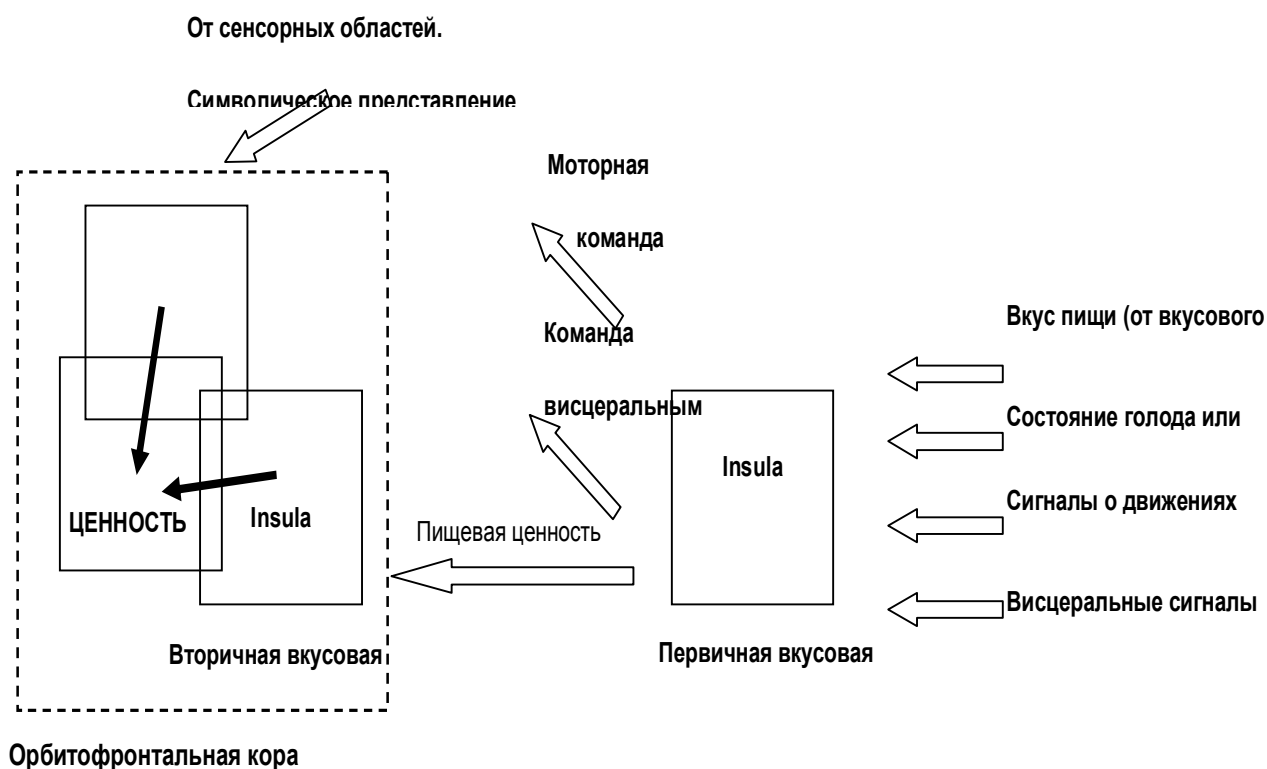


Рис.4. Схема вычисления ценности сенсорного стимула. Показано, что первичная вкусовая кора является центром вкусовой рецепции и управления пищевым поведением. Орбитофронтальная кора получает сигналы о пищевой ценности объектов представленных сенсорными сигналами произвольных модальностей.

чить его от других. Это может быть запах (самый простой и самый древний вариант), либо это должно быть какое-то символическое обозначение. Для простых стимулов типа света лампы или звука (клика, щелчка) символическое обозначение может быть тождественно представлению самого стимула. Для сложных составных образов этот сигнал содержится в верхневисочной

шие и командные переменные. Если вначале система корректировала направление движения к источнику запаха на основании разности интенсивностей запаха воспринимаемых рецепторами находящимися по обоим сторонам тела, то в ходе эволюции место интенсивности запаха (управляющая переменная) заняла пищевая ценность объекта, а место командной переменной,

направления на запах, занял целевой объект, причем в качестве определяющей его сенсорной характеристики сначала сохранился запах, так что производилось сравнение ценностей двух по-разному пахнущих объектов (современная высшая обонятельная область - пириформная кора имеется у всех млекопитающих и ответы ее нейронов отражают пищевую ценность объекта с данным запахом [7]). В конце концов, нервная система научилась сравнивать пищевые ценности объектов, заданных в произвольных сенсорных модальностях. Для такой манипуляции понадобилось представлять разные объекты унифицированно – то есть завести специальную корковую область, содержащую некоторый аналог запаха – символическое представление объекта. Возможно, что для этой цели используется периринальная кора, получающая входы различных сенсорных модальностей, и тесно связанная с базолатеральным отделом миндалины и с орбитофронтальной корой.

Таким образом, можно выделить следующие этапы эволюции поведенческого выбора.

1. Выбор направления на запах = сравнение интенсивностей одного и того же запаха справа и слева. Поворот в сторону большей интенсивности запаха.

2. Выбор одной из двух запаховых целей = сравнение ценностей двух запахов. Движение в сторону запаховой цели имеющей большую ценность.

3. Выбор одного из двух целевых объектов = сравнение ценностей двух объектов, заданных символическим представлением. Действие с целевым объектом, имеющим большую ценность.

Доказательством этого утверждения могут служить экспериментальные данные об участии базолатерального отдела миндалины совместно с орбитофронтальной корой в процессе выучивания ценностей сенсорных сигналов [12]. Обычно экспериментаторы используют процесс переучивания, когда животное сначала обучается тому, что некоторый сенсорный сигнал предвещает вознаграждение, а потом условия опыта меняют, например путем обесценивания пищевой награды [11] (крысам перед опытом разрешали неограниченный доступ к пище). Крысы с удаленным базолатеральным отделом миндалины не переучиваются, они все так же продолжают нажимать на рычаг. Эксперименты с экспрессией ранних генов *c-fos* [13] показали, что базолатеральная часть миндалины активируется именно на стадии обучения, а по мере перехода в хорошо обученную стадию активность базолатеральной миндалины падает.

Заключение

Поведение современных позвоночных животных это последовательное достижение сменяющих друг друга поведенческих целей. В каждый момент, при появлении новых внешних объектов, животное осуществляет выбор: продолжать достижение ранее выбранной цели, или сменить ее на новую. Система выбора поведенческой цели включает сложные манипуляции со входящими сигналами, осуществляющие сравнение

ценности текущего сигнала с ценностями конкурирующих сигналов, вычисленными на основании предыдущего опыта и корректируемыми по результатам совершения пробных действий. Итоговые ценности хранятся в инсулярной и орбитофронтальной коре. Но сами манипуляции исторически сложились на базе операций с запаховыми входами. Решающим здесь явилось то, что запаховая цель характеризуется только одной характеристикой – направлением, и зависит от одной переменной – интенсивности запаха, что максимально упрощало задачу выбора. Система выбора произвольной поведенческой цели, направленная на получение пищевого вознаграждения, использовала уже сложившийся аппарат нахождения цели. Она надстроилась над системой выбора запаховой цели путем добавления действий с другими, незапаховыми сенсорики, и смены ценностного объекта с вомероназального на пищевую, что потребовало существенного усложнения устройств сравнения.

Таким образом, можно утверждать, что целенаправленное действие возникло на базе репродуктивного поведения, включавшего перемещение животного как целого, а конечным судьей, разрешающим или не разрешающим действие в данной конкретной обстановке, служит система, развившаяся из пищевого поведения, не требовавшего перемещений животного, а состоящего только из захвата и усвоения пищи.

Литература

1. M. Halpern The organization and function of the vomeronasal system. //Annu Rev Neurosci. 1987 10:325-62.
2. И.Г. Акмаев, Л.Б. Калимуллина Миндалевидный комплекс мозга: функциональная морфология и нейро-эндокринология. - М.:Наука, 1993.
3. E Lanuza, A Novejarque, J Martínez-Ricós, J Martínez-Hernández, C Agustín-Pavón, F. Martínez-García. Sexual pheromones and the evolution of the reward system of the brain: the chemosensory function of the amygdala. // Brain Res Bull. 2008 .75(2-4):460-6.
4. J. Martínez-Ricós, C. Agustín-Pavón, E. Lanuza, F. Martínez-García Role of the vomeronasal system in intersexual attraction in female mice// Neuroscience. - 153, 2008. 383–395.
5. CJ Shi, MD. Cassell, Cortical, thalamic, and amygdaloid connections of the anterior and posterior insular cortices //J Comp Neurol. 1998
6. J.D. Wallis, & S.W. Kennerley Heterogeneous reward signals in prefrontal cortex// Current Opinion in Neurobiology. - V. 20. 2010. P. 191–198.
7. DJ Calu, MR Roesch, TA Stalnaker, G. Schoenbaum Associative encoding in posterior piriform cortex during odor discrimination and reversal learning// Cereb Cortex. 2007 17(6):1342-9.
8. R. Suárez, D. García-González, F. De Castro Mutual influences between the main olfactory and vomeronasal systems in development and evolution// Frontiers in Neuroanatomy, 24 Dec. 2012
9. S. Frank, S.Kullmann, R. Veit Food related processes in the insular cortex// Frontiers in HUMAN NEUROSCIENCE 23 Aug. 2013

10. D. Ongur, J.L. Price The organization of networks within the orbital and medial prefrontal cortex of rat, monkeys and humans// *Cerebral Cortex* 2000, 10: 206-219

11. B. W. Balleine, A. S. Killcross, A. Dickinson The Effect of Lesions of the Basolateral Amygdala on Instrumental Conditioning // *The Journal of Neuroscience*, 2003 • 23(2):666–675

12. G. Schoenbaum, A.A. Chiba, M. Gallagher, Neuronal encoding in orbitofrontal cortex and basolateral amygdala during olfactory discrimination learning// *Journal of Neuroscience*, 19, 1999. p.1876-1884

13. U.S. Hess, C.M.Gall, R.Granger, G.Lynch Differential patterns of c-fos mRNA expression in amygdala during successive stages of odor discrimination learning // *Learning and memory*, 4,1997. p.262-283

Comparative roles for taste and olfaction in the origin of choice behavior

I. A. Smirnitskaia

Abstract. The main purpose of the basolateral amygdala the behavioral choice is discussed by means of the evolutionary approach in which the system of behavior choice regarded to be a result of vomeronasal, olfaction and taste interaction.

Об архитектуре вычислительных процессов в мозге

В.Л. Дунин-Барковский¹, Я.М. Карандашев, К.П. Соловьева

1-доктор физико-математических наук, профессор

Описывается конструкция сети нейропроцессоров. Каждый из них представляет собой базовую нейронную сеть. Процессоры соединены в сеть и подключены к устройствам ввода и вывода информации.

1. Введение

Многолетние усилия исследователей по вскрытию механизмов работы нейронных систем начинают давать результаты. В предлагаемом тексте описываются элементы представлений о сути и механизмах нейронных информационных процессов. В принципе, мы считаем, что пришло время подготовить сводку сведений о работе мозга, достаточную для создания в срок порядка пяти лет действующей модели мозга человека, и эта работа может быть выполнена за короткий срок [1]. Но сейчас работа находится на промежуточной стадии, поэтому тексты на эту тему являются неизбежно фрагментарными. Авторы настоящего обзора полагают, что публикация постепенно выясняющихся фрагментов картины работы мозга может быть интересна профессионалам. Отрасль нейронаук, связанная с технологически продвинутыми представлениями о работе нейронных систем называется Computational Neuroscience. Следуя [2] мы будем называть эту сферу вычислительными нейроисследованиями. Среди первых Российских монографий по этому предмету – небольшая книга [3], давно вышедшая, но не устаревшая. Мы отсылаем читателя к этому изданию, когда речь заходит о первичных понятиях и относительно общеизвестных фактах.

В тексте работы описываются элементы базовой конструкции, которая может служить основой мыслительной деятельности человека и/или его будущего искусственного интеллектуального партнера.

2. Принцип кооперативности в возбудимых системах

Один из принципов организации нервной деятельности (и вообще, функционирования возбудимых клеток и тканей организма) состоит в использовании коллективных (синергетических, кооперативных, реверберационных) динамических паттернов. Для нервной системы сейчас известно пять классов синергетических процессов. Три из них локализованы внутри отдельных нейронов, а два связаны с процессами, охватывающими сети нейронов. К внутриклеточным процессам относятся: (1) генерация и распространение нервных импульсов, которые связаны со взаимодействием молекул ионных каналов через мембранный потенциал клетки; (2) зависящие от состояния NMDA рецепторов состояния деполяризации дендритов (“NMDA spikes”); (3) вспышки и волны повышенной внутриклеточной кон-

центрации кальция обусловленные специализированными кальциевыми каналами. Два важных класса регенеративных процессов могут идти в сетях нейронов. Это: (4) аттракторный режим работы сети, то есть, такой режим работы нейронной сети, в котором постоянно остаются активными одни и те же нейроны, поддерживающие возбуждение друг друга; (5) режим распространяющейся волны, который со времен Винера и Розенблата [4] называется режимом возбудимой ткани.

Ниже мы рассмотрим каждый из перечисленных режимов подробнее.

2.1. Нервный импульс

Корректные физиологические описания нервного возбуждения впервые сформулированы в Нобелевских (по факту последующего присуждения Премии за эти работы) статьях Гольдмана, Ходжкина и Каца [3]. Сейчас основные механизмы генерации нервных импульсов в целом понятны. Возбуждение той же природы имеет место в сердечной, скелетно-мышечной и (до некоторой степени) в гладкомышечной тканях.

Генерирование нервных импульсов обеспечивается следующими двумя классами основных факторов: (1) разницей концентраций основных «физиологических» ионов (натрий, калий, кальций, хлор) внутри и вне клетки, создаваемой специализированными физиологическими механизмами; (2) наличием ионных каналов, т.е. встроенных в мембрану клетки белковых комплексов. Ионные каналы могут избирательно пропускать через мембрану клетки ионы определённых типов. Для генерирования импульсов самым важным является то, что состояние натриевых и кальциевых каналов влияет на разность потенциалов на мембране и, в свою очередь, зависит от разности потенциалов на мембране. Таким образом, работа ионных каналов происходит в условиях сильного взаимодействия между ними, опосредованного мембранным потенциалом.

Совокупность процессов, связанных с генерацией нервных импульсов относительно хорошо изучена. Количество известных типов ионных каналов составляет десятки и сотни. Существенно, что ионных каналов основных типов много в каждой клетке (по разным оценкам – по 10^4 – 10^5 экземпляров каналов каждого типа), а их взаимодействие приводит к генерации дискретных и одинаковых волноформ мембранного потенциала. Взаимодействие ионных каналов включает очень быструю фазу положительной обратной связи, синхронизирующую все каналы. Детали этих процессов занимают значительные по объёму разделы руководств

по вычислительным нейроисследованиям. По ионной специфичности каналов основную роль в генерации возбуждения играют натриевые каналы. Существенна также роль каналов, избирательных для кальция; в некоторых случаях возбудимость обусловлена исключительно кальциевыми каналами, иногда встречается совместное действие кальциевых и натриевых каналов. От мембранного потенциала зависит состояние каналов, избирательных для других ионов (в первую очередь, калия). В процессах возбуждения они выполняют вспомогательные роли. Вообще, в возбуждении любой нервной клетки принимают участие многие типы ионных каналов (десять и более), при этом работа каждого из них может нести полезную функциональную нагрузку. В частности, участие кальциевых каналов в генерации импульсов может также использоваться для того, чтобы внутри клетки запускались процессы, зависящие от внутриклеточного кальция.

Ещё раз подчеркнем, что в основе самого явления нервного импульса лежит процесс коллективного лавинообразного взаимодействия большого числа ионных каналов, приводящий к генерации стандартной по форме (точечной или распространяющейся) волны мембранного потенциала продолжительностью около 1 мс. Таким образом, многие степени свободы отдельных каналов (каждый канал может в принципе независимо от других каналов находиться в одном из нескольких состояний) порождают один стандартный одномерный (мембранный потенциал нейрона) повторяющийся процесс – нервный импульс. В случае распространения нервного импульса этот стандартный процесс распространяется по нервным волокнам, т.е. представляет автоволны нервной активности.

2.2. Вспышки и волны повышенной концентрации кальция внутри клетки

Это явление связано с тем, что всю клетку опутывает/пронизывает сеть каналов и полостей эндоплазматического ретикула (ЭР). Внутренняя полость ЭР содержит такую же концентрацию кальция, как и внеклеточное пространство (около 2 мМ). В покое в основном пространстве клетки (в *цитозоле*) концентрация кальция составляет около 10^{-8} мМ. Крайне низкая концентрация кальция позволяет использовать его в качестве передатчика сигналов от мембранных процессов к внутриклеточным. Кальций попадает в цитозоль либо снаружи клетки, через мембрану нейрона, либо выделяется из ЭР. Выделение кальция из ЭР осуществляется одним из двух механизмов: (1) через пропускающие только кальций ионные каналы, открываемые веществом, называемым IP_3 , и (2) через ионные каналы, открываемые в присутствии кальция. Эти каналы называют также *рианодиновыми рецепторами* (RyR) [5]. Вещество IP_3 синтезируется на внутренней стороне мембраны клетки при активации метаболитных рецепторов. Наличие сверхпороговой концентрации Ca^{++} вблизи RyR приводит к запуску регенерирующего распространяющегося вдоль ЭР процесса повышения концентрации Ca^{++} . Прекращение выделения Ca^{++} связано с инактивацией ко- или контр-ионов (Na^{+} или Cl^{-}), выделяющегося из ЭР одновременно с Ca^{++}

[5]. RyR-зависимые волны, как и нервные импульсы, представляют собой автоволны. Следует отметить, что в литературе распространено ошибочное мнение о том, что RyR-зависимых Ca^{++} волн нет в клетках Пуркинне мозжечка [6]. В работе [7] показано, что такие волны в клетках Пуркинне могут возникать.

2.3. NMDA-зависимые состояния деполяризации дендритов пирамидных клеток

Речь идёт об обширной группе рецепторов медиатора глутамата. Активация этих рецепторов сама по себе не вызывает постсинаптической реакции нейрона. Однако, если постсинаптический нейрон деполяризован, то активированный NMDA рецептор открывает катионные каналы в постсинаптической мембране. Активация этих каналов сама по себе вызывает деполяризацию мембраны. Это приводит к тому, что несколько активированных глутаматом NMDA рецепторов могут пребывать как в проводящем состоянии, когда они поддерживают своей работой себя и других в проводящем состоянии, так и в непроводящем состоянии при недостаточно положительных значениях мембранного потенциала [8]. Данная возможность зависит от присутствия снаружи вблизи мембраны медиатора глутамата. Когда его нет, устойчиво только непроводящее состояние NMDA рецепторов.

2.4. Реверберационные аттракторы в нейронных сетях

Идея того, что разные группы нейронов могут поддерживать друг друга в активном состоянии обычно приписывается Лоренте-де-Но [9]. Проследивание этой идеи на детальном модельном уровне, по-видимому, впервые было выполнено Дэвидом Марром в теории работы поля CA3 гиппокампа [10]. Анализ показал, что в одной нейронной сети с помощью синапсов Хебба могут быть запомнены несколько разных взаимно случайных состояний активности всех нейронов сети. При этом, по части запомненного состояния может быть воспроизведено всё состояние нейронной сети, то есть, ревербирующая нейронная сеть способна к ассоциативной памяти. Марр оценил количество разных паттернов, которые могут таким образом быть запомнены. Интенсивное развитие теории таких сетей началось после переоткрытия их Хопфилдом [11]. Хопфилд также указал на аналогию нейронных сетей со спиновыми системами, в частности, с так называемыми спиновыми стёклами. Он также заметил, что в нейронных сетях с симметричными связями при автономной работе сети с течением процесса активности минимизируется определённый функционал от активности сети («энергия Хопфилда»). Несколько ранее, Сун-ичи Амари обнаружил, что в сети с локальными связями могут быть устойчивы все состояния, в которых активны несколько рядом расположенных нейронов [12]. Сети, исследованные Марром, Амари и Хопфилдом, представляют примеры сетей с ревербирующими аттракторными состояниями. Такими свойствами нейронные сети могут обладать либо в результате «записи» в сети паттернов активности с

помощью модифицируемых синапсов, либо за счёт связей, сформированных с помощью врождённых молекулярных механизмов [13, 14]. Общей чертой всех аттракторных режимов нейронных сетей является возможность для каждого нейрона принимать участие в нескольких не связанных друг с другом состояниях. В широком смысле такая ситуация представляет аналог использования разных разрядов компьютерных слов в представлении чисел. Однако, в отличие от компьютерных слов, в нейронной сети реально используются не все 2^N возможных состояний нейронной сети (N - число нейронов в сети), а значительно меньшее число состояний. По разным оценкам это число должно иметь порядок $100 N$ (для $N \sim 10\,000$ – предполагаемый размер корковой колонки). Также в отличие от компьютерных слов, в нейронных сетях состояния «0» (нейрон «не активен») и «1» (нейрон «активен») используются с существенно разной частотой. Обычно, число активных нейронов составляет малую часть всех нейронов сети. Оценки показывают, что в среднем один нейрон генерирует два импульса в секунду, а максимальная частота работы нейронов – до 200 импульсов в секунду. Число нейронов, участвующих в активных состояниях нейронных сетей, поддерживается на более или менее постоянном уровне.

Вообще говоря, вопрос о числе нейронов, активных в данном состоянии, легко ставится и решается для дискретных моделей нейронов, функционирующих в дискретном времени. В таких случаях имеет смысл говорить об одновременно возбужденных нейронах. Для нейронных моделей, генерирующих «точечные» импульсы в непрерывном времени, естественно считать, что в любой момент времени (задаваемый действительным числом) может быть активен лишь один нейрон. Аттракторные режимы активности в нейронных сетях с точечными импульсами (непрерывным временем) заключаются в том, что конкретное подмножество нейронов остаётся активным в течение длительного времени. То есть, эти нейроны «довольно часто» генерируют импульсы, а остальные нейроны сети при этом не активны. Более формально вопрос о состояниях нейронной сети непрерывных нейронов можно сформулировать с применением метода *L-plot* для визуализации активности многих нейронов [15]. В частности, по реально зарегистрированной активности дыхательных нейронов продолговатого мозга можно сделать вывод о том, что в процессе дыхания зарегистрированное множество дыхательных нейронов постоянно пребывает в одном из двух состояний с резкими переключениями между этими состояниями в моменты начала вдоха и начала выдоха ([15], рис. 8).

2.5. Волны активности в нейронных сетях с непрерывными аттракторами

Аттракторы в фазовом пространстве нейронной сети могут представлять аналог применяемых в вычислительной математике «вычислительных сеток» для переменных величин, с которыми связывается нейронная сеть. То есть, отдельные точки аттракторов нейронной сети могут быть узлами вычислительных сеток соответствующих размерностей. В работе Понуляка и

Хопфилда [11] показано, что во всякой сети нейронов, обладающей непрерывным (бугорковым) аттрактором, могут распространяться пространственные волны активности. В цитированной работе показано также, что эти волны могут успешно применяться для поиска оптимального пути из любой точки пространства в точку, где представлен объект, необходимый субъекту (то есть, обладателю нейронной сети). В том числе, может быть найден путь к цели из той точки, в которой субъект находится в текущий момент времени. Существенно, что как активность аттракторного типа, так и активность волнового типа могут происходить в одной и той же нейронной сети, при тех же самых связях между нейронами, но в разных режимах работы нейронной сети. Следует подчеркнуть, что в «волновом» режиме работы нейронной сети речь не идёт о волнах активности, распространяющихся в физическом пространстве. Возникающий в нейронной сети режим активности естественно назвать волной Хопфилда (*H*-волной). Формальное определение *H*-волны несколько нечетко, но «физически однозначно». *H*-волна связана с определением аттракторного состояния. В аттракторном состоянии активны нейроны, поддерживающие активность друг друга. Нейроны, принадлежащие данному аттракторному состоянию, в течение неограниченного времени возбуждаются снова и снова. Когда нейронная сеть работает в аттракторном режиме, в ней генерируют импульсы тормозные нейроны, не позволяющие возбуждаться тем нейронам, которые не входят в текущее аттракторное состояние. Далее про нейроны, которые возбуждаются в данной точке аттрактора, мы будем говорить, что они принадлежат данной точке аттрактора. Факт, обнаруженный в работе [11] состоит в том, что можно перестроить режим работы «аттракторной» нейронной сети на «волновой» режим. В волновом режиме, одномоментное возбуждение всех нейронов одной точки аттрактора, в последующие моменты времени вызывает возбуждение нейронов точек аттрактора, соседних с исходной, и так далее. В результате этого процесса, получается как бы непрерывное распространение возбуждения по непрерывному аттрактору нейронной сети. Тормозные нейроны при этом должны быть выключены, но порог нейронов должен быть довольно большим, так чтобы возбуждались только те нейроны, которые входят в соответствующие точки аттракторов. Регулирование порога в волновом режиме может обеспечиваться, например, за счет нейромодуляторов, действующих одновременно и плавно на все нейроны сети. Применение «антихейббовского обучения» при распространении *H*-волны позволяет активности нейронной сети в аттракторном режиме после прохождения *H*-волны распространяться от любой заданной точки аттрактора к точке аттрактора - источнику *H*-волны. Сочетание аттракторной и волновой динамики позволяет одной и той же нейронной сети как представлять информацию о внешнем мире, так и находить решения навигационных задач с помощью уникального механизма, аналогичного применяемому в информационно-вычислительных системах волновому алгоритму поиска решений.

3. Общая схема конструкции мозга

Конструкция мозга человека в принципе не отличается от конструкции мозга других высших млекопитающих. Однако, в основном за счёт увеличения размеров коры больших полушарий (КБП), мозг человека позволяет людям ориентироваться в инструментальных и социальных средах такой сложности, которая недоступна животным. Таким образом, именно устройство КБП необходимо в первую очередь понять, чтобы расшифровать секреты нашего мозга. Общая схема нейровычислительного процесса в коре больших полушарий в бодрствующем состоянии выглядит следующим образом. Кора мозга работает в мультиплексном режиме с частотой смены состояний в темпе либо тета- либо альфа-ритма (от 6 до 12 Hz). Естественно предположить, что в течение одного цикла базовых колебаний мозга чередуются три фазы работы колонок коры: (1) фаза восприятия входной информации; (2) фаза релаксации системы к аттракторному состоянию, определяемому связями внутри корковой колонки; (3) фаза распространения изолированных автоволн. Сохранение информации о предыдущих состояниях в последовательные фазы корковых циклов может осуществляться, например, с помощью «фантомов Цодыкса» [16].

В разных состояниях сна фазы работы коры могут отличаться от фаз работы коры в состоянии бодрствования. Мы ограничимся самой общей информацией о работе коры в состояниях сна.

Кора мозга состоит из клеточных блоков, колонок. Колонки содержат основные клетки (возбуждающие, 80% клеток) и тормозящие интернейроны (20 % клеток). Колонки коры делятся на (1) входные; (2) внутренние и (3) выходные. Входные колонки принимают информацию от сенсорных входов. Выходные колонки посылают информацию на исполнительные органы. Взаимодействие между колонками осуществляется как непосредственно, так и через промежуточные звенья: таламус, базальные ганглии, гиппокамп, амигдала, клауструм и гипоталамус. Кроме того, колонки делятся на два типа: (1) гранулярные колонки и (2) агранулярные колонки.

Основные клетки колонок связаны между собой врождёнными связями. Врождённые связи обеспечивают в колонках возможность режимов, называемых *основными аттракторами колонок*. Основные аттракторы, это множества устойчивых (точнее, квазиустойчивых) состояний нейронов в каждой отдельной колонке, обусловленные врождёнными связями между этими нейронами. Мы понимаем, как могут быть организованы врождённые связи, чтобы аттракторы имели свойства, которые мы называем d -размерностью. Причём значения d - это небольшое целое число. Наибольший интерес представляют аттракторы с $d = 0, 1, 2, 3$. Суть аттракторов состоит в том, что именно их элементы представляют переменные, которыми оперирует мозг. Дискретные переменные представлены аттракторами с $d = 0$, а непрерывные переменные больших размерностей представлены аттракторами с $d = 1, 2, 3$.

Имеется два типа связей между основными нейронами колонок – врожденные и настраиваемые. Колонки связаны друг с другом прямыми и обратными связями. Кроме того, часть колонок связана с сенсорными входами. Прямые связи делятся на непосредственные и кодонные.

Сами по себе врожденные аттракторы, конечно, ничего не представляют. Они могут представлять переменные, с которыми имеет дело нервная система, за счет врождённых, или сформированных во время функционирования («обученных») связей между колонками. Некоторые колонки имеют связи со входом в кору (с сенсорными входами). Другие колонки имеют связи с выходом из коры (моторные выходы коры). Весь мир отображается в нервной системе в виде состояний активности колонок коры головного мозга. Всякому элементу восприятия мира соответствует активность отдельной колонки.

В настоящем тексте мы практически не рассматриваем входы и выходы коры и связи коры со вспомогательными структурами. Достаточно их пока упомянуть. Важнейшие из вспомогательных структур: таламус, гиппокамп, базальные ганглии и мозжечок. Настоящий текст, практически целиком, посвящен типам и способам выполнения основных операций в коре.

Операции первого типа. Их основная функция состоит в том, чтобы активность нейронов колонок приобрела значения. Пример такой операции – построение самоорганизующихся карт Кохонена [17]. Другой пример – формирование дискретного векторного квантования [14]. Построенные примеры операций относятся к связям тех корковых колонок, которые связаны с сенсорными сигналами. Таким образом точки аттракторов этих колонок приобретают значение.

В аттракторном режиме факт активации колонки дискретен: колонка либо активирована, либо нет. Речь идёт об одном цикле работы, т.е. о промежутке времени 80-120 мс. Возбуждена или нет колонка в течение данного цикла работы зависит от того, больше или меньше некоторого порогового числа импульсов было сгенерировано в данной колонке за данный цикл. Эффект, производимый возбуждённой колонкой, зависит как от того, сколько нейронов колонки возбудилось, так и от того, какие именно нейроны возбудились. Возбуждение колонки представляет наличие или отсутствие некоторого одного гностического элемента (ГЭ), а конкретный нейронный паттерн – это параметр этого ГЭ. Размерность параметра может принимать значения $d = 0, 1, 2, \dots$, в соответствии с размерностью аттрактора нейронной сети. ГЭ – это элемент возбуждения коры, наличие или отсутствие которого имеет определённый смысл. В принципе, возбуждение одной колонки может само по себе смысла не иметь, а быть только компонентой ГЭ. То есть, быть полноценными ГЭ, иметь смысл могут определённые комбинации компонент ГЭ. Собственно, ГЭ – это и есть «нейрон бабушки» [18]. В том, что сформулировано выше, важно то, что размер «нейрона бабушки», т.е. число компонент, которые составляют ГЭ, не фиксирован. В частности, этот размер может зависеть от «популярности бабушки». Значение активности элемента восприятия определяется тем эффектом, который вызывается этой активностью.

Для всех колонковых процессов существенную роль играет формат активности нейронов колонки. В аттракторном режиме формат активности стационарный. А в волновом режиме – формат распространяющейся *H*-волны. Как уже говорилось выше, эти два формата тесно связаны. Эффективность мозга как вычислительного устройства определяется тем, что кора может **представлять** состояния, работая в **аттракторном** режиме, и может **находить** пути из одного состояния в другое, работая в **волновом** режиме.

Конечно, понимание мозга должно включать понимание всей совокупности постоянно идущих в мозге процессов. Полный масштаб времени мозга включает одну жизнь. Продолжительность жизни современного человека – не более 120 лет. В целом, в масштабе всей жизни, работа мозга не стационарна. Впрочем, в интервале 25-50 лет возраста человека изменения можно считать незначительными. До 25 лет идёт формирование мозга, после 50 лет – постепенная его деградация. Соответственно, мы будем пока иметь в виду работу мозга человека в этом, рабочем, интервале возраста. Работа мозга подвержена также периодической регуляции, соответствующей чередованию дня и ночи. Регулярные смены состояний мозга связаны с циклом бодрствование-сон. Функции мозга в различные фазы этого цикла различны.

В мозге, как и в современном компьютере, идёт одновременно много процессов. Например, стандартный ноутбук в каждый момент времени сообщает о полусотне параллельно идущих процессах. Использование в компьютерах множества параллельных процессов вовсе не объясняется желанием имитировать работу мозга. Просто в работающей системе, много за чем нужно следить, и удобно, чтобы отдельные блоки работы системы контролировались специализированными программами. В современном компьютере имеется обычно один центральный процессор (или несколько, тесно связанных друг с другом). Поэтому параллельные процессы делят друг с другом «внимание» центрального процессора.

Соответственно, в мозге также постоянно идёт много параллельных процессов. В «фоновом режиме» мозг обеспечивает управление дыханием, регуляцию позы, управление кровообращением и работой внутренних органов, отслеживание всех сенсорных входов. В мозге нет центрального доминирующего процессора. Этот факт с одной стороны облегчает работу параллельных систем мозга, а с другой стороны может быть источником конфликтов, затрудняющих работу параллельных управляющих систем.

Одновременно в организме идёт много процессов. Практически все они в той или иной степени зависят от работы нервной системы. Видимо, имеет смысл говорить о масштабе времени корреляции активности нервной системы и переменных конкретного процесса. При этом надо учитывать масштаб времени автокорреляции и нейронной активности и переменных процесса.

Кроме того, в мозге идут процессы мышления. К ним естественно отнести все процессы, которые начинаются, развиваются, протекают и заканчиваются в самом мозге. Результатом конкретного процесса мышления является решение конкретной задачи. Что такое

«задачи», откуда они берутся, пока не ясно. Более или менее понятно, какая часть коры («префронтальная кора») связана с формулировкой и управлением поиском решения задач.

Размышления – это процесс «свободного полёта мысли». В процессах размышления мозг исследует «закоулки» накопленного знания, по-видимому, с чисто исследовательскими целями. Точно так же, как «крысы-исследователи» лезут в незнакомые лабиринты. Для мозга «внутренний лабиринт» накопленного знания в мозге ничем не отличается от лабиринтов внешнего мира.

4. Многоагентный мозг Конрадта

Интересную модель поведения предложил в своей диссертации Йорг Конрадт [19]. Он разработал конструкцию робота, способного к навигации в реальной среде. Конструкция состоит из простейшей системы управления роботом, который способен двигаться в заданном направлении с обходом препятствий и большого числа «агентов места». Агенты места все умещаются в голову робота и занимаются сбором и упорядочиванием информации о «принадлежащих им» областях окружающего пространства. У робота имеется запас таких потенциальных агентов. Всякий раз, когда робот оказывается в месте, не «приватизированном» ни одним из его агентов места, это место осваивается новым агентом места. Каждый агент знает всё, о своей «вотчине» и знает своих соседей. Такая организация позволяет роботу легко решать задачи, в которые он вовлечён. В частности, робот Йорга решал задачу принести чашечку кофе в ту комнату Института нейроинформатики в Цюрихе, где это кофе потребовалось.

В свободное от выполнения задач пользователей время агенты использовали робота (его глаза и другие органы чувств) для уточнения информации о своём «месте обитания». Для таких исследовательских задач робот передаётся от одного агента к другому. В результате процессов исследования появляются новые агенты места. Или, точнее, какие-то из резервных информационных агентов переходят в разряд действующих. Для того, чтобы конкретный процесс был активен, нужно чтобы в организме был сверхпороговый уровень дефицита потребности, в удовлетворении которой участвует данный процесс. Процесс прерывается или прекращается, если его вытесняет конкурирующий (за общие ресурсы) процесс, или тогда, когда потребность в активном ходе процесса отпадает. Такая распределённая система управления и навигации удобна и легко обозрима. Интересно отметить, что с внешней точки зрения запись того, кто (какой конкретно агент места) и когда пользовался роботом (т.е. «бортовой журнал робота»), представляет как бы «след сознания» робота.

5. Вербальные механизмы

Основные функции речи, в самых общих чертах сводятся: (1) к передаче информации между индивидами; (2) к передаче информации индивидуумом са-

мому себе и ее анализу, т.е. к использованию слов в процессах мышления человека [1].

Известно, что 60 000 лет назад люди не разговаривали, а 40 000 лет назад они уже умели пользоваться речью [20]. За 10-20 тысяч лет, отделяющих человечество с языком от не говорящего человечества, анатомия и физиология людей не могла существенно измениться. В силу этого, нейронные механизмы, задействованные в узнавании элементов речи и манипулировании ими, должны быть теми же самыми, которые использовались людьми при узнавании и манипуляции объектами в доречевую эпоху. В этом – суть гипотезы [1].

Точных данных о механизмах узнавания и манипулирования объектами мира в нервной системе пока нет. Однако сейчас некоторые существенные черты этих механизмов становятся понятными. Речь идет ГЭ [18]. В доязыковую эпоху ГЭ соответствовали только естественным объектам внешнего мира. Рождение языка привело к тому, что значительную долю ГЭ стали составлять элементы речи.

Способы манипуляции новыми («языковыми») ГЭ не могут существенно отличаться от способов манипуляции старыми («доязыковыми») ГЭ. В частности, известный в лингвистике общий принцип: «Язык – это инстинкт» [21], – скорее всего, означает тождественность мозговых механизмов функционирования «новых» и «старых» ГЭ. Итак, «нейромеханика» освоения и использования языка человеком по сути своей не отличается от «нейромеханики» освоения и использования неязыковых типов ментально-моторных инвариантов.

Мышление и язык у человека тесно связаны. Разумеется, многие нервные процессы у животных можно и нужно называть мышлением. Мышление человека отличается от мышления животных, в частности тем, что в мыслительный процесс человека могут включаться слова. Одним из ключей к пониманию мышления человека может быть то, что процессы мышления, включающие слова, реализуются теми же механизмами, какими реализовывались мысли, не содержавшие слов. Исходя из указанных соображений, можно пытаться строить стратегию понимания механизмов мышления. Например, типичная «дословесная мысль» состояла в мысленном отыскании пути из текущего состояния в целевую точку пространства [11], в мысленном проведении «маршрута из точки А в точку Б». Соответственно, существенная часть «словесных» мыслей должна содержать (или опираться на) те же нейронные механизмы, что и мысленный поиск маршрута. Одним из аспектов, важных для понимания механизмов поиска мысленных путей в нейронном ментальном пространстве, содержащем как образы физических объектов, так и образы слов, может быть осознание того, что физический мир существенно трехмерен, а мир слов может иметь гораздо более сложную геометрию и топологию.

В данной гипотезе важна идея о том, что слова явили собой новые и многочисленные элементы среды обитания человека. Не ясно, носило ли изобретение языка первоначально утилитарную или игровую функцию. Но совершенно ясно, что сообщество уже говорящих людей обладает многими преимуществами пе-

ред сообществом людей, не имеющих полноценных средств общения. Именно возникновение/изобретение языка 50 000 лет назад могло быть движущей силой известной из антропологии неолитической «промышленной революции» [20]. Любопытно заметить, что связанное с возникновением языка обильное появление слов в окружении каждого человека стало фактически первым массовым антропогенным изменением (своего рода «загрязнением») окружающей среды в истории человечества.

6. Организация основного цикла нейронной деятельности

Постепенно становится понятной приблизительно следующая общая схема работы коры головного мозга. В период бодрствования функционирование связано с циклами основного ритма коры (6-12 Hz). В последовательные фазы ритма в коре осуществляется:

(1) отображение работой аттракторных сетей текущей сенсорной и внутренней обстановки со специализацией, определяемой локально по зонам коры;

(2) отображение текущих целевых состояний и проведение *H*-волн из целевых состояний в полиаттракторном поле;

(3) определение кода нейронного действия для перехода из текущего состояния в требуемое;

(4) активация нейронного действия по найденному коду и переход к следующему циклу.

При смене фаз цикла работы коры в корковых модулях (на основе механизмов типа «фантомов Цодыкса» [16]) в качестве начальных значений сохраняются значения переменных, достигнутых в конце предыдущего шага основного цикла. Все состояния первой фазы основного цикла (с доступной точностью) последовательно записываются в поле СА₃ гиппокампа. Вместе с состояниями определяется и записывается степень рассогласования получаемых состояний с ожидаемыми.

Для сна функция основной (для информационной работы мозга) деятельности коры была определена Марром. В определенные фазы сна в мозге с помощью гиппокампа повторяются («проигрываются») те эпизоды работы мозга, которые хуже всего предсказывались в состоянии бодрствования. Для этих эпизодов производится формирование (или переформировывание) кодонных преобразований на входе коры и в связях между корковыми модулями [10]. Видимо, побочным эффектом процессов проигрывания записанной ранее информации являются сновидения. Сон также связан с восстановлением биохимического баланса многих тканей и органов организма. В частности, во сне с помощью коры больших полушарий может осуществляется дополнительная регулировка функций желудочно-кишечного тракта [22].

Заключение

Общая схема информационных процессов в мозге во всех деталях, достаточных для их искусственного воспроизведения, пока не ясна. Однако, сейчас идёт процесс формирования понимания многих конкретных

деталей этой схемы. В работах данного направления необходимо избегать две крайности. Во-первых, не следует поддаваться гипнозу «величия» задачи понимания мозга. В конце концов, вся история исследования мозга и история создания управляющих машин и устройств показывает, что за пределами сложных задач ни в психической деятельности человека, ни в задачах технологии не встречается. Всё, в конце концов, как-нибудь оказывается устроено. Во-вторых, конечно, даже тогда, когда решение задач кажется уже найденным, необходимы многочисленные дополнительные проверки, чтобы убедиться в работоспособности и состоятельности получаемых схем.

Работа поддержана Общественным Движением «Россия 2045» и грантом РФФИ № 13-07-01004.

Литература

1. В.Л. Дунин-Барковский К вопросу об обратном конструировании мозга. // В кн.: Глобальное будущее 2045. Конвергентные технологии и трансгуманистическая эволюция. – М.: изд-во МБА, 2013, С. 150-157
2. В.Л. Дунин-Барковский Нейроинформатика в России и мире. //Мозг: фундаментальные и прикладные проблемы: научная сессия общего собрания РАН. Тез.докл.: М.: изд-во Наука, 2010, С. 220 – 223.
3. В.Л. Дунин-Барковский Информационные процессы в нейронных структурах. М.: Наука, 1978, С.166.
4. В.И. Кринский, А.С. Михайлов Автоволны. М.: Знание, 1984, С.63.
5. Л.Р.Арутюнова, В.Л.Дунин-Барковский, Л.М.Чайлахян Моделирование роли Ca^{++} каналов в перемещении Ca^{++} через мембрану эндоплазматического ретикулума. // ДАН. - т. 409 (2), 2006, С. 261 – 265.
6. W.N. Ross Understanding calcium waves and sparks in central neurons. // *Nature Reviews Neuroscience*. Vol. 13 (3), 2010, P. 157-168.
7. L. R.Artinian, E. A. Finch Dual role of ryanodine receptors during parallel fiber – Purkinje cell synaptic transmission. // Soc. Neuroscience Ann. Meeting, New Orleans, 2003, Poster Presentation No. 426.21.
8. S.D. Antic, W.L. Zhou, A.R. Moore, S.M. Short, K.D. Ikonomu. The decade of the dendritic NMDA spike. // *J Neurosci Res*. 2010, Vol. 88(14):2991-3001.
9. R. Lorente De No Cerebral cortex: architecture, intracortical connections, motor projections. //In.: *Physiology of the nervous system*. - N.Y., Oxford Univ. Press, 1949, P. 288– 312.
10. В.Л. Дунин-Барковский Нейронные схемы ассоциативной памяти. //В кн.: Моделирование возбудимых структур. Пущино, НИВЦ АН СССР, 1975, С. 90-141.
11. F. Ponulak, J.J. Hopfield Rapid, parallel path planning by propagating wavefronts of spiking neural activity. // *Frontiers in Computational Neuroscience*, V. 7, article 98, 2013, P. 1-14.
13. W. Dunin-Barkowski Data formats in multi-neuronal systems and brain reverse engineering. // Invited talk, Conference Biologically Inspired Cognitive Architecture 2011. Available from: (<http://2045.ru/pdf/ARLINGTON20111106wldb.pdf>)
14. Я.М. Карандашев Перцептрон с аттракторами. // *Нейроинформатика* 2013, т. 2, С. 125-130.
15. W.L. Dunin-Barkowski, A.T. Lovering, J.M. Orem, et al. L-plotting — A method for visual analysis of physiological experimental and modeling multi-component data. // *Neurocomputing*, 2010, Vol. 74, P. 328-336.
16. G. Mongillo, O. Barak, M. Tsodyks Synaptic theory of working memory. // *Science*. 2008, 319(5869), P. 1543-1546.
17. К.П. Соловьева Формирование самоорганизующихся отображений сенсорных сигналов на непрерывные нейросетевые аттракторы. // *Математическая биология и биоинформатика*. 2013. Т. 8. № 1. С. 234–247.
18. R.Q. Quiroga, I. Fried, C. Koch Brain cells for grandmother. // *Sci Am*. 2013 Feb; 308(2): 30-5.
19. J.-A. Conradt, R. Douglas A distributed cognitive map for spatial navigation. //Laboratory for Sensory Robotics 50yrs Celebration, Munich Technological Institute, Munich, Germany, 2011: Available from: (<http://www.lsr.ei.tum.de/fileadmin/publications/Conradt/CoTeSys2011Workshop-JConradt.pdf>)
20. Г. Маркус Несовершенный человек. Случайность эволюции мозга и ее последствия. - М.: изд-во Альпина нонфикшн 2011, С. 253.
21. N. Chomsky The Science of Language. - Cambridge University Press, NY, 2012, P. 328.
22. Н.Г. Бибилов, И.Н. Пигарев Основные статистические характеристики фоновой активности корковых нейронов кошки в состоянии медленного сна. // *Физиологический журнал имени И.М. Сеченова*, 2013, т. 99 (3), С. 347-361.

On Brain Computing Architecture

W.L. Dunin-Barkowski, I.M. Karandashev, K.P. Solovyeva

Abstract. The construction of a network of neural processors is described. Each of the processors is implemented as a basic neural network. The processors are coupled to each other into the network and are connected to input and output devices.

Модель формирования простого вида импринтинга в процессе обучения и эволюции автономных агентов

В.Г. Редько¹, О.В. Редько

1 – доктор физико-математических наук

Построена и исследована компьютерная модель происхождения простой формы импринтинга в процессе обучения и эволюции автономных агентов. Импринтинг – известное в биологии явление запечатления в памяти животных определенных объектов. В настоящей работе моделируется формирование простого вида импринтинга – запечатления образа матери только что родившимися птенцами и последующего использования этого образа. Продемонстрировало формирование этого вида импринтинга и проанализированы механизмы взаимодействия между обучением и эволюционной оптимизацией автономных агентов в процессе формирования импринтинга. Модель строится на базе предыдущей формальной модели генерации простых навыков автономных агентов в процессе их обучения и эволюции.

1. Введение

В работе [1] была построена и исследована формальная модель взаимодействия между обучением и эволюцией автономных агентов. В модели предполагалось, что имеется популяция агентов, каждый агент имеет генотип и фенотип. Генотип S_{Gk} и фенотип S_{Pk} представляют собой одинаковые по форме цепочки бинарных символов (k – номер агента в популяции). И имеется оптимальная цепочка S_m , которая ищется в процессе обучения и эволюционной оптимизации агентов. Процесс обучения осуществляется путем проб и ошибок, эволюция состоит в отборе и мутациях агентов. Генотип агента S_{Gk} не меняется в процессе его жизни, а фенотип S_{Pk} усовершенствуется в процессе обучения. Потомки агента наследуют генотип своего родителя, отбор осуществляется в соответствии с конечным фенотипом агента, полученным в результате обучения. Начальный фенотип вновь рожденного агента определяется его генотипом, полученным от родителя. В [1] было показано, что обучение может радикально ускорять процесс эволюционной оптимизации. Кроме этого, были проанализированы механизмы взаимодействия между обучением и эволюционной оптимизацией: механизм генетической ассимиляции, при которой индивидуально приобретаемые путем обучения навыки «переизобретаются» эволюцией и записываются непосредственно в генотип агентов, механизм эффекта экранирования, приводящего к тому, что сильное обучение тормозит эволюционную оптимизацию генотипов и механизм влияния нагрузки на обучение, которая приводит к значительному ускорению эволюции и генетической ассимиляции.

Отметим, что хотя генетическая ассимиляция и эффекты экранирования и нагрузки на обучение были ранее известны и в определенной степени изучены путем компьютерного моделирования [2,3], однако механизмы этих эффектов не были четко раскрыты. Эти механизмы в [1] удалось количественно проанализировать, благодаря использованию одной из наиболее четких моделей эволюции – модели квазивидов [4,5] и количественных оценок эффективности эволюционных

алгоритмов, полученных в [6-8].

Настоящая статья посвящена развитию работы [1], в ней построена и исследуется связанная с биологическим прототипом компьютерная модель формирования простого вида импринтинга в процессе обучения и эволюции популяции автономных агентов, аналогов цыплят, которым целесообразно следовать за своей матерью, курицей. Анализируется, каким образом может происходить формирование навыка следования за матерью в процессе обучения и эволюции. Также анализируется, как в этой модели работают механизмы взаимодействия между обучением и эволюционной оптимизацией автономных агентов.

В разделе 2 излагаются основные результаты работы [1]. В разделе 3 построена и исследована компьютерная модель формирования импринтинга в процессах обучения и эволюции.

2. Формальная модель взаимодействия между обучением и эволюцией

2.1. Описание формальной модели

Рассматривается эволюционирующая популяция автономных агентов или модельных особей. Генотип S_{Gk} и фенотип S_{Pk} агента определяются единообразно, а именно, задаются цепочками символов, равных 0 либо 1. Длина этих цепочек N одинакова. Например, как и в [2], можно считать, что генотип кодируется модельной цепочкой ДНК, «буквы» которой равны 0 либо 1, а фенотип определяется нейронной сетью агента, при этом веса синапсов нейронной сети также равны 0 либо 1. Начальные веса синапсов, полученные при рождении, равны генотипу, а в процессе жизни агента эти веса меняются путем обучения.

Популяция состоит из n агентов, генотипы которых равны S_{Gk} , $k = 1, \dots, n$. S_{Gk} представляет собой цепочку символов, S_{Gki} , $i = 1, \dots, N$. Длина цепочки N и численность популяции n велики: $N, n \gg 1$, величины N и n не меняются в ходе эволюции. Символы S_{Gki} рав-

ны 0 либо 1. Предполагается, что N настолько велико, что только малая часть из всех возможных 2^N генотипов может быть представлена в отдельной популяции: $2^N \gg n$. Эволюционный процесс состоит из последовательности поколений. Новое поколение получается из старого путем отбора и мутаций агентов. В нулевом поколении генотипы агентов случайны.

При размножении потомки наследуют генотипы своих родителей S_{Gk} ; генотип агента не меняется в течение его жизни и передается (с малыми мутациями) его потомкам. Мутации состоят в случайной замене символов S_{Gki} . В момент рождения агент получает от своего родителя генотип S_{Gk} , а фенотип S_{Pk} в этот момент времени t равен генотипу: $S_{Pk}(t=1) = S_{Gk}$ (время t дискретно). После рождения агенты живут в течение T_g тактов времени, T_g – время жизни одного поколения. Цепочка S_{Pk} меняется в течение жизни агента путем обучения.

Предполагается, что имеется оптимальная цепочка S_m длины N (компоненты которой также равны 0 или 1), которая ищется в процессе эволюции и обучения агентов. При моделировании цепочка S_m задавалась случайным образом.

