

ТРУДЫ МФТИ

Труды Московского физико-технического института (национального исследовательского университета)

Том 16, № 3 (63) 2024 год

Содержание

Информатика и управление	5
Математика	5
<i>Бишук А. Ю., Зухба А. В.</i> Метод порождения графов с контролем статистических свойств	5
<i>Буитраго Оропеса Х. К.</i> Максимальные индуцированные пути в случайных двудольных графах	17
<i>Бусовиков В. М.</i> Аппроксимация диффузионного процесса на бесконечномерном пространстве при помощи усреднения случайных сдвигов общего вида	24
<i>Зелезецкий Д. В.</i> Глубокое обучение в задаче прогнозирования финансовых временных рядов	35
<i>Ибрагимов Б. Л., Гусев Г. Г.</i> Оптимизация стохастического градиентного бустинга с помощью out-of-sample оценок качества	49
<i>Слюсарев В. В.</i> Почти достоверная модальная логика шкал Кripке с функциональным отношением	57
<i>Ченцов А. М., Торопов Н. И.</i> Применение подхода двойного машинного обучения для задачи анализа зависимости между отклонениями от непокрытого паритета процентных ставок и степенью открытости экономики	72
<i>Шабанов Д. А., Шайхеева Т. М.</i> Оценки пороговых вероятностей для свойств дробной раскрашиваемости случайных гиперграфов	81
Механика	92
<i>Брутян М. А., Ибрагимов У. Г.</i> Точное решение уравнений Навье – Стокса, описывающее закрученные торнадообразные течения вязкого газа	92
<i>Илюшин П. А., Наумченко В. П., Пикунов Д. Г.</i> Анализ системы амортизации инерциального прибора как решение задачи многокритериальной оптимизации	105
Физика	118
<i>Сарман Р. А.</i> <i>Ab initio</i> исследование разогретого плотного аргона	118

<i>Хамдохов З. М., Маргушев З. Ч. Особенности структуры композитных пленок Си–С, полученных ионно-плазменным методом</i>	127
<i>Хамдохов З. М., Маргушев З. Ч., Калажсоков З. Х., Ильичев Э. А., Ромашкин А. В. Ионно-плазменный метод модификации слоя на основе поликристаллической алмазной пленки</i>	133
<i>Эпов И. В., Резник А. Ю., Соболев А. С. Метод измерения частоты максималь- ного согласования радиочастотной метки с помощью векторного анализатора цепей и разработанных калибровочных и измерительных плат</i>	140
Сведения об авторах статей	148
Ссылки на опубликованные статьи	150

PROCEEDINGS OF MIPT

Proceedings of Moscow Institute of Physics and Technology

Volume 16, N 3 (63) 2024

Contents

Computer science and management	5
Mathematics	5
<i>Bishuk A. Y., Zukhba A. V.</i> Method for generating graphs with control of statistical properties	5
<i>Buitrago Oropeza J. C.</i> Maximum induced paths in random bipartite graphs	17
<i>Busovikov V. M.</i> Approximation of a diffusion process on an infinite-dimensional space using averaging of random shifts of general form	24
<i>Zelezetsky D. V.</i> Deep learning in financial time series forecasting	35
<i>Ibragimov B. L., Gusev G. G.</i> Optimizing stochastic gradient boosting with out-of-sample evaluation metrics	49
<i>Slusarev V. V.</i> Almost sure modal logic of Kripke frames with a functional relation	57
<i>Chentsov A. M., Toropov N. I.</i> Estimation of causal dependence between economic openness and deviations from uncovered interest parity using double machine learning ..	72
<i>Shabanov D. A., Shaikheeva T. M.</i> Bounds for probability thresholds for fractional colorability properties of random hypergraphs	81
Mechanics	92
<i>M.A. Brutyany, U.G. Ibragimov</i> Exact solution of the Navier – Stokes equations for rotational tornado-like flow of a viscous gas	92
<i>Ilushin P. A., Naumchenko V. P., Pikunov D. G.</i> Inertial measurement unit amortization system analysis as a solution to the multi-criteria optimization problem	105
Physics	118
<i>Sartan R. A.</i> <i>Ab initio</i> study of warm dense argon	118
<i>Khamdokhov Z. M., Margushev Z. Ch.</i> Features of the structure of Cu–C composite films obtained by the ion-plasma method	127

<i>Khamdokhov Z. M., Margushev Z. Ch., Kalazhokov Z. Kh., Plyichev E. A., Romashkin A. V. Ion-plasma layer modification method based on polycrystalline diamond film</i>	133
<i>Epov I. V., Reznik A. Yu., Sobolev A. S. Method for measuring the resonant frequency of an RFID tag using a vector network analyzer and developed calibration and measuring boards</i>	140
Authors' Background Information	148
References to the Published	150

УДК 519.25, 519.7

A. Ю. Бишу́к, A. В. Зухба

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Метод порождения графов с контролем статистических свойств

В работе предлагается метод условного порождения графов, учитывающий статистические характеристики графов. Данные характеристики разделяются на две группы. Первая группа, называемая *простыми статистиками*, может быть вычислена эффективными детерминированными алгоритмами со сложностью не более квадратичной от числа вершин. Такое разделение диктуется дорогоизной использования вычислительно сложных алгоритмов на графах, по размеру приближенных к реальным. Вторая группа характеристик порождается в скрытом пространстве и отвечает за закономерности графа, которые невозможно описать «простыми статистиками». Этот подход позволяет порождать графы с точно заданными статистическими характеристиками, при этом сохраняя их разнообразие. Более того, данный метод может быть применен для порождения графов, имеющих схожую структуру с исходным. Работоспособность предложенного метода подтверждается вычислительным экспериментом, проведенным на датасетах Citeseer и Cora.

Ключевые слова: порождение данных, порождение графов, графы, вариационный автокодировщик, теория графов, генеративные модели, условное порождение, вариационный вывод

A. Y. Bishuk, A. V. Zukhba

Moscow Institute of Physics and Technology

Method for generating graphs with control of statistical properties

In this paper we propose a method of conditional graph generation that takes into account statistical characteristics of graphs. These characteristics are divided into two groups. The first group, called *simple features*, can be computed by efficient deterministic algorithms with complexity not more than quadratic of the number of vertices. This is dictated by the costliness of using computationally complex algorithms on graphs that are close to real graphs in size. The second group of features is generated in the hidden space and is responsible for graph regularities that cannot be described by «simple features». This approach allows to generate graphs with precisely defined statistical characteristics, while preserving their diversity. Moreover, this method can be applied to generate graphs with similar structure to the original one. The performance of the proposed method is confirmed by a computational experiment conducted on the Citeseer and Cora datasets.

Key words: data generation, graph generation, graphs, variational autoencoder, graph theory, generative models, conditional generation, variational inference

1. Введение

Проблема сложности получения большого числа данных для обучения нейросетевых моделей становится все более актуальной. Особенно это заметно в задачах, где данные представляют собой графовые структуры. Для решения этой проблемы часто используются подходы по порождению данных [4].

Кроме того, часто возникает потребность в графах, имеющих схожее распределение с исходным. Это важно, например, в случае графа ежедневных контактов фиксированного сообщества, где необходимо порождать ряд графов, похожих на изначальный. Для этой задачи традиционно используются генеративные модели, такие как GraphVAE [5] или диффузионные [6].

Однако существующие методы [14], [15] фокусируются на реконструкции исходного графа и не способны учитывать при порождении интуитивно понятные характеристики. Например, в случае графа контактов время взаимодействия людей в офисе ограничено, а потому есть ограничения на время и число контактов. Предлагается использовать в качестве ограничения на порождение не столько качество реконструкции, сколько заранее выбранные глобальные характеристики графа (например число ребер, вершин, кластерное число и так далее). Тем самым порождаются графы с заранее выбранными статистиками и имеющие распределение, схожее с исходным графом.

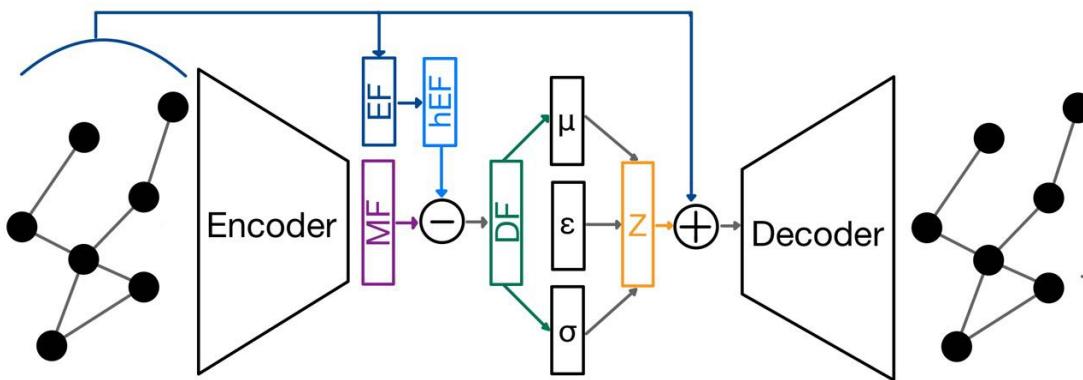


Рис. 1. Схема предложенного метода. Здесь \mathbf{MF} — векторное представление графа, \mathbf{EF} — вектор статистик из теории графов, \mathbf{hEF} — преобразованный вектор \mathbf{EF} , \mathbf{DF} — вектор, содержащий информацию о графе, которую невозможно получить преобразованием предпосчитанных статистик графа, ε — случайная величина $\in N(0, 1)$, а \mathbf{Z} — матрица из распределения $N(\mu, \sigma)$

Предложенный в данной работе метод может быть использован для поиска «сложных» статистик графа, таких как цикл максимальной длины или центральность смежности вершин [7], поиск которых до сих пор остаётся нерешенным на достаточно высоком уровне. Это может быть сделано путем контроля фокуса обучения сети на таких сложных характеристиках графа, если добавить в группу простых статистик больше независимых характеристик.

Первое упоминание идеи использования дополнительной информации для порождении данных встречается в статье «Learning Structured Output Representation using Deep Conditional Generative Models» [13], где была представлена модель Conditional Variational Autoencoders (CVAE). CVAE — это модификация VAE, которая может порождать данные с заданными условиями. В стандартном вариационном автокодировщике (VAE) модель порождает данные на основе скрытого пространства, которое не зависит от каких-либо внешних переменных. В CVAE модель использует дополнительную информацию для порождения данных. Авторы в статье показывают, как CVAE может быть использована для порождения изображений с заданными свойствами. Они используют MNIST [11] для порождения цифр с определенными свойствами, такими как цвет и положение цифры на изображении. Также описывается, как CVAE может быть использована для классификации

изображений. Например, авторы статьи применяют CVAE к задаче классификации CIFAR-10 [12], показывая, что CVAE может значительно улучшить точность. Впоследствии было предложено множество модификаций идей CVAE, таких как AC-GAN (Auxiliary Classifier GAN) и InfoGAN (Information Maximizing GAN), которые используют схожие идеи для порождения изображений с более сложными свойствами.

Для иллюстрации работы предложенного метода проводится ряд вычислительных экспериментов для задачи порождения графов с заданными статистиками на примере датасетов Cora [9] и Citeeser [10]. Также проводится теоретический анализ предложенного метода, подтверждающий работоспособность предложенного метода, а также схожих эвристических методов [16].

2. Постановка задачи

Пусть задано множество графов $\{G_i\}$ фиксированного размера по числу вершин n . Каждый элемент задается матрицей смежности \mathbf{A} и матрицей признаков вершин \mathbf{V}_f . Необходимо породить графы, близкие к исходным по статистическим свойствам.

В ходе решения проблемы порождения возникают две задачи — задача правильного восстановления матрицы смежности из скрытого пространства и задача построения неизвестного распределения данных.

Задача реконструкции. Для того чтобы обучить модель порождать новый элемент данных, необходимо научиться реконструировать объект из скрытого пространства. В работе будет предсказываться наличие и отсутствие ребра в графе.

Формально постановка этой задачи может быть описана следующим образом.

Дано: граф G с матрицей смежности $\mathbf{A} \in \mathcal{R}^{n \times n}$, где $\mathbf{A}_{ij} = 1$, если ребро (i, j) существует в графе, и 0 в противном случае. Матрица признаков вершин $\mathbf{V}_f \in \mathcal{R}^{n \times k}$, а также набор скрытых ребер $E = \{(i, j)\}$. Здесь k — размер вектора признаков вершин.

Задача

Построить модель, предсказывающую наличие ребра в графе на основе признаков вершин и существующих ребер. Однако особый интерес представляет предсказание наличия маркированных ребер. Задача может быть сформулирована как задача бинарной классификации: для каждой пары вершин i и j нужно предсказать вероятность того, что ребро (i, j) существует в графе, то есть принимает значение 1 в матрице смежности.

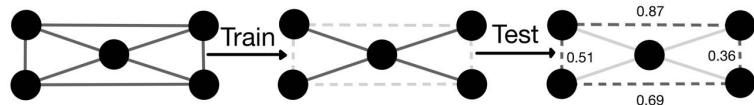


Рис. 2. Процесс маркировки ребер при порождении и тестировании модели

Модель обучается на данных, которые представляют собой множество пар вершин с маркированными и немаркированными ребрами. Она должна определить, какие признаки графа могут помочь в предсказании наличия ребер. На основе этих признаков необходимо построить модель, которая может классифицировать каждую пару вершин в графе.

Результатом работы модели является матрица предсказанных вероятностей существования ребер между всеми парами вершин в графе, включая немаркированные ребра.

Задача порождения. Задача по получению новых графов из неизвестного распределения выглядит следующим образом.

Дано: множество $\{\mathbf{A}_i\}_{i=0}^N \in \mathcal{R}^{n \times n}$ матриц смежности графов G_i из неизвестного распределения $\pi(G)$, построенного на основе графа G .

Задача

Получить распределение $\pi(G)$ в целях оценки $\pi(\hat{G})$ для нового графа \hat{G} и порождения новых графов из распределения $\pi(G)$.

Задача, решаемая в работе. В отличие от ряда работ [17], [18], где для создания алгоритма порождения графов решаются только задачи реконструкции и порождения, в данной работе дополнительно решается задача сохранения характеристик исходного графа.

Для удобства обозначений введем следующие понятия:

Определение 1. Простые статистики в предложенном методе — это числовые характеристики используемые в теории графов, которые могут быть вычислены не более чем за квадратичное время.

В качестве простых статистик графа были выбраны следующие характеристики:

- Размерные показатели $[O(1)]$:
 - число ребер,
 - число вершин.
- Вершины специального вида $[O(V)]$:
 - изолированные вершины — вершины без единого ребра,
 - висячие вершины — вершины с одним ребром,
 - промежуточные вершины — вершины с двумя ребрами,
 - вершины, связанные с каждой вершиной графа.
- Статистики на степенях вершин $[O(V)]$:
 - максимальная степень вершины,
 - средняя степень вершины,
 - медианная степень вершины,
 - модальная степень вершины,
 - стандартное отклонение степеней вершин в графе.
- Гистограмма степеней вершин графа $[O(V)]$ (здесь μ — средняя степень вершин в графе, σ — среднеквадратичное отклонение степеней вершин в графе). Доля вершин со степенью на интервалах: $(\mu - \sigma, \mu)$, $(\mu, \mu + \sigma)$, $(\mu - 2\sigma, \mu - \sigma)$, $(\mu + \sigma, \mu + 2\sigma)$, $(\mu - 3\sigma, \mu - 2\sigma)$, $(\mu + 2\sigma, \mu + 3\sigma)$.
- Оценка размера наибольшей клики в графе $[O(Vd^2)]$, d — максимальная степень вершины [2].
- Коэффициент кластеризации $[O(V^2)]$ [3].

Определение 2. Смешанными статистиками назовем любое численное описание графа, которое однозначно описывает граф.

Под скрытым представлением обычно понимают сжатое представление входных данных, которого достаточно для их восстановления.

Определение 3. Сложными статистиками назовем вектор \mathbf{d} , такой что каждая компонента вектора \mathbf{d} статистически независима от компонент вектора простых статистик \mathbf{s} , и при этом вектор смешанных статистик \mathbf{m} выражается через \mathbf{d} и \mathbf{s} линейно.

Иными словами, под сложными статистиками будут пониматься те особенности графа, которые невозможно выразить при помощи простых статистик.

Введем понятие *распределения графа*. Допустим, структура графа задается матрицей смежности $A \in \mathbb{B}^{n \times n}$. Сопоставим графу матрицу $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$, в ячейке (i, j) которой находится вероятность того, что значение в матрице A в ячейке (i, j) изменит свое значение на противоположное. Величина вероятности может отличаться для исходных единиц и нулей или основываться на структурных особенностях графа, но в данной работе они выбирались одинаковыми для всех ячеек и были достаточно небольшими, чтобы порождать по большей части графы, похожие на исходный. Таким образом, порождение графа, похожего на данный (например, имеющий одно лишнее ребро), будет более вероятным событием, чем порождение близкого к обратному.

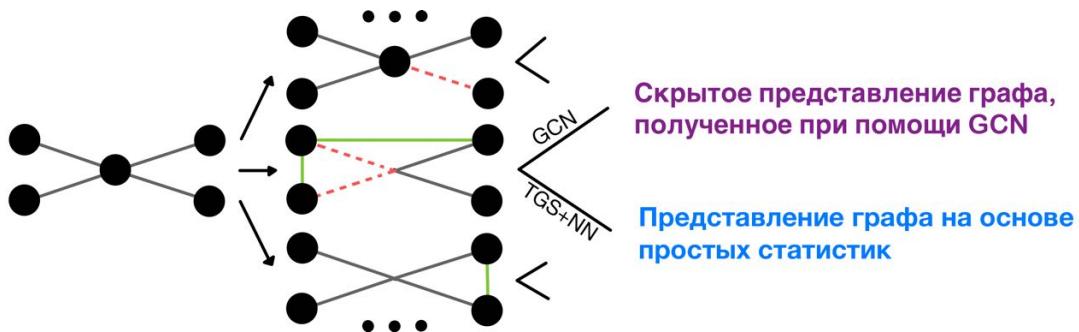


Рис. 3. Процесс создания распределения графа на основе имеющегося

Таким образом, отождествляется скрытое представление графа со смешанными статистиками. Также простые статистики переводятся в некоторое скрытое пространство линейной сверткой, требуя, чтобы получившееся представление имело нормальное распределение с нулевым математическим ожиданием, а линейные комбинации его компонент наилучшим образом приближали смешанные статистики в скрытом представлении графа. Под распределением скрытых представлений (они же смешанные статистики) и распределением простых статистик будем понимать множество скрытых представлений и векторов простых статистик, соответствующих графам из распределения графа G .

Подводя итог, задача, решаемая в этой работе, состоит в том, чтобы, подавая в порождающую модель графы из распределения графа G с их векторами простых статистик, получать представления, на основе которых при помощи вектора простых статистик исходного графа породить граф, схожий с исходным.

3. Предлагаемый метод

Предложенный метод порождения графов основан на модели графового вариационного автокодировщика (GraphVAE). В основе данного метода лежит аппроксимация апостериорного распределения матриц смежности графов $p(A|X)$. Вводится предположение, что процесс порождения графов и соответствующих матриц смежности зависит от скрытых переменных Z . Для оценки апостериорного распределения с учетом скрытой переменной Z используется вариационное распределение $q(Z|X, A)$, приближающее распределение $p(Z|X, A)$. Итоговая вариационная нижняя оценка:

$$\mathcal{L}_{VAE} = \mathbb{E}_q(\mathbf{Z}|X, A) \log p(\mathbf{A}|\mathbf{Z}) - D_{KL}q(\mathbf{Z}|X, A)\|p(\mathbf{Z}),$$

где \mathbf{A} — матрица смежности, \mathbf{Z} — матрица скрытых переменных, \mathbf{X} — матрица признаков вершин, $q(\cdot), p(\cdot)$ — соответствующие распределения.

Основным преимуществом нового подхода является возможность контролировать порождение, задавая определенные свойства графа. Это делает его более удобным и гибким по сравнению с обычным VAE.

3.1. Описание метода

Идея описываемого метода основывается на выводах, что использование дополнительной информации улучшает качество порождения данных. В качестве дополнительной информации используются простые статистики, посчитанные на исходном графе. С этой точки зрения предложенный метод можно назвать самоусловным GraphVAE по аналогии с CVAE, в котором оптимизируется следующий функционал:

$$\mathcal{L}_{CondVAE} = \mathbb{E}_{q(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, c)}[\log P(\mathbf{X}|\mathbf{Z}, c)] - D_{KL}[Q(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, c) \| P(\mathbf{Z}|c)],$$

где c — дополнительная информация, которая накладывает ограничения на модель.

Алгоритм 1 Алгоритм обучения порождающей модели

Require: G — граф. $G = (\mathbf{A} — \text{Матрица смежности}, \mathbf{V} — \text{Признаки вершин})$

Ensure: $\hat{\mathbf{A}}$ — матрица смежности реконструированного графа.

- 1: $\mathbf{s}_o \leftarrow \text{DeterministicAlgo}(G')$ ▷ Расчет простых статистик исходного графа
 - 2: **for** i in $[1, 2, \dots]$ **do**
 - 3: $\hat{G}[i] \leftarrow \text{SampleFromDistribution}(G)$ ▷ Получение графа из распределения исходного графа
 - 4: $\mathbf{s}[i] \leftarrow \text{DeterministicAlgo}(G')$ ▷ Расчет простых статистик семплированного графа
 - 5: **end for**
 - 6: $\mathbf{MF} \leftarrow \text{Encoder}(\hat{G})$ ▷ Вычисление матрицы смешанных статистик
 - 7: $\mathbf{hEF} \leftarrow \text{LL}(\mathbf{s})$ ▷ Вычисление оценки смешанных статистик
 - 8: $\mathbf{DF} \leftarrow \text{LL}(\mathbf{MF} - \mathbf{hEF})$ ▷ Выделение сложных статистик
 - 9: $\mu \leftarrow \text{GCN}(\mathbf{DF}), \sigma \leftarrow \text{GCN}(\mathbf{DF}), \varepsilon \leftarrow N(0, 1)$
 - 10: $\mathbf{Z} \leftarrow \mu + \varepsilon \cdot \sigma$
 - 11: $\hat{\mathbf{Z}} \leftarrow \text{LL}((\mathbf{Z}) + \text{LL}(\mathbf{s}_o))$ ▷ Учет простых статистик при декодировании
 - 12: $\hat{\mathbf{A}} \leftarrow \text{Decoder}(\hat{\mathbf{Z}})$ ▷ Преобразование порожденной матрицы в матрицу смежности
-

Следующим шагом алгоритма происходит вычитание оценки смешанных статистик (\mathbf{hEF}), полученной линейным преобразованием простых статистик, из самих смешанных статистик (\mathbf{MF}). Тем самым в скрытом представлении остаются только те характеристики графа, которые нельзя линейно выразить через простые. Такие характеристики мы называем сложными статистиками (\mathbf{DF}).

Далее на основе матрицы сложных статистик (\mathbf{DF}) формируется оценка математического ожидания (μ) и дисперсии (σ) сложных статистик исходного графа. Затем, при помощи трюка репараметризации, происходит порождение матрицы сложных статистик (\mathbf{Z}). Путем сложения полученной матрицы сложных статистик и преобразованного вектора простых статистик исходного графа (\mathbf{s}_o) будет получена итоговая матрица признаков графа ($\hat{\mathbf{Z}}$), с помощью которой блок декодера формирует матрицу смежности.

Итоговая функция потерь для предложенной модели имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} L(\mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}, \mathbf{M}, \mathbf{s}, \mathbf{D}) = & -\frac{1}{N^2} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \mathbf{w}_{ij} [\mathbf{Y}_{ij} \log(\hat{\mathbf{Y}}_{ij}) + (1 - \mathbf{Y}_{ij}) \log(1 - \hat{\mathbf{Y}}_{ij})] - \\ & - D_{KL}(\mathbf{D}, N(0, 1)) - \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \sum_j (\mathbf{M}_{ij} - \mathbf{s}_j)^2, \end{aligned}$$

где

- \mathbf{Y} — матрица смежности входного графа;
- $\hat{\mathbf{Y}}$ — матрица смежности порожденного графа, где в ячейке $\hat{\mathbf{Y}}_{ij}$ стоит вероятность того, что существует ребро между вершинами i и j ;

- \mathbf{M} — матрица смешанных статистик;
- \mathbf{s} — вектор простых статистик входного графа;
- \mathbf{D} — матрица порожденных сложных статистик;
- w_{ij} — веса перед элементами в матрице смежности. Самый большой вес у маркированных ребер, затем у маркированных мест, где ребра нет, меньший вес у существующих не маркированных ребер и самый маленький вес у мест, где ребер нет и они не маркированы. Вес зависит от того, было ли место в матрице маркировано и сколько всего ребер есть в рассматриваемом графе.

3.2. Анализ предложенного метода

Вариационный автокодировщик (VAE) — это генеративная модель, которая обучается отображать объекты в заданное скрытое пространство, после чего порождать новые объекты из этого скрытого пространства.

Часто важно, чтобы элементы скрытого пространства были распределены стандартно нормально. В данной работе это достигается стандартизацией скрытого представления по всем скрытым представлениям, полученным от преобразованных графов.

Далее в этом разделе под простыми статистиками будем понимать скрытое представление простых статистик, которое также будет иметь нормальное распределение с нулевым математическим ожиданием. Это будет достигаться теми же способами, которые используются для получения нормально распределенных смешанных статистик.

Глобальная цель — разложить смешанные статистики графа G в линейную комбинацию независимых друг от друга простых и сложных статистик.

Замечание 1. Далее будет рассматриваться лишь один из векторов смешанных статистик. Однако рассуждения можно провести для каждого вектора из матрицы смешанных статистик.

Замечание 2. В общем смысле все статистики графа представляют собой некоторые функции, которые переводят граф в действительное числовое пространство. В этой работе будет подразумеваться под той или иной статистикой реализация функции на заданном графе.

Пусть у нас есть вектор смешанных статистик \mathbf{m} и вектор простых статистик \mathbf{s} , такие, что $|\mathbf{m}| > |\mathbf{s}|$, принадлежащие соответствующим распределениям. Причем оба вектора состоят из независимых одинаково (стандартно нормально) распределенных случайных величин.

Замечание 3. Статистическая независимость элементов вектора \mathbf{s} гарантируется по построению.

В силу статистической независимости элементов векторов, не существует линейного отображения из вектора \mathbf{s} в вектор \mathbf{m} . Однако обратное утверждать нельзя, поэтому выдвинем следующую гипотезу.

Гипотеза. Существует линейное отображение вектора смешанных статистик в вектор простых статистик.

Иными словами, существует матрица $\mathbf{A}^{|\mathbf{s} \times \mathbf{m}|}$, задающая следующее отображение: $\mathbf{Am} = \mathbf{s}$.

Введем следующую лемму.

Лемма 1. Пусть дан набор независимых, одинаково распределенных нормально случайных величин $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$. Случайная величина $\xi = a_1\gamma_1 + a_2\gamma_2 + \dots + a_n\gamma_n$ статистически зависима от каждой из случайных величин γ_i , коэффициент для которой $a_i \neq 0$.

Доказательство

Докажем это утверждение для γ_1 .

В силу теоремы [1] о сохранении нормальности при линейном преобразовании, случайная величина ξ будет также иметь нормальное распределение.

Для нормальных величин существует критерий независимости, который можно записать для γ_i и ξ :

$$\mathbb{E}(\gamma_i \xi) - \mathbb{E}(\gamma_i) \mathbb{E}(\xi) = 0.$$

Распишем этот критерий, воспользовавшись тем фактом, что γ_i и γ_j являются независимыми для $\forall i \neq j$:

$$a_1 \mathbb{E}(\gamma_1^2) + a_2 \mathbb{E}(\gamma_1) \mathbb{E}(\gamma_2) + \dots + a_n \mathbb{E}(\gamma_1) \mathbb{E}(\gamma_n) - \mathbb{E}(\gamma_1) (a_1 \mathbb{E}(\gamma_1) + \dots + a_n \mathbb{E}(\gamma_n)) = 0,$$

$$a_1 \mathbb{D}(\gamma_1) \neq 0.$$

Таким образом в силу критерия независимости случайных величин, ξ статистически зависит от каждого слагаемого, коэффициент при котором не равен нулю.

Лемма 2. *Матрица A имеет максимально возможный ранг.*

Доказательство

Докажем это от противного — в матрице A есть линейно зависимая строка.

Для простоты дальнейших выкладок пусть есть строка, которая является линейной комбинацией двух других, которые между собой линейно не зависят. Каждой из этих строк соответствуют компоненты вектора \mathbf{s} :

$$\begin{cases} \xi = k_1 \eta + k_2 \zeta, \\ \eta = a_1 \gamma_1 + \dots + a_n \gamma_n \\ \zeta = b_1 \gamma_1 + \dots + b_n \gamma_n. \end{cases}$$

ξ, η, ζ будут нормальными случайными величинами в силу теоремы о сохранении нормальности при линейном преобразовании [1].

