Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»



На правах рукописи

Кайда Анатолий Сергеевич

Разработка интеллктуальной системы анализа патентов химической отрасли для представления данных в структурированном виде

Специальность 01.04.02 — «Прикладная математика и информатика»

Магистерская диисертация

Научный руководитель: уч. степень, уч. звание Глинский Андрей Владимирович

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Обзор современных больших языковых моделей	7
1.1 Устройство больших языковых моделей	7
1.2 Применение больших языковых моделей в химии	7
1.3 Агенты на основе больших языковых моделей и их применение в	
современной химии	7
Глава 2. Длинное название главы, в которой мы смотрим	
на примеры того, как будут верстаться изображения	
и списки	8
2.1 Одиночное изображение	8
2.2 Длинное название параграфа, в котором мы узнаём как сделать	
две картинки с общим номером и названием	8
2.3 Векторная графика	8
2.4 Пример вёрстки списков	8
Глава 3. Вёрстка таблиц	9
3.1 Таблица обыкновенная	9
Заключение	10
Словарь терминов	11
Список литературы	12
Список рисунков	13
Список таблиц	14
Приложение А. Примеры вставки листингов программного кода	15

		Стр.
Прило	жение Б. Очень длинное название второго приложения,	
	в котором продемонстрирована работа	
	с длинными таблицами	21
Б.1	Подраздел приложения	21
Б.2	Ещё один подраздел приложения	23
Б.3	Использование длинных таблиц с окружением $longtblr$ из пакета	
	tabularray	27
Б.4	Форматирование внутри таблиц	30
Б.5	Стандартные префиксы ссылок	32
Б.6	Очередной подраздел приложения	33
Б.7	И ещё один подраздел приложения	33
Прило	жение В. Чертёж детали	34

Введение

Интеграция современных цифровых технологий в химию в настоящее время активно обсуждается в литературе. Так, академик Анаников выделил двадцать наиболее перспективных областей применения различных цифровых технологий в химии, которые затрагивают все аспекты работы современного исследователя в области химии: поиск и анализ данных, проведение эксперимента, предсказание новых материалов и т.д. [1]. Ожидается, что цифровизация должна вывести химическую науку на "новую ступень эволюции". В частности, Нобелевская премия по химии в 2024 году была присуждена Демису Хассабису и Джону Джамперу — авторам модели для предсказания структуры белков AlphaFold2 на основе последовательности нуклеотидов. [2]. Данный факт подчеркивает чрезвычайную важность применения технологий на основе искусственного интеллекта (ИИ) в современных естественных науках.

Поиск и анализ литературы является одной отправной точкой в любой исследовательском проекте. Однако, в последние годы наблюдается экспоненциальный рост количества публикаций [3], что делает классический (во многом ручной) подход к работе с научной литературой, не смотря на существование различных поисковиков и баз данных неэффективным. Однако, быстрое развитие Больших Языковых Моделей (БЯМ) открывает возможность в создании систем, способных значительно ускорить работу с большим объемом литературных данных. Одним из недавних примеров систем, способных отвечать на запрос в текстовой виде может служить «РарегQА» [4].

Целью данной работы является разработка инструмента на основе БЯМ, способного извлекать структурированную информацию по текстовому запросу из патентной информации описывающей синтез катализаторов Циглера-Натта

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- 1. Изучить существующие современные подходы к решению данной задачи.
- 2. Провести сравнение избранных подходов для решения задачи извлечения структурированной информации
- 3. Провести экспериментальные работы и сравнить данный результат

Научная новизна:

- 1. Впервые . . .
- 2. Впервые . . .
- 3. Было выполнено оригинальное исследование ...

Практическая значимость ...

Методология и методы исследования. ...

Основные положения, выносимые на защиту:

- 1. Первое положение
- 2. Второе положение
- 3. Третье положение
- 4. Четвертое положение

Достоверность полученных результатов обеспечивается . . . Результаты находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на: перечисление основных конференций, симпозиумов и т. п.

Личный вклад. Автор принимал активное участие ...

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 18 печатных изданиях, 12 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 5-в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 4-в тезисах докладов. Зарегистрированы 1 патент и 1 программа для ЭВМ.

При использовании пакета biblatex будут подсчитаны все работы, добавленные в файл biblio/author.bib. Для правильного подсчёта работ в различных системах цитирования требуется использовать поля:

- authorvak если публикация индексирована BAK,
- authorscopus если публикация индексирована Scopus,
- authorwos если публикация индексирована Web of Science,
- authorconf для докладов конференций,
- authorpatent для патентов,
- authorprogram для зарегистрированных программ для ЭВМ,
- authorother для других публикаций.