Обучение происходит методом проб и ошибок. При обучении меняются символы фенотипов S_{Pk} : каждый такт времени t каждый символ цепочки S_{Pk} с определенной вероятностью p_l меняется на случайный (равный 0 либо 1), и если новый символ совпадает с соответствующим символом оптимальной цепочки S_m , то этот символ сохраняется; в противном случае происходит возврат к старому символу цепочки S_{Pk} . Таким образом, при обучении происходит приближение фенотипов S_{Pk} к оптимальной цепочке S_m .

Отметим, что при интерпретации символов цепочек S_{Pk} как весов синапсов нейронной сети процесс обучения имеет простой смысл: обучение происходит путем поиска оптимальных весов синапсов.

В конце поколения происходит отбор агентов в соответствии с их приспособленностями, определяемыми фенотипами в такт времени $t = T_g$. Обозначим этот конечный фенотип S_{Fk} , т.е. полагаем $S_{Fk} = S_{Pk}(t = T_g)$. Приспособленность произвольного агента S_k определяется расстоянием по Хеммингу $\rho(S_{Fk}, S_m)$ между цепочками S_{Fk} и S_m :

$$f(S_k) = \exp[-\beta \rho(S_{Fk}, S_m)] + \varepsilon, \quad (1)$$

где β – положительный параметр, характеризующий интенсивность отбора, $0 < \varepsilon \ll 1$. Параметр ε характеризует то, что нет сильного различия в приспособленностях агентов, имеющих цепочки S_{Fk} , удаленные на большое расстояние ρ от оптимальной. Роль слагаемого ε можно рассматривать как влияние случайных факторов окружающей среды на приспособленность агентов.

Отбор агентов в новое поколение производится известным рулеточным методом, при котором агенты отбираются в новое поколение вероятностным способом. Выбор агентов в следующее поколение производится n раз, в результате численность популяции во всех поколениях равна n . При каждом выборе вероятность селекции определенного агента пропорциональна его приспособленности. Подробнее о рулеточном методе отбора см., например, [6].

Таким образом, обучаемые агенты отбираются по

конечным фенотипам $S_{Fk} = S_{Pk}(t = T_g)$, т.е. по конечному результату обучения, а по наследству передаются потомкам (с малыми мутациями) генотипы S_{Gk} .

Поскольку потомкам передаются именно генотипы S_{Gk} , полученные от родителей, а не конечные фенотипы S_{Fk} , полученные в результате обучения, то эволюционный процесс имеет дарвиновский характер.

Дополнительно учтено то, что процесс обучения имеет определенную нагрузку на агента и приспособленность агента может уменьшаться под влиянием этой нагрузки. С этой целью рассматриваются модифицированные следующим образом приспособленности агентов:

$$f_m(S_k) = \exp(-ad) \{ \exp[-\beta \rho(S_{Fk}, S_m)] + \varepsilon \}, \quad (2)$$

где α – положительный параметр, учитывающий нагрузку, связанную с обучением, $d = \rho(S_{Gk}, S_{Fk})$ – расстояние по Хеммингу между начальной и конечной цепочками S_{Pk} рассматриваемого агента, т.е. величина, характеризующая интенсивность всего процесса обучения агента ($S_{Gk} = S_{Pk}(t=1)$). Введенный в (2) фактор $\exp(-ad)$ приводит к уменьшению приспособленности агента, это уменьшение тем больше, чем больше было изменение фенотипа S_{Pk} в процессе обучения, т.е. чем больше была нагрузка на обучение.

Отметим, что поскольку начальные генотипы агентов в исходной популяции S_{Gk} случайны, то среднее расстояние по Хеммингу между этими цепочками и оптимальной S_m равно $N/2$. Такое расстояние нужно преодолеть путем обучения и эволюционного поиска.

2.2. Основные результаты исследования формальной модели

2.2.1. Схема и параметры моделирования

Рассматривается два режима работы модели: 1) эволюция с обучением, как изложено выше, 2) «чистая эволюция» – в этом режиме обучения не происходит и считается, что фенотипы не меняются и в каждый момент времени $S_{Pk} = S_{Gk}$. Анализ модели был проведен путем компьютерного моделирования.

Параметры расчетов выбирались таким образом, чтобы эволюционный поиск проходил достаточно эффективно, при этом использовался опыт работы [7], в которой сделаны оценки скорости и эффективности эволюционных процессов. Полагалось, что длина цепочек достаточно велика: $N = 100$. Параметр отбора считался равным $\beta = 1$, это соответствует достаточно высокой интенсивности отбора, при которой скорость эволюционного поиска определяется в основном интенсивностью мутаций. Интенсивность мутаций должна быть не слишком высока, чтобы не было мутационных потерь уже найденных в процессе эволюции удачных агентов, но и не слишком мала, для того, чтобы мутационный поиск происходил достаточно быстро. С учетом этого полагалось, что вероятность замены любого символа в цепочках S_{Gk} при мутациях равна $p_m = N^{-1} = 0.01$. При такой интенсивности мутаций p_m за одно поколение происходит замена примерно одного символа в генотипе агента, т.е. в течение одного поколения за счет мутаций расстояние по Хеммингу ρ между цепочками агентов S_{Gk} и оптимальной цепочкой S_m изменяется в среднем на 1. Отбор приводит к умень-

шению этого расстояния. Поскольку расстояние по Хеммингу от цепочек S_{Gk} агентов нулевого поколения до оптимальной S_m порядка N , то весь процесс эволюции займет порядка $G_T \sim N$ поколений. Такая оценка скорости эволюции справедлива, если численность популяции достаточно велика и флуктуационными эффектами и нейтральной фиксацией агентов (независящей от приспособленности агентов) можно пренебречь. Для выполнения этого условия достаточно потребовать, чтобы характерное время нейтрального отбора (по порядку величины равное n [6,9]) было не меньше G_T , поэтому полагалось $n = G_T = N$.

Итак, параметры расчета были выбраны следующим образом: $N = 100$, $\beta = 1$, $p_m = N^{-1} = 0.01$, $n = N = 100$.

Дополнительно считалось, что вероятность случайной замены символов при обучении достаточно велика: $p_l = 1$, число тактов времени в течение поколения равно $T_g = 2$ (выбор таких параметров p_l и T_g приводит к тому, что обучение происходит достаточно быстро), параметр ε достаточно мал: $\varepsilon = 10^{-6}$. Полученные зависимости были усреднены по 1000 или 10000 расчетам с разными генераторами случайных чисел.

2.2.2. Сопоставление режимов с обучением и без обучения

На рис. 1 представлена зависимость от номера поколения G среднего по популяции расстояния по Хеммингу $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ между генотипом агента S_{Gk} и оптимальной цепочкой S_m . Кривая 1 характеризует режим эволюции с обучением, кривая 2 – режим чистой эволюции (без обучения). Приспособленности агентов определялись выражением (1). Видно, что без обучения при даже малом ε чисто эволюционный процесс (кривая 2) не обеспечивает оптимизации генотипов агентов S_{Gk} , а при наличии обучения (кривая 1) явно происходит приближение к оптимальному агенту S_m .

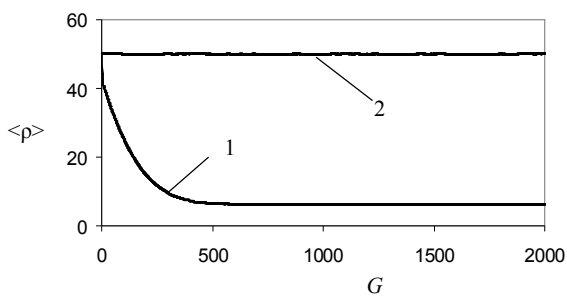


Рис. 1. Зависимость среднего по популяции расстояния генотипов до оптимума $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{Gk}, S_m) \rangle$ от номера поколения G ; 1 – режим с обучением, 2 – режим чистой эволюции (усреднено по 1000 расчетам).

Анализ расчетов показывает, что постепенное уменьшение величин $\rho(S_{Gk}, S_m)$ при наличии обучения происходит следующим образом. Сначала при обучении распределение агентов $n(\rho)$ смещается в сторону меньших ρ , в результате чего величины $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$ становятся достаточно малыми, такими, что $\exp[-\beta \rho(S_{Fk}, S_m)] \sim \varepsilon$. Далее в соответствии с приспособленностями (1) из этих агентов в следующее поколение

отбираются агенты с малыми значениями $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$. Генотипы S_{Gk} отобранных агентов должны быть достаточно близки к конечным фенотипам S_{Fk} (полученным в результате обучения и отбора) этих агентов. Поэтому в результате отбора происходит селекция агентов, генотипы которых S_{Gk} также приближаются к S_m . То есть происходит генетическая ассимиляция: уменьшение величин $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$, полученное в результате обучения, переходит в уменьшение величин $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$. Отсутствие уменьшения ρ в процессе чистой эволюции обусловлено следующим. Все агенты исходной популяции удалены от оптимальной, для них $\rho \sim N/2 = 50$, следовательно, $\exp(-\rho) \sim 10^{-22}$ и $\exp(-\rho) \ll \varepsilon$. Это означает, что все агенты популяции имеют приблизительно одинаковое значение приспособленности, равное ε , поэтому в случае чистой эволюции вообще не происходит селекции агентов и приближения к S_m . Приближение к S_m происходит только при наличии обучения.

Механизм генетической ассимиляции представлен на рис. 2, на котором показано распределение агентов $n(\rho)$ по ρ в разные моменты первого поколения. Кривая 1 на рис. 2 показывает распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для исходных генотипов агентов. Кривая 2 показывает распределение по $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$ для агентов после обучения, но еще до отбора. Кривая 3 показывает распределение по $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$ для агентов, отобранных в соответствии с приспособленностями (1). Кривая 4 показывает распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для генотипов отобранных агентов в конце поколения. Генотипы отобранных агентов S_{Gk} достаточно близки к цепочкам обученных и отобранных агентов S_{Fk} , поэтому распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для генотипов (кривая 4) перемещается в сторону распределения для конечных фенотипов S_{Fk} (кривая 3). В итоге после отбора в конце поколения формируется распределение генотипов по ρ (кривая 4), более близкое к распределению, представленному кривой 3, чем начальное распределение генотипов (кривая 1). В следующих поколениях происходит аналогичное дальнейшее смещение распределения $n(\rho)$ в сторону меньших значений ρ .

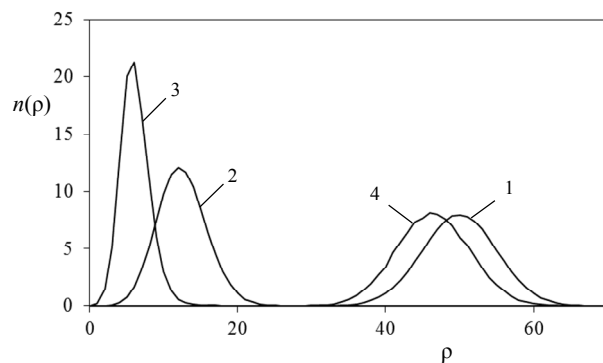


Рис. 2. Распределение агентов $n(\rho)$ по величинам ρ в первом поколении эволюции: 1 – распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для исходных генотипов до обучения, 2 – распределение по $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$ для агентов после обучения, но еще до отбора, 3 – распределение по $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$ для отобранных агентов, 4 – распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для генотипов отобранных агентов в конце поколения (усреднено по 10000 расчетам).

Подчеркнем, что в результате обучения происходит смещение к достаточно малым ρ , при которых роль

параметра ε значительно уменьшается и существенно различаются приспособленности (1), так что после обучения происходит эффективный отбор агентов с меньшими значениями $\rho(S_{Fk}, S_m)$. Для того, чтобы изложенный механизм работал, обучение должно быть достаточно сильным. О другой роли сильного обучения сказано в следующем подразделе.

Приведенные результаты показывают, что обучение может приводить к эффективной генетической ассимиляции, к радикальному ускорению эволюционного процесса.

2.2.3. Эффект экранирования

Однако сильное обучение может не только способствовать эволюции, но и препятствовать нахождению оптимального генотипа. Как показывает кривая 1 на рис. 1, при больших G уменьшение $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{Gk}, S_m) \rangle$ ограничено: конечное значение $\langle \rho \rangle$ остается достаточно большим, приблизительно равным 6.2. Это связано с тем, что для сильного обучения ($p_l = 1$, $T_g = 2$) при $G \sim 1000$ нахождение фенотипов S_{Pk} , близких к S_m , происходит практически независимо от генотипа S_{Gk} . Поэтому на конечных стадиях эволюции не происходит приближения генотипов к S_m . Наблюдается эффект экранирования, обсуждавшийся в работе [3]. Как показано в [1], эффект экранирования можно существенно ослабить, если уменьшить интенсивность обучения, например, положив $p_l = 0.5$.

Итак, эффект экранирования приводит к тому, что сильное обучение препятствует эволюционной оптимизации генотипов, так как оно увеличивает шансы нахождения хорошего фенотипа независимо от генотипа агента. В рассмотренном случае экранирование наблюдается в конце эволюционного процесса.

2.2.4. Влияние нагрузки на обучение на моделируемые процессы

В [1] был также проведен анализ влияния нагрузки на обучение на моделируемые процессы эволюции с обучением. Для этого случая приспособленность определялась выражением (2). Расчет проводился для указанных выше параметров ($N = n = 100$, $\beta = 1$, $p_m = 0.01$, $p_l = 1$, $T_g = 2$, $\varepsilon = 10^{-6}$), величина α полагалась равной 1. Результаты расчета представлены на рис. 3, 4. На рис. 3 показана зависимость среднего по популяции расстояния $\langle \rho \rangle$ между генотипами S_{Gk} и S_m от номера поколения G . На рис. 4 представлена динамика распределения особей $n(\rho)$ по величинам ρ в первом поколении эволюции.

Сравнение рис. 1, 2 и рис. 3, 4 показывает, что учет нагрузки на обучение приводит к дополнительному значительному ускорению эволюции. Это ускорение связано с тем, что с учетом нагрузки при отборе происходит более сильная селекция агентов, для которых мало расстояние между начальной и конечной цепочками $\rho(S_{Gk}, S_{Fk})$, чем для случая приспособленности (1), т.е. дополнительно минимизируется изменение фенотипа S_{Pk} в процессе обучения. В конце эволюционного процесса (при $G = 200$) агенты, для которых $\rho = 0$, в популяции присутствуют в начале поколения, после

обучения и после отбора, т.е. при наличии нагрузки на обучение эффект экранирования не наблюдается.

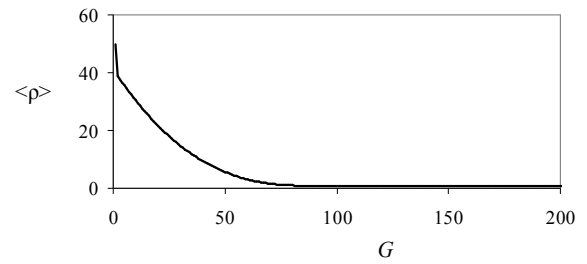


Рис. 3. Зависимость среднего по популяции расстояния до оптимума $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{Gk}, S_m) \rangle$ для генотипов агентов от номера поколения G ; приспособленность агентов определяется выражением (2), уменьшение $\langle \rho \rangle$ происходит намного быстрее, чем на рис. 1 (усреднено по 1000 расчетам).

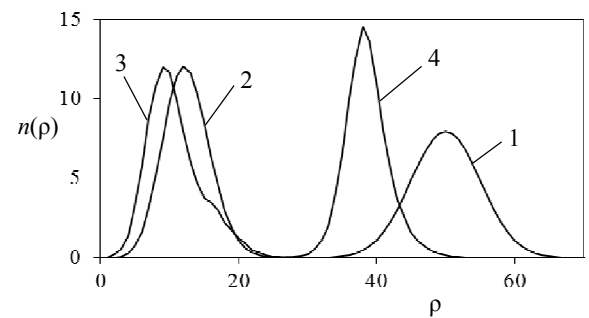


Рис. 4. Распределение агентов $n(\rho)$ по величинам ρ в первом поколении эволюции с учетом нагрузки на обучение; приспособленность агентов определяется выражением (2); 1 – распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для исходных генотипов до обучения, 2 – распределение по $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$ для агентов после обучения, но еще до отбора, 3 – распределение по $\rho = \rho(S_{Fk}, S_m)$ для отобранных агентов, 4 – распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для генотипов отобранных агентов в конце поколения; смещение распределения 4 к меньшим значениям ρ существенно больше, чем на рис. 2 (усреднено по 10000 расчетам).

Подчеркнем, что генетическая ассимиляция для случаев приспособленностей, определяемых выражением (1) и выражением (2), имеет одну и ту же природу. В обоих случаях генотипы отобранных агентов S_{Gk} приближаются к цепочкам S_{Fk} обученных и отобранных особей. Т.е. на рис. 2 и рис. 4 кривые 4 приближаются к кривым 3. Существенное различие состоит только в том, что с учетом нагрузки на обучение это приближение становится более эффективным. В результате при использовании приспособленности, вычисляемой согласно (2), генетическая ассимиляция становится более четко выраженной.

Таким образом, учет нагрузки на обучение приводит к тому, что происходит более эффективная селекция особей с генотипами S_{Gk} , близкими к S_m , и процесс эволюции значительно ускоряется.

2.3. Выводы по формальной модели

Таким образом, в рамках формальной модели количественно охарактеризованы 1) механизм генетической ассимиляции приобретаемых навыков, 2) эффект

экранирования и 3) влияние нагрузки на обучение на исследованные процессы. Подробнее детали исследования формальной модели изложены в работе [1].

3. Модель формирования импринтинга

3.1. Описание модели

Предполагаем, что имеется эволюционирующая популяция агентов, аналогов цыплят. Популяция находится в двумерном клеточном мире. Также имеется агент-курица, которая может перемещаться по этому миру. Основная задача агентов-цыплят – следовать за курицей. Если цыпленок удался от курицы, то он может погибнуть. Как и формальной модели предполагаем, что каждый агент-цыпленок имеет генотип и фенотип. Генотипы меняются в процессе эволюции. Фенотип меняется индивидуально в процессе обучения агента-цыпленка. Фенотип цыпленка определяет его систему управления. Численность популяции агентов-цыплят равна n .

Двумерный клеточный мир состоит из $N_x N_y$ клеток (координаты агентов могут быть равны $i_x = 1, 2, \dots, N_x$, $i_y = 1, 2, \dots, N_y$). Причем мир замкнут: например, если агент перемещается из клетки с координатами (N_x, i_y) вправо, то он попадает в клетку с координатами $(1, i_y)$. Время дискретно: $t = 1, 2, \dots$. Курица перемещается через каждые T_M тактов времени в случайном направлении на одну клетку.

Система управления агента-цыпленка определяет, какие действия должен цыпленок выполнять в той или иной ситуации. Ситуация определяется наличием или отсутствием курицы в той или иной клетке поля зрения цыпленка. Поле зрения включает в себя 5 клеток: ту клетку, в которой цыпленок находится, и 4-х ближайших к нему клеток (клеток впереди, сзади, направо и налево от цыпленка). Таким образом, имеется $N_S = 6$ возможных ситуаций: курица находится в одной из 5-ти клеток поля зрения цыпленка, либо цыпленок не видит курицы. Имеется $N_A = 5$ возможных действий цыпленка: не перемещаться или перемещаться в одну из ближайших 4-х клеток. В системе управления цыпленка имеется $N_R = N_A N_S = 30$ правил, определяющих соответствие между ситуациями и действиями. Каждое правило имеет вес W_i , $i = 1, 2, \dots, N_R$. Чтобы было удобно сопоставление с формальной моделью, предполагаем, что веса правил бинарны: веса W_i равны 0 либо 1. Веса правил оптимизируются путем обучения и эволюционного поиска. Совокупность этих N_R правил представляет собой систему управления цыпленка.

При рождении цыпленка он получает от своего родителя генотип S_G , т.е. начальные веса правил. Генотип агента-цыпленка в процессе его жизни остается неизменным. Фенотип цыпленка в каждый момент времени t равен текущему вектору весов его правил: $S_P(t) = W(t)$. Как и для формальной модели полагаем, что в момент рождения цыпленка его фенотип равен генотипу: $S_P(t = 1) = S_G$. В процессе жизни цыпленка текущие веса правил оптимизируются путем обучения.

Выбор действия k -м цыпленком определяется имеющимися у него в данный момент времени t веса-

ми правил $W_k(t) = S_{Pk}(t)$ следующим образом. Рассматриваются все правила, соответствующие текущей ситуации, среди этих правил выбираются те, для которых вес равен 1. Если такое правило одно, то выполняется действие, соответствующее этому правилу. Если таких правил оказалось несколько, то случайно выбирается произвольное из них, и действие, соответствующее этому выбранному правилу, выполняется. Если для данной ситуации в данный момент времени все веса правил равны 0, то выбирается действие, случайное из 5-ти возможных.

Обучение, т.е. изменение текущих весов правил $W(t)$, происходит следующим образом. Если в определенной ситуации в результате действия цыпленка он приблизился к курице, то вес, соответствующий этим ситуации и действию, становится равным 1. Если, наоборот, цыпленок удался от курицы, то соответствующий вес становится равным 0. Такое обучение предполагает, что цыпленок может положительно оценивать наличие курицы в поле зрения и свое приближение к курице. При компьютерном моделировании обучение обычно происходило каждый такт времени. Вводилась также возможность уменьшения интенсивности обучения, для этого случая каждый такт времени обучение производилась с определенной вероятностью p_l ($p_l < 1$).

Кроме этого, сделано дополнительное предположение относительно изменения весов правил. Считается, что вес правила, соответствующего текущей ситуации и выполненному действию, становится равным 1, если после действия цыпленок находится в одной клетке с курицей, и что вес правила становится равным 0, если после применения этого правила курицы нет в поле зрения цыпленка. Это дополнительное предположение способствует разумному формированию весов правил в начальные моменты жизни цыпленка. Это предположение модели будем называть дополнительным предположением А.

Так как цыпленок может оценивать свое приближение к курице или удаление от курицы, то предполагаем, что если в предыдущий момент времени цыпленок удался от курицы, то в данный момент времени он возвращается обратно. Это предположение модели будем называть дополнительным предположением В.

В каждый такт времени оценивается уровень безопасности цыплят L . Считается, что этот уровень безопасности максимален ($L = L_{max}$), если цыпленок находится в одной клетке с курицей. Этот уровень средний ($L = L_{mean}$), если цыпленок находится в соседней клетке с курицей, и этот уровень минимальный ($L = L_{min}$), если цыпленок удален от курицы больше чем на одну клетку.

Популяция агентов-цыплят эволюционирует в течение ряда поколений. В начале первого поколения веса правил для цыплят различны и случайны. Каждое поколение длится T_g тактов времени, в течение этого времени цыплята обучаются. В начальный момент каждого поколения курица и все цыплята помещаются в одну клетку. Считается, что к концу поколения цыплята вырастают и рожают своих потомков. В конце поколения определяются приспособленности агентов-цыплят и производится отбор агентов в следующее поколение. Чем выше приспособленность агента, тем

больше потомков он может родить.

Приспособленности определяются следующим образом. После того, как пройдет T_g тактов времени, выделяется еще определенное количество тактов T_{test} , в течение которых цыплята уже не обучаются, а только оценивается их уровень безопасности. То есть вычисляется сумма всех уровней безопасности для каждого агента-цыпленка в течение T_{test} тактов времени:

$$L_{sk} = \sum_{t=T_g+1}^{T_g+T_{test}} L_k(t), \quad (3)$$

где $L_k(t)$ – уровень безопасности k -го цыпленка в такт времени t , L_{sk} – суммарный уровень безопасности этого цыпленка. L_{sk} характеризует уровень безопасности цыпленка в конце поколения после того, как обучение закончилось. Приспособленность цыпленка определяется разностью между максимально возможным суммарным уровнем безопасности, равным $L_{sm} = L_{max}T_{test}$, и реально достигнутым уровнем L_{sk} , а именно, приспособленность k -го цыпленка равна:

$$f_k = \exp[-\beta(L_{sm} - L_{sk})] + \varepsilon, \quad (4)$$

где β – положительный параметр, характеризующий интенсивность отбора, $0 < \varepsilon \ll 1$. Как и в формальной модели роль слагаемого ε можно рассматривать как влияние случайных факторов окружающей среды на приспособленность агентов.

В конце поколения производится отбор агентов, родителей будущих агентов нового поколения, рулеточным методом. При каждом выборе вероятность селекции определенного агента-родителя пропорциональна его приспособленности. Каждый агент-родитель рождает одного потомка. Эти потомки составляют следующее поколение. Выбор агентов-родителей производится n раз, в результате численность популяции во всех поколениях равна n . Генотип S_G передается от родителя к потомку с небольшими мутациями.

Такая форма отбора подразумевает, что приспособленность неявно характеризует вероятность гибели цыплят при удалении их от курицы: чем больше суммарный уровень безопасности цыпленка L_{sk} , тем выше его приспособленность.

Таким образом, как и формальной модели, обученные агенты-цыплята отбираются по конечным фенотипам $S_{pk}(t = T_g)$, т.е. по весам правил $W_k(t = T_g) = S_{pk}(t = T_g)$, полученным в результате обучения, а по наследству передаются потомкам (с малыми мутациями) генотипы S_{Gk} , т.е. начальные веса правил агентов.

Поскольку потомкам передаются именно генотипы S_{Gk} , полученные от родителей, а не конечные фенотипы $S_{pk}(t = T_g)$, полученные в результате обучения, то эволюционный процесс имеет дарвиновский характер.

Как и в формальной модели, учтем то, что процесс обучения может иметь определенную нагрузку для агента-цыпленка и приспособленность агента может уменьшаться под влиянием этой нагрузки. С этой целью, помимо приспособленностей (4), будем рассматривать и модифицированные следующим образом приспособленности агентов:

$$f_{mk} = \exp(-ad_k) \{ \exp[-\beta(L_{sm} - L_{sk})] + \varepsilon \}, \quad (5)$$

где α – положительный параметр, учитывающий нагрузку, связанную с обучением, $d_k = r(W_k(t=1), W_k(t=T_g))$ – расстояние по Хеммингу между

начальной и конечной цепочками весов правил W_k k -го агента-цыпленка, т.е. величина, характеризующая интенсивность всего процесса обучения этого агента. Фактор $\exp(-ad_k)$ приводит к уменьшению приспособленности агента, это уменьшение тем больше, чем больше было изменение весов правил W_k в процессе обучения, т.е. чем больше была нагрузка на обучение.

3.2. Результаты моделирования

3.2.1. Схема и параметры моделирования

В основном будем использовать подход, примененный при исследовании формальной модели. Сопоставим режим эволюции с обучением и режим чистой эволюции, проанализируем механизмы генетической ассимиляции, эффект экранирования и влияние нагрузки на обучение на исследуемые процессы. Дополнительно рассмотрим еще некоторые особенности модели агентов-цыплят, в частности, проанализируем возможную роль случайной гибели агентов-цыплят при удалении их от курицы.

Генотип и фенотип агента-цыпленка определяются набором весов правил. Генотип S_G – начальный набор весов правил, передаваемый по наследству, фенотип S_p – текущий набор весов правил. Длина цепочек N генотипа и фенотипа равна числу правил, т.е. $N = N_R = 30$.

Как и формальной модели, введем понятие оптимальной цепочки S_m (длина этой цепочки также равна N), которая определяет веса правил следующим образом:

1) Если ситуация такова, что агент-цыпленок находится в той же клетке, что и курица, то ему не нужно перемещаться, т.е. цыпленку целесообразно осуществлять действие «покой». Считаем, что для оптимальной цепочки S_m вес правила, соответствующего указанным ситуации и действию, равен 1, веса правил, соответствующих этой ситуации и всем остальным действиям, для цепочки S_m полагаем равными 0.

2-5) Если курица находится в одной из ближайших к цыпленку клеток (таких клеток четыре), то цыпленку целесообразно перемещаться в эту ближайшую клетку (например, если курица находится в клетке справа от цыпленка, то цыпленку нужно переместиться на одну клетку вправо). Считаем, что для оптимальной цепочки S_m веса правил, соответствующих таким ситуациям и целесообразным в этих ситуациях действиям, равны 1.

Веса всех остальных не указанных правил для цепочки S_m полагаем равными 0.

Таким образом, оптимальная цепочка S_m определяет веса правил, при которых цыпленок четко следует за курицей. Только 5 символов этой цепочки равны 1, все остальные равны 0.

Используя оптимальную цепочку S_m , можно определить расстояние по Хеммингу ρ между генотипом S_G или фенотипом S_p рассматриваемого цыпленка и S_m . При вычислении этого расстояния одну ситуацию, при которой курица находится вне поля зрения цыпленка, можно не учитывать, так как в этой ситуации оптимальное действие цыпленка не определено. Таким образом, определяем расстояние до оптимума $\rho = \rho(S_G, S_m)$ (или $\rho = \rho(S_p, S_m)$), как число несовпадающих

символов в цепочках S_G и S_m (или в цепочках S_P и S_m) для 5-ти указанных ситуаций (курица в той же клетке, что и цыпленок, или в соседней с цыпленком клетке) и для 5-ти возможных действий цыпленка. Это расстояние может меняться от 0 до 25.

Аналогично формальной модели, основные параметры эволюционных процессов определяем следующим образом: $N = 30$, $\beta = 1$, $p_m = 0.03 \approx N^{-1}$, $n = N = 30$. Здесь p_m – вероятность случайной замены символа в генотипе при мутациях в процессе наследования генотипов (т.е. при передаче генотипа родителя к потомку при переходе от старого поколения к новому).

Новые параметры модели формирования импринтинга выбираем следующим образом. Длительность поколения считаем достаточно большой $T_g = 100$, время тестирования при оценке сформировавшегося к концу поколения уровня безопасности считаем равным $T_{test} = 100$, параметр ε считаем достаточно малым: $\varepsilon = 0.001$. Эта величина ε выбрана таким образом, чтобы стохастичность внешней среды существенно влияла на приспособленности агентов-цыплят, а обучение приводило к существенному различию приспособленностей агентов. Уровни безопасности считались равными: $L_{max} = 1$ (если цыпленок находится в одной клетке с курицей), $L_{mean} = 0.5$ (если цыпленок находится в соседней клетке с курицей) и $L_{min} = 0$ (если цыпленок удален от курицы больше, чем на одну клетку). Размеры клеточного мира считаем равными: $N_x = N_y = 10$. Длительность остановок курицы, т.е. время между случайными перемещениями курицы в большинстве расчетов было равно: $T_M = 10$, в отдельных указанных ниже расчетах величина T_M уменьшалась. Большинство расчетов было выполнено при вероятности обучения $p_l = 1$, только в одном случае считалось $p_l = 0.1$.

Анализ модели был проведен путем компьютерного моделирования. Полученные зависимости усреднялись по 1000 или 100000 расчетам с разными генераторами случайных чисел.

Сначала изложим результаты, аналогичные формальной модели.

3.2.2. Сопоставление режимов с обучением и без обучения

На рис. 5 представлены зависимости среднего по популяции расстояния по Хеммингу $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ между генотипом агента S_{Gk} и оптимальной цепочкой S_m от номера поколения G для режимов эволюции с обучением (кривая 1) и режима чистой эволюции, без обучения (кривая 2). Приспособленности агентов определялись выражением (4). Видно, что оптимизация геномов для чисто эволюционного процесса (кривая 2) происходит значительно медленней, чем при наличии обучения (кривая 1). Это аналогично явному преимуществу режима с обучением по сравнению со случаем чистой эволюции для формальной модели (рис. 1). Хотя имеется определенное отличие от формальной модели: в настоящей модели в режиме чистой эволюции хоть медленно, но оптимизация генотипов происходит. Это обусловлено тем, что в данном случае размерность N цепочек S_{Gk} существенно меньше, чем для расчетов в формальной модели.

Зависимость среднего по популяции расстояния по

Хеммингу $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ между генотипом агента S_{Gk} и оптимальной цепочкой S_m от номера поколения G для режима чистой эволюции для больших значений G представлена на рис. 6. Видно, что без обучения эволюционный процесс поиска оптимума сходится в течение нескольких тысяч поколений. Анализ расчетов для чистой эволюции показывает, что при $G = 15000$ генотипы S_{Gk} , равные оптимальной цепочке S_m , в популяции присутствует, т.е. эволюционный поиск обеспечивает нахождение оптимального генотипа.

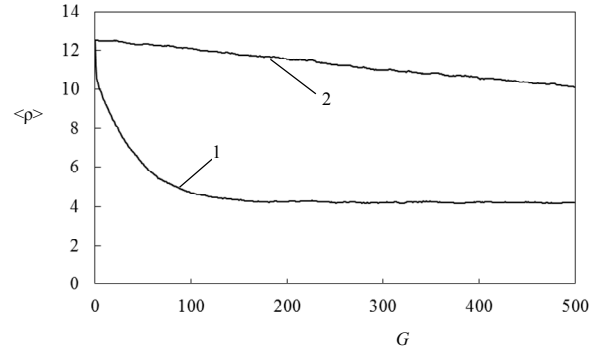


Рис. 5. Зависимость среднего по популяции расстояния между генотипами агентов S_{Gk} и оптимальной цепочкой $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{Gk}, S_m) \rangle$ от номера поколения G ; 1 – режим с обучением, 2 – режим чистой эволюции (усреднено по 1000 расчетам).

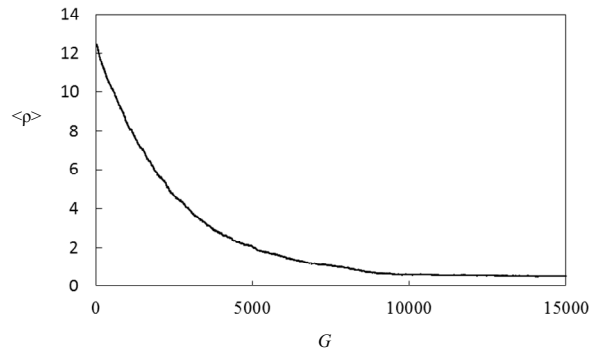


Рис. 6. Зависимость среднего по популяции расстояния между генотипами агентов S_{Gk} и оптимальной цепочкой $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{Gk}, S_m) \rangle$ от номера поколения G для режима чистой эволюции (усреднено по 1000 расчетам).

Как и в случае формальной модели, при наличии обучения происходит генетическая ассимиляция приобретаемого в процессе обучения навыка приближения к оптимуму. Механизм генетической ассимиляции представлен на рис. 7, на котором показано распределение агентов $n(\rho)$ по ρ в разные моменты первого поколения. Кривая 1 показывает распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для исходных генотипов цыплят-агентов в начале поколения. Кривая 2 показывает распределение по $\rho = \rho(S_{Pk}, S_m)$ для фенотипов агентов после обучения, но еще до отбора. Кривая 3 показывает распределение по $\rho = \rho(S_{Pk}, S_m)$ для агентов, отобранных в соответствии с приспособленностями (4). Кривая 4 показывает распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для генотипов отобранных агентов в конце поколения. Генотипы отобранных агентов S_{Gk} достаточно близки к фенотипам обученных и отобранных агентов S_{Pk} , поэтому распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для генотипов (кривая 4) пе-

ремещается в сторону распределения для конечных фенотипов S_{P_k} (кривая 3). В итоге после отбора в конце поколения формируется распределение генотипов по ρ (кривая 4), более близкое к распределению, представленному кривой 3, чем начальное распределение генотипов (кривая 1).

Сопоставление рис. 2 и рис. 7 показывает, что механизм генетической ассимиляции для агентов-цыплят такой же, как и для формальной модели. Генетическая ассимиляция происходит за счет того, что при обучении распределение фенотипов агентов смещается в сторону оптимума, а в дальнейшем при отборе выбираются те агенты, генотипы которых также приближаются к оптимуму.

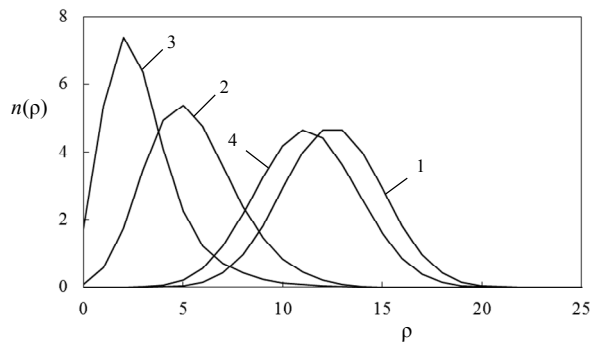


Рис. 7. Распределение агентов-цыплят $n(\rho)$ по величинам ρ в первом поколении эволюции: 1 – распределение по $\rho = \rho(S_{G_k}, S_m)$ для исходных генотипов до обучения, 2 – распределение по $\rho = \rho(S_{P_k}, S_m)$ для фенотипов агентов после обучения, но еще до отбора, 3 – распределение по $\rho = \rho(S_{P_k}, S_m)$ для отобранных агентов, 4 – распределение по $\rho = \rho(S_{G_k}, S_m)$ для генотипов отобранных агентов в конце поколения (усреднено по 100000 расчетам).

Рис. 5-7 показывают, что, как и в формальной модели, в данном случае обучение радикально ускоряет эволюционный процесс.

3.2.3. Эффект экранирования

Для того чтобы изложенный механизм генетической ассимиляции работал, обучение должно быть достаточно сильным. Однако сильное обучение может не только способствовать эволюции, но и препятствовать нахождению оптимального генотипа. Как показывает кривая 1 на рис. 5, при больших G уменьшение $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{G_k}, S_m) \rangle$ ограничено: конечное значение $\langle \rho \rangle$ остается достаточно большим, приближенно равным 4.2. Это связано с тем, что для сильного обучения ($p_l = 1$) при $G \sim 500$ нахождение фенотипов S_{P_k} близких к оптимальной цепочке S_m , происходит практически независимо от генотипа S_{G_k} . Поэтому на конечных стадиях эволюции не происходит приближения генотипов к S_m . Наблюдается эффект экранирования [3].

Этот эффект иллюстрируется рис. 8, на котором представлены распределения по ρ для генотипов и фенотипов агентов-цыплят в конце эволюционного процесса (при $G = 500$) для режима эволюции с обучением в разные моменты последнего поколения. Видно, что распределение по $\rho = \rho(S_{P_k}, S_m)$ для фенотипов после обучения включает в себя агентов, для которых $\rho = 0$, т.е. после обучения находятся фенотипы S_{P_k} , равные

оптимальной цепочке S_m . В результате в конце эволюционного процесса дальнейшего уменьшения $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{G_k}, S_m) \rangle$ не происходит. Это подтверждается тем, что в конце эволюции показанные на рис. 8 кривые от поколения к поколению практически не смещаются, а также согласуется с тем, что при больших G величина $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{G_k}, S_m) \rangle$ становится постоянной (кривая 1 на рис. 5). То, что распределения по ρ в генотипах в начале поколения и после отбора (кривые 1 и 4 на рис. 8) немного различаются, связано с наличием мутаций, которые приводят к небольшому увеличению ρ в начале поколения по сравнению с распределением после отбора. Итак, при $G \sim 500$ за счет обучения находятся оптимальные фенотипы, и в результате этого дальнейшего уменьшения $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{G_k}, S_m) \rangle$ в популяции не происходит.

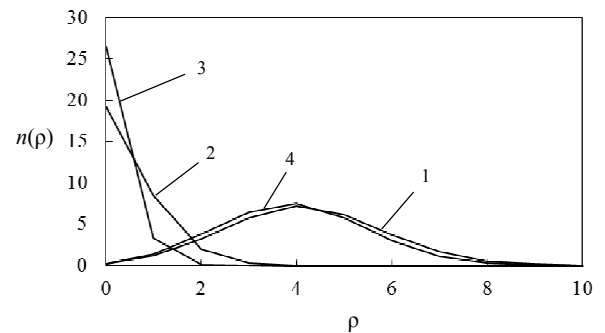


Рис. 8. Распределение агентов $n(\rho)$ по величинам ρ при $G = 500$: 1 – распределение по $\rho = \rho(S_{G_k}, S_m)$ для исходных генотипов до обучения, 2 – распределение по $\rho = \rho(S_{P_k}, S_m)$ для фенотипов агентов после обучения, но еще до отбора, 3 – распределение по $\rho = \rho(S_{P_k}, S_m)$ для отобранных агентов, 4 – распределение по $\rho = \rho(S_{G_k}, S_m)$ для генотипов отобранных агентов в конце поколения (усреднено по 1000 расчетам).

Эффект экранирования можно существенно ослабить, если уменьшить вероятность обучения p_l . Зависимость $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{G_k}, S_m) \rangle$ от номера поколения G для ослабленного обучения ($p_l = 0.1$, прочие параметры расчета остались прежними, расчет проведен для режима эволюции с обучением) представлена на рис. 9.

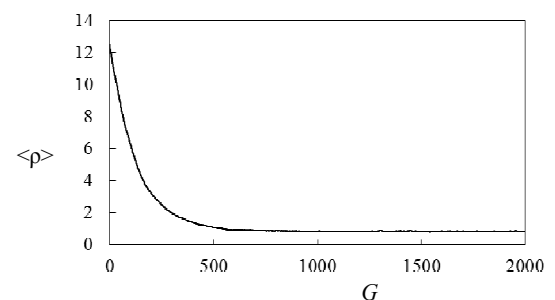


Рис. 9. Зависимость среднего по популяции расстояния генотипов до оптимума $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{G_k}, S_m) \rangle$ от номера поколения G при ослабленном обучении: $p_l = 0.1$ (усреднено по 1000 расчетам); по сравнению со случаем $p_l = 1$ скорость обучения уменьшается, но находятся генотипы агентов, значительно более близкие к S_m .

Для этого случая скорость уменьшения $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{G_k}, S_m) \rangle$ в процессе эволюции падает, однако конечное значение $\langle \rho \rangle$ значительно уменьшается и ста-

новится приближенно равным 0.85. Итак, значение $\langle \rho(S_{Gk}, S_m) \rangle$ в конце эволюции значительно уменьшается по сравнению со случаем $p_l = 1$. Следовательно, ослабление обучения приводит к тому, что происходит отбор агентов, генотипы которых достаточно близки к S_m . Более того, анализ результатов расчетов показывает, что в конце эволюционного процесса (при $G = 2000$) агенты, для которых $\rho = 0$, в популяции присутствуют в начале поколения, после обучения и после отбора.

Итак, эффект экранирования приводит к тому, что сильное обучение препятствует эволюционной оптимизации генотипов, так как оно увеличивает шансы нахождения хорошего фенотипа независимо от генотипа агента. В рассмотренном случае экранирование наблюдается в конце эволюционного процесса. Ослабление обучения приводит к уменьшению экранирования.

3.2.4. Влияние нагрузки на обучение на моделируемые процессы

Был проведен анализ влияния нагрузки на обучение на моделируемые процессы эволюции с обучением. Для этого случая приспособленность определялась выражением (5). Расчет проводился для указанных выше параметров ($N = n = 30$, $\beta = 1$, $p_m = 0.03$, $p_l = 1$, $T_g = 100$, $\varepsilon = 0.001$, $T_M = 10$), величина α полагалась равной 1. Результаты расчета представлены на рис. 10, 11. На рис. 10 показана зависимость среднего по популяции расстояния $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{Gk}, S_m) \rangle$ между генотипами S_{Gk} и оптимальной цепочкой S_m от номера поколения G . На рис. 11 представлена динамика распределения агентов $n(\rho)$ по величинам ρ в первом поколении эволюции в разные моменты поколения.

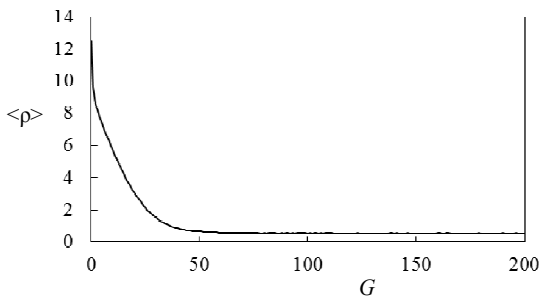


Рис. 10. Зависимость среднего по популяции расстояния до оптимума $\langle \rho \rangle = \langle \rho(S_{Gk}, S_m) \rangle$ для генотипов агентов от номера поколения G ; приспособленность агентов определяется выражением (5), уменьшение $\langle \rho \rangle$ происходит значительно быстрее, чем на рис. 5 (усреднено по 1000 расчетам).

Сравнение рис. 5, 7 и рис. 10, 11 показывает, что учет нагрузки на обучение приводит к дополнительному значительному ускорению эволюции. Это ускорение связано с тем, что с учетом нагрузки при отборе происходит более сильная селекция агентов, для которых мало расстояние между начальным и конечным фенотипами (т.е. между генотипами и конечными фенотипами), чем для случая приспособленности (4). Отметим, что распределение 3 на рис. 11 имеет немного «растянутый хвост» справа, это можно интерпретировать как то, что в соответствии с приспособленностями

(5) преимущественно отбираются агенты, для которых мало изменение фенотипов S_{P_k} при обучении. В конце эволюционного процесса (при $G = 200$) агенты, для которых $\rho = 0$, в популяции присутствуют в начале поколения, после обучения и после отбора. Эффекта экранирования в данном случае не наблюдается.

Таким образом, учет нагрузки на обучение приводит к тому, что происходит более эффективная селекция агентов с генотипами S_{Gk} , близкими к S_m , генетическая ассимиляция усиливается и процесс эволюции значительно ускоряется.

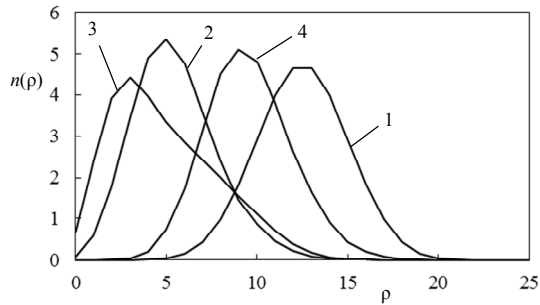


Рис. 11. Распределение агентов-цыплят $n(\rho)$ по величинам ρ в первом поколении эволюции с учетом нагрузки на обучение; приспособленность агентов определяется выражением (5); 1 – распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для исходных генотипов до обучения, 2 – распределение по $\rho = \rho(S_{P_k}, S_m)$ для фенотипов агентов после обучения, но еще до отбора, 3 – распределение по $\rho = \rho(S_{P_k}, S_m)$ для отобранных агентов, 4 – распределение по $\rho = \rho(S_{Gk}, S_m)$ для генотипов отобранных агентов в конце поколения; смещение распределения 4 к меньшим значениям ρ существенно больше, чем на рис. 7 (усреднено по 100000 расчетам).

3.2.5. Анализ особенностей модели формирования импринтинга

Итак, в модели формирования импринтинга наблюдаются те же эффекты взаимодействия между обучением и эволюцией, что и в формальной модели: генетическая ассимиляция приобретаемых в процессе индивидуального обучения навыков, эффект экранирования и существенное влияние нагрузки на обучение на процессы поиска оптимума. Основное отличие состоит в том, что в модели формирования импринтинга чисто эволюционная оптимизация (без обучения) весов правил, хоть и медленно, но происходит (см. рис. 1, 5, 6). Это различие связано с тем, что размерность пространства поиска N в данной модели значительно меньше, чем для представленных результатов в формальной модели.

Кроме приведенных результатов, для модели формирования импринтинга были проанализированы следующие ее особенности: 1) была проанализирована возможная роль явной гибели агентов-цыплят при удалении их от курицы, рассматривались 2) возможность более частого перемещения курицы, чем предполагалось выше, 3) возможность случайного выбора действия агентом-цыпленком независимо от весов правил, 4) возможность исключения из модели дополнительных предположений А и В (см. выше, в описании мо-

дели) о режиме обучения и дополнительном перемещении цыплят обратно в случае понижения их уровня безопасности.

Явная гибель цыплят предполагала, что агент-цыпленок с определенной вероятностью P_D в рассматриваемый такт времени погибает, если его уровень безопасности в этот такт равен минимальному значению L_{min} . Расчет с учетом такой явной гибели цыплят для режима эволюции с обучением иллюстрируется рис. 12. На рисунке представлена зависимость среднего по популяции расстояния $\langle r \rangle = \langle r(S_{Gk}, S_m) \rangle$ между генотипами S_{Gk} и оптимальной цепочкой S_m от номера поколения G для случаев явного учета гибели (кривая 2) и для обычного расчета (кривая 1). Напомним, что в обычном расчете гибель цыплят учитывалась неявно: предполагалось, что приспособленность агентов учитывает такую возможность в величине приспособленности (4). Кривая 2 на рис. 12, помимо этого, учитывает и явную гибель цыплят, вероятность P_D для этого расчета составляла величину: $P_D = 0.1$.

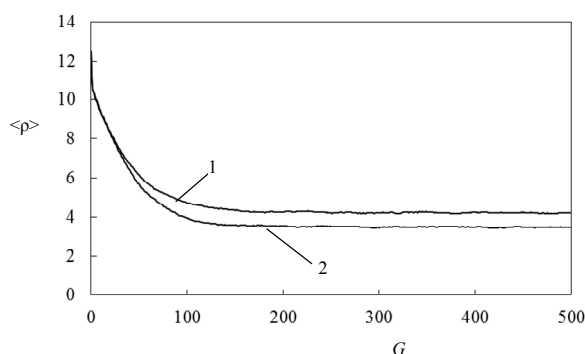


Рис. 12. Зависимость среднего по популяции расстояния между генотипами агентов S_{Gk} и оптимальной цепочкой $\langle r \rangle = \langle r(S_{Gk}, S_m) \rangle$ от номера поколения G ; 1 — обычный режим, 2 — расчет с учетом явной гибели цыплят при $P_D = 0.1$ (усреднено по 1000 расчетам).

Видно, что учет явной гибели цыплят не существенно меняет процесс поиска оптимальных весов правил. Скорость уменьшения $\langle r \rangle$ для обеих зависимостей на рис. 12 приблизительно одинакова. Ослабевает только эффект экранирования: для обычного расчета конечное значение $\langle r \rangle \approx 4.2$, с учетом гибели цыплят эта величина уменьшается до значения $\langle r \rangle \approx 3.5$. Варьирование вероятности гибели цыплят P_D приводило к аналогичным результатам.

При рассмотрении более частого перемещения курицы полагалось, что время покоя курицы между случайными перемещениями на одну клетку равно не $T_M = 10$, как выше, а несколько меньше, например, $T_M = 4$ или $T_M = 5$. Результаты расчетов для таких величин T_M показали, что уменьшение T_M приводит примерно к тем же результатам, что ослабление обучения: скорость уменьшения $\langle r \rangle = \langle r(S_{Gk}, S_m) \rangle$ немного падает, конечное значение $\langle r \rangle$ также уменьшается. Например, при $T_M = 4$ конечное значение $\langle r \rangle$ составило: $\langle r \rangle \approx 2.2$.

При случайном выборе действий цыплятами-агентами независимо от весов правил поиска оптимальных весов правил, естественно, не происходило.

В компьютерной программе была предусмотрена

возможность исключения одного или двух дополнительных предположений А и В о режиме обучения и дополнительном перемещении цыплят обратно в случае понижения их уровня безопасности. Расчеты показали, что такие исключения не приводили с существенным изменениям в поиске оптимума. Хотя наблюдались небольшие особенности, характерные для расчетов с ослабленным обучением. Например, при исключении двух предположений А и Б наблюдалось уменьшение скорости уменьшения $\langle r \rangle$ примерно в 2 раза по сравнению с обычным расчетом в режиме эволюции с обучением, конечная величина $\langle r \rangle$ составила: $\langle r \rangle \approx 2.6$.