Воспользуемся критерием независимости нормальных случайных величин для ξ и η :

$$\mathbb{E}(\xi \eta) = \mathbb{E}((k_1 \eta + k_2 \zeta) \eta) = k_1 \mathbb{E}(\eta^2) + k_2 \mathbb{E}(\zeta \eta) = k_1 \mathbb{E}(\eta^2) + k_2 \sum_{i=1}^n b_i \eta \gamma_i,$$

$$\mathbb{E}(\xi) \mathbb{E}(\eta) = (k_1 \mathbb{E}(\eta) + k_2 \mathbb{E}(\zeta)) \mathbb{E}(\eta) = (k_1 \mathbb{E}(\eta) + k_2 \sum_{i=1}^n b_i \mathbb{E}(\gamma_i)) \mathbb{E}(\eta),$$

$$\mathbb{E}(\xi \eta) - \mathbb{E}(\xi) \mathbb{E}(\eta) = k_1 (\mathbb{E}(\eta^2) - (\mathbb{E}(\eta))^2) + k_2 \sum_{i=1}^n b_i (\mathbb{E}(\gamma_i \eta) - \mathbb{E}(\gamma_i) \mathbb{E}(\eta)),$$

В силу леммы 1: $b_i (\mathbb{E}(\gamma_i \eta) - \mathbb{E}(\gamma_i) \mathbb{E}(\eta)) = b_i a_i \mathbb{D} \gamma_i$. Тогда

$$\mathbb{E}(\xi \eta) - \mathbb{E}(\xi) \mathbb{E}(\eta) = k_1 \mathbb{D}(\eta) + k_2 \sum_{i=1}^n a_i b_i \mathbb{D} \gamma_i.$$

Поскольку γ_i распределены стандартно нормально:

$$\mathbb{E}(\xi \eta) - \mathbb{E}(\xi) \mathbb{E}(\eta) = k_1 \mathbb{D}(\eta) + k_2 \sum_{i=1}^n a_i b_i.$$

В силу линейной независимости строк матрицы A , соответствующих η и ζ , $\sum_{i=1}^n a_i b_i = 0$. Тогда критерий преобразуется в следующий вид:

$$\mathbb{E}(\xi \eta) - \mathbb{E}(\xi) \mathbb{E}(\eta) = k_1 \mathbb{D}(\eta) \neq 0, \text{ поскольку } k_1 \neq 0 \text{ и } \mathbb{D}(\eta) > 0.$$

Таким образом, ξ и η — зависимые случайные величины, что противоречит условию о статистической независимости компонент вектора \mathbf{s} .

На основе данного отображения построим следующие преобразования:

Дополним матрицу $\mathbf{A}^{|s \times m|}$ до матрицы $\hat{\mathbf{A}}^{|m \times m|}$. Существует бесконечно много способов дополнить матрицу таким образом. Для того чтобы уйти от неоднозначности, нужно наложить дополнительные ограничения, о которых будет сказано далее.

После перехода к преобразованию добавленную часть матрицы $\hat{\mathbf{A}}$ будем называть матрицей $\mathbf{D}_{\hat{\mathbf{A}}}$, а изначальную $\mathbf{A}_{\hat{\mathbf{A}}}$. Кроме того, часть нового вектора $\hat{\mathbf{s}}$ будем называть \mathbf{d} .

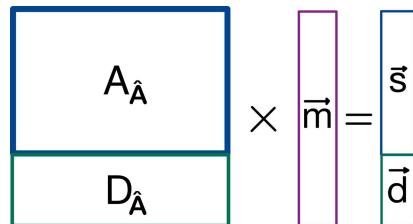


Рис. 4. Построенное линейное преобразование смешанных статистик

В качестве дополнительных ограничений на матрицу $\mathbf{D}_{\hat{\mathbf{A}}}$ примем требование на максимально возможный ранг матрицы $\mathbf{D}_{\hat{\mathbf{A}}}$ и линейную независимость каждой строки матрицы $\mathbf{D}_{\hat{\mathbf{A}}}$ от строк матрицы $\mathbf{A}_{\hat{\mathbf{A}}}$. В силу леммы 2, матрица $\mathbf{D}_{\hat{\mathbf{A}}}$ будет ортогональным дополнением матрицы $\mathbf{A}_{\hat{\mathbf{A}}}$.

При линейной независимости строк матрицы $\hat{\mathbf{A}}$ компоненты векторов \mathbf{s} и \mathbf{d} будут статистически независимы.

Таким образом, получившийся вектор \mathbf{d} будет нормальным вектором в силу теоремы о сохранении нормальности при линейном преобразовании [1]. Также каждая его компонента статистически независима от компонент вектора \mathbf{s} , а матрица $\hat{\mathbf{A}}$ имеет полный ранг (а потому существует обратное преобразование). Итого получаем, что вектор \mathbf{d} есть вектор сложных статистик по определению.

Теорема [Бишук]. *Преобразование, описанное выше, соответствует разложению смешанных статистик на простые и сложные.*

4. Вычислительный эксперимент

В этом разделе производится проверка предложенного метода и сравнение его с существующими методами на реальных данных.

4.1. Наборы данных

Эксперимент проводился на наборах данных «Cora» [9] и «Citeseer» [10], которые представляют собой информацию о научных статьях и их цитировании.

Cora

Датасет «Cora» [9] — это один из наиболее часто используемых датасетов в задачах классификации и кластеризации графов. Он состоит из 2708 статей, взятых из базы arXiv и разбитых на семь категорий: биология, информатика, право, математика, медицина, физика и социология. Каждая статья представлена в виде узла графа, а связи между статьями — это ссылки между ними.

Каждая статья представлена в виде признаков, являющихся мешком слов (bag-of-words) из 1433 уникальных терминов, которые были извлечены из полного текста статей.

Таким образом, датасет представляет собой ориентированный граф, каждая вершина которого представлена набором из 1433 признаков.

Citeseer

В качестве второго датасета для тестирования предложенного метода был выбран датасет «Citeseer» [10], который традиционно используется для задачи классификации статей

по научным темам. Датасет содержит статьи из компьютерных наук и связанных с ними областей, таких как базы данных, информационный поиск и машинное обучение. Каждая статья представляет собой узел в графе, а ссылки на другие статьи формируют ребра. В датасете всего 6 классов научных тем: базы данных, интеллектуальная обработка информации, машинное обучение, информационный поиск, распределенные системы и робототехника. Он содержит 3327 статьи и 9228 ссылки между ними. Каждая статья представлена в виде метаданных, включающих название, список авторов, перечень ссылок на другие статьи и аннотацию.

Данные датасета были собраны из различных источников, включая базы данных ACM, DBLP и PubMed. В оригинальной статье, описывающей датасет, авторы провели анализ структуры сети цитирования, выделили основные сообщества статей и оценили качество работы алгоритмов кластеризации и классификации на этих данных.

4.2. Протокол эксперимента

Обучение происходило на популярных датасетах Cora, Citeseer. Для обучения использовалась матрица смежности графов датасета, а также матрица признаков вершин. Кроме того, матрица смежности преобразовывалась согласно алгоритму, предложенному в оригинальной статье GraphVAE [8] и показавшему свою эффективность.

Модель получает на вход матрицу смежности графа, признаки вершин, а также вектор простых статистик, которые вычислялись детерминированными алгоритмами.

На каждой эпохе обучения происходило разбиение графа — выбирались ребра и разбивались на три группы — валидация, обучение и тест. Затем выбирались пары вершин, между которыми ребра отсутствовали, которые также распределялись по этим группам. Процент распределения является параметром обучения, но наиболее стабильные результаты были получены при выделении 15% для теста, 25% для валидации и 65% для обучения.

4.3. Результаты

Для стандартной задачи порождения графов используются критерии качества классификации, не требующих порога бинаризации — ROC-AUC и Average Precision. Однако для поставленной задачи необходимо зафиксировать порог бинаризации для подсчета различия между статистиками поданного на вход и порожденного графов. Для этого происходит проход со всеми возможными порогами для вероятности в матрице смежности порожденного графа и рассчитываем простые статистики. После чего выбирается тот порог, который соответствует минимуму средней абсолютной ошибки между простыми статистиками входного графа и порожденного.

Такой минимум считается лучшим результатом, который может получить алгоритм порождения и записываем его в таблицу результатов.

Т а б л и ц а 1
Результаты вычислительного эксперимента по классификации наличия ребер

	Dataset	ROC-AUC	AP	MAE (global statistics)
GraphVAE	Cora	$75.18 \pm 0.02\%$	$75.81 \pm 0.02\%$	0.066 ± 0.002
Our method		$76.68 \pm 0.02\%$	$75.18 \pm 0.02\%$	$0.046 \pm 0.002 (-30\%)$
GraphVAE	Citeseer	$82.09 \pm 0.01\%$	$79.94 \pm 0.01\%$	0.072 ± 0.001
Our method		$76.28 \pm 0.01\%$	$76.44 \pm 0.01\%$	$0.060 \pm 0.001 (-17\%)$

Как видно из табл. 1, предложенный метод порождает графы с статистиками, более близкими к исходным, чем обычная модель GraphVAE.

Предполагается, что уменьшение значения критериев качества реконструкции можно нивелировать, используя другой подход к агрегации простых статистик либо более тон-

кой настройкой параметров обучения. Подробнее этот вопрос будет исследован в будущих работах.

5. Заключение

В ходе данной работы был разработан и теоретически обоснован новый метод порождения графов, использующий идею разделения статистик графа на простые (легко вычислимые и интерпретируемые) и сложные. Эксперименты, проведенные на наборах данных Cora и Citess, показали эффективность предложенного метода в сравнении с оригинальной моделью графового маркионного автокодировщика.

Небольшое снижение критериев качества реконструкции оставляет модель на уровне актуальных моделей оригинальной архитектуры, но при этом позволяет порождать графы с заранее заданными свойствами.

Предложенный подход можно обобщить на прочие модели, преобразующие данные в некоторое скрытое представление. Это может быть полезным, например, при порождении молекулярных структур или сетей связей между людьми.

В будущих работах планируется расширить предложенный метод, используя дополнительно новые простые статистики; исследовать влияние различных простых статистик на ограничение свободы порождения графов; рассмотреть разнообразные методы агрегации графов в векторе одной вершины.

Список литературы

1. Боровков А.А. Теория вероятностей. Москва : Наука, Физматлит, 1986. 432 с.
2. Pattabiraman B. [et al.]. Fast algorithms for the maximum clique problem on massive sparse graphs // Algorithms and Models for the Web Graph: 10th International Workshop. 2013. P. 156–169.
3. Saramaki J. [et al.]. Generalizations of the clustering coefficient to weighted complex networks // Physical Review E. 2007. V. 75(2). P. 027105.
4. Ying Z. [et al.]. Gnnexplainer: Generating explanations for graph neural networks // Advances in neural information processing systems. 2019. V. 32.
5. Kipf T.N., Welling M. Variational Graph Auto-Encoders // Stat. 2016. V. 1050. P. 21.
6. Chamberlain B. [et al.]. Grand: Graph neural diffusion // International Conference on Machine Learning. 2021. P. 1407–1418.
7. Latora V., Marchiori M. A measure of centrality based on network efficiency // New Journal of Physics. 2007. V. 9(6). P. 188.
8. Kingma D.P., Welling M. Auto-Encoding Variational Bayes // Stat. 2022. V. 1050. P. 10.
9. Sen P. [et al.]. Collective classification in network data // AI magazine. 2008. V. 29(3). P. 93.
10. Rossi R., Ahmed N. The network data repository with interactive graph analytics and visualization // Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence. 2015. V. 29(1).
11. Deng L. The mnist database of handwritten digit images for machine learning research [best of the web] // IEEE signal processing magazine. 2012. V. 29(6). P. 141–142.
12. Krizhevsky A. [et al.]. Learning multiple layers of features from tiny images // Technical Report University of Toronto. Toronto, Ontario. 2009.
13. Sohn K., Lee H., Yan X. Learning structured output representation using deep conditional generative models // Advances in neural information processing systems. 2015. V. 28.
14. Mitton J. [et al.]. A Graph VAE and Graph Transformer Approach to Generating Molecular Graphs // ArXiv, abs/2104.04345.

15. *Simonovsky M., Komodakis N.* Graphvae: Towards generation of small graphs using variational autoencoders // Artificial Neural Networks and Machine Learning–ICANN 2018: 27th International Conference on Artificial Neural Networks. 2018. P. 412–422.
16. *Zhao J. [et al.]*. GraphTune: An Efficient Dependency-Aware Substrate to Alleviate Irregularity in Concurrent Graph Processing // ACM Transactions on Architecture and Code Optimization. 2023. V. 20(3). P. 1–24.
17. *De Cao N., Kipf T.* An implicit generative model for small molecular graphs // ICML 2018 workshop on Theoretical Foundations and Applications of Deep Generative Models. 2018.
18. *Velickovic P. [et al.]*. Graph attention networks // Stat. 2017. V. 1050(20). P. 10–48550.

References

1. *Borovkov A.A.* Probability theory. Moscow : Nauka, Fizmatlit, 1986. 432 p. (in Russian).
2. *Pattabiraman B., et al.*, Fast algorithms for the maximum clique problem on massive sparse graphs. Algorithms and Models for the Web Graph: 10th International Workshop. 2013. P. 156–169.
3. *Saramaki J., et al.*, Generalizations of the clustering coefficient to weighted complex networks. Physical Review E. 2007. V. 75(2). P. 027105.
4. *Ying Z., et al.*, Gnnexplainer: Generating explanations for graph neural networks. Advances in neural information processing systems. 2019. V. 32.
5. *Kipf T.N., Welling M.* Variational Graph Auto-Encoders. Stat. 2016. V. 1050. P. 21.
6. *Chamberlain B., et al.*, Grand: Graph neural diffusion. International Conference on Machine Learning. 2021. P. 1407–1418.
7. *Latora V., Marchiori M.* A measure of centrality based on network efficiency. New Journal of Physics. 2007. V. 9(6). P. 188.
8. *Kingma D.P., Welling M.* Auto-Encoding Variational Bayes. Stat. 2022. V. 1050. P. 10.
9. *Sen P., et al.*, Collective classification in network data. AI magazine. 2008. V. 29(3). P. 93.
10. *Rossi R., Ahmed N.* The network data repository with interactive graph analytics and visualization. Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence. 2015. V. 29(1).
11. *Deng L.* The mnist database of handwritten digit images for machine learning research [best of the web]. IEEE signal processing magazine. 2012. V. 29(6). P. 141–142.
12. *Krizhevsky A., et al.*, Learning multiple layers of features from tiny images. Technical Report University of Toronto. Toronto, Ontario. 2009.
13. *Sohn K., Lee H., Yan X.* Learning structured output representation using deep conditional generative models. Advances in neural information processing systems. 2015. V. 28.
14. *Mitton J., et al.*, A Graph VAE and Graph Transformer Approach to Generating Molecular Graphs. ArXiv, abs/2104.04345.
15. *Simonovsky M., Komodakis N.* Graphvae: Towards generation of small graphs using variational autoencoders. Artificial Neural Networks and Machine Learning–ICANN 2018: 27th International Conference on Artificial Neural Networks. 2018. P. 412–422.
16. *Zhao J., et al.*, GraphTune: An Efficient Dependency-Aware Substrate to Alleviate Irregularity in Concurrent Graph Processing. ACM Transactions on Architecture and Code Optimization. 2023. V. 20(3). P. 1–24.
17. *De Cao N., Kipf T.* An implicit generative model for small molecular graphs. ICML 2018 workshop on Theoretical Foundations and Applications of Deep Generative Models. 2018.
18. *Velickovic P., et al.*, Graph attention networks. Stat. 2017. V. 1050(20). P. 10–48550.

УДК 519.175.4

Х. К. Буитраго Оропеса

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Максимальные индуцированные пути в случайных двудольных графах

Доказано, что максимальный размер индуцированного пути в биномиальном двудольном случайном графе $G(n, n, p = 1/2)$ сконцентрирован в трех последовательных значениях с вероятностью, стремящейся к 1, при $n \rightarrow \infty$.

Ключевые слова: двудольный случайный граф, максимальный подграф, концентрация

J. C. Buitrago Oropesa

Moscow Institute of Physics and Technology

Maximum induced paths in random bipartite graphs

We prove that the maximum size of an induced path in the binomial bipartite random graph $G(n, n, p = 1/2)$ is concentrated asymptotically almost surely at three consecutive points.

Key words: bipartite random graph, maximum subgraph, concentration

1. Введение

Рассмотрим множество $\Omega_{2 \times n} = \{G = (V_1^n \sqcup V_2^n, E)\}$ всех неориентированных графов без кратных рёбер с непересекающимися и независимыми множествами вершин V_1^n, V_2^n размера $n \in \mathbb{N}$, таких, что допускаются только рёбра между вершинами, принадлежащими различным множествам. Случайный двудольный граф $G(n, n, p)$ является случайным элементом множества $\Omega_{2 \times n}$ с распределением, определяемым равенством

$$\mathbb{P}(G(n, n, p) = G) = p^{|E(G)|} (1 - p)^{n^2 - |E(G)|},$$

то есть каждое ребро полного двудольного графа появляется с вероятностью p независимо от других.

Пусть $[n] := \{1, \dots, n\}$ — множество помеченных вершин. Напомним, что множество вершин $U \subset [n]$ в графе, в котором никакие две вершины не являются смежными, называется *независимым множеством*. Размер наибольшего независимого множества называется *числом независимости* графа. Хорошо известно, что с вероятностью, стремящейся к 1, два максимальных независимых множества в графе $G(n, n, p)$ — это его две доли V_1^n и V_2^n , поэтому число независимости точно равно n .

В [1], [2], [3], [4] было доказано, что для $p = \text{const} \in (0, 1)$ число независимости биномиального случайного графа $G(n, p)$ (в этом графе каждая пара различных вершин из $[n]$ является смежной с вероятностью p независимо от других) с вероятностью, стремящейся к 1, принимает одно из двух значений, $f(n)$ и $f(n) + 1$, где

$$f(n) = \left\lfloor 2 \log_b n - 2 \log_b \log_b n + 2 \log_b \frac{e}{2} + 0.9 \right\rfloor, \quad b = 1/(1 - p).$$

Некоторые улучшения этого результата можно найти в [6]. В этом случае мы говорим, что число независимости *сконцентрировано в двух точках*.

В дальнейшем концентрация в двух точках была доказана и для других характеристик случайного графа. Особое внимание было уделено максимальному размеру индуцированного подграфа в $G(n, p)$, обладающего заданным свойством. Напомним, что множество $A \subset [n]$ вершин графа G *индуцирует* в нем подграф $G|_A$, множество вершин которого равно A , а множество ребер образовано всеми ребрами графа G , оба конца которых принадлежат A . Например, в [6] концентрация в двух точках была доказана для максимального размера индуцированного пути, в [7] — для максимального размера индуцированного дерева, а в [8] — для максимального размера индуцированного леса. Для каждой из этих трех случайных величин было доказано, что найдется функция $C(n) = O(1)$ такая, что рассматриваемая случайная величина принимает одно из двух значений $\log_{1/(1-p)} n + C(n)$ и $\log_{1/(1-p)} n + C(n) + 1$ с вероятностью, стремящейся к 1.

Все предыдущие результаты применимы к модели случайного графа, где вероятность появления ребра является постоянной величиной. Некоторые из этих результатов были расширены для случая $p(n) = o(1)$. Так, в [9] было доказано, что число независимости $G(n, p)$, где $n^{-2/3+\varepsilon} < p < 1/[\log(n)]^2$, сконцентрировано в двух точках. Кроме того, в [9] было доказано, что максимальный размер индуцированного дерева в графе $G(n, p)$, где $n^{-\frac{e-2}{3e-2}+\varepsilon} \leq p = o(1)$, также сконцентрирован в двух точках.

Следующим естественным шагом является проверка концентрации в двух точках некоторых из этих характеристик в других моделях случайных графов. В настоящей работе мы сосредотачиваемся на модели двудольного случайного графа $G(n, n, p)$. В частности, нам удалось доказать, что максимальный размер индуцированного пути в двудольном случайном графе $G(n, n, p = 1/2)$ сконцентрирован в трех последовательных точках.

Теорема 1. *Обозначим через \mathbf{P} максимальную длину (то есть количество вершин) индуцированного пути в графе $G(n, n, 1/2)$. Тогда для любой достаточно малой константы $\varepsilon > 0$ с вероятностью, стремящейся к 1, $\mathbf{P} \in \{2g(n), 2g(n) + 1, 2g(n) + 2\}$, где*

$$g(n) = \lceil 2 \log_2 n - 1 - \varepsilon \rceil.$$

Несмотря на то, что в основе доказательства теоремы 1 лежит стандартная техника, применение неравенства Маркова для получения верхней оценки на случайную величину и неравенства Чебышева для получения нижней, проблема, как обычно, заключается в необходимости достаточно точного оценивания второго момента случайной величины, представляющей число индуцированных путей заданной длины. В отличие от стандартной модели биномиального случайного графа $G(n, p)$ здесь возникает дополнительная сложность при оценке вклада пар пересекающихся индуцированных путей во второй момент, так как необходимо также учитывать их пересечения с каждой частью двудольного графа.

2. Доказательство теоремы 1

Для краткости обозначим $g := g(n)$. Далее при упоминании вероятности проведения ребра, равной $1/2$, будем в некоторых ситуациях обозначать ее p для большей ясности изложения — а именно, для отличия вклада в оцениваемые величины самой вероятности p и вероятности дополнения события, $1 - p$. Как обычно, мы будем использовать методы первого и второго моментов. Сначала покажем, что с вероятностью, стремящейся к 1 при $n \rightarrow \infty$, $\mathbf{P} < 2g + 3$.

Пусть X_k — число индуцированных путей длины k в графе $G(n, n, p)$. Пусть $k = \Theta(\log n)$. Нетрудно заметить, что

$$\mathbb{E}X_{2k} = \binom{n}{k}^2 (k!)^2 p^{2k-1} (1-p)^{k^2-2k+1} \sim n^{2k} 2^{-k^2}$$

и

$$\mathbb{E}X_{2k+1} = \binom{n}{k} \binom{n}{k+1} k!(k+1)! p^{2k} (1-p)^{k(k+1)-2k} \sim n^{2k+1} 2^{-k^2-k} \sim \mathbb{E}X_{2k} n 2^{-k},$$

поскольку существует два способа выбрать часть, к которой принадлежат первая и последняя вершины нечетного пути, а количество способов провести такой путь на фиксированном наборе из $k+1$ вершин одной части и k вершин другой части равно $k!(k+1)!/2$.

В частности,

$$\mathbb{E}X_{2k} = e^{k(2 \ln n - k \ln 2) + o(1)}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}X_{2g+3} &\sim \mathbb{E}X_{2g+2} n 2^{-g-1} = e^{(g+1)(2 \ln n - (g+1) \ln 2) + o(1)} n 2^{-g-1} \leq 2^{\varepsilon(g+1)} n 2^{-2 \log_2 n + \varepsilon} = \\ &= \Theta(n^{2\varepsilon-1}) = o(1). \end{aligned}$$

Следовательно, по неравенству Маркова

$$\mathbb{P}(X_{2g+3} \geq 1) \leq \mathbb{E}X_{2g+3} = o(1),$$

что означает, что $\mathbf{P} \leq 2g+2$ с вероятностью, стремящейся к 1 при $n \rightarrow \infty$, поскольку

$$\{\mathbf{P} \leq 2g+2\} = \{X_{2g+3} = 0\}.$$

Теперь покажем, что $\mathbb{P}(\mathbf{P} \geq 2g) = 1 - o(1)$. Сначала заметим, что для $0 < \varepsilon < 1$ получаем

$$\mathbb{E}X_{2g} = e^{g(2 \ln n - g \ln 2) + o(1)} \geq 2^{\varepsilon g + o(1)} \rightarrow \infty \text{ при } n \rightarrow \infty.$$

Таким образом, по неравенству Чебышёва

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{2g} = 0) &\leq \frac{\text{Var}X_{2g}}{(\mathbb{E}X_{2g})^2} = \frac{\mathbb{E}X_{2g}(X_{2g} - 1) - (\mathbb{E}X_{2g})^2}{(\mathbb{E}X_{2g})^2} + \frac{1}{\mathbb{E}X_{2g}} = \\ &= \frac{\mathbb{E}X_{2g}(X_{2g} - 1) - (\mathbb{E}X_{2g})^2}{(\mathbb{E}X_{2g})^2} + o(1). \end{aligned} \tag{1}$$

Остается показать, что правая часть выражения (1) является $o(1)$.

Случайную величину X_{2g} можно представить как сумму индикаторов $I_{B(U_1 \sqcup U_2)}$ по всем g -элементным множествам $U_1 \subset V_1^n$ и $U_2 \subset V_2^n$, где $B(U_1 \sqcup U_2)$ — событие, заключающееся в том, что $U_1 \sqcup U_2$ индуцирует путь в $G(n, n, p)$. Следовательно,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}X_{2g}(X_{2g} - 1) &= \sum_{U_1 \sqcup U_2, U'_1 \sqcup U'_2} \mathbb{P}(B(U_1 \sqcup U_2) \cap B(U'_1 \sqcup U'_2)) = \\ &= \left(\sum_{\substack{U_1 \sqcup U_2 \text{ и } U'_1 \sqcup U'_2 \\ \text{имеют общие вершины}}} + \sum_{\substack{U_1 \sqcup U_2 \text{ и } U'_1 \sqcup U'_2 \\ \text{не имеют общие вершины}}} \right) \mathbb{P}(B(U_1 \sqcup U_2) \cap B(U'_1 \sqcup U'_2)), \end{aligned}$$

где

$$\sum_{\substack{U_1 \sqcup U_2 \text{ и } U'_1 \sqcup U'_2 \\ \text{не имеют общие вершины}}} \mathbb{P}(B(U_1 \sqcup U_2) \cap B(U'_1 \sqcup U'_2)) = \binom{n}{g}^2 \binom{n-g}{g}^2 (g!)^4 \frac{1}{2^{2g^2}} \leq [\mathbb{E}X_{2g}]^2.$$

Таким образом, мы имеем

$$\begin{aligned} \mathbb{E}X_{2g}(X_{2g} - 1) - (\mathbb{E}X_{2g})^2 &\leq \sum_{v=1}^{2g-1} \sum_{\substack{U_1 \sqcup U_2 \text{ and } U'_1 \sqcup U'_2 \\ \text{with } v \text{ common vertices}}} \mathbb{P}(B(U_1 \sqcup U_2) \cap B(U'_1 \sqcup U'_2)) \leq \\ &\leq \sum_{v=1}^{2g-1} \binom{n}{g}^2 (g!)^2 \binom{2g}{v}^2 n^{2g-v} \gamma(v) \frac{p^{2(2g-1)} (1-p)^{2[g^2-(2g-1)]}}{\min_{x_1, x_2} \left\{ (1-p)^{x_1} \left(\frac{p}{1-p} \right)^{x_2} \right\}}, \end{aligned}$$

где $\gamma(v)$ — это количество возможных перестановок вершин в пересечении двух путей (мы впоследствии оценим это значение в зависимости от величины v), x_1 — это количество пар общих вершин между различными частями двудольного графа в пересечении двух путей, а x_2 — количество общих рёбер. Заметим, что $x_1 \leq \frac{v^2}{4}$, так как это точно произведение двух неотрицательных целых чисел, сумма которых равна v . Принимая $p = 1/2$, получаем

$$\mathbb{E}X_{2g}(X_{2g} - 1) - (\mathbb{E}X_{2g})^2 \leq \mathbb{E}X_{2g} \sum_{v=1}^{2g-1} \frac{\binom{2g}{v}^2 n^{2g-v}}{2^{g^2 - \frac{v^2}{4}}} \gamma(v). \quad (2)$$

Теперь мы можем найти подходящую оценку для $\gamma(v)$. Для $v \leq \lfloor 1.1g \rfloor$ рассмотрим тривиальную оценку $\gamma(v) \leq v!$. С другой стороны, для $v > \lfloor 1.1g \rfloor$ зафиксируем один путь, который назовем \mathcal{P}_1 , затем выберем общие вершины и, начиная с этих вершин, построим второй путь, который назовем \mathcal{P}_2 . Таким образом, мы видим, что пересечение \mathcal{P}_1 и \mathcal{P}_2 состоит из $2g - v + 1$ связных компонент, которые разделены вершинами \mathcal{P}_1 . Следовательно, существует не более чем $(2g-v+1)!$ перестановок этих компонент. С другой стороны, для каждой связной компоненты у нас есть два варианта выбора её ориентации внутри \mathcal{P}_2 . Следовательно, для $v > \lfloor 1.1g \rfloor$ мы можем оценить $\gamma(v) \leq (2g-v+1)! 2^{2g-v+1}$.