Для подсчёта используются счётчики:

- citeauthorvak для работ, индексируемых BAK,
- citeauthorscopus для работ, индексируемых Scopus,
- citeauthorwos для работ, индексируемых Web of Science,

- citeauthorvakscopuswos для работ, индексируемых одной из трёх баз,
- citeauthorscopuswos для работ, индексируемых Scopus или Web of Science,
- citeauthorconf для докладов на конференциях,
- citeauthorother для остальных работ,
- citeauthorpatent для патентов,
- citeauthorprogram для зарегистрированных программ для ЭВМ,
- citeauthor для суммарного количества работ.

Для добавления в список публикаций автора работ, которые не были процитированы в автореферате, требуется их перечислить с использованием команды \nocite в Synopsis/content.tex.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и 3 приложений. Полный объём диссертации составляет 34 страницы, включая 0 рисунков и 4 таблицы. Список литературы содержит 4 наименования.

- Глава 1. Обзор современных больших языковых моделей
 - 1.1 Устройство больших языковых моделей
 - 1.2 Применение больших языковых моделей в химии
- 1.3 Агенты на основе больших языковых моделей и их применение в современной химии

Глава 2. Длинное название главы, в которой мы смотрим на примеры того, как будут верстаться изображения и списки

- 2.1 Одиночное изображение
- 2.2 Длинное название параграфа, в котором мы узнаём как сделать две картинки с общим номером и названием
 - 2.3 Векторная графика
 - 2.4 Пример вёрстки списков

Глава 3. Вёрстка таблиц

3.1 Таблица обыкновенная

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

- 1. На основе анализа . . .
- 2. Численные исследования показали, что ...
- 3. Математическое моделирование показало ...
- 4. Для выполнения поставленных задач был создан ...

И какая-нибудь заключающая фраза.

Последний параграф может включать благодарности. В заключение автор выражает благодарность и большую признательность научному руководителю Иванову И.И. за поддержку, помощь, обсуждение результатов и научное руководство. Также автор благодарит Сидорова А.А. и Петрова Б.Б. за помощь в работе с образцами, Рабиновича В.В. за предоставленные образцы и обсуждение результатов, Занудятину Г.Г. и авторов шаблона *Russian-Phd-LaTeX-Dissertation-Template* за помощь в оформлении диссертации. Автор также благодарит много разных людей и всех, кто сделал настоящую работу автора возможной.

Словарь терминов

 ${f TeX}$: Система компьютерной вёрстки, разработанная американским профессором информатики Дональдом Кнутом

панграмма : Короткий текст, использующий все или почти все буквы алфавита

Список литературы

- 1. Ananikov, V. Top 20 Influential AI-Based Technologies in Chemistry [Teκcτ] / V. Ananikov. 04/12/2024. URL: https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/66176d4391aefa6ce150c0d6 (visited on 10/20/2024).
- 2. The Nobel Prize in Chemistry 2024 [Tekct]: NobelPrize.org. URL: https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/press-release/ (visited on 10/20/2024).
- 3. Fire, M. Over-Optimization of Academic Publishing Metrics: Observing Goodhart's Law in Action [Tekct] / M. Fire, C. Guestrin. 06/2019. (Visited on 10/26/2024).
- 4. PaperQA: Retrieval-Augmented Generative Agent for Scientific Research [Текст] / J. Lála [et al.]. 12/2023. arXiv: 2312.07559 [cs]. (Visited on 10/26/2024).

Список рисунков

Список таблиц

1	Наименование таблицы средней длины	23
2	Тестовые функции для оптимизации, D —размерность. Для всех	
	функций значение в точке глобального минимума равно нулю	28
3	Длинная таблица с примером чересстрочного форматирования	31
4	Стандартные префиксы ссылок	33

Приложение А

Примеры вставки листингов программного кода

Для крупных листингов есть два способа. Первый красивый, но в нём могут быть проблемы с поддержкой кириллицы (у вас может встречаться в комментариях и печатаемых сообщениях), он представлен на листинге A.1. Второй

Листинг А.1 Программа "Hello, world" на C++

```
#include <iostream>
using namespace std;

int main() //кириллица в комментариях при xelatex и lualatex и меет проблемы с пробелами

{
    cout << "Hello, world" << endl; //latin letters in commentaries
    system("pause");
    return 0;
}
```

не такой красивый, но без ограничений (см. листинг А.2).