4. Обсуждение, заключение

В настоящей работе построена и исследована модель формирования импринтинга для агентов-цыплят, которым целесообразно следовать за курицей. Модель предполагает, что цыпленок способен отличать благоприятную ситуацию (быть рядом с курицей) от неблагоприятной (быть далеко от курицы). Эта способность лежит в основе процесса обучения цыплят. Если мать-курица вообще отсутствует (например, в случае, когда цыплят вырастили в инкубаторе), то аналогичная способность отличать благоприятную ситуацию от неблагоприятной также возможна, если вместо курицы имеется другой, подобный курице защитник цыплят. Такую возможность несложно рассмотреть в рамках настоящей модели, видоизменяя величины уровней безопасности L_{max} , L_{mean} и L_{min} .

Таким образом, модель формирования импринтинга предполагает, что у цыплят имеется врожденное понятие «защитник» и врожденное представление о том, что приближение к защитнику полезно, а удаление от защитника вредно для цыплят. Если такого врожденного чувства у цыплят нет, то рассмотренное в модели обучение невозможно, в этом случае формирование импринтинга возможно только в результате эволюционной оптимизации поведения агентов-цыплят. В нашей модели эволюционная оптимизация иллюстрируется рис. 6. При такой оптимизации отбор агентов-цыплят осуществляется по их суммарному уровню безопасности, т.е. импринтинг в этом случае формируется, хотя и медленней, чем при наличии обучения.

Подводя итог, отметим, что построена и исследована модель формирования импринтинга и изучены механизмы взаимодействия между обучением и эволюционной оптимизацией в процессах формирования импринтинга.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке программы Президиума РАН № 15, проект 2.10 и РФФИ, проект 13-01-00399. Авторы благодарны Л.Е. Цитоловскому за предложение моделировать явление импринтинга.

Литература

1. В.Г. Редько Модель взаимодействия между обучением и эволюционной оптимизацией // *Математи-*

ческая биология и биоинформатика (электронный журнал). – Т.7. № 2. 2012. С. 676-691.

URL: http://www.matbio.org/2012/Redko_7_676.pdf

2. G.E. Hinton, S.J. Nowlan How learning can guide evolution // *Complex Systems*. – V. 1. 1987. P. 495-502.

3. G. Mayley Guiding or hiding: Explorations into the effects of learning on the rate of evolution // In: *Proceedings of the Fourth European Conference on Artificial Life (ECAL 97)*. Eds. Husbands P. and Harvey I. Cambridge, Massachusetts: MIT Press. 1997. P. 135-144.

4. М. Эйген *Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул*. – М.: Мир, 1973.

5. М. Эйген, П. Шустер *Гиперцикл. Принципы саморганизации макромолекул*. – М.: Мир, 1982.

6. В.Г. Редько *Эволюция, нейронные сети, интеллект: Модели и концепции эволюционной кибернетики*. – М.: УРСС. 2005.

7. В.Г. Редько, Ю.Р. Цой Оценка эффективности эволюционных алгоритмов // *Доклады АН*. – Т. 404. № 3. 2005. С. 312-315.

8. В.Г. Редько, Ю.Р. Цой Оценка скорости и эффективности эволюционных алгоритмов // В: *Бионические информационные системы и их практические применения*. Под ред. Зинченко Л.А., Курейчика В.М., Редько В.Г. М.: Физматлит, 2011. С. 109-126.

9. М. Кимура *Молекулярная эволюция: теория нейтральности*. – М.: Мир, 1985.

The model of formation of the simple form of imprinting in the process of learning and evolution of autonomous agents

V.G. Red'ko, O.V. Red'ko

Abstract. The computer model of the origin a simple form of imprinting in the process of learning and evolution of autonomous agents is constructed and investigated. Imprinting is a well-known biological phenomenon of impression in memory of animals of certain objects. The current paper models the formation of the simple form of imprinting: imprinting the image of the mother by newborn chicks and subsequent use of this image. The formation of this kind of imprinting is demonstrated by means of computer simulation. The mechanisms of interaction between learning and evolutionary optimization of autonomous agents in the process of formation of imprinting are analyzed. The model is constructed on the basis of previous formal model of generation of simple skills of autonomous agents during their learning and evolution.

Многоагентная модель прозрачной рыночной экономической системы

В.Г. Редько¹, З.Б. Сохова

1 – доктор физико-математических наук

Построена многоагентная модель прозрачной рыночной экономической системы, состоящей из сообщества инвесторов и производителей, которые налаживают взаимодействие внутри сообщества с помощью легких агентов-посланников. Продемонстрирована работоспособность модели и получены первые результаты ее исследования. Показана эффективность предложенной системы взаимодействия между инвесторами и производителями.

1. Введение

В настоящей работе предлагается многоагентная модель прозрачной рыночной экономической системы, и приводятся первые результаты исследования модели. Предлагаемый метод основан на подходе работ [1, 2], в которых использовались легкие агенты-посланники (аналоги искусственных муравьев, «artificial ants») для оптимизации работы производственного цеха и маршрутизации движения автомобилей в городе.

В данной работе легкие агенты (агенты-разведчики и агенты намерений) используются для оптимизации функционирования сообщества инвесторов и производителей.

В отличие от других работ по многоагентным экономическим моделям (см., например, [3]), в которых анализируется поведение нескольких групп агентов, мы рассматриваем упрощенное экономическое сообщество, состоящее только из инвесторов и производителей, что позволяет построить и проанализировать модель достаточно четко. В этом сообществе имеется конкуренция, которая может приводить вымиранию тех или иных инвесторов и/или производителей, что характерно для рыночной экономики. Тем не менее, хотя экономика и рыночная, экономические характеристики каждого из субъектов сообщества открыты для всего сообщества и взаимодействие между субъектами однозначно определено. Поэтому такую экономическую систему можно назвать «честной рыночной экономикой».

2. Общие положения модели

Полагаем, что имеется сообщество, состоящее из N инвесторов и M производителей, каждый из которых имеет определенный капитал K_{inv} и K_{pro} . Инвесторы и производители функционируют в среде прозрачной экономики, т.е. предоставляют всему сообществу информацию о собственном текущем капитале и прибыли. Время t дискретно. Имеются периоды функционирования сообщества инвесторов и производителей. Например, каждый период может быть равен одному году. Далее T – номер периода.

В начале каждого периода T отдельный инвестор делает вклад в m производителей ($m \leq M$). В конце

периода производитель возвращает каждому инвестору капитал, вложенный инвестором, а также распределяет полученную им прибыль между инвесторами пропорционально их вкладам, при этом определенная доля прибыли остается у производителя.

Перед началом периода, т.е. в конце предыдущего периода $T-1$ каждый инвестор принимает решение: какой капитал вложить в того или иного производителя в следующий период T . Это происходит следующим образом. Организуется итеративный процесс. На первой итерации инвесторы рассылают легких агентов-разведчиков, которые определяют, какой капитал имеется у каждого производителя. На основании данных о капитале производителя инвестор определяет, какую прибыль можно будет получить в конце следующего периода от этого производителя. После сделанной оценки ожидаемых прибылей инвестор выбирает m производителей, от которых можно получить наибольшую прибыль. Затем инвесторы рассылают агентов намерений производителям с указанием того капитала, который они намереваются вложить в того или иного производителя. После этого производители оценивают тот капитал, который у них получится после вклада инвесторов, и ту прибыль, которая у них получится в конце следующего периода. Далее происходит переход к следующей итерации и вновь инвесторы рассылают агентов-разведчиков, которые определяют, какой капитал будет у производителей уже с учетом намеченных предварительно вкладов всех возможных инвесторов, и какую прибыль можно будет получить в конце периода от производителей. Затем инвесторы снова выбирают наиболее выгодных производителей с учетом намеченных на первой итерации вкладов инвесторов в производителей. Потом снова рассылаются агенты намерений, и производители переоценивают свой капитал и ожидаемую прибыль. Такой итеративный процесс продолжается в течение достаточного большого числа итераций. После чего инвесторы принимают окончательное решение о вкладах в производителей в следующий период. Эти вклады равны намеченным инвесторами вкладам на последней итерации.

Если капитал инвестора или производителя стал меньше определенного малого порога Th_{min_inv} или Th_{min_pro} , то инвестор или производитель прекращает

свою деятельность. Если же капитал инвестора или производителя стал больше высокого порога Th_{max_inv} или Th_{max_pro} , то такой инвестор или производитель порождает «потомка», при этом «родитель» отдает потомку половину своего капитала.

Основным предметом данного исследования является проверка работоспособности модели, в частности, проверка сходимости итеративного процесса, при котором инвесторы могут менять намечаемые вклады в производителей.

3. Принципы функционирования сообщества производителей и инвесторов

Считаем, что перед началом периода T i -й производитель имеет собственный исходный капитал C_{i0} . К капиталу каждого производителя добавляются вклады от инвесторов. Будем полагать, что производитель вкладывает в производство весь имеющийся у него к началу периода капитал C_i :

$$C_i = C_{i0} + \sum_{j=1}^N C_{ij}, \quad (1)$$

где C_{ij} – капитал, вложенный j -м инвестором в i -го производителя в начале периода. Считаем, что зависимость прибыли производителя от его текущего капитала нелинейная $Pr_i(C_i)$: прибыль мала при малом капитале C_i и достигает насыщения или очень медленно возрастает при большом C_i : $Pr_i(C_i) = k_i F(C_i)$, где функция F одинакова для всех производителей, а коэффициент k_i характеризует эффективность производства i -го производителя. Величины k_i в конце каждого периода случайно варьируются. При компьютерном моделировании считалось, что функция

$F(x)$ имеет вид $F(x) = \frac{x^2}{x^2 + a^2}$, где a – положительный параметр.

В конце периода T производитель возвращает инвесторам вложенный ими капитал. Кроме того, производитель выплачивает инвесторам часть полученной им прибыли. Причем j -му инвестору отдается часть прибыли, пропорциональная сделанному им вкладу в данного производителя:

$$Pr_{ij} = k_{\text{выпл}} Pr_i(C_i) \frac{C_{ij}}{\sum_{l=1}^N C_{il}}, \quad (2)$$

где C_i – текущий капитал (в начале периода) i -го производителя, $k_{\text{выпл}}$ – параметр, характеризующий долю выплат прибыли инвесторам, $0 < k_{\text{выпл}} < 1$. Сам производитель получит остальную часть своей прибыли Pr_i , равную:

$$Pr_i = (1 - k_{\text{выпл}}) Pr_i(C_i). \quad (3)$$

4. Схема итеративного процесса принятия решения инвесторами

Изложим подробнее схему итеративного процесса. Итеративный процесс, в течение которого

определяются вклады инвесторов в производителей, состоит в следующем. На первой итерации инвесторы рассылают агентов-разведчиков по всем производителям и определяют, какой капитал имеется у каждого производителя в данный момент времени. Причем на первой итерации не учитываются вклады других инвесторов в производителей. Далее инвесторы оценивают величины A_{ij} , характеризующие прибыль, ожидаемую от i -го производителя в течение нового периода T . Эти величины A_{ij} равны:

$$A_{ij} = k_{\text{dist}} Pr_{ij} = k_{\text{dist}} k_{\text{выпл}} k_i F(C_{i0}) \frac{C_{ij}}{\sum_{l=1}^N C_{il}}, \quad (4)$$

где C_{il} – капитал, вложенный l -м инвестором в i -го производителя, C'_{i0} – предполагаемый исходный капитал i -го производителя в начале следующего периода (на первой итерации без учета вкладов инвесторов), $k_{\text{dist}} = k_+$ либо k_- , $k_+ > k_-$. Положительные параметры k_+ , k_- определяют степень доверия инвестора производителю, т.е. полагается, что степень доверия инвестора к проверенному и непроверенному производителю равна k_+ и k_- , соответственно. Эти параметры учитывают то, что инвестор предпочитает проверенных им производителей. При моделировании полагалось $k_+ = 1$, $k_- = 0.5$.

Затем инвестор ранжирует всех производителей в соответствии с величинами A_{ij} и выбирает m наиболее выгодных производителей, т.е. тех производителей, которым соответствуют наибольшие величины A_{ij} . Далее j -й инвестор формирует намерение распределить весь свой капитал K_{invj} по всем выбранным производителям, пропорционально полученным оценкам A_{ij} (для невыбранных производителей формально полагалось $A_{ij} = 0$). А именно, намечается, что вклад j -го инвестора в i -го производителя C_{ij} будет равен:

$$C_{ij} = K_{invj} \frac{A_{ij}}{\sum_{i=1}^M A_{ij}}. \quad (5)$$

На второй итерации каждый инвестор с помощью агентов намерений оповещает тех производителей, которых он выбрал для инвестиций, о величине капитала, который он намеревается вложить в каждого из производителей.

На основе этих данных производители оценивают свой новый исходный капитал C'_{i0} , который они ожидают после получения капитала от всех инвесторов, т.е. у производителя формируется оценка

суммы $\sum_{l=1}^N C_{il}$ и новая оценка своего капитала в соответствии с выражением (1).

Затем инвесторы снова высылают агентов-разведчиков всем производителям и оценивают новый капитал производителей C'_{i0} с учетом намерений других инвесторов. Делаются оценки прибыли, согласно выражению (4), в котором уже учитывается

сумма вкладов всех инвесторов $\sum_{l=1}^N C_{il}$. Далее производители ранжируются, и капитал инвестора

распределяется пропорционально новым полученным оценкам A_{ij} . Инвесторы снова рассылает агентов намерений, для того чтобы сообщить производителям намеченные величины вкладов.

Делается достаточно большое число таких итераций, после чего итерации заканчиваются, и инвестор принимает окончательное решение, какие вложения сделать на следующий период T . Окончательные вклады равны величинам C_{ij} , полученным инвесторами на последней итерации.

В конце каждого периода T капиталы производителей пересчитываются с учетом амортизации (например, это может быть, амортизация оборудования производителя) $K_{pro}(T+1) = k_{amr} K_{pro}(T)$, где k_{amr} – коэффициент амортизации ($0 < k_{amr} \leq 1$). Аналогично учитываются расходы инвесторов (для удобства соответствующие величины будем называть коэффициентами инфляции) и пересчитывается капитал инвесторов $K_{inv}(T+1) = k_{inf} K_{inv}(T)$, где k_{inf} – коэффициент инфляции ($0 < k_{inf} \leq 1$).

5. Результаты моделирования

Параметры моделирования. Описанная выше модель была реализована в виде компьютерной программы на языке Java. Использовались следующие параметры расчетов:

- общее число периодов в рассматриваемых процессах: $N_T = 100$,
- число итераций в каждом периоде: $k_{iter} = 20$,
- максимальные пороги капиталов производителей и инвесторов (превышение этих порогов приводило к делению производителя или инвестора): $Th_{max_pro} = 1$, $Th_{max_inv} = 1$,
- минимальные пороги капиталов производителей и инвесторов (если капитал становился ниже этих порогов, то соответствующий производитель или инвестор погибал): $Th_{min_pro} = 0.01$, $Th_{min_inv} = 0.01$,
- максимальное число производителей и инвесторов: $N_{pro_max} = 100$, $N_{inv_max} = 100$,
- начальное количество производителей и инвесторов: $N_{pro_initial} = 50$, $N_{inv_initial} = 50$,
- максимальное число производителей m , в которых мог вкладывать капитал инвестор, обычно полагалось $m = 100$,
- доля выплат из полученной производителями прибыли инвесторам, обычно полагалось $k_{выпл} = 0.3$,
- характерная величина случайной вариации коэффициентов k_i , определяющих эффективность i -го производителя: $\Delta k = 0.5$,
- параметр функции $F(x)$, определяющей величину прибыли: $a = 1$ или $a = 10$.

Величины k_i , характеризующие эффективность производителей, исходно (в начале расчета) были случайными, равномерно распределенными в интервале $[0,1]$.

При делении производителя или инвестора «родитель» отдавал половину своего капитала «потомку». Деление осуществлялось в конце периода.

Начальные капиталы инвесторов и производителей исходно были случайными, они были равномерно распределены в интервале $[0,1]$.

Исследование модели проводилось путем компьютерного моделирования.

Изложим результаты моделирования. Начнем с важного вопроса модели: сходится ли итеративный процесс, в котором могут постоянно меняться вклады инвесторов в разных производителях? То есть проверим сходимость итеративного процесса. Затем представим зависимость капитала инвесторов и производителей от номера периода для основного компьютерного расчета, для которого амортизацией и инфляцией пренебрегаем: $k_{amr} = 1$, $k_{inf} = 1$, остальные параметры указаны выше. После чего, отталкиваясь от основного расчета, представим влияние различных факторов на исследуемые процессы. Так как при расчетах использовались случайные процессы, для получения надежных данных всюду проводилось усреднение по 100 различным расчетам, соответствующих разным генераторам случайных чисел.

Моделирование проводилось для двух значений параметра a функции $F(x)$: $a = 1$ и $a = 10$. Разные значения параметра a соответствуют разному характеру зависимости величины прибыли от капитала производителя. Так, при величинах $a = 10$ и величинах $C_{i0} \sim 10$ дифференцировка прибылей производителей для разных капиталов более существенна, чем при $a = 1$.

Проверка сходимости итеративного процесса.

Была проверена зависимость конечного суммарного капитала производителей для типичного расчета в зависимости от числа итераций в каждом периоде. Результаты для основного значения $a = 1$ (параметра функции $F(x)$) представлены на рис. 1.

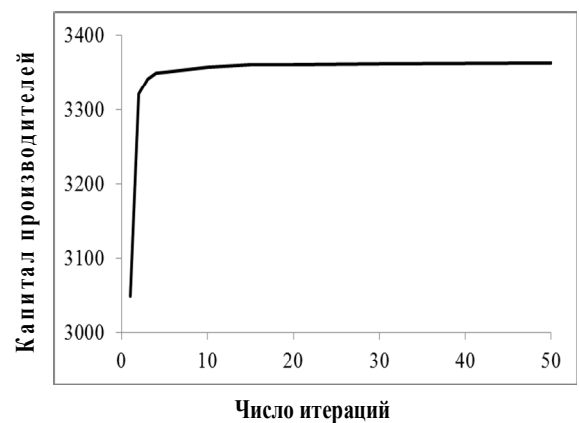


Рис. 1. Сходимость итеративного процесса ($k_{amr} = 1$, $k_{inf} = 1$)

Видно, что итеративный процесс сходится в течение 10-20 итераций. Был также проведен аналогичный расчет для параметра $a = 10$, сходимость итеративного процесса за 10-20 итераций была подтверждена и в этом случае. С учетом проверки сходимости итерационного процесса при расчетах полагалось, что число итераций равно 20.

Основной расчет. Приведем результаты для расчета, в котором нет амортизации и инфляции: $k_{амр} = 1$, $k_{инф} = 1$ (рис. 2). На рис. 2-4 капитал производителей показан сплошной линией, капитал инвесторов – штриховой линией.

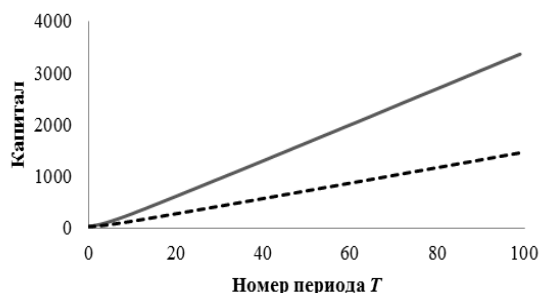


Рис. 2. Зависимость суммарного капитала производителей и инвесторов от времени (от номера периода). Идеальная экономическая среда: $k_{амр} = 1$, $k_{инф} = 1$

Рис. 2 показывает, что при $k_{амр} = 1$, $k_{инф} = 1$ суммарный капитал производителей и инвесторов со временем растет.

Влияние амортизации капитала производителей и инфляции на моделируемые процессы. При умеренной амортизации и инфляции суммарный капитал производителей и инвесторов со временем несколько повышается и при больших T почти не меняется (рис. 3).

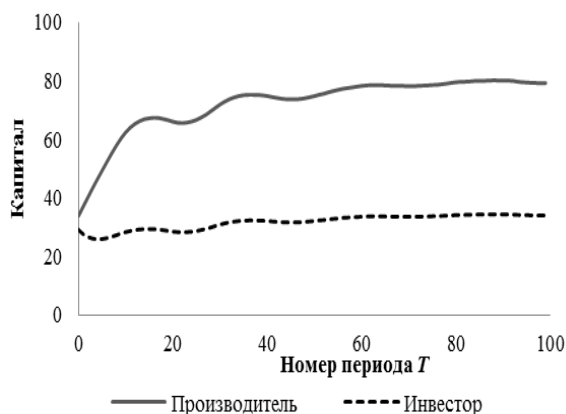


Рис. 3. Зависимость суммарного капитала производителей и инвесторов от времени. Умеренная инфляция и амортизация, $k_{амр} = 0.8$, $k_{инф} = 0.8$

При высокой инфляции или амортизации капитал производителей и инвесторов уменьшается, и они погибают (рис. 4).

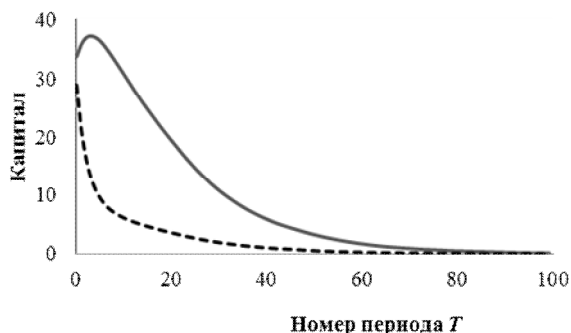


Рис. 4. Зависимость суммарного капитала производителей и инвесторов от времени, $k_{амр} = 0.8$, $k_{инф} = 0.6$

Влияние других факторов. Кроме приведенных результатов путем численных расчетов были еще проанализированы следующие аспекты рассматриваемых процессов.

Был проведен анализ влияния числа производителей m , в которых вкладывают капитал инвесторы, на моделируемые процессы. Например, полагалось $m = 10$ и $m = 30$. Сравнение этих расчетов показало, что инвесторам выгодно делать вклады в большое количество производителей, так как при больших величинах m капитал инвесторов существенно возрастал. При этом капитал производителей при изменении m менялся незначительно.

Было проанализировано влияние распределения полученного капитала между производителями и инвесторами, т.е. варьировался параметр $k_{выпл}$. Например, сравнивались расчеты для $k_{выпл} = 0.1$ и $k_{выпл} = 0.7$. Анализ результатов расчета показал, что когда доля выплат прибыли инвесторам мала, их суммарный капитал растет очень медленно и становится значительно меньше суммарного капитала производителей. Если же основная часть прибыли отдается инвесторам, то происходит обратная ситуация.

Также было проанализировано влияние параметра a , входящего в функцию $F(x)$, определяющую величину прибыли производителей, например, кроме обычных расчетов, в которых считалось $a = 1$, был проведен расчет для $a = 10$. Было показано, что такое увеличение a приводило к более высокой дифференцировке производителей инвесторами.

6. Заключение

Таким образом, построена многоагентная модель честной рыночной экономики. Продемонстрирована работоспособность модели и получены первые результаты компьютерных экспериментов. Проанализировано влияние параметров модели на исследуемые процессы.

Возможно, что данная модель не полностью соответствует происходящим реальным экономическим процессам. Тем не менее, построенная модель может служить опорной моделью широкого класса близких экономических процессов. Более того, настоящая модель может быть определенным эталоном конкурентной, но честной экономики.

Работа выполнялась при поддержке РФФИ, проект 13-01-00399. Авторы благодарны Редько О.В. за помощь в проведении компьютерных расчетов и плодотворные дискуссии.

Литература

1. T. Holvoet, P. Valckenaers Exploiting the environment for coordinating agent intentions // Environments for Multi-Agent Systems III, Lecture Notes in Artificial Intelligence, Springer. – Berlin et al. Vol. 4389, 2007. P. 51-66.

2. R. Claes, T. Holvoet, D. Weyns A decentralized approach for anticipatory vehicle routing using delegate multiagent systems // *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*. –Vol. 12. No. 2. 2011. P. 364-373.

3. А.Р. Бахтизин Гибрид агент-ориентированной модели с пятью группами домохозяйств и CGE модели

экономики России // *Искусственные общества*. – М: ЦЭМИ РАН, 2007. Т. 2. № 2. С. 30-75.

Multi-agent model of a transparent market economy system

V.G. Red'ko, Z.B. Sokhova

Abstract. A multi-agent model of a transparent market economy system is designed. The considered economy system is the community of investors and producers which adjust interactions within the community by means of easy agents-messengers. First results of computer simulations are obtained. The functionality of the model is demonstrated. The effectiveness of the proposed system of interactions between investors and producers is confirmed.

Моделирование нейронов генерирующих периодические залпы импульсов на основе внутриклеточной динамики концентрации кальция

В.Б. Котов, К.П. Соловьева

Впервые рассмотрена детальная модель нейронов, генерирующих при постоянных внешних воздействиях периодические пачки импульсов с учетом внутриклеточной динамики концентрации кальция. В данной модели, помимо биофизики ионных каналов внешней клеточной мембраны учитываются процессы, связанные с кальций-зависимым высвобождением кальция из эндоплазматического ретикула. Рассматривается зависимость параметров работы нейронов от характеристик ионных каналов.

1. Введение

В последнее время обнаружено, что в работе нейронных систем важную роль играет способность изолированных нейронов к автономному сложному поведению, в частности, к генерации периодических залпов нервных импульсов [1]. Известны упрощенные математические модели, генерирующие подобную активность [2]. Однако, для сравнения модельных результатов с экспериментом важно понимать, как функциональные особенности работы нейронов зависят от свойств ионных каналов нейронов. В связи с этим в данной статье исследуется детальная (на уровне нейронных каналов) модель генерации пачечной ритмики, основанная на взаимодействии каналов внешней мембраны нейронов и динамики внутриклеточной концентрации кальция, связанной с эндоплазматическим ретикулом [3].

Здесь мы моделируем пейсмекерные нейроны, которые в дальнейшем могут быть использованы для создания генератора дыхательной ритмики. В нашей модели возможность генерации пейсмекера определяется динамикой внутриклеточной концентрации ионов кальция. Наличие адекватной модели может позволить не только объяснить экспериментальные результаты, но и наметить способы влияния на генератор дыхательного ритма с целью коррекции сбоев и лечения патологий дыхательной системы [4].

Настоящая статья представляет собой, в основном, развитие (с учетом биофизики ионных каналов) результатов [3], где впервые свойства условных ритмических пейсмекеров [5] были получены в модели с учетом процессов, связанных с кальций-зависимым высвобождением кальция из эндоплазматического ретикула (ЭР). В настоящей работе также учитывается тот факт, что выделение кальция из ЭР должно быть связано с сопряженным выделением или поглощением из ЭР анионов (ионы хлора) или катионов (ионы натрия), на что впервые было указано в работе [6]. В тезисной форме результаты работы частично представлялись ранее [7, 8]. Основные уравнения биофизики клеточной мембраны нейрона используются в форме, предложенной в [9].

2. Модель

При построении модели исходим из представления о компактной (точечной) клетке, которая описывается единым мембранным потенциалом. Этот потенциал непосредственно связан с измеряемым потенциалом. Из этого потенциала формируется сигнал, передаваемый другим нейронам, – выходной сигнал нейрона. Мембрана клетки содержит несколько типов ионных каналов, пропускающих соответствующие ионы. Проводимость каналов меняется при изменении мембранного потенциала и под влиянием химических веществ (например, ионов кальция).

Помимо основной клеточной мембраны внутри клетки имеются мембраны, ограничивающие области эндоплазматического ретикула. В модели считаем, что эндоплазматическая мембрана (мембраны) также описывается единым мембранным потенциалом (не совпадающим с мембранным потенциалом основной клеточной мембраны).

Рассматривая клеточную мембрану как конденсатор, можно записать уравнение

$$CdV / dt = -I \quad (1)$$

где V – мембранный потенциал, I – полный ток через мембрану, C – ёмкость мембраны. Полный ток можно представить в виде суммы токов различных каналов и тока стимуляции I_{st} , определяемого внешними сигналами – сигналами возбуждения и торможения (см. ниже):

$$I = SI_i + I_{st} \quad (2)$$

(суммирование проводится по всем имеющимся типам каналов).

Аналогичные уравнения справедливы для внутренней мембраны (мембраны ЭР). Величины, относящиеся к этой мембране, отмечаем индексом R . Вместо уравнения (1) имеем уравнение

$$C_R dV_R / dt = -I_R \quad (3)$$

В полный ток I_R не входит ток стимуляции, так как внешние сигналы не доходят до внутренней мембраны. Аналог уравнения (2) записывается в виде

$$I_R = \sum I_{iR} \quad (4)$$

(суммирование в правой части уравнения (4) проводится по учитываемым типам каналов).

Для каждого канала можно записать аналог закона Ома

$$I_i = g_i(V - E_i) \quad (5)$$

где g_i – проводимость i -го канала, E_i – потенциал равновесия для соответствующего иона. Изменения проводимостей описываются уравнениями типа Ходжкина – Хаксли. Эти уравнения имеют специфический вид для разных каналов.

Опишем интересные для нашей задачи каналы. Для медленного натриевого (Na persistent обозначим индексом NaP) канала записываем уравнения

$$\begin{aligned} g_{NaP} &= g_{0NaP} m_{NaP} h_{NaP} \\ dm_{NaP} / dt &= (m_{\infty NaP} - m_{NaP}) / \tau_{mNaP} \\ dh_{NaP} / dt &= (h_{\infty NaP} - h_{NaP}) / \tau_{hNaP} \end{aligned} \quad (6)$$

где g_{0NaP} – максимальная проводимость канала, m_{NaP} , h_{NaP} – функции активации и инактивации канала (их произведение меньше единицы), $m_{\infty NaP}$, $h_{\infty NaP}$ – равновесные значения соответствующих функций, τ_{mNaP} , τ_{hNaP} – характерные времена изменения этих величин. Равновесные значения зависят от мембранного потенциала:

$$\begin{aligned} m_{\infty NaP} &= 1 / (1 + \exp(-(V - V_{mNaP}) / \Delta_{mNaP})) \\ h_{\infty NaP} &= 1 / (1 + \exp((V - V_{hNaP}) / \Delta_{hNaP})) \end{aligned} \quad (7)$$

Для быстрого натриевого канала проводимость считается из уравнения:

$$g_{Na} = g_{0Na} (m_{Na})^3 h_{Na} \quad (8)$$

Уравнения для m_{Na} и h_{Na} аналогичны уравнениям для m_{NaP} и h_{NaP} , с соответствующими индексами (Na вместо NaP).

Уравнение проводимости для кальциевого канала (P-канала) имеет вид:

$$g_P = g_{0P} m_P \quad (9)$$

Для проводимости калиевого задержанного выпрямляющего тока, проводимого K-каналом:

$$g_K = g_{0K} (m_K)^4 \quad (10)$$

Для описания проводимости любого из двух последних каналов используется только одна функция – функция активации m_P или m_K , а не две, как у описанных выше каналов. Уравнения для m_P и m_K аналогичны уравнениям для m_{NaP} (с учётом замены индекса NaP на P и K соответственно).

Проводимость другого калиевого канала (A-канал) описывается уравнением, аналогичному уравнению для NaP -канала:

$$g_A = g_{0A} m_A h_A \quad (11)$$

Уравнения для m_A и h_A также аналогичны уравнениям для m_{NaP} и h_{NaP} .

Имеется также калиевый канал, управляемый внутриклеточной концентрацией ионов кальция Ca^{2+} – SK -канал. Для него используем уравнения

$$\begin{aligned} g_{SK} &= g_{0SK} (m_{SK})^2 \\ dm_{SK} / dt &= (m_{\infty SK} - m_{SK}) / \tau_{SK} \\ m_{\infty SK} &= [Ca^{2+}]^2 / ([Ca^{2+}]^2 + (SKhalf)^2) \end{aligned} \quad (12)$$

($SKhalf$ – значение концентрации ионов кальция $[Ca^{2+}]$, при котором величина $m_{\infty SK}$ равна $1/2$). Интересно, что значение $m_{\infty SK}$ не зависит от мембранного потенциала V .

В качестве канала можно рассматривать утечку. Проводимость для тока утечки g_{leak} , в отличие от проводимостей рассмотренных выше каналов, считается постоянной величиной.

Для внутренней мембраны ограничимся двумя каналами – хлорным каналом и специфическим кальциевым каналом. Проводимость кальциевого канала определяется концентрацией ионов кальция (внутри клетки, вне ретикулума):

$$g_{CaR} = g_{0CaR} / \left(1 + \exp\left(-\left([Ca^{2+}] - Ca_0\right) / DCa\right)\right) \quad (13).$$

Здесь g_{0CaR} – максимальная проводимость, Ca_0 – пороговое значение концентрации ионов кальция, DCa – ширина переходной зоны (по концентрации).

Проводимость хлорного канала задаётся уравнениями

$$\begin{aligned} g_{ClR} &= g_{0ClR} m_{ClR} \\ dm_{ClR} / dt &= (m_{\infty ClR} - m_{ClR}) / \tau_{ClR} \\ m_{\infty ClR} &= 1 / (1 + \exp((V_R - V_{ClR}) / \Delta_{ClR})) \end{aligned} \quad (14)$$

Изменение концентрации ионов кальция Ca^{2+} можно описать феноменологическим уравнением,

$$d[Ca^{2+}] / dt = k_1 (I_{Ca} + I_{CaR}) - k_2 [Ca^{2+}] \quad (15)$$

которое учитывает приток ионов кальция с кальциевыми токами $I_{Ca} = I_N$, I_{CaR} и расход этих ионов за счёт химических реакций и использования внутри клетки.

Уравнение для тока стимуляции I_{st} :

$$I_{st} = g_{ex} (V - V_{ex}) \quad (16)$$

где g_{ex} – модуляция проводимости, а V_{ex} в типичном случае $V_{ex} = -12$ мВ.

В нашем случае g_{ex} задаётся в виде суммы постоянной величины и случайного временного сигнала.

Величины, входящие в представленные уравнения, в основном размерные. Поэтому для численного моделирования необходимо зафиксировать единицы измерения. Будем использовать нА (пА) для тока, мВ (мВ) для напряжения, мкс (мкс) для проводимости, мс (мс) для времени, мМ (мМ) для концентрации, нФ (нФ) для ёмкости.

На основе базовой модели можно строить конкретные модели, задавая численные значения параметров (или диапазоны изменения для некоторых параметров). Часть параметров можно задать, исходя из экспериментальных данных. Для некоторых параметров эксперименты не дают достаточной информации. Выбор значений таких параметров можно производить в значительной степени произвольно с учётом оценки биологического правдоподобия формы потенциалов действия. На данном этапе исследований такой подход вполне допустим, учитывая, как мало известно об изучаемых процессах. Следует заметить, что и сама базовая модель построена не только на основе

экспериментальных данных, но и исходя из требований простоты модели и не слишком большого числа уравнений, описывающих модель.

2. Пейсмейкерная генерация нейрона

Рассмотрим отдельный нейрон. Ток стимуляции является током возбуждения. Параметры для каналов внешней мембраны приведены в табл.1, параметры для каналов ЭР приведены в табл.2 и прочие параметры моделирования приведены в табл.3. Величина проводимости для внешнего возбуждающего сигнала была выбрана $g_{ex} = 0.0073$ мкСм .

Таблица 1
Параметры каналов внешней мембраны

NaP (медленный натриевый канал)							Na (быстрый натриевый канал)							утечка			
g_{0NaP} , мкСм	τ_{hNaP} , мс	τ_{mNaP} , мс	V_{hNaP} , мВ	V_{mNaP} , мВ	Δ_{hNaP} , мВ	Δ_{mNaP} , мВ	g_{0Na} , мкСм	τ_{hNa} , мс	τ_{mNa} , мс	V_{hNa} , мВ	V_{mNa} , мВ	Δ_{hNa} , мВ	Δ_{mNa} , мВ	g_{leak} , мкСм			
0.05	150	0.1	65	47.1	5	4.1	0.7	1.5	0.1	44.1	36	7	8.5	0.005			
К (калиевый задержанный)			А (калиевый А-канал)						Р (кальцевый Р-канал)				SK (калиевый кальций-управляемый канал)				
g_{0K} , мкСм	τ_K , мс	V_K , мВ	Δ_K , мВ	g_{0A} , мкСм	τ_{hA} , мс	τ_{mA} , мс	V_{hA} , мВ	V_{mA} , мВ	Δ_{hA} , мВ	Δ_{mA} , мВ	g_{0P} , мкСм	τ_{mP} , мс	V_{mP} , мВ	Δ_{mP} , мВ	g_{0SK} , мкСм	τ_{SK} , мс	$Skhalf$, мМ
1.3	0.9	30	25	0.95	15	3	80	27	11	16	0.03	2	17	3	0.5	1	0.005

Таблица 2
Параметры каналов мембраны ЭР

ClR (хлорный канал)				CaR (специфический кальцевый канал)		
g_{0ClR} , мкСм	τ_{ClR} , мс	V_{ClR} , мВ	Δ_{ClR} , мВ	g_{0CaR} , мкСм	Ca_0 , мМ	DCa , мМ
0.01	80	23	2	0.07	0.002	0.00031

Таблица 3
Параметры моделирования

Равновесные потенциалы, мВ						Концентрация Са		Ёмкости мембранн	
E_{Na}	E_K	E_{Ca}	E_{Cl}	E_{leak}	E_{ex}	k_1 , мМ/пкКл	k_2 , мс ⁻¹	C_m , нФ	C_{mR} , нФ
60	-80	40	-60	-50	-12	-0.0005	0.02	0.04	0.015

На рис. 1 представлена картина электрической активности нейрона, полученная в результате численного моделирования. В начале эксперимента ток стимуляции отсутствует. Через 1.5 секунды после начала численного эксперимента включается постоянный стимул, приводящий к постоянной модуляции проводимости g_{ex} . Видно, что генерация пачек импульсов происходит только при наличии возбуждающего воздействия. В данном случае период генерации пачек составляет 1.46 с, причём длительность пачки 0.6 с. В каждой пачке содержится 14 импульсов, частота следования импульсов внутри пачки не постоянна – в конце пачки частота ниже, чем в начале. Средняя частота импульсов в пачке около 20 Гц. Длительность каждого импульса – чуть больше 1 мс.

Форма импульса определяется в основном традиционными натриевыми и калиевыми каналами (точнее, Na-, K-, А-каналами). При этом более медленные процессы (с характерными временами порядка периода генерации пачек) связаны с изменением концентрации ионов кальция. Это видно из сравнения рис.1 с рис. 2, на котором представлено

изменение концентрации ионов кальция. Генерация пачки происходит на спаде концентрации. Заметим, что колебания концентрации ионов кальция происходят даже в отсутствие возбуждающего сигнала (в первые 1.5 секунды), причём частоты спонтанных колебаний выше частоты вынужденных колебаний (при наличии возбуждения).

Колебания концентрации ионов кальция в свою очередь коррелируют с изменениями потенциала внутренней мембраны (рис. 3). Представленный на рис. 1 вид временной зависимости является характерной особенностью использованной модели внутренней мембраны. Наличие только двух типов каналов с очень простыми свойствами (см. уравнения (13), (14)) приводит, в частности, к спонтанным колебаниям потенциала внутренней мембраны с довольно высокой частотой. Влияние этих колебаний прослеживается и во временной зависимости потенциала клеточной мембраны (первые 1.5 с на графике рис. 1). Не исключено, что отсутствие подобных колебаний в экспериментально измеренных зависимостях потребует модификации (усложнения) модели.

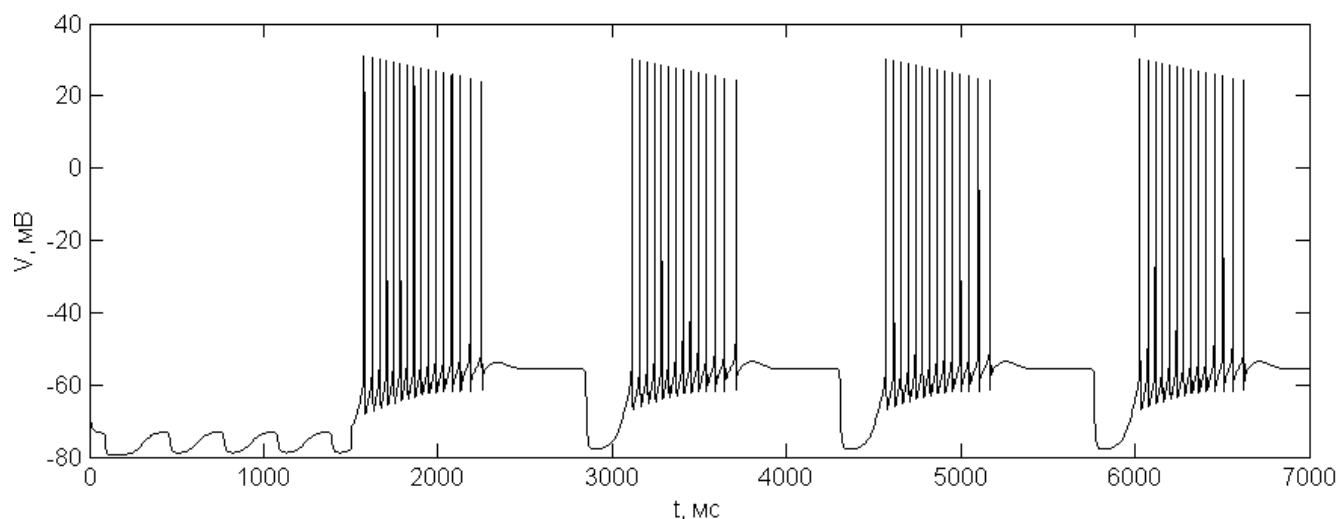


Рис. 1 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени. В момент времени $t=1.5$ с включается ток стимуляции.

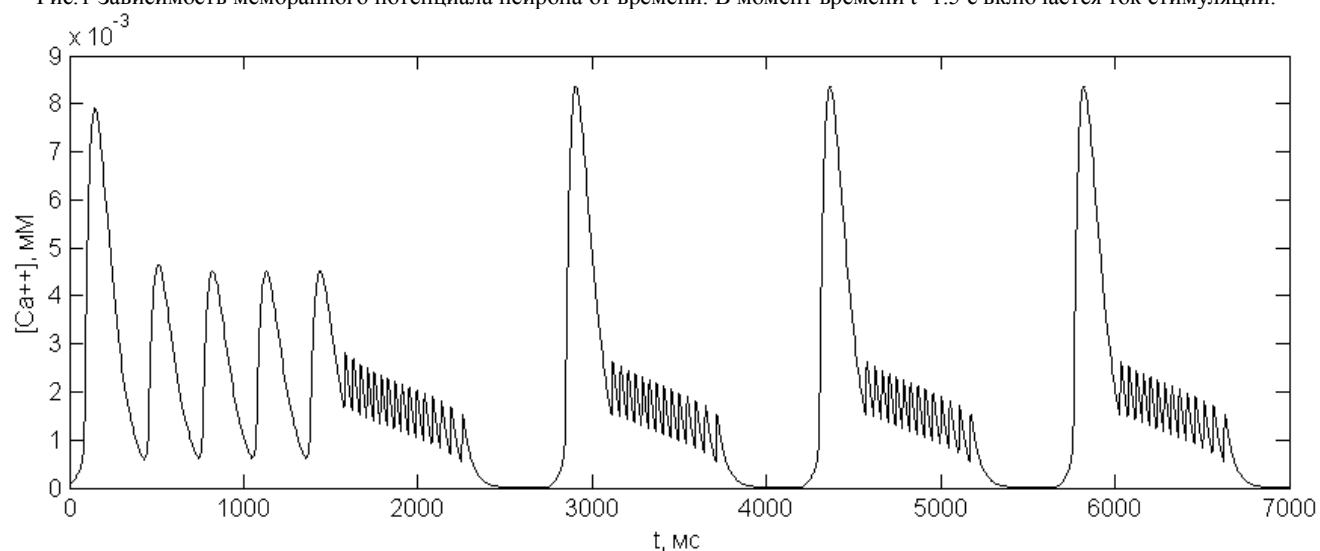


Рис. 2 Зависимость внутриклеточной концентрации ионов Ca от времени. В момент времени $t=1.5$ с включается ток стимуляции.

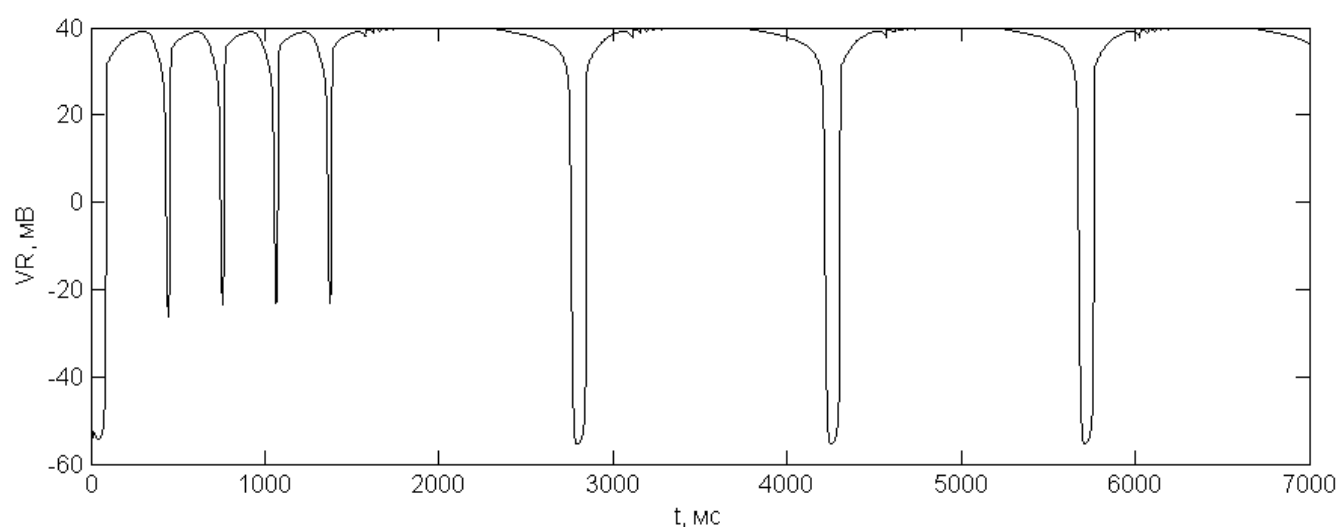


Рис. 3 Зависимость потенциала внутренней мембраны (мембраны ЭР) от времени. В момент времени $t=1.5$ с включается ток стимуляции.

3. Зависимость характера картины электрической активности нейрона от величины возбуждающего сигнала

Важную роль играет зависимость характера картины электрической активности нейрона от величины возбуждающего сигнала.

На рис.4 представлены графики изменения характеристик активности нейрона в зависимости от величины проводимости входного сигнала g_{ex} . Видно, что при увеличении входного сигнала растёт период генерации пачек и длительность пачки (рис. 4а). Во всём диапазоне пейсмекерной генерации частота

меняется всего в два раза (рис. 4б). Интересно отметить характер зависимости отношения длительности пачки к длительности паузы между пачками (рис. 4в). Величина этой характеристики по отношению к единице будет играть значительную роль при наличии связей между нейронами.

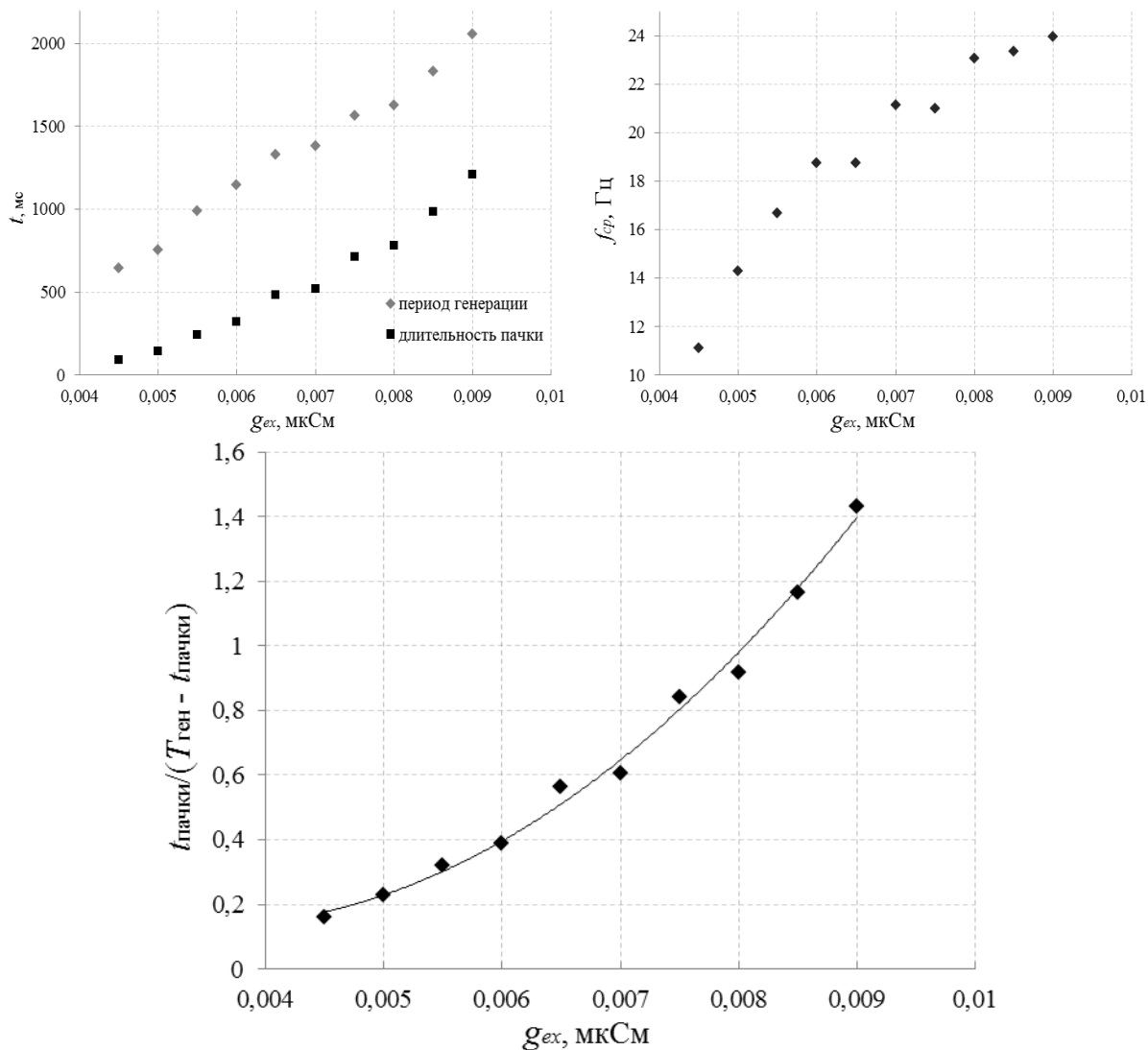


Рис. 4 Зависимость параметров активности нейрона от величины возбуждающего сигнала g_{ex} . 4а - (левая) зависимость периода генерации пачек и их длительности от g_{ex} . 4б - (правая) зависимость средней частоты генерации нейрона в пачке от g_{ex} . 4в - (нижняя) зависимость отношения длительности пачки к остальной части периода генерации пачек от g_{ex} .

При больших отклонениях уровня возбуждения от оптимального значения режим генерации пейсмекера оказывается невозможным. При увеличении уровня возбуждения пачки импульсов, в конце концов, сливаются – генерация приобретает сложный непериодический характер. График подобной генерации представлен на рис. 5а.