Таким образом, из (1) и (2) следует, что

$$\begin{aligned} \frac{\mathbb{E}X_{2g}(X_{2g} - 1) - (\mathbb{E}X_{2g})^2}{(\mathbb{E}X_{2g})^2} &\leq \frac{1}{\mathbb{E}X_{2g}} \sum_{v=1}^{2g-1} \frac{\binom{2g}{v}^2 n^{2g-v}}{2^{g^2 - \frac{v^2}{4}}} \gamma(v) = \\ &= \sum_{v=1}^{2g-1} \frac{\binom{2g}{v}^2 n^{2g-v} 2^{\frac{v^2}{4}}}{\binom{n}{g}^2 (g!)^2} \gamma(v) \leq \\ &\leq \sum_{v=1}^{\lfloor 1.1g \rfloor} \frac{\binom{2g}{v}^2 n^{2g-v} 2^{\frac{v^2}{4}} v!}{\binom{n}{g}^2 (g!)^2} + \\ &\quad + \sum_{v=\lfloor 1.1g \rfloor + 1}^{2g-1} \frac{\binom{2g}{v}^2 n^{2g-v} 2^{\frac{v^2}{4}} (2g-v+1)! 2^{2g-v+1}}{\binom{n}{g}^2 (g!)^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Теперь задача состоит в том, чтобы показать, что правая часть выражения (3) является $o(1)$. Сначала рассмотрим слагаемые с $v \in [1, \lfloor 1.1g \rfloor]$. Так как $1 \ll g \ll \sqrt{n}$, получаем следующую асимптотику:

$$\binom{n}{g} \sim \frac{n^g}{g!}.$$

С другой стороны, заметим, что

$$2^{\frac{v}{4}} \leq 2^{\frac{1.1g}{4}} = 2^{0.55 \log_2 n + O(1)} = \Theta(n^{0.55}).$$

Таким образом, мы получаем

$$\begin{aligned} \sum_{v=1}^{\lfloor 1.1g \rfloor} \frac{\binom{2g}{v}^2 n^{2g-v} 2^{\frac{v^2}{4}} v!}{\binom{n}{v}^2 (g!)^2} &\sim \sum_{v=1}^{\lfloor 1.1g \rfloor} \binom{2g}{v}^2 n^{-v} 2^{\frac{v^2}{4}} v! \leq \\ &\leq \sum_{v=1}^{\lfloor 1.1g \rfloor} (2g)^{2v} n^{-v} 2^{\frac{v^2}{4}} v^v = \sum_{v=1}^{\lfloor 1.1g \rfloor} \left(\frac{(2g)^2 v 2^{v/4}}{n} \right)^v \leq \\ &\leq \sum_{v=1}^{\lfloor 1.1g \rfloor} (n^{-0.45+o(1)})^v = o(1). \end{aligned}$$

Теперь перейдем к доказательству того, что сумма в (3) является $o(1)$, для $v \in [\lfloor 1.1g \rfloor + 1, 2g - 1]$:

$$\begin{aligned} \sum_{v=\lfloor 1.1g \rfloor + 1}^{2g-1} \frac{\binom{2g}{v}^2 n^{2g-v} 2^{\frac{v^2}{4}} (2g-v+1)! 2^{2g-v+1}}{\binom{n}{v}^2 (g!)^2} &\sim \sum_{v=\lfloor 1.1g \rfloor + 1}^{2g-1} \binom{2g}{v}^2 n^{-v} 2^{\frac{v^2}{4}} (2g-v+1)! 2^{2g-v+1} = \\ &= \sum_{v=\lfloor 1.1g \rfloor + 1}^{2g-1} f(v), \end{aligned} \tag{4}$$

где

$$f(v) := \binom{2g}{v}^2 n^{-v} 2^{\frac{v^2}{4}} (2g-v+1)! 2^{2g-v+1}.$$

Заметим, что

$$\begin{aligned} \frac{f(v+1)}{f(v)} &= \frac{(2g-v)^2 2^{\frac{2v+1}{4}}}{(v+1)^2 n (2g-v+1) 2} > \frac{2^{\frac{1.1g}{2}}}{16g^3 n} = \\ &= \frac{2^{1.1 \log_2 n + O(1)}}{g^3 n} = \Theta\left(\frac{n^{0.1}}{g^3}\right) \rightarrow \infty, \quad n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Следовательно, $f(v)$ строго возрастает на отрезке $[\lfloor 1.1g \rfloor + 1, 2g - 1]$. Таким образом, мы можем оценить правую часть выражения (4) следующим образом

$$\begin{aligned} \sum_{v=\lfloor 1.1g \rfloor + 1}^{2g-1} f(v) &\leq g \cdot f(2g-1) = \\ &= g(2g)^2 n^{-2g+1} 2^{\frac{(2g-1)^2}{4} + 3} = 32g^3 n^{-(2g-1)} \left(2^{\frac{2g-1}{4}}\right)^{2g-1} = \\ &= 32g^3 \left(\frac{2^{\frac{2\lceil 2\log_2 n - 1 - \varepsilon \rceil - 1}{4}}}{n}\right)^{2g-1} \leq 32g^3 \left(\frac{2^{\frac{4\log_2 n - 1 - 2\varepsilon}{4}}}{n}\right)^{2g-1} = \\ &= 32g^3 2^{-\frac{(1+2\varepsilon)(2g-1)}{4}} = o(1). \end{aligned}$$

Следовательно, правая часть выражения (1) является $o(1)$, что завершает доказательство.

3. Заключение

Нам удалось доказать, что с вероятностью, стремящейся к 1, максимальный размер индуцированного пути в биномиальном двудольном случайном графе $G(n, n, p = 1/2)$ сконцентрирован в трех последовательных точках: $2g(n)$, $2g(n) + 1$ и $2g(n) + 2$, где $g(n) = \lceil 2\log_2 n - 1 - \varepsilon \rceil$. Эти результаты аналогичными методами можно обобщить на

случай произвольного $p = \text{const} \in (0, 1)$. Более интересной является задача обобщения этих результатов на случай $p = o(1)$. Ожидается, что если $p < n^{-a}$ для некоторого достаточно большого $a \in (0, 1)$, то результат о концентрации в двух точках перестанет быть выполненным. Кроме того, было бы также интересно доказать аналогичные результаты для модели случайного k -дольного графа для произвольного натурального $k \geq 2$, а также результаты о концентрации максимального размера индуцированных подграфов из других семейств — например, деревьев и лесов.

Список литературы

1. Bollobás B., Erdős P. Cliques in random graphs // Math. Proc. Camb. Phil. Soc. 1976. V. 80. P. 419–427.
2. Grimmett G.R., McDiarmid C.J.H. On colouring random graphs // Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. 1975. V. 77. P. 313–324.
3. Matula D.W. The largest clique size in a random graph // Tech. Rep. Dept. Comp. Sci. Southern Methodist University, Dallas, Texas, 1976.
4. Matula D. The Employee Party Problem // Notices of the American Mathematical Society. 1972. V. 19, N 2. P. A–382.
5. Krivelevich M., Sudakov B., Vu V.H., Wormald N.C. On the probability of independent sets in random graphs // Random Struct. Algorithms. 2003. V. 22(1). P. 1–14.
6. Dutta K., Subramanian C.R. On Induced Paths, Holes and Trees in Random Graphs // Proc. ANAL-CO. 2018. P. 168–177.
7. Kamaldinov D., Skorkin A., Zhukovskii M. Maximum sparse induced subgraphs of the binomial random graph with given number of edges // Discrete Appl. Math. 2021. V. 344(2). P. 112205.
8. Krivoshapko M., Zhukovskii M. Maximum induced forests in random graphs // Discrete Appl. Math. 2021. V. 305. P. 211–213.
9. Bohman T., Hofstad R. Two-Point Concentration of the Independence Number of the Random Graph // Forum of Mathematics, Sigma. 2024. V. 12. P. e24.
10. Buitrago Oropeza J.C. Maximum Induced Trees in Sparse Random Graphs // Dokl. Math. 2024. V. 109. P. 167–169.

References

1. Bollobás B., Erdős P. Cliques in random graphs. Math. Proc. Camb. Phil. Soc. 1976. V. 80. P. 419–427.
2. Grimmett G.R., McDiarmid C.J.H. On colouring random graphs. Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. 1975. V. 77. P. 313–324.
3. Matula D.W. The largest clique size in a random graph. Tech. Rep. Dept. Comp. Sci. Southern Methodist University, Dallas, Texas, 1976.
4. Matula D. The Employee Party Problem. Notices of the American Mathematical Society. 1972. V. 19, N 2. P. A–382.
5. Krivelevich M., Sudakov B., Vu V.H., Wormald N.C. On the probability of independent sets in random graphs. Random Struct. Algorithms. 2003. V. 22(1). P. 1–14.
6. Dutta K., Subramanian C.R. On Induced Paths, Holes and Trees in Random Graphs. Proc. ANAL-CO. 2018. P. 168–177.

7. *Kamaldinov D., Skorkin A., Zhukovskii M.* Maximum sparse induced subgraphs of the binomial random graph with given number of edges. *Discrete Appl. Math.* 2021. V. 344(2). P. 112205.
8. *Krivoshapko M., Zhukovskii M.* Maximum induced forests in random graphs. *Discrete Appl. Math.* 2021. V. 305. P. 211–213.
9. *Bohman T., Hofstad J.* Two-Point Concentration of the Independence Number of the Random Graph. *Forum of Mathematics, Sigma.* 2024. V. 12. P. e24.
10. *Buitrago Oropeza J.C.* Maximum Induced Trees in Sparse Random Graphs. *Dokl. Math.* 2024. V. 109. P. 167–169.

Поступила в редакцию 19.08.2024

УДК 517.98, 519.2

B. M. Бусовиков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Аппроксимация диффузионного процесса на бесконечномерном пространстве при помощи усреднения случайных сдвигов общего вида

Целью данной работы является изучение динамики диффузионного процесса на бесконечномерном пространстве, в частности, его аппроксимация при помощи случайных блужданий. Показано, что для любого распределения векторов довольно общего вида процесс усреднения случайного сдвига вдоль указанных векторов сходится к эволюции диффузионного процесса. Данный результат можно также рассматривать как аналог центральной предельной теоремы для операторозначных функций на гильбертовом пространстве.

Ключевые слова: конечно-аддитивная мера, трансляционно инвариантные меры на банаховых пространствах, случайные блуждания, теорема Чернова

V. M. Busovikov

Moscow Institute of Physics and Technology

Approximation of a diffusion process on an infinite-dimensional space using averaging of random shifts of general form

The purpose of this work is to study the dynamics of the diffusion process in an infinite-dimensional space, in particular, its approximation using random walks. It is shown that for any distribution of vectors of a fairly general form, the process of averaging a random shift along these vectors converges to the evolution of the diffusion process. This result can also be considered as an analogue of central limit theorem for operator-valued functions on a Hilbert space.

Key words: finitely additive measure, translation invariant measures on Banach spaces, random walks, Chernoff's theorem

1. Введение

Полугруппа $U(t)$, задающая эволюцию диффузионного процесса на сепарабельном вещественном гильбертовом пространстве E , может быть получена как математическое ожидание случайного сдвига на вектор, имеющий гауссовское распределение с параметрами, зависящими от t . При этом, в силу того, что $U(t)$ является полугруппой, последовательность усреднений $V_n(t) = (U(t/n))^n$ равна $U(t)$ для любого n . Однако для негауссовского распределения μ математическое ожидание случайного сдвига $V(t)f(x) = \mathbb{E}_{\mu(h)}f(x - h)$ не является полугруппой, соответственно осмысленным является вопрос о сходимости последовательности $(V(t/n))^n$ к полугруппе $U(t)$ или к какой-либо другой операторозначной функции $\mathbb{R}_+ \rightarrow B(E)$. По аналогии с центральной предельной теоремой для случайных величин на \mathbb{R} , которая изучает сходимость по распределению усреднений одинаково

распределенных независимых величин $\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n (x_k - \mathbb{E}x_k)$, установление сходимости последовательности $(V(t/n))^n$ можно считать аналогом центральной предельной теоремы для композиции независимых одинаково распределенных операторов сдвига. В теореме 9 установлена обобщенная сходимость по распределению (см. подробнее [1]) последовательности усреднений случайных сдвигов на вектор $\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n h_k$ к случайному сдвигу на гауссовский вектор. Ключом к доказательству сходимости является теорема Чернова, которую можно сформулировать следующим образом.

Теорема 1 (Chernoff, [2], Corollary 5.3 chapter III). *Пусть функция $V : \mathbb{R}_+ \rightarrow B(H)$ удовлетворяет условиям*

- 1) $V(0) = I$;
- 2) $\|V(t)^k\| \leq M \exp(wkt)$ для некоторых $M, k \in \mathbb{R}$ и всех $k \in \mathbb{N}, t \in \mathbb{R}_+$;
- 3) *найдется такое линейное подпространство $D \subset H$ и оператор A на нем, такие, что для всех $x \in D$ выполнено*

$$Ax = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (V(t)x - x);$$

- 4) *либо найдется такое $\lambda_0 > w$, что и D и $(\lambda_0 - A)D$ плотны в H , либо замыкание \bar{A} оператора A является генератором некоторой сильно-непрерывной однопараметрической полугруппы.*

Тогда замыкание \bar{A} оператора A порождает сильно-непрерывную полугруппу $T(t) : \mathbb{R}_+ \rightarrow B(H)$, для которой выполнена сходимость

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} \|T(t)x - (V(t/k))^k x\|_H = 0$$

для всех $x \in H$ и также выполнено неравенство

$$\|T(t)\|_{B(H)} \leq M \exp(wt).$$

Для того чтобы определить на E оператор Лапласа, нам потребуется построить специальную меру и ввести необходимые пространства интегрируемых функций. Выбор меры на E сам по себе является нетривиальной задачей. Как известно (см. [3, 4]), на бесконечномерном топологическом векторном пространстве не существует аналога меры Лебега, т.е. не существует такой нетривиальной меры, удовлетворяющей одновременно следующим свойствам:

- 1) борелевость,
- 2) счётная аддитивность,
- 3) σ -конечность,
- 4) локальная конечность,
- 5) инвариантность относительно сдвига на любой вектор этого пространства.

В силу несуществования нетривиальной меры, удовлетворяющей сразу всем перечисленным свойствам, изучались меры, инвариантные относительно сдвига на векторы из некоторого максимального допустимого подпространства, как в [5]. Или, например, не σ -конечные меры, как в [6] или [7, 8].

В данной работе мы остановимся на мере, предложенной В. Ж. Сакбаевым [9–12], поскольку она является трансляционно инвариантной, сдвиг квадратично интегрируемой по ней функции на произвольный вектор будет унитарным оператором, а результат усреднений случайных сдвигов — самосопряженным оператором. Также в этом случае оператор Лапласа будет самосопряженным и его область определения можно точно установить. Отсутствие меры Лебега на гильбертовом пространстве не позволяло перенести эти известные факты о конечномерных случайных блужданиях на бесконечномерный случай.

2. Пространства интегрируемых функций

В этом разделе мы рассмотрим конструкцию конечно-аддитивной меры на вещественном сепарабельном гильбертовом пространстве E , инвариантной относительно сдвигов, и введем все необходимые пространства функций для дальнейшей работы. Конструкция зависит от выбора ортонормированного базиса, так что здесь и далее мы фиксируем ортонормированный базис $\mathcal{E} = \{e_1, e_2, \dots\}$.

Под $\langle a, b \rangle$ будем понимать конечный промежуток с концами a и b при $a \leq b$, и пустое множество при $a > b$. При этом если $a = b$, множество $\langle a, b \rangle$ может быть как одноточечным, так и пустым в зависимости от типа промежутка.

Определение 1. Будем называть множество бруском, если оно представляется в виде

$$\Pi = \{x \in E : (x, e_j) \in \langle a_j, b_j \rangle \forall j \in \mathbb{N}\}, \quad a, b \in l_\infty.$$

Если ряд

$$\sum_{j=1}^{\infty} \max\{0, \ln(b_j - a_j)\}$$

сходится, то брус будем называть *измеримым*. Множество измеримых брусов обозначим за p .

На измеримых брусах введем функцию множества $\lambda : p \rightarrow [0, +\infty)$ следующим образом:

$$\lambda(\Pi_{a,b}) = \begin{cases} \exp\left(\sum_{j=1}^{\infty} \ln(b_j - a_j)\right), & \Pi_{a,b} \neq \emptyset, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Теорема 2 [9]. *Функция множества λ является аддитивной функцией на p и однозначно продолжается по аддитивности на минимальное кольцо r , содержащее p .*

Для произвольного множества $X \subset E$ введем соответственно верхнюю и нижнюю меру стандартным образом:

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}(X) &= \inf_{Q \in r, X \subset Q} \lambda(Q), \\ \underline{\lambda}(X) &= \sup_{Q \in r, Q \subset X} \lambda(Q). \end{aligned}$$

Множества, нижняя и верхняя мера которых совпадают и конечны, мы будем называть *измеримыми*. Измеримые множества образуют кольцо, которое мы обозначим за R , а функция множества λ , продолженная на R по правилу $\lambda(X) = \bar{\lambda}(X) = \underline{\lambda}(X) < +\infty$, является конечно-аддитивной мерой.

Введем \mathbb{C} -линейное пространство $\mathcal{S}(E, R, \mathbb{C})$, состоящее из линейных комбинаций индикаторных функций из кольца R . Определим на нем неотрицательно определенную эрмитову полуторалинейную форму по следующему правилу: для любых $A, B \in R$ положим $\beta(\chi_A, \chi_B) = \lambda(A \cap B)$, а для произвольных функций $u, v \in \mathcal{S}(E, R, \mathbb{C})$ вида

$u = \sum_{j=1}^n c_j \chi_{A_j}$, $v = \sum_{k=1}^m b_k \chi_{B_k}$ положим

$$\beta(u, v) \equiv (u, v)_{\mathcal{H}} = \left(\sum_{j=1}^n c_j \chi_{A_j}, \sum_{k=1}^m b_k \chi_{B_k} \right) = \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n \overline{b_k} c_j (\chi_{A_j}, \chi_{B_k}).$$

Обозначим за $\mathcal{S}_2(E, R, \mathbb{C})$ линейное подпространство $\mathcal{S}(E, R, \mathbb{C})$, состоящее из таких функций f , для которых $\beta(f, f)$ конечно, а за $\mathcal{N}_2(E, R, \mathbb{C})$ — линейное подпространство $\mathcal{S}_2(E, R, \mathbb{C})$, состоящее из функций f , для которых выполнено $\beta(f, f) = 0$.

Определение 2. Пополнение факторпространства $\mathcal{S}_2(E, R, \mathbb{C})/\mathcal{N}_2(E, R, \mathbb{C})$ по норме $\|f\| = \sqrt{\beta(f, f)}$ будем обозначать \mathcal{H} или $L_2(E, R, \mathbb{C})$ и называть функциями, квадратично интегрируемыми относительно меры λ . Функцию скалярного произведения на нем будет играть форма β .

Лемма 1 [10, 12]. *Пространство \mathcal{H} не сепарабельно.*

Определение 3. Будем говорить, что функция $f \in \mathcal{H}$ дифференцируема вдоль направления $h \in E$, если найдется такая функция $g \in \mathcal{H}$, что

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left\| \frac{f(x + th) - f(x)}{t} - g(x) \right\| = 0.$$

Функцию $g(x)$ будем в таком случае называть производной f вдоль вектора h .

В случае, если h равен базисному вектору e_j , производную вдоль h будем обозначать ∂_j . Также при помощи определения 3 можно определить и производные высших порядков.

Определение 4. Пусть D — невырожденный, положительно определенный оператор на E , диагональный в базисе \mathcal{E} . Обозначим за d_k его диагональные элементы.

Определим пространство Соболева $W_{2,D}^l = \mathcal{H}_D^l$ порядка l как подпространство \mathcal{H} , состоящее из функций f , у которых корректно определены все производные $\partial_k^l f \in \mathcal{H}$ и конечна норма

$$\|f\|_{W_{2,D}^l}^2 = \|f\|_{\mathcal{H}}^2 + \sum_{k=1}^{\infty} d_k \|\partial_k^l f\|_{\mathcal{H}}^2.$$

Скалярное произведение в пространстве Соболева положим равным

$$(f, g)_{W_{2,D}^l} = (f, g)_{\mathcal{H}} + \sum_{k=1}^{\infty} d_k (\partial_k^l f, \partial_k^l g)_{\mathcal{H}}. \quad (1)$$

Лемма 2 [15]. *Пространство $W_{2,D}^l$ со скалярным произведением (1) является гильбертовым.*

3. Усреднение случайных сдвигов

В этом разделе мы введем полугруппу усреднений случайных сдвигов на гауссовский вектор и рассмотрим свойства сглаженных функций, которые получаются при помощи таких усреднений.

Перед тем как говорить о случайных сдвигах, введем оператор детерминированного сдвига вдоль вектора h :

$$S_h f(x) = f(x - h), \quad f \in \mathcal{H}, h \in E.$$

Введем в E линейное подпространство $L_1(E)$, состоящее из таких векторов h , для которых

$$\|h\|_{L_1(\mathcal{E})} = \sum_{k=1}^{\infty} |(h, e_k)|$$

конечно.

Лемма 3 [11, теорема 4.1]. Однопараметрическая группа унитарных операторов $S_{th}, t \in \mathbb{R}$ является сильно непрерывной в том и только в том случае, если $h \in L_1(\mathcal{E})$.

Лемма 4. Пусть $h \in L_1(\mathcal{E})$. Пусть $P_m : E \rightarrow E$ — оператор проекции на первые m базисных координат. В таком случае первые m координат $P_m h$ в базисе \mathcal{E} совпадают с координатами h , а остальные равны нулю. Тогда для любого $f \in \mathcal{H}$ выполнено

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} \|(S_{th} - S_{tP_m h})f\|_{\mathcal{H}} = 0. \quad (2)$$

Доказательство

Для характеристической функции бруса нулевой меры утверждение тривиально. Рассмотрим произвольный брус $\Pi = \Pi_{a,b}$ положительной меры со сторонами $[a_k, b_k]$. Оценим норму разности $S_{te_j} \chi_{\Pi} - \chi_{\Pi}$ в предположении, что $t < b_j - a_j$:

$$\|S_{te_j} \chi_{\Pi} - \chi_{\Pi}\|_{\mathcal{H}}^2 = 2\lambda(\Pi) - 2\lambda((\Pi + te_j) \cap \Pi). \quad (3)$$

Мера пересечения $(\Pi + te_j) \cap \Pi$ непуста в силу условия $t < b_j - a_j$, следовательно

$$\lambda((\Pi + te_j) \cap \Pi) = \prod_{k=1}^{j-1} (b_k - a_k) \cdot (b_j - a_j - t) \cdot \prod_{k=j+1}^{\infty} (b_k - a_k) = \frac{b_j - a_j - t}{b_j - a_j} \lambda(\Pi). \quad (4)$$

Подставим (4) в (3):

$$\|S_{te_j} \chi_{\Pi} - \chi_{\Pi}\|_{\mathcal{H}}^2 = 2t \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{b_k - a_k} \lambda(\Pi).$$

В силу положительности меры бруса Π инфимум $\{b_k - a_k\}_{k=1}^{\infty}$ положителен, и поэтому

$$\|S_{te_j} \chi_{\Pi} - \chi_{\Pi}\|_{\mathcal{H}}^2 = tC_{\Pi},$$

где константа C_{Π} зависит только от бруса Π .

Следовательно,

$$\|(S_{th} - S_{tP_m h})\Pi\|_{\mathcal{H}} \leq \sum_{k=m+1}^{\infty} \|S_{th_k e_k} \Pi - \Pi\| \leq tC_{\Pi} \sum_{k=m+1}^{\infty} |h_k|.$$

Переходя к супремуму,

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} \|(S_{th} - S_{tP_m h})f\|_{\mathcal{H}} \leq tC_{\Pi} \sum_{k=m+1}^{\infty} |h_k|,$$

что доказывает верность сходимости (2) для характеристических функций измеримых брусов. А поскольку характеристические функции брусов являются плотными в \mathcal{H} , то условие (2) верно и для производной квадратично интегрируемой функции.

■

Напомним (см. [13]), что гауссовской мерой на гильбертовом пространстве E называется конечно-аддитивная функция множества на минимальной алгебре $\mathcal{A}(E)$, содержащей цилиндрические множества E , сужение которой на совокупность цилиндрических множеств с конечномерными основаниями является гауссовской мерой на конечномерном евклидовом пространстве. Гауссовская мера ν , определенная на σ -алгебре $\mathcal{C}(E)$ (минимальной σ -алгебре, содержащей цилиндрические подмножества пространства E , порождаемые функционалами из E), имеет единственное счетно аддитивное продолжение до меры на σ -алгебре $\mathcal{B}(E)$ борелевских подмножеств пространства E тогда и только тогда (см. [13], теоремы 2.1, 2.3), когда она обладает ядерным ковариационным оператором D .

Пусть ν_D , $t \geq 0$, – однопараметрическое семейство гауссовых мер на пространстве E с нулевым математическим ожиданием и ковариационным оператором tD (ядерность ковариационного оператора меры эквивалентна существованию у меры конечного второго момента, теорема 2.1, [13]). Однопараметрическое семейство гауссовых мер ν_{tD} , $t \geq 0$, на пространстве E образует полугруппу относительно операции свертки (см. [14]):

$$\nu_{tD} * \nu_{sD} = \nu_{(t+s)D} \quad \forall t, s \in R_+.$$

Определение 5. Определим однопараметрическое семейство $\mathcal{U}_D(t)$, $t \geq 0$ преобразований пространства \mathcal{H} как усреднение случайного сдвига S_h при условии, что случайный вектор $h \in E$ в момент времени $t \geq 0$ задается мерой ν_{tD} на пространстве E :

$$\mathcal{U}_D(t)u(x) = \int_E \mathbf{S}_h u(x) d\nu_{tD}(h),$$

где интеграл понимается в смысле Петтиса:

$$(\mathcal{U}_D(t)u, v)_{\mathcal{H}} = \int_E (\mathbf{S}_h u, v)_{\mathcal{H}} d\nu_{tD}(h) \quad \forall v \in \mathcal{H}.$$

Теорема 3 [10, лемма 8]. *Пусть ν_D – гауссовская мера на пространстве E с ядерным ковариационным оператором D , диагональным в базисе \mathcal{E} . Тогда однопараметрическое семейство операторов $\mathcal{U}_D(t)$, $t \geq 0$, является полугруппой сжимающих самосопряженных операторов:*

$$\mathcal{U}_D(t)\mathcal{U}_D(s) = \mathcal{U}_D(t+s) \quad \forall t, s \in R_+.$$

Теорема 4 [10, теорема 2]. *Пусть D – невырожденный неотрицательный ядерный оператор в пространстве E , диагональный в базисе \mathcal{E} . Пусть также оператор $D^{1/2}$ является ядерным. Тогда полугруппа $\mathcal{U}_D(t)$, $t \geq 0$, является сильно непрерывной.*

Теорема 5 [15]. *Генератором полугруппы $\mathcal{U}_D(t)$ является самосопряженный оператор, определенный на $W_{2,D}^2$, действующий по правилу*

$$\Delta_D f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} d_k \partial_k^2 f(x).$$

Теорема 6 [12, лемма 7.1]. *Пусть D – невырожденный неотрицательный ядерный оператор в пространстве E , диагональный в базисе \mathcal{E} . Пусть также оператор $D^{1/2}$ является ядерным. Тогда функция $f = \mathcal{U}_{tD}u$, $t > 0$, $u \in \mathcal{H}$ является бесконечно дифференцируемой вдоль всех базисных направлений, причем верна оценка*

$$\|\partial_j^l f\|_{\mathcal{H}} = \left\| \frac{d^l}{dx_j^l} \mathcal{U}_{tD}u \right\|_{\mathcal{H}} \leq \frac{c_l}{(td_j)^{l/2}} \|u\|_{\mathcal{H}}, \quad (5)$$

где константа c_l зависит только от порядка производной l . Так же для набора индексов j_1, \dots, j_k выполнено

$$\|\partial_{j_1} \dots \partial_{j_k} \mathcal{U}_{tD} f\|_{\mathcal{H}} \leq \frac{c_k}{\sqrt{d_{j_1} \dots d_{j_k}}} \|f\|_{\mathcal{H}}.$$

Ввиду последнего свойства мы будем называть функции из линейного пространства

$$C_D = \{\mathcal{U}_{tD} u, t > 0, u \in \mathcal{H}\}$$

гладкими. Заметим, что несмотря на бесконечную дифференцируемость вдоль базисных направлений, гладкие функции не обязаны быть непрерывными вдоль других направлений.