Листинг А.2 Программа "Hello, world" без подсветки

```
#include <iostream>
using namespace std;

int main() //кириллица в комментариях
{
    cout << "Привет, мир" << endl;
}</pre>
```

Можно использовать первый для вставки небольших фрагментов внутри текста, а второй для вставки полного кода в приложении, если таковое имеется.

Если нужно вставить совсем короткий пример кода (одна или две строки), то выделение линейками и нумерация может смотреться чересчур громоздко.

В таких случаях можно использовать окружения lstlisting или Verb без ListingEnv. Приведём такой пример с указанием языка программирования, отличного от заданного по умолчанию:

```
fibs = 0 : 1 : zipWith (+) fibs (tail fibs)
```

Такое решение—со вставкой нумерованных листингов покрупнее и вставок без выделения для маленьких фрагментов—выбрано, например, в книге Эндрю Таненбаума и Тодда Остина по архитектуре компьютера.

Наконец, для оформления идентификаторов внутри строк (функция main и тому подобное) используется lstinline или, самое простое, моноширинный текст (\texttt).

Пример A.3, иллюстрирующий подключение переопределённого языка. Может быть полезным, если подсветка кода работает криво. Без дополнительного окружения, с подписью и ссылкой, реализованной встроенным средством.

Листинг А.3 Пример листинга с подписью собственными средствами

```
## Caching the Inverse of a Matrix
  ## Matrix inversion is usually a costly computation and there
     may be some
  ## benefit to caching the inverse of a matrix rather than
     compute it repeatedly
5 ## This is a pair of functions that cache the inverse of a
     matrix.
  ## makeCacheMatrix creates a special "matrix" object that can
     cache its inverse
  makeCacheMatrix <- function(x = matrix()) {#кириллица в коммента
     риях при xelatex и lualatex имеет проблемы с пробелами
10
      i <- NULL
      set <- function(y) {</pre>
          x <<- y
          i <<- NULL
      }
15
      get <- function() x</pre>
      setSolved <- function(solve) i <<- solve</pre>
      getSolved <- function() i</pre>
      list(set = set, get = get,
      setSolved = setSolved,
20
      getSolved = getSolved)
```

```
}
25 ## cacheSolve computes the inverse of the special "matrix"
     returned by
  ## makeCacheMatrix above. If the inverse has already been
     calculated (and the
  ## matrix has not changed), then the cachesolve should retrieve
     the inverse from
  ## the cache.
30 cacheSolve <- function(x, ...) {
       ## Return a matrix that is the inverse of 'x'
      i <- x$getSolved()</pre>
      if(!is.null(i)) {
           message("getting cached data")
35
           return(i)
      }
      data <- x$get()</pre>
      i <- solve(data, ...)</pre>
      x$setSolved(i)
      i
40
  }
```

Листинг A.4 подгружается из внешнего файла. Приходится загружать без окружения дополнительного. Иначе по страницам не переносится.