При уменьшении уровня сигнала возбуждения (от оптимального значения) по мере уменьшения длительности пачек происходит уменьшение числа импульсов в пачке. Генерацию пар импульсов ещё

можно назвать генерацией пейсмекера (при $g_{ex}=0.0045$ мкСм). Однако при одном импульсе в пачке (при $g_{ex}=0.0041$ мкСм) следует говорить о генерации импульсов (более или менее периодической). При дальнейшем уменьшении уровня возбуждения генерация становится невозможной (при $g_{ex}<0.0039$ мкСм). На рис. 5б видна генерация двух импульсов, однако это возможно только благодаря переходному процессу, имеющему место после включения возбуждающего сигнала.

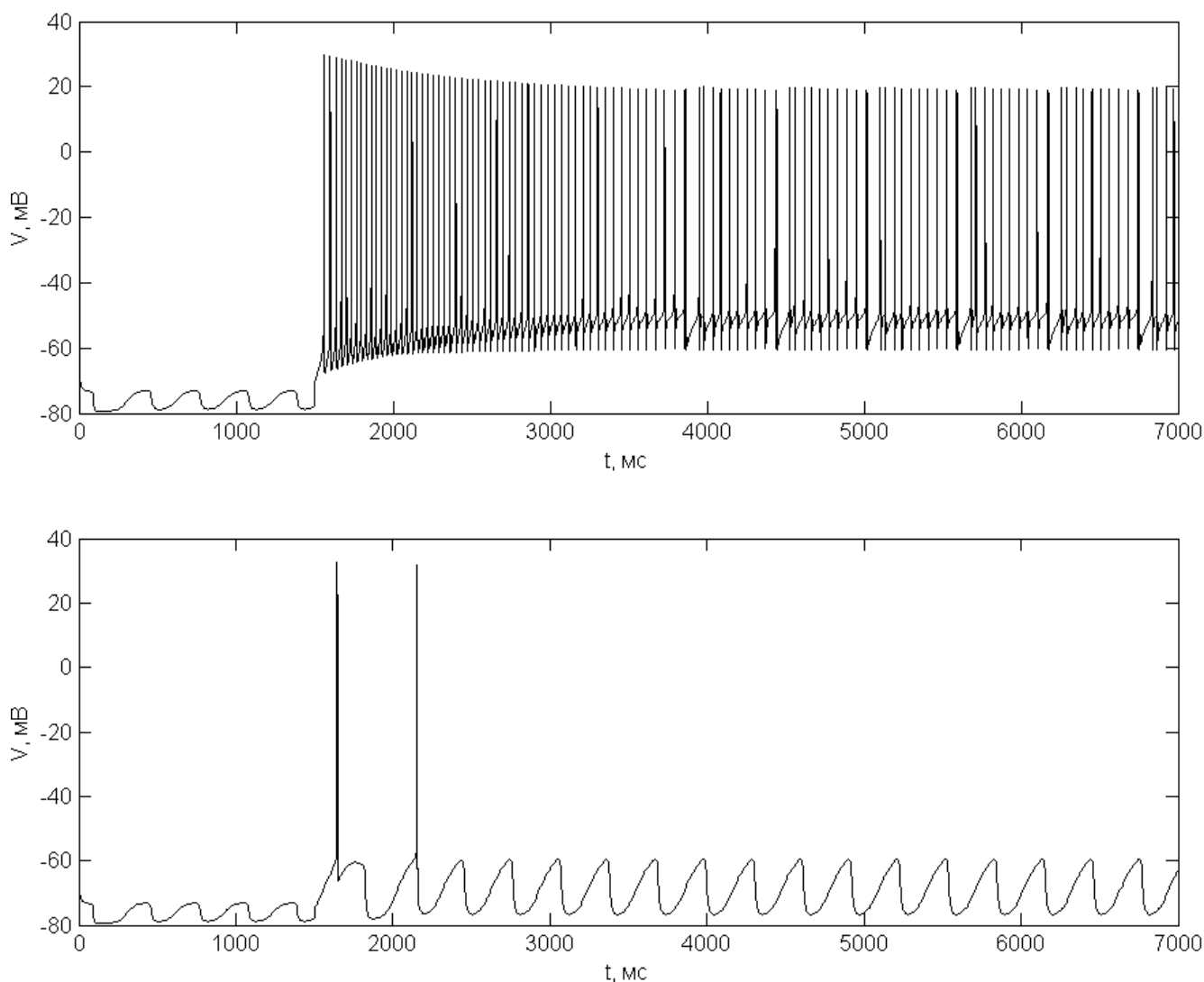


Рис. 5 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для значений входного возбуждения вне диапазона пейсмекерной генерации. 5а - (сверху) высокий уровень внешнего входного сигнала: $g_{ex} = 0.0095$ мкСм. 5б - (снизу) низкий уровень внешнего входного сигнала: $g_{ex} = 0.004$ мкСм.

4. Зависимость характера картины электрической активности нейрона от уровня величины шума возбуждающего сигнала

Реально сигнал возбуждения формируется в результате поступления большого числа импульсов от внешних по отношению к генератору дыхательного ритма нейронов. Результирующий сигнал возбуждения можно представить в виде суммы постоянного уровня и шумоподобной добавки с нулевым средним. До сих пор мы не учитывали эту добавку. Теперь посмотрим, к чему приводит непостоянство возбуждающего сигнала. Зададим добавку в виде кусочно-постоянной функции. Интервал постоянства равен 1 мс, уровни функции – случайные величины с равномерным распределением и нулевым средним. При десятипроцентном максимальном отклонении уровня возбуждения от среднего уровня вместо рис. 1

получаем рис. 6. Принципиальных отличий от случая постоянного уровня возбуждения (рис. 1) не наблюдается. Изменения параметров генерации незначительны, хотя и заметны (например, заметно изменение частоты генерации пачек). На графике потенциала клеточной мембраны виден небольшой высокочастотный шум, который также не играет заметной роли.

При тридцатипроцентном максимальном отклонении сигнала возбуждения от среднего значения отличия от случая постоянного уровня возбуждения значительные (рис. 7а). В данном случае больше период генерации пачек и длительность пачки (как если был увеличен постоянный уровень возбуждения). Кроме того характер генерации импульсов в пачке здесь имеет менее регулярный характер, чем в случае рис. 1. То же относится к временной зависимости концентрации ионов кальция, график которой представлен на рис. 7б. Отчётливо видно различие максимумов концентрации.

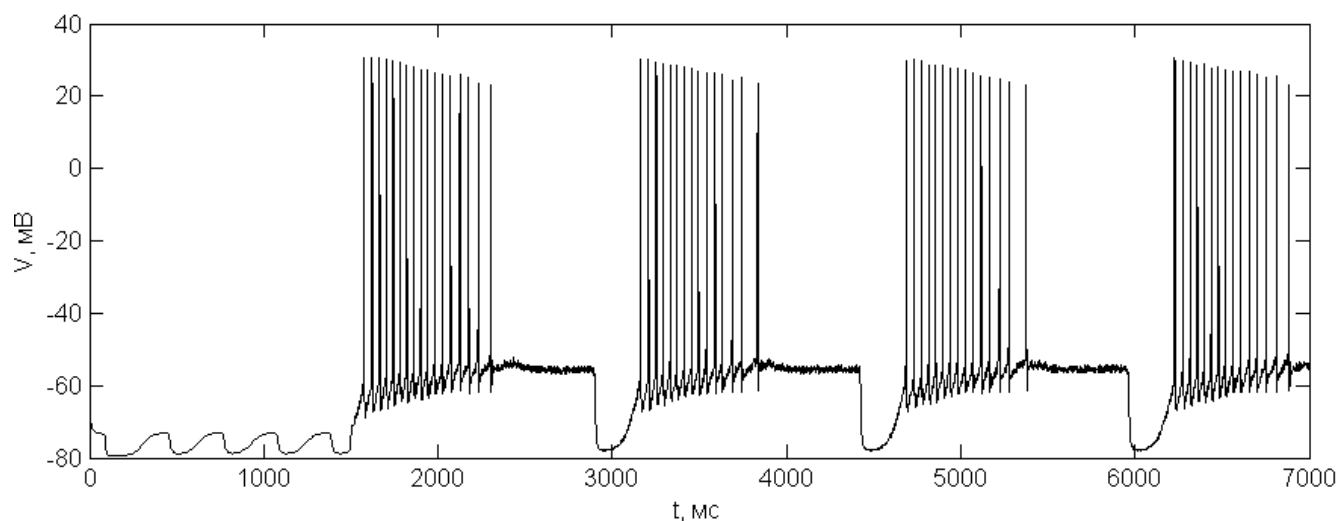


Рис. 6 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для входного возбуждения с отклонением 10% от среднего.

$g_{ex,cr} = 0.0073$ мкСм

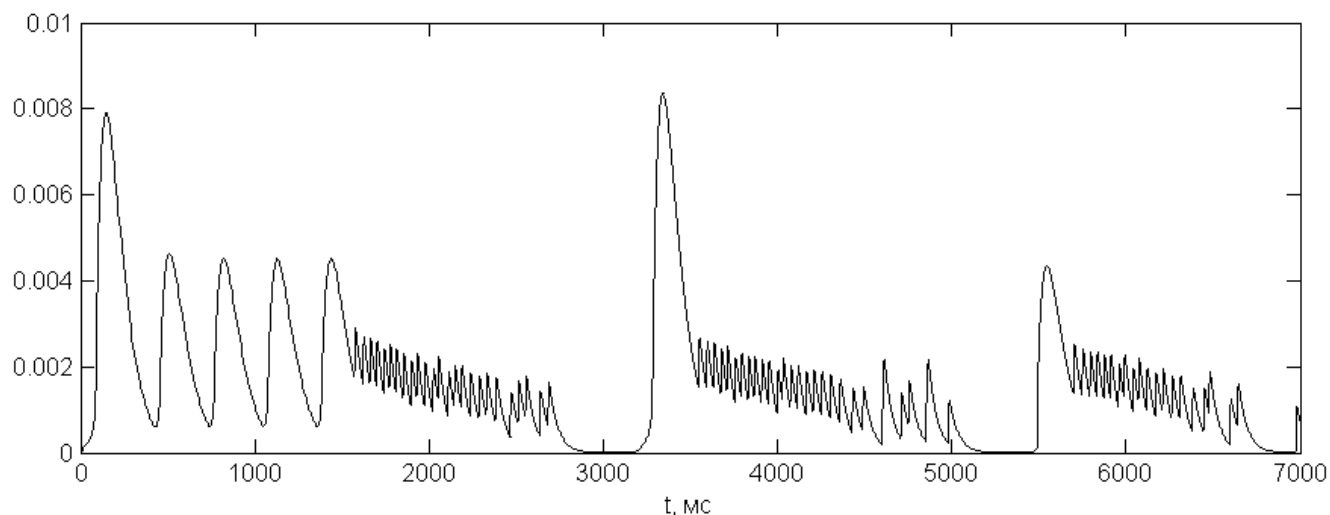
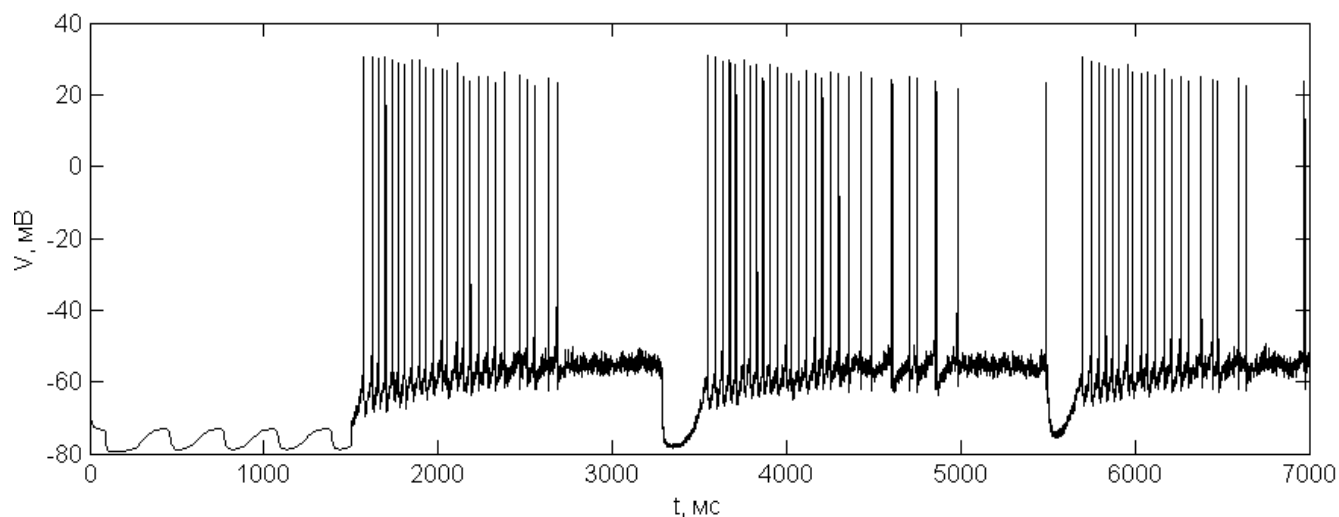


Рис. 7 Зависимость характеристик нейрона от времени для входного возбуждения с отклонением 30% от среднего. $g_{ex,cr} = 0.0073$ мкСм. 7а - (сверху) мембранный потенциал. 7б - (внизу) концентрация внутриклеточного Ca.

При пятидесятипроцентном максимальном отклонении уровня возбуждения от среднего уровня (рис. 8) имеет место режим не вполне регулярной генерации импульсов. Этот режим напоминает режим при повышенном постоянном уровне возбуждения

(см. рис. 5а), однако в данном случае степень нерегулярности заметно выше. Напомним, что рис. 5а был получен при уровне возбуждения для случая рис. 1, увеличенном на четверть.

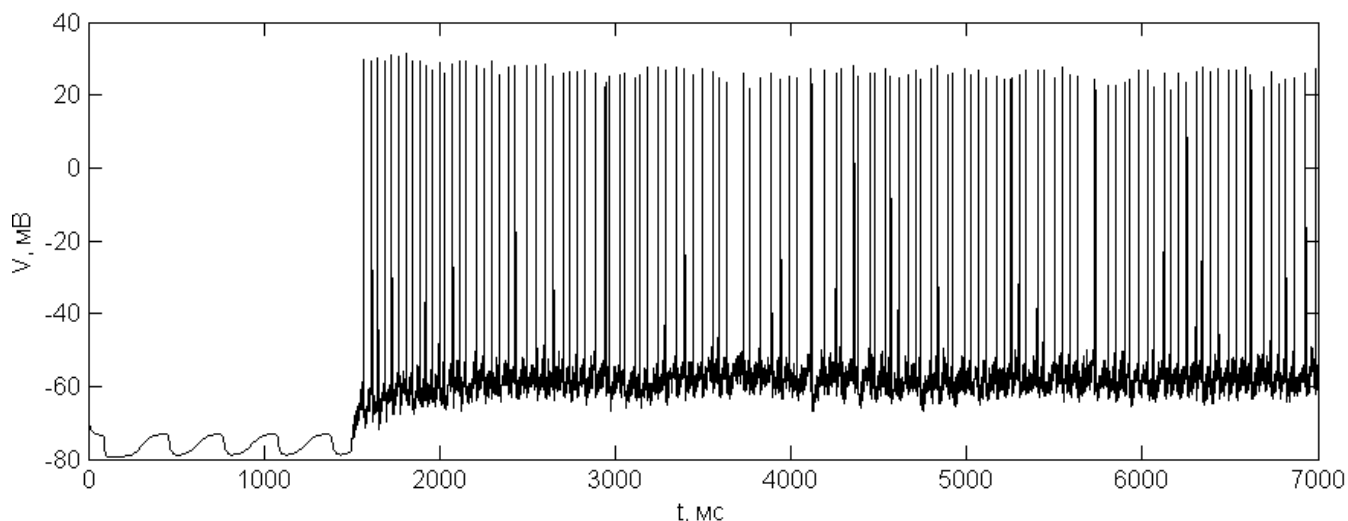


Рис. 8 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для входного возбуждения с отклонением 50% от среднего.

$$g_{ex\text{cp}} = 0.0073 \text{ мкСм}$$

Из приведённых примеров видно, что общие характеристики генерации, такие как период генерации пачек и длительность пачки определяются не средним значением уровня возбуждения, ведь для этих примеров средний уровень возбуждения один и тот же, а характеристики генерации существенно различаются. Возьмем случай пятидесятипроцентного отклонения уровня возбуждения от среднего значения, однако теперь потребуем, чтобы не среднее значение уровня возбуждения, а его максимальное значение совпадало с

постоянным уровнем возбуждения, использованным для примера рис.1. Получающаяся картина электрической активности представлена на рис. 9. Характеристики активности нейрона для такого шума ближе всего к характеристикам безшумовой активности нейрона при $g_{ex} = 0.0055 \text{ мкСм}$, хотя в данном случае проявляется сильная нерегулярность генерации импульсов, связанная с разбросом уровней возбуждения.

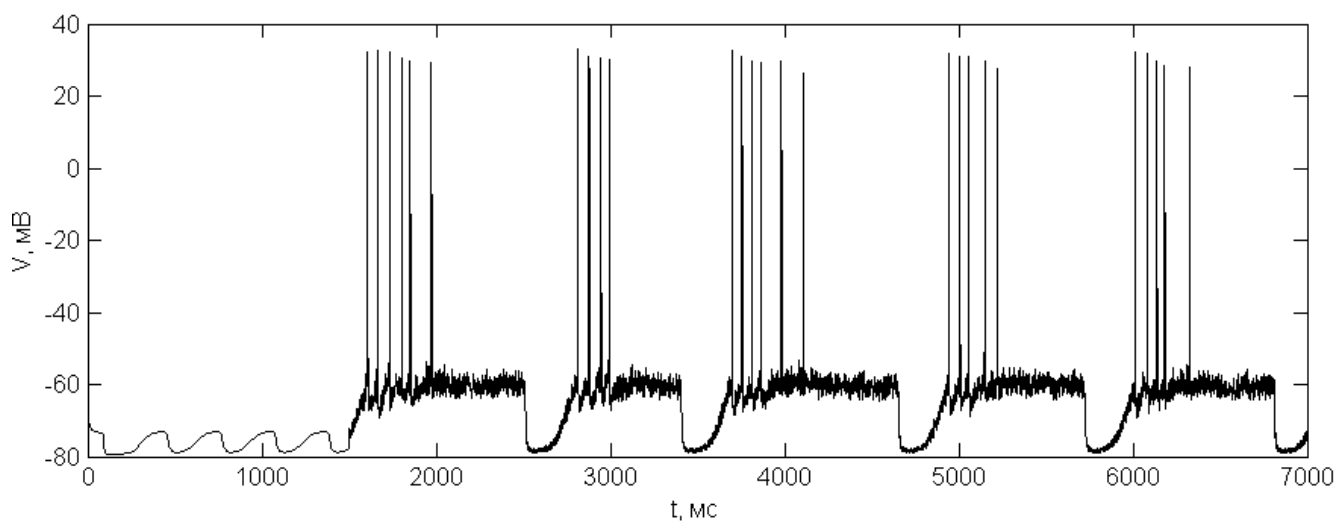


Рис. 9 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для входного возбуждения с отклонением 50% от среднего.

$$g_{ex\text{max}} = 0.0073 \text{ мкСм}$$

Ясно, что для того, чтобы получить сходный характер картин электрической активности для случаев постоянного уровня возбуждения и случайного уровня возбуждения с равномерным распределением, надо постоянный уровень (для первого случая) взять равным некоторому уровню, лежащему между средним значением уровня возбуждения и максимальным значением уровня возбуждения (для

второго случая). Взяв постоянный уровень возбуждения из примера рис. 1, средний уровень, равным 80% от постоянного, максимальный уровень, равный 120% от постоянного, получим картину электрической активности, изображённую на рис. 10. Характеристики этой картины активности нейрона значительно ближе к характеристикам картины, изображённой на рис.1, чем картины на рис. 9.

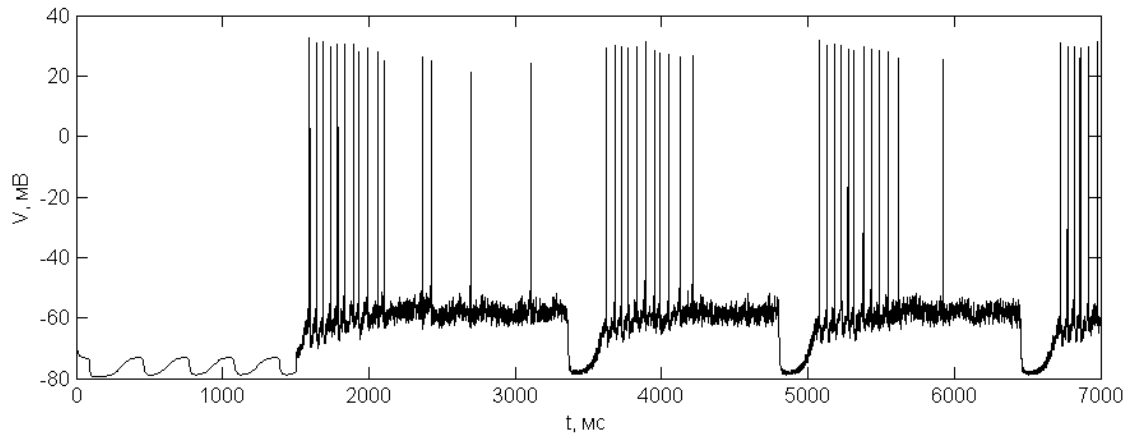


Рис. 10 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для входного возбуждения с отклонением 40% от среднего.

$$g_{ex\text{cp}} = 0.00584 \text{ мкСм}$$

5. Зависимость характера картины электрической активности нейрона от параметров каналов мембраны ЭР

Большой интерес представляет зависимость электрической активности от параметров, характеризующих каналы внутренней мембраны, прежде всего проводимостей каналов. Это

обусловлено возможностью влиять на свойства каналов внутренней мембраны путем введения определённых медикаментозных средств. Для иллюстрации влияния проводимостей каналов вернемся к примеру рис. 1. Все данные этой части, кроме проводимостей g_{CaR} и g_{ClR} взяты из таблиц 1-3. Входной сигнал постоянный $g_{ex} = 0.0073 \text{ мкСм}$.

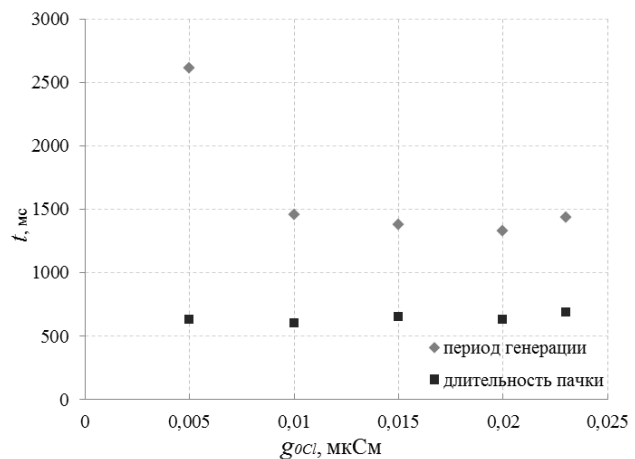
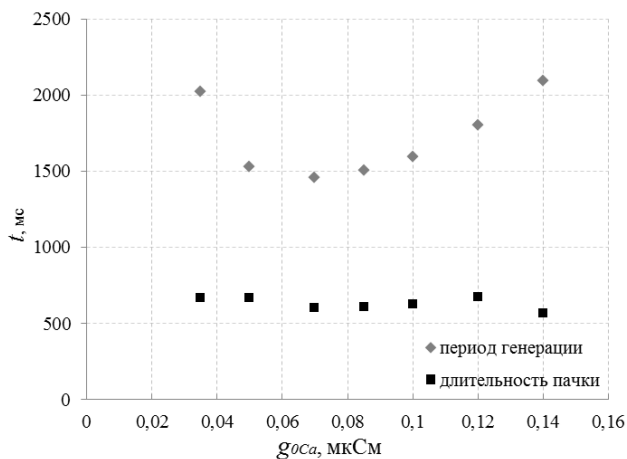


Рис. 11 Графики зависимостей параметров электрической активности нейрона от параметров каналов мембраны ЭР. 12а - (слева) Зависимости периода генерации и длительности пачек от параметра g_{CaR} 12б - (справа) Зависимости периода генерации и длительности пачек от параметра g_{ClR} .

На рис. 11 изображены графики зависимостей периода генерации и длительности пачек от параметров g_{CaR} (рис. 11а) и g_{ClR} (рис. 11б). При варьировании g_{CaR} длительность пачки и средняя частота импульсов практически не меняется. В то время, как период генерации имеет минимум в окрестности значения g_{CaR} , выбранного в начале. При увеличении g_{CaR} больше до значения 0.18 и дальше, возможна генерация только одной пачки за счёт переходного процесса при включении возбуждения (рис. 12). При достаточно малых значениях параметра

g_{CaR} (< 0.03), генерация последовательности пачек не происходит. При практически нулевой проводимости происходит генерация единственной пачки (рис. 13).

Пачки на рисунках 12 и 13 похожи. Это не должно вызывать удивления, т.к. в обоих случаях внутренняя (эндоплазматическая) мембрана не влияет на генерацию. Отличие рис. 12 от рис. 13 выражается в наличии колебаний до включения возбуждения (первые 1.5 с) на рис. 12, на рис. 13 такие колебания невозможны из-за нулевой проводимости кальциевых каналов внутренней мембраны.

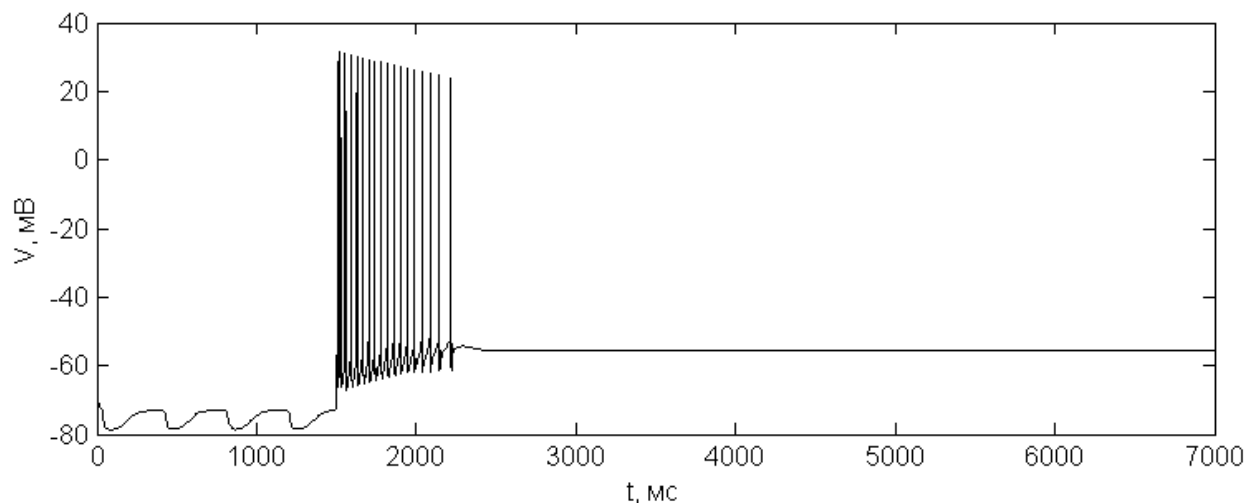


Рис. 12 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для $g_{0CaR} = 0.18$ мкСм.

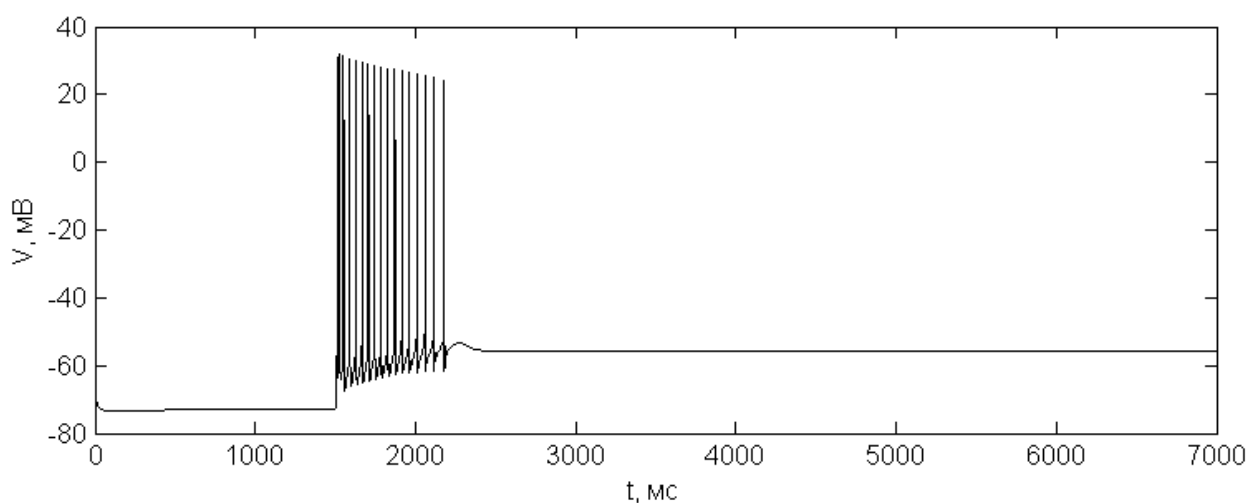


Рис. 13 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для $g_{0CaR} = 0.0001$ мкСм.

Как можно заметить из рис. 11б, в рабочем диапазоне g_{0CIR} от 0.005 до 0.023 мкСм, период генерации пачек практически монотонно убывает, в то время как длительность пачки остаётся относительно постоянной. При $g_{0CIR} > 0.025$ мкСм генерация отсутствует. При значениях проводимости меньше 0.005 мкСм, вплоть до нуля, происходит генерация единственной пачки как на рис. 12.

Отметим, что нулевые значения любой из проводимостей g_{0CaR} или g_{0CIR} соответствуют отсутствию влияния внутренней мембраны на электрическую активность клеточной мембраны — наличием внутренней мембраны можно пренебречь. При этом происходит генерация одной-единственной пачки при подаче сигнала возбуждения. Если сигнал возбуждения периодически включается и выключается, то каждый раз при его включении генерируется пачка импульсов. Подобная ситуация иллюстрируется рисунком 14. Здесь принято, что $g_{0CaR} = g_{0CIR} = 0$, сигнал возбуждения включается через 1.5 с

после начала эксперимента, выключается через 3.5 с и ещё через 1 с опять включается. Видно, что при каждом включении возбуждения генерируется пачка импульсов. Очевидно, для генерации не требуется предварительного полного выключения возбуждения, необходимо значительное и достаточно резкое изменение уровня возбуждения. На рис. 15 показана генерация пачек, при подаче возбуждающего сигнала, пропорционального $\sin^2(\pi t/T)$, где T — период изменения возбуждения. Период генерации пачек равен T . При наличии тормозящих связей вместо изменения возбуждающего сигнала для генерации пачек может быть использовано изменение тормозящего сигнала. Именно таков механизм генерации дыхательного ритма коллективом нейронов не способных к самостоятельной пейсмейкерной генерации (но способных генерировать пачки при изменении возбуждающего или тормозящего сигнала).

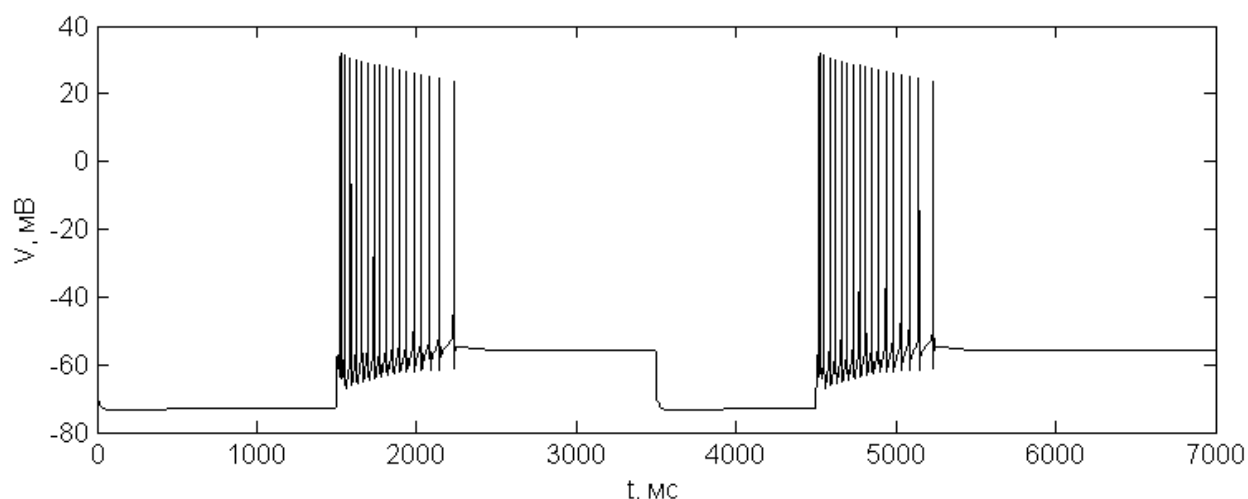


Рис. 14 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для $g_{CaR} = g_{ClR} = 0$. Внешний сигнал включается при $t=1.5$ с, выключается при $t=3.5$ с, и вновь включается при $t=4.5$ с.

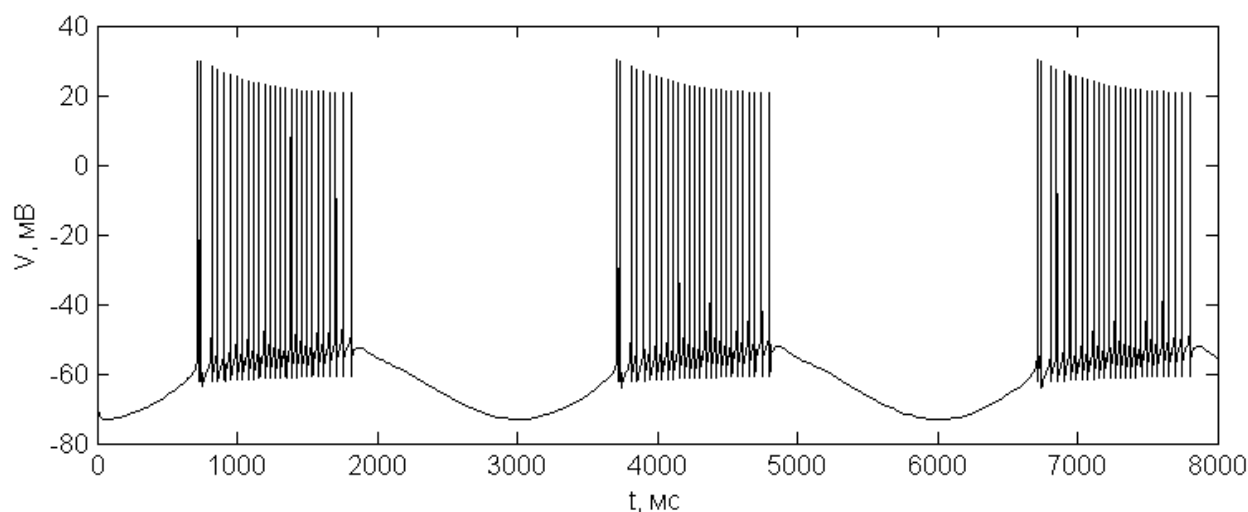


Рис. 15 Зависимость мембранного потенциала нейрона от времени для $g_{CaR} = g_{ClR} = 0$. Внешний сигнал пропорционален $\sin^2(\pi t/T)$, где T – период изменения возбуждения.

6. Заключение

В настоящей работе описана одна из возможных нейросетевых моделей дыхательной ритмики. Анализ основан на детальной (с учетом конкретных типов ионных каналов) нейронной модели условного ритмического пейсмекера, использующего кальций-зависимое высвобождение кальция из ЭР. Моделирование продемонстрировало биологическую правдоподобность предложенного ранее механизма ритмической активности нейронов. Наборы паттернов нейронной активности, описанные в данной работе необходимо учитывать при интерпретации экспериментальных данных и при создании моделей нейронных систем.

Постановка задачи исследования предложена В.Л. Дуниным-Барковским. Основная часть подготовительной и вычислительной работы выполнялась при поддержке Программы Президиума

РАН «Фундаментальные науки – медицине» в 2009-2011 гг.

Литература

1. J. Ramirez, A. Tryba, F. Pena. Pacemaker neurons and neuronal networks: an integrative view. // *Curr Opin Neurobiol.* – No. 6. 2004 P. 665-74.
2. E. Izhikevich. Simple model of spiking neurons. // *IEEE Trans Neural Netw.* – Vol. 14: 2003. P. 1569-72.
3. W.L. Dunin-Barkowski, A.L. Escobar, A.T. Lovering, J.M. Orem Respiratory Pattern Generator Model Using Ca^{++} -induced Ca^{++} Release in Neurons Shows both Pacemaker and Reciprocal Network Properties // *Biol. Cybernetics.* – Vol. 89. No. 4. 2003. P. 274-288
4. C. Del Negro, J. Hayes, J. Reikling. Dendritic calcium activity precedes inspiratory bursts in preBotzinger complex neurons. // *J Neurosci.* – Vol. 31. 2011. P. 1017-22.
5. R.J. Butera, J. Rinzel, J.C. Smith. Models of respiratory rhythm generation in the pre-Botzinger Complex. // *J Neurophysiol.* – Vol. 80. 1999. P. 382–415.

6. Л.Р. Арутюнова, В.Л. Дунин-Барковский Л.М.Чайлахян Моделирование роли Cl^- каналов в перемещении Ca^{++} через мембрану эндоплазматического ретикулума. // *ДАН*. – Т. 409, № 2. 2006. С. 261-265.

7. В.Л. Дунин-Барковский, В.Б. Котов. Теоретические, модельные и экспериментальные исследования нейронного генератора дыхательной ритмики. // *Фундаментальные науки – медицине. Тезисы докладов на конференциях и семинарах по*

научным направлениям Программы в 2010 году. М.: Фирма «Слово», 2010. (304 с.) С. 179-181.

8. V. Kotov, L. Artinian, V. Rehder, W. Dunin-Barkowski Modeling of the electrical activity of the *Helisoma trivolvis* B5 neurons. // *Front. Neuroinform.* 2011, *Conference Abstract: 4th INCF Congress of Neuroinformatics*. doi: 10.3389/conf.fninf.2011.08.00131

9. L.K. Purvis, and R.J. Butera Ionic Current Model of a Hypoglossal Motoneuron. // *J Neurophysiol* – Vol. 93, 2005. P. 723–733.

Modeling of neurons producing periodic bursts of impulses based on intracellular calcium dynamics

V.B. Kotov, K.P. Solovyeva

Abstract. A detailed ionic channel model of rhythmic bursts pacemaker neurons is considered. In this model, in addition to ion channel biophysics of the outer cell membrane the processes connected to the calcium-dependent release of calcium from the endoplasmic reticulum are considered. The modes of neuron model behavior in relation to the model parameter values are explored.

Нейросетевая модель дыхательной ритмики с учетом процессов, связанных с эндоплазматическим ретикулумом

К.П. Соловьева, В.Б. Котов

Рассматривается вариант нейросетевой модели дыхательной ритмики. Базовая нейронная модель представляет детальную модель нейрона на уровне нескольких типов ионных каналов а также процессов, связанных кальций-зависимым выделением кальция из эндоплазматического ретикулума. Анализируются режимы работы нейросетевого генератора, в зависимости от параметров нейронов и нейронной сети. Нейронная сеть состоит из двух тормозящих друг друга полувентров, состоящих из 30 нейронов каждый.

1. Введение

Управление дыханием, в частности, задание дыхательного ритма – одна из жизненно необходимых функций нервной системы. Принято считать, что дыхательный ритм (у высших животных) задаётся дыхательным центром, который вырабатывает два типа сигналов, управляющие вдохом и выдохом. Эти два типа сигнала должны находиться в противофазе.

С точки зрения инженерии информационно-управляющих технологии задача построения генератора дыхательного ритма не кажется сложной. Однако специфика живых систем сильно ограничивает априорные инженерные возможности [1].

Главными элементами дыхательного центра являются нейроны, разделённые на два множества (пула) – нейроны вдоха и выдоха. Нейроны каждого множества генерируют импульсы, дающие вклад в соответствующие сигналы. Сигнал каждого типа (вдоха и выдоха) имеет вид почти периодических пачек импульсов. Число импульсов в пачке (или средняя частота импульсов в пачке) определяет интенсивность сигнала, а частота пачек определяет частоту сигнала.

Противофазность сигналов вдоха и выдоха связана с наличием тормозящих связей между нейронами разных множеств. Во многих моделях дыхательного центра используются пейсмейкерные нейроны, т.е. нейроны, генерирующие периодические пачки импульсов. Единственный пейсмейкерный нейрон генерирует сигнал, схожий по характеристикам к выходному сигналу генератора дыхательного ритма. Для реализации модели генератора дыхательного ритма было бы достаточно двух пейсмейкерных нейронов, тормозящих друг друга. Использование вместо двух нейронов двух пулов нейронов обеспечивает надёжность работы такой конструкции.

В настоящей работе мы используем детальную модель пейсмейкерных нейронов описанную в [2]. В нашей модели возможность генерации пейсмейкера определяется наличием калиевых кальций-зависимых каналов и выделением ионов кальция из эндоплазматического ретикулума (ЭР). Наличие адекватной модели позволило бы не только объяснить экспериментальные результаты, но и наметить способы влияния на генератор дыхательного ритма с

целью коррекции сбоев и лечения патологий дыхательной системы.

Настоящая статья представляет собой, в основном, развитие (с учетом биофизики ионных каналов) результатов [3] на основе детальной модели одиночного нейрона [2]. Предварительные результаты работы (в тезисной форме) частично представлены в [4]. Основные уравнения биофизики клеточной мембраны нейрона используются в форме, предложенной в [5].

2. Модель сети дыхательных нейронов

В данной работе была использована детальная точечная модель нейрона с учётом мембраны ЭР, как в работе [2]. Следует подчеркнуть, что, в отличие от [1], наша модель не нацелена на то чтобы целиком охватить весь комплекс проблем, относящихся к дыхательной ритмике. Мы ограничиваемся лишь теми вопросами, которые могут быть связаны с участием в этом сложном физиологическом процессе оперативных внутриклеточных механизмов, связанных с динамикой внутриклеточной концентрации ионов кальция.

Ток стимуляции нейрона I_{st} представим в виде суммы тока возбуждения и тока торможения, каждый из которых является результатом модуляции проводимости некоторого типа канала:

$$I_{st} = g_{ex}(V - V_{ex}) + g_{in}(V - V_{in}) \quad (1)$$

где g_{ex} , g_{in} – модуляции проводимостей, а V_{ex} , V_{in} – равновесные потенциалы соответствующих каналов. Разделение тока стимуляции на возбуждающий и тормозящий члены оправдывается тем, что $V_{ex} > V_{in}$, в типичном случае $V_{ex} = -12$ мВ, $V_{in} = -60$ мВ.

Нейроны разбиты на два множества (по 30 нейронов), причём между нейронами разных множеств установлены тормозящие связи.

Нейроны одного пула не связаны между собой. На каждый нейрон поступает возбуждающий сигнал от внешнего источника (реально от внешних нейронов). Чтобы отвлечься от несущественных деталей, будем моделировать возбуждающий ток, задавая g_{ex} в виде суммы постоянной величины и случайного временного сигнала.

Тормозящее влияние нейронов разных пулов друг на друга задаётся формулой

$$g_{in} = k_{in} \text{Inh } f_{in} \quad (2)$$

где g_{in} , f_{in} – вектор-столбцы, составленные из величин g_{in}, f_{in} для всех нейронов,

Inh – матрица тормозящих связей, k_{in} – нормировочная постоянная, задающая среднюю силу связей. Ненулевые элементы матрицы связей – положительные случайные величины со средним, равным 1. Для задания тормозящей функции f_{in} для каждого нейрона используются уравнения

$$\begin{aligned} df_{ac} / dt &= \alpha_0 \theta(V - V_0) (1 - f_{ac}) - \alpha_1 \theta(V_0 - V) f_{ac}, \\ df_{in} / dt &= \alpha_1 \alpha_2 f_{ac} - \alpha_2 f_{in} \end{aligned} \quad (3)$$

где f_{ac} – функция активации нейрона, заметно отличная от нуля только во время и некоторое время после генерации импульса, константы α_0 , α_1 , α_2 определяют обратные характерные времена изменения функций активации и торможения, V_0 – напряжение, достижение которого означает генерацию импульса. Нетрудно видеть, что $(\alpha_1)^{-1}$ – это характерное время действия тормозящей функции, а $(\alpha_2)^{-1}$ – время задержки максимума тормозящей функции (после генерации импульса). Должно выполняться неравенство $\alpha_1 > \alpha_2$. При моделировании параметр α_2 выбирался одинаковым для всех нейронов (например, $\alpha_2 = 0.05$), а параметр α_1 выбирается случайным образом из заданного диапазона, соответствующего диапазону задержек 3...7 мс. Заметим, что выбор коэффициента для f_{ac} в правой части второго уравнения (3) определяется условием нормировки (по времени) функции торможения, получающейся из уравнений.

Для моделирования в ряде случаев большую роль играют начальные условия (начальные состояния нейронов). Будем пользоваться начальным состоянием, полученным в результате продолжительного функционирования несвязанных нейронов. Благодаря различию уровней возбуждения нейроны, изначально находившиеся в одинаковых состояниях, оказываются в различных состояниях, причём различие растёт со временем. Из-за конечности времени функционирования, распределение состояний нейронов не вполне случайно – импульсы нейронов каждого множества разбросаны во времени не совсем равномерно, причем интенсивности генерации импульсов разными множествами коррелируют между собой. Однако для моделирования абсолютная случайность обычно не требуется, достаточно добиться устранения артефактов, связанных с резкими изменениями интенсивности генерации каждого множества нейронов.

Для представления коллективной генерации (для каждого из множеств) удобно пользоваться понятием мгновенной частоты импульсов. Для одного нейрона мгновенная частота в данный момент времени определяется как обратная длительность включающего данный момент временного интервала между двумя соседними импульсами. Для множества нейронов мгновенная частота равна сумме частот всех входящих в него нейронов. Мгновенная частота (для

краткости, частота) характеризует интенсивность генерации импульсов нейронами данного множества.

3. Моделирование генератора дыхательного ритма на основе пейсмейкерных нейронов с короткими пачками импульсов

Пусть все нейроны имеют одинаковые значения параметров, большинство из которых было использовано в ([2], рис.1). В этом примере не использовался параметр k_{in} , играющий ключевую роль при наличии тормозящих связей. Он по существу задаёт силу (среднюю) тормозящих связей. Посмотрим, как меняется картина генерации при изменении параметра k_{in} .

При слабых тормозящих связях – $k_{in} = 0.003$ – взаимодействие пулов незначительно. Однако из рис. 1 видна тенденция к противофазности колебаний частот двух множеств – после десятой секунды положения максимумов частоты первого множества примерно совпадают с положениями минимумов частоты второго множества и наоборот. Размах колебаний не достигает максимума, поэтому нельзя говорить о выходе на режим генерации дыхательного ритма. Период колебаний в установившемся режиме совпадает с периодом генерации пачек одиночным нейроном [2]. Переход к противофазным колебаниям мгновенных частот первого и второго пулов получается в результате изменений моментов генерации пачек. Этот переходный процесс длится 10...20 с.

При увеличении силы связей картина меняется. Рис. 2 получен при $k_{in} = 0.01$. Первые 8 с происходят процессы аналогичные процессам рис. 1, приводящие к достижению противофазности колебаний частот генерации двух пулов. В дальнейшем происходит дополнительное упорядочивание – сближение моментов генерации пачек для нейронов одного множества. В результате размах колебаний возрастает почти до максимального значения. Здесь уже можно говорить о выходе на режим генерации дыхательного ритма. Как и в предыдущем случае, здесь тормозящие связи не вносят кардинальных изменений в работу отдельного нейрона, но могут вызвать изменение момента генерации пачки (в начале интервала наблюдения).

При дальнейшем усилении тормозящих связей переходный процесс становится всё короче, размах колебаний частот генерации достигает максимума. На рис. 3 приведены частоты генерации пулов при $k_{in} = 1$. Здесь переход к режиму генерации дыхательного ритма занимает меньше периода колебания частоты (или периода генерации пачек нейроном). В данном случае тормозящие связи оказывают заметное влияние на генерацию пачек отдельными нейронами.

В установившемся режиме влияние нейронов разных пулов друг на друга не очень велико – пачки нейронов одного пула в основном укладываются между пачками нейронов другого пула.

Генерация импульсов нейронами одного из пулов (в данном случае первого) сначала оказывается полностью подавленной и возобновляется после завершения генерации пачки большинством нейронов другого (второго) пула. После этого происходит попеременная генерация пачек нейронами первого и второго пулов.

При больших значениях параметра k_{in} ($k_{in} > 1$) типична ситуация, при которой нейроны одного пула полностью подавляют генерацию импульсов нейронами другого пула. Графики частот для такой ситуации изображены на рис. 4, который получен при $k_{in}=3$. Здесь нейроны второго пула не генерируют импульсы, поэтому нейроны первого пула не получают сигналы торможения и функционируют как отдельные нейроны. Видимые колебания активности первого пула

обусловлены синхронными начальными условиями нейронов.

Впрочем, надо отметить, что возможен переход от режима подавления нейронов одного пула (рис. 4) к режиму попеременной генерации импульсов разными пулами (рис. 3). Нейроны молчащего пула находятся в готовности к генерации импульсов и при некотором ослаблении торможения (за счет случайного уменьшения частоты генерации работающего пула) могут начать одновременную генерацию. Эта генерация подавит ранее работавший пул, который сможет опять начать работать по окончании пачек, генерируемых изначально молчащим (а потом заработавшим) пулом. Подобная ситуация представлена на рис. 5, полученным при $k_{in}=2.2$.