При помощи неравенства (5) и сильной непрерывности полугруппы \mathcal{U}_{tD} можно доказать следующий результат.

Теорема 7 [15, теорема 9]. Пусть D – невырожденный неотрицательный ядерный оператор в гильбертовом пространстве E , такой, что оператор D^γ является ядерным при некотором $\gamma > 0$. Пусть $l \in \mathbb{N}$. Тогда если $b \geq l\alpha + \gamma$ при некотором $\alpha \in [\gamma, +\infty)$, то выполняется условие $C_{D^\alpha}^\infty(E) \subset W_{2,D^b}^l(E)$.

Если, кроме того, выполнено условие $\alpha \geq 2\gamma$, то линейное многообразие $C_{D^\alpha}^\infty(E)$ плотно в пространстве $W_{2,D^b}^l(E)$.

В частности, если D – невырожденный неотрицательный ядерный оператор, такой что $D^{1/2}$ ядерный, то $C_{D^{1/2}}^\infty$ лежит в $W_{2,D}^1$ и плотно в нем.

4. Формула Тейлора и усреднение случайных сдвигов на негауссовские векторы

Теорема 8. Пусть D – невырожденный положительно-определенный ядерный оператор с собственным базисом \mathcal{E} , такой что $D^{1/2}$ тоже ядерный. Пусть $h \in L_1(\mathcal{E})$ такой вектор, что последовательность $D^{-1/2}h$ также лежит в $L_1(\mathcal{E})$. Тогда для функции $f = \mathcal{U}_{sD}u(x) \in C_D^\infty$ выполнено

$$S_{th}f(x) = \sum_{k=0}^n \frac{t^k}{k!} d^k f(x)(h, \dots, h) + r_{n+1},$$

где

$$d^k f(x)(h, \dots, h) = \sum_{j_1, \dots, j_k \in \mathbb{N}} (h_{j_1} \dots h_{j_k}) \frac{d^k}{dx_{j_1} \dots dx_{j_k}} f(x)$$

и

$$\|r_{n+1}\|_{\mathcal{H}} \leq \frac{t^{n+1}}{s^{(n+1)/2} (n+1)!} \|D^{-1/2}h\|_{L_1(\mathcal{E})}^{n+1} \|u\|_{\mathcal{H}}.$$

Доказательство

Пусть $h^{(m)} = P_m h$. Рассмотрим функции

$$\varphi(t) = f(x + th) = S_{th}f(x), \quad \varphi_m(t) = f(x + th^{(m)}) = S_{th^{(m)}}f(x).$$

В силу леммы 4 выполнена поточечная сходимость:

$$\forall t \lim_{m \rightarrow \infty} \|\varphi_m(t) - \varphi(t)\| = 0.$$

По теореме 3, у $f(x)$ определены все смешанные производные вдоль координатных направлений, и выполнено неравенство

$$\left\| \frac{d^k}{dx_{j_1} \dots dx_{j_k}} f(x) \right\| \leq \frac{c_k}{\sqrt{s^k d_{j_1} \dots d_{j_k}}} \|u\|.$$

При этом дифференциалы любого порядка функции φ_m фундаментальны по норме \mathcal{H} равномерно по t :

$$\begin{aligned} \left\| \frac{d^k}{dt^k} \varphi_m(t) - dfrac{d^k dt^k}{} \varphi_{m+p}(t) \right\| &\leq t^k \sum_{\substack{j_1, \dots, j_k=1 \\ \exists j_k \geq m+1}}^{m+p} |h_{j_1}| \dots |h_{j_k}| \cdot \left\| dfrac{d^k dx_{j_1} \dots dx_{j_k}}{} f(x) \right\| \leq \\ &\leq c_k t^k \left(\sum_{k=1}^{m+p} \frac{|h_k|}{\sqrt{sd_k}} \right)^k \|u\| \leq t^k c_k s^{-k/2} \|D^{-1/2} h\|_{L_1(\mathcal{E})}^k \|u\|. \end{aligned}$$

Следовательно, по теореме о равномерной сходимости производных, можно доказать по индукции, что функция $\varphi(t)$ также бесконечно дифференцируема и

$$\frac{d^k}{dt^k} \varphi(t) = t^k \sum_{j_1, \dots, j_k \in \mathbb{N}} (h_{j_1} \dots h_{j_k}) \frac{d^k}{dx_{j_1} \dots dx_{j_k}} f(x).$$

Для $S_{th^{(m)}} f(x)$ можно написать формулу Тейлора остаточным членом в форме Лагранжа [16, теорема 12.4.4]:

$$f(x - th^{(m)}) = \sum_{k=0}^n \frac{t^k}{k!} d^k f(x)(h^{(m)}, \dots, h^{(m)}) + \frac{t^{n+1}}{n!} \int_0^1 (1-\theta)^n d^n f(x + \theta th^{(m)})(h^{(m)}, \dots, h^{(m)}) d\omega,$$

откуда

$$\begin{aligned} \left\| f(x - th^{(m)}) - \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} d^k f(x)(h^{(m)}, \dots, h^{(m)}) \right\| &\leq \\ &\leq \frac{t^{n+1}}{(n+1)!} \|d^n f(x + \theta th^{(m)})(h^{(m)}, \dots, h^{(m)})\| \leq \\ &\leq \frac{t^{n+1}}{(n+1)!} s^{-(n+1)/2} \|D^{-1/2} h\|_{L_1(\mathcal{E})}^{n+1} \|u\|, \end{aligned}$$

где оценка не зависит от m . Переходя к пределу при $m \rightarrow \infty$, получаем формулу Тейлора для $\varphi(t)$. ■

Лемма 5. Пусть $h \in E$ — случайный вектор с нулевым матожиданием и диагональным в базисе \mathcal{E} оператором ковариации D , корень из которого ядерный. Пусть также существует ядерный оператор B , диагональный в базисе \mathcal{E} , корень из которого тоже ядерный, такой, что $B^{-1/2} h \in L_1(\mathcal{E})$ почти наверно и $\mathbb{E}_h \|B^{-1/2} h\|_{L_1(\mathcal{E})}^3 < +\infty$. Тогда для любого $f \in C_B^\infty$ функция

$$A(t) = \mathbb{E}_h S_{th} f(x)$$

двойжды дифференцируема в нуле, и выполнено

$$\|\mathbb{E}_h S_{th} f(x) - f(x) - \frac{1}{2} t^2 \Delta_D f(x)\| \leq C t^3.$$

Доказательство

Для каждого фиксированного $h = h(\omega)$, такого, что $B^{-1/2} h \in L_1(\mathcal{E})$, справедливо равенство

$$S_{th} f(x) = f(x) + t \sum_{k=1}^{\infty} h_k \partial_k f(x) + \frac{t^2}{2} \sum_{k,l=1}^{\infty} h_k h_l \partial_k \partial_l f(x) + r(t, h),$$

$$\text{где } r(t, h) \leq \frac{t^3}{6} \|B^{-1/2} h\|_{L_1(\mathcal{E})}^3 \|u\|.$$

Переходя к матожиданию по h , получаем

$$\mathbb{E}_h S_{th} f(x) = f(x) + \frac{t^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} d_k \frac{d^2}{dx_k^2} f(x) + \mathbb{E}_h r(h, t),$$

где по условию

$$\|\mathbb{E}_h r(h, t)\| \leq C t^3.$$

■

Теорема 9. Пусть $h \in E$ — случайный вектор с распределением μ , обладающий следующими свойствами:

- 1) $\mathbb{E}h = 0$;
- 2) $\mathbb{E}h^2 = D$, где D диагонален в \mathcal{E} и $D^{1/3}$ ядерный;
- 3) вектор $D^{-1/3}h$ лежит в $L_1(\mathcal{E})$ почти наверно;
- 4) $\mathbb{E}\|D^{-1/3}h\|_{L_1(\mathcal{E})}^3 < +\infty$.

Введем полугруппу усреднений сдвига на вектор h :

$$V(t) = \mathbb{E}S_{\sqrt{t}h} = \int_E S_{\sqrt{t}h} d\mu(h).$$

Тогда выполнена сходимость

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} \left\| \left[\left(V \left(\frac{t}{n} \right) \right)^n - e^{\Delta_D t} \right] u \right\|_{\mathcal{H}} = 0 \quad \forall T > 0, \forall u \in \mathcal{H}. \quad (6)$$

Доказательство

Положим $B = D^{2/3}$ и воспользуемся леммой 5, которая гарантирует нам, что $V(t^2)$ дважды дифференцируема в нуле, и

$$\|V(t^2)f(x) - f(x) - \frac{1}{2}t^2 \Delta_D f(x)\| \leq C t^3$$

для любого $f \in C_{D^{2/3}}$. Заметим, что в силу того, что $D^{1/3}$ ядерный, пространство $C_{D^{2/3}}$ плотно в \mathcal{H} .

Отсюда следует, что $V(t)$ дифференцируема в нуле, и ее производная равна плотно определенному оператору $\frac{1}{2}\Delta_D$, который, по теореме 3, является генератором сильно непрерывной полугруппы. При этом, очевидно, $V(0) = I$ и $\|V(t)\| \leq 1$. Воспользовавшись теоремой Чернова, получим сходимость (6). ■

Заключение

В данной работе была исследована динамика диффузионного процесса на бесконечномерном пространстве с использованием аппроксимации через случайные блуждания. Основной целью исследования было показать, что процесс усреднения случайного сдвига вдоль указанных векторов для любого распределения векторов общего вида сходится к эволюции диффузионного процесса.

Наши результаты подтверждают, что предложенная методология является эффективным инструментом для моделирования и анализа сложных диффузионных процессов в бесконечномерных пространствах. В частности, мы продемонстрировали, что аналог центральной предельной теоремы применим к операторозначным функциям на гильбертовом пространстве, что открывает новые перспективы для дальнейших исследований в этой области.

Полученные выводы имеют важное значение для теоретической и прикладной математики, особенно в контексте изучения стохастических процессов и их применений в различных научных и инженерных дисциплинах. В будущем планируется расширить данное исследование, включив в него более сложные типы случайных блужданий и другие виды бесконечномерных пространств, чтобы углубить понимание и расширить область применения полученных результатов.

Таким образом, проведенное исследование не только подтвердило гипотезу о сходстве процессов усреднения случайного сдвига к диффузионному процессу, но и заложило основу для дальнейших исследований в данной области, способствуя развитию математических методов анализа сложных систем.

Список литературы

1. *Sakbaev V.Z., Shmidt E.V., Shmidt V.* Limit distribution for compositions of random operators // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2022. V. 43. N 7. P. 1740–1754.
2. *Engel K.-J., Nagel R., Brendle S.* One-parameter semigroups for linear evolution equations. Springer, 2000. V. 194.
3. *Vakhania N., Tarieladze V., Chobanyan S.* Probability Distributions on Banach Spaces. V. 14. Springer, Georgia, 2012.
4. *Вейль А.* Интегрирование в топологических группах и его применение. Москва : Изд. иностр. лит., 1950.
5. *Vershik A.M.* Does there exist a Lebesgue measure in the infinite-dimensional space? // Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. 2007. V. 259, N 1. P. 248–272. (in Russian).
6. *Baker R.* «Lebesgue measure» on R^∞ // Proceedings of the AMS. 1991. V. 113, N 4. P. 1023–1029.
7. *Завадский Д.В.* Инвариантные относительно сдвигов меры на пространствах последовательностей // Труды МФТИ. 2017. Т. 9, № 4. С. 142–148.
8. *Завадский Д.В.* Аналоги меры Лебега в пространствах последовательностей и классы интегрируемых по ним функций // Итоги науки и техники. Серия «Современная математика и ее приложения. Тематические обзоры». Москва : ВИНИТИ, 2018. Т. 151. С. 37–44.
9. *Сакбаев В.Ж.* Конечно-аддитивные меры на банаевых пространствах, инвариантные относительно сдвигов. Квантовая динамика и функциональные интегралы // Материалы научной конференции ИПМ им М.В. Келдыша РАН. Россия. Москва, 14 марта 2016 г. Москва : ИПМ им. Келдыша, 2016.
10. *Сакбаев В.Ж.* Усреднение случайных блужданий и меры на гильбертовом пространстве, инвариантные относительно сдвига // ТМФ. 2017. Т. 191, № 3. С. 886–909.
11. *Сакбаев В.Ж.* Полугруппы преобразований пространства функций, квадратично интегрируемых по трансляционно инвариантной мере на банаевом пространстве // Итоги науки и техники. Серия «Современная математика и ее приложения. Тематические обзоры». Москва : ВИНИТИ, 2018. Т. 151. С. 73–90.
12. *Сакбаев В.Ж.* Случайные блуждания и меры на гильбертовом пространстве, инвариантные относительно сдвигов и поворотов. Дифференциальные уравнения. Математическая физика // Итоги науки и техн. Сер. Соврем. мат. и ее прил. Темат. обз. 140. Москва : ВИНИТИ, 2017. С. 88–118.
13. *Го X.С.* Гауссовские меры в банаевых пространствах. Москва : Мир, 1979.
14. *Богачев В.И.* Гауссовские меры. Москва : Физматлит, 1997.

15. *Бусовиков В.М., Сакбаев В.Ж.* Пространства Соболева функций на гильбертовом пространстве с трансляционно инвариантной мерой и аппроксимации полугрупп // Известия Российской академии наук. Серия математическая. 2020. Т. 84. № 4. С. 79–109.

16. *Bogachev V.I., Smolyanov O.G.* Real and functional analysis. Springer, 2020.

References

1. *Sakbaev V.Z., Shmidt E.V., Shmidt V.* Limit distribution for compositions of random operators. Lobachevskii Journal of Mathematics. 2022. V. 43. N 7. P. 1740–1754.
2. *Engel K.-J., Nagel R., Brendle S.* One-parameter semigroups for linear evolution equations. Springer, 2000. V. 194.
3. *Vakhania N., Tarieladze V., Chobanyan S.* Probability Distributions on Banach Spaces. V. 14. Springer, Georgia, 2012.
4. *Weil A.* L'intégration dans les groupes topologiques et ses applications. Moscow : Izd. In. Lit., 1950. (in Russian).
5. *Vershik A.M.* Does there exist a Lebesgue measure in the infinite-dimensional space? Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. 2007. V. 259, N 1. P. 248–272.
6. *Baker R.* «Lebesgue measure» on R^∞ . Proceedings of the AMS. 1991. V. 113, N 4. P. 1023–1029.
7. *Zavadsky D.V.* Shift-invariant measures on sequence spaces Proceedings of MIPT, 2017. V. 9. N 4. P. 142–148. (in Russian).
8. *Zavadsky D.V.* Analogs of the Lebesgue measure in spaces of sequences and classes of functions integrable with respect to these measures. The results of science and technology. The series «Modern computer science and its applications. Thematic reviews». Moscow : VINITI, 2018. V. 151. P. 37–44. (in Russian).
9. *Sakbaev V.Zh.* Finite-additive measures on Banach spaces, invariant with respect to shifts. Quantum dynamics and functional integrals. Materials of the scientific conference of the IPM named after M.V. Keldysh of the Russian Academy of Sciences. Russia. Moscow, 14 March 2016. Moscow : IPM named after Keldysh, 2016. (in Russian).
10. *Sakbaev V.Zh.* Averaging of random walks and shift-invariant measures on a Hilbert space. Theor. Math. Phys. 2017. V. 191, N 3. P. 886–909. (in Russian).
11. *Sakbaev V.Zh.* Semigroups of transformations of the space of functions quadratically integrable by a translationally invariant measure on a Banach space. Results of science and technology. The series «Modern mathematics and its applications. Thematic reviews». Moscow : VINITI, 2018. V. 151. P. 73–90. (in Russian).
12. *Sakbaev V.Zh.* Random walks and measures on Hilbert space that are invariant with respect to shifts and rotations. Mathematical physics. Results of science and technology. Ser. Lie. mate. and her adj. Thematic overview 140. Moscow : VINITI, 2017. P. 88–118. (in Russian).
13. *Kuo H.H.* Gaussian measures in banach spaces. Moscow : Mir, 1979. (in Russian).
14. *Bogachev V.* Gaussian measures. Moscow : Fizmatlit, 1997. (in Russian).
15. *Busovikov V.M., Sakbaev V.Zh.* Sobolev spaces of functions on a Hilbert space endowed with a translation-invariant measure and approximations of semigroups. Izvestiya RAS: Mathematics. 2020. V. 84, N 4. P. 79–109. (in Russian).
16. *Bogachev V.I., Smolyanov O.G.* Real and functional analysis. Springer, 2020.

УДК 339.163.4

Д. В. Зелезецкий

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Глубокое обучение в задаче прогнозирования финансовых временных рядов

Рассматривается задача прогнозирования временных рядов цен финансовых инструментов, а также обсуждается проблематика подбора функции потерь для прогнозирования данных со спекулятивным интересом. В ходе исследования производится проверка ряда нейросетевых архитектур (LSTM, Transformer, TSMixer), затем наилучшая модель интегрируется в торговый алгоритм, который оптимизируется в дальнейшем по своим гиперпараметрам. На последнем этапе производится тестирование полученного торгового алгоритма.

Ключевые слова: финансовые временные ряды, нейросетевое прогнозирование, алгоритмическая торговля, создание торговой стратегии

D. V. Zelezetsky

Moscow Institute of Physics and Technology

Deep learning in financial time series forecasting

Deep learning based financial time series forecasting is considered during the work. Moreover, the problem of selecting a loss function for predicting data with speculative interest is also discussed. During the research, a number of neural network architectures (LSTM, Transformer, Tsmuxer) are tested, then the best model is integrated into a trading algorithm, which is further optimized according to its hyperparameters. At the last stage, the resulting trading algorithm is tested.

Key words: financial time series, neural network forecasting, algorithmic trading, creating a trading strategy

1. Введение

Задача прогнозирования финансовых временных рядов представляет интерес из-за ряда особенностей, которыми обладают финансовые данные, поведение которых сложно описывается классическими эконометрическими моделями, которые неспособны обобщить сложные закономерности временного ряда. Среди широкого перечня особенностей данной задачи остановимся на двух основных:

- 1) **Сложность их описания.** Финансовые временные ряды, в частности цены акций, сложно описываются с математической точки зрения, так как не имеют постоянного тренда, сезонной и циклической компоненты, а также постоянного среднего и дисперсии. Движение цены хаотично, а следовательно, плохо обобщаемо большинством моделей [1]. Принято считать, что поведение цены акции схоже с поведением мартингала, стохастического процесса, наилучшим прогнозом на следующий временной шаг которого является его текущее значение.

- 2) **Отсутствие единых стимулов для всего рынка.** Рассматривая поведение цены акций с финансовой точки зрения, следует отметить, что игроки отличаются друг от друга своими стимулами к покупке и продаже. Разные группы игроков ориентируются на разные источники данных при принятии решения о совершении транзакции, следовательно, не существует единых подходов к выбору признакового описания временного ряда, которое в полной мере определяло бы его поведение. Среди наиболее популярных подходов можно отметить использование технических индикаторов, анализ новостей и использование фундаментального анализа. Как правило, использование технических индикаторов обусловлено высокой частотой совершения операций, в то время как анализ новостей или отчётностей применяется в среднесрочном и долгосрочном инвестировании.
- 3) **Специфика функции потерь для обучения нейросети.** В отличие от других временных рядов, прогнозирование цен акций, как правило, не носит исключительно исследовательский характер, а сопряжено со спекулятивными интересами. Следовательно, как будет показано позднее, классические подходы к выбору функции потерь не выполняют всех требований, накладываемых на них.

Успех нейросетевых архитектур в задачах моделирования последовательностей [2] говорит об их способности обобщать данные и находить в них сложные закономерности. В частности, успехи моделей семейства Transformer в задачах обработки языка [3] вызывают интерес к их адаптации для временных рядов. Опираясь на перечисленные особенности финансовых данных, можно выдвинуть предположение о том, что при успешном подборе модели и признакового описания мы сможем совершать прогнозы с точностью, достаточной для ведения прибыльной торговли, а значит, сможем аппроксимировать некоторую часть игроков рынка, поведение которых мы косвенно предсказываем через прогноз будущей цены.

2. План эксперимента

Целью эксперимента является оценка ряда нейросетевых архитектур [3, 4, 5] на способность генерации качественных прогнозов, а также создание торгового алгоритма, способного работать с этими прогнозами.

Обсуждая основные задачи эксперимента, выделим следующие:

- 1) выбор признакового описания,
- 2) разработка функции потерь,
- 3) поиск оптимальной архитектуры,
- 4) внедрение архитектуры в торговый алгоритм и его оптимизация,
- 5) тестирование алгоритма.

В ходе работы используются данные цен закрытия акций, входящих в Индекс Мосбиржи с частотой обновления 1 час. В качестве признакового описания используются 57 технических индикаторов. Данные получены посредством Python библиотеки Algorapack, являющейся официальным продуктом Московской Биржи. Использование технических индикаторов обусловлено высокой частотой обновления цен. Метрики фундаментального анализа или анализ новостей сложно интегрируемы с часовыми данными, так как частота обновления этих признаков сильно ниже частоты обновления цен, а значит, на протяжении большого количества временных тактов признаки будут неизменны.

3. Разработка функции потерь

Разработка функции потерь для обучения нейросети является отдельной важной задачей. Как говорилось ранее, стандартные функции (Mean Squared Error, Mean Average Error), зачастую используемые при обучении нейросетей, не отвечают всем накладываемым требованиям, а значит, некорректно обучаются модель.

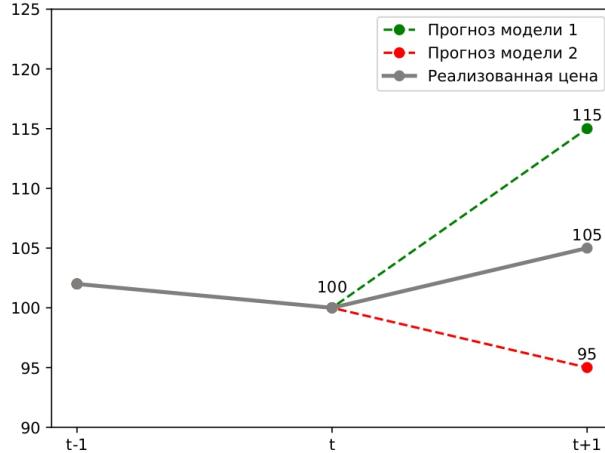


Рис. 1. Иллюстративный пример для оценки ценности прогнозов

Рассмотрим ситуацию на рис. 1. Предположим, находясь на моменте времени t , мы прогнозируем $t+1$ период времени двумя моделями, одна из которых (модель 1) прогнозирует рост цены со 100 до 115, в то время как другая (модель 2) прогнозирует падение со 100 до 95. Оценивая их ошибки через MSE, MAE или другие симметричные функции, мы приравниваем их, так как квадрат или модель убивают знак, в результате давая ошибку, равную 100 в случае MSE и 10 в случае MAE. Однако, как только мы начинаем рассматривать их ошибки с позиции спекулятивного интереса, выясняется, что они не равны друг другу. Так, при использовании прогноза модели 2, мы займём короткую позицию, одолжим акцию у брокера, продадим за 100 рублей, однако в $t+1$ периоде потеряем деньги, так как будем вынуждены выкупить её за 105 рублей. В свою очередь, используя прогнозы модели 1, мы займём длинную позицию в периоде t и в $t+1$ периоде заработаем на повышении цены, хотя и не таком сильном, как предсказывалось. Решением данной проблемы является подбор специфической функции потерь, учитывающей спекулятивный интерес [6].

В рамках эксперимента была разработана следующая функция потерь:

$$CustomLoss(y_{i+1}, \hat{y}_{i+1}) = \left| \frac{y_{i+1} - \hat{y}_{i+1}}{y_{i+1}} \right| - \lambda(\hat{y}_{i+1} - y_i)(y_{i+1} - y_i). \quad (1)$$

Как можно видеть из формулы, часть $\left| \frac{y_{i+1} - \hat{y}_{i+1}}{y_{i+1}} \right|$ полностью соответствует функции MAPE, однако далее идёт добавленный штраф с коэффициентом чувствительности λ . Если знаки $(\hat{y}_{i+1} - y_i)$ и $(y_{i+1} - y_i)$ совпадают, то знак этого произведения всегда будет положительный, а значит, коэффициент λ должен идти со знаком минус. И наоборот, если члены произведения отличаются знаками, то предсказанное направление движения актива отличается от его истинного движения, а следовательно, это должно увеличивать функцию потерь. Коэффициент λ , в свою очередь, отвечает за величину штрафа и является гиперпараметром. При слишком большом λ модель будет стараться угадывать направление в ущерб точности самого прогноза, и наоборот, при слишком маленьком λ модель не будет бояться ошибаться в направлениях. Следовательно, этот коэффициент должен быть таким,

чтобы модель при обучении соплась к весам, с которыми могла бы угадывать направление, однако делала это с приемлемой точностью.

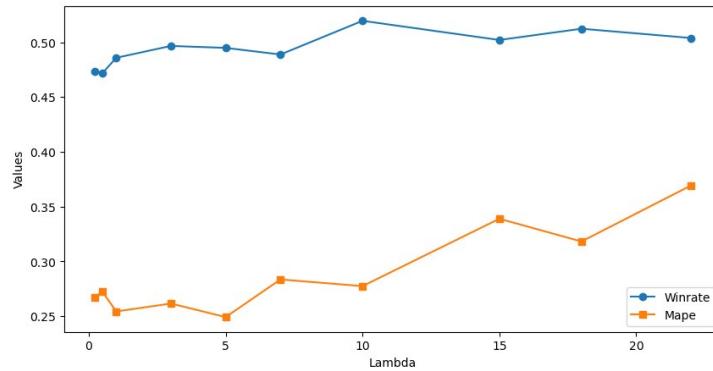


Рис. 2. Зависимость Winrate и MAPE от гиперпараметра λ

$$Winrate(y, \hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=2}^N [sign(y_i - y_{i-1}) = sign(\hat{y}_i - \hat{y}_{i-1})]. \quad (2)$$

Эмпирические исследования подтверждают теоретическое представление о работе штрафной компоненты функции. Как видно на рис. 2, метрика Winrate (доля правильно угаданных направлений) имеет тенденцию расти при росте гиперпараметра λ , и, как следствие, это влечёт за собой динамику метрики MAPE, которая также растёт. Очевидно, не существует единственно правильного ответа на вопрос о том, какое значение параметра выбрать для максимизации качества прогнозов. С одной стороны, мы хотим получать достоверные прогнозы с точки зрения их точности, так как если бы мы старались максимизировать Winrate путём сильного увеличения λ , то модель хоть и начинала бы чаще угадывать направление, однако из-за низкой точности цена ошибки была бы высока. И наоборот, стараясь минимизировать MAPE путём понижения λ , мы рискуем получать низкую частоту угадываний направления и, как следствие, недостаточный Winrate для ведения прибыльной торговли.

4. Поиск оптимальной архитектуры

На первом этапе необходимо найти оптимальную архитектуру, которая наиболее точно обобщает данные.

	И.1	И.2	И.3
LSTM	•	•	•
Transformer(encoder часть)	•	•	•
Transformer(encoder + decoder)	•	•	•
TSMixer	•	•	•

Рис. 3. Испытания моделей

На рисунке 3:

И.1 – Одномерный ряд (без признаков), прогноз на 1 час вперёд.

И.2 – Многомерный ряд (признаки – технические индикаторы), прогноз на 1 час вперёд.

И.3 – Многомерный ряд (признаки – другие активы на рынке), прогноз на 1 час вперёд.

Как видно из рис. 3, исследуются 4 модели, две из которых являются представителями семейства Transformer, отличающимися лишь наличием декодера в своём составе.

В рамках испытания мы проверяем 4 модели на трёх видах данных: одномерном ряду без признаков, с использованием технических индикаторов и с использованием других активов в качестве признаков для прогноза целевого. Поскольку λ является гиперпараметром, то каждая из моделей будет обучаться на каждом из испытаний для всех $\lambda \in [0, 1, 5, 10, 12, 25, 35, 45, 50]$, с последующим усреднением.

4.1. Итерация 1

В рамках первой итерации мы работаем на данных 2020 и 2021 годов. Набор данных имеет размер 172.129 строк и (1/58/42) столбцов, где 1 столбец – это цена закрытия (целевая переменная), а остальные – признаковое описание.

	И.1	И.2	И.3
LSTM	24.55	19.47	21.7
Transformer(encoder часть)	20.11	12.19	16.33
Transformer(encoder + decoder)	20.00	13.17	16.4
TSMixer	21.00	15.71	16.52

Рис. 4. Результаты испытаний для итерации 1

Как можно заметить из рис. 4, наилучшего результата смогла достигнуть Transformer (Encoder) архитектура в испытании 2, где в качестве признаков выступают технические индикаторы. Это значит, что следующий этап (оптимизация гиперпараметров стратегии) будет проходить на её основе и с применением данного признакового пространства. Наглядно видно, как модели начинают ухудшать свой результат при отсутствии признаков. Это наблюдение подтверждает гипотезу о том, что признаки несут в себе информационную пользу для модели и помогают прогнозировать будущие цены точнее.