Листинг А.4 Листинг из внешнего файла

```
# Analysis of data on Course Project at Getting and Cleaning
    data course of Data Science track at Coursera.

# Part 1. Merges the training and the test sets to create one
    data set.

# 3. Uses descriptive activity names to name the activities in
    the data set

# 4. Appropriately labels the data set with descriptive variable
    names.

if (!file.exists("UCI HAR Dataset")) {
    stop("You need 'UCI HAR Dataset' folder full of data")
}
```

```
library(plyr) # for mapualues
15 #getting common data
  features <- read.csv("UCI HAR Dataset/features.txt",sep=" ",</pre>
     header = FALSE,
                         colClasses = c("numeric", "character"))
  activity_labels <- read.csv("UCI HAR Dataset/activity_labels.txt
     ",sep="",
                                header = FALSE, colClasses = c("
     numeric", "character"))
20
  #getting train set data
  subject_train <- read.csv("UCI HAR Dataset/train/subject_train.</pre>
     txt",
                              header = FALSE, colClasses = "numeric",
     col.names="Subject")
  y_train <- read.csv("UCI HAR Dataset/train/y_train.txt", header</pre>
     = FALSE,
25
                        colClasses = "numeric")
  x_train <- read.csv("UCI HAR Dataset/train/X_train.txt",sep="",</pre>
     header = FALSE,
                        colClasses = "numeric",col.names=features$V2
     , check.names = FALSE)
  activity_train <- as.data.frame(mapvalues(y_train$V1, from =
     activity_labels$V1,
30
                                               to = activity_labels$
     V2))
  names(activity_train) <- "Activity"</pre>
35 #getting test set data
  subject_test <- read.csv("UCI HAR Dataset/test/subject_test.txt"</pre>
                             header = FALSE, colClasses = "numeric",
     col.names="Subject")
  y_test <- read.csv("UCI HAR Dataset/test/y_test.txt", header =</pre>
     FALSE,
                      colClasses = "numeric")
40 x_test <- read.csv("UCI HAR Dataset/test/X_test.txt",sep="",
     header = FALSE,
```

```
colClasses = "numeric", col.names=features$V2,
     check.names = FALSE)
  activity_test <- as.data.frame(mapvalues(y_test$V1, from =</pre>
     activity_labels$V1,
                                             to = activity_labels$V2
     ))
45 names (activity_test) <- "Activity"
  # Forming full dataframe
  data_train <- cbind(x_train, subject_train, activity_train)</pre>
50 data_test <- cbind(x_test, subject_test, activity_test)
  data <- rbind(data_train, data_test)</pre>
  # Cleaning memory
  rm(features, activity_labels, subject_train, y_train, x_train,
     activity_train,
     subject_test, y_test, x_test, activity_test, data_train, data
     _test)
  # Part 2. Extracts only the measurements on the mean and
     standard deviation for each measurement.
60 cols2match <- grep("(mean|std)",names(data))
  \# Excluded gravityMean, tBodyAccMean, tBodyAccJerkMean,
     tBodyGyroMean,
  # tBodyGyroJerkMean, as these represent derivations of angle
  # opposed to the original feature vector.
  # Subsetting data frame, also moving last columns to be first
  Subsetted_data_frame <- data[ ,c(562, 563, cols2match)]</pre>
  # Part 5. From the data set in step 4, creates a second,
     independent tidy data set
70| # with the average of each variable for each activity and each
     subject.
  library(dplyr) # for %>% and summarise_each
```

Приложение Б

Очень длинное название второго приложения, в котором продемонстрирована работа с длинными таблицами

Б.1 Подраздел приложения

Вот размещается длинная таблица:

Параметр	Умолч.	Тип	Описание
&INP			
kick	1	int	 0: инициализация без шума (p_s = const) 1: генерация белого шума 2: генерация белого шума симметрично относительно экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума ($p_s = const$) 1: генерация белого шума 2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
mana	0	int	экватора
mars kick	0 1	int int	1: инициализация модели для планеты Марс 0: инициализация без шума $(p_s = const)$ 1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$ 1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$ 1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$ 1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
	1	1	продолжение следует

П	37	m	(продолжение)
Параметр	Умолч.	Тип	Описание
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
	0	. ,	экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	$_{ m int}$	0: инициализация без шума $(p_s = const)$ 1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
111011	_	1110	1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	$_{ m int}$	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	$_{ m int}$	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума 2: генерация белого шума симметрично относительно
			2: генерация оелого шума симметрично относительно экватора
mars	0	int	зкватора 1: инициализация модели для планеты Марс
&SURFPAI		1110	1. инициализация модели для плансты марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
KICK	1	1110	1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
	_		экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			продолжение следует

	(продолжение)			
Параметр	Умолч.	Тип	Описание	
			2: генерация белого шума симметрично относительно	
			экватора	
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс	
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$	
			1: генерация белого шума	
			2: генерация белого шума симметрично относительно	
			экватора	
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс	
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$	
			1: генерация белого шума	
			2: генерация белого шума симметрично относительно	
			экватора	
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс	
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$	
			1: генерация белого шума	
			2: генерация белого шума симметрично относительно	
			экватора	
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс	
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$	
			1: генерация белого шума	
			2: генерация белого шума симметрично относительно	
			экватора	
mars	0	$_{ m int}$	1: инициализация модели для планеты Марс	

Б.2 Ещё один подраздел приложения

Нужно больше подразделов приложения! Конвынёры витюпырата но нам, тебиквюэ мэнтётюм позтюлант ед про. Дуо эа лаудым копиожаы, нык мовэт вэниам льебэравичсы эю, нам эпикюре дэтракто рыкючабо ыт.