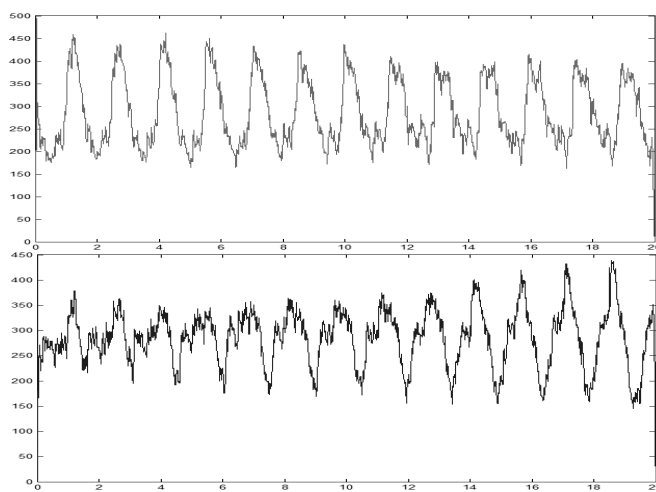


Рис. 1 $k_{in}=0.003$

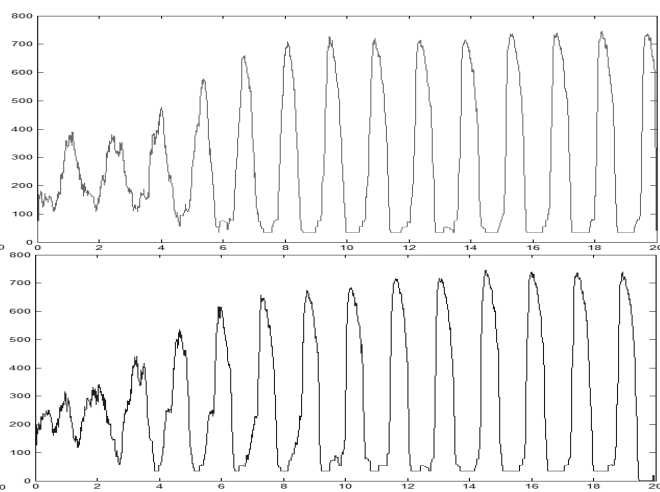


Рис. 2 $k_{in}=0.01$

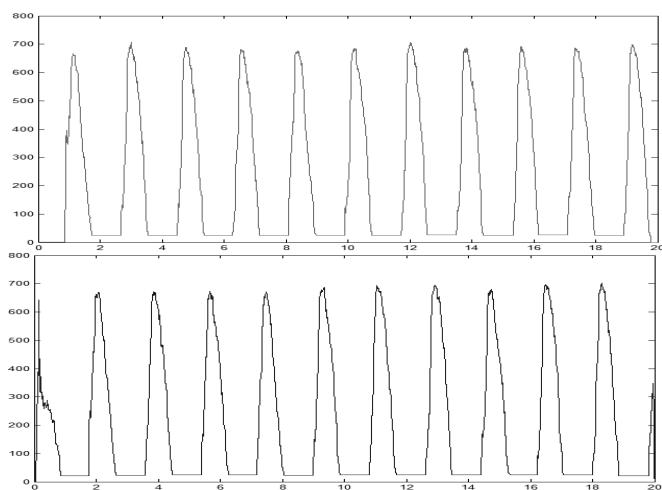


Рис. 3 $k_{in}=1$

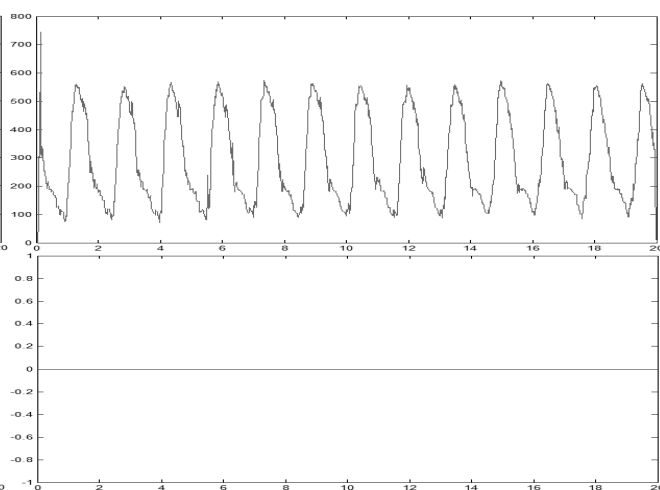
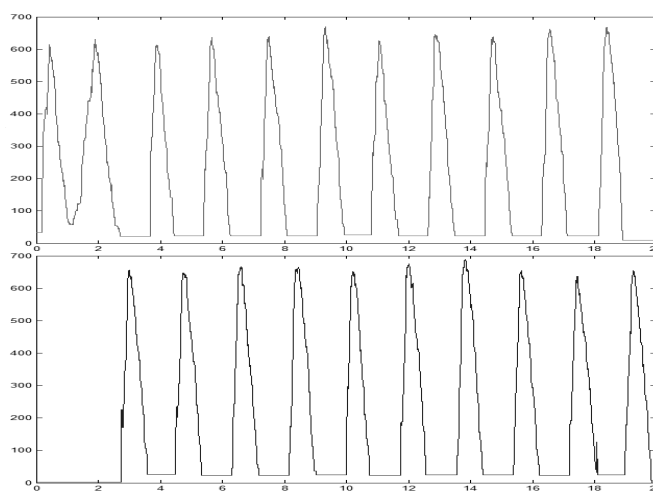


Рис. 4 $k_{in}=3$

Рис. 5 при $k_{in}=2.2$

Рассмотренные примеры работы коллектива нейронов имеют характерную особенность — длительность пачки, генерируемой отдельным нейроном, меньше длительности паузы между пачками (хоть и не намного). Эта особенность позволяет пачкам одного нейронного пула располагаться между пачками другого нейронного пула, при этом минимизируется взаимное торможение нейронов разных пулов. Следствием указанной особенности является приблизительное равенство периода колебаний частот генерации периоду генерации пачек отдельным нейроном.

4. Моделирование генератора дыхательного ритма на основе пейсмекерных нейронов с длинными пачками импульсов

Интересно посмотреть, что происходит, когда длительность пачки превышает длительность паузы между пачками. Возьмем в качестве строительного материала нейроны, для которых изменен параметр SK канала $SK_{half}=0.0036$ мМ и параметр для зависимости концентрации кальция $k_2=0.022$ с⁻¹.

Опять будем менять параметр k_{in} , характеризующий силу тормозящих связей.

При небольшом значении параметра k_{in} ($k_{in}=0.003$) колебания частот генерации для разных пулов стремятся к противофазности (рис. 6). Переходный процесс занимает около 10 с. Однако размах колебаний частот не достигает максимального значения, форма колебаний также не устанавливается окончательно. Пока можно говорить только о приближении к режиму генерации дыхательного ритма. Генерация импульсов нейронами мало отличается от генерации в отсутствие связей.

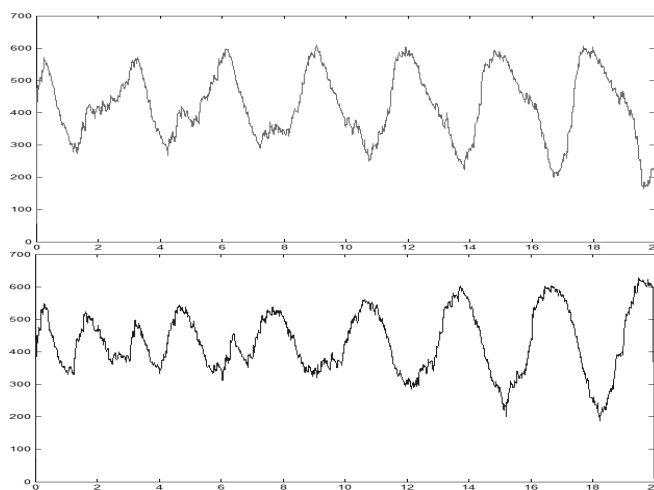
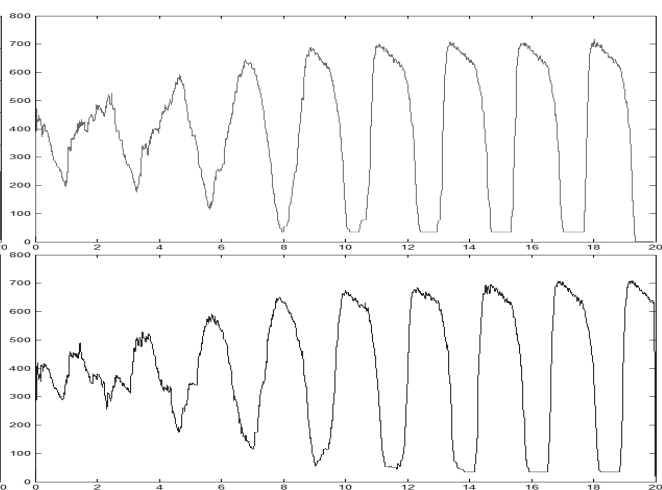
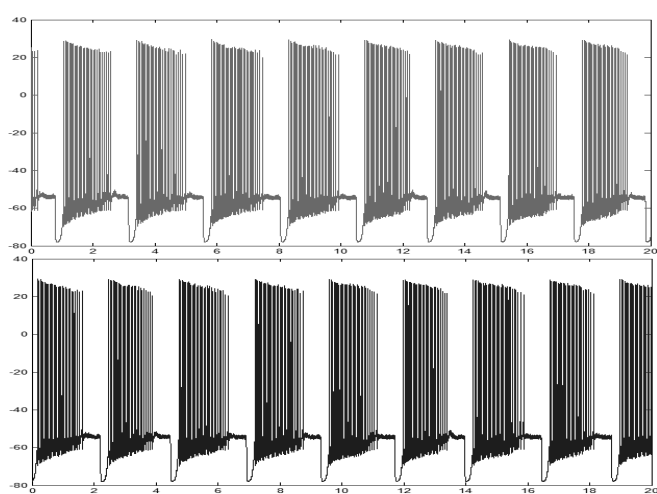
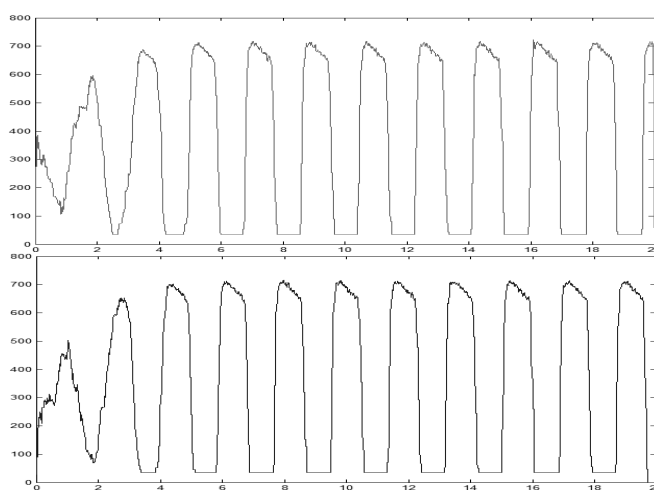
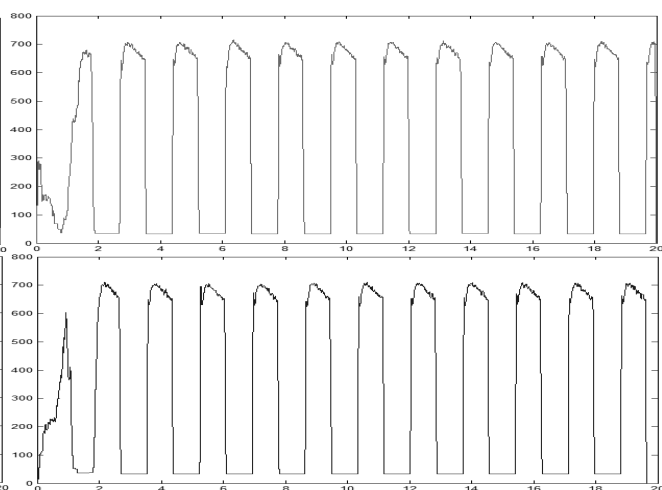
При $k_{in}=0.01$ (рис. 7) за 10 с устанавливается форма колебаний частот генерации. Противофазность колебаний частот генерации для двух пулов достигается ещё раньше — примерно через 3 с. Период колебаний частот составляет чуть больше 2 с и совпадает со средним периодом генерации пачек одним нейроном (рис. 8). На рис. 6 период генерации пачек составляет около 3 с. Уменьшение периода

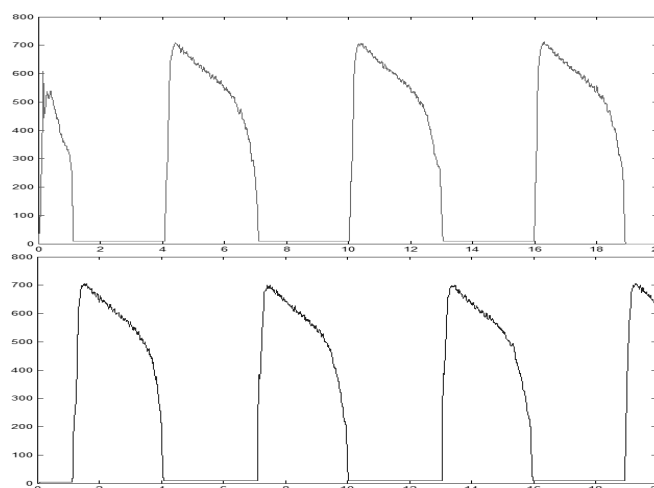
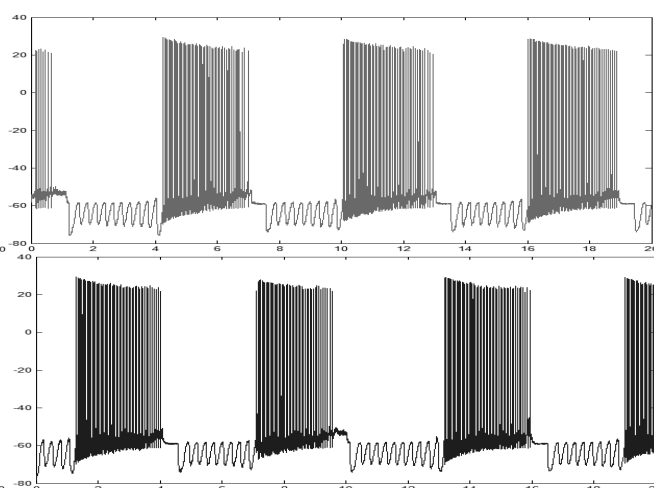
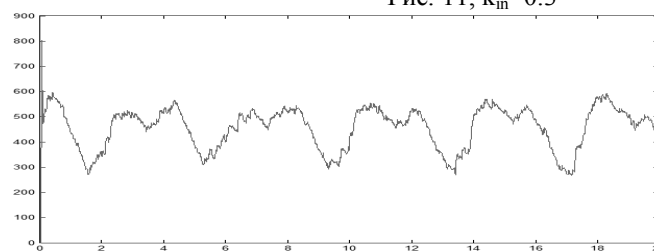
следования пачек, как и уменьшение отношения длительностей пачки и паузы, является результатом действия сигналов торможения.

При увеличении параметра k_{in} переходные процессы становятся ещё короче, а частота колебаний увеличивается. Для $k_{in}=0.03$ (рис. 9) переходный процесс занимает 3 с., период колебаний чуть меньше 2 с. Интересно, что при данном значении параметра длительность пачки примерно равна длительности паузы между пачками. При $k_{in}=0.1$ (рис. 10) длительность переходного процесса меньше периода колебаний частоты генерации, который составляет 1.7 с. В этом случае пачки нейронов одного пула умещаются между пачками нейронов другого пула. Для этого пачки нейронов одного пула должны быть хорошо синхронизованы между собой. Высокая степень синхронизации пачек объясняет очень резкие изменения частоты генерации на рис. 10.

Дальнейшее увеличение силы связей приводит к изменению режима генерации дыхательного ритма. На рис. 11 представлены графики колебаний частоты генерации при $k_{in}=0.3$. Период колебаний составляет 6 с. Таков же период генерации пачек одним нейроном, причём примерно половину этого периода занимает пачка, а другую половину — пауза между пачками (рис. 12). В данном случае длительность пачки не сильно превышает длительность пачки для отдельного нейрона (рис. 6) — менее чем в полтора раза. Пауза же в данном случае значительно длиннее. Кроме того, в течение паузы мембранный потенциал испытывает несколько колебаний в отличие от случая отдельного нейрона. Ясно, что генерация импульсов нейроном носит специфический вынужденный характер. Переход от высокочастотного режима к низкочастотному (т.е. от рис. 10 к рис. 11) объясняется, по-видимому, усилением влияния тормозящего сигнала, задержанного по отношению к пачке одного пула, и невозможностью отдалить пачки другого пула для уменьшения влияния тормозящего сигнала.

При больших значениях параметра k_{in} ($k_{in}>1$) наиболее типично полное торможение одного пула другим. Такая ситуация показана на рис. 13 для $k_{in}=1$. Здесь генерация второго пула полностью подавлена, при этом частота генерации первого пула изменяется как в отсутствие второго пула.

Рис. 6 $k_{in}=0.003$ Рис. 7 $k_{in}=0.01$ Рис. 8 $k_{in}=0.01$ Рис. 9. $k_{in}=0.03$ Рис. 10. При $k_{in}=0.1$

Рис. 11, $k_{in}=0.3$ Рис. 12, $k_{in}=0.3$ Рис. 13, $k_{in}=1$

5. Моделирование генератора дыхательного ритма на основе пейсмекерных нейронов с короткими пачками импульсов и уменьшенной проводимостью мембраны ЭР

В рассмотренных выше примерах длительность пачки либо превышает длительность паузы между пачки, либо меньше её, но незначительно. Некоторые особенности могут проявиться в случае нейронов с короткой генерируемой пачкой, когда длительность пачки существенно меньше длительности паузы. С подобными нейронами мы уже сталкивались при уменьшенных значениях проводимостей внутренней мембраны (например, [2], $g_{0CaR}=0.16$ мкСм). Построим из таких нейронов генератор дыхательного ритма и посмотрим, что происходит при увеличении силы тормозящих связей (параметра k_{in}).

При $k_{in}=0$ имеем независимые случайные колебания частот генерации пулов. Начальная корреляция колебаний частот генерации – следствие неполной стохастизации фаз нейронов – сохраняется на протяжении всего времени наблюдения.

При малых положительных значениях параметра k_{in} наблюдается тенденция к противофазности колебаний частот генерации для первого и второго пулов. Это хорошо видно на графиках, построенных для $k_{in}=0.01$. Интересно, что максимумы частоты генерации каждого пула следуют с частотой, в два раза большей частоты следования пачек для одного нейрона. Эта особенность связана именно с малой длительностью пачки (по сравнению с

длительность паузы). Для данного значения параметра нельзя говорить о полноценной генерации дыхательного ритма – колебания частот генерации не приняли законченный вид. Заметим, что при том же значении параметра k_{in} для ранее рассмотренных случаев (рис. 3 и 7) колебания частот генерации успевают в основном установиться. Это отличие связано опять же с малой длительностью пачек, точнее, с относительно малым числом импульсов, генерируемых нейроном в течение периода генерации пачек. В данном случае для достижения заданного уровня торможения требуется большее значение параметра k_{in} .

Даже при $k_{in}=0.03$ колебания частот генерации не достигают установившегося вида (рис. 14) – мешают промежуточные максимумы уменьшенной высоты.

При дальнейшем увеличении параметра k_{in} промежуточные максимумы подавляются. Это видно на графиках рис. 15, полученного при $k_{in}=0.1$. Здесь колебания частот генерации выходят на (почти) периодический режим с периодом, равным периоду генерации пачек нейроном.

При $k_{in}=0.3$ (рис. 16) колебания хорошо сформированы, переходный процесс занимает менее 3 с. Следует отметить заметные искажения пачек и связанный с этим «негладкий» вид колебаний частоты генерации пула (особенно первого). Кроме того, частота генерации пачек нейроном в данном случае заметно выше, чем для несвязанных нейронов.

При $k_{in}=1$ нарушения регулярности колебаний частот генерации пулов становятся более отчётливыми. Возрастает и степень искажения картины генерации пачек нейроном.

При дальнейшем увеличении параметра k_{in} указанные нарушения и искажения нарастают. При $k_{in}=3$ уже трудно говорить о периодических

колебаниях частот генерации (рис. 17). Форма колебаний различна для первого и второго пулов и может быть весьма замысловатой. Генерация пачек нейроном здесь также далеко не регулярная. Помимо пачек наблюдаются отдельные импульсы. Порой трудно определить, где начало и конец пачки.

При $k_{in}=10$ нарушение регулярности становится вопиющим (рис. 18). Здесь даже при большом желании не удастся усмотреть генерацию дыхательного ритма.

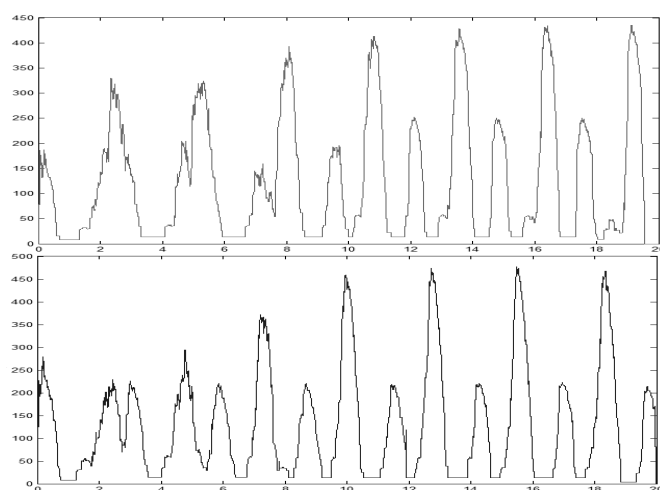


Рис. 14, $k_{in}=0.03$

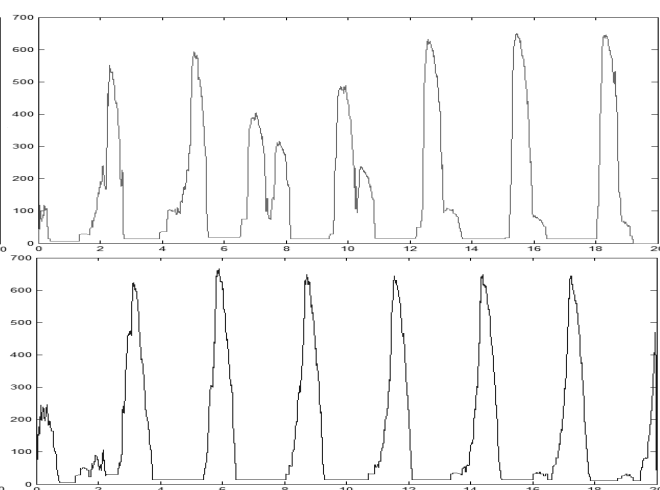


Рис. 15, $k_{in}=0.1$

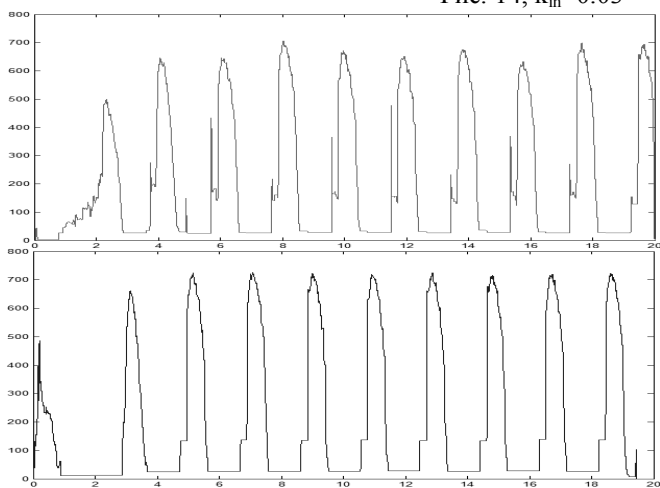


Рис. 16, $k_{in}=0.3$

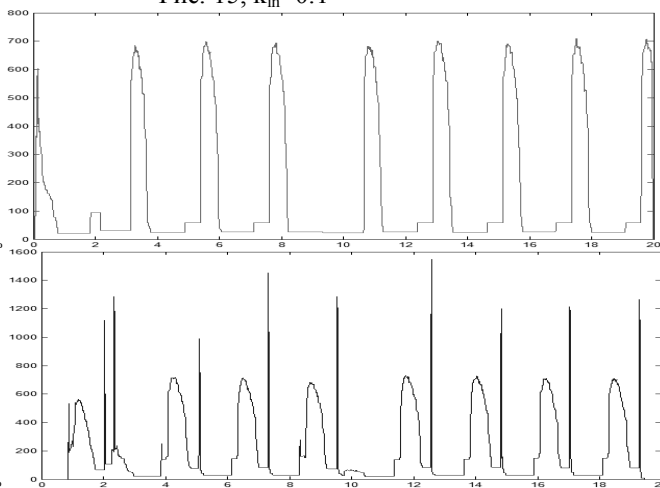


Рис. 17. При $k_{in}=3$

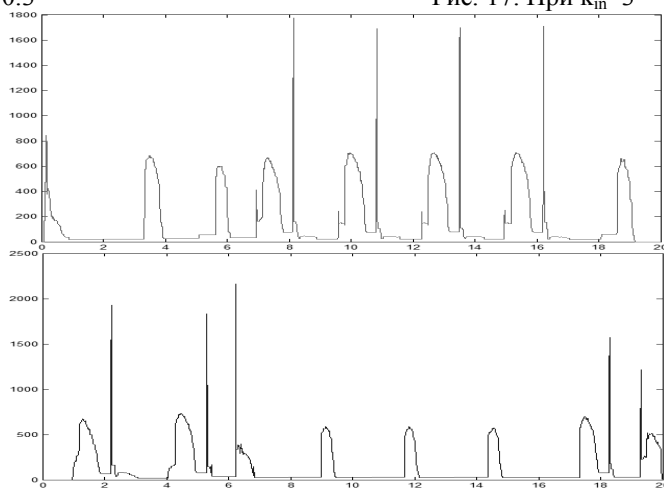


Рис. 18, $k_{in}=10$

Ясно, что нейроны, генерирующие короткие пачки, малоприспособлены для построения генератора дыхательного ритма. Достаточно хороший регулярный режим генератора осуществляется только в узком диапазоне параметра k_{in} (рис. 15, 16). Но даже для

такого регулярного режима форма колебаний не очень удобна для управления дыханием – пики узковаты, имеются резкие выбросы. Нежелательные особенности объясняются именно малой длительностью пачек – для пачек имеется слишком много возможностей для

размещения на временной оси, что и приводит к различным нарушениям регулярности.

Нейроны с более длинными пачками удобнее для построения генератора дыхательного ритма, причем предпочтение следует отдавать нейронам, у которых длительность пачки приблизительно совпадает с длительностью паузы между пачками – поведение генератора из таких нейронов наиболее предсказуемо.

6. Моделирование генератора дыхательного ритма на основе пейсмейкерных нейронов при воздействии блокатора кальциевой проводимости ЭР

Для практики большое значение имеет исследование влияния медикаментов на генератор дыхательного ритма. С помощью введения определённых веществ можно изменять свойства ионных каналов и тем самым изменять режим генерации дыхательного ритма. Для клеточной мембраны подобные исследования ведутся уже давно. Нас же больше интересуют каналы внутренней (эндоплазматической) мембраны. Здесь мы рассмотрим влияние дентролина (dantrolene) на генератор дыхательного ритма. Известно, что введение дентролина приводит к блокированию кальциевого канала эндоплазматической мембраны. В рамках рассматриваемой модели это означает обнуление кальциевой проводимости: $g_{0CaR} \rightarrow 0$. Как мы видели в разделе 3, при $g_{0CaR}=0$ нейрон не может генерировать пачки импульсов в стационарных условиях. Однако при наличии тормозящих связей от нейронов противоположного пула может быть реализован режим периодического нестационарного торможения для каждого нейрона, при этом (при достаточной силе тормозящих связей) может иметь место генерация ритма – противофазные колебания частот генерации первого и второго пулов.

Рассмотрим серию численных экспериментов. Каждый эксперимент длится 20 с (как в предыдущем разделе). Через 10 с после начала эксперимента кальциевые каналы внутренней мембраны полностью блокируются. В качестве нейронов возьмем нейроны с параметрами файла `resp16a.m`, т.е. нейроны, генерирующие в отсутствие торможения

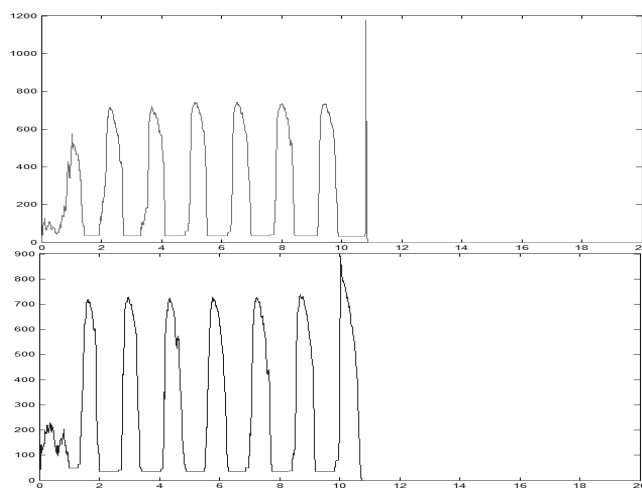
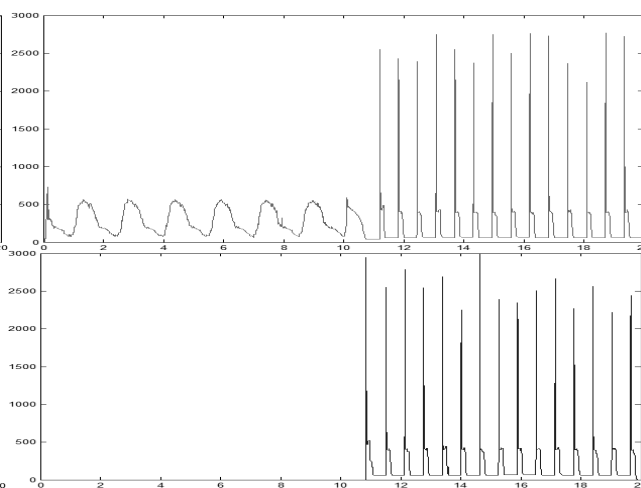
последовательности пачек с длительностью пачки немного меньшей длительности паузы.

При $k_{in}=0$ первые 10 с происходят несвязанные колебания частот генерации первого и второго пулов. После выключения кальциевых каналов внутренней мембраны генерация импульсов прекращается. Прекращение генерации происходит с некоторой задержкой относительно момента выключения каналов. Это связано с возможностью генерации нейроном одной пачки за счёт переходного процесса. При $k_{in}=0.1$ (рис. 19) за 10 с, к моменту выключения кальциевых каналов, колебания частот генерации первого и второго пулов успевают установиться (и стать противофазными). После выключения кальциевых каналов каждый нейрон может сгенерировать не более одной пачки. После этого всякая генерация импульсов прекращается. Здесь сигнал торможения довольно слабый и не может обеспечить периодический режим генерации за счёт нестационарности тормозящего сигнала.

Аналогичная ситуация имеет место при $k_{in}=0.3$ – силы связей вполне достаточно для генерации дыхательного ритма при работающих включённых кальциевых каналах внутренней мембраны, но недостаточно для генерации при заблокированных кальциевых каналах. Впрочем, из графиков мембранного потенциала видно, что некоторые нейроны (в частности, нейрон 1) делают попытку сгенерировать вторую пачку импульсов. Надо еще немного увеличить силу связей.

При $k_{in}=1$ первые 10 с генерация одного из пулов подавлена, при этом другой пул работает сам по себе. После выключения кальциевой проводимости внутренней мембраны имеет место генерация пачек обоими пулами, причём пачки одного пула расположены между пачками другого. Генерируемые пачки довольно короткие, каждая пачка включает два-четыре импульса. Период следования пачек от одного нейрона составляет около 0.6 с. Если и можно говорить о генерации дыхательного ритма, то надо помнить о специфичности этого ритма. Пачки разных нейронов одного пула хорошо синхронизованы, о чем говорят узость и высота максимумов колебаний частоты генерации.

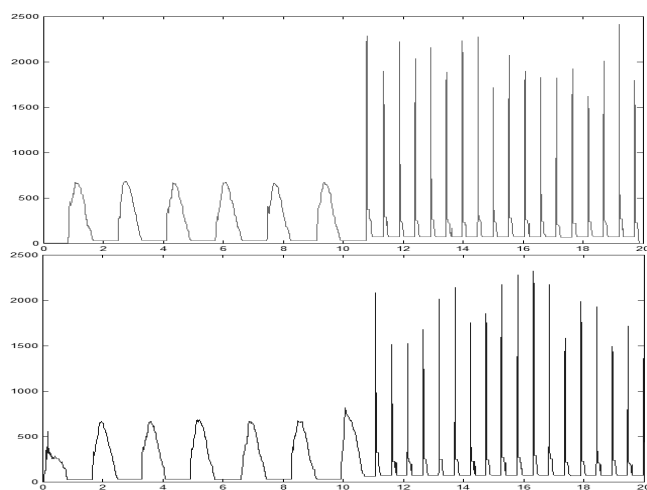
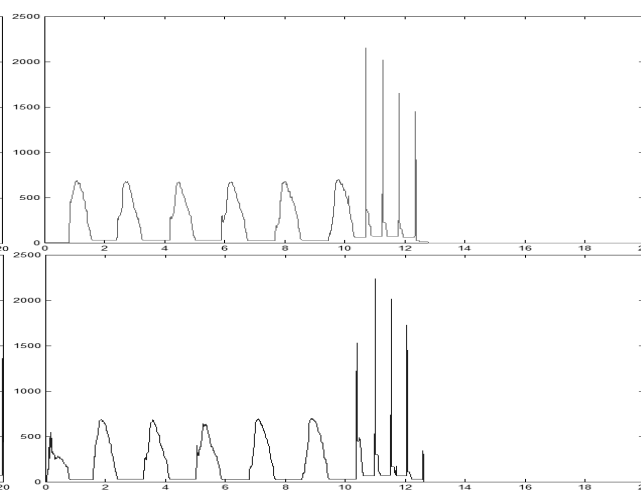
Аналогичная ситуация имеет место при $k_{in}=3$ (рис. 20). По сравнению со случаем $k_{in}=1$ здесь несколько больше период поддерживающихся колебаний частот генерации после блокирования кальциевых каналов внутренней мембраны. Здесь опять можно говорить о появлении дыхательного ритма после введения медикамента.

Рис. 19, $k_{in}=0.1$ Рис. 20, $k_{in}=3$

До сих пор мы сталкивались либо с прекращением генерации дыхательного ритма после введения медикамента (рис. 19), либо, наоборот, с появлением дыхательного ритма (не совсем дыхательного, конечно) под действием медикамента (рис. 20). Однако для некоторого диапазона (довольно узкого) параметра k_{in} блокирование кальциевых каналов внутренней мембраны приводит к смене одного дыхательного ритма другим. На рис. 21 представлены графики колебаний частот генерации для первого и второго пулов при $k_{in}=0.6$. Видно, что в после выключения кальциевых каналов происходит изменение типа колебаний частот генерации (с небольшой задержкой). Уменьшается период колебаний, увеличивается амплитуда и уменьшается ширина максимумов колебаний. Генерируемые

нейроном пачки становятся короче, уменьшается частота их следования. Для дыхания подобные изменения не полезны – дыхание становится слишком судорожным. Заметим, что подобное изменение характера колебаний может наблюдаться и при больших значениях параметра k_{in} , например, при $k_{in}=1$. Для этого значения параметра, картина может измениться из-за неконтролируемых изменений условий эксперимента.

При значениях параметра k_{in} , близких к указанному диапазону, но не достаточных для обеспечения постоянной генерации с выключенными кальциевыми каналами внутренней мембраны, наблюдаются несколько колебаний частот генерации. Для иллюстрации служит рис. 22, полученный при $k_{in}=0.5$.

Рис. 21, $k_{in}=0.6$ Рис. 22, $k_{in}=1$

Мы видели, что выключение калиевых каналов внутренней мембраны при достаточно сильных тормозящих связях приводит к высокой степени упорядоченности нейронов по фазам генерации. Этот факт подсказывает идею использования блокирования кальциевых каналов внутренней мембраны для борьбы с хаосом, препятствующим генерации дыхательного ритма. При достаточно больших значениях параметра k_{in} (например, при $k_{in}=3$) один из нейронных пулов не генерирует импульсы, а другой работает сам по себе.

При этом нет генерации дыхательного ритма. Чтобы её запустить, надо произвести упорядочение фаз нейронов. Это можно сделать, блокировав на некоторое время кальциевые каналы эндоплазматической мембраны.

Изменим условия численного эксперимента. Пусть через 10 с после начала эксперимента происходит выключение указанных кальциевых каналов, а ещё через 4 с проводимость этих каналов восстанавливается (до прежнего уровня). На рис. 23

представлены рассчитанные графики изменения частот генерации первого и второго пулов $k_{in}=3$. (Для расчёта мембранных потенциалов используется команда `resp24` с параметром, равным k_{in} .) Первые 10 секунд работает только первый пул. Следующие 4 секунды имеет место генерация учащённого (квазидыхательного) ритма без участия внутренних мембран. При этом происходит

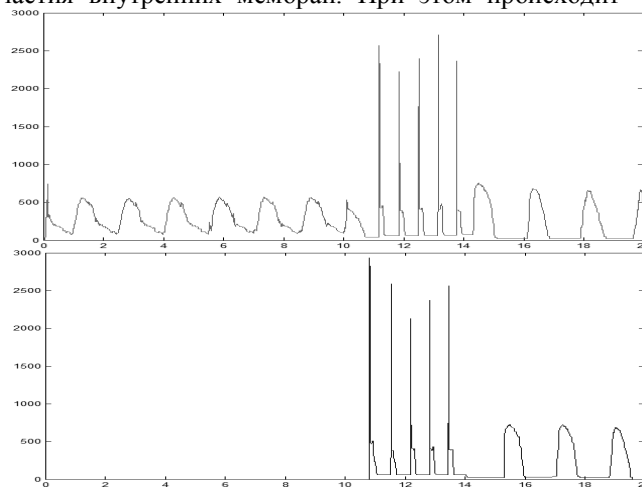


Рис. 23

упорядочение фаз нейронов. В результате после возвращения к исходному значению параметра k_{in} начинается генерация полноценного дыхательного ритма. Нейроны обоих пулов генерируют пачки (рис. 24), причём пачки одного пула располагаются между пачками другого пула. Шоковая терапия с выключение кальциевых каналов может быть полезной.

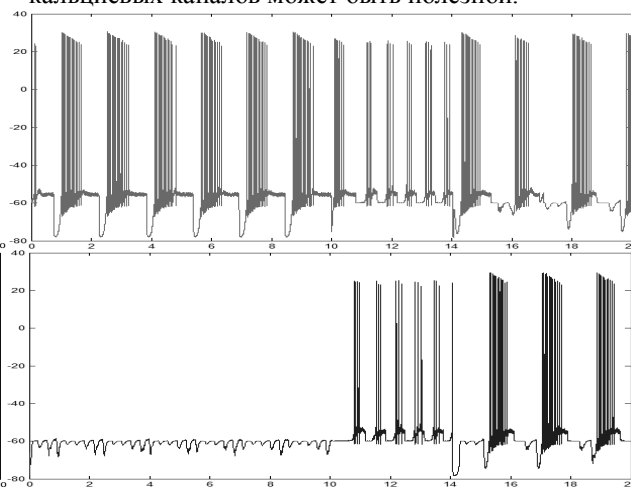


Рис. 24

Заключение

В настоящей работе описана нейросетевая модель дыхательной ритмики на основе детальной (с учетом конкретных типов ионных каналов) модели условного ритмического пейсмекера, основанного на кальций-зависимом высвобождении кальция из ЭР. Моделирование позволило исследовать режимы работы нейронной сети указанного типа и существенно расширить арсенал аналитических средств для экспериментаторов нейрофизиологов и врачей-клиницистов, работающих в области патологии дыхательной системы.

Постановка задачи работы предложена В.Л. Дуниным-Барковским. Часть подготовительной и вычислительной работы выполнялась при поддержке Программы Президиума РАН «Фундаментальные науки – медицине» в 2009-2011 гг.

Литература

1. J. Smith, A. Abdala, A. Borgmann, I. Rybak, J. Paton. Brainstem respiratory networks: building blocks and

microcircuits. // *Trends Neurosci.* – Vol. 36, 2013, p. 152-62.

2. В.Б. Котов, К.П. Соловьева. Моделирование нейронов генерирующих периодические залпы импульсов с учетом внутриклеточной динамики концентрации кальция. // Труды НИИСИ, 2013 (в настоящем сборнике).

3. W.L. Dunin-Barkowski, A.L. Escobar, A.T. Lovering, J.M. Orem Respiratory Pattern Generator Model Using Ca^{++} -induced Ca^{++} Release in Neurons Shows both Pacemaker and Reciprocal Network Properties // *Biol. Cybernetics*, – Vol. 89, No. 4, 2003. P. 274-288

4. В. Дунин-Барковский, В. Котов, И. Смирнитская, А. Жуков. Элементы обратной инженерии нейронных систем на уровне базовых информационных процессов. // *Фундаментальные науки – медицине. Тезисы докладов на конференциях и семинарах по научным направлениям Программы в 2011 году*. М.: Фирма «Слово», 2011. (334 с.) С. 209-211.

5. L.K. Purvis, and R.J. Butera Ionic Current Model of a Hypoglossal Motoneuron. // *J. Neurophysiol* – Vol. 93, 2005. P. 723–733.

The neural network model of respiratory rhythmicity based on processes depending on endoplasmic reticulum

K. P. Solovyeva, V.B. Kotov

Abstract. We consider a detailed model of pacemaker neurons. These neurons are part of the network of respiratory rhythm generator. In this model, in addition to ion channel Biophysics outer cell membrane than the processes relating to the calcium-dependent release of calcium from the endoplasmic reticulum. The possibility of neurons as a pacemaker neurons, depending on the range of values of certain parameters.

Моделирование когнитивной эволюции – перспективное направление междисциплинарных исследований

В.Г. Редько

доктор физико-математических наук

Обсуждается перспективное направление междисциплинарных исследований – моделирование когнитивной эволюции, т.е. эволюции познавательных способностей биологических организмов, в результате которой произошли логика, мышление, интеллект человека. Характеризуются заделы исследований когнитивной эволюции и предлагаются контуры программы моделирования когнитивной эволюции. Подчеркиваются междисциплинарные связи этих исследований.

1. Введение

В настоящей работе обсуждается перспективное направление междисциплинарных исследований – моделирование когнитивной эволюции, т.е. эволюции познавательных способностей биологических организмов. Аргументируется, что актуальность исследований когнитивной эволюции связана с глубокой гносеологической проблемой: почему формальное логическое человеческое мышление, казалось бы, совсем не связанное с реальным физическим миром, применимо к познанию природы? Показано, что имеются заделы моделирования когнитивной эволюции, развиваемые в целом ряде направлений исследований. Обсуждаются перспективы моделирования когнитивной эволюции. Характеризуются междисциплинарные связи рассматриваемых исследований.

2. Ключевые проблемы

Наиболее серьезные и глубокие когнитивные процессы – это процессы научного познания. Но насколько способен человек познавать внешний мир? Почему формальный логический вывод, сделанный *человеком*, применим к реальным объектам в *природе*? Поясним эти вопросы. Рассмотрим, например, физику, одну из фундаментальных естественнонаучных дисциплин. Мощь физики связана с эффективным применением математики. Но математик делает логические выводы, доказывает теоремы независимо от внешнего мира, используя свое мышление. Почему же эти выводы применимы к реальной природе? В более общей формулировке проблема может быть сформулирована так: почему логика человеческого мышления применима к познанию природы?

Для того чтобы разобраться в применимости логического мышления человека к познанию природы, целесообразно проанализировать эволюцию познавательных способностей биологических организмов, исследовать эволюционные корни познавательных способностей человека.

Как же исследовать происхождение логических форм мышления? Как промоделировать это происхождение? Как исследования эволюционного происхожде-

ния мышления могут быть связаны с основаниями науки, основаниями математики? Есть ли задел работ по моделированию эволюции познавательных способностей животных? Далее обсуждаются перечисленные вопросы. Но, прежде всего, кратко остановимся на вопросе: можно ли вообще в принципе провести такие исследования?

Итак, можно ли проследить эволюционные корни логических правил, используемых в дедуктивных доказательствах? По мнению автора настоящей статьи, да, можно. Приведем следующую аналогию.

Одно из элементарных правил, которое использует математик в логических заключениях, – правило *modus ponens*: «если имеет место A , и из A следует B , то имеет место B », или

$$\frac{A, A \rightarrow B}{B}. \quad (1)$$

Перейдем от математики к собаке, у которой вырабатывают классический условный рефлекс. При выработке рефлекса в памяти собаки формируется связь «за УС должен последовать БС» (УС – условный стимул, БС – безусловный стимул). И когда после выработки рефлекса собаке предъявляют УС, то она, помня о хранящейся в ее памяти «записи» $УС \rightarrow БС$, делает элементарный «вывод»:

$$\frac{УС, УС \rightarrow БС}{БС}. \quad (2)$$

И собака ожидает БС.

Конечно, чисто дедуктивное применение формального правила *modus ponens* математиком и основанный на обобщении опыта индуктивный «вывод», который делает собака, явно различаются. Тем не менее, и в первом и во втором случаях речь идет о следственной связи между математическими утверждениями либо событиями: из A следует B , за УС следует БС. Хотя контексты следственной связи, следственной зависимости в этих двух случаях различны: в первом случае B есть формальное логическое следствие A ; во втором случае в процессе наблюдений формируется и запоминается причинно-следственная связь между событиями УС и БС, следующими одно за другим во времени.

Итак, применение правила *modus ponens* при дедуктивном выводе аналогично «выводу» на основе классического условного рефлекса.

Указанная аналогия позволяет задуматься об эволюционных корнях логических правил, используемых в математике. Таким образом, можно анализировать эволюционные корни логического мышления и строить модели эволюционного происхождения логических правил, используемых в научном познании.

При этом результат эволюции – правила логического вывода, используемые при математических доказательствах, – известны и достаточно хорошо формализованы [1]. В основе этих выводов – элементарные правила, такие как *modus ponens*.

Важно подчеркнуть, что были и попытки пересмотра оснований математики в близком к исследованиям когнитивной эволюции контексте. В статье В.Ф. Турчина [2] предпринята весьма нетривиальная попытка пересмотра оснований математики и рассмотрена возможность построения предиктивных логических правил в контексте теории множеств и кибернетического подхода к обоснованию математики. В.Ф. Турчиным также была предложена концептуальная теория метасистемных переходов (переходов от нижних уровней кибернетических систем к более высоким уровням) [3], которая может быть использована при моделировании когнитивной эволюции.

Как же конкретно вести моделирование когнитивной эволюции? Есть ли задел таких исследований? Оказывается, что да, такой задел в той или иной форме существует в нескольких современных направлениях исследований в области вычислительных наук. Эти направления характеризуются в следующем разделе.

3. Заделы моделирования происхождения мышления

Адаптивное поведение. Направление «Адаптивное поведение» развивается с начала 1990-х годов [4]. Основной подход направления – конструирование и исследование искусственных «организмов» (в виде компьютерной программы или робота), способных приспосабливаться к переменной внешней среде. Эти организмы часто называются «аниматами» (от англ. *animal* и *robot*: *animal* + *robot* = *animat*), агентами, автономными агентами. Исследователи адаптивного поведения разрабатывают такие модели, которые применимы к описанию поведения как реального животного, так и искусственного анимата [5]. Дальняя цель этих работ – анализ эволюции когнитивных способностей животных и происхождения интеллекта человека [6]. Эта цель близка к задаче моделирования когнитивной эволюции.

Искусственная жизнь. Близким направлением к «Адаптивному поведению» является интересное направление исследований «Искусственная жизнь». Основной мотивацией исследований искусственной жизни служит желание понять и промоделировать формальные принципы организации биологической жизни. Как сказал руководитель первой международной конференции по искусственной жизни К. Лэнгтон, «основное предположение искусственной жизни состоит в том, что "логическая форма" организма может быть отделена от материальной основы его конструкции».

Сторонники направления «Искусственная жизнь»

часто считают, что они исследуют более общие формы жизни, чем те, которые существуют на Земле. То есть изучается жизнь, какой она могла бы в принципе быть (“*life-as-it-could-be*”), а не обязательно та жизнь, какой мы ее знаем (“*life-as-we-know-it*”). Обзор ранних работ по искусственной жизни содержится в [7].

Когнитивные архитектуры. Под когнитивными архитектурами понимаются структуры и принципы функционирования познающих систем, которые можно использовать в искусственном интеллекте. Пример когнитивной архитектуры – система Soar (от англ. *State, Operator And Result*). Основная цель работ по Soar – создание системы функционирования интеллектуальных агентов, работающих в широкой области: от простейших форм до оперирования в сложных, заранее не предсказуемых условиях. Систему Soar предложили специалисты в области искусственного интеллекта еще в 1980 годах, тогда ее инициировали, как попытку построить унифицированную теорию познания. Обзор исследований по когнитивным архитектурам и Soar содержится в работах [8, 9]. В последние годы большое внимание уделяется биологически инспирированным когнитивным архитектурам [10].

Интеллектуальные автономные агенты. Это близкое к когнитивным архитектурам направление исследований, в котором большое внимание уделяется биологически обоснованным автономным агентам и компьютерным моделям агентов, обладающих когнитивными и некоторыми интеллектуальными свойствами. Обзор исследований по автономным агентам содержится в работе [11]. Необходимо подчеркнуть, что автономные агенты могут рассматриваться как объединяющее понятие для указанных направлений исследований: агенты вполне естественно могут моделировать биологические организмы и искусственные аналоги организмов. Также естественно изучать познавательные свойства и знания автономных агентов.

Близкие работы по научным основам искусственного интеллекта. Такие работы включают исследования когнитивных систем роботов [12], изучение нестандартных логик [13], исследование познавательных методов, используемых человеком [14].

Примеры моделей адаптивного поведения автономных агентов, иллюстрирующие некоторые срезы отмеченных исследований, кратко излагаются в следующем разделе.

4. Примеры моделей адаптивного поведения автономных агентов

4.1. Модели мозга и поведения в Институте нейронаук

В Институте нейронаук, руководимом лауреатом Нобелевской премии Дж. Эдельманом (сайт института: <http://www.nsi.edu>), более 25 лет ведутся разработки поколений моделей работы мозга (*Darwin I*, *Darwin II*, ...). В последние годы идут исследования адаптивного поведения искусственного организма NOMAD (*Neurally Organized Mobile Adaptive Device*), система управления которого построена на базе этих моделей.

Работы по NOMAD'у – исследование поведения адаптивного роботоподобного устройства, использующего модели мозга (авторы называют его также Brain-based device), принципы моделирования которого состоят в следующем:

1) устройство помещается в реальную физическую среду,

2) имеется некоторая поведенческая задача, которую должно решать устройство,

3) поведение устройства контролируется модельной нервной системой, которая отражает архитектуру мозга и динамику процессов в мозге,

4) поведение устройства и процессы в модельной нервной системе должны допускать сравнение с экспериментальными биологическими данными.

В одной из работ по NOMAD'у [15] промоделировано поведение мыши в лабиринте Морриса.

Исследования поведения мыши или крысы в лабиринте Морриса – один из канонических биологических экспериментов, который состоит в следующем. Имеется бассейн с непрозрачной жидкостью (например, это может быть вода, подкрашенная молоком), на бортах бассейна есть рисунки, которые мышь видит и может использовать для ориентировки. В определенном месте бассейна есть скрытая платформа, которую мышь может найти и тем самым спастись – не утонуть. Мышь бросают в бассейн, она плавает некоторое время и либо находит платформу и спасается, либо начинает тонуть (тогда ее спасает экспериментатор). После ряда экспериментов мышь начинает использовать ориентиры на бортах бассейна и находить платформу за достаточно короткое время.

Поведение NOMAD'а в лабиринте Морриса моделировалась следующим образом [15]. NOMAD представлял собой подвижное роботоподобное устройство на колесах, управляемое нейронной сетью, состоящей из 90000 нейронов, в которой было выделено 50 различных нейронных областей, в частности, были выделены несколько областей гиппокампа. В сети было $1.4 \cdot 10^6$ синаптических контактов между нейронами. Программно нейронная сеть была реализована на основе компьютерного кластера.

Сенсорная система NOMAD'а включала зрение, систему инфракрасных приемников-излучателей, обеспечивающую избегание столкновений, и специальный детектор скрытой от зрения платформы, позволяющий обнаруживать эту платформу только тогда, когда NOMAD находился непосредственно над ней.