4.2. Итерация 2

В рамках второй итерации мы работаем на данных 2020, 2021 и 2022 годов. Набор данных имеет размер 241.978 строк и (1/58/42) столбцов, где 1 столбец – это цена закрытия (целевая переменная), а остальные – признаковое описание.

	И.1	И.2	И.3
LSTM	28.67	22.46	24.85
Transformer(encoder часть)	24.54	17.2	18.26
Transformer(encoder + decoder)	24.4	18.55	19.00
TSMixer	25.64	18.9	20.09

Рис. 5. Результаты испытаний для итерации 2

Усреднённые по всем $\lambda \in \{0, 1, 5, 10, 12, 25, 35, 45, 50\}$ значения функции потерь для каждой модели и каждого испытания изображены на рис. 5. Как можно заметить, снова наилучшего результата смогла добиться Transformer (Encoder) архитектура в испытании 2, где в качестве признаков выступают технические индикаторы. Это значит, что следующий этап (оптимизация гиперпараметров стратегии) также будет проходить на её основе и с применением данного признакового пространства. Результаты 1 этапа данной итерации подтверждают результаты этого же этапа предыдущей итерации, где модели продемонстрировали схожее поведение. Во время второй итерации видно, что каждая из моделей ухудшила свой средний loss на каждом из испытаний. Причиной этому может служить появление данных 2022 года. Данные 2022 года были обрезаны по 1 марта и причиной данного решения является тот факт, что рынок того времени не отражал типичное поведение игроков. На тот момент на рынке преобладал несистематический риск, а следовательно,

данные того периода не содержат в себе полезной информации для модели. Однако стоит заметить, что, несмотря на обрезанные по началу апреля данные, фондовый рынок имел высокую волатильность и дальше. Это могло послужить причиной повышенного значения усреднённой функции потерь.

5. Оптимизация портфеля

В рамках данного эксперимента наши модели прогнозируют будущую цену актива, а значит, из ожидаемой цены возможно получить ожидаемую доходность путём следующей элементарной операции:

$$\hat{r}_{i+1} = \frac{\hat{y}_{i+1} - y_i}{y_i}, \quad (3)$$

где y_i известна, а \hat{y}_{i+1} – это ожидаемая цена.

Из этого следует, что в каждый момент времени, при условии прогнозирования N активов на рынке, мы можем получить вектор размерности N , каждой координатой которого будет являться прогнозируемая доходность определённого актива на следующий момент времени. Данный вектор позволяет нам переходить к задаче оптимизации портфеля, где целевой переменной может выступать вектор весов портфеля, вектор вложений портфеля, вектор торговых операций и так далее.

Используемая в ходе эксперимента задача оптимизации является адаптацией задачи, предложенной Стивеном Бойдом в работе [7], и представляет собой однопериодную оптимизацию портфеля. Однопериодная задача оптимизации инвестиционного портфеля заключается в правильном выборе распределения средств, которые направляются на покупку и продажу активов. Данная задача решается путём оптимизации выпуклой или вогнутой функции.

Частная постановка задачи:

$$\begin{aligned} \text{Max}_{u_t} \quad & \hat{r}_t^T h_t + \hat{r}_t^T u_t - c^T u_t - \gamma_t \cdot ((h_t + u_t) \Sigma (h_t + u_t)), \\ \text{subject to} \quad & u_t \in \mathbb{R}^{n+1}, \quad h_t + u_t \geq 0, \\ & 1^T u_t + c^T u_t = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где c – вектор комиссий брокеру и бирже,

h_t – портфель до торговых операций,

u_t – вектор торговых операций,

\hat{r}_t – ожидаемые доходности всех торгуемых активов,

γ_t – коэффициент принятия риска (гиперпараметр),

Σ – ковариационная матрица доходностей.

По завершению первого этапа в обеих итерациях, мы смогли определить наиболее качественную модель с точки зрения усреднённой функции потерь, а также подобрать то признаковое описание, которое позволяет нам добиться наименьшего значения функции потерь для данной модели. В ходе проведения испытаний мы выяснили, что в обеих итерациях модель Transformer (Encoder) показала наилучший результат на испытании 2, где признаками выступают 57 технических индикаторов. Следовательно, следующей задачей будет являться интеграция модели в торговый алгоритм и оптимизация последнего по гиперпараметрам λ , risk aversion (далее RA).

Имея 9 весов Трансформера, обученного на $\lambda \in \{0, 1, 5, 10, 12, 25, 35, 45, 50\}$, мы переходим к проведению бектеста и поиску оптимальных параметров на обрезанных по март данных 2022 года для первой итерации и данных 2023 года для второй итерации. Также стоит напомнить, что параметр RA определяется как γ в теле целевой функции, при решении задачи оптимизации и отвечает за чувствительность к риску при поиске оптимальных торговых операций.

Require:

$$\Lambda = \{0, 1, 5, 10, 12, 25, 35, 45, 50\}, \Gamma = \{0.5, 1, 2, 3, 4, 5, 8\};$$
Ensure:

Sharpe Ratio - значение коэффициента Шарпа для получившегося портфеля

- 1: **for** $\lambda \in \Lambda, \gamma \in \Gamma$ **do**
- 2: Проводим почасовое прогнозирование всего года трансформером, обученным на λ .
- 3: На полученных данных проводим бектест с $RA = \gamma$
- 4: Фиксируем полученный Sharpe Ratio
- 5: **end for** = 0

Рис. 6. Обобщённая схема проведения бектестов для всех λ, γ

Схема алгоритма на рис. 6 показывает общий вид проведения бектеста с фиксированными параметрами.

5.1. Итерация 1

В рамках первой итерации сбор результатов бектеста и поиск оптимальных параметров λ, γ производится на данных 2022 года, обрезанных по 1 марта. Общий размер данных составляет 69 849 строк. Транзакционные издержки равны 0,02%, что является наиболее выгодным предложением для частного трейдера на момент проведения исследования.

Lambda=0,RA=0.5,Sharpe=-2.205	Lambda=12,RA=3,Sharpe=-1.674
Lambda=0,RA=1,Sharpe=-2.217	Lambda=12,RA=4,Sharpe=-1.713
Lambda=0,RA=2,Sharpe=-2.207	Lambda=12,RA=5,Sharpe=-1.731
Lambda=0,RA=3,Sharpe=-2.218	Lambda=12,RA=8,Sharpe=-1.773
Lambda=0,RA=4,Sharpe=-2.276	Lambda=25,RA=0.5,Sharpe=-2.575
Lambda=0,RA=5,Sharpe=-2.326	Lambda=25,RA=1,Sharpe=-2.565
Lambda=0,RA=8,Sharpe=-2.408	Lambda=25,RA=2,Sharpe=-2.577
Lambda=1,RA=0.5,Sharpe=-2.484	Lambda=25,RA=3,Sharpe=-2.567
Lambda=1,RA=1,Sharpe=-2.443	Lambda=25,RA=4,Sharpe=-2.565
Lambda=1,RA=2,Sharpe=-2.432	Lambda=25,RA=5,Sharpe=-2.553
Lambda=1,RA=3,Sharpe=-2.336	Lambda=25,RA=8,Sharpe=-2.538
Lambda=1,RA=4,Sharpe=-2.26	Lambda=35,RA=0.5,Sharpe=-0.908
Lambda=1,RA=5,Sharpe=-2.201	Lambda=35,RA=1,Sharpe=-0.9
Lambda=1,RA=8,Sharpe=-2.104	Lambda=35,RA=2,Sharpe=-0.828
Lambda=5,RA=0.5,Sharpe=-2.647	Lambda=35,RA=3,Sharpe=-0.825
Lambda=5,RA=1,Sharpe=-2.585	Lambda=35,RA=4,Sharpe=-0.865
Lambda=5,RA=2,Sharpe=-2.529	Lambda=35,RA=5,Sharpe=-0.903
Lambda=5,RA=3,Sharpe=-2.491	Lambda=35,RA=8,Sharpe=-0.984
Lambda=5,RA=4,Sharpe=-2.472	Lambda=45,RA=0.5,Sharpe=-1.901
Lambda=5,RA=5,Sharpe=-2.496	Lambda=45,RA=1,Sharpe=-1.893
Lambda=5,RA=8,Sharpe=-2.427	Lambda=45,RA=2,Sharpe=-1.878
Lambda=10,RA=0.5,Sharpe=-1.128	Lambda=45,RA=3,Sharpe=-1.878
Lambda=10,RA=1,Sharpe=-1.098	Lambda=45,RA=4,Sharpe=-1.888
Lambda=10,RA=2,Sharpe=-1.054	Lambda=45,RA=5,Sharpe=-1.868
Lambda=10,RA=3,Sharpe=-1.042	Lambda=45,RA=8,Sharpe=-1.802
Lambda=10,RA=4,Sharpe=-1.098	Lambda=50,RA=0.5,Sharpe=-3.322
Lambda=10,RA=5,Sharpe=-1.212	Lambda=50,RA=1,Sharpe=-3.354
Lambda=10,RA=8,Sharpe=-1.478	Lambda=50,RA=2,Sharpe=-3.35
Lambda=12,RA=0.5,Sharpe=-1.614	Lambda=50,RA=3,Sharpe=-3.347
Lambda=12,RA=1,Sharpe=-1.621	Lambda=50,RA=4,Sharpe=-3.34
Lambda=12,RA=2,Sharpe=-1.62	Lambda=50,RA=5,Sharpe=-3.385
Lambda=12,RA=3,Sharpe=-1.674	Lambda=50,RA=8,Sharpe=-3.387

Рис. 7. Результаты серии бектестов для первой итерации

Как видно из рис. 7, ни на одной из комбинаций гиперпараметров алгоритм не смог достичь положительной доходности. Как говорилось ранее, в течение всего 2022 года российский фондовый рынок страдал от высокой волатильности вследствие сильного несистематического риска, вызванного санкционным давлением на российскую экономику. Данные факторы могли внести негативный вклад в успех торгового алгоритма, однако нашей

задачей по-прежнему является поиск параметров, дающих максимальный коэффициент Шарпа. Как видно на рис. 7, оптимальными параметрами являются $\lambda^* = 35$, $RA^* = 3$, именно на них мы будем тестировать торговую стратегию на следующем шаге.

5.2. Итерация 2

В рамках второй итерации сбор результатов бектеста и поиск оптимальных параметров λ, γ производится на данных 2023 года. Общий размер данных составляет 77043 строк. Транзакционные издержки также равны 0,02%.

Lambda=0,RA=0.5,Sharpe=-0.736	Lambda=12,RA=4,Sharpe=-2.456
Lambda=0,RA=1,Sharpe=-0.786	Lambda=12,RA=5,Sharpe=-2.466
Lambda=0,RA=2,Sharpe=-0.798	Lambda=12,RA=8,Sharpe=-2.502
Lambda=0,RA=3,Sharpe=-0.784	Lambda=25,RA=0.5,Sharpe=-1.821
Lambda=0,RA=4,Sharpe=-0.822	Lambda=25,RA=1,Sharpe=-1.798
Lambda=0,RA=5,Sharpe=-0.873	Lambda=25,RA=2,Sharpe=-1.785
Lambda=0,RA=8,Sharpe=-1.004	Lambda=25,RA=3,Sharpe=-1.791
Lambda=1,RA=0.5,Sharpe=-1.01	Lambda=25,RA=4,Sharpe=-1.814
Lambda=1,RA=1,Sharpe=-0.985	Lambda=25,RA=5,Sharpe=-1.833
Lambda=1,RA=2,Sharpe=-0.918	Lambda=25,RA=8,Sharpe=-1.868
Lambda=1,RA=3,Sharpe=-0.885	Lambda=35,RA=0.5,Sharpe=-1.819
Lambda=1,RA=4,Sharpe=-0.9	Lambda=35,RA=1,Sharpe=-1.827
Lambda=1,RA=5,Sharpe=-0.894	Lambda=35,RA=2,Sharpe=-1.861
Lambda=1,RA=8,Sharpe=-0.869	Lambda=35,RA=3,Sharpe=-1.9
Lambda=5,RA=0.5,Sharpe=0.215	Lambda=35,RA=4,Sharpe=-1.923
Lambda=5,RA=1,Sharpe=0.242	Lambda=35,RA=5,Sharpe=-1.947
Lambda=5,RA=2,Sharpe=0.271	Lambda=35,RA=8,Sharpe=-1.894
Lambda=5,RA=3,Sharpe=0.276	Lambda=45,RA=0.5,Sharpe=-1.221
Lambda=5,RA=4,Sharpe=0.275	Lambda=45,RA=1,Sharpe=-1.224
Lambda=5,RA=5,Sharpe=0.345	Lambda=45,RA=2,Sharpe=-1.254
Lambda=5,RA=8,Sharpe=0.334	Lambda=45,RA=3,Sharpe=-1.279
Lambda=10,RA=0.5,Sharpe=-2.291	Lambda=45,RA=4,Sharpe=-1.283
Lambda=10,RA=1,Sharpe=-2.285	Lambda=45,RA=5,Sharpe=-1.279
Lambda=10,RA=2,Sharpe=-2.245	Lambda=45,RA=8,Sharpe=-1.265
Lambda=10,RA=3,Sharpe=-2.209	Lambda=50,RA=0.5,Sharpe=-1.067
Lambda=10,RA=4,Sharpe=-2.189	Lambda=50,RA=1,Sharpe=-1.063
Lambda=10,RA=5,Sharpe=-2.16	Lambda=50,RA=2,Sharpe=-1.081
Lambda=10,RA=8,Sharpe=-2.21	Lambda=50,RA=3,Sharpe=-1.1
Lambda=12,RA=0.5,Sharpe=-2.435	Lambda=50,RA=4,Sharpe=-1.144
Lambda=12,RA=1,Sharpe=-2.438	Lambda=50,RA=5,Sharpe=-1.168
Lambda=12,RA=2,Sharpe=-2.443	Lambda=50,RA=8,Sharpe=-1.246
Lambda=12,RA=3,Sharpe=-2.445	

Рис. 8. Результаты серии бектестов для второй итерации

На рисунке 8 можно наблюдать, что наибольший коэффициент Шарпа достигается при $\lambda^* = 5$, $RA^* = 5$. Именно на них будет проводиться тестирование торговой стратегии. Следует заметить, что, по сравнению с первой итерацией, оптимальные λ и RA поменялись, а значит, мы можем констатировать факт того, что стратегия адаптируется в зависимости от рынка, на котором происходит торговля. Нестабильный рынок 2022 года требовал увеличивать параметр λ из-за высокой нестабильности и непредсказуемости рынка, в то время как растущий рынок 2023 года позволил снизить λ , больше концентрируясь на точность прогноза, а не доле правильно угаданных направлений.

6. Тестирование алгоритма

Наконец, последним этапом проверки торговой стратегии является её тестирование на тестовых данных, которых она не видела прежде. Дойдя до этого этапа, мы уже выбрали оптимальную нейросетевую архитектуру, а также оптимальные гиперпараметры торговой стратегии λ^* и RA^* . Зафиксировав архитектуру и гиперпараметры, мы проводим бектест на тестовых данных, в ходе которого собираем результаты торговли.

Ключевой метрикой оценки качества стратегии является Return – доходность стратегии за тестируемый период. Кроме того, результат стратегии сравнивается с результатом доходности бенчмарка (Индекс Мосбиржи) для ответа на вопрос о том, может ли она перегнать бенчмарк в виде индекса, торгуя лишь активами из него самого.

6.1. Итерация 1

Тестирование стратегии с параметрами $\lambda^* = 35$, $RA^* = 3$ в рамках первой итерации производится на данных 2023 года, имеющих 77043 наблюдения. Транзакционные издержки по-прежнему равны 0,02%.

Т а б л и ц а 1
Результаты тестирования для $\lambda = 35$, $RA = 3$ ($c = 0.0002$)

Metric	Value
Initial value (cash)	1.000e+06
Final value (cash)	9.585e+05
Profit (cash)	-4.151e+04
Avg. return (annualized)	-0.1%
Volatility (annualized)	32.1%
Avg. excess return (annualized)	-0.1%
Avg. active return (annualized)	-0.1%
Excess volatility (annualized)	32.1%
Active volatility (annualized)	32.1%
Avg. growth rate (annualized)	-5.2%
Avg. excess growth rate (annualized)	-5.2%
Avg. active growth rate (annualized)	-5.2%
Sharpe ratio	-0.00
Information ratio	-0.00
Avg. drawdown	-9.2%
Min. drawdown	-24.9%
Avg. leverage	101.4%
Max. leverage	106.8%
Avg. turnover	95.9%
Max. turnover	104.1%

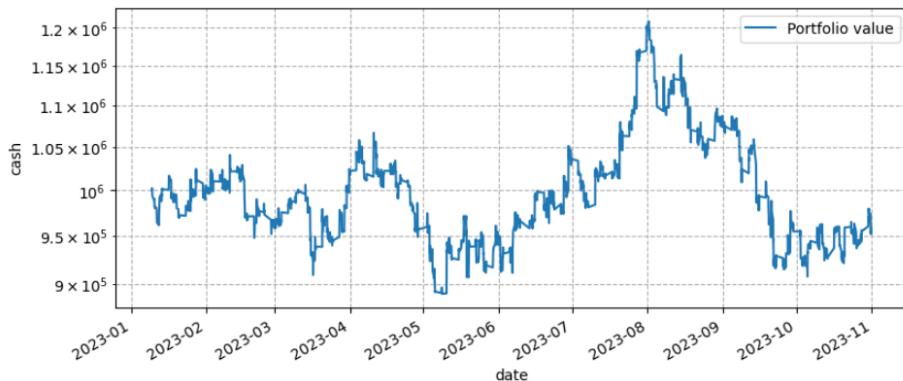


Рис. 9. График стоимости портфеля $\lambda = 35$, $RA = 3$ ($c = 0.0002$)

Как таблица 1, так и рисунок 9 содержат результаты тестирования стратегии. Мы можем наблюдать, что алгоритм не смог реализовать положительную доходность, хотя период с 2023-06 по 2023-08 можно охарактеризовать периодом уверенного роста цены портфеля.

Разбираясь в причинах такого неудовлетворительного результата, следует обратить внимание на общую стоимость транзакционных издержек, которые мы заплатили в ходе торговли: 712 796 рублей. Как можно увидеть, на комиссию брокеру уходит достаточно большая доля, а значит, что алгоритм, чрезмерно часто перебалансируя портфель, теряет на этом большие суммы.

6.2. Итерация 2

Тестирование стратегии с параметрами $\lambda^* = 5, RA^* = 5$ в рамках второй итерации производится на данных 2024 года (01.01.2024 – 01.04.2024), имеющих 20 803 наблюдения. Транзакционные издержки по-прежнему равны 0,02%.

Т а б л и ц а 2
Результаты тестирования для $\lambda = 5, RA = 5$ ($c = 0.0002$)

Metric	Value
Initial value (cash)	1.000e+06
Final value (cash)	1.081e+06
Profit (cash)	8.062e+04
Avg. return (annualized)	39.5%
Volatility (annualized)	28.7%
Avg. excess return (annualized)	39.5%
Avg. active return (annualized)	39.5%
Excess volatility (annualized)	28.7%
Active volatility (annualized)	28.7%
Avg. growth rate (annualized)	35.4%
Avg. excess growth rate (annualized)	35.4%
Avg. active growth rate (annualized)	35.4%
Sharpe ratio	1.37
Information ratio	1.37
Avg. drawdown	-4.1%
Min. drawdown	-12.3%
Avg. leverage	100.5%
Max. leverage	108.5%
Avg. turnover	87.2%
Max. turnover	104.2%

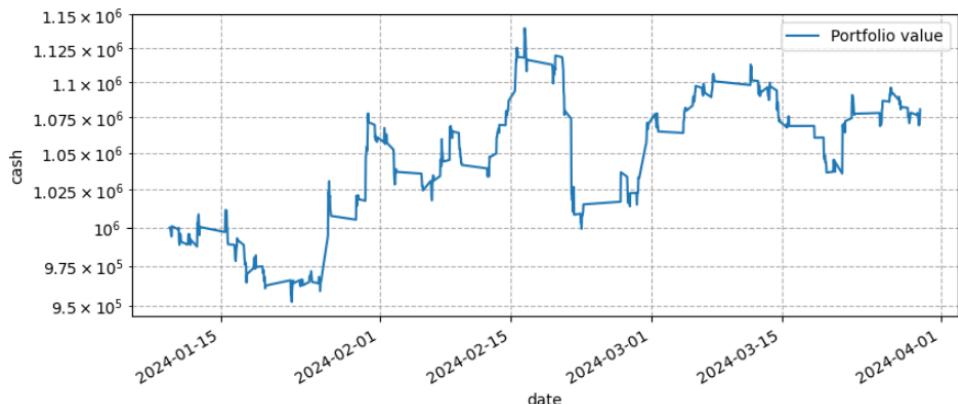


Рис. 10. График стоимости портфеля $\lambda = 5, RA = 5$ ($c = 0.0002$)

Результаты таблицы 2 и рисунка 10 говорят об эффективности торгового алгоритма

при транзакционных издержках в 0,02%. Начиная с января 2024 и по начало апреля этого же года, стоимость портфеля выросла на 8.1%. За аналогичный период времени бенчмарк (Индекс Мосбиржи) вырос на 5,6%, что свидетельствует об эффективности алгоритма. Общие издержки на комиссию составили 88 629 рублей.

7. Обсуждение результатов

После проведения эксперимента и фиксации полученных результатов, мы можем переходить к их интерпретации и обсуждению.

7.1. Обсуждение результатов поиска оптимальной архитектуры

Приведём основные выводы данного этапа:

- 1) Оценивая исследуемые архитектуры по результатам первой и второй итерации, мы можем заметить, что наихудшую производительность показывает архитектура LSTM, дающая наивысший средний Loss среди всех испытуемых моделей. Причиной такого результата может служить ограничение модели на объём удерживаемой памяти внутри себя, что является известной проблемой всех рекуррентных нейросетевых архитектур [8].
- 2) Говоря об TSMixer архитектуре, следует отметить её высокую скорость обучения по причине того, что она состоит из полно связанных слоёв, однако данный факт сыграл негативную роль в результатах модели, из-за чего её точность не смогла сравняться с точностью трансформеров, хотя и обогнала LSTM.
- 3) Трансформеры (оба варианта) смогли показать наилучший результат среди всех исследуемых моделей, благодаря блокам памяти (Attention Layer) и позиционному кодированию (Positional Encoding). Данные нововведения позволяют захватывать более сложные взаимосвязи во входящих последовательностях, а значит, совершать более качественные прогнозы.
- 4) Говоря о признаковом описании ряда, мы можем наблюдать наихудший результат у всех четырёх моделей, работающих с одномерным рядом (ряд цен без дополнительных признаков). Полученные результаты вполне очевидны, так как, используя данные одних лишь цен, трудно обнаружить сложную структуру во входящей последовательности. На втором месте по результативности идёт постановка, в которой признаками являются цены закрытий других активов. Данное описание целевой переменной позволило понизить средний Loss у всех моделей. Исходя из этого, можно выдвинуть гипотезу о том, что модель использовала значения цен сильно коррелированных активов для предсказания поведения цен. Сама по себе корреляция активов не является гипотезой и давно исследуется научным сообществом [9]. Наконец, наилучший результат с точки зрения точности на обеих итерациях дали 57 технических индикаторов, которые были получены вместе с ценой через API Мосбиржи. Данные индикаторы позволили всем моделям добиться оптимальных результатов в прогнозировании, а значит, предоставили скрытую в них информацию о поведении цены.

7.2. Обсуждение результатов поиска оптимальных гиперпараметров торговой стратегии

Обсуждая результаты поиска оптимальных гиперпараметров, следует обратить внимание на то, что они отличаются от итерации к итерации, а значит, адаптируются под конъюнктуру рынка и данных, на которых обучается модель. Попробуем проинтерпретировать полученные результаты.

- 1) Первая итерация показала, что оптимальными параметрами торговли на рынке 2022 года оказались $\lambda^* = 35$, $RA^* = 3$. Напоминаем, что в рамках эксперимента $\lambda \in \{0, 1, 5, 10, 12, 25, 35, 45, 50\}$, $RA \in \{0.5, 1, 2, 3, 4, 5, 8\}$, а значит, полученная λ^* имеет достаточно высокое значение, а RA^* имеет среднее значение. Можно предположить, что данная необходимость обоснована высокой волатильностью и непредсказуемостью рынка 2022 года, когда санкционное давление на экономику России вызвало высокий несистематический риск на всех её рынках. Этот факт заставляет нашу модель обращать особое внимание на направление движения предсказанного актива (большой λ^*), так как цены ведут себя нехарактерным для спокойного времени образом. В свою очередь, средний RA^* сигнализирует нам о необходимости учёта рисков со средней силой. Иными словами, алгоритм должен вести торговлю с умеренной агрессией, хотя и не совсем консервативно.
- 2) Вторая итерация показала, что оптимальными параметрами торговли на рынке 2023 года оказались $\lambda^* = 5$, $RA^* = 5$. Можно сказать, что в условиях растущего рынка с положительной динамикой модель начинает меньше опасаться непредсказуемого поведения цен, проявляя это в снижении параметра λ^* . Однако параметр RA^* возрос по сравнению с первой итерацией, что означает, что теперь требуется вести более-менее рискованную торговлю.

Можно заключить, что оптимальные параметры в большинстве своём неплохо соотносятся с реальностью.

7.3. Обсуждение результатов тестирования стратегии

Результаты тестирования стратегий сообщают об одной основной уязвимости нашего алгоритма, которая в некоторых случаях мешает ему вести прибыльную торговлю – высокие издержки на комиссию брокеру. Обсудим это подробнее.

- 1) Согласно наблюдаемым результатам, алгоритм первой итерации торгует либо в минус, либо не догоняет бенчмарк, по причине высоких издержек на комиссию и лишь с комиссии, равной 0.009%, наш алгоритм начинает обгонять бенчмарк на тестовых данных. Данные издержки происходят из-за частых перебалансировок портфеля, которые приводят к большому количеству сделок на рынке, не все из которых могут покрыть комиссию. Решением данной проблемы может служить переход на данные большей фракции, например на двухчасовые или дневные диапазоны.
- 2) Более того, гипотетической причиной неудачи на первой итерации может служить то, что оптимальный параметр Loss функции, а также коэффициент RA подбирались на рынке 2022 года, который кардинально отличался от рынка 2023 года, на котором эти параметры тестировались. Данное различие двух рынков предположительно могло спровоцировать негативный результат при тестировании. Частично эта гипотеза подтверждается результатами второй итерации, в которой наша стратегия, оптимизированная на растущем рынке 2023 года, смогла продемонстрировать положительный результат на части 2024 года, обогнав бенчмарк примерно в два раза (индекс +5.6%, стратегия +8.1%).

Исходя из проделанной работы можно заключить, что архитектуры типа Transformer, обученные на разработанной функции потерь, способны производить прогнозы, достаточные для ведения прибыльной торговли. В свою очередь, разработанный торговый алгоритм позволяет обрабатывать прогнозы и производить перебалансировку портфеля с достаточной скоростью и точностью.

Однако, как было сказано ранее, существенным недостатком данного подхода являются большие расходы на комиссию брокеру, которые мешают ведению прибыльной торговли в

некоторых случаях. Причиной таких расходов является частая перебалансировка портфеля (раз в час). Одним из возможных способов устранения данных недостатков является переход на данные с более низкой частотой обновления.

Список литературы

1. *Zinenko A.* Forecasting financial time series using singular spectrum analysis // Business Informatics. 2023. V. 17, N 3. P. 87–100.
2. *Junyoung C., Caglar G., KyungHyun C., Yoshua B.* Empirical Evaluation of Gated Recurrent Neural Networks on Sequence Modeling // Deep Learning and Representation Learning Workshop. 2014.
3. *Vaswani A., Shazeer N., Parmar N., Uszkoreit J., Jones L., Gomez A.N., Kaiser L., Polosukhin I.* Attention is all you need // Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems, NIPS'17, Red Hook, NY, USA. Curran Associates Inc. 2017. P. 6000–6010.
4. *Hochreiter S., Schmidhuber J.* Long short-term memory // Neural Computation. 1997. V. 9, N 8. P. 1735–1780.
5. *Zeng A., Liu X., Lin Z., Xu J., Tao D.* TSMixer: An All-MLP Architecture for Time Series Forecasting // arXiv preprint arXiv:2303.06053. 2023.
6. *Lee T.* Loss Functions in Time series forecasting // University of California, Riverside. 2007.
7. *Boyd S., Busseti E., Diamond S., Kahn R.N., Koh K., Nystrup P., Speth J.* Multi-Period Trading via Convex Optimization // Foundations and Trends in Optimization. 2017. V. 20, N 20. P. 1–74.
8. *Landi F., Baraldi L., Cornia M., Cucchiara R.* Working Memory Connections for LSTM // Neural Networks. 2021. P. 334–341.
9. *Song D.-M., Tumminello M., Zhou W.-X., Mantegna R.N.* Evolution of worldwide stock markets, correlation structure, and correlation-based graphs // Physical Review E. 2011. V. 84, N 2.