Пример длинной таблицы с записью продолжения по ГОСТ 2.105:

Таблица 1 — Наименование таблицы средней длины

Параметр	Умолч.	Тип	Описание
&INP			
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора

Продолжение таблицы 1

Параметр	Умолч.	Тип	Описание
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно

Продолжение таблицы 1

одолжение			
Параметр	Умолч.	Тип	Описание
			экватора
mars	0	\mid int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	\mid int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
&SURFPA	R		
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	\inf	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0 : инициализация без шума $(p_s=const)$

Продолжение таблицы 1

Параметр	Умолч.	Тип	Описание
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс
kick	1	int	0: инициализация без шума $(p_s = const)$
			1: генерация белого шума
			2: генерация белого шума симметрично относительно
			экватора
mars	0	int	1: инициализация модели для планеты Марс

Б.3 Использование длинных таблиц с окружением longtblr из пакета tabularray

В таблице 2 более книжный вариант длинной таблицы, используя окружение longtblr из пакета tabularray и разнообразные разделители (toprule, midrule, bottomrule) из пакета booktabs.

Чтобы визуально таблица смотрелась лучше, можно использовать следующие параметры. Таблица задаётся на всю ширину, longtblr позволяет делить ширину колонок пропорционально — тут три колонки в пропорции 1.1:1.1:4 — для каждой колонки первый параметр в описании X[]. Кроме того, в таблице убраны отступы слева и справа с помощью Q{} в преамбуле таблицы. К первому и второму столбцу применяется модификатор

>{\setlength{\baselineskip}{0.7\baselineskip}}, который уменьшает межстрочный интервал для текста таблиц (иначе заголовок второго столбца значительно шире, а двухстрочное имя сливается с окружающими). Для первой и второй колонки текст в ячейках выравниваются по центру как по вертикали, так и по горизонтали—задаётся буквами m и c в описании столбца X[].

Так как формулы большие — используется окружение alignedat, чтобы отступ был одинаковый у всех формул — он сделан для всех, хотя для большей части можно было и не использовать. Чтобы формулы занимали поменьше места в каждом столбце формулы (где надо) используется \textstyle — он делает дроби меньше, у знаков суммы и произведения — индексы сбоку. Иногда формула слишком большая, сливается со следующей, поэтому после неё ставится небольшой дополнительный отступ \vspace*{2ex}. Для штрафных функций — размер фигурных скобок задан вручную \Big\{, т. к. не умеет alignedat работать с \left и \right через несколько строк/колонок.

В примечании к таблице наоборот, окружение cases даёт слишком большие промежутки между вариантами, чтобы их уменьшить, в конце каждой строчки окружения использовался отрицательный дополнительный отступ \\[-0.5em].

Таблица 2 — Тестовые функции для оптимизации, D — размерность. Для всех функций значение в точке глобального минимума равно нулю.

Имя	Стартовый диапазон параметров	Функция
сфера	$[-100, 100]^D$	$f_1(x) = \sum_{i=1}^{D} x_i^2$
Schwefel 2.22	$[-10, 10]^D$	$f_2(x) = \sum_{i=1}^{D} x_i + \prod_{i=1}^{D} x_i $
Schwefel 1.2	$[-100, 100]^D$	$f_3(x) = \sum_{i=1}^{D} \left(\sum_{j=1}^{i} x_j\right)^2$
Schwefel 2.21	$[-100, 100]^D$	$f_4(x) = \max_i \{ x_i \}$
Rosenbrock	$[-30,30]^D$	$f_5(x) = \sum_{i=1}^{D-1} \left[100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right]$
ступенчатая	$[-100, 100]^D$	$f_6(x) = \sum_{i=1}^{D} [x_i + 0.5]^2$
зашумлённая квартическая	$[-1.28, 1.28]^D$	$f_7(x) = \sum_{i=1}^{D} ix_i^4 + rand[0,1)$
Schwefel 2.26	$[-500, 500]^D$	$f_8(x) = \sum_{i=1}^{D} -x_i \sin \sqrt{ x_i } + D \cdot 418.98288727243369$
Rastrigin	$[-5.12, 5.12]^D$	$f_9(x) = \sum_{i=1}^{D} \left[x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) + 10 \right]$
Ackley	$[-32, 32]^D$	$f_{10}(x) = -20 \exp\left(-0.2\sqrt{\frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D} x_i^2}\right) - \exp\left(\frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D} \cos(2\pi x_i)\right) + 20 + e$
Griewank	$[-600, 600]^D$	$f_{11}(x) = \frac{1}{4000} \sum_{i=1}^{D} x_i^2 - \prod_{i=1}^{D} \cos(x_i/\sqrt{i}) + 1$
штрафная 1	$[-50, 50]^D$	$f_{12}(x) = \frac{\pi}{D} \left\{ 10 \sin^2(\pi y_1) + \sum_{i=1}^{D-1} (y_i - 1)^2 \left[1 + 10 \sin^2(\pi y_{i+1}) \right] + (y_D - 1)^2 \right\} + \sum_{i=1}^{D} u(x_i, 10, 100, 4)$