NOMAD помещался в комнату, в которой была скрытая платформа; на стенах комнаты были видимые NOMAD'у разноцветные полосы – ориентиры. В начале каждого из экспериментов NOMAD помещался в разные участки комнаты, задача NOMAD'а была найти скрытую платформу. Обучение нейронных сетей NOMAD'а осуществлялось по модифицированному правилу Хебба (увеличение или уменьшение веса синаптической связи между активными нейронами) на основе поощрений (получаемых при нахождении скрытой платформы) и наказаний (получаемых при приближении к стенам комнаты).

Было продемонстрировано, что

1) NOMAD самостоятельно обучается находить платформу достаточно быстро (за 10-20 попыток);

2) в модельном гиппокампе формируются нейроны места, активные только тогда, когда NOMAD находится в определенных участках комнаты;

3) в модельном гиппокампе формируются связи между отдельными нейронными областями, отражающие причинно-следственные зависимости.

Итак, изложенная модель представляет собой интересное компьютерное исследование самообучающегося устройства, хорошо продуманное с биологической точки зрения.

4.2. Бионическая модель поискового поведения

Одно из актуальных направлений исследований в рамках моделирования поведения автономных агентов – имитация поискового поведения животных. В работе [16] исследовано поисковое поведение на примере личинок ручейников, обитающих на дне водоемов. Личинки носят на себе защищающий их «домик» – трубку из песчинок и других частиц, собираемых со дна водоемов. Частицы скрепляются между собой по краям с помощью клейкой белковой нити. Строительство домика требует меньше времени, усилий и белка, если личинки используют относительно крупные и плоские частицы. Однако поиск крупных частиц на дне водоема требует затрат времени и энергии, не известных личинке заранее.

В [16] построена компьютерная модель поискового поведения личинок ручейников, строящих чехол-домик из частиц разного размера и ведущих поиск скоплений подходящих частиц. Модель использует понятие мотивации к прикреплению частиц к домику. Динамика регулирующей поведение мотивации $M(t)$ описывается уравнением:

$$M(t) = k_1 M(t-1) + \xi(t) + I(t), \quad (3)$$

время t дискретно, k_1 – параметр, характеризующий медленную релаксацию мотивации ($0 < k_1 < 1$, $1 - k_1 \ll 1$), $\xi(t)$ – случайные вариации мотивации, величина $I(t)$ характеризует направленное изменение мотивации при тестировании модельной личинкой частиц:

$$I(t) = k_2 (S_{curr} - S_{last}) / S_{last}, \quad (4)$$

где k_2 – положительный параметр, S_{curr} – площадь тестируемой в данный момент частицы, S_{last} – площадь последней протестированной ранее частицы. Если мотивация $M(t)$ достаточно велика, то происходит сбор и прикрепление частиц к домику, если $M(t)$ мала, то модельная личинка ищет новое место с подходящими размерами частиц.

Важно, что в модели использовались знания личинки о размерах последних протестированных и прикрепленных частиц.

Построенная модель качественно согласуется с биологическими экспериментальными данными: как в эксперименте, так и в модели к домику преимущественно прикрепляются крупные частицы, есть сильный разброс числа прикрепляемых частиц и момента начала прикрепления, число прикрепляемых частиц в обоих случаях невелико.

Очерченные модели – это только два примера из многочисленных исследований автономных агентов с когнитивными свойствами.

Еще одно направление работ, близкое к изучению когнитивной эволюции – биологические исследования познавательных способностей живых организмов. Это направление характеризуется в следующем разделе.

5. Биологические эксперименты по «элементарному мышлению животных»

В последние годы проведены интересные биологические исследования, показывающие, что элементарные формы мышления присущи не только высшим животным, но и достаточно простым, например, насекомым (пчелам, муравьям) или врановым птицам.

Пчелы сообщают другим пчелам, где искать медоносные цветы. Еще в 1920-е годы Карл фон Фриш начал исследования способа передачи пчелами информации друг другу. К. фон Фриш обратил внимание на то, что возвращающиеся в улей пчелы-сборщицы совершают танец, привлекающий внимание других пчел. Угол, составленный осью танца и вертикалью, соответствует углу между направлением на пищу и направлением на солнце. Причем этот угол для танцующей пчелы меняется в соответствии с движением солнца. Скорость танца соответствует расстоянию между пищей и ульем. Танцующая пчела также пахнет, ее запах характеризует медоносный цветок. Другие пчелы наблюдают этот танец и затем находят те цветы, с которых прилетела танцующая пчела (на расстоянии до нескольких километров).

Интересно, что в 1990-е годы Б. Андерсен и А. Михельсен создали искусственную пчелу-робота, которая также танцевала и с помощью танца передавала информацию живым пчелам. Живые пчелы летели из улья на поляну, руководствуясь указаниями пчелы-робота. Подробнее об этой передаче символической информации см. обзор Ж.И. Резниковой [17].

Муравьи могут передавать друг другу информацию со скоростью около 1 бита в минуту и запоминать небольшие целые числа. В семье рыжих лесных муравьев можно выделить рабочие группы, состоящие из одного разведчика и 3-8 фуражиров. Каждый разведчик, найдя пищу, вступает в контакт со своей группой и передает информацию фуражирам, где нужно искать пищу. В экспериментах и расчетах Ж.И. Резниковой и Б.Я. Рябко исследовалось поведение муравьев с помощью специально изготовленных ветвящихся лабиринтов небольшой глубины: каждый путь разветвлялся на два, было до 5-6-ти развилок в лабиринте. Было установлено, что муравьи-разведчики могли запомнить путь к кормушке, а затем путем контактов с фуражирами передавать им информацию о том, в каком месте лабиринта находится пища [17, 18]. Зная глубину лабиринта и время контакта, Ж.И. Резникова и Б.Я. Рябко определяли количество информации, передаваемой разведчиками фуражирам, и скорость передачи этой информации. В результате оказалось, что скорость передачи информации составляла около 1 бита в минуту.

Причем, если путь был достаточно простым, например, в каждой развилке лабиринта надо было всегда поворачиваться в левую ветку, то разведчики могли использовать «сжатую» информацию и передавать ее фуражирам с большей скоростью. Образно говоря, муравьи «освоили» как информацию по Шеннону, так и информацию по Колмогорову (подробнее см. [17-19]).

Кроме этого, исследовалась передача информации между муравьями-разведчиками и фуражирами для более простых лабиринтов-гребенок, состоящих из одного основного канала, от которого ответвляются в одну сторону одинаковые каналы (до 40 веток) [19]. Пища находилась в одном из ответвлений. Муравьи оказались способными запоминать и передавать друг другу сведения о номере ветки, т.е. они умели определенным образом считать.

Новокаледонские вороны могут изобретать способ изготовления орудия труда. Обычно в природе новокаледонские вороны могут обкусывать веточки так, что получаются простые орудия (заостренные палочки или крючки). На заостренную палочку ворона может насаживать личинки насекомых, а крючком вытаскивать личинок из-под коры.

В университете Оксфорда проводили исследования с воронами, находившимися долгое время в неволе [20]. Двум воронам (молодой самке и самцу постарше) предлагали добывать ведро с пищей со дна прозрачного вертикального цилиндра. Рядом с цилиндром были прямая проволока и проволока, согнутая крючком. Ведро можно было вытащить крючком, но не прямой проволокой. Раньше с проволокой вороны дела не имели. Тем не менее, они сразу поняли, что ведро можно вытащить с помощью крючка.

Неожиданность произошла, когда самец утащил крючок. Тогда самка сначала попыталась подцепить ручку ведра прямым куском проволоки (что было безуспешно), а потом довольно быстро научилась делать из прямой проволоки крючок, зажимая один конец проволоки в одной из щелей экспериментальной установки и загибая проволоку. А затем с помощью изготовленного ей крючка доставала ведро с пищей. В дальнейшем, если крючок убирал, а оставляли прямую проволоку, ворона сразу делала крючок и доставала пищу. Отметим, что самец не перенимал опыт самки, он наблюдал за ней и иногда отнимал у нее пищу.

Таким образом, ворона сама, без какого-либо обучения, без каких-либо инструкций, изобрела способ изготовления орудия труда. Подробнее см. [20] и сайт исследователей новокаледонских ворон университета Оксфорда [<http://users.ox.ac.uk/~kgroup/index.html>, <http://users.ox.ac.uk/~kgroup/tools/introduction.shtml>].

Новокаледонские вороны могут мысленно составлять планы цепочек целенаправленных действий. Еще одно интересное исследование с новокаледонскими воронами провели исследователи из Новой Зеландии [21]. Задание для ворон состояло из 3-х следующих частей. 1) Сначала надо было подтянуть к себе шнуром и освободить от шнура маленькую палочку, которая висела на шнуре. 2) Затем с помощью маленькой палочки требовалось достать из одного зарешеченного контейнера длинную палочку. 3) Наконец, с помощью длинной палочки надо было достать пищу из

второго контейнера. Причем, без короткой палочки нельзя было достать длинную, а короткой палочкой нельзя было дотянуться до пищи во втором контейнере. То есть весь процесс добывания пищи должен был состоять из трех последовательных шагов, на которых надо было использовать три «инструмента»: шнур, маленькую палочку, длинную палочку.

Предварительно вороны тренировались в более простых условиях: они могли использовать часть или все эти инструменты по отдельности. Когда им нужно было выполнить полное задание из трех шагов, то те вороны, которые имели опыт использования всех трех инструментов по отдельности, выполняли задание с первого раза, а те, которые предварительно освоили инструменты частично, выполняли задание не всегда с первого раза, но, тем не менее, тоже быстро научились с ним справляться.

Таким образом, вороны научились продумывать план решения новой задачи, мысленно связывая в плане ранее освоенный опыт.

6. Контур программы будущих исследований когнитивной эволюции

Как же использовать очерченные заделы и знания при моделировании когнитивной эволюции? Каковы эволюционные уровни, на которых стоит остановиться? Как от простых форм поведения автономных агентов идти к логическим формам, используемым в научном познании? Предложим контуры программы будущих исследований, нацеленных на моделирование когнитивной эволюции. При этом постараемся выделить наиболее существенные этапы, ведущие к логическому мышлению.

А. Моделирование поведения автономных агентов с несколькими естественными потребностями: питания, размножения, безопасности. Это могло бы быть моделирование достаточно естественного и полноценного поведения простых модельных организмов. Моделирование в этом направлении уже начато, см. ниже.

Б. Исследование перехода от физического уровня обработки информации в нервной системе животных к уровню обобщенных образов. Такой переход можно рассматривать, как появление в «сознании» животного свойства «понятие». Обобщенные образы можно представить как мысленные аналоги наших слов, не произносимые животными, но реально используемые ими. Использование понятий приводит к существенному сокращению и требуемой памяти, и времени обработки информации, поэтому оно должно быть эволюционно выгодным.

В. Исследование процессов формирования причинных связей в памяти животных. Запоминание причинно-следственных связей между событиями во внешней среде и адекватное использование этих связей в поведении — одно из ключевых свойств активного познания животным закономерностей внешнего мира. Такая связь формируется, например, при выработке условного рефлекса: животное запоминает связь между условным стимулом (УС) и следующим за ним без-

условным стимулом (БС), что позволяет ему предвидеть события в окружающем мире и адекватно использовать это предвидение.

Естественный следующий шаг — переход от отдельных причинных связей к логическим выводам на основе уже сформировавшихся знаний.

Г. Исследование процессов формирования логических выводов в «сознании» животных. Фактически, уже на базе классического условного рефлекса животные способны делать «логический вывод» вида: $\{УС, УС \rightarrow БС\} \Rightarrow БС$ или «Если имеет место условный стимул, и за условным стимулом следует безусловный, то нужно ожидать появления безусловного стимула». В определенной степени такие выводы подобны выводам математика, доказывающего теоремы (см. выше, раздел 2). И целесообразно разобраться в системах подобных выводов, понять, насколько эффективна логика поведения животных и насколько она подобна нашей, человеческой логике.

Перечисленные пункты очерчивают круг исследований от моделирования простейших форм поведения к логическим правилам, используемым в математике. Опираясь на эти пункты, мы начали соответствующее моделирование.

7. Начальные шаги моделирования когнитивной эволюции

7.1. Компьютерная модель автономных агентов, имеющих естественные потребности

В работе [22] была построена и исследована компьютерная модель автономных агентов, обладающих естественными для живых организмов потребностями питания, безопасности и размножения. Предполагалось, что агент имеет определенный ресурс R , который уменьшался при выполнении действий и увеличивался при питании. Кроме того, ресурс агента существенно уменьшался, когда на агента нападал активный хищник. Потребностям агента соответствовали три фактора: фактор питания F_F , фактор безопасности F_S , фактор размножения F_R . Для каждого фактора имелся порог T_F , T_S и T_R , при превышении фактором которого удовлетворялась соответствующая потребность.

Между потребностями вводилась следующая иерархия: 1) пищевая потребность (наиболее приоритетна), 2) потребность безопасности, 3) потребность размножения (наименее приоритетна). Потребность считалась ведущей, если она была наиболее приоритетной из всех потребностей, для которых фактор меньше своего порога.

Система управления агента была основана на наборе правил вида: $S_k \rightarrow A_k$ (в ситуации S_k нужно выполнить действие A_k). Ситуация S_k определялась активностью хищника рядом с агентом, предыдущим действием агента и ведущей потребностью. Агент мог выполнять одно из следующих действий A_k : 1) поиск пищи, 2) питание, 3) подготовка к размножению, 4) размножение, 5) оборона, 6) покой. Каждое правило

имело свой вес W_k , веса правил настраивались методом обучения с подкреплением [23]. Агент выполнял действия, соответствующие правилам с наибольшими весами.

Моделирование показало, что в результате обучения происходит формирование циклов поведения, в которых последовательно удовлетворяются потребности питания, безопасности и размножения. Подробнее см. [22].

7.2. Модель формирования обобщенных эвристик и простых обобщенных образов

Формирование обобщенных эвристик и простых обобщенных образов в процессе обучения автономных агентов при поиске агентами пищи в двумерной клеточной среде было продемонстрировано в компьютерной модели [24]. Модель предполагала, что в части клеток были порции пищи. При съедании пищи ресурс агента пополнялся. Система управления агента была основана на правилах вида $S \rightarrow A$, веса правил оптимизировались методом обучения с подкреплением. В результате обучения агент самостоятельно формировал обобщающие эвристики: если имеется пища в той же клетке, в которой находится агент, то нужно съесть пищу; если в клетке агента нет пищи, но есть пища в клетке впереди или справа/слева от агента, то нужно выполнить действие «перемещение вперед» или «поворот направо/налево». В модели вводилась процедура усреднения, в результате которой агент формировал внутренние понятия «имеется пища в моей клетке», «имеется пища в клетке впереди меня», «имеется пища в клетке справа/слева от меня». Фактически эти понятия использовались в обобщающих эвристиках, которые формировались автономным агентом в процессе его самообучения.

Таким образом, построены первые модели, соответствующие предложенной программе (раздел 6), хотя пока эти модели целесообразно рассматривать только как начальный этап более полноценных исследований.

8. Междисциплинарные связи исследований когнитивной эволюции

Укажем потенциальные междисциплинарные связи будущих исследований когнитивной эволюции и тем самым подчеркнем перспективность этих исследований.

- Эти исследования связаны с основаниями науки, с основаниями математики, с серьезной проблемой: почему логические выводы, математические доказательства применимы к реальной природе.
- Данные исследования интересны с гносеологической точки зрения – они нацелены на прояснение причин применимости человеческого мышления в познании природы.
- В ряде направлений исследований вычислительных наук и в биологических работах развивается задел по моделированию когнитивной эволюции.
- Эти исследования интересны с точки зрения развития когнитивных наук, так как они связаны с

наиболее важными когнитивными процессами – процессами научного познания.

9. Заключение

Итак, имеется ряд заделов моделирования когнитивной эволюции в направлениях «Адаптивное поведение», «Искусственная жизнь», «Когнитивные архитектуры», в научных основах разработок искусственного интеллекта. Еще одно близкое направление работ – биологические исследования, направленные на изучение «элементарного мышления животных» (раздел 5). Хотя работ на стыке биологии и вычислительных наук, направленных на моделирование «интеллектуального» поведения животных, пока еще явно недостаточно.

Выше наиболее четко очерчен подход к исследованию эволюционного происхождения логического мышления, используемого в математических доказательствах (раздел 2). Существенное достоинство этого подхода – ясен конечный результат эволюции: правила логического вывода, используемые при математических доказательствах, известны и достаточно хорошо формализованы.

Сопоставляя пункты контуров программы моделирования когнитивной эволюции (раздел 6) с отмеченными и другими известными моделями, можно заключить, что имеются отдельные небольшие элементы, соответствующие каждому из пунктов. Образно говоря, у нас уже есть некоторые очень небольшие фрагменты картины, но мы еще не видим всей картины когнитивной эволюции. Четкая последовательность серьезных, канонических моделей, которые показывали бы общую картину происхождения мышления, должна сформироваться в будущем.

Работа выполнялась при поддержке РФФИ, проект 13-01-00399.

Литература

1. Математическая теория логического вывода. Под ред. А.В. Идельсона и Г.Е. Минца. – М.: Наука, 1967.
2. V.F. Turchin A constructive interpretation of the full set theory // *Journal of Symbolic Logic*. – V. 52. No. 1. 1987. P. 172-201.
3. В.Ф. Турчин Феномен науки. Кибернетический подход к эволюции. – М.: Наука, 1993.
4. From Animals to Animats. Proceedings of the First International Conference on Simulation of Adaptive Behavior. Eds. J.-A. Meyer, S.W. Wilson. – Cambridge: MIT Press, 1991.
5. В.А. Непомнящих Поиск общих принципов адаптивного поведения живых организмов и аниматов // *Новости искусственного интеллекта*. – № 2. 2002. С. 48-53.
6. J.Y. Donnat, J.-A. Meyer Learning reactive and planning rules in a motivationally autonomous animat // *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics - Part B: Cybernetics*. – V. 26. No.3. 1996. P. 381-395.

7. В.Г. Редько Эволюция, нейронные сети, интеллект: Модели и концепции эволюционной кибернетики. – М.: УПСС, 2005.
8. P. Langley, J.E. Laird, S. Rogers Cognitive architectures: Research issues and challenges // *Cognitive Systems Research*. – V.10. No. 2. 2009. P. 141-160.
9. J.E. Laird The Soar Cognitive Architecture. – Cambridge et al.: The MIT Press, 2012.
10. Biologically Inspired Cognitive Architectures 2012. Proceedings of the Third Annual Meeting of the BICA Society. Eds. A. Chella, R. Pirrone, R. Sorbello, K.R. Johansdottir. – Heidelberg et al: Springer, 2012.
11. D. Vernon, G. Metta, G. Sandini A survey of artificial cognitive systems: Implications for the autonomous development of mental capabilities in computational agents // *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*. – V. 11. No. 2. 2007. P. 151-180.
12. Л.А. Станкевич Искусственные когнитивные системы // XII Всероссийская научно-техническая конференция «Нейроинформатика-2010»: Лекции по нейроинформатике. – М.: НИЯУ МИФИ, 2011. С. 106-160.
13. В.К. Финн О машинно-ориентированной формализации правдоподобных рассуждений в стиле Ф. Бэкона – Д.С. Милля // *Семиотика и информатика*. 1983. М.: ВИНТИ. Вып. 20. С. 35-101.
14. O. Anshakov, T. Gergely Cognitive Reasoning: A Formal Approach. – Heidelberg et al: Springer, 2010.
15. J.L. Krichmar, A.K. Seth, D.A. Nitz, J.G. Fleischer, G.M. Edelman Spatial navigation and causal analysis in a brain-based device modeling cortical-hippocampal interactions // *Neuroinformatics*. – V. 3. No. 3. 2005. P. 197-221.
16. В.А. Непомнящих, Е.Е. Попов, В.Г. Редько Бионическая модель адаптивного поискового поведения // *Известия РАН. Теория и системы управления*. – № 1. 2008. С. 85-93.
17. Ж.И. Резникова Современные подходы к изучению языкового поведения животных // Сборник «Разумное поведение и язык. Коммуникативные системы животных и язык человека». – М.: «Языки славянских культур», 2008. С. 293-337.
18. Ж.И. Резникова, Б.Я. Рябко Теоретико-информационный анализ «языка» муравьев // *Журнал общей биологии*. – Т. 51. № 5. 1990. С. 601-609.
19. Ж.И. Резникова, Б.Я. Рябко Передача информации о количественных характеристиках объекта у муравьев // *Журнал высшей нервной деятельности*. – Т. 45. №3. 1995. С. 500-509.
20. A.A.S. Weir, J. Chappell, A. Kacelnik Shaping of hooks in New Caledonian crows // *Science*. – V. 297. No. 5583. 2002. P. 981-983.
21. A.H. Taylor, D. Elliffe, G.R. Hunt, R.D. Gray Complex cognition and behavioural innovation in New Caledonian crows // *Proceedings of the Royal Society. B*. – V. 277. No. 1694. 2010. P. 2637-2643.
22. А.Г. Коваль В.Г. Редько Поведение модельных организмов, обладающих естественными потребностями и мотивациями // *Математическая биология и биоинформатика* (электронный журнал). – Т. 7. № 1. 2012. С. 266-273.
URL: [http://www.matbio.org/2012/Koval2012\(7_266\).pdf](http://www.matbio.org/2012/Koval2012(7_266).pdf).
23. Р.С. Саттон, Э.Г. Барто Обучение с подкреплением. – М.: Бином, 2011.
24. Г.А. Бесхлебнова, В.Г. Редько Модель формирования обобщенных понятий автономными агентами // Четвертая международная конференция по когнитивной науке: Тезисы докладов: В 2-х томах. Томск: ТГУ, 2010. Т. 1. С. 174-175.

Modeling of cognitive evolution is perspective direction of interdisciplinary investigations

V.G. Red'ko

Abstract. Perspective direction of interdisciplinary investigations, namely, modeling of cognitive evolution is discussed. Backgrounds for this direction of investigations are characterized. Sketch program of future modeling of cognitive evolution is proposed. Initial models of these investigations are shortly described. Interdisciplinary relations of modeling of cognitive evolution are underlined.

Расчет оптических свойств серебра в рамках модифицированной модели Тауца-Лоренца

Б.В. Крыжановский¹, А.О. Меликян²

1- доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, 2-доктор физико-математических наук, профессор

Мы предлагаем реалистичную модель оптических свойств серебра, в которой межзонные переходы с пороговой энергией ~ 4 эВ описываются феноменологически с помощью ансамбля лоренцевых осцилляторов с непрерывным распределением собственных частот, а вклад электронов проводимости в диэлектрическую проницаемость определяется формулой Друде. Предлагаемая модель фактически содержит в себе основные черты как модели Лоренца-Друде (Rakić et al. 1998), так и модели Тауца-Лоренца (Jian-Hong Qiu et al. 2005). В отличие от указанных работ предлагаемая модель содержит всего шесть подгоночных параметров, при этом среднеквадратичное отклонение коэффициента поглощения и показателя преломления серебра от экспериментальных значений оказывается порядка 0.05.

1. Введение

Моделирование оптических свойств различных материалов и параллельное сравнение результатов расчета с экспериментальными данными позволяет идентифицировать наиболее важные физические процессы, определяющие зависимость диэлектрической проницаемости (ДП) от частоты. Определенный прогресс в этом направлении достигнут для благородных металлов [1-5], которые интенсивно исследуются в связи с многочисленными применениями в нанооптике и фотонике. В низкочастотной области спектра, когда энергия фотона ниже порога межзонного поглощения поведение ДП серебра как функции частоты достаточно хорошо описывается друдеской моделью [4,5]. В то же время в надпороговой области хорошее согласие достигается, например, для золота при добавлении к друдескому члену двух или четырех лоренцевых осцилляторов. Другой подход основан на модели так называемой критической точки [1-3]. И наконец, универсальный подход с использованием 17 подгоночных параметров развит в работе [6].

Естественно считать, что суперпозиция достаточно большого конечного числа лоренцевых осцилляторов может хорошо описывать зависимость ДП от частоты. Однако физическая природа законов дисперсии электронов как в зоне проводимости, так и в d-зоне имеет мало общего с физикой лоренцевого осциллятора. В связи с этим следует отметить работы [7, 8], в которых для достижения лучшего согласия используется модель Тауца-Лоренца, которая представляет собой совокупность конечного числа лоренцевых осцилляторов (без друдеского члена), собственные частоты которых распределены непрерывно в интервале от пороговой частоты до бесконечности. Эта модель уже гораздо ближе к истинной зонной структуре благородного металла. Кроме того здесь вводится дополнительный подгоночный параметр, соответствующий ДП при асимптотически высоких энергиях фотона.

В настоящей работе вводится комбинированная модель, содержащая всего шесть параметров в которой вклад свободных электронов серебра описывается друдеской формулой с двумя подгоночными параметрами, а вклад межзонных переходов – одним лоренцевым осциллятором с непрерывным распределением собственной частоты и с одинаковыми константами затухания. Плотность состояний выбирается таким образом, что при низких энергиях электронов (вблизи порога межзонного поглощения) закон дисперсии имеет квадратичный вид, а при высоких энергиях учитывается непараболичность зоны проводимости.

2. Описание модели

Обозначим функцию распределения собственных частот осциллятора через, тогда ДП серебра может быть представлена в виде

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} + \int_0^\infty \frac{J(x)dx}{x^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (1)$$

где ω_p - плазменная частота, γ_D - друдеская константа релаксации. Функцию $J(x)$ выбираем в следующем виде

$$J(x) = \begin{cases} \sqrt{\omega_0 x} e^{-x/\sigma}, & x \geq \Delta \\ 0, & x < \Delta \end{cases} \quad (2)$$

Здесь ω_0, γ, Δ и σ - подгоночные параметры вклада межзонного перехода, причем Δ соответствует порогу межзонного поглощения. Окончательно для ДП получаем следующее выражение с шестью подгоночными параметрами

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} + \int_{\Delta}^{\infty} \frac{\sqrt{\omega_0 x} e^{-x/\sigma} dx}{x^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (3)$$

Очевидно, что комплексная ДП, определяемая выражением (3) удовлетворяет дисперсионным соотношениям Крамерса-Кронига.

Для определения значений подгоночных параметров необходимо воспользоваться экспериментальными данными для показателя преломления $n = n(\omega)$ и коэффициента экстинкции $k = k(\omega)$ с учетом формул связи

$$k(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} - \varepsilon_1 \right]^{1/2} \quad (4)$$

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} + \varepsilon_1 \right]^{1/2}$$

где $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\omega)$ и $\varepsilon_2 = \varepsilon_2(\omega)$ - действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости соответственно ($\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$).

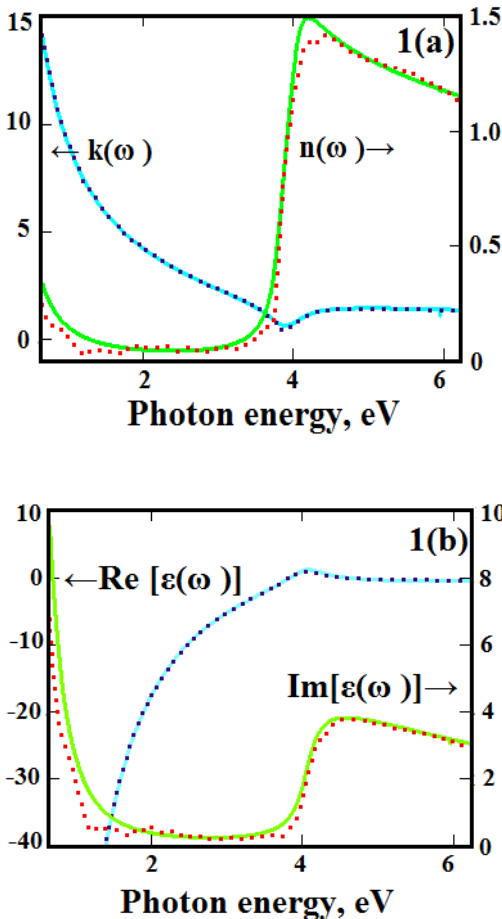


Рис.1 а. - зависимость показателя преломления и коэффициента экстинкции серебра от энергии фотона. б. - зависимость действительной и мнимой частей ДП от энергии фотона. Сплошные линии соответствуют формулам (3) и (4), пунктирные линии построены по интерполяционным формулам согласно экспериментальным данным работы [9]. Значения подгоночных параметров приведены в (5).

Хорошо известно (см. например [9]), что измерения коэффициента поглощения дают более надежные результаты, чем измерения показателя преломления. Данные разных источников [9-11] сильно различаются даже в длинноволновой области, которая достаточно хорошо описывается друдевским членом. В то же время оказывается, что коэффициент экстинкции более чувствителен к значениям параметров, чем показатель преломления. Поэтому мы проведем процедуру подгонки, используя данные по коэффициенту экстинкции. Приведем значения, полученные методом наименьших квадратов

$$\gamma_D = 0.03 \text{ эВ}, \quad \omega_p = 9.15 \text{ эВ}, \quad \Delta = 4.05 \text{ эВ} \quad (5)$$

$$\gamma = 0.32 \text{ эВ}, \quad \omega_0 = 86.5 \text{ эВ}, \quad \sigma = 10.0 \text{ эВ}$$

Важно отметить, что значения друдевских параметров γ_D и ω_p определены из условия наилучшего совпадения с экспериментальными данными в интервале энергий $0.64 \div 1$ эВ, где вкладом межзонных переходов можно пренебречь.

Оказалось, что среднеквадратичное отклонение величины δk - разницы между расчетным и экспериментально измеренным значениями величины $k(\omega)$ - в интервале частот $0.64 \div 6.22$ эВ составляет 0.05, а для интервала $0.64 \div 3.5$ равно 0.037. Для отклонения показателя преломления получается близкое значение.

На рис. 1.а и 1.б показаны соответственно результаты для коэффициента преломления и коэффициента экстинкции, действительной и мнимой частей ДП согласно (3) – (5) (сплошные линии). Интерполяционные кривые для тех же величин согласно экспериментальным данным показаны пунктиром.

3. Результаты и обсуждение

Во-первых видно, что результаты вычислений согласно формулам (3) и (4) прекрасно согласуются с экспериментальными данными. Кроме того значения друдевских параметров γ_D и ω_p , вычисленные методом наименьших квадратов близки к значениям, полученным другими методами [9]. Интересно отметить, что значения γ_D извлеченные из оптических измерений и измерений проводимости при постоянном напряжении [12] оказываются очень близки.

Отметим, что выражение (3) хорошо описывает оптические свойства серебра для частот ниже 6 эВ. Для более высоких частот должны быть введены новые члены, подобные интегралу в (3), учитывающие межзонные переходы на высоких частотах. Анализ показывает, что вклад межзонного перехода на частоте ~ 14 эВ [13] дает заметный вклад даже вблизи частоты 6 эВ.

На рис. 2 представлены результаты расчетов коэффициента отражения R и пропускания T серебряных пленок толщиной 20 нм и 50 нм на кварцевой подложке в том же интервале частот. Сплошные линии соответствуют пропусканию и отражательной способности,

рассчитанным согласно (3)-(5), квадраты и ромбы соответствуют данным [9].

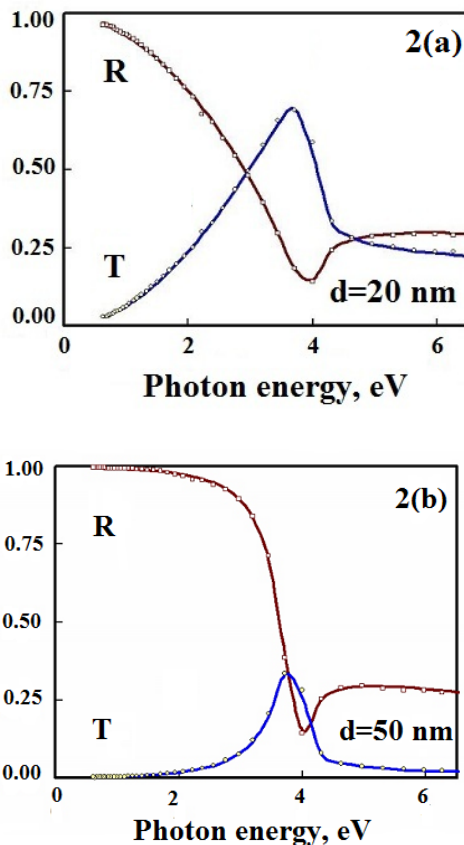


Рис.2. Зависимость пропускания T и отражательной способности R серебряных пленок толщиной 20 нм а) и 50 нм б) на кварцевой подложке. Сплошные линии соответствуют пропусканию и отражательной способности, рассчитанным согласно (3)-(5), квадраты и ромбы соответствуют данным [9].

Необходимо отметить, что процедура подгонки, основанная на выражении (3) с использованием данных SOPRA [11] приводит к худшему согласию даже в низкочастотной области. В частности для константы релаксации γ_D получается значение 0.085 эВ, что в четыре раза превышает результат [9]. Это расхождение данных легко объяснимо. Дело в том, что определение коэффициента поглощения производится косвенно, по измерению пропускания тонкой пленки. Пропускание (экстинкция) определяется поглощением в тонкой пленке и рассеянием на неоднородностях, которое трудно измерить и более того учесть. По этой причине напыление пленки рекомендуется проводить при низкой температуре (ниже 1500 С) подложки для того, чтобы минимизировать размеры кристаллитов и соответственно рассеяние (для случая золота см. [9], для серебра – [14]). Наличие примесей также необходимо учитывать. Особенно сложно избавиться от примесей меди, которые в случае серебряной пленки высокой чистоты (~99.99) могут давать значительный вклад в мнимую часть ДП. Например на дисперсионной кривой серебра, показанной в [9] ясно виден пологий мак-

симум на частоте $\omega \sim 2$ эВ, который соответствует максимуму мнимой части ДП меди.

4. Заключение

Предложена реалистическая феноменологическая модель ДП серебра как функции частоты, учитывающая качественно зонную структуру. Модель содержит два подгоночных параметра для друдевского вклада и четыре для вклада одного межзонного перехода с пороговой энергией около 4 эВ. Значения параметров определены методом наименьших квадратов с помощью экспериментальных данных [9]. В интервале энергий фотона 0.62÷6.22 эВ достигается превосходное согласие с экспериментальными данными.

Литература

1. P.G. Etchegoin, E.C. Le Ru, and M. Meyer Erratum: "An analytic model for the optical properties of gold" // *J. Chem. Phys.* – 125, 2006. 164705.
2. A. Vial, and T. Laroche Comparison of gold and silver dispersion laws suitable for FDTD simulations // *Applied Physics B* – 93, 2008, pp.139-143.
3. A. Vial, and T. Laroche Description of dispersion properties of metals by means of the critical points method and application to the study of resonant structures using the FDTD method // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 40, 2007. 7152-8.
4. G.W. Ford, and W.H. Weber Electromagnetic interactions of molecules with metal surfaces // *Phys. Rep.* – 113, 1984, pp.195-287.
5. R. Rojas, and F. Claro Theory of surface enhanced Raman scattering in colloids // *J.Chem. Phys.* – 98 (2). 1993. P. 998-1006.
6. A.D. Rakic, A.B. Djurisic, et al. Optical properties of metal films for vertical-cavity optoelectronic devices // *Applied Optics* – 37 19985271-5283
7. Jian-Hong Qiu, Peng Zhou, Xiao-Yong Gao et al. Ellipsometric Study of the Optical Properties of Silver Oxide Prepared by Reactive Magnetron Sputtering. // *J. Korean Phys. Soc.* – Vol. 46, 2005 pp. S269-S275.
8. J. Sancho-Parramon, M. Modreanu, S. Bosch, M. Stchakovsky Optical Characterization of HfO₂ by spectroscopic ellipsometry: Dispersion models and direct data inversion. // *Thin Solid Films* – v. 516, 2008, pp.7990-7995.
9. P.B. Johnson, and R. W. Christy Optical constants of the noble metals // *Phys. Rev. B* – 6, 1972, pp. 4370 - 9
10. E.D. Palik (ed) Handbook of Optical Constants of Solids, – New York: Academic, 1985.
11. <http://www.spectra.com/files/misc/win/SOPRA>
12. N.W. Ashcroft, and N.D. Mermin Solid State Physics – Saunders College Publishing, 1976, p.10.
13. H. Ehrenreich, and H.R. Philipp Optical properties of Ag and Cu. // *Phys. Rev.* – 128. 1962, pp. 1622-9
14. A.N. Palagushkin, S.A. Prokopenko et al Measurement of Metal nanolayers Optical Parameters Using Surface Plasmon Resonance Method. // *Optical Memory and Neural Networks (Information Optics)* – v.16, 2007, pp. 288-294

Computing the optical properties of silver using the modified Tautz-Lorenz model

B.V.Kryzhanovsky, A.O.Melikyan

Abstract. We propose a realistic model of optical properties of silver in which interband transitions with threshold energy of about 4eV are defined phenomenologically using an ensemble of Lorenz oscillators with a continuous distribution of fundamental frequencies, and the contribution of conduction electrons to the dielectric permeability is determined by the Drude formula. The model we offer includes the basic ideas of both the Lotenz-Drude model (Rakić et al. 1998) and Tautz-Lorenz model (Jian-Hong Qiu et al. 2005). In contrast with the two approaches our model has only six adjusting parameters, the mean square deviation of the absorption and refraction coefficients of silver from experimental data being about 0.05.

Проблемы применения металлополимерных корпусов BGA

К.К. Смирнов, А.Г. Сухов, А.С. Цимбалов¹

кандидат технических наук

В статье рассмотрены проблемы, возникающие при производстве микросхем специального назначения в металлополимерных корпусах типа BGA. Проанализированы причины снижения прочности выводов на различных этапах производства и испытаний, описана апробированная методика, позволяющая минимизировать снижение прочности выводов. Приводятся обоснованные аргументы в пользу переноса формирования шариковых выводов из процесса производства микросхем в процесс сборки печатных узлов.

Введение

Одной из очевидных тенденцией развития современных цифровых микросхем является их функциональное усложнение и, как следствие, увеличение количества выводов. Эта тенденция вызвала появление корпусов типа BGA (Ball Grid Array) и LGA (Land Grid Array), число выводов в которых может превышать 2000.

Оба типа корпусов могут иметь различное конструктивное исполнение, но объединяет их наличие контактных площадок на нижней плоскости корпуса. У корпусов типа BGA на этих контактных площадках сформированы шариковые выводы, как правило, из легкоплавкого материала. Некоторые конструкции корпусов BGA имеют небольшие углубления, в которых располагаются контактные площадки, предназначенные для установки шариковых выводов. Такая конструкция получила обозначение DIMPLED BGA или DBGA и активно внедряется рядом производителей, например фирмой Kyocera Corporation. Глубина такого углубления составляет доли миллиметра. Эта конструкция изображена на рисунке 1.



Рисунок 1. Крепление шарикового вывода в корпусе типа DBGA

В металлополимерных корпусах с подложкой из ламината на основе бисмалеимида триамина контактные площадки для шариковых выводов могут быть глубже нижней поверхности корпуса на толщину паяльной маски. Она составляет порядка 70 мкм. Таким образом, до формирования шариковых выводов, мик-

росхемы в корпусах BGA и LGA конструктивно весьма схожи.

Монтаж, или формирование шариковых выводов является последней операцией сборки микросхем в корпусах типа BGA. Согласно действующим в настоящее время нормативным документам, все виды испытаний микросхем происходят уже после установки выводов.

Микросхемы при производстве подвергаются электротермотренировке (ЭТТ) и стопроцентному функциональному контролю в диапазоне рабочих температур. Суть электротермотренировки заключается в выявлении скрытых дефектов за счёт работы микросхем при повышенной температуре в течение нескольких десятков часов.

При испытаниях микросхем серии 1890 в металлополимерных корпусах типа 8114.680-1 были отмечены многократные случаи отрыва шариковых выводов. Отрывы происходили на различных этапах испытаний, но наиболее часто при проведении функционального контроля (ФК) в диапазоне температур после ЭТТ. Отрывы выводов приводили к необходимости браковать фактически годные микросхемы на финишном этапе испытаний. Кроме того, отрывы происходили в процессе транспортировки годных микросхем потребителю и в процессе пайки микросхем на печатные платы. Для устранения таких отрывов потребовалось проведение дополнительных исследований.

1. Исследование проблемы

При изучении литературы [1,3,5,7] по вопросу прочности паяных соединений, возникло предположение, что прочность выводов может снижаться из-за образования паразитных интерметаллидных соединений вблизи границы припоя и контактной площадки из-за длительной выдержки при высокой температуре на ЭТТ. Такие паразитные интерметаллидные соединения могут быть разрушены и прочность соединения восстановлена путем полного повторного оплавления шариковых выводов. Для проверки данного предположения, было проведено опытное оплавление выводов микросхем 1890КПЗЯ после ЭТТ перед ФК. Усилие

сдвига было также измерено до проведения операции ЭТТ.

Для проведения операции оплавления был выбран стандартный температурный профиль [4], приведённый на рисунке 2.

В эксперименте использовалась печь конвекционного оплавления ERSA HOTFLOW2/14 .

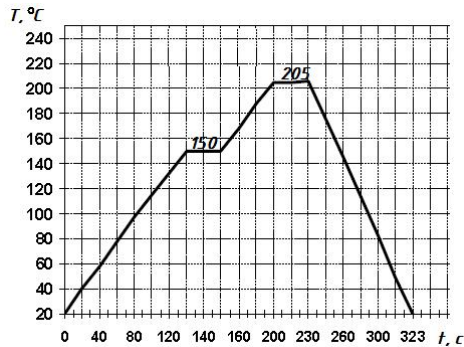


Рисунок 2. Зависимость температуры от времени при оплавлении

Результаты этого эксперимента приведены в таблице 1 и на диаграмме на рисунке 3. В этом эксперименте операция ЭТТ снижает прочность крепления выводов на 26%. Увеличение усилия сдвига выводов микросхем после ЭТТ, вызванное их оплавлением, составило 71% относительно состояния после ЭТТ и 26% относительно исходного состояния. Результаты получены для 5 микросхем усреднением значений усилия сдвига 20 рядов по 5 выводов. Усилие сдвига измерялось на установке проверки прочности монтажа DAGE-4000.

Таблица 1. Усилие сдвига шариковых выводов на различных этапах маршрута испытаний

	До ЭТТ	После ЭТТ	После ЭТТ и оплавления
Усилие сдвига, Г	4049	2996	5136
Изменение	100%	-26%	+27%
		100%	+71%

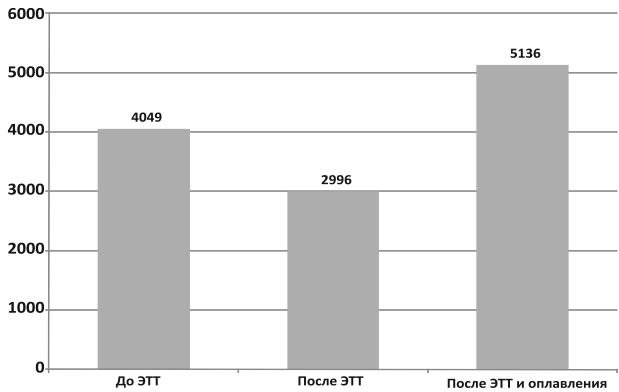


Рисунок 3. Усилие сдвига шариковых выводов на различных этапах маршрута испытаний

При попытке сдвинуть выводы вручную после оплавления иногда происходил отрыв печатной кон-

тактной площадки корпуса. Данный факт ранее не отмечался. Отрыв контактной площадки показан на рисунке 4.

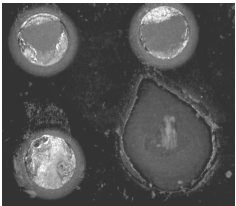


Рисунок 4. Отрыв контактной площадки при контроле прочности выводов

На рисунке 5 представлены фотографии срезаемых и отскакивающих при измерении усилия сдвига выводов до и после оплавления. На рисунке отчётливо видно, что площадки под отскакивающими выводами не оплавились. Это свидетельствует в пользу предположения, что отрыв выводов происходит по некоторому паразитному промежуточному слою.

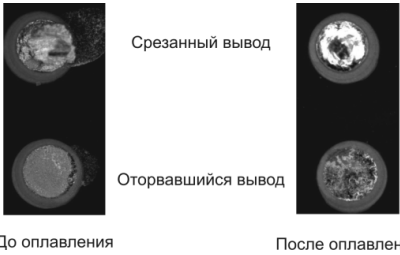


Рисунок 5. Контактные площадки с оторвавшимися и срезаемыми выводами до и после оплавления

Технологический маршрут отбраковочных испытаний предполагает несколько температурных воздействий. Это предварительная термообработка, испытание на воздействие термоциклов и ЭТТ. Для определения оптимальной позиции операции оплавления микросхем в корпусах типа 8114.680-1 в технологическом маршруте был проведён следующий эксперимент.

Были сформированы четыре группы микросхем 1890BM7Я по три микросхемы в каждой группе.

Первая группа была подвергнута оплавлению перед термообработкой и испытанием на воздействие термоциклов. То есть, в самом начале маршрута. Для этой группы увеличение усилия сдвига¹ на выходе составило 8%, относительно исходного, что значительно меньше, чем в первом эксперименте. Результаты группы 1 представлены на диаграмме, представленной на рисунке 6.

¹ Результаты получены усреднением по сдвигу 20 рядов по 5 выводов для трёх микросхем в каждой группе.



Рисунок 6. Группа 1. Влияние оплавления в самом начале маршрута на усилие сдвига выводов

Вторая группа была оплавлена после ЭТТ. Прирост усилия сдвига составил 24%. При анализе результатов групп 1 и 2, было отмечено, что для микросхем 1890BM7Я данной партии снижения прочности от операции ЭТТ нет, а присутствует даже небольшое увеличение. Аналогичный эффект дают и термоциклы. Отдельными исследованиями было установлено, что влияние термоциклирования и ЭТТ на прочность выводов не только нестабильно по значению, но и меняет знак. Такие изменения происходят как от партии к партии одного типа микросхем, так и между микросхемами разных типов в одинаковых корпусах. Предположительной причиной этого являются отклонения в технологическом процессе первоначальной монтажа выводов.

Изменение усилия сдвига для группы 2 представлено на диаграмме на рисунке 7.

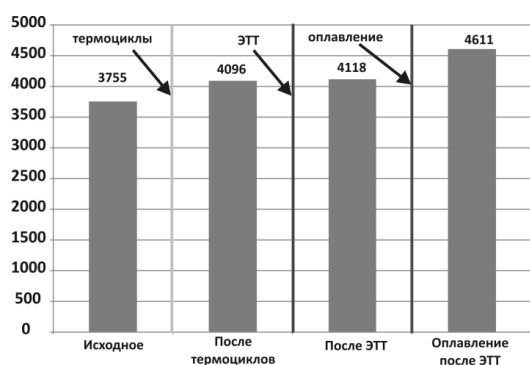


Рисунок 7. Группа 2. Влияние оплавления после ЭТТ на усилие сдвига выводов

Третья группа была оплавлена до и после операции ЭТТ. Окончательный прирост усилия сдвига составил 25%. Это значение не сильно отличается от показателя группы 2. Однако, в этом случае микросхемы проходят операцию ЭТТ со значительно упрочнёнными выводами. Это почти гарантирует сохранность микросхем и дорогостоящих контактирующих устройств в процессе этой операции.

Изменение усилия сдвига для группы 3 представлено на диаграмме на рисунке 8.

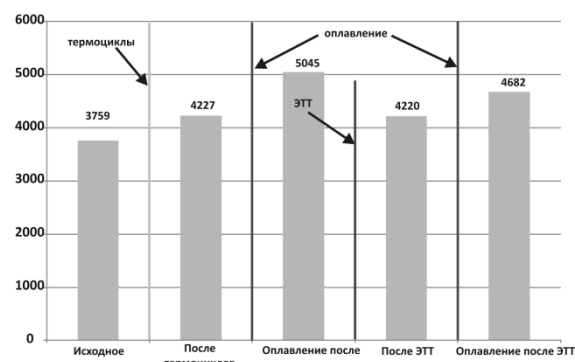


Рисунок 8. Группа 3. Влияние оплавления до и после ЭТТ на усилие сдвига выводов

Четвёртая группа была сформирована для проверки воздействия оплавления на результаты функционального контроля и была оплавлена три раза. Для этой группы после каждой операции оплавления был проведён функциональный контроль, который показал полное отсутствие влияния операции на электрические и функциональные свойства микросхем.

На диаграмме на рисунке 9 представлено увеличение усилия сдвига для групп 2 и 3. Из этой диаграммы следует, что прирост в обоих случаях сравним, но двукратное оплавление существенно снижает риск повреждения контактирующих устройств при электротермотренировке.

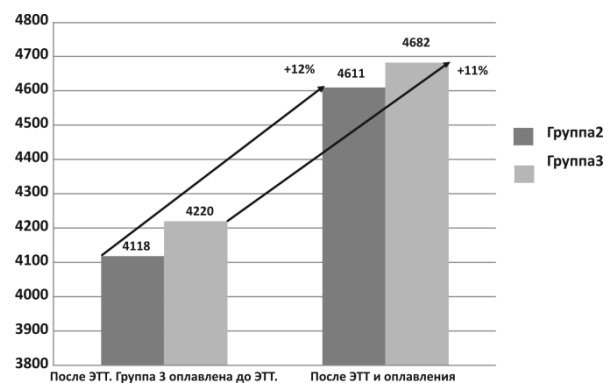


Рисунок 9. Влияние оплавления до и после ЭТТ (группа 3) и только после ЭТТ (группа 2) на усилие сдвига выводов

В таблице 2 приведены сводные результаты увеличения усилия сдвига для первых трёх групп микросхем.

Таблица 2. Увеличение усилия сдвига после оплавления для трёх экспериментальных групп микросхем

Усилие сдвига, Г.	Группа		
	1	2	3
Исходное	3776	3732	3759
После эксперимента	4064	4611	4682
Прирост	8%	24%	25%

В процессе апробирования технологии оплавления на разных типах микросхем было отмечены зна-

чительные колебания как исходных значений усилия сдвига, так и его прироста. Хотя такое обстоятельство известно, для его подтверждения был проведен отдельный эксперимент. Он показал, как отличается прочность выводов у разных типов микросхем в корпусах BGA680 и как она меняется после повторного оплавления в самом начале маршрута испытаний, так как влияние возможных отклонений в проведении термообработки, термоциклирования и электротермотренировки исключаются только в этом случае. Для исследования были отобраны по пять микросхем 1890BM6Я, 1890BM7Я, 1890BG18Я и 1890KP3Я. Микросхемы каждого типа отбирались в рамках отдельной партии. Результаты данного эксперимента

рующих устройств. Деграция многократно ускоряется во время испытаний при максимальных температурах. При стоимости контактирующих устройств с числом выводов более полутысячи в несколько сотен долларов, проблема приобретает существенное коммерческое значение.

Проведение отбраковочных испытаний для микросхем специального назначения в металлополимерных корпусах типа BGA с установленными шариковыми выводами нежелательно. Проведение испытаний до установки выводов позволяет избежать проблем с контактирующими устройствами на всех этапах испытаний и снимает проблему удаления отшелушившихся частиц припоя с технологического оборудова-

Таблица 3. Увеличение усилия сдвига после оплавления для микросхем различных типов.

Усилие сдвига, Г.	Тип микросхем			
	1890BM7Я	1890BG18Я	1890BM6Я	1890KP3Я
Исходное	4227	3697	3281	3816
Отклонение от среднего	11%	-2%	-14%	2%
После эксперимента	5045	4896	4712	5062
Отклонение от среднего	2%	-1%	-5%	3%
Прирост	19%	32%	44%	33%

представлены в таблице 3 и на рисунке 10.