References

1. *Zinenko A.* Forecasting financial time series using singular spectrum analysis. Business Informatics. 2023. V. 17, N 3. P. 87–100.
2. *Junyoung C., Caglar G., KyungHyun C., Yoshua B.* Empirical Evaluation of Gated Recurrent Neural Networks on Sequence Modeling. Deep Learning and Representation Learning Workshop. 2014.
3. *Vaswani A., Shazeer N., Parmar N., Uszkoreit J., Jones L., Gomez A.N., Kaiser L., Polosukhin I.* Attention is all you need. Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems, NIPS'17, Red Hook, NY, USA. Curran Associates Inc. 2017. P. 6000–6010.
4. *Hochreiter S., Schmidhuber J.* Long short-term memory. Neural Computation. 1997. V. 9, N 8. P. 1735–1780.
5. *Zeng A., Liu X., Lin Z., Xu J., Tao D.* TSMixer: An All-MLP Architecture for Time Series Forecasting. arXiv preprint arXiv:2303.06053. 2023.
6. *Lee T.* Loss Functions in Time series forecasting. University of California, Riverside. 2007.
7. *Boyd S., Busseti E., Diamond S., Kahn R.N., Koh K., Nystrup P., Speth J.* Multi-Period Trading via Convex Optimization. Foundations and Trends in Optimization. 2017. V. 20, N 20. P. 1–74.

8. *Landi F., Baraldi L., Cornia M., Cucchiara R.* Working Memory Connections for LSTM. Neural Networks. 2021. P. 334–341.
9. *Song D.-M., Tumminello M., Zhou W.-X., Mantegna R.N.* Evolution of worldwide stock markets, correlation structure, and correlation-based graphs. Physical Review E. 2011. V. 84, N 2.

Поступила в редакцию 15.07.2024

УДК 004.852

Б. Л. Ибрагимов^{1,2}, Г. Г. Гусев^{1,3}¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)²АНО Институт Искусственного Интеллекта³Лаборатория Искусственного Интеллекта, Сбер

Оптимизация стохастического градиентного бустинга с помощью out-of-sample оценок качества

Стохастический градиентный бустинг (SGB) — это мощный метод ансамблевого обучения, широко используемый в различных приложениях машинного обучения. Он использует регуляризацию, отбрасывая подмножество данных на каждой итерации, что помогает предотвратить переобучение. Однако эти данные вне выборки (OOS), которые обычно остаются неиспользованными во время обучения модели, представляют собой нераскрытую возможность для повышения стабильности процесса обучения. В данной работе мы предлагаем новый подход, который использует OOS данные не только для оценки качества построенных деревьев решений, но и для целенаправленной оптимизации гиперпараметров. Оценивая корреляцию между фактическими и предсказанными значениями градиентов на OOS данных, мы выводим метрики, которые эффективно приближают производительность деревьев на невидимых тестовых данных.

Наши эмпирические исследования, проведенные на коллекции реальных наборов данных размером до 100,000 примеров, демонстрируют эффективность этого метода. Результаты показывают последовательное снижение уровня ошибок с улучшениями до 2% по logloss по сравнению со стандартными реализациями SGB. Эти выводы подчеркивают потенциал настройки гиперпараметров на основе OOS данных не только для повышения точности модели, но и для предоставления вычислительно-эффективного пути к регуляризации в рамках градиентного бустинга.

Ключевые слова: стохастический градиентный бустинг, регуляризация, подвыборки, ансамбль, машинное обучение

B. L. Ibragimov^{1,2}, G. G. Gusev^{1,3}¹Moscow Institute of Physics and Technology²Artificial Intelligence Research Institute³Sber AI Lab

Optimizing stochastic gradient boosting with out-of-sample evaluation metrics

Stochastic Gradient Boosting (SGB) is a powerful ensemble learning method widely used in various machine learning applications. It introduces regularization by discarding a subset of data samples at each iteration, a technique that helps prevent overfitting. However, these out-of-sample (OOS) data points, typically left unused during model training, present an untapped opportunity to enhance the robustness of the learning process. In this paper, we propose a novel approach that leverages OOS data not only to evaluate the quality of constructed decision trees but also to perform targeted pruning and hyperparameter optimization. By assessing the correlation score between actual and predicted gradient values on OOS data, we establish a metric that effectively approximates the trees's performance on unseen test data.

Our empirical studies, conducted on a collection of real-world benchmark datasets with sizes up to 100,000 samples, demonstrate the efficiency of this method. The results

indicate a consistent reduction in error rates, with improvements reaching up to 2% in log-loss compared to standard SGB implementations. These findings highlight the potential of OOS-driven pruning and hyperparameter tuning to not only enhance model accuracy but also to provide a computationally efficient pathway for regularization in gradient boosting frameworks.

Key words: stochastic gradient boosting, regularization, subsampling, ensemble, machine learning

1. Введение

Несмотря на значительные успехи глубоких нейросетевых алгоритмов, методы ансамблевого обучения, такие как *градиентный бустинг* (Gradient Boosting) [1], все еще являются неотъемлемой частью арсенала машинного обучения благодаря своей высокой точности и способности эффективно работать с большими и сложными данными [2]. Градиентный бустинг основывается на идее построения последовательности базовых моделей (как правило, решающих деревьев), в которой каждая следующая модель стремится уменьшить функцию потерь за счет приближения вектора градиента ошибок в точке текущего предсказания. Этот метод доказал свою эффективность и широко используется в современных задачах прогнозирования [3] от классификации и регрессии до решения задач в области обработки текстов и изображений.

В то же время градиентный бустинг подвержен проблеме переобучения, особенно на небольших или сильно шумных данных [4]. Для борьбы с переобучением были разработаны различные *методы регуляризации*, такие как контроль за глубиной деревьев, уменьшение скорости обучения и добавление шума в процессе обучения. Одним из таких методов является *стохастический градиентный бустинг* (SGB) [5], который включает случайную выборку подмножества данных на каждой итерации обучения. Это снижает корреляцию между деревьями и повышает обобщающую способность модели.

В последние годы были предложены методы усовершенствования алгоритма SGB [6], однако они в первую очередь сосредоточены на процедурах выбора наиболее информативной подвыборки. При этом текущие методы в основном не учитывают те данные, которые исключаются из каждой итерации обучения, то есть данные, оставшиеся «вне выборки» (out-of-sample, OOS). В большинстве случаев эти данные просто игнорируются, хотя могли бы быть полезны для повышения качества модели. В частности, они могут использоваться для оценки качества построенных деревьев и корректировки гиперпараметров модели, что потенциально может привести к еще более устойчивой модели с улучшенной обобщающей способностью.

Регуляризация играет ключевую роль в улучшении обобщающей способности моделей машинного обучения, и стохастический градиентный бустинг не является исключением. Однако до сих пор мало внимания уделялось использованию OOS данных для дополнительной оптимизации модели в процессе обучения, хотя такие данные традиционно используются в других ансамблевых методах, таких как *бэггинг* (bagging) [7].

В настоящей работе мы анализируем применимость OOS данных для регуляризации моделей градиентного бустинга, а также предлагаем новый способ их использования для оценки качества и оптимизации гиперпараметров деревьев решений, что позволяет достичь более высокой точности моделей и их устойчивости при применении к различным типам данных.

2. Градиентный бустинг

Формально задача градиентного бустинга [1] заключается в минимизации некоторой дифференцируемой функции потерь $L(y, F(x))$, где y — истинное значение, $F(x)$ — предсказание модели.

Алгоритм начинается с константного предсказания:

$$F_0(x) = \arg \min_c \sum_{i=1}^n L(y_i, c).$$

Затем на каждой итерации m добавляется новое дерево $f_m(x)$, которое минимизирует остаточную ошибку (градиент) текущей модели:

$$F_m(x) = F_{m-1}(x) + \nu f_m(x),$$

где ν — коэффициент скорости обучения (learning rate), который контролирует вклад каждого нового дерева.

Введем обозначение $g_m(x_i) = \frac{\partial L(y_i, F_{m-1}(x_i))}{\partial F_{m-1}(x_i)}$. Основная идея градиентного бустинга заключается в том, чтобы на каждой итерации обучать регрессионное дерево, используя градиенты функции потерь в качестве целевой переменной:

$$f_m = \arg \min_f \sum_{i=1}^n (-g_m(x_i) - f(x_i))^2. \quad (1)$$

Здесь f_m — новое дерево, которое аппроксимирует отрицательный градиент функции потерь.

Стохастический градиентный бустинг (SGB) [5] — это расширение стандартного градиентного бустинга, в котором на каждой итерации случайным образом выбирается подмножество обучающих данных для построения очередного дерева решений.

Формально процесс SGB можно описать следующим образом:

- 1) На m -й итерации случайным образом выбирается подмножество данных S_m из общего множества данных X с размером $|S_m| = s \times |X|$, где s — это коэффициент подвыборки (sampling rate).
- 2) Далее, на этом подмножестве данных S_m обучается очередное дерево $f_m(x)$, которое аппроксимирует негативный градиент функции потерь, аналогично стандартному градиентному бустингу.
- 3) После обучения дерево добавляется к модели с учетом коэффициента скорости обучения.

3. Эмпирический анализ качества обученных деревьев

Из описания процедуры построения модели градиентного бустинга (секция 2) следует, что одним из ключевых факторов, влияющих на качество модели бустинга, является качество предсказаний градиентов отдельными деревьями (уравнение 1). В данной секции мы рассмотрим результаты эмпирического исследования, проведенного для анализа того, как различные метрики качества отдельных деревьев влияют на общую производительность градиентного бустинга. В частности, внимание уделяется тому, насколько хорошо деревьяправляются с задачей предсказания градиентов на каждой итерации и как эти предсказания отражаются на метриках качества на обучающей, OOS и тестовой выборках.

Для эксперимента исходные данные были разделены на обучающую и тестовую выборки в соотношении 4 к 1. Обучающая выборка, в свою очередь, была разделена на две части: 80% данных использовались для обучения деревьев на каждой итерации, а оставшиеся 20% — как данные вне выборки (OOS). Обучение модели стохастического градиентного бустинга проводилось с использованием 80% данных на каждой итерации, а затем качество модели оценивалось на трех выборках: обучающей, OOS и тестовой. Гиперпараметры моделей были выбраны таким образом, чтобы гарантировать сходимость

процесса обучения. В качестве исследуемых метрик для оценки качества отдельных регрессионных деревьев были взяты коэффициент детерминации (R^2), косинусное сходство, гос-аус (предсказание знака градиента), а также Log Loss для оценки качества ансамбля после каждой итерации.

Результаты эксперимента на наборе данных Adult (так же картина наблюдается и на прочих наборах, перечисленных в секции 5) представлены на рис. 1. Первый вывод заключается в том, что качество регрессионных деревьев довольно быстро становится низким по мере увеличения количества деревьев, что заметно по отрицательным значениям R^2 и оклонулевым значениям косинусного сходства как для OOS выборок, так и для тестовой выборки. Причем резкое падение качества происходит еще до фактического момента переобучения, на что указывает тот факт, что даже при отрицательном качестве предсказаний отдельными деревьями тестовый logloss продолжает уменьшаться. Этот результат кажется неинтуитивным, учитывая, что задачей градиентного бустинга на каждой итерации является приближение значений градиентов.

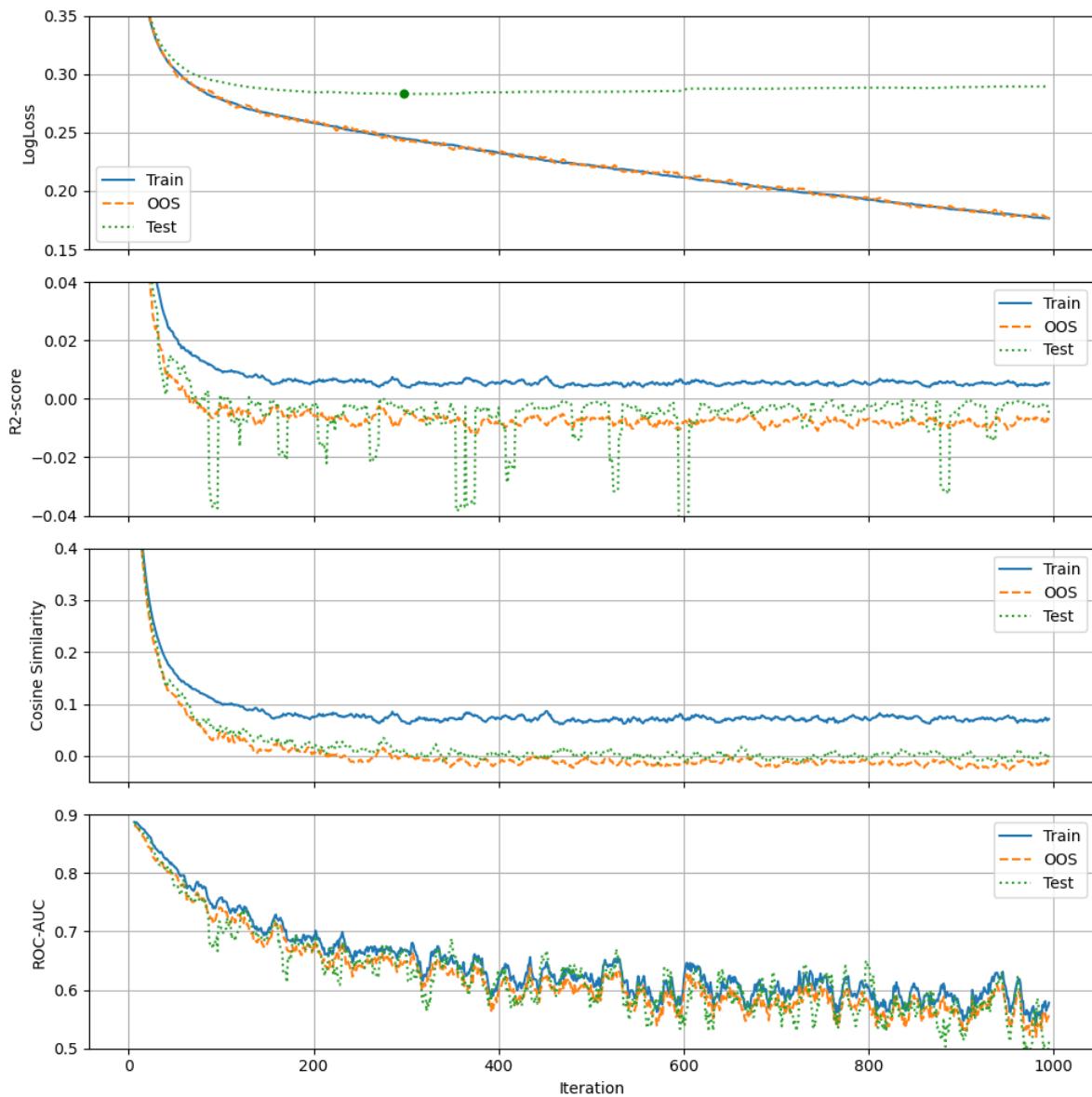


Рис. 1. Оценка качества ансамбля (Log Loss) и отдельных деревьев (R^2 , косинусное сходство, гос-аус) в зависимости от итерации. Маркером на первом графике выделена точка переобучения

Этот континтуитивный результат может быть объяснен тем, что, несмотря на низкое

качество предсказания величины градиентов, модели успешно справляются с предсказанием их знаков (график гос-аус), что позволяет процессу оптимизации двигаться в правильном направлении. На это же указывает и метрика косинусного сходства, которая вплоть до момента переобучения имеет хоть и слабо выраженные, но положительные значения. Подробная интерпретация и анализ приведенных выше эффектов приводится в секции 4.

Интересным наблюдением является факт, что на большинстве итераций качество на OOS данных оказывается ниже, чем на тестовых данных, несмотря на то, что последние обладают очевидным смещением, связанным с неизбежным эффектом переобучения. Этот результат можно объяснить тем, что OOS выборка является случайным подмножеством обучающих данных, которое может иметь меньший объем и большую вариативность оценок. Это ведет к большей чувствительности к шуму и, как следствие, к ухудшению метрик. Этот эффект связан с известным в статистике понятием *смещения выборки* или *эффекта малой выборки* [8], где меньшие подвыборки могут демонстрировать большее отклонение в метриках по сравнению с более репрезентативными выборками. В частности, при случайному разделении выборки на две части, их оценки среднего будут отрицательно коррелированы в силу того, что они не являются независимыми.

Несмотря на то, что метрики качества на OOS данных хуже, чем на тестовых данных, и значительно хуже, чем на обучающей выборке, они демонстрируют высокую связь с метриками на тестовых данных. Это особенно заметно при визуальном анализе графиков, а также подтверждается тестом Спирмена. Такой результат указывает на то, что, несмотря на худшие показатели на OOS выборке, она все же предоставляет полезную информацию о том, как дерево будет вести себя на невидимых данных. Таким образом, OOS метрики могут служить надежным индикатором для оценки потенциального поведения модели и могут быть использованы для построения алгоритмов регуляризации моделей градиентного бустинга. В следующих секциях мы предлагаем один из подходов, основанный на этой идее, а также теоретическое и экспериментальное обоснование его эффективности.

4. Оптимизация обучения с помощью OOS оценок

Известно [1], что оптимизация среднеквадратичной ошибки (уравнение 1) при построении очередного дерева эквивалентна минимизации первого члена разложения по Тейлору изменения функции потерь:

$$MSE_m(X) = \sum_{l \in \mathcal{L}} \sum_{i \in l} (g_m(x_i) + f_{m,l})^2 = - \sum_{l \in \mathcal{L}} \frac{(\sum_{i \in l} g_m(x_i))^2}{|l|} + C(g_m),$$

$$\Delta L_m(X) = \sum_{i=1}^n g_m(x_i) \cdot \nu f_m(x_i) = \sum_{l \in \mathcal{L}} \sum_{i \in l} g_m(x_i) \cdot \nu f_{m,l} = -\nu \sum_{l \in \mathcal{L}} \frac{(\sum_{i \in l} g_m(x_i))^2}{|l|},$$

где учтено, что дерево f_m с листьями \mathcal{L} — кусочно-постоянная функция со значением $f_{m,l} = \frac{\sum_{i \in l} g_m(x_i)}{|l|}$ в листе l .

Важно отметить, что данная эквивалентность справедлива только для обучающей выборки и не выполняется для OOS и тестовых/валидационных выборок. Отсюда вытекает слабая связь процесса обучения и регрессионных метрик (секция 2). Также данный факт может являться подтверждением того, что низкое качество предсказания величин градиентов не обязательно ведет к низкому качеству итогового ансамбля. Аналогично, можно заметить связь падения косинусной схожести на OOS ниже нуля с началом переобучения. Это согласуется с представлениями выше, так как отрицательное значение скалярного произведения (рост функции потерь) на OOS выборке при малых шагах обучения означает низкую обобщающую способность построенного дерева.

Таким образом, минимизация скалярного произведения на OOS данных позволяет оценить изменение функции потерь на этих данных и служит основой для предлагаемого метода регуляризации:

$$\Delta L_m(X_{oos}) = \sum_{i=1}^k g_m(x_i) \cdot \nu f_m(x_i) = \sum_{l \in \mathcal{L}} \sum_{i \in l} g_m(x_i) \cdot \nu f_{m,l}.$$

Заметим, что приведенная выше оценка является суммой независимых слагаемых по листьям. Таким образом, возникает возможность оценки качества отдельных листьев.

Мы предлагаем простой алгоритм регуляризации, который основан на величине OOS оценки скалярного произведения предсказания градиента в листьях. А именно: алгоритм оценивает знак соответствующей метрики в каждом листе и зануляет значение в тех листьях, в которых скалярное произведение оказалось положительным:

$$\hat{f}_m(x) = \sum_{l \in \mathcal{L}} \mathbf{1}(x \in l) \cdot \mathbf{1} \left(\sum_{x' \in X_{oos} \cap l} g_m(x') \cdot f_{m,l} < 0 \right) \cdot f_{m,l}.$$

5. Эксперименты

Для оценки эффективности предлагаемого метода регуляризации, он был реализован на базе современной библиотеки для обучения моделей градиентного бустинга PyBoost [9]. Обучение моделей проводилось с подбором гиперпараметров посредством 5-фолдовой стратифицированной кросс-валидации с максимальным числом деревьев, ограниченным до 1000. Это ограничение было выбрано для предотвращения переобучения и обеспечения устойчивости модели. Категориальные признаки обрабатывались с помощью алгоритма, описанного в статье CatBoost [10].

В таблице 1 представлен перечень использованных наборов данных и их характеристики, а также результаты сравнения качества моделей при различныхолях сэмплирования для классического SGB и предложенного метода на основе OOS, описанного в секции 4. Все эксперименты были проведены на 10 независимых запусках с различными значениями случайного зерна (random seed), которое влияет на формирование подвыборок на каждой итерации. Важно отметить, что для каждого запуска случайное зерно для классического SGB и предложенного алгоритма было одинаковым, что позволяет проводить корректное сравнение эффективности этих подходов и использовать парный статистический тест (тест Уилкоксона), чтобы подтвердить значимость различий между двумя подходами. Усредненные результаты по всем 10 запускам также представлены в табл. 1.

Таблица 1
Результаты сравнения качества моделей (LogLoss) при различныхолях сэмплирования для классического SGB и предложенного метода на основе OOS

Sampling Ratio	0.1	0.3	0.5	0.7	0.9
Adult (49K/15)	.2989/.2988	.2860/. 2853	.2830/. 2815	.2799/. 2794	.2789/. 2782
Amazon (33K/10)	.1682/. 1670	.1645/. 1634	.1641/. 1631	.1638/. 1635	.1641/. 1638
Default (30K/23)	.4331/.4330	.4322/.4323	.4330/. 4327	.4337/.4335	.4348/. 4342
KDD Churn (50K/231)	.2349/. 2344	.2337/. 2333	.2329/. 2325	.2329/. 2326	.2329/. 2326
KDD Internet (10K/69)	.2635/. 2610	.2470/.2468	.2343/. 2312	.2308/. 2291	.2295/.2294
KDD Upselling (50K/231)	.1705/.1704	.1685/. 1681	.1673/.1670	.1672/.1671	.1669/.1671
Kick (73K/36)	.3000/. 2997	.2978/.2979	.2969/. 2963	.2965/. 2959	.2959/.2959
Marketing (45K/16)	.2107/. 2097	.2050/. 2043	.2022/. 2015	.2011/. 1999	.2007/. 2001

Жирным цветом выделены результаты со статзначимыми различиями ($p\text{-value} < 0.05$) согласно парному тесту Уилкоксона.

Из приведенных результатов можно сделать вывод об эффективности использования OOS выборок для регуляризации моделей SGB. В подавляющем числе экспериментов удается достичь значимого уменьшения ошибки предсказаний. При этом значимость эффекта

наблюдается независимо от уровня сэмплирования. Анализ значений p-value, полученных с помощью теста Уилкоксона, подтверждает статистическую значимость улучшений.

6. Заключение

В данной работе был предложен новый метод регуляризации стохастического градиентного бустинга (SGB) с использованием оценок качества на данных вне выборки (OOS). Основная идея заключается в том, чтобы использовать скалярное произведение между предсказанными и истинными градиентами на OOS данных для оценки качества модели и последующей коррекции структуры деревьев.

Эмпирические исследования показали, что предложенный подход позволяет значительно улучшить качество предсказаний модели на различных наборах данных. В частности, было отмечено уменьшение ошибки предсказаний (Log Loss) на тестовых данных по сравнению с классическими реализациями SGB. Важно отметить, что улучшения наблюдаются независимо от уровня сэмплирования, что подчеркивает универсальность метода.

Кроме того, проведенный анализ показал, что несмотря на низкие значения традиционных метрик, таких как R^2 и косинусное сходство на OOS данных, предложенный метод позволяет сохранить высокое качество модели за счет оптимизации важнейшего показателя — направления градиента. Это открывает новые возможности для дальнейшего улучшения моделей машинного обучения, особенно в условиях ограниченного объема данных и наличия шума.

В качестве возможных направлений для будущих исследований можно отметить обобщение алгоритма на методы второго порядка, оценку возможности оптимизации прочих гиперпараметров (размер листьев, регуляризационные коэффициенты и т.п.), а также разработку более эффективных алгоритмы использования OOS оценок.

Список литературы

1. Friedman J.H. Greedy function approximation: a gradient boosting machine // Annals of statistics. 2001. P. 1189–1232.
2. Roe B.P. [et al.]. Boosted decision trees as an alternative to artificial neural networks for particle identification // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2005. V. 543. N 2–3. P. 577–584.
3. Caruana R., Niculescu-Mizil A. An empirical comparison of supervised learning algorithms // Proceedings of the 23rd international conference on Machine learning. 2006. P. 161–168.
4. Mease D., Wyner A. Evidence Contrary to the Statistical View of Boosting // Journal of Machine Learning Research. 2008. V. 9. N 2.
5. Friedman J.H. Stochastic gradient boosting // Computational statistics & data analysis. 2002. V. 38. N 4. P. 367–378.
6. Ke G. [et al.]. Lightgbm: A highly efficient gradient boosting decision tree // Advances in neural information processing systems. 2017. V. 30.
7. Breiman L. Out-of-bag estimation. 1996.
8. Heckman J.J. Sample selection bias as a specification error // Econometrica: Journal of the econometric society. 1979. P. 153–161.
9. Iosipoi L., Vakhrushev A. Sketchboost: Fast gradient boosted decision tree for multioutput problems // Advances in Neural Information Processing Systems. 2022. V. 35. P. 25422–25435.
10. Prokhorenkova L. [et al.]. CatBoost: unbiased boosting with categorical features // Advances in neural information processing systems. 2018. V. 31.

References

1. *Friedman J.H.* Greedy function approximation: a gradient boosting machine. *Annals of statistics*. 2001. P. 1189–1232.
2. *Roe B.P., et al.*, Boosted decision trees as an alternative to artificial neural networks for particle identification. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2005. V. 543. N 2–3. P. 577–584.
3. *Caruana R., Niculescu-Mizil A.* An empirical comparison of supervised learning algorithms. *Proceedings of the 23rd international conference on Machine learning*. 2006. P. 161–168.
4. *Mease D., Wyner A.* Evidence Contrary to the Statistical View of Boosting. *Journal of Machine Learning Research*. 2008. V. 9. N 2.
5. *Friedman J.H.* Stochastic gradient boosting. *Computational statistics & data analysis*. 2002. V. 38. N 4. P. 367–378.
6. *Ke G., et al.*, Lightgbm: A highly efficient gradient boosting decision tree. *Advances in neural information processing systems*. 2017. V. 30.
7. *Breiman L.* Out-of-bag estimation. 1996.
8. *Heckman J.J.* Sample selection bias as a specification error. *Econometrica: Journal of the econometric society*. 1979. P. 153–161.
9. *Iosipoi L., Vakhrushev A.* Sketchboost: Fast gradient boosted decision tree for multioutput problems. *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2022. V. 35. P. 25422–25435.
10. *Prokhorenkova L., et al.*, CatBoost: unbiased boosting with categorical features. *Advances in neural information processing systems*. 2018. V. 31.

Поступила в редакцию 20.08.2024

УДК 510.643

В. В. Слюсарев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Почти достоверная модальная логика шкал Кripке с функциональным отношением

Рассматривается случайная отмеченная шкала Кripке с равномерным распределением на множестве шкал модальной логики **SL** на фиксированном множестве точек размера n . Почти достоверной логикой **SL^{as}** называется множество всех формул, которые общезначимы в случайной **SL**-шкале размера n с вероятностью, стремящейся к единице при $n \rightarrow \infty$. Доказывается, что **SL^{as} = SL**.

Ключевые слова: модальная логика, семантика Кripке, асимптотические вероятности, случайные графы, почти достоверные логики, разбиения множеств

V. V. Sliusarev

Moscow Institute of Physics and Technology

Almost sure modal logic of Kripke frames with a functional relation

We consider the random labelled Kripke frames distributed uniformly on the set of frames on a fixed set of n points that validate the modal logic **SL**. The almost sure logic **SL^{as}** is the set of all formulas that are valid in the random **SL**-frame on n points with probability approaching to one as $n \rightarrow \infty$. We show that **SL^{as} = SL**.