(продолжение)

Имя	Стартовый диапазон параметров	Функция
штрафная 2	$[-50, 50]^D$	$f_{13}(x) = 0.1 \left\{ \sin^2(3\pi x_1) + \sum_{i=1}^{D-1} (x_i - 1)^2 \left[1 + \sin^2(3\pi x_{i+1}) \right] + (x_D - 1)^2 \left[1 + \sin^2(2\pi x_D) \right] \right\} + \sum_{i=1}^{D} u(x_i, 5, 100, 4)$
сфера	$[-100, 100]^D$	$f_1(x) = \sum_{i=1}^{D} x_i^2$
Schwefel 2.22	$[-10, 10]^D$	$f_2(x) = \sum_{i=1}^{D} x_i + \prod_{i=1}^{D} x_i $
Schwefel 1.2	$[-100, 100]^D$	$f_3(x) = \sum_{i=1}^{D} \left(\sum_{j=1}^{i} x_j \right)^2$
Schwefel 2.21	$[-100, 100]^D$	$f_4(x) = \max_i\{ x_i \}$
Rosenbrock	$[-30,30]^D$	$f_5(x) = \sum_{i=1}^{D-1} \left[100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right]$
ступенчатая	$[-100, 100]^D$	$f_6(x) = \sum_{i=1}^{D} \left[x_i + 0.5 \right]^2$
зашумлённая квартическая	$[-1.28, 1.28]^D$	$f_7(x) = \sum_{i=1}^{D} ix_i^4 + rand[0,1)$
Schwefel 2.26	$[-500, 500]^D$	$f_8(x) = \sum_{i=1}^{D} -x_i \sin \sqrt{ x_i } + D \cdot 418.98288727243369$
Rastrigin	$[-5.12, 5.12]^D$	$f_9(x) = \sum_{i=1}^{D} [x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) + 10]$
Ackley	$[-32, 32]^D$	$f_{10}(x) = -20 \exp\left(-0.2\sqrt{\frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D} x_i^2}\right) - \exp\left(\frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D} \cos(2\pi x_i)\right) + 20 + e$
Griewank	$[-600, 600]^D$	$f_{11}(x) = \frac{1}{4000} \sum_{i=1}^{D} x_i^2 - \prod_{i=1}^{D} \cos(x_i/\sqrt{i}) + 1$

(окончание)

Имя	Стартовый диапазон параметров	Функция	
штрафная 1	$[-50, 50]^D$	$f_{12}(x) = \frac{\pi}{D} \left\{ 10 \sin^2(\pi y_1) + \sum_{i=1}^{D-1} (y_i - 1)^2 \left[1 + 10 \sin^2(\pi y_{i+1}) \right] + (y_D - 1)^2 \right\} + \sum_{i=1}^{D} u(x_i, 10, 100, 4)$	
штрафная 2	$[-50, 50]^D$	$f_{13}(x) = 0.1 \left\{ \sin^2(3\pi x_1) + \sum_{i=1}^{D-1} (x_i - 1)^2 \left[1 + \sin^2(3\pi x_{i+1}) \right] + (x_D - 1)^2 \left[1 + \sin^2(2\pi x_D) \right] \right\} + \sum_{i=1}^{D} u(x_i, 5, 100, 4)$	
Примечание — Лля функций f_{12} и f_{12} используется $u_i = 1 + \frac{1}{2}(r_i + 1)$			

Примечание — Для функций
$$f_{12}$$
 и f_{13} используется $y_i=1+\frac{1}{4}(x_i+1)$ и $u(x_i,a,k,m)= \begin{cases} k(x_i-a)^m, & x_i>a\\ 0, & -a\leqslant x_i\leqslant a\\ k(-x_i-a)^m, & x_i<-a \end{cases}$

Б.4 Форматирование внутри таблиц

В таблице 3 пример с чересстрочным форматированием. Это реализовано средствами, доступными в таблицах пакета tabularray.