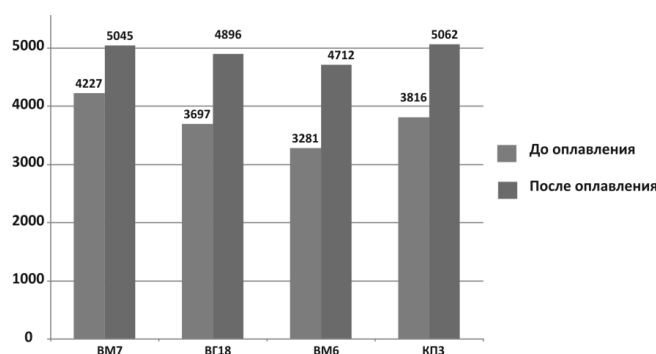


Рисунок 10. Увеличение усилия сдвига после оплавления для микросхем различных типов

Из полученных результатов следует, что прочность крепления шариковых выводов различных типов микросхем перед началом испытаний различается очень существенно. Размах отклонения на измеренных партиях составляет 25%. Причиной этого может быть как нестабильность технологического процесса монтажа выводов, так и различия в продолжительности хранения микросхем после установки выводов до начала испытаний. Последнее обстоятельство требует отдельного исследования и выходит за рамки данной работы.

После оплавления, разница в прочности выводов существенно снижается и составляет 7%. Таким образом, оплавление даёт наиболее существенный прирост прочности выводов для партий с исходно наименьшими показателями.

В работе [8] показано, что корпуса типа BGA при испытаниях в нормальных условиях приводят к весьма быстрой и необратимой деградации контакти-

ния в чистых помещениях. Такой подход требует, однако, изменения методики испытаний и введения окончательного функционального контроля после установки выводов, что не всегда возможно.

3. Выводы

В результате проведённых экспериментов установлено следующее:

- повторное оплавление шариковых выводов на любом этапе технологического маршрута повышает прочность их монтажа;
- наибольший прирост прочности выводов отмечен при проведении повторного оплавления после ЭТТ;
- прирост прочности отмечен также при проведении оплавления до и после ЭТТ;
- прочность монтажа шариковых выводов значительно отличается для разных типов микросхем и для различных партий микросхем одного типа;
- максимальный прирост прочности отмечен на самых слабых по прочности выводах партий,
- после оплавления все типы микросхем показали весьма схожие данные по усилию сдвига, что свидетельствует об устранении причины снижения прочности выводов;
- внешний вид контактных площадок с оторвавшимися и срезанными выводами до и после оплавления подтверждает предположение о наличии паразитных интерметаллидных слоев между контактной площадкой и шариком припоя;
- контроль формы и размеров шариковых выводов после дополнительного оплавления не выявил отклонений от исходного состояния;

- функциональный контроль микросхем после дополнительного оплавления не выявил изменения электрических параметров.

При производстве и испытаниях микросхем специального назначения в металлополимерных корпусах типа BGA проблема прочности шариковых выводов стоит весьма остро. Сама конструкция таких микросхем существенно отличается от других типов корпусов наличием паяного соединения шариковых выводов. Прочность такого соединения снижается от термических и механических воздействий в процессе производства и испытаний микросхем. Для устранения, или существенного снижения отрицательного воздействия испытаний на прочность крепления шариковых выводов, в производственный маршрут весьма целесообразно вводить промежуточную и, возможно финишную, операцию оплавления. Она снимает напряжения паяного соединения шариковых выводов с контактными площадками корпуса микросхемы. Эффективность этой операции зависит от многих факторов, однако всегда положительна, что подтверждено экспериментально.

Следует отметить, что наличие в производственном процессе микросхем специального назначения сплава свинца и олова в принципе не желательно. Из-за своих свойств, припой шариковых выводов не только образует пыль, но и вызывает коррозию элементов оснастки по всему маршруту, где с ним происходит контакт. Для производства микросхем специального назначения было бы идеально, проводить весь цикл производства и испытаний до формирования шариковых выводов. При этом формирование выводов должно быть включено в технологический процесс сборки печатных узлов, где использование припоя является стандартным.

Литература

1. Диаграммы состояний двойных металлических систем. Том 1, Справочник под редакцией акад. РАН Н.П. Лякишева. М. Машиностроение, 2001.
2. Надёжность тестирования BGA-компонентов. Чин-май Ко, Минг-Кунь Чень и др. «Технологии в электронной промышленности» №4, 2009.
3. ROADMAPS OF PACKAGING TECHNOLOGY. Eric Bogatin, Laura Peters, Integrated Circuit Engineering Corporation, Dick Potter ISBN 1877750611 (1-877750-61-1) Hardcover, Integrated Circuit Engineering.
4. Стандарт ASSOCIATION CONNECTING ELECTRONICS INDUSTRIES (The Institute for Interconnecting and Packaging Electronic Circuits) IPC/EIA J-STD-001D (Requirements for Soldered Electrical and Electronic Assemblies). Требования к пайке электрических и электронных сборок.
5. Материалы для пайки и ремонта печатных узлов. ЗАО «Предприятие ОСТЕК». Инженерное пособие. М. 2012.
6. M.K. Chen et al. Electrical Characterization of BGA Test Socket for High-Speed Applications. 4 th International Symposium on Electronic Materials and Packaging. Kaohsiung, Taiwan, 2002.
7. Лазерная пайка шариков припоя в BGA. Дж. Муонио, Р. Стадем ПЕЧАТНЫЙ МОНТАЖ №6/2008.
8. Чин-май Ко, Минг-Кунь Чень и др. Надёжность тестирования BGA-компонентов. Технологии в электронной промышленности №4, 2009
9. W. Liu, M. Pecht IC Component Sockets. New Jersey: John Wiley & Sons, 2001.

Problems caused by using BGA metal-polymeric packages

K.K. Smirnov, A.G. Suchov, A.S. Tsimbalov

Abstract. Article describes problems occurring in manufacturing process of dedicated chips in BGA metal-polymeric packages. The reasons causing decreasing of balls durability are analyzed regarding to different stages of manufacturing and testing. Article also describes proven method for minimizing of balls durability decrease. Well-founded arguments to move balling procedure from chip manufacturing process to the process of assembling printed boards are provided.

Об эффективности распараллеливания процессов при решении уравнений газовой динамики с помощью суперкомпьютерного комплекса МВС-100К

М.Ж. Акжолов¹, И.Г. Лебо², А.Г. Мадера³

1 - кандидат физико-математических наук, 2 –доктор физико-математических наук, профессор

3 – доктор технических наук, профессор

Работа посвящена анализу производительности расчетов при распараллеливании процессов на примере решения одной двумерной задачи газовой динамики. Для реализации соответствующих параллельных алгоритмов была использована MPI технология (Message Passing Interface) на суперкомпьютерном комплексе МВС-100К (г. Москва)

Введение

Появившиеся в начале нынешнего века высокопроизводительные суперкомпьютеры и кластеры открывают большие возможности перед научным сообществом для проведения широкомасштабного моделирования различных физических явлений. Численное моделирование сложных не одномерных течений сжимаемых сред [1] является примером задачи, требующей больших вычислительных ресурсов (памяти и быстродействия ЭВМ). Использование параллельных алгоритмов и многопроцессорных супер-ЭВМ позволяет решать задачи, которые были недоступны ранее однопроцессорным компьютерам [2,3]. В приведенной ниже работе изучается эффективность использования разработанных авторами статьи параллельных алгоритмов на примере решения одной газодинамической задачи.

Постановка задачи

Решается задача взрыва в замкнутом пространстве методом крупных частиц. Расчеты были сделаны на суперкомпьютерном комплексе МВС-100К в Межведомственном суперкомпьютерном центре Российской Академии Наук. Для численного моделирования двумерных уравнений газовой динамики использовался метод крупных частиц [4].

Полная система уравнений механики сплошной среды, записанная в безразмерном виде выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho W) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u W) + \frac{\partial p}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho W) + \frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E W) + \operatorname{div}(p W) = 0,$$

где $E = J + (u^2 + v^2)/2$ - полная энергия, p - давление, ρ - плотность, J - внутренняя энергия единицы массы среды, W - вектор скорости, u, v - компоненты вектора скорости по осям ox и oy , соответственно, t - время.

В (1) записаны уравнения: закон сохранения массы (первое уравнение), законы сохранения импульса (второе и третье уравнения), закон сохранения энергии (четвертое уравнение). Для замыкания системы уравнений (1) используется уравнение состояния идеального газа.

$$p = (\gamma - 1)\rho J = (\gamma - 1)\rho \left(E - \frac{u^2 + v^2}{2} \right), \quad (2)$$

где γ - показатель адиабаты газа.

Изначально имеется матрица размера $M \times N$ с количеством расчетных ячеек $(M-2) \times (N-2)$. Ячейки, не используемые в расчетах, являются фиктивными и необходимы для постановки граничных условий. В расчетном поле воздух покоится, значения плотности, давления и полной энергий постоянны.

Начальные условия, моделирующие (имитирующие) расширение плотного сгустка вещества в воздухе, формируются путем задания значения плотности в центре расчетного поля

$$\rho_{i0,j0}^n = m \rho_{\infty}^0.$$

Здесь $i0 = N/2, j0 = M/2$ - индексы, указывающие координаты центра расчетной области, m - коэффициент, показывающий кратность плотности,

вызывающей (имитирующей) разлет сгустка и формирующей ударную волну в воздухе ($m > 1$, например $m = 10; 100; 300; \dots$).

На суперкомпьютерном комплексе были реализованы два метода распараллеливания процессов при решении полной системы уравнений газовой динамики.

Для каждого реализованного алгоритма были рассчитаны коэффициенты ускорения и эффективности. В результате анализа полученных коэффициентов был сделан вывод о целесообразности и эффективности использования исследуемых алгоритмов для решения реальных трудоемких научных вычислительных задач.

Выбор методов реализации поставленной задачи

Суперкомпьютерный комплекс MBC-100K является кластерным суперкомпьютером MIMD (Multiple Instruction Multiple Data) архитектуры. Параллельные программы для него создаются, с использованием модели обмена сообщениями. В качестве механизма для построения таких программ на суперкомпьютерном комплексе используется программный интерфейс передачи сообщений MPI, который фактически является стандартом для суперкомпьютеров такого класса, как MBC-100K.

Реализация параллельного алгоритма «методом полос»

Изначально имеется матрица размера $M \times N$ с количеством расчетных ячеек $(M-2) \times (N-2)$. Ячейки, не используемые в расчетах, являются фиктивными и необходимы для постановки граничных условий. Для распараллеливания расчета матрица разбивается на подматрицы по блокам строк:

Так как было принято решение использовать метод крупных частиц первого порядка точности необходимо пересылать только две смежных строки каждого процессорного блока.

Для корректной работы алгоритмы необходимо пересылать на эйлеровом этапе данные о давлении и вертикальной компоненте скорости. На лагранжевом этапе – данные о давлении, внутренней энергии, плотности и вертикальной компоненте скорости. Всего шесть величин.

Таким образом при параллельной обработке матрицы $N \times M$ методом полос во время одной итерации пересылается $6 \cdot 2 \cdot M \cdot (num-1) \cdot 64$ байт данных. Например, для расчета матрицы в 1000 столбцов на 16 процессорах на каждой итерации необходимо пересылать 11 мегабайт данных.

Ниже в таблицах 1 и 2 приведены результаты тестирования параллельного алгоритма метода крупных частиц на суперкомпьютерном комплексе MBC-100K Межведомственного Суперкомпьютерного Центра.

Таблица 1.

Кол-во процессов	1 млн.	4 млн.	9 млн.
1	46,02	193,13	452,98
4	13,20	68,04	158,99
16	4,60	18,89	43,78
64	1,26	5,21	11,57
144	0,85	2,42	5,21

Таблица 2.

Кол. эле-ов	Кэф. ус-ия 1млн.	Кэф. ус-ия 4млн.	Кэф. ус-ия 9млн.	Кэф. утил-и 1млн.	Кэф. утил-и 4млн.	Кэф. утил-и 9млн.
1	1,00	1,00	1,00	100,0%	100,0%	100,0%
4	3,49	2,84	2,85	87,16%	70,96%	71,23%
16	10,00	10,22	10,35	62,53%	63,90%	64,67%
64	36,52	37,07	39,15	57,07%	57,92%	61,17%
144	54,14	79,81	86,94	37,60%	55,42%	60,38%

Реализация параллельного алгоритма «методом секторов»

Изначально имеется матрица размера $M \times N$ с количеством расчетных ячеек $(M-2) \times (N-2)$. Ячейки, не используемые в расчетах, являются фиктивными и необходимы для постановки граничных условий. Для распараллеливания расчета матрица разбивается на подматрицы по секторам:

Так как было принято решение использовать метод крупных частиц первого порядка точности необходимо пересылать четыре смежных строки каждого процессорного блока.

Для корректной работы алгоритмы необходимо пересылать на эйлеровом этапе данные о давлении и вертикальной компоненте скорости при вертикальной передаче, или горизонтальной компоненте скорости при горизонтальной передаче. На лагранжевом этапе – данные о давлении, внутренней энергии, плотности и вертикальной компоненте скорости. Всего шесть величин.

Таким образом при параллельной обработке матрицы $N \times M$ «методом полос» во время одной итерации пересылается $6 \times 4 \times M \times (\sqrt{num} - 1) \times 64$ байт данных. Например, для расчета матрицы в 1000 столбцов и 1000 строк на 16 процессорах на каждой итерации необходимо пересылать 4.4 мегабайт данных.

В таблицах 3 и 4 приведены результаты тестирования параллельного алгоритма метода крупных частиц на суперкомпьютерном комплексе MBC-100K Межведомственного Суперкомпьютерного Центра.

Таблица 3.

Кол-во процессов	1 млн. элементов	4 млн. элементов	9 млн. элементов
1	46,94	186,78	448,29
4	17,82	80,75	231,65
16	8,82	39,83	88,46
64	2,52	10,35	22,63
144	1,34	4,88	11,20

Таблица 4.

Кол. процесс ов	Коэф. уск-ия 1млн.	Коэф. уск-ия 4млн.	Коэф. уск-ия 9млн.	Коэф. утилизи-и 1млн.	Коэф. утилизи-и 4млн.	Коэф. утилизи-и 9млн.
1	1,00	1,00	1,00	100,0%	100,0%	100,0%
4	2,63	2,31	1,94	65,85%	57,83%	48,38%
16	5,32	4,69	5,07	33,26%	29,31%	31,67%
64	18,63	18,05	19,81	29,10%	28,20%	30,95%
144	35,03	38,27	40,03	24,33%	26,58%	27,80%

Анализ результатов

Выше приведены сравнительные таблицы (1-4) коэффициентов утилизации для расчетов матриц с размерами 1 млн., 4 млн. и 9 млн. элементов с помощью двух методов: «секторов» и «полос». На этих сравнительных таблицах отчетливо видно, что «метод полос» значительно превосходит по производительности «метод секторов» в рассмотренных случаях. Это объясняется влиянием латентности коммуникационной системы на время

работы алгоритма, а также, в целом, более сложной схемой алгоритма, что вызывает дополнительные временные расходы. Однако, при использовании «метода секторов» пересылается меньше данных, чем при использовании «метода полос», поэтому логично предположить, что при расчете больших матриц производительность «метода секторов» может оказаться более эффективной, чем «метод полос».

Литературы

1. И.Г. Лебо, В.Ф. Тишкин. Исследования гидродинамической неустойчивости в задачах лазерного термоядерного синтеза методами математического моделирования. –М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. –304 с.
2. М.Ж. Акжолов, А.В. Климов, А.И. Лупенко. Особенности программирования для вычислительной системы потоковой архитектуры на примере двумерной задачи теплопроводности // «Научный вестник МИРЭА», № 2, 2007 г., с. 12-30.
3. М.Ж. Акжолов, А.Г. Мадера, П.И. Кандалов, И.Г.Лебо. Компьютерное моделирование конвективных процессов в воздушной среде вблизи электронных устройств //Труды. Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук (НИИСИ РАН) том 1 № 2 ISSN 2225-7349 Москва 2011. С 44-46
4. О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов «Метод крупных частиц в газовой динамике. Вычислительный эксперимент.» -М.: Наука, 1982. –392 с.

On the efficiency of parallel simulations of gas dynamic equation with help of supercomputer complex MVS-100K

M.H. Akcholov, I.G. Lebo, A.G. Madera

Abstract: The paper is devoted to the analysis of parallel computer simulation performance. We have solved some 2D gas dynamic problem as the example of such calculation. We have used MPI (Message Passing Interface) technology for realization of parallel algorithms in supercomputer MBC-100K (Moscow).

Два алгоритма фильтрации, сглаживания и выделения тренда зашумленных больших временных рядов: Алгоритм 2

М.Л. Бахмутский

кандидат физико-математических наук

Предложен алгоритм применения сингулярного спектрального анализа [1] для выделения тренда и сглаживания больших зашумленных временных рядов. Он основан на предлагаемом в работе алгоритме нахождения собственных значений и собственных векторов больших, порядка десятков тысяч строк и столбцов, симметричных заполненных матриц. Так как, хорошо известно [2], что задачу сингулярного разложения произвольной матрицы можно свести к спектральной задаче для симметричной матрицы, то этот алгоритм может быть обобщен как алгоритм сингулярного разложения заполненной матрицы. Алгоритм применяется к траекторной матрице временного ряда, длина столбца которой равна половине длины временного ряда.

Некоторые недостатки первого алгоритма

В рассмотренном ранее алгоритме, при помощи вейвлет-преобразования строилось многомасштабное разложение исходного временного ряда и для каждого возникшего временного ряда своего масштаба строилась своя траекторная матрица, вычислялось ее сингулярное разложение и матрица приближалась отбрасыванием всех сингулярных троек, сингулярные числа которых меньше некоторого значения. После чего делалось обратное вейвлет-преобразование. При

этом могут считаться шумом и быть отброшены скрытые периодические и квазипериодические слабые сигналы представляющие интерес, сингулярные числа, в разложении которых также меньше пороговых. Приведем реальный пример временного ряда значений давления в наблюдательной скважине при гидродинамическом прослушивании скважин на месторождении. На рис.1 приведен пример такой записи давления.

На рис.2 приведена эта же кривая, фильтрация и сглаживание произведено при помощи 5-ти сингулярных троек.

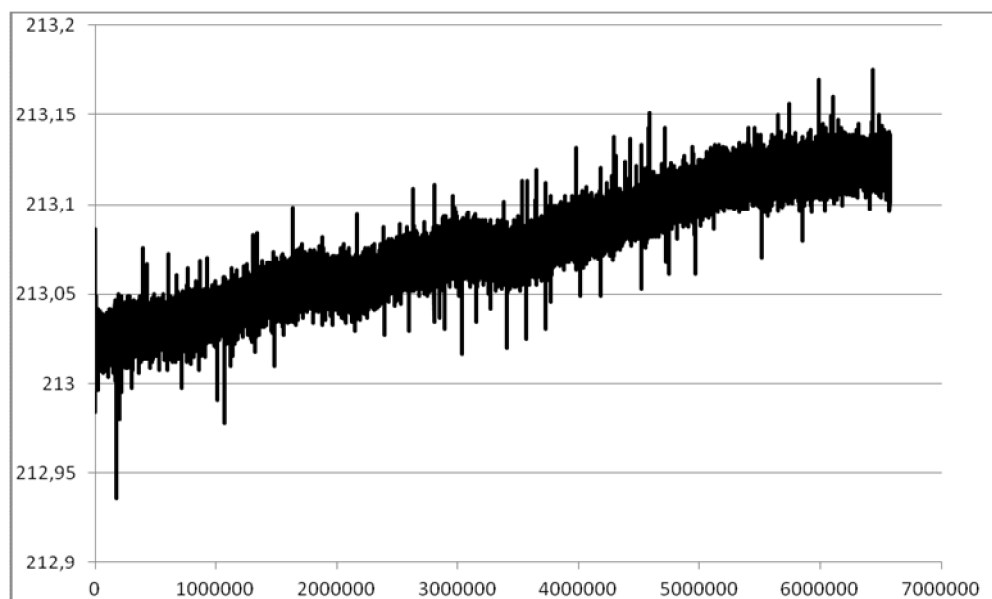


Рис.1. Запись кривой реагирования при гидродинамическом прослушивании. Ось x – время(сек)

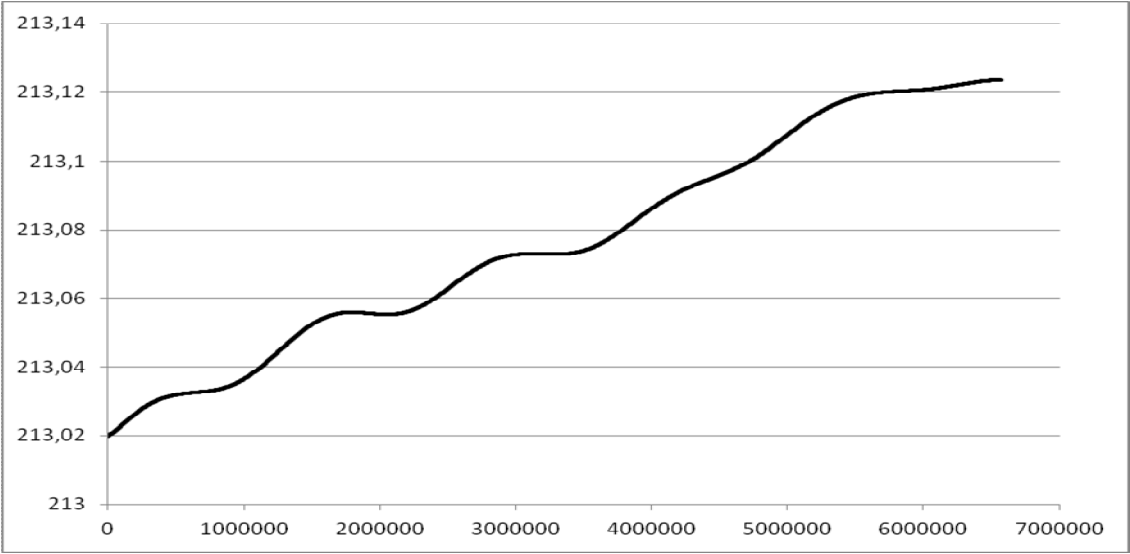


Рис.2. Исходная кривая гидропрослушивания, восстановленная при помощи 5-ти сингулярных троек

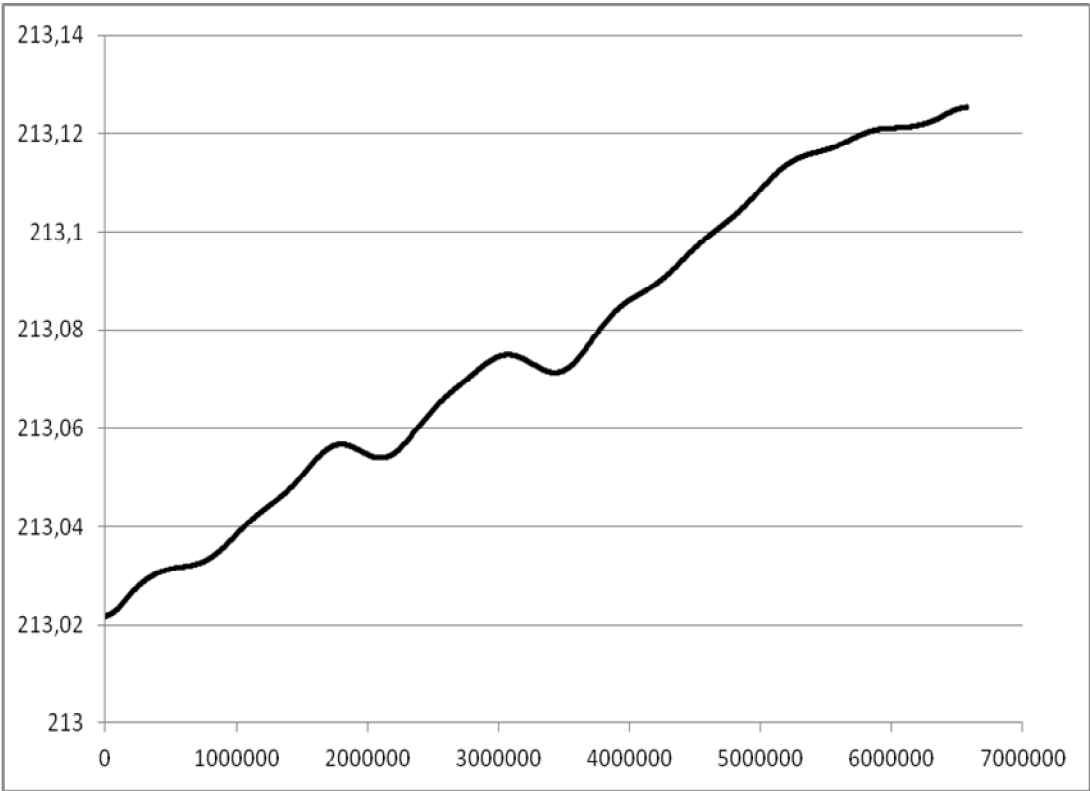


Рис.3. Исходная кривая, восстановленная использованием 10-ти сингулярных троек

Мы можем видеть в некоторых местах мельчайшие изменения. Приведем этот же временной ряд отфильтрованный при помощи 11 (рис.4) и 15 (рис.5) сингулярных троек.

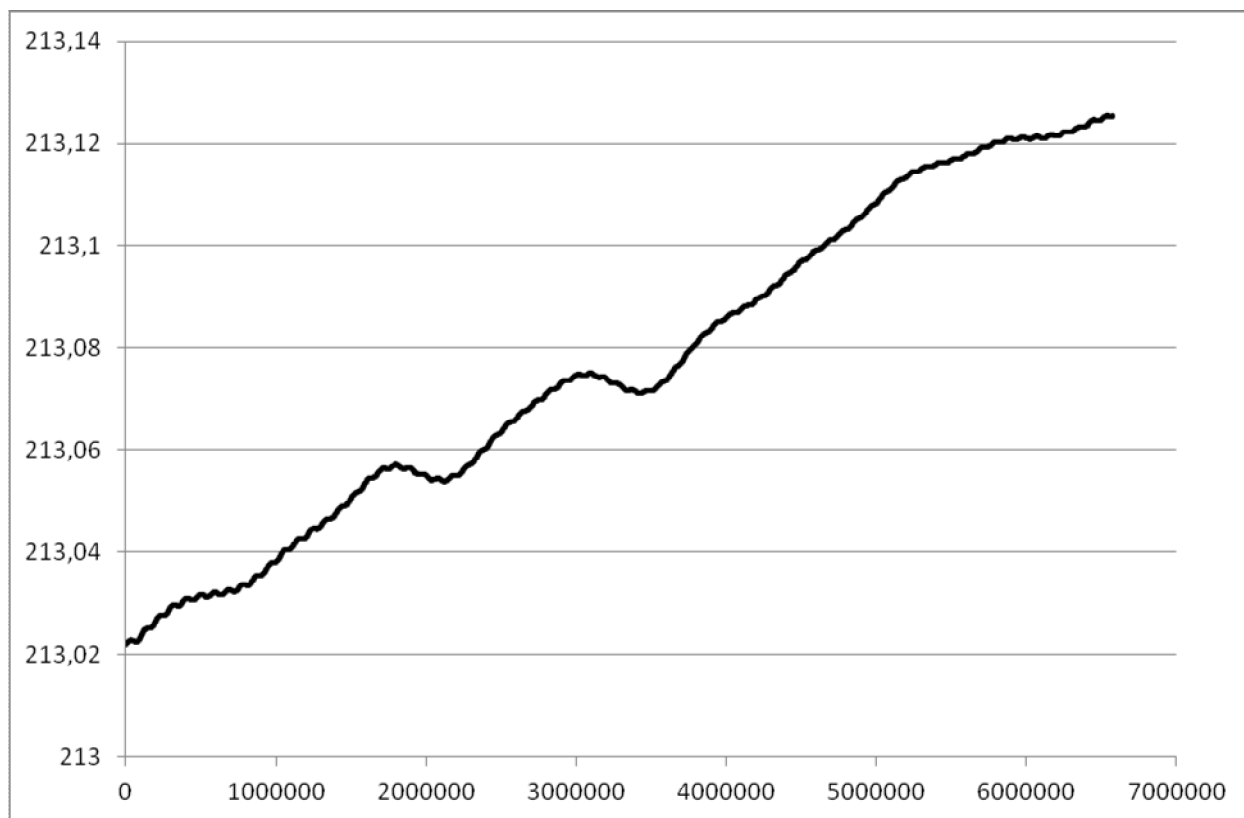


Рис.4 Отфильтровано 11 сингулярными тройками

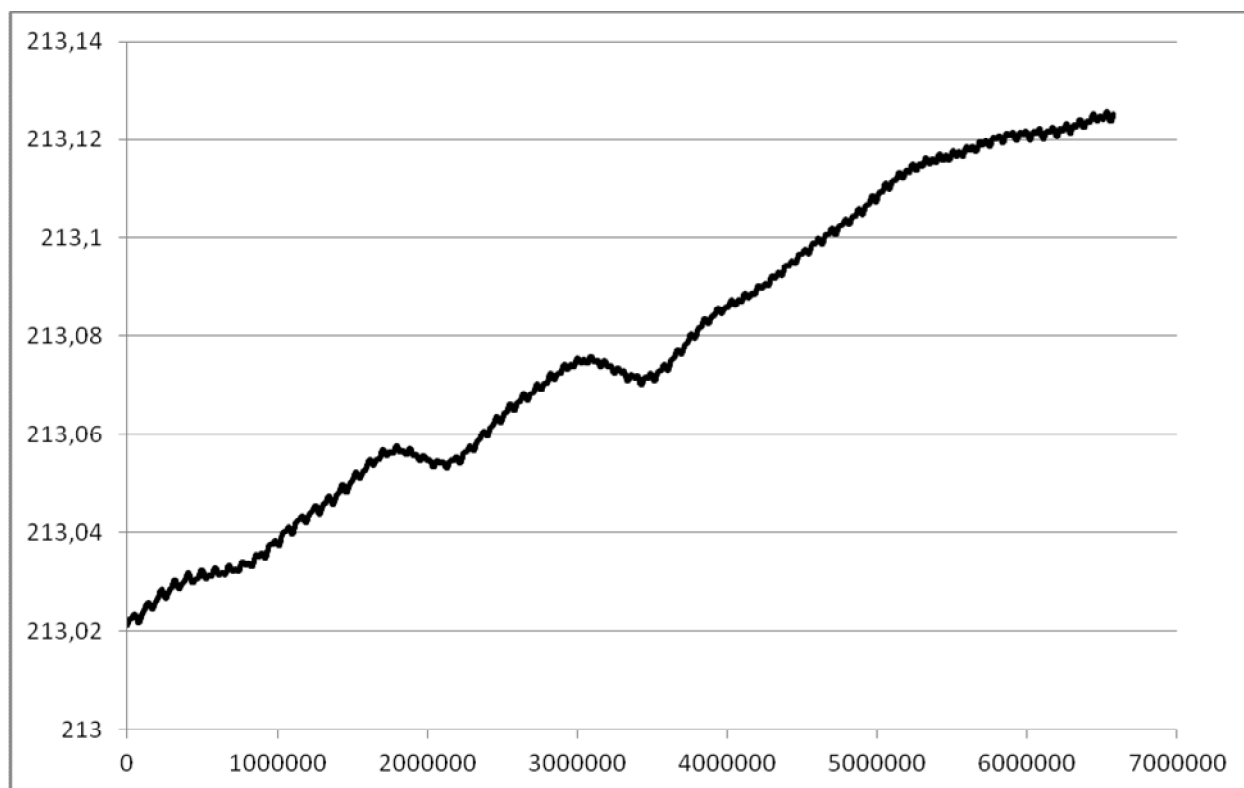


Рис.5 Отфильтровано 15 сингулярными тройками

Возникает вопрос соответствуют ли изменения на рис.4. появлению шумовой компоненты и означает ли рис.5, что шумовая компонента усиливается в силу большей точности аппроксимации исходного материала или здесь присутствует слабая периодическая или квазипериодическая компонента? Для ответа на этот вопрос, можно воспользоваться тем известным фактом(см. напр.[3]), что гармоническая составляющая временного ряда порождает две сингулярные тройки и элементы собственных векторов этих троек приближенно представляют собой гармонические функции с тем же периодом и фазой, причем одному собственному вектору соответствует

косинус а другому синус. Если будем попарно откладывать значения собственных векторов по осям координат, то будем получать аналоги известных фигур Лисажу. При этом периодической (квазипериодической) компоненте будет отвечать замкнутая кривая. На рис.6 приведено попарное построение первого и второго сингулярного векторов. На рис.7 приведено попарное построение 11-го и 12-го сингулярного вектора. На рис.8 приведено попарное построение 13-го и 14-го сингулярного вектора.

На рис.9 приведено построение 15-го и 16-го сингулярных векторов.

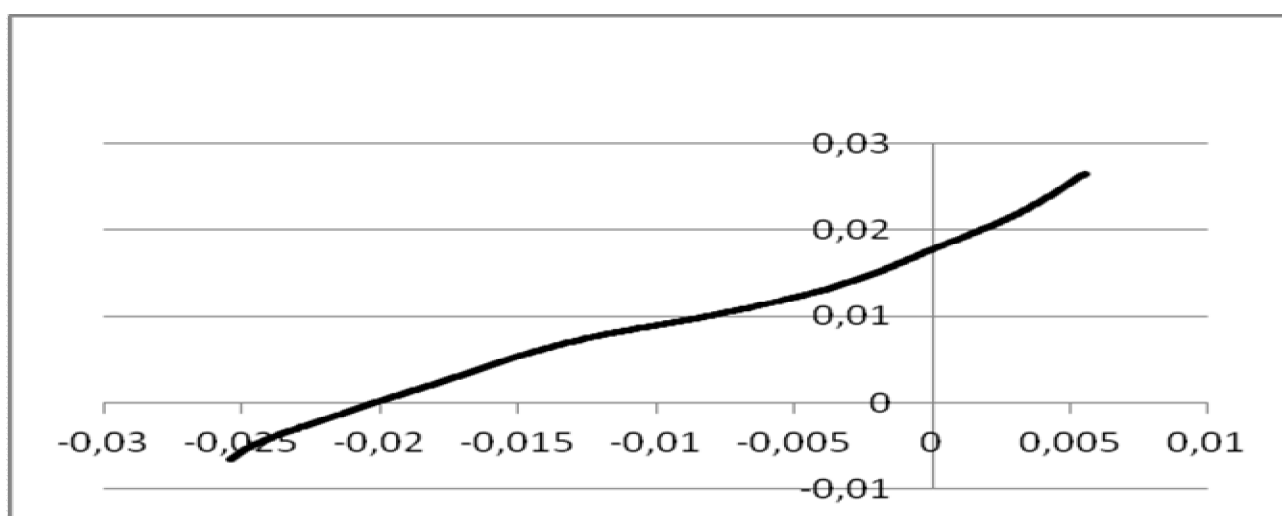


Рис.6 Попарное построение векторов. Вектора 1 и 2

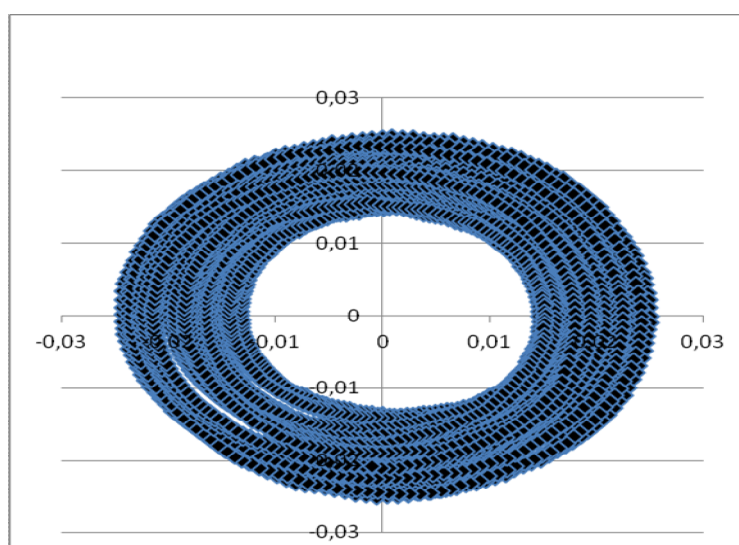


Рис.7 Попарное построение 11-го и 12 сингулярного вектора

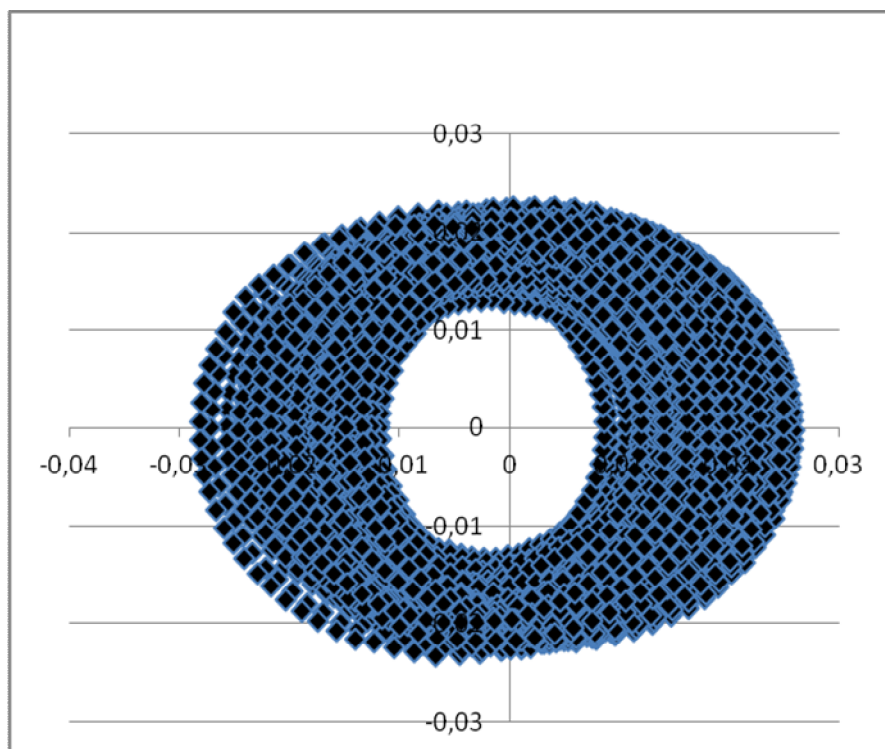


Рис.8 Попарное построение 13-го и 14-го сингулярного вектора

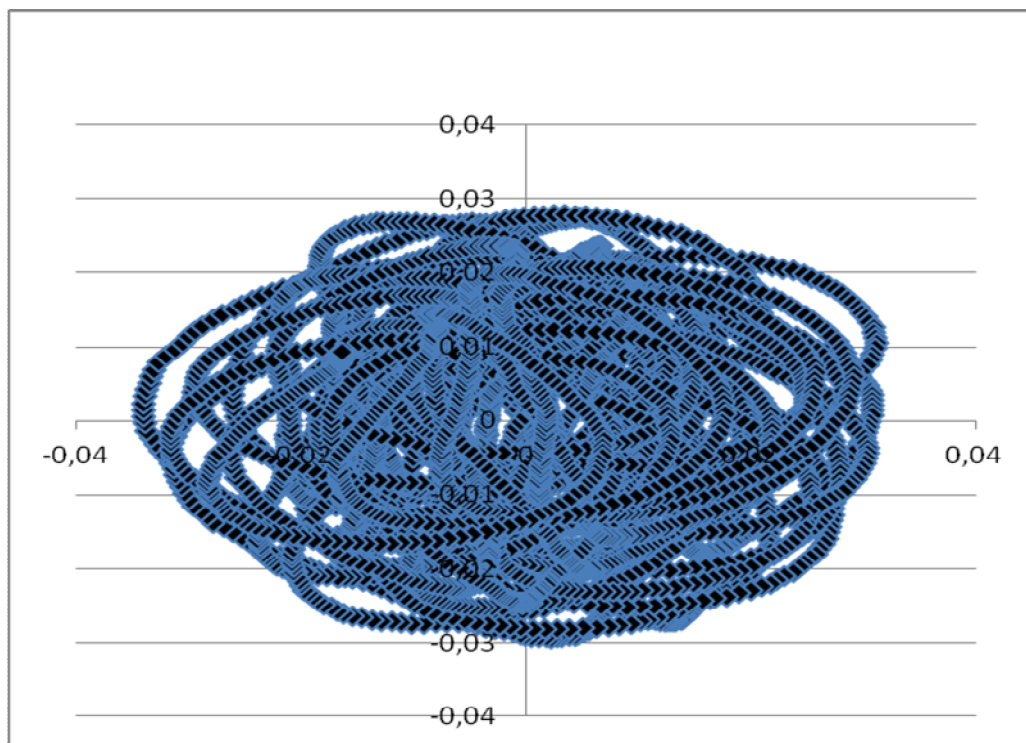


Рис.9 Попарное построение 15-го и 16-го сингулярных векторов

В результате можно сказать, что для задачи гидродинамического прослушивания скважин можно воспользоваться кривой построенной по 10 сингулярным тройкам. Если мы воспользуемся 11ю сингулярными тройками, то необходимо дальнейшее исследование сингулярных векторов (в данной работе оно не рассматривается), т.к. вероятно здесь проявляется неожиданная периодическая компонента. Использование же 15-й сингулярной тройки вносит шумовую компоненту и она должна быть отброшена. Приведем на рис.10 построение 20-го и 21-го сингулярного вектора.

где

A – симметричная матрица размерности $N \times N$. $N \approx 10000 \div 200000$. Фактически не теряя общности, полагаем $N = 2^k \times N_1$. Это означает, что размер временного ряда составляет $2^{k+1} \times N_1 - 1$. В этом случае траекторная матрица является симметричной. Не будем пока обращать внимания на то, что хранение такой матрицы в оперативной памяти требует десятков гигабайт. В реальности такой памяти не требуется и это будет показано потом. Сформируем ортогональную матрицу:

$$W_{(N)} = \{W_{i,j}\} \quad (2)$$

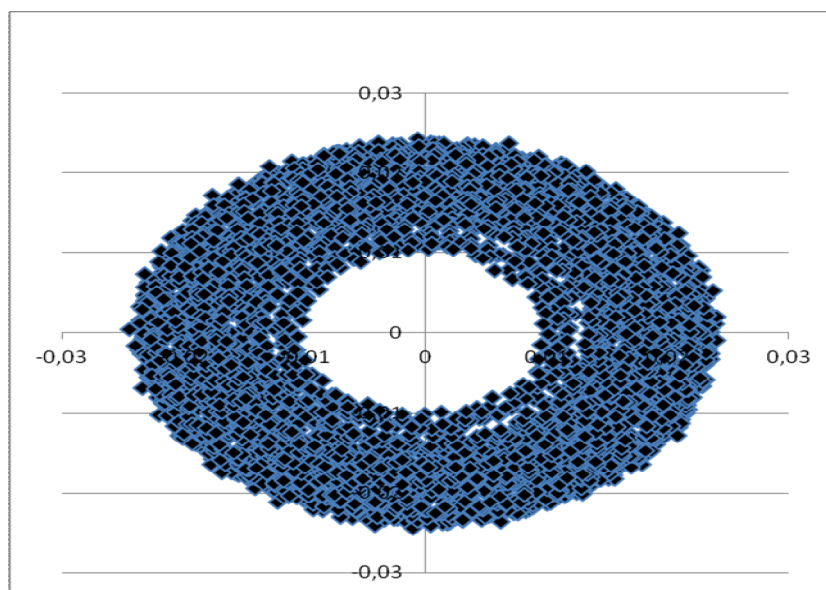


Рис.10 Построение 20-го и 21-го сингулярного векторов.

Второй алгоритм

Рассмотренный пример показывает, что отбрасывание сингулярных троек, сингулярные числа которых меньше некоторых значений может привести к потере неожиданных но интересных сигналов, отношение сигнал/шум которых меньше 1. Понижение же границы отбрасывания приведет к зашумлению отфильтрованных данных и ухудшению процедуры фильтрации. Приходится признать, что первый алгоритм недостаточен и необходимо уметь находить полное или частичное спектральное (сингулярное) разложение больших заполненных матриц. Будем рассматривать спектральную задачу:

$$Ax = \lambda x \quad (1),$$

$$W_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \times \delta_{2i-1,j} + \frac{1}{\sqrt{2}} \times \delta_{2i,j}; & 1 \leq i \leq \frac{N}{2} = 2^{k-1} \times N_1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \times \delta_{2i-1-N} - \frac{1}{\sqrt{2}} \times \delta_{2i-N}; & \frac{N}{2} < i \leq N \end{cases} \quad (3)$$

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Умножение матрицы $W_{(N)}$ на вектор размерности N означает вейвлет – преобразование этого вектора на основе вейвлетов Хаара[4]. Сформируем последовательность из k матриц.

$$\begin{aligned} \text{(1)} \quad W &= W_{(N)} \quad ; \quad \text{(2)} \quad W = \begin{pmatrix} W_{(N/2)} & 0 \\ 0 & W_{(N/2)} \end{pmatrix} \quad ; \quad \dots; \\ \text{(3)} \quad W &= \begin{pmatrix} W_{(N/2^{k-1})} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & W_{(N/2^{k-1})} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Матрица $\text{(3)} \quad W$ является блочно-диагональной матрицей с

2^{J-1} ненулевыми диагональными блоками и нулевыми внедиагональными блоками. Рассмотрим матрицу $\text{(4)} \quad W = W \times \dots \times W \times W$.

Умножив уравнение (1) на матрицу W , получим задачу:

$$\tilde{A} \times z = \lambda \times z, \quad \tilde{A} \equiv W \times A \times W^T, \quad z \equiv W \times x \quad (4)$$

Таким образом, к матрице A и собственному вектору x было применено вейвлет-пакетное преобразование [4]. В результате получаем блочную матрицу блочной размерности $2^{k-1} \times 2^{k-1}$ и с блоками размерностью $N_1 \times N_1$. Выделим диагональную часть $\bar{A}$, т.е. представим эту матрицу как

$$\tilde{A} = \bar{A} + B, \quad \text{где}$$

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \begin{pmatrix} A_{1,1} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & A_{2^{k-1}, 2^{k-1}} \end{pmatrix}, \\ B &= \begin{pmatrix} 0 & A_{1,2} & \dots & A_{1,2^{k-1}} \\ A_{2,1} & 0 & \dots & A_{2,2^{k-1}} \\ \vdots & \dots & \ddots & \vdots \\ A_{2^{k-1},1} & \dots & A_{2^{k-1},2^{k-1}-1} & 0 \end{pmatrix} \quad (4a) \end{aligned}$$

В силу свойств, вейвлет- пакетов матрица $\bar{A}$ описывает регулярную часть исходной матрицы, а матрица B – матрица поправок различной гладкости. Рассмотрим спектральную задачу:

$$\bar{A}u = \bar{\lambda}u \quad (5)$$

Эта задача распадается на 2^{k-1} независимых спектральных задач размерностью $N_1 \times N_1$.

$$A_{i,i} u = \bar{\lambda}_i u, \quad i \in 1 \dots 2^{k-1} \quad (6)$$

Задачи (6) решаются при помощи хорошо работающих традиционных алгоритмов[5], причем для компьютеров с параллельной архитектурой, каждая из

задач (6) решается одновременно и независимо друг от друга. Матрица собственных векторов задачи (5) имеет вид:

$$U = \begin{pmatrix} u & 0 & \dots & 0 \\ \text{(1)} & & & \\ 0 & u & \dots & 0 \\ & \text{(2)} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & u \\ & & & \text{(2}^{k-1}\text{)} \end{pmatrix} \quad (7)$$

Подматрицы $\text{(8)} \quad u$ являются ортогональными матрицами,

столбцами которых являются собственные вектора задач (6). Собственные вектора задачи (5) образуют базис в пространстве R^N и имеют по N_1 ненулевых компонент.

Воспользуемся этим фактом, представлением (4a) и построим теорию возмущений для задачи (4) по аналогии с теорией возмущений Бриллюэна-Вигнера [6]. Перепишем (4) для n – го собственного вектора в виде:

$$\bar{A}z_n - \lambda_n z_n = -Bz_n$$

Полагая, что при $\|B\| \rightarrow 0$, $z_n \rightarrow u_n$ разложим z_n по векторам базиса u :

$$z_n = cu_n + \sum_{k \neq n} c_{n,k} u_k \quad (8)$$

И подставим в (4). В результате получим уравнения:

$$\begin{aligned} c(\lambda_n - \bar{\lambda}_n) &= (u_n, Bz_n) \\ z_n &= cu_n + \sum_{p \neq n} \frac{(u_p, Bz_n)}{(\lambda_n - \bar{\lambda}_p)} u_p \quad (9) \end{aligned}$$

Эту систему уравнений решаем методом последовательных приближений. В первом приближении имеем:

$$z_n = c \left\{ u_n + \sum_{p \neq n} \frac{(u_p, B u_n)}{(\lambda_n - \bar{\lambda}_p)} u_p \right\}$$

$$\lambda_n = \bar{\lambda}_n + (u_n, B u_n) + \sum_{p \neq n} \frac{(u_n, B u_p)(u_p, B u_n)}{(\lambda_n - \bar{\lambda}_p)} \quad (10)$$

Процесс последовательных приближений быстро сходится при любой матрице B , т.к. искомое собственное значение находится и в знаменателе. Легко видеть из (4a) и (7), что скалярные произведения $(u_n, B u_n) = 0$ и $(u_i, B u_j) = 0$ если u_i и u_j являются

собственными векторами одной и той же задачи(6). Легко также видеть, что вообще скалярные произведения собственных векторов и матрицы В на самом деле являются скалярными произведениями собственных векторов и соответствующего блока этой матрицы. Численные эксперименты пока подтверждают быструю сходимость последовательных приближений, однако теоремы о сходимости процесса последовательных приближений автор не имеет. Для нахождения собственного значения исходной задачи используется метод Ньютона вычисления корня функции $F(\lambda)$. Т.е. ищется корень уравнения $F(\lambda)=0$.

$$F(\lambda_n) = \lambda_n - \overline{\lambda_n} - \sum_{p \neq n} \frac{(u_n, B u_p)(u_p, B u_n)}{(\lambda_n - \overline{\lambda_p})}$$

$$F'(\lambda_n) = 1 + \sum_{p \neq n} \frac{(u_n, B u_p)(u_p, B u_n)}{(\lambda_n - \overline{\lambda_p})^2}$$

Получения формул и программирования второго и высших приближений не представляют затруднений и, поэтому, здесь опускаются. Вычислив λ_n , используя (10) или аналоги, находим собственный вектор. Константа c в формуле для собственного вектора находится из условия нормировки. Найдя собственные вектора задачи (4), находим собственные вектора исходной задачи, проделав обратное вейвлет преобразование:

$$x_n = W^T z_n$$

1. Формирование матриц. Предыдущее изложение алгоритма велось так, как если бы траекторная матрица хранилась бы в оперативной памяти. Однако в этом случае этот алгоритм был бы крайне не эффективным. Действительно, если временной ряд содержит $2^{k+1}N_1 - 1$ отсчетов, то для хранения его траекторной матрицы (с окном равным половине ряда) требуется $2^{2k}N_1^2$ чисел, т.е. потребность в оперативной памяти повышается в $2^{k-1}N_1$ раз. Т.е. если для хранения исходного временного ряда нам требуется 1.64Мб, то для хранения его траекторной матрицы нам могло бы потребоваться 22.4 Гб. Вместе с тем из (3),(4) и (4а) ясно, что элементы каждого блока могут вычисляться независимо и нам нет необходимости в хранении всей матрицы как исходной, так и модифицированной. Пусть мы имеем временной ряд $\{x_i\}$, где $i \in 1 + 2^{k+1}N_1 - 1$. Траекторная матрица $A = \{a_{i,j}\}$,

где $a_{i,j} = x_{i+j-1}$; $i, j \in 1 + 2^k N_1$. Подействуем на матрицу A матрицей W . Получим матрицу $\tilde{A}$.