Key words: modal logic, Kripke semantics, asymptotic probabilities, random graphs, almost sure validities, set partitions

1. Введение

В современной математике активно изучаются случайные структуры, такие как случайные отношения на заданном множестве. Одним из основных способов изучения случайных структур является их описание с помощью логических языков.

Достаточно хорошо изучено описание случайных отношений на языке первого порядка. Широко известен закон нуля или единицы для случайных отношений, утверждающий, что любое определимое на языке первого порядка свойство случайного отношения на n -элементном множестве имеет асимптотическую вероятность, равную нулю или единице. Этот закон доказали независимо Глебский, Коган, Легонький и Таланов [1], и Фейгин [2]. В последней работе описывается аксиоматизация для множества всех предложений, которые верны для случайного отношения с вероятностью, стремящейся к единице, или *асимптотически почти наверное*.

Представляет интерес характеристизация случайных отношений на языках неклассических логик. Бинарные отношения можно описывать на языке модальной логики с помощью семантики Кripке. Случайные шкалы Кripке и случайные модели Кripке демонстрируют различное поведение: в частности, для моделей Кripке выполнен закон нуля и единицы [3], в то время как для шкал Кripке он нарушается [4]. В этой статье мы ограничимся рассмотрением случайных шкал Кripке.

Множество формул, которые выполнены асимптотически почти наверное в данном семействе случайных шкал Крипке, назовём *почти достоверной логикой* этого семейства. Горанко [5] описал почти достоверную логику случайной счётной шкалы Крипке и показал [6], что она содержится в почти достоверной логике конечных шкал Крипке. Задача полной аксиоматизации почти достоверной логики конечных шкал Крипке остаётся открытой; согласно Горанко [6], она может быть не конечно аксиоматизируемой и даже не перечислимой. Задача аксиоматизации почти достоверной логики, однако, может быть более выполнимой для более узких классов шкал Крипке, среди которых наибольший интерес представляют классы шкал, определяемые нормальными модальными логиками. Вербрюгге [7] доказала закон нуля и единицы для случайных конечных шкал модальной логики **GL** и аксиоматизацию для почти достоверной логики этого класса. Из этого результата следует, что почти достоверная логика конечных **GL**-шкал является строгим нормальным расширением логики **GL**.

В этой статье мы рассматриваем почти достоверную логику класса шкал модальной логики **SL**. Известно, что логика **SL** определяет класс шкал Крипке, в которых отношение является функцией. Классический результат Сегерберга [8] служит примером простой структуры, характеризующей эту логику: **SL** полна относительно шкалы на множестве натуральных чисел с отношением следования. В общем случае шкалы, в которых общезначима логика **SL**, устроены гораздо более нетривиально.

В разделе 1 вводятся основные термины и обозначения и формулируются классические утверждения теории моделей модальной логики, которые используются для решения поставленной задачи. В разделе 2 формулируется и доказывается теорема 1 о включении почти достоверной логики класса шкал, заданного некоторой модальной логикой, в почти достоверную логику класса связных шкал этой логики. В разделе 3 описывается комбинаторная структура связных конечных шкал логики **SL** и доказывается, что **SL** является почти достоверной логикой связных конечных **SL**-шкал. По теореме 1 из этого следует основной результат: **SL** также совпадает с почти достоверной логикой всех конечных **SL**-шкал.

1.1. Модальная логика

Определение 1. [9] Зафиксируем счётное множество пропозициональных переменных $PV := \{p_1, p_2, \dots\}$. Определим множество **ML** модальных формул как множество всех строк φ в алфавите $PV \cup \{(\cdot), (\cdot), \neg, \vee, \Diamond\}$, удовлетворяющих БНФ-выражению:

$$\varphi ::= \perp \mid p_i \mid (\varphi \rightarrow \psi) \mid \Box \varphi, \quad i \in \mathbb{N}.$$

Введём сокращение: $\Diamond \varphi := \neg \Box \neg \varphi$.

Определение 2. [9] Множество формул **L** назовём *нормальной модальной логикой*, если:

- 1) **L** содержит все тавтологии классической логики;
- 2) **L** содержит аксиому нормальности $\Box(p_1 \rightarrow p_2) \rightarrow (\Box p_1 \rightarrow \Box p_2)$;
- 3) **L** замкнуто относительно правил вывода:
 - (MP) если $\varphi \in \mathbf{L}$, $\varphi \rightarrow \psi \in \mathbf{L}$, то $\psi \in \mathbf{L}$ для любых $\varphi, \psi \in \mathbf{ML}$;
 - (Gen) если $\varphi \in \mathbf{L}$, то $\Box \varphi \in \mathbf{L}$ для любой $\varphi \in \mathbf{L}$;
 - (Sub) если $\varphi \in \mathbf{L}$, то $\varphi[\psi/p] \in \mathbf{L}$, где $p \in PV$, $\varphi, \psi \in \mathbf{ML}$, $\varphi[\psi/p]$ — результат замены всех вхождений переменной p в формуле φ на формулу ψ .

Определение 3. Пусть **SL** — минимальная нормальная модальная логика, содержащая формулы $\Box p \rightarrow \Diamond p$ и $\Diamond p \rightarrow \Box p$.

1.2. Шкалы Крипке

Определение 4. [9] *Шкалой Крипке* называется пара $F = (X, R)$, где $X \neq \emptyset$ — множество, $R \subseteq X \times X$ — отношение. Множество X в этом случае будем обозначать $\text{dom } F$.

Обозначение. Пусть $F = (X, R)$ — шкала Крипке. Обозначим:

- 1) $R^0 = \{(a, a) \mid a \in X\};$
- 2) $R^{-1} = \{(a, b) \mid a, b \in X, bRa\};$
- 3) $R^{n+1} := \{(a, b) \mid \exists c \in X (aRc \text{ и } cR^n b)\}$ для всех $n \geq 0$;
- 4) $R^* = \bigcup_{i \geq 0} R^i$; —рефлексивно-транзитивное замыкание R ;
- 5) $R(a) := \{b \in X \mid aRb\}$ для любого $a \in X$.
- 6) $R(U) := \bigcup_{a \in U} R(a)$ для любого $U \subseteq X$.
- 7) $R \upharpoonright U := R \cap (U \times U)$ для любого $U \subseteq X$.
- 8) $F \upharpoonright U := (U, R \upharpoonright U)$ для любого $U \subseteq X$.

Определение 5. [9] *Оценкой* в шкале Крипке $F = (X, R)$ называется функция $V : PV \rightarrow 2^X$. Пара (F, V) в этом случае называется *моделью Крипке*. Тройка (F, V, x) , где $x \in X$, называется *отмеченной моделью Крипке*.

Определение 6. Пусть $F = (X, R)$, $G = (Y, S)$ — шкалы Крипке. Биекция $f : X \rightarrow Y$ называется:

- 1) *изоморфизмом шкал* F и G , если для любых $a, b \in X$ верно $aRb \iff f(a)Sf(b)$;
- 2) *изоморфизмом моделей* (F, V) и G, U , где $V : PV \rightarrow 2^X$ и $U : PV \rightarrow 2^Y$, если выполнено условие 1 и для любых $a \in X$, $p \in PV$ выполнено $a \in V(p) \iff f(a) \in U(p)$;
- 3) *изоморфизмом отмеченных моделей* (F, V, x) и (G, U, y) , где $V : PV \rightarrow 2^X$, $x \in X$, $U : PV \rightarrow 2^Y$, $y \in Y$, если выполнено условие 2 и $f(x) = y$.

Две шкалы Крипке (модели Крипке, отмеченные модели Крипке) называются *изоморфными*, если между ними существует изоморфизм. Отношение изоморфности обозначается символом \cong .

Определение 7. [9] Пусть (F, V, x) — отмеченная модель Крипке, $F = (X, R)$, $\varphi \in \mathbf{ML}$. Отношение $F, V, x \models \varphi$ (“ φ истинна в (F, V, x) ”) определяется индуктивно:

- 1) $F, V, x \not\models \perp$;
- 2) $F, V, x \models p \iff x \in V(p)$, где $p \in PV$;
- 3) $F, V, x \models (\varphi \rightarrow \psi)$, если $F, V, x \not\models \varphi$ или $F, V, x \models \psi$, где $\varphi, \psi \in \mathbf{ML}$;
- 4) $F, V, x \models \Box \varphi$, если $\forall y \in R(x) (F, V, y \models \varphi)$, где $\varphi \in \mathbf{ML}$.

Предложение 1. [10] Пусть $\varphi \in \mathbf{ML}$. Если отмеченные модели Крипке (F, V, x) и (G, U, y) изоморфны, то $F, V, x \models \varphi \iff G, U, y \models \varphi$.

Определение 8. Формула φ общезначима в шкале Крипке $F = (X, R)$, если для любой оценки $V : PV \rightarrow 2^X$ и любой $x \in X$ выполнено $F, V, x \models \varphi$.

Предложение 2. [10] Пусть $\varphi \in \mathbf{ML}$. Если шкалы Крипке F и G изоморфны, то $F \models \varphi \iff G \models \varphi$.

Определение 9. Логикой $\text{Log } \mathcal{F}$ класса шкал Кripке \mathcal{F} называется множество всех формул $\varphi \in \mathbf{ML}$, таких что $F \models \varphi$ для любой $F \in \mathcal{F}$.

Определение 10. Классом шкал $\text{Fr } \Gamma$ множества формул $\Gamma \subseteq \mathbf{ML}$ называется класс всех шкал F , таких что $F \models \varphi$ для любой $\varphi \in \Gamma$.

Замечание. Если $\mathcal{F} = \{F\}$ или $\Gamma = \{\varphi\}$, то фигурные скобки могут опускаться, например: $F \models \Gamma$; $\text{Log } F$; $\text{Fr } \varphi$.

Определение 11. Рекурсивно определим функцию $\text{md} : \mathbf{ML} \rightarrow \mathbb{N}$ —модальную глубину формулы:

- 1) $\text{md}(\perp) = 0$;
- 2) $\text{md}(p) = 0$ для любой $p \in PV$;
- 3) $\text{md}(\varphi \rightarrow \psi) = \max\{\text{md}(\varphi), \text{md}(\psi)\}$;
- 4) $\text{md}(\Box\varphi) = \text{md}(\varphi) + 1$.

Определение 12. Пусть $F = (X, R)$ —шкала Кripке, V —оценка, $x \in X$. Пусть $n \in \mathbb{N}$. Определим *усечённую отмеченную модель* $M_x^{\leq n} = (F_x^{\leq n}, V_x^{\leq n}, x)$, где

$$F_x^{\leq n} = \bigcup_{i=0}^n R^i(x); \quad R_x^{\leq n} = R \upharpoonright X_x^{\leq n}; \quad F_x^{\leq n} = (X_x^{\leq n}, R_x^{\leq n}); \quad V_x^{\leq n}(p) = V(p) \cap X^{\leq n}(x), p \in PV.$$

Лемма 1. Пусть $F = (X, R)$ —шкала Кripке, V —оценка, $x \in X$. Пусть $n \in \mathbb{N}$. Тогда для любой формулы φ , $\text{md}(\varphi) \leq n$, верно

$$F, V, x \models \varphi \iff F_x^{\leq n}, V_x^{\leq n}, x \models \varphi.$$

Данная лемма является частным случаем леммы об n -бисимуляции [10, Лемма 31].

1.3. Случайные шкалы и почти достоверные логики

Определение 13. Пусть $[n] = \{1, \dots, n\}$. Обозначим \mathcal{F}_n множество всех шкал Кripке вида $([n], R)$, где $R \subseteq [n] \times [n]$.

Определение 14. Пусть \mathcal{F} —непустой класс шкал. Для любого $n \in \mathbb{N}$ определим *случайную шкалу* $\hat{F}_n(\mathcal{F})$ как случайный элемент со значениями в $\mathcal{F} \cap \mathcal{F}_n$ с равномерным распределением:

$$P(\hat{F}_n(\mathcal{F}) \in A) = \frac{|\mathcal{F}_n \cap \mathcal{F} \cap A|}{|\mathcal{F}_n \cap \mathcal{F}|}, \quad \text{где } A \subseteq \mathcal{F}_n \cap \mathcal{F}. \quad (1)$$

Замечание. Изоморфные шкалы считаются различными.

Определение 15. Почти достоверной логикой $\text{Log}^{\text{as}}(\mathcal{F})$ класса шкал \mathcal{F} называется множество формул $\varphi \in \mathbf{ML}$, таких что

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(\hat{F}_n(\mathcal{F}) \models \varphi) = 1.$$

Предложение 3. Для любого класса шкал \mathcal{F} , $\text{Log } \mathcal{F} \subseteq \text{Log}^{\text{as}}(\mathcal{F})$.

Доказательство. Пусть $\varphi \in \text{Log } \mathcal{F}$, тогда $\mathcal{F} \subseteq \text{Fr } \varphi$. По (1), для любого $n \in \mathbb{N}$,

$$P(\hat{F}_n(\mathcal{F}) \models \varphi) = \frac{|\mathcal{F} \cap \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \varphi|}{|\mathcal{F} \cap \mathcal{F}_n|} = \frac{|\mathcal{F} \cap \mathcal{F}_n|}{|\mathcal{F} \cap \mathcal{F}_n|} = 1,$$

так что $\varphi \in \text{Log}^{\text{as}}(\text{Fr } \mathbf{L})$. \square

Обозначение. Если L —нормальная модальная логика, то обозначим $\hat{F}_n(L) := \hat{F}_n(\text{Fr } L)$ и $L^{\text{as}} := \text{Log}^{\text{as}}(\text{Fr } L)$.

В этой работе мы исследуем логику \mathbf{SL}^{as} .

2. Логики случайных связных шкал

Определение 16. Пусть $F = (X, R)$ — шкала Крипке. Определим отношение

$$\overset{F}{\rightsquigarrow} := (R \cup R^{-1})^*.$$

Предложение 4. Для любой шкалы Крипке $F = (X, R)$, $\overset{F}{\rightsquigarrow}$ — отношение эквивалентности на множестве X .

Определение 17. Классы эквивалентности по отношению $\overset{F}{\rightsquigarrow}$ назовём *компонентами связности* шкалы F . Шкала Крипке F называется *связной*, если она содержит ровно одну компоненту связности.

Обозначение. Если \mathcal{F} — класс шкал Крипке, то $\text{Con } \mathcal{F}$ — класс всех связных шкал в \mathcal{F} .

Для многих модальных логик \mathbf{L} задачу определения почти достоверной логики \mathbf{L}^{as} можно свести к задаче описания почти достоверной логики $\text{Log}^{\text{as}}(\text{Con Fr } \mathbf{L})$ связных шкал логики \mathbf{L} .

Определение 18. Пусть $\mathcal{F} = \{(X_i, R_i)\}_{i \in I}$ — множество шкал Крипке, где I — некоторое непустое множество. *Несвязной суммой* $\biguplus \mathcal{F}$ множества шкал \mathcal{F} называется шкала (X, R) , где

$$\begin{aligned} X &= \{\langle i, a \rangle \mid a \in X_i, i \in I\}; \\ \langle i, a \rangle R \langle j, b \rangle &\iff i = j, a R_i b. \end{aligned}$$

Обозначение. Обозначим $F_1 \uplus F_2 := \biguplus_{i \in \{1,2\}} F_i$.

Лемма 2. [10] Пусть I — непустое множество, $\{F_i = (X_i, R_i)\}_{i \in I}$ — набор шкал Крипке, $F = \uplus_{i \in I} F_i$. Тогда $\text{Log } F = \bigcap_{i \in I} \text{Log } F_i$.

Определение 19. Пусть $F \in \mathcal{F}_n$, $n \in \mathbb{N}$. Положим

$$\begin{aligned} m &:= \max \left\{ |C| \mid C \in [n] \Big/ \overset{F}{\rightsquigarrow} \right\}; \\ k &:= \min \left\{ k \in [n] \mid \exists C \in [n] \Big/ \overset{F}{\rightsquigarrow} : k \in C, |C| = m \right\}. \end{aligned}$$

Пусть C — компонента связности F , содержащая точку k . Обозначим $MC(F) = F \upharpoonright C$.

Замечание. $MC(F)$ — сужение F на компоненту связности, которая содержит точку с минимальным номером среди всех компонент максимального размера. В частности, $MC(F)$ — связная шкала Крипке, и $|\text{dom } MC(F)| \geq |C|$ для любой $C \in [n] \Big/ \overset{F}{\rightsquigarrow}$.

Предложение 5. Для любой шкалы Крипке $F \in \mathcal{F}_n$, $\text{Log } F \subseteq \text{Log } MC(F)$.

Доказательство. Заметим, что $F \cong MC(F) \uplus F \upharpoonright ([n] \setminus \text{dom } MC(F))$. Утверждение следует из леммы 2. \square

Определение 20. Пусть $U \subseteq \mathbb{N}$ — конечное множество. Обозначим \mathcal{F}_U множество всех шкал Крипке вида (U, R) , $R \subseteq U \times U$.

Предложение 6. Пусть \mathbf{L} — модальная логика, $n \in \mathbb{N}$, $U \subseteq [n]$. При условии $\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U$, случайная шкала $MC(\hat{F}_n(\mathbf{L}))$ равномерно распределена на $\mathcal{F}_U \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$:

$$P(MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = G_1 \mid \text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U) = P(MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = G_2 \mid \text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U)$$

для любых $G_1, G_2 \in \mathcal{F}_U \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$, где $P(A \mid B) := \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$ — условная вероятность.

Доказательство. Зафиксируем $n \in \mathbb{N}$, подмножество $U \subseteq [n]$ и шкалы $G_1 = (U, S_1)$, $G_2 = (U, S_2) \in \mathcal{F}_U \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$. Так как $\text{dom } G_1 = \text{dom } G_2 = U$, по определению условной вероятности достаточно показать, что

$$\text{P}(MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = G_1) = \text{P}(MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = G_2),$$

что в силу (1) эквивалентно

$$|\{F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L} : MC(F) = G_1\}| = |\{F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L} : MC(F) = G_2\}|.$$

Построим биекцию f между этими двумя множествами. Пусть $F = ([n], R) \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L}$ такова, что $MC(F) = G_1$. Определим шкалу $f(F) = ([n], R')$, где

$$aR'b \iff \begin{cases} aRb, & \text{если } a, b \notin U; \\ aS_2b, & \text{если } a, b \in U, \end{cases} \quad a, b \in [n].$$

Заметим, что $F \cong G_1 \uplus F \upharpoonright ([n] \setminus U)$, так что по лемме 2 $\mathbf{L} \subseteq \text{Log } F \upharpoonright ([n] \setminus U)$. Далее, $f(F) \cong G_2 \uplus F \upharpoonright ([n] \setminus U)$ и, поскольку $G_2 \models \mathbf{L}$,

$$\text{Log } f(F) = \text{Log } G_2 \cap \text{Log } F \upharpoonright ([n] \setminus U) \supseteq \mathbf{L}.$$

Таким образом, $f(F) \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L}$.

По условию $\text{dom } G_1 = U$ является компонентой связности в F . По построению отношения R' , между U и $[n] \setminus U$ не существует R' -стрелок, так что U также является компонентой связности в F' . Так как при этом R' совпадает с R на $[n] \setminus U$, полученная шкала $f(F)$ имеет то же множество компонент связности, что и F . Следовательно, $\text{dom } MT(f(F)) = U$. Поскольку $f(F) \upharpoonright U = G_2$, имеем $MT(f(F)) = G_2$, как и требовалось.

Для любой шкалы $F = ([n], R') \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L}$, удовлетворяющей $MC(F) = G_2$, справедливо $f^{-1}(F) = ([n], R)$, где

$$aRb \iff \begin{cases} aR'b, & \text{если } a, b \notin U; \\ aS_1b, & \text{если } a, b \in U, \end{cases} \quad a, b \in [n].$$

Следовательно, f является биекцией между множествами $\{F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L} : MC(F) = G_1\}$ и $\{F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L} : MC(F) = G_2\}$, так что их мощности равны. \square

Предложение 7. Пусть \mathbf{L} — модальная логика, $n \in \mathbb{N}$, $U \subseteq [n]$, $|U| = m$. Тогда для любой модальной формулы φ :

$$\text{P}(MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) \models \varphi \mid \text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U) = \text{P}(\hat{F}_m(\text{Con Fr } \mathbf{L}) \models \varphi).$$

Доказательство. Множество U равномощно $[m]$, так что существует биекция $f : [m] \rightarrow U$. Определим биекцию \tilde{f} между множествами $\mathcal{F}_U \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$ и $\mathcal{F}_{[m]} \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$: для любой шкалы $F = (U, R) \in \mathcal{F}_U \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$ положим

$$\tilde{f}(F) = ([m], R'), \quad aR'b \iff f(a)Rf(b), \quad a, b \in [m].$$

Заметим, что f является изоморфизмом между F и $\tilde{f}(F)$. Тогда для любой $F \in \mathcal{F}_U \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$ и любой модальной формулы φ имеет место эквивалентность:

$$F \models \varphi \iff \tilde{f}(F) \models \varphi.$$

По предложению 6, при условии $\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U$ случайная шкала $MC(\hat{F}_n(\mathbf{L}))$ равномерно распределена на $\mathcal{F}_U \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$, следовательно, $\tilde{f}(MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})))$ равномерно распределена на $\mathcal{F}_{[m]} \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$ при этом же условии. Тогда утверждение следует из равномерного распределения $\hat{F}_m(\text{Con Fr } \mathbf{L})$ на $\mathcal{F}_{[m]} \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$. \square

Определение 21. Пусть $n \in \mathbb{N}$. Числом Белла B_n называется число разбиений множества $[n]$ на непересекающиеся подмножества.

Определение 22. Пусть $n, r \in \mathbb{N}$. Обозначим $G_{n,r}$ число всех разбиений множества $[n]$ на непересекающиеся подмножества, каждое из которых имеет мощность не более r .

Предложение 8. Для любых $r, k \in \mathbb{N}$ выполнено асимптотическое соотношение:

$$G_{n,r} 2^{nk} = o(B_n), \quad n \rightarrow \infty.$$

Доказательство. Известны асимптотики для чисел B_n и $G_{n,r}$ при $r = \text{const}$, $n \rightarrow \infty$ [11] [12]:

$$\begin{aligned} \ln B_n &= n(\ln n - \ln \ln n - 1 + o(1)), \\ \ln G_{n,r} &= \left(1 - \frac{1}{r}\right) n \ln n + O(n). \end{aligned}$$

Тогда

$$\ln \left(\frac{G_{n,r} 2^{nk}}{B_n} \right) = -\frac{n}{r} n \ln n + n \ln \ln n + O(n) \rightarrow -\infty,$$

так что $\frac{G_{n,r} 2^{nk}}{B_n} \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. \square

Предложение 9. Пусть \mathbf{L} — модальная логика, такая что $\mathcal{F}_n \cap \text{Con Fr } \mathbf{L} \neq \emptyset$ для любого $n \in \mathbb{N}$. Для любого фиксированного $r \in \mathbb{N}$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{P}(|\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L}))| \leq r) = 0.$$

Доказательство. Заметим, что любому разбиению $[n]$ на непересекающиеся подмножества соответствует хотя бы одна шкала в $\mathcal{F}_n \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$. Действительно, если $\{U_1, \dots, U_k\}$ — разбиение, то для любого $j = 1, \dots, k$ существует связная шкала $F_j \in \mathcal{F}_{|U_j|} \cap \text{Con Fr } \mathbf{L}$. Построим шкалу $F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L}$, поместив шкалу, изоморфную F_j , на U_j для $j = 1, \dots, k$. Разным разбиениям соответствуют разные шкалы, так что $|\mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L}| \geq B_n$.

Оценим сверху число шкал $F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L}$, у которых $|\text{dom } MC(F)| \leq r$. Так как $\text{dom } MC(F)$ — максимальная компонента связности, у всех таких шкал каждая компонента связности имеет мощность не более r . Каждая такая шкала однозначно задаётся разбиением $[n] \xrightarrow{F} \{U_1, \dots, U_k\}$ на компоненты связности, где $k \leq n$ и $|U_j| \leq r$ для любого $j = 1, \dots, k$, и сужениями $R \upharpoonright U_j$ на все компоненты связности U_j . Для любого j существует $2^{|U_j|^2} \leq 2^{r^2}$ отношений на U_j . Тогда искомое число шкал оценивается сверху выражением

$$\sum_{\substack{[n] = U_1 \sqcup \dots \sqcup U_k \\ \forall j \quad |U_j| \leq r}} 2^{|U_1|^2} \dots \dots 2^{|U_k|^2} \leq \sum_{\substack{[n] = U_1 \sqcup \dots \sqcup U_k \\ \forall j \quad |U_j| \leq r}} 2^{nr^2} = G_{n,r} 2^{nr^2}.$$

По предложению 8 выполнено $G_{n,r} 2^{nr^2} = o(B_n)$, $n \rightarrow \infty$. Тогда

$$\text{P}(|\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L}))| \leq r) = \frac{|\{F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L} : |\text{dom } MC(F)| \leq r\}|}{|\{\mathcal{F}_n \cap \text{Fr } \mathbf{L}\}|} = \frac{o(B_n)}{B_n} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

\square

Теорема 1. Пусть \mathbf{L} — модальная логика, такая что $\mathcal{F}_n \cap \text{Con Fr } \mathbf{L} \neq \emptyset$ для любого $n \in \mathbb{N}$. Тогда $\mathbf{L}^{\text{as}} \subseteq \text{Log}^{\text{as}}(\text{Con Fr } \mathbf{L})$.

Доказательство. Пусть $\varphi \notin \text{Log}^{\text{as}}(\text{Con Fr } \mathbf{L})$. Тогда существуют $m \in \mathbb{N}$ и $q \in [0, 1)$, такие что $\text{P}(\hat{F}_n(\text{Con Fr } \mathbf{L}) \models \varphi) < q$ при $n \geq m$.

По предложению 5,

$$\begin{aligned} \text{P}(\hat{F}_n(\mathbf{L}) \models \varphi) &\leq \text{P}(MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) \models \varphi) \\ &\leq \text{P}(|\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L}))| < m) + \text{P}(|\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L}))| \geq m \wedge MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) \models \varphi). \end{aligned}$$

По предложению 9, первое слагаемое стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$. Оценим второе, используя предложение 7:

$$\begin{aligned} \text{P}(|\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L}))| \geq m \wedge MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) \models \varphi) &= \\ &= \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq m} \text{P}(\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U \wedge MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) \models \varphi) = \\ &= \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq m} \text{P}(MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) \models \varphi \mid \text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U) \text{P}(\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U) = \\ &= \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq m} \text{P}(\hat{F}_{|U|}(\text{Con Fr } \mathbf{L}) \models \varphi) \text{P}(\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U) < \\ &< \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq m} q \text{P}(\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U) = \\ &= q \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq m} \text{P}(\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L})) = U) = \\ &= q \text{P}(|\text{dom } MC(\hat{F}_n(\mathbf{L}))| \geq m) \leq q. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\text{P}(\hat{F}_n(\mathbf{L}) \models \varphi) \leq o(1) + q, \quad n \rightarrow \infty,$$

так что при достаточно большом n данная вероятность меньше единицы. Тогда $\varphi \notin \mathbf{L}^{\text{as}}$.

В силу произвольности $\varphi \notin \text{Log}^{\text{as}}(\text{Con Fr } \mathbf{L})$, имеем $\mathbf{L}^{\text{as}} \subseteq \text{Con Fr } \mathbf{L}$. \square

3. Логика \mathbf{SL}^{as}

Шкалы Крипке из класса $\text{Fr } \mathbf{SL}$ будем называть \mathbf{SL} -шкалами. В этом разделе мы опишем структуру случайной \mathbf{SL} -шкалы и докажем основной результат — равенство $\mathbf{SL}^{\text{as}} = \mathbf{SL}$.

Предложение 11. Пусть $F = (X, R)$ — шкала Крипке. Логика \mathbf{SL} общезначима в F тогда и только тогда, когда

$$\forall a \in X (|R(a)| = 1). \quad (2)$$

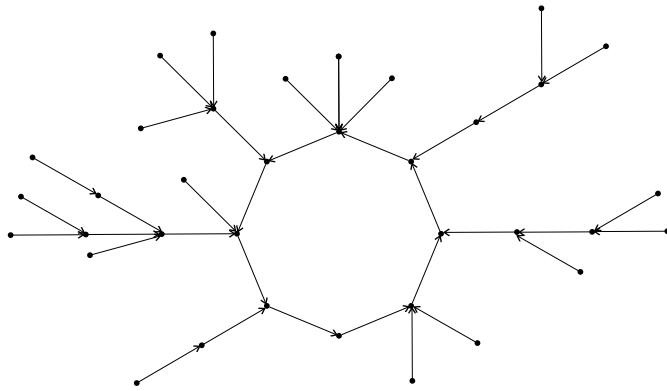
Доказательство. Формула $\Box p \rightarrow \Diamond p$ определяет условие $\forall a \in X (R(a) \neq \emptyset)$, а формула $\Diamond p \rightarrow \Box p$ — условие $\forall a \in X (|R(a)| \leq 1)$. Обе эквивалентности проверяются непосредственно по определению 7. \square

Определение 23. Шкала $F = (X, R)$ называется *обратным деревом*, если:

- 1) существует единственная точка $a_0 \in X$, такая что $R(a_0) = \emptyset$;
- 2) $|R(a)| = 1$ для любой $a \in X \setminus \{a_0\}$;
- 3) aR^*a_0 для любой $a \in X$.