В таблице 3 каждая чётная строчка (заголовок таблицы тоже считается за строчку) — синяя, нечётная — с наклоном и слегка поднята вверх. Визуально это приводит к тому, что среднее значение и среднеквадратичное изменение группируются и хорошо выделяются взглядом в таблице. Сохраняется возможность отдельные значения в таблице выделить цветом или шрифтом. К первому и второму столбцу форматирование не применяется по сути таблицы, к шестому общее форматирование не применяется для наглядности.

Таблица 3 — Длинная таблица с примером чересстрочного форматирования

	Итера-	JADE++	JADE	jDE	SaDE	DE/rand	PSO
	ции	·	V	v	2022	/1/bin	_ ,5 0
f1	1500	1.8E-60	1.3E-54	2.5E-28	4.5E-20	9.8E-14	9.6E-42
		(8.4E-60)	(9.2E-54)	(3.5E-28)	(6.9E-20)	(8.4E-14)	(2.7E-41)
f2	2000	1.8E-25	3.9E-22	1.5E-23	1.9E-14	1.6E-09	9.3E-21
		(8.8E-25)	(2.7E-21)	(1.0E-23)	(1.1E-14)	(1.1E-09)	(6.3E-20)
f3	5000	5.7E-61	6.0E-87	5.2E-14	9.0E-37	6.6E-11	2.5E-19
		(2.7E-60)	(1.9E-86)	(1.1E-13)	(5.4E-36)	(8.8E-11)	(3.9E-19)
f4	5000	8.2E-24	4.3E-66	1.4E-15	7.4E-11	4.2E-01	4.4E-14
		(4.0E-23)	(1.2E-65)	(1.0E-15)	(1.8E-10)	(1.1E+00)	(9.3E-14)
f5	3000	8.0E-02	3.2E-01	1.3E + 01	$2.1\mathrm{E}{+01}$	2.1E+00	2.5E + 01
		(5.6E-01)	(1.1E+00)	(1.4E+01)	(7.8E+00)	(1.5E+00)	(3.2E+01)
f6	100	2.9E + 00	5.6E + 00	1.0E + 03	9.3E + 02	4.7E + 03	4.5E + 01
		(1.2E+00)	(1.6E+00)	(2.2E+02)	(1.8E+02)	(1.1E+03)	(2.4E+01)
f7	3000	6.4E-04	6.8E-04	3.3E-03	4.8E-03	4.7E-03	2.5E-03
		(2.5E-04)	(2.5E-04)	(8.5E-04)	(1.2E-03)	(1.2E-03)	(1.4E-03)
f8	1000	3.3E-05	7.1E + 00	7.9E-11	$4.7\mathrm{E}{+00}$	5.9E + 03	2.4E + 03
		(2.3E-05)	(2.8E+01)	(1.3E-10)	(3.3E+01)	(1.1E+03)	(6.7E+02)
f9	1000	1.0E-04	1.4E-04	1.5E-04	1.2E-03	1.8E + 02	5.2E + 01
		(6.0E-05)	(6.5E-05)	(2.0E-04)	(6.5E-04)	(1.3E+01)	(1.6E+01)
f10	500	8.2E-10	3.0E-09	3.5E-04	2.7E-03	1.1E-01	4.6E-01
		(6.9E-10)	(2.2E-09)	(1.0E-04)	(5.1E-04)	(3.9E-02)	(6.6E-01)
f11	500	9.9E-08	2.0E-04	1.9E-05	7.8E-04	2.0E-01	1.3E-02
		(6.0E-07)	(1.4E-03)	(5.8E-05)	(1.2E-03)	(1.1E-01)	(1.7E-02)
f12	500	4.6E-17	3.8E-16	1.6E-07	1.9E-05	1.2E-02	1.9E-01
		(1.9E-16)	(8.3E-16)	(1.5E-07)	(9.2E-06)	(1.0E-02)	(3.9E-01)
f13	500	2.0E-16	1.2E-15	1.5E-06	6.1E-05	7.5E-02	2.9E-03
		(6.5E-16)	(2.8E-15)	(9.8E-07)	(2.0E-05)	(3.8E-02)	(4.8E-03)
f1	1500	1.8E-60	1.3E-54	2.5E-28	4.5E-20	9.8E-14	9.6E-42
		(8.4E-60)	(9.2E-54)	(3.5E-28)	(6.9E-20)	(8.4E-14)	(2.7E-41)
f2	2000	1.8E-25	3.9E-22	1.5E-23	1.9E-14	1.6E-09	9.3E-21
		(8.8E-25)	(2.7E-21)	(1.0E-23)	(1.1E-14)	(1.1E-09)	(6.3E-20)