$\tilde{A} = W A W^T$. Легко убедиться, что эта матрица

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{1,1} & \tilde{A}_{1,2} \\ \tilde{A}_{2,1} & \tilde{A}_{2,2} \end{pmatrix}$$

является блочной и $\tilde{A} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{1,1} & \tilde{A}_{1,2} \\ \tilde{A}_{2,1} & \tilde{A}_{2,2} \end{pmatrix}$.

Как легко убедиться для элементов матрицы справедливо:

$$\tilde{A}_{1,1}^{lm} = \{a_{1,ij}^{lm}\}; i, j \in 1 + \frac{N}{2}$$

$$a_{1,ij}^{1,1} = \frac{1}{2}(a_{2i-1,2j-1} + a_{2i-1,2j} + a_{2i,2j-1} + a_{2i,2j}) \quad i, j \in 1 + \frac{N}{2}$$

$$a_{1,ij}^{1,1} = \frac{1}{2}(x_{2i+2j-3} + 2x_{2i+2j-2} + x_{2i+2j-1}) \quad i, j \in 1 + \frac{N}{2}$$

$$a_{1,ij}^{1,2} = \frac{1}{2}(a_{2i-1,2j-1} - a_{2i-1,2j} + a_{2i,2j-1} - a_{2i,2j}) \quad i, j \in 1 + \frac{N}{2}$$

$$a_{1,ij}^{1,2} = \frac{1}{2}(x_{2i+2j-3} - x_{2i+2j-1}) \quad i, j \in 1 + \frac{N}{2}$$

$$a_{1,ij}^{2,1} = \frac{1}{2}(a_{2i-1,2j-1} - a_{2i,2j-1} + a_{2i-1,2j} - a_{2i,2j})$$

$$a_{1,ij}^{2,1} = \frac{1}{2}(x_{2i+2j-3} - x_{2i+2j-1})$$

$$a_{1,ij}^{2,2} = \frac{1}{2}(a_{2i-1,2j-1} - a_{2i-1,2j} - a_{2i,2j-1} + a_{2i,2j})$$

$$a_{1,ij}^{2,2} = \frac{1}{2}(x_{2i+2j-3} - 2x_{2i+2j-2} + x_{2i+2j-1})$$

$$i, j \in 1 + \frac{N}{2} \quad (11)$$

Подействуем на матрицу $\tilde{A}$ матрицей W и получим

$$\tilde{A} = W \tilde{A} W^T$$

Как легко видеть

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} W_{(N/2)} \tilde{A}_{1,1} W_{(N/2)}^T & W_{(N/2)} \tilde{A}_{1,2} W_{(N/2)}^T \\ W_{(N/2)} \tilde{A}_{2,1} W_{(N/2)}^T & W_{(N/2)} \tilde{A}_{2,2} W_{(N/2)}^T \end{pmatrix} \quad (12)$$

При этом для любого блока из (12) справедливы формулы (11) с соответствующей заменой $a_{i,j}$ на

$$a_{i,j}^{lm}. \text{ Эти формулы можно применять рекуррентно.}$$

Таким образом, на любом уровне вейвлет преобразования, можно легко выразить элементы блока получаемой матрицы через значения временного

ряда. Для иллюстрации некоторых особенностей алгоритма, рассмотрим одну из модельных матриц. Рассмотрим модельную задачу:

$$A u_m = \lambda_m u_m; \dim A = N \times N; A = \{a_{i,j}\}$$

$$a_{i,j} = -\frac{2}{N+1} \sum_{k=1}^N \frac{\sin\left(\frac{\pi k i}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi k j}{N+1}\right)}{\left(\sin\left(\frac{\pi k}{2(N+1)}\right)\right)^2}$$

$$\lambda_m = \frac{1}{\left(\sin\left(\frac{\pi m}{2(N+1)}\right)\right)^2} \quad u_m(i) = c_m \sin\left(\frac{\pi m i}{N+1}\right)$$

$$c_m = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^N \left(\sin\left(\frac{\pi m i}{N+1}\right)\right)^2\right)^{1/2}} \quad i, m \in 1 + N \quad (13)$$

Пусть $k=7, N_1 = 51$; Тогда $N=6528$. На рис.11 приведены логарифмы 55 собственных значений точных (сплошная линия) и начальных приближений (пунктир), полученных решением задач (6). Полученная в результатевейлет – пакетного преобразования, матрица может считаться разреженной. На рис. 12,13,14 приведены натуральные логарифмы евклидовых норм матричных блоков на первой, второй и 128 блочной строке итоговой матрицы

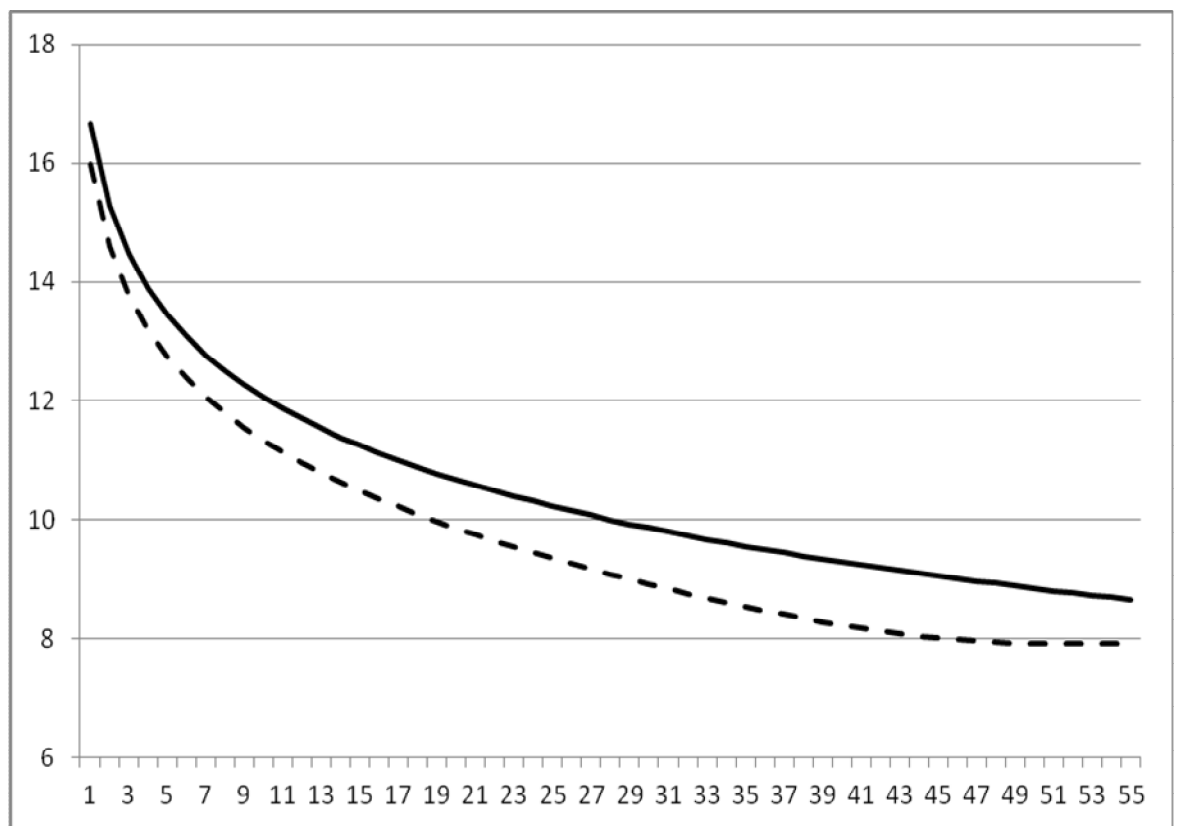


Рис.11. Натуральные логарифмы (ось ординат) точных и начальных приближений собственных значений. По оси х номера собственных значений

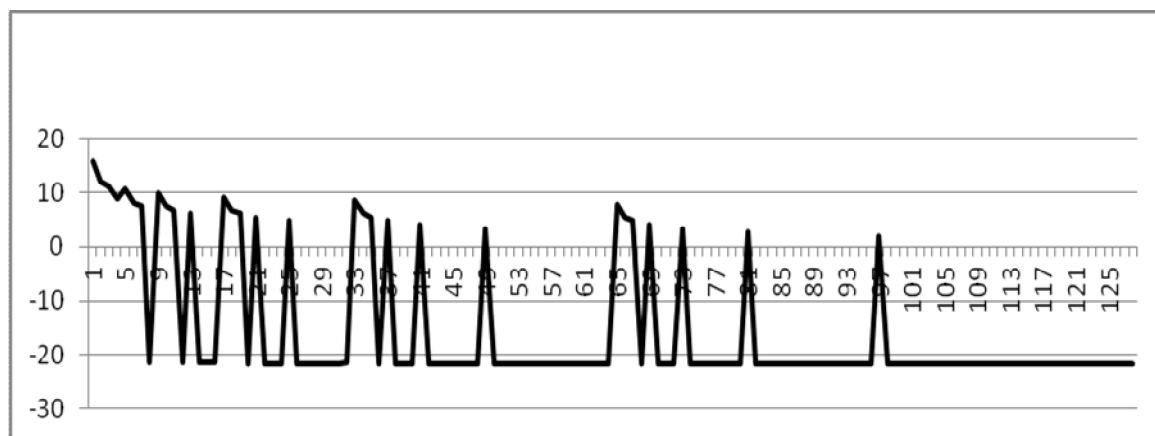


Рис.12. Логарифмы норм матричных блоков первой блочной строки

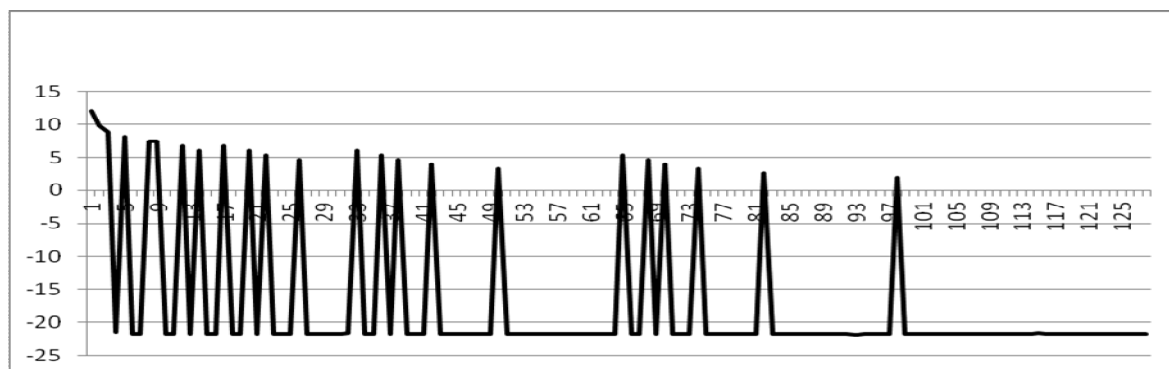


Рис.13. Логарифмы норм матричных блоков второй блочной строки

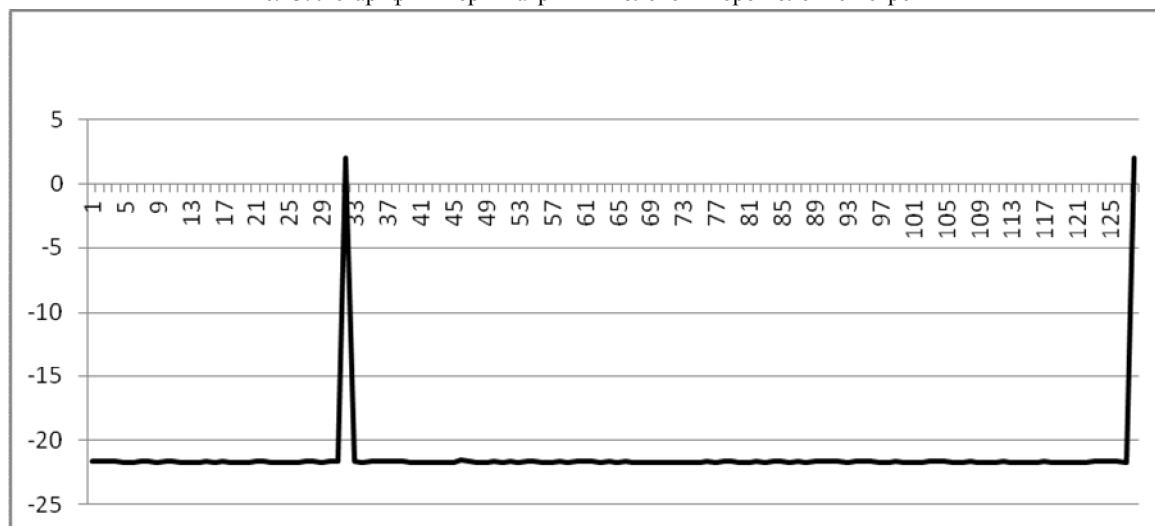


Рис.14. Логарифмы норм матричных блоков 128 блочной строки

Вычислим в каждой блочной строке максимальную норму блока. Если мы будем пренебрегать в каждой строке блоками с нормой меньше 0.001 максимальной, то в первой блочной строке вместо 128 блоков останется 6, при этом один из них диагональный. Т.е. в правую часть формулы (10), вместо 127 членов, входит 5.

Во второй вместо 128 блоков остается 14. В 128-й остается только 2 блока.

Если учесть, что матричные блоки могут вычисляться независимо друг от друга, то с учетом этого факта, требования к памяти этого алгоритма не являются значительными и этот алгоритм хорошо распараллеливается при помощи библиотеки MPI.

Заклучение

Алгоритм нахождения спектра больших матриц позволяет применить сингулярный спектральный анализ не только в задаче выделения тренда сильно зашумленных больших временных рядов, но и к задаче выделения слабого полезного периодического (квазипериодического) сигнала в больших временных рядах.

Литература

1. R.Vautard, P.Yiou, M. Ghil. Physica D.,1992,v.58,p.95-126
2. Дж.Деммель, Вычислительная линейная алгебра,М.,”Мир”,2001г.
3. Ф.И.Александров, Разработка программного комплекса автоматического выделения и прогноза аддитивных компонент временных рядов в рамках подхода “Гусеница”-SSA.//Автореферат диссертации к.ф.-м.н.,Санкт-Петербург,2006г.
4. Э.Столниц, Т.ДеРоуз, Д.Салезин, Вейвлеты в компьютерной графике, Москва-Ижевск,2002г.
5. Дж. Х. Уилкинсон, С. Райнш. Справочник алгоритмов на языке Алгол. Линейная алгебра, М.,»Машиностроение», 1976г.
6. Ф.М.Морс, Г. Фешбах. Методы теоретической физики, т.2, М., Наука,1963г.

Two algorithm denoising, smoothing and trend identify for large noisy time series: Algorithm2

M.L. Bakhmutsky

Abstract. New method for determination eigenvalues and eigenvectors very large symmetric dense matrix are provided. This tool is applied to trajectory matrix large nonstationary time series. Column trajectory matrix is equal to one-half time series. The algorithm is variant of singular-spectral analysis for identify trends, denoising, and smoothing for large nonstationary time series.

Тепловое моделирование компонентов электронных модулей

П.И. Кандалов

В статье рассматривается тепловое моделирование компонентов электронных модулей. Описывается построение математической модели компонентов с применением многополюсных графов. Рассматривается пример компьютерного моделирования на основе полученной математической модели.

1. Введение

Важнейшие характеристики электронных систем (ЭС) и их компонентов (микросхем, электронных модулей, вычислительных комплексов и систем и др.) такие как статические и динамические электрические параметры, надежность, быстродействие, помехоустойчивость и т.д., в значительной степени зависят от температуры. При этом ограничения по уровню рабочих температур ЭС являются зачастую решающими, на пути создания ЭС с требуемыми значениями эксплуатационных характеристик. Перегревы компонентов ЭС могут приводить к выходу микросхем из строя, неправильному срабатыванию, снижению надежности и пр., поэтому данная проблема является особенно актуальной для современных ЭС, к которым предъявляются повышенные требования к миниатюризации и плотности компоновки, приводящие, в свою очередь, к росту плотности мощности тепловыделения. Поэтому наряду с проектированием ЭС и их компонентов (кристаллов микросхем (МС), корпусов микросхем, многослойных печатных плат (МПП), электронных модулей (ЭМ) и пр.), включающим решение задач расчета электрических параметров, механических характеристик, трассировку и пр., необходимо проводить также их тепловое проектирование, то есть проектирование собственно тепловых режимов конструкций совместно с остальными видами проектирования.

Тепловое проектирование ЭС включает в себя математическое и компьютерное моделирование тепловых процессов, протекающих в ЭС и их компонентах. Последние представляют собой трехмерные конструкции, состоящие из большого числа разнородных компонентов сложной формы, находящихся во взаимодействии между собой и окружающей средой. К ним относятся микропроцессоры, МС, ЭМ, блоки, панели, стойки. Каждый ЭМ, в свою очередь, содержит большое число таких компонентов, как МС, электро- радиоэлементы (ЭРЭ), а так же различные компоненты конструкций креплений, направляющих, электрических разъемов, контактирующих устройств, теплоотводов, систем охлаждения. Компоненты ЭМ также представляют собой сложные подсистемы. Так, МС состоит из полупроводникового кристалла, с созданными на его поверхности p - n -переходами, металлизированной разводки, многослойного корпуса, металлических выводов кристалла и корпуса, теплоотводов и пр.

На сегодняшний день, отсутствуют надежные и универсальные программные средства компьютерного

моделирования тепловых процессов в сложных ЭС. Так, широко используемый за рубежом программный комплекс (ПК) теплового проектирования и моделирования температурных полей в ЭМ Beta-Soft не позволяет проводить расчеты температурных полей, учитывающие такие особенности реальных конструкций, как многослойность МПП (в Beta-Soft МПП моделируется в виде одного слоя с усредненной теплопроводностью), трехмерность конструкций МС и ЭРЭ и пр. Столь серьезные ограничения в возможностях ПК Beta-Soft не позволяют проводить с его помощью адекватное моделирование температурных полей сложных конструкций ЭС.

Основным компонентом ЭС является ЭМ, включающий МПП и установленные на ее поверхностях МС, ЭРЭ, элементы конструкции. Тепловое проектирование ЭМ включает в себя решение следующих задач:

- моделирование – математическое и компьютерное – температурных полей конструкции и ее компонентов в различных условиях эксплуатации и испытаний;
- проектирование компонентов теплоотвода;
- конструирование систем эффективного охлаждения компонентов и всей конструкции ЭМ в целом (конвективно-воздушного, кондуктивно-воздушного, кондуктивно-жидкостного, кондуктивно-испарительного, жидкостного и т.д.).

Для решения указанных задач необходимо располагать эффективными, универсальными и надежными методами математического и компьютерного моделирования температурных полей сложных конструкций ЭМ. Эти методы должны учитывать следующие факторы и особенности реальных конструкций ЭМ:

- конструкция ЭМ представляет собой сложную систему, состоящую из большого числа компонентов и элементов;
- Компоненты ЭМ характеризуются различными значениями потребляемых мощностей, размерами и пространственной конфигурацией, различными теплофизическими характеристиками материалов, неоднородными включениями и полостями, нестационарным распределением мощностей элементов, носящих стохастический характер;
- МПП и МС представляют собой многослойные структуры, состоящие из большого числа слоев различной толщины, выполненных из различных материалов.

Компоненты, используемые в современных ЭМ, отличаются большим качественным и количественным разнообразием, что требует создания для каждого из них собственной тепловой модели. Однако с точки зрения происходящих в них процессов энергопотребления, их можно разбить на две группы – активные и пассивные.

Активные компоненты являются источниками тепловой энергии, возникающей в процессе потребления электрической мощности, которая в конечном итоге рассеивается в виде тепла. К активным компонентам относятся МС, диоды, транзисторы, резисторы, катушки индуктивности, трансформаторы.

Пассивные компоненты не обладают собственным тепловыделением. К ним относятся электрические разъемы, конструктивные элементы крепления и монтажа, направляющие, конденсаторы, контактирующие устройства, элементы теплоотвода (радиаторы, металлические детали, тепловые трубы и пр.).

Деление компонентов на две группы по их способности к тепловыделению позволяет создать две обобщенные тепловые модели, описывающих процессы теплопереноса в каждом из них. При тепловом моделировании ЭМ пассивные компоненты выполняют функции теплоотводов и по своему физическому смыслу являются стоками тепла, а активные компоненты, выделяющие тепловую энергию, играют в конструкции ЭМ роль тепловых источников.

В данной статье рассматривается метод математического и компьютерного моделирования активных и пассивных компонентов (МС и ЭРЭ) на основе многополюсного графа. Метод позволяет проводить расчеты температуры и тепловых параметров сложных элементов конструкций ЭМ и учитывает реальные конструктивные особенности как корпусов МС, так и теплоотводов. Компьютерное моделирование, представляющее собой реализацию математических моделей и методов на компьютере, реализовано в виде ПК STF-ElectronMod 2013 [1], написанного на высокоуровневом языке Pascal для персональных компьютеров в среде ОС Windows. ПК STF-ElectronMod имеет развитую пользовательскую оболочку, графический интерфейс и гибкую систему интерактивного взаимодействия с пользователем. Приводится пример и результаты компьютерного моделирования.

2. Тепловое моделирование активных и пассивных компонентов ЭМ

Рассмотрим тепловые модели активных и пассивных компонентов.

Тепловые модели активных и пассивных компонентов представляют собой тепловые схемы, получаемые на основе метода электротепловой аналогии [2], согласно которому сложная структура компонента разбивается на систему из нескольких изотермических тел, обменивающихся между собой и окружающей средой потоками тепла. Разбиение на систему изотермических тел выполняется таким образом, что с достаточной для практики точностью можно принять, что каждое тело системы имеет однородное температурное поле, характеризуемое средней температурой по объе-

му тела. Поэтому, каждое изотермическое тело структуры может быть смоделировано в виде узла, имеющего среднюю температуру, а тепловое взаимодействие тел – тепловыми сопротивлениями, соединяющими тепловые узлы различных тел.

Применяя метод электротепловой аналогии для активных компонентов может быть получена тепловая модель, которая представляет собой обобщенную тепловую схему (рис. 1а) подробно рассмотренную в [3]. Согласно этому методу активный компонент МС представляется в виде системы, содержащей кристалл МС, корпус МС и среду, которые моделируются узлами тепловой схемы, с средними температурами, между которыми включены соответствующие тепловые сопротивления. Пассивные компоненты участвуют в процессах теплообмена только в качестве стоков тепловой энергии, поэтому их тепловая модель (рис. 1б) содержит только одно тепловое сопротивление, которое моделирует полный тепловой тракт, вдоль которого тепловой поток отводится от поверхности МПП через конструкцию пассивного компонента к стоку теплоты в конце тракта.

Обобщение рассмотренных тепловых схем для ак-

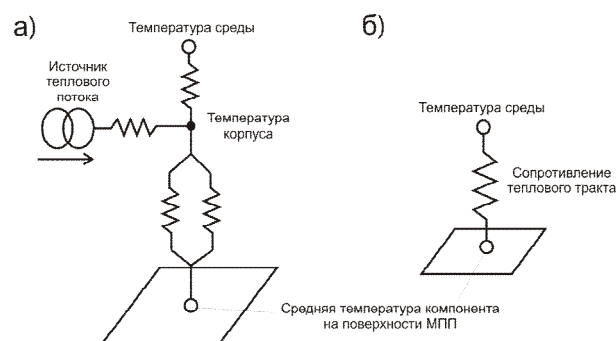


Рис. 1. Тепловая схема активного (а) и пассивного (б) компонентов

тивного и пассивного компонентов может быть проведено в следующем направлении: тепловая схема состоит из системы узлов, представляющих собой изотермические тела, и тепловых сопротивлений, включенных в ветви, соединяющих соответствующие узлы; каждое тепловое сопротивление, соединяющее два узла, моделирует элемент конструкции; поток тепла течет от узла с большей температурой к узлу с меньшей температурой; активный компонент может содержать несколько независимых источников теплового потока. Таким образом, тепловая модель компонента является *ориентированным графом*, в котором принято, что направление потока вдоль дуги графа, соединяющей узлы i и j , устанавливается от узла i с большей средней температурой T_i к узлу j с меньшей средней температурой T_j .

Положим, граф состоит из n -вершин и m -ребер и в графе имеется узел p с температурой T_p , связанный с узлом p на поверхности МПП, расположенным в центре прямоугольной площадке проекции компонента на плате (рис. 2). Тогда, суммарный тепловой поток J_p , выходящий из узла p графа равен тепловому потоку

входящему в прямоугольную площадку компонента платы в точке p .

Согласно матрично-топологическому методу [1], температуры в узлах произвольной тепловой схемы определяются следующим матричным уравнением:

$$AGA^T T = J + AGT_a, \quad (1)$$

где A – матрица инцидентов графа, G – квадратная матрица проводимостей ветвей, J – вектор известных тепловых потоков независимых источников тепловых потоков, T_a – вектор известных температур в соответ-

где $P = \|J_{p1}, \dots, J_{pN}\|^T$ – вектор-столбец потоков тепла в узлах p_i , $i = 1, 2, \dots, N$, входящих в соответствующие прямоугольные площадки на тепловой модели МПП; $T = \|T_{p1}, T_{p2}, \dots, T_{pN}\|^T$ – вектор-столбец усредненных температур по прямоугольным площадкам соответствующих элементов тепловой модели МПП; A_p – диагональная матрица коэффициентов $a_{p,i}$, B_p – вектор коэффициентов $b_{p,i}$, $i = 1, 2, \dots, N$, которые определяются из выражений (5).

Для получения окончательного решения, необхо-

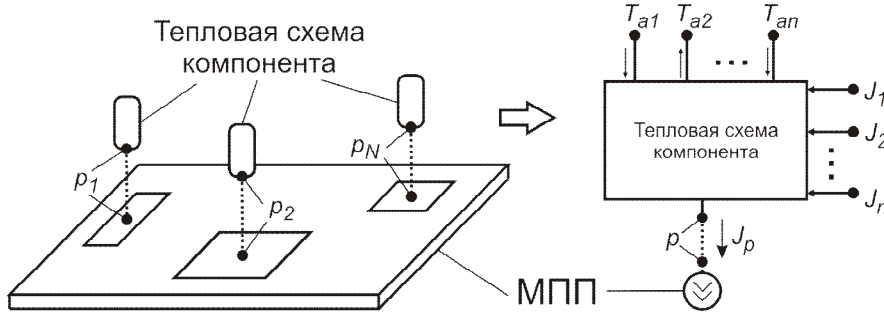


Рис.2. МПП и обобщенная тепловая схема компонента

ствующих ветвях тепловой схемы.

Решением матричного уравнения (1) является зависимость между неизвестными температурой T_p в узле p и суммарным тепловым потоком J_p , выходящим из этого узла, выраженная через известные значения матрицы инцидентов A , матрицы проводимостей ветвей G , векторов известных тепловых потоков независимых источников тепловых потоков J и температур в соответствующих ветвях тепловой схемы T_a (рис. 2). Эта зависимость может быть записана в следующем виде:

$$J_p = f(T_p, A, G, J, T_a). \quad (2)$$

Из матрично-топологического уравнения (1) следует, что функция (2) определяется линейным уравнением:

$$J_p = a_p T_p + b_p. \quad (3)$$

Для определения коэффициентов a_p и b_p в уравнении (3) разделим вектор теплового потока независимых источников тепловых потоков J на два независимых вектора J^+ и J^- . Каждый элемент i вектора J^+ определяется абсолютной величиной теплового потока, направленного к узлу i , а для J^- – от узла i . С учетом разделения вектора J матричное уравнение (1) примет вид:

$$AGA^T T = J^+ + J^- + AGT_a. \quad (4)$$

Коэффициенты a_p и b_p уравнения (3) определяются из матричного уравнения (4) и имеют вид:

$$a_p = -\frac{1}{c_{pp}}, \quad b_p = \frac{1}{c_{pp}} \cdot \sum_{i=1}^n c_{pi} V_i, \quad (5)$$

где c_{pp} элемент обратной матрицы $C = AGA^T$, V_i – i -ый элемент вектора $V = C^{-1}(J^+ + AGT_a)$.

Поскольку тепловая модель ЭМ, состоит из МПП и расположенных на ней N прямоугольных площадок на ее верхней и нижней поверхностях [3] к центру которых подсоединяются узлы p графов тепловых схем компонентов, можно записать N линейных уравнений, определяемых выражениями вида (3):

$$P = A_p T + B_p, \quad (6)$$

димо подставить уравнение (6) в систему математической модели ЭМ полученную в [4]. Конечной целью решения уравнений математической модели ЭМ является определение значений вектора-столбца потоков тепла P и вектора-столбца усредненных температур по прямоугольным площадкам соответствующих элементов, расположенных на поверхностях МПП. После того как они будут найдены, будут определены значения температур в каждом узле тепловой схемы, значения тепловых потоков и их направления через тепловые сопротивления тепловой схемы. Известными величинами являются: матрица инцидентов A , матрица проводимостей ветвей G и вектор известных тепловых потоков независимых источников тепловых потоков J . Неизвестными величинами, подлежащими определению, являются: вектор-столбец усредненных температур T и вектор-столбец потоков тепла P .

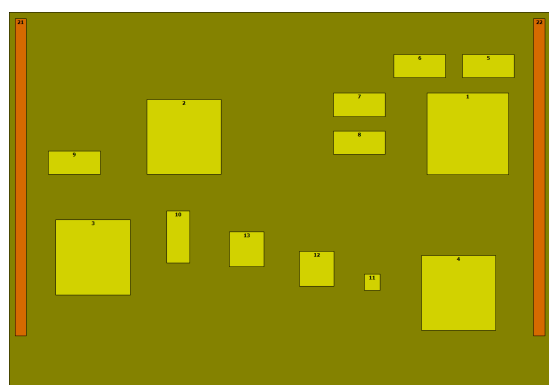
3. Пример моделирования ЭМ с активными и пассивными компонентами

Моделирование температурных полей проводилось на ПК STF-ElectronMod 2013. В качестве примера рассматривается ЭМ, представляющий собой МПП, с установленными на ней 20-ю МС, расположенными на верхней (ТОР) и нижней (БОТТОМ) поверхностях МПП. Каждая МС моделируется тепловой схемой (рис. 1а). Конструкция ЭМ крепится к верхней и нижней частям корпуса крейта и прижимается к нему с помощью двух клиновых механизмов, так что на каждой поверхности МПП образуется по два пассивных компонента, моделирующих стоки тепла с помощью тепловой схемы (рис. 1б). Расположение активных и пассивных компонентов на ТОР и БОТТОМ поверхностях ЭМ приведены на рис. 3.

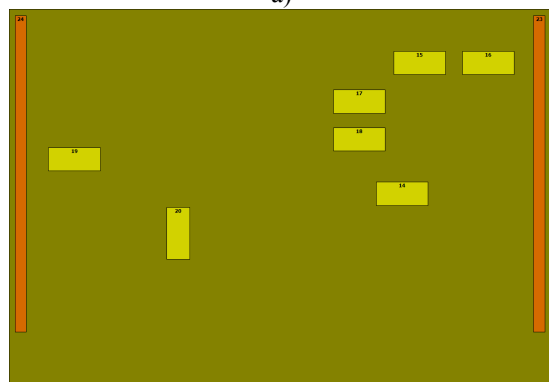
Рассматриваемый ЭМ находится в условиях свободного конвективного теплообмена с воздушной сре-

дой при нормальном давлении. Температура среды на TOP и BOTTOM поверхностях составляет 39,5 °С,

микропроцессоров, транзисторов, элементов конструктивных разъемов, теплоотводов, радиаторов и пр. – а так-



a)



b)

Рис. 3. TOP(a) и BOTTOM (b) поверхности ЭМ с установленными активными (показаны желтыми прямоугольниками) и пассивными (показаны оранжевыми прямоугольниками) компонентами

суммарная мощность потребляемая ЭМ равна 16,91 Вт.

Результаты моделирования показаны на рис. 4 в виде цветных изотерм температурного поля ЭМ.

4. Выводы

Разработанный метод моделирования активных и пассивных компонентов ЭМ реализован и используется в ПК STF-ElectronMod 2013 [1] при тепловом проектировании конструкций реальных ЭМ. Метод позволяет проводить моделирование компонентов ЭМ – МС,

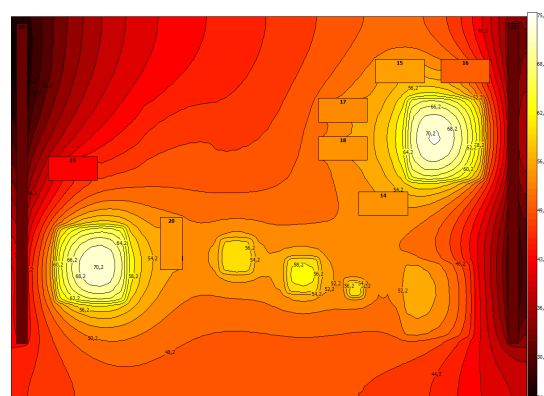


Рис.4. Изотермы на TOP поверхности МПП

же всей конструкции ЭМ в целом. Разработанный метод может применяться к сколь угодно сложным конструкциям компонентов ЭС.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 12-07-00076-а

Литература

1. Simulation of Temperature Fields of Electronic Modules (STF-ElectronMod) 2013// П.И. Кандалов, А.Г. Мадера / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013615400. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 06 июня 2013 г
2. А.Г. Мадера Моделирование теплообмена в технических системах. – М.: НФ, 2005
3. А.Г. Мадера, П.И. Кандалов Моделирование процессов теплообмена в электронных модулях. // Математическое и компьютерное моделирование систем: теоретические и прикладные аспекты. – Сборник научных трудов НИИСИ РАН, 2009. С. 56 – 66
4. А.Г. Мадера, П.И. Кандалов Матрично-топологический метод математического и компьютерного моделирования температурных полей в электронных модулях: программный комплекс STF-Electron Mod. // Программные продукты и системы, 2012, №4. – С. 160 – 164

Thermal modeling of components electronic modules

P. I. Kandalov

Abstract. The article deals with the thermal modeling of components electronic modules. Construction of mathematical model of components with application of multi polar graphs is described. An example of computer modeling on the basis of this mathematical model is reviewed.

Моделирование гидродинамической неустойчивости на границах ускоренного слоя

И.Г. Лебо

доктор физико-математических наук, профессор

Представлены результаты расчетов развития гидродинамической неустойчивости на контактных границах плоского и сферического слоев для различных режимов ускорения.

Введение

Если две среды с разной плотностью находятся в поле постоянного ускорения, причем более плотная жидкость давит сверху на менее плотную, то развивается неустойчивость Рэлея-Тейлора (НРТ) [1] (Лорд Rayleigh наблюдал неустойчивость при попытке налить ртуть на воду и впервые описал это явление). В статье [1] было показано, что в этом случае малые возмущения контактной поверхности будут нарастать по закону $\alpha(t) = \alpha_0 \cdot \exp(\omega \cdot t)$, где $\omega = \sqrt{kg \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1}}$,

t – время, ρ_2, ρ_1 – плотности верхнего и нижнего слоев, g – ускорение свободного падения, k – волновое число. В этой же статье было получено аналитическое решение, описывающее развитие малых возмущений границ слоя из несжимаемой жидкости толщиной h в поле постоянного ускорения g (уравнения 1):

$$\alpha = \frac{(\alpha_0 - \beta_0 \cdot e^{-kh}) \cdot \cosh(\omega t) - (\alpha_0 \cdot e^{-2kh} - \beta_0 \cdot e^{-kh}) \cdot \cos(\omega t)}{1 - e^{-2kh}} \quad (1)$$

$$\beta = \frac{(\alpha_0 \cdot e^{-kh} - \beta_0 \cdot e^{-2kh}) \cdot \cosh(\omega t) - (\alpha_0 \cdot e^{-kh} - \beta_0) \cdot \cos(\omega t)}{1 - e^{-2kh}}$$

где $\omega = \sqrt{-kg}$, $\alpha(t), \beta(t)$ – амплитуды возмущений на верхней и нижней границах, индекс «0» указывает их начальные значения, а ускорение g направлено вниз ($g < 0$).

Из формулы (1) следует, что при $\alpha_0 = \beta_0 \cdot e^{-kh}$ амплитуда возмущения не нарастает, а лишь осциллирует со временем.

В настоящей статье с помощью методов математического моделирования изучаются развитие неустойчивости границ слоя для различных режимов ускорения плоского и сферического слоев.

1. Постановка и решение задачи о развитии НРТ в плоском слое

Следуя [1] выпишем уравнения, описывающие развитие возмущений на границе слоя. В отличие от классической задачи мы учитываем плотности сред над и под слоем (η_U, η_L – уравнения верхней и нижней границ слоя) и возможность зависимости ускорения от времени $g(t)$. Тогда получается система уравнений (2), из которой следует решение (3).

Система уравнений (2-3) решалась численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка точности. В качестве теста использовались решения из (1).

Отметим, что полученные решения из (2-3) совпадали с (1) в том случае, когда $g = g_0 > 0$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta_U}{\partial t} &= -\frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{y=0}, \quad \eta_U = \alpha(t) \cdot \cos kx, \quad \eta_L = \beta(t) \cdot \cos kx \\ \frac{\partial \eta_L}{\partial t} &= -\frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{y=-h}, \quad \Phi = (A(t)e^{ky} + B(t)e^{-ky}) \cdot \cos(kx) \\ \frac{d\Phi}{dt} \Big|_{y=0} &= -\left(1 - \frac{\rho_2}{\rho_0}\right) \cdot \eta_U \cdot \frac{dV}{dt}, \\ \frac{d\Phi}{dt} \Big|_{y=-h} &= -\left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_0}\right) \cdot \eta_L \cdot \frac{dV}{dt} \end{aligned} \quad (2)$$

$\frac{dV}{dt}$ – ускорения границ слоя.

$$\begin{cases} \ddot{\alpha} = -kg \frac{(1 - \rho_2 / \rho_0) \cdot \cosh(kh) \cdot \alpha - (1 - \rho_1 / \rho_0) \cdot \beta \sinh(kh)}{\sinh(kh)} \\ \ddot{\beta} = -kg \frac{(1 - \rho_2 / \rho_0) \cdot \alpha - (1 - \rho_1 / \rho_0) \cosh(kh) \cdot \beta}{\sinh(kh)} \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $\ddot{\alpha} = \frac{d^2 \alpha}{dt^2}$, $\ddot{\beta} = \frac{d^2 \beta}{dt^2}$, ρ_1, ρ_2, ρ_0 – соответствующие плотности слоев (смотри рис.1), $h > 0$.

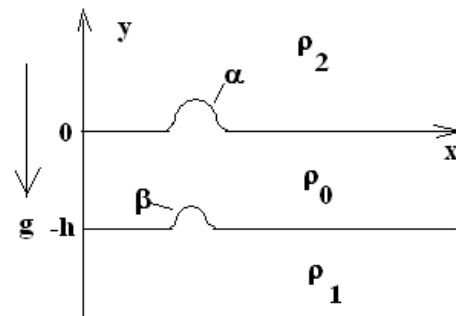


Рис.1. Постановка задачи о развитии возмущения на контактных поверхностях слоя в поле ускорения.

В начальный момент задавались амплитуды возмущений α_0 и β_0 , а начальные скорости возмущений равнялись 0. В первой серии расчетов ускорение свободного падения равнялось $g_0 = \text{const} = -9/8$ в условных единицах (у.е.). Пусть $\rho_0 = 1, \rho_2 = \rho_1 = 0$, и $\alpha_0 = 0,01, \beta_0 = 0$. (все величины заданы в у.е.). На верхней границе нарастают возмущения согласно (1). Если начальное возмущение задано на нижней границе, то оно осциллирует в процессе ускорения слоя также согласно (1).

Если $\rho_2 = 2$, $\rho_0 = 1$, $\rho_1 = 0$, и $\alpha_0 = 0,01$, $\beta_0 = 0$ то амплитуда на внешнем слое осциллирует, что согласуется с результатом первой части статьи [1], где получен инкремент роста возмущения границы раздела двух бесконечных слоев вида $\omega = \sqrt{\frac{\rho_0 - \rho_2}{\rho_0 + \rho_2}} kg$

В случае $\rho_1 = 2$, $\rho_2 = 0$, а остальные параметры прежние, возмущения на верхней границе нарастают, причем в случае $k \cdot h > 1$ их поведение совпадает с (1), где полагалось, что $\rho_1 = \rho_2 = 0$. Как изменится поведение возмущений в случае переменного ускорения?

Пусть $\rho_2 = \rho_1 = 0$ и $\alpha_0 = 0,01$, $\beta_0 = 0$, а $g_{-1}(t) = g_1 \cdot t^2$, причем $g_1 = -6 \cdot 9,8 = -58,8$ (при таких соотношениях слой имеет одинаковый путь ускорения для постоянного и переменного g на интервале времени $0 < t < 1$).

В следующем варианте был задан режим, когда ускорение убывает со временем, но при условии, что за время $0 < t < 1$ слой пройдет тоже расстояние. Закон изменения ускорения $g_{-2}(t) = 0,5 \cdot g_0 \cdot \exp(1-t)$.

Тогда получаем следующее поведение возмущений на границах слоя (смотри рис.2). Видно, что в случае нарастающего ускорения амплитуда возмущений к концу временного интервала больше, чем в случае постоянного, а в случае убывающего – меньше, чем в случае постоянного ускорения. Такая зависимость выполняется для всех номеров гармоник и толщин слоя. Отметим, что значения на оси ординат взяты в логарифмическом масштабе. В случае постоянного ускорения в этом масштабе амплитуда нарастает по линейному закону, в двух других случаях зависимость роста возмущений более сложная. Видно, что скорость роста возмущений возрастает с величиной ускорения (случай g_{-1}) и наоборот уменьшается, с уменьшением ускорения (случай g_{-2}).

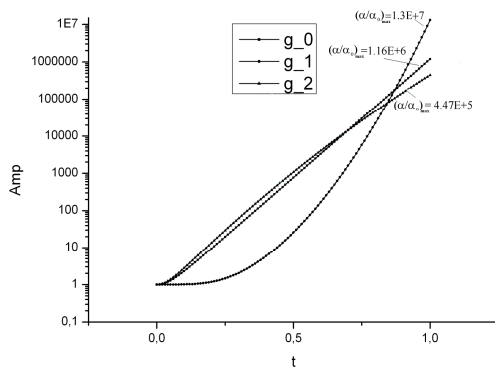


Рис.2. Рост амплитуд возмущений (Amp) от времени (t) на нижней границе при постоянном и нарастающем ускорении. Номер гармоники $k=22$. Толщина слоя $h = 1$.

Как следует из (1) в том случае, когда $\alpha_0 = \beta_0 \cdot e^{-kh}$, $\rho_2 = \rho_1 = 0$ и ускорение свободного падения является постоянной отрицательной величиной, то возмущения будут осциллировать. Если же задать $\rho_2 = \rho_1 > \rho_0$, то возмущения на обеих границах будут нарастать, причем с одинаковой скоростью. Таким образом, только в

случае $\alpha_0 = \beta_0 \cdot e^{-kh}$, когда слой помещен в среду меньшей плотности, выполняется условие отсутствия роста возмущений, а возмущения осциллируют. В режиме нарастающего (g_{-1}) и убывающего (g_{-2}) ускорений при выполнении условий $\beta_0 = \alpha_0 \cdot e^{kh}$, $h = 1$, $\rho_2 = \rho_1 = 0$ поведение возмущений качественно соответствует тому, что было получено ранее (смотри рис.3). Заметим, что возмущения на верхней и нижней границах осциллируют со временем. В случае постоянного ускорения (g_0) численное решение совпадает с (1).

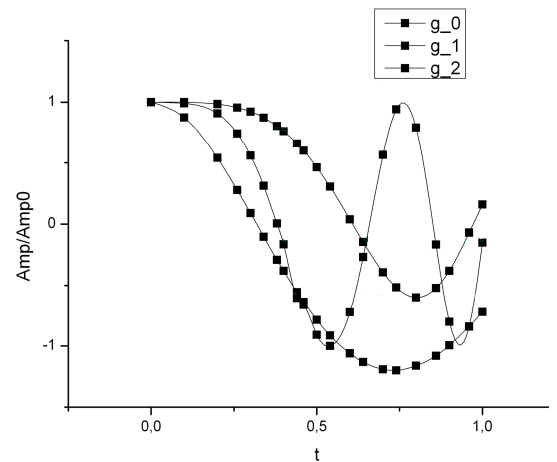


Рис.3. Эволюция относительных амплитуд возмущений (Amp/Amp_0) от времени (t) для случаев, когда $\beta_0 = \alpha_0 \cdot \exp(k \cdot h)$. Номер гармоники $k=2$. Толщина слоя $h=1$.

2. Развитие НРТ в сферическом слое из несжимаемой жидкости.

Постановка и вывод уравнений для моделирования неустойчивости границ сферического слоя ускоренного внешним давлением дан в [2]. В настоящем разделе приводится сравнение характера развития возмущений границ плоского и сферического слоев.

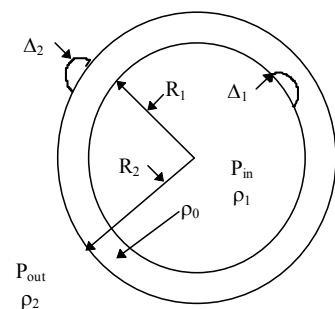


Рис.4. Постановка задачи о развитии возмущений на границах сферического слоя.

На рис.4 показана постановка задачи о развитии возмущений контактных границ сферического слоя.

В задаче имеются две границы $R_1(t)$ - внутренняя граница оболочки, и $R_2(t)$ - внешняя граница оболочки, $\Delta_{1(2)}$ - возмущения форм соответствующих границ, $P_{out(in)}$ - давления вне и внутри оболочки, ρ_2, ρ_0, ρ_1 - плотности среды вне..., в ... и внутри оболочки.

Уравнение движения невозмущенной оболочки имеет следующий вид (V_1 , V_2 – скорости границ):

$$Z = R_1(t) / R_2(t)$$

$$\frac{\partial V_1}{\partial t} = - \left\{ 2 - \frac{0.5 \cdot (1 - Z^4)}{1 - Z} \right\} \cdot \frac{V_1^2}{R_1} - \frac{P_{out} - P_{in}}{R_1(1 - Z) \cdot \rho} \quad (4)$$

Развитие возмущений границ описывается следующими уравнениями:

$$\frac{d^2 \Delta_{n1}}{dt^2} = - \frac{3V_1}{R_1} \frac{d\Delta_{n1}}{dt} + (2n+1) \frac{Z^{n-1} \cdot (1 - Z^3) \cdot V_1}{\Phi_n R_1} \frac{d\Delta_{n2}}{dt} - \left(2 - \left(1 - \rho_1 / \rho_0 \right) \frac{n+1+nZ^{2n+1}}{\Phi_n} \right) \frac{1}{R_1} \frac{dV_1}{dt} \Delta_{n1} - (2n+1) \frac{Z^{n-1}}{\Phi_n} \cdot \quad (5)$$

$$\cdot \left(\frac{-2V_1^2 Z^3 (1 - Z^3)}{R_1^2} + \left(1 - \rho_2 / \rho_0 \right) \frac{1}{R_2} \frac{dV_2}{dt} \right) \Delta_{n2}$$

$$\frac{d^2 \Delta_{n2}}{dt^2} = (2n+1) \frac{Z^{n+2} (1 - Z^3) V_1}{\Phi_n R_1} \frac{d\Delta_{n1}}{dt} - \frac{3V_2}{R_2} \frac{d\Delta_{n2}}{dt} + (2n+1) \left(\frac{2V_1^2 (1 - Z^3)}{R_1^2} + \left(1 - \rho_1 / \rho_0 \right) \frac{1}{R_1} \frac{dV_1}{dt} \right) \cdot \frac{Z^{n+2}}{\Phi_n} \Delta_{n1} \quad (6)$$

Здесь $\Phi_n = 1 - Z^{2n+1}$. При выводе уравнений (5) и (6) полагалось, что потенциал $\psi = (A(t) \cdot r^n + B(t) \cdot r^{-(n+1)}) \cdot Y_{nm}$ где $Y_{nm}(\theta, \varphi)$ – сферическая функция, амплитуды возмущений на внутренней и внешней границах $\Delta_{1(2)} = \Delta_{n1(n2)}(t) \cdot Y_{nm}(\theta, \varphi)$, а скорость можно выразить через потенциал: $\vec{V} = -grad\psi$. При движении оболочки ее толщина меняется, а скорости и ускорения на внешней и внутренней границах отличаются, причем $V_1 \cdot R_1^2 = V_2 \cdot R_2^2$.

Для моделирования развития НРТ на границах сферического слоя была разработана программа «RUNO» [2]. Рассмотрим случай расширяющейся оболочки. Три режима: $P_{out} = 0$, $P_{in} = P_{1(2,3)} \cdot R_1^\alpha(t)$

1) $\alpha = 0$, $P_1 = 1$; 2) $\alpha = 2$, $P_2 = 0.3763$;

3) $\alpha = -2$, $P_2 = 2.33333$. Параметры подобраны так, чтобы на радиусах $1 \leq R_1(t) \leq 2$ давление P_{in} совершало одинаковую работу для всех трех режимов.

На рис.5 показан сравнительный рост амплитуд возмущений оболочки для всех трех режимов.

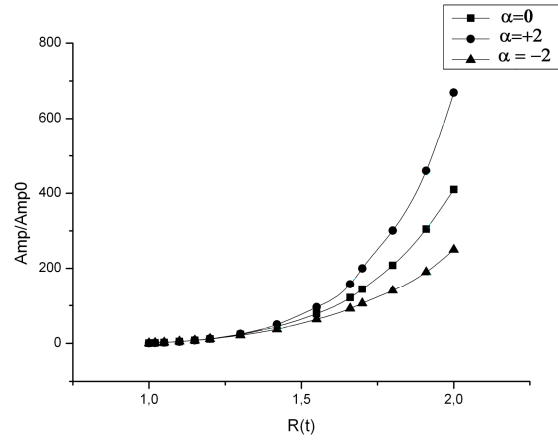


Рис.5. Рост амплитуды возмущения на внутренней границе оболочки при ее ускоренном расширении для трех режимов: 1) $\alpha=0$, постоянное давление, 2) $\alpha=2$, нарастающее давление, 3) $\alpha=-2$, убывающее давление. Номер гармоники $n=30$.

Поведение возмущений для других номеров гармоник качественно соответствует приведенным на рис.5 зависимостям.

3. Основные результаты

1. Приведены постановки задач и основные уравнение, описывающие развитие возмущений

границ плоского и сферического слоев несжимаемой жидкости, движущихся с различными режимами ускорения.

2. Показано, что режим с нарастающим ускорением является наиболее неустойчивым в плоском и сферическом случаях.

3. Условие стабилизации возмущений плоского слоя выполняется также и в случаях переменных ускорений.

Литература

1. G. Taylor. The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. // Proceedings of the Royal Society of London. Ser A, Mathematical and Physical Sciences/ Vol/201, No.1065, 192-196, 1950

2. И.Г. Лебо, В.Ф. Тишкин. Исследование гидродинамической неустойчивости в задачах лазерного термоядерного синтеза. М., ФИЗМАТЛИТ, 2006

The modeling of hydrodynamic instability at the layer boundaries.

I.G. Lebo

Abstract. The results of simulations of hydrodynamic instability development at the contact boundaries of plane and spherical layers for the different acceleration regimes have been presented