продолжение следует

(окончание)

	Итера-	JADE++	JADE	jDE	SaDE	DE/rand	PSO
	ции	JADE au au	JADE	JDL	SaDE	/1/bin	150
f3	5000	5.7E-61	6.0E-87	5.2E-14	9.0E-37	6.6E-11	2.5E-19
		(2.7E-60)	(1.9E-86)	(1.1E-13)	(5.4E-36)	(8.8E-11)	(3.9E-19)
f4	5000	8.2E-24	4.3E-66	1.4E-15	7.4E-11	4.2E-01	4.4E-14
		(4.0E-23)	(1.2E-65)	(1.0E-15)	(1.8E-10)	(1.1E+00)	(9.3E-14)
f5	3000	8.0E-02	3.2E-01	1.3E + 01	2.1E + 01	2.1E + 00	2.5E + 01
		(5.6E-01)	(1.1E+00)	(1.4E+01)	(7.8E+00)	(1.5E+00)	(3.2E+01)
f6	100	2.9E + 00	5.6E + 00	1.0E + 03	9.3E + 02	4.7E + 03	4.5E + 01
		(1.2E+00)	(1.6E+00)	(2.2E+02)	(1.8E+02)	(1.1E+03)	(2.4E+01)
f7	3000	6.4E-04	6.8E-04	3.3E-03	4.8E-03	4.7E-03	2.5E-03
		(2.5E-04)	(2.5E-04)	(8.5E-04)	(1.2E-03)	(1.2E-03)	(1.4E-03)
f8	1000	3.3E-05	7.1E + 00	7.9E-11	$4.7\mathrm{E}{+00}$	5.9E + 03	2.4E + 03
		(2.3E-05)	(2.8E+01)	(1.3E-10)	(3.3E+01)	(1.1E+03)	(6.7E+02)
f9	1000	1.0E-04	1.4E-04	1.5E-04	1.2E-03	1.8E + 02	5.2E + 01
		(6.0E-05)	(6.5E-05)	(2.0E-04)	(6.5E-04)	$\big(1.3E + 01\big)$	(1.6E+01)
f10	500	8.2E-10	3.0E-09	3.5E-04	2.7E-03	1.1E-01	4.6E-01
		(6.9E-10)	(2.2E-09)	(1.0E-04)	(5.1E-04)	(3.9E-02)	(6.6E-01)
f11	500	9.9E-08	2.0E-04	1.9E-05	7.8E-04	2.0E-01	1.3E-02
		(6.0E-07)	(1.4E-03)	(5.8E-05)	(1.2E-03)	(1.1E-01)	(1.7E-02)
f12	500	4.6E-17	3.8E-16	1.6E-07	1.9E-05	1.2E-02	1.9E-01
		(1.9E-16)	(8.3E-16)	(1.5E-07)	(9.2E-06)	(1.0E-02)	(3.9E-01)
f13	500	2.0E-16	1.2E-15	1.5E-06	6.1E-05	7.5E-02	2.9E-03
		(6.5E-16)	(2.8E-15)	(9.8E-07)	(2.0E-05)	(3.8E-02)	(4.8E-03)

Б.5 Стандартные префиксы ссылок

Общепринятым является следующий формат ссылок: <prefix>:<label>. Например, \label{fig:knuth}; \ref{tab:test1}; label={lst:external1}. В таблице 4 приведены стандартные префиксы для различных типов ссылок.

Таблица 4 — Стандартные префиксы ссылок

Префикс	Описание
ch:	Глава
sec:	Секция
subsec:	Подсекция
fig:	Рисунок
tab:	Таблица
eq:	Уравнение
lst:	Листинг программы
itm:	Элемент списка
alg:	Алгоритм
app:	Секция приложения

Для упорядочивания ссылок можно использовать разделительные символы. Haпример, \label{fig:scheemes/my_scheeme} или \label{lst:dts/linked_list}.

Б.6 Очередной подраздел приложения

Нужно больше подразделов приложения!

Б.7 И ещё один подраздел приложения

Нужно больше подразделов приложения!



Копировал

Формат А4