Точку a_0 будем называть *корнем* дерева F и обозначать $\text{root } F$.

Определение 24. Пусть $F = (X, R)$ — обратное дерево, $|X| < \infty$. Высотой F назовём число $\text{height } F = \max \{k \geq 0 \mid \exists a \in X : aR^k(\text{root } F)\}$.

Рис. 1. Конечная связная **SL**-шкала

Предложение 12. Шкала Кripке $F = (X, R)$ — конечная связная **SL**-шкала тогда и только тогда, когда

1) в F существует цикл $C = \{c_1, \dots, c_k\} \subseteq X$:

$$R(c_1) = \{c_2\}; R(c_2) = \{c_3\}; \dots; R(c_k) = \{c_1\}; \quad (3)$$

2) для любой $c \in C$ существует подмножество $T(c) \subseteq X$, такое что $c \in T(c)$ и $(T(c), R \upharpoonright T(c))$ — обратное дерево;

3) множества $T(c)$, $c \in C$, попарно не пересекаются и образуют разбиение X .

Доказательство. Пусть шкала $F = (X, R)$ удовлетворяет условиям 1 — 3. Покажем, что для любой точки $a \in X$ выполнено (2). Если $a \in C$, то $|R(a)| = 1$ согласно (3). Иначе, $a \in T(c)$ для некоторого $c \in C$. Так как $a \notin C$, имеем $a \neq c$, так что a не является корнем обратного дерева $T(c)$. Тогда $|R(a)| = 1$. В силу произвольности $a \in X$, утверждение доказано.

Обратно, пусть $F = (X, R) \in \mathcal{F}_n \cap \text{Con Fr } \mathbf{SL}$. Покажем, что в F существует цикл. Рассмотрим произвольную точку $a_1 \in X$. По условию (2) существует единственная точка $a_2 \in R(a_1)$. Продолжим построение: для любого $i \in \mathbb{N}$ существует единственная точка $a_{i+1} \in R(a_i)$. Тогда $a_{|X|+1} \in \{a_1, \dots, a_{|X|}\}$ в силу конечности множества X . Выберем минимальное m , такое что $a_{m+1} = a_k$ для некоторого $k \leq m$. Тогда $C = \{a_k, a_{k+1}, \dots, a_m\}$ — искомый цикл.

Покажем, что цикл C единственный. Предположим, что в F существуют два различных цикла $C = \{c_1, \dots, c_k\}$ и $C' = \{c'_1, \dots, c'_s\}$. Если $C \cap C' \neq \emptyset$, то $c_i = c'_j$ для некоторых $i \in [k], j \in [s]$. Но тогда по (2) получаем, что $c_{(i \bmod k)+1} = c'_{(j \bmod s)+1}$, откуда по индукции можно доказать, что $C = C'$. Если $C \cap C' = \emptyset$, то заметим, что в силу связности шкалы F верно $c_1(R \cup R^{-1})^* c'_1$. Так как циклы не пересекаются, часть пути из c_1 в c'_1 лежит вне обоих циклов: $c_i(R \cup R^{-1})a_1(R \cup R^{-1})a_2(R \cup R^{-1}) \dots a_l(R \cup R^{-1})c'_j$ для некоторых $i \in [k], j \in [s]$ и $a_1, \dots, a_l \notin C \cup C'$. Так как $R(c_i) = \{c_{(i \bmod k)+1}\}$, невозможно, что c_iRa_1 , так что a_1Rc_i . Аналогично, так как $|R(a_1)| = 1$, получаем a_2Ra_1 . Рассуждая таким образом, получим, что $c'_jRa_lR \dots Ra_1Rc_i$, но это противоречит тому, что $R(c'_j) = \{c_{(j \bmod s)+1}\}$. Следовательно, цикл C единственный.

Рассмотрим произвольную точку $c \in C$. Пусть $T_1(c) = R^{-1}(c) \setminus C$. Тогда для любой $a \in T_1(c)$, $R(a) = \{c\}$. Пусть $T_2(c) = R^{-1}(T_1(c))$. Так как $R(T_1(c)) = \{c\}$ и $c \notin T_1(c)$, имеем $T_2(c) \cap T_1(c) = \emptyset$. Заметим, что $T_2(c) \cap C = \emptyset$. Действительно, если $a \in T_2(c) \cap C$, то aRb для некоторого $b \in R_1(c)$, но в то же время в силу (3) $R(a) = \{c'\}$ для некоторого $c' \in C$ — противоречие. Продолжим построение: для любого $i \geq 2$ положим $T_{i+1}(c) = R^{-1}(T_i(c))$. Аналогично описанному случаю доказывается, что $T_{i+1} \cap C = \emptyset$ и $T_{i+1} \cap T_j = \emptyset$ для $1 \leq j \leq i$.

Положим $T(c) = \{c\} \cup \bigcup_{i=1}^{\infty} T_i(c)$. Обозначим $R_c = R \upharpoonright T(c)$. Докажем, что $(T(c), R_c)$ — обратное дерево с корнем c . По построению $c \in T(c)$ и $T(c) \cap C = \{c\}$. Так как $R(c) \subseteq C$, получаем, что $R_c(c) = \emptyset$. Для любого $a \in T(c) \setminus \{c\}$, $|R(a)| = 1$ по (2) и $R(a) \subseteq T(c)$ по построению, так что $|R_c(a)| = 1$. Выше мы показали, что для любого $a \in T_1(c)$ выполнено aRc . Так как $T_{i+1}(c) = R^{-1}(T_i(c))$ для всех $i \geq 1$, отсюда следует, что aR^*c для любого $a \in T_i(c)$ и любого $i \geq 1$, так что aR^*c . Следовательно, aR^*c для любой $a \in T(c)$.

Покажем, что $\{T(c) \mid c \in C\}$ — разбиение X . Пусть $a \in X$. Рассуждая так же, как при доказательстве существования цикла, заметим, что в $R^*(a)$ содержится цикл. Так как C — единственный цикл, $C \subseteq R^*(a)$. Для любой $c \in C$ обозначим $d(a, c)$ минимальное число $d \geq 0$, такое что aR^dc . Из условия (2) следует, что $d(a, c)$ различны для разных $c \in C$. Пусть c_a — точка из C с наименьшим $d(a, c)$. Если $d(a, c_a) = 0$, то $a = c_a$, так что $a \in T(a)$. Иначе $a \in T_{d(a, c_a)}(c_a) \subseteq T(c_a)$.

Теперь докажем, что $a \notin T(c)$ при $c \neq c_a$. Предположим, что $a \in T(c)$ для некоторого $c \in C$. Если $a = c$, то $d(a, c) = 0$ должно быть минимальным среди всех точек из C , тогда $c_a = c$. Иначе, $a \in T_r(c)$ для некоторого $r > 0$, тогда aR^rc . В силу минимальности $d(a, c_a)$, $r > d(a, c_a)$. Тогда путь из a в c проходит через c_a , следовательно, $c_a \in T(c)$. По построению $T(c) \cap C = \{c\}$, так что $c_a = c$. Утверждение доказано. \square

Определение 25. Определим шкалу $N := (\mathbb{N}, S)$, где $S = \{(n, n+1) \mid n \in \mathbb{N}\}$.

Предложение 13. [8] $\mathbf{SL} = \text{Log } N$.

Определение 26. Пусть $F = (X, R)$ — шкала Крипке, $k \in \mathbb{N}$. Множество $\{a_1, \dots, a_k\} \subseteq X$ называется *простой цепью из k элементов* в F , если a_1, \dots, a_k попарно различны и $a_1R\dots Ra_k$.

Предложение 14. Пусть $\varphi \in \mathbf{ML} \setminus \mathbf{SL}$ — модальная формула, $\text{md}(\varphi) = m$. Если в шкале $F = (X, R) \in \text{Fr } \mathbf{SL}$ найдётся простая цепь из $m+1$ элемента, то $F \not\models \varphi$.

Доказательство. По утверждению 13, $(\mathbb{N}, S) \not\models \varphi$. Тогда для некоторой оценки V шкалы N и некоторого $r \in \mathbb{N}$ верно $N, V, r \not\models \varphi$. По лемме 1, $N_r^{\leq m}, V_r^{\leq m}, r \not\models \varphi$. Заметим, что $\text{dom } N_r^{\leq r} = \{r, r+1, \dots, r+m\}$.

Пусть a_0, \dots, a_m — простая цепь в F . По условию (2), $R(a_i) = \{a_{i+1}\}$ для всех $0 \leq i < m$. Тогда $F_{a_0}^{\leq m} = (\{a_0, \dots, a_m\}, \{(a_i, a_{i+1})_{i=0}^{m-1}\})$. Определим оценку V' на $F_{a_0}^{\leq m}$: положим

$$V'(p) = \{a_i \mid 0 \leq i \leq m, (r+i) \in V_a^{\leq m}(p)\}.$$

Тогда отмеченные модели $(N_r^{\leq m}, V_r^{\leq m}, r)$ и $(F_{a_0}^{\leq m}, V', a)$ изоморфны, так что по предложению 2 $F_a^{\leq m}, V', a \not\models \varphi$. По лемме 1, $F \not\models \varphi$. \square

Следствие 1. Пусть $\varphi \in \mathbf{ML} \setminus \mathbf{SL}$, $\text{md}(\varphi) = m$. Пусть $F = ([n], R) \in \text{Con Fr } \mathbf{SL}$. Обозначим $C \subseteq [n]$ цикл в F , $h = \max_{c \in C} \text{height}(T(c))$. Если $|C| + h > m$, то $F \not\models \varphi$.

Доказательство. Пусть $|C| + h > m$. Существует $c \in C$, такая что $\text{height } T(c) = h$. Тогда в $T(c)$ найдётся точка a_0 , такая что $R^*(a_0)$ — простая цепь из не менее чем $m+1$ элемента.

\square

Следствие 2. Пусть $\varphi \in \mathbf{ML} \setminus \mathbf{SL}$, $\text{md}(\varphi) = m$. Пусть $F = ([n], R) \in \text{Con Fr } \mathbf{SL}$, $C \subseteq [n]$ — цикл в F , $d = \max_{c \in C} |T(c)|$. Если $d < \frac{n}{m}$, то $F \not\models \varphi$.

Доказательство. Пусть $d < \frac{n}{m}$. Так как $\{T(c) \mid c \in C\}$ — разбиение множества $[n]$,

$$n = \sum_{c \in C} |T(c)| \leq |C| \max_{c \in C} |T(c)| = |C|d < |C|\frac{n}{m},$$

тогда $|C| > \frac{mn}{n} = m$, следовательно $|C| + d > m$. По следствию 1, $F \not\models \varphi$. \square

Далее мы покажем, что $\text{Log}^{\text{as}}(\text{Con Fr } \mathbf{SL}) \subseteq \mathbf{SL}$. По следствию 1 достаточно показать, что в случайной шкале $\hat{F}_n(\text{Con Fr } \mathbf{SL})$ с ненулевой асимптотической вероятностью найдётся большой цикл или дерево большой высоты. Исследуем распределение высоты максимального дерева в $\hat{F}_n(\text{Con Fr } \mathbf{SL})$.

Определение 27. Пусть $F = ([n], R)$ — связная **SL**-шкала с циклом C и разбиением $\{T(c) \mid c \in C\}$ на обратные деревья. Обозначим:

$$m := \max\{\text{height } T(c) \mid c \in C\},$$

$$c_0 := \min\{c \in C \mid \text{height } T(c) = m\}.$$

Определим $MT(F) := F \upharpoonright T(c_0)$ — обратное дерево в F , обладающее минимальным номером корня среди обратных деревьев максимальной высоты в F .

Определение 28. Определим случайную шкалу $\hat{T}_n = MT(\hat{F}_n(\text{Con Fr } \mathbf{SL}))$.

Определение 29. Для любого $U \subseteq \mathbb{N}$, $|U| < \infty$, $a \in U$ обозначим $\mathcal{T}(U, r)$ множество обратных деревьев вида (U, R) с корнем r .

Предложение 15. Пусть $n \in \mathbb{N}$, $U \subseteq [n]$ — фиксированное подмножество, $|U| < \infty$, $r \in U$. При условии $\text{dom } \hat{T}_n = U$, $\text{root } \hat{T}_n = r$ случайная шкала \hat{T}_n равномерно распределена на $\mathcal{T}(U, r)$:

$$P(\hat{T}_n = T_1 \mid \text{dom } \hat{T}_n = U, \text{root } \hat{T}_n = r) = P(\hat{T}_n = T_2 \mid \text{dom } \hat{T}_n = U, \text{root } \hat{T}_n = r)$$

для любых $T_1, T_2 \in \mathcal{T}_{U,a}$.

Доказательство. Пусть $T_1 = (U, S_1)$, $T_2 = (U, S_2) \in \mathcal{T}_{U,a}$. По определению условной вероятности достаточно показать, что

$$P(\hat{T}_n = T_1 \wedge \text{dom } \hat{T}_n = U \wedge \text{root } \hat{T}_n = a) = P(\hat{T}_n = T_2 \wedge \text{dom } \hat{T}_n = U \wedge \text{root } \hat{T}_n = a),$$

что равносильно

$$|\{F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Con Fr } \mathbf{SL} : MT(F) = T_1\}| = |\{F \in \mathcal{F}_n \cap \text{Con Fr } \mathbf{SL} : MT(F) = T_2\}|.$$

Построим биекцию f между этими двумя множествами. Пусть $F = ([n], R)$ — связная **SL**-шкала и $MT(F) = T_1$. В частности, $\text{root } MT(F) = \text{root } T_1 = a$. Определим $f(F) = ([n], R')$, где

$$aR'b \iff \begin{cases} aRb, & \text{если } a \notin U \\ aS_2b, & \text{если } a \in U. \end{cases}$$

Иными словами, мы заменили отношение на множестве U так, чтобы на нём находилось дерево T_2 вместо дерева T_1 . Так как $\text{root } T_2 = a = \text{root } MT(F)$, то легко убедиться, что $f(F)$ — связная **SL**-шкала с таким же разбиением на обратные деревья, как и F . Тогда $\text{dom } MT(F) = U$ и $MT(F) = (U, R' \upharpoonright U) = (U, S_2) = T_2$.

Чтобы показать, что f — биекция, заметим, что для любой связной **SL**-шкалы $G = ([n], R')$, такой что $MT(F) = U$ и $G \upharpoonright U = T_2$, прообраз $f^{-1}(G)$ можно вычислить аналогичной заменой отношения на множестве U на отношение дерева T_1 :

$$f^{-1}(G) = ([n], R), \text{ где } aRb \iff \begin{cases} aR'b, & \text{если } a \notin U \\ aS_1b, & \text{если } a \in U. \end{cases}$$

□

Определение 30. Для любых $U \subseteq \mathbb{N}$, $|U| < \infty$, и $a \in U$ обозначим $\hat{X}(U, a)$ случайный элемент множества $\mathcal{T}(U, a)$ с равномерным распределением.

Определение 31. Обозначим \hat{Y}_n случайный элемент с равномерным распределением на всех обратных деревьях вида $([n], R)$.

Следствие 3. Пусть $n \in \mathbb{N}$, $U \subseteq [n]$ — фиксированное подмножество, $a \in U$. Тогда для любого $T \in \mathcal{T}(U, a)$:

$$P(\hat{T}_n = T \mid \text{dom } \hat{T}_n = U, \text{root } \hat{T}_n = a) = P(\hat{X}(U, a) = T).$$

Предложение 16. Пусть $U \subseteq \mathbb{N}$. Тогда для любого $a \in U$ и любого числа $h \in \mathbb{N}$,

$$P(\text{height } \hat{X}(U, a) = h) = P(\text{height } \hat{Y}_{|U|} = h).$$

Доказательство. Так как $|U| < \infty$ и распределение $\hat{X}(U, a)$ не зависит от структуры множества U , достаточно рассмотреть случай $U = [n]$, где $n \in \mathbb{N}$.

По определению, \hat{Y}_n равномерно распределено на множестве $\bigsqcup_{r=1}^n \mathcal{T}([n], r)$. Тогда для любого $h \in \mathbb{N}$:

$$P(\text{height } \hat{Y}_n = h) = \frac{\sum_{a=1}^n |\{F \in \mathcal{T}([n], a) : \text{height } F = h\}|}{\sum_{a=1}^n |\mathcal{T}([n], a)|}. \quad (4)$$

Пусть $a, b \in [n]$. Обозначим σ_{a-b} циклический сдвиг на $[n]$, который переводит b в a :

$$\sigma_{a-b} : [n] \rightarrow [n]; \quad \sigma_{a-b}(i) = (i + a - b) \bmod n$$

Для любого $F_a = ([n], R) \in \mathcal{T}([n], a)$ определим $F_b = ([n], R')$, где

$$iR'j \iff \sigma_{a-b}(i)R\sigma_{a-b}(j).$$

По построению $\text{root } F_b = b$, так что $F_b \in \mathcal{T}([n], b)$; деревья F_a и F_b изоморфны, так что $\text{height } F_a$ и $\text{height } F_b$. Легко видеть, что данное преобразование $F_a \mapsto F_b$ обратимо: аналогичным образом применим к F_b обратный циклический сдвиг σ_{b-a} . Таким образом, для любых $a, b \in [n]$ и любого $h \in \mathbb{N}$ определена биекция между $\{F \in \mathcal{T}([n], a) : \text{height } F = h\}$ и $\{F \in \mathcal{T}([n], b) : \text{height } F = h\}$. Следовательно,

$$|\{F \in \mathcal{T}([n], a) : \text{height } F = h\}| = |\{F \in \mathcal{T}([n], b) : \text{height } F = h\}|, \quad a, b \in [n]. \quad (5)$$

Аналогично,

$$|\mathcal{T}([n], a)| = |\mathcal{T}([n], b)|, \quad a, b \in [n]. \quad (6)$$

Тогда по (4) для любого $h \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} P(\text{height } \hat{Y}_n = h) &= \frac{n|\{F \in \mathcal{T}([n], 1) : \text{height } F = h\}|}{n|\mathcal{T}([n], 1)|} = \\ &= \frac{|\{F \in \mathcal{T}([n], 1) : \text{height } F = h\}|}{|\mathcal{T}([n], 1)|} = P(\text{height } \hat{X}([n], 1) = h). \end{aligned}$$

Для любого $a \in [n]$ и $h \in \mathbb{N}$, используя (5) и (6):

$$\begin{aligned} P(\text{height } \hat{X}([n], a) = h) &= \frac{|\{F \in \mathcal{T}([n], a) : \text{height } F = h\}|}{|\mathcal{T}([n], a)|} = \\ &= \frac{|\{F \in \mathcal{T}([n], 1) : \text{height } F = h\}|}{|\mathcal{T}([n], 1)|} = P(\text{height } \hat{Y}_n = h), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать. \square

Следствие 4. Пусть $n \in \mathbb{N}$, $U \subseteq [n]$ — фиксированное подмножество, $a \in U$. Тогда для любого $h \in \mathbb{N}$:

$$P(\text{height } \hat{T}_n = h \mid \text{dom } \hat{T}_n = U, \text{root } \hat{T}_n = a) = P(\text{height } \hat{Y}_{|U|} = h).$$

Доказательство. Утверждение прямо вытекает из следствия 3 и предложения 16. \square

Предложение 17. [13] Справедливы асимптотические выражения для математического ожидания и дисперсии высоты случайного дерева:

$$E(\text{height } \hat{Y}_n) \sim \sqrt{2\pi n}; \quad \text{Var}(\text{height } \hat{Y}_n) \sim \frac{\pi(\pi - 3)n}{3}, \quad n \rightarrow \infty.$$

Предложение 18. $\text{Log}^{\text{as}}(\text{Con Fr } \mathbf{SL}) \subseteq \mathbf{SL}$.

Доказательство. Пусть $\varphi \notin \mathbf{SL}$, $\text{md}(\varphi) = m$.

По следствиям 1 и 2,

$$P(\hat{F}_n(\text{Con Fr } \mathbf{SL}) \not\models \varphi) \geq P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| < \frac{n}{m}\right) + P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| \geq \frac{n}{m} \wedge \text{height } \hat{T}_n > m\right). \quad (7)$$

Вычислим второе слагаемое, используя следствие 4:

$$\begin{aligned} P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| \geq \frac{n}{m} \wedge \text{height } \hat{T}_n > m\right) &= \\ &= \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq \frac{n}{m}} P(\text{dom } \hat{T}_n = U \wedge \text{height } \hat{T}_n > m) = \\ &= \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq \frac{n}{m}} P(\text{height } \hat{T}_n > m \mid \text{dom } \hat{T}_n = U) P(\text{dom } \hat{T}_n = U) = \\ &= \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq \frac{n}{m}} P(\text{height } \hat{Y}_{|U|} > m) P(\text{dom } \hat{T}_n = U) = \\ &= P(\text{height } \hat{Y}_{|U|} > m) \cdot \sum_{U \subseteq [n], |U| \geq \frac{n}{m}} P(\text{dom } \hat{T}_n = U) = \\ &= P(\text{height } \hat{Y}_{|U|} \geq m) P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| < \frac{n}{m}\right). \end{aligned}$$

Для любого $k > \frac{n}{m}$ верна асимптотика $\frac{m}{\sqrt{k}} = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) = o(1)$, так что по утверждению 17 и неравенству Чебышёва получим

$$\begin{aligned} P(\text{height } \hat{Y}_k \leq m) &\leq P\left(|\text{height } \hat{Y}_k - \mathbb{E} \text{height } \hat{Y}_k| \geq \mathbb{E} \text{height } \hat{Y}_k - m\right) \leq \\ &\leq \frac{\text{Var}(\text{height } \hat{Y}_k)}{(\mathbb{E} \text{height } \hat{Y}_k - m)^2} \sim \frac{\pi(\pi-3)k}{3(\sqrt{2\pi k} - m)^2} \sim \frac{\pi(\pi-3)}{3(\sqrt{2\pi} - \frac{m}{\sqrt{k}})^2} \sim \frac{\pi-3}{6}, \quad n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Тогда для любого $U \subseteq [n]$, $|U| > \frac{n}{m}$ выполнено:

$$P(\text{height } \hat{Y}_{|U|} > m) \geq \left(1 - \frac{\pi-3}{6}\right)(1+o(1)) = \frac{9-\pi}{6}(1+o(1)), \quad n \rightarrow \infty.$$

Обозначим $q := \frac{9-\pi}{6} > 0$. Подставим полученную оценку в (7):

$$\begin{aligned} P(\hat{F}_n(\text{Con Fr } \mathbf{SL}) \not\models \varphi) &\geq P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| < \frac{n}{m}\right) + q(1+o(1)) P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| \geq \frac{n}{m}\right) = \\ &= P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| < \frac{n}{m}\right) + q(1+o(1)) \left(1 - P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| < \frac{n}{m}\right)\right) = \\ &= \left(q + (1-q) P\left(|\text{dom } \hat{T}_n| < \frac{n}{m}\right)\right)(1+o(1)) \geq q(1+o(1)). \end{aligned}$$

При достаточно большом n эта вероятность положительна.

В силу произвольности $\varphi \notin \mathbf{SL}$, $\text{Log}^{\text{as}}(\text{Con Fr } \mathbf{SL}) \subseteq \mathbf{SL}$. \square

Теорема 2. $\mathbf{SL}^{\text{as}} = \mathbf{SL}$.

Доказательство. Заметим, что $\mathcal{F}_n \cap \text{Con Fr } \mathbf{SL} \neq \emptyset$ для любого $n \in \mathbb{N}$: цикл на множестве $[n]$ является связной \mathbf{SL} -шкалой. Тогда по теореме 1 и утверждению 18, $\mathbf{SL}^{\text{as}} \subseteq \text{Con Fr } \mathbf{SL} \subseteq \mathbf{SL}$. По утверждению 3, $\mathbf{SL} \subseteq \mathbf{SL}^{\text{as}}$. \square

4. Заключение

Мы доказали, что $\mathbf{SL}^{\text{as}} = \mathbf{SL}$. Ключевую роль в доказательстве сыграла теорема 1, которая позволила вместо всех \mathbf{SL} -шкал рассматривать только связные \mathbf{SL} -шкы, комбинаторные свойства которых значительно проще. Предложение 12 показывает, что связная \mathbf{SL} -шкала может быть описана небольшим набором параметров. Такое описание позволяет нам явно вычислить вероятности возникновения свойств, от которых зависит логика случайной \mathbf{SL} -шкы.

Исследование может быть продолжено в нескольких направлениях. Открыт вопрос о законе нуля и единицы для модальных формул в \mathbf{SL} -шкахах. Полученный нами результат может послужить важной отправной точкой для изучения закона нуля и единицы. Поскольку $\mathbf{SL}^{\text{as}} = \mathbf{SL}$, достаточно установить, существуют ли формулы, не входящие в логику \mathbf{SL} , которые выполнены в случайной \mathbf{SL} -шке с положительной, но меньшей единицы асимптотической вероятностью.

Описанный нами метод может быть использован для изучения вероятностных свойств других модальных логик. В частности, можно рассматривать логики, описывающие более широкие классы шкы, чем \mathbf{SL} . Условие (2) является частным случаем условий вида $\forall x (|r(x)| \leq m)$ или $\forall x (1 \leq |R(x)| \leq m)$, которые соответствуют модальным логикам \mathbf{Alt}_m и \mathbf{DAlt}_m [9]. Мы предполагаем, что случайные шкы этих логик обладают схожими свойствами, что позволит обобщить подход данной статьи на эти логики.

Список литературы

1. Глебский Ю.В., Коган Д.И., Легонький М.И., Таланов В.А. Область и степень реализуемости формул ограниченного исчисления предикатов // Кибернетика. 1969. Т. 5. С. 142–154.
2. Fagin R. Probabilities on finite models // Journal of Symbolic Logic. 1976. V. 41, N 1. P. 50–58.
3. Halpern J.Y., Kapron B. Zero-One Laws for Modal Logic // Annals of Pure and Applied Logic. 1994. V. 69, N 2–3. P. 157–193.
4. Le Bars J.-M. The 0-1 law fails for frame satisfiability of propositional modal logic // Proceedings 17th Annual IEEE Symposium on Logic in Computer Science. 2002. 02. P. 225–234.
5. Goranko V., Kapron B. The Modal Logic of the Countable Random Frame // Archive for Mathematical Logic. 2003. V. 42, N 3. P. 221–243.
6. Goranko V. The Modal Logic of Almost Sure Frame Validities in the Finite // Advances in Modal Logic. 2020.
7. Verbrugge R. Zero-one laws for provability logic: Axiomatizing validity in almost all models and almost all frames // 2021 36th Annual ACM/IEEE Symposium on Logic in Computer Science, LICS 2021. IEEE Xplore. 2021. 06. Proceedings – Symposium on Logic in Computer Science.
8. Segerberg Krister. On the Logic of «To-morrow» // Theoria. 1967. V. 33, N 1. P. 45–52.
9. Chagrov A.V., Zakharyashev M. Modal Logic. Oxford University Press, 1997. Oxford logic guides, V. 35.
10. Goranko Valentin, Otto Martino. Model Theory of Modal Logic // Studies in Logic and Practical Reasoning. 2007. 12. V. 3. P. 249–329.
11. de Brujin N.G. Asymptotic Methods in Analysis // Bibliotheca Mathematica. North-Holland Publishing Co., 1958.
12. Miksa F.L., Moser L., Wyman M. Restricted Partitions of Finite Sets // Canadian Mathematical Bulletin. 1958. V. 1, N 2. P. 87–96.

13. Rényi A., Szekeres G. On the height of trees // Journal of The Australian Mathematical Society. 1967. V. 7. P. 497–507.

References

1. Glebskii Yu. V., Kogan D. I., Liogon'kii M. I., Talanov V. A. Range and degree of realizability of formulas in the restricted predicate calculus. Cybernetics. 1969. V. 5. P. 142–154. (in Russian).
2. Fagin R. Probabilities on finite models. Journal of Symbolic Logic. 1976. V. 41, N 1. P. 50–58.
3. Halpern J. Y., Kapron B. Zero-One Laws for Modal Logic. Annals of Pure and Applied Logic. 1994. V. 69, N 2–3. P. 157–193.
4. Le Bars J.-M. The 0-1 law fails for frame satisfiability of propositional modal logic. Proceedings 17th Annual IEEE Symposium on Logic in Computer Science. 2002. 02. P. 225–234.
5. Goranko V., Kapron B. The Modal Logic of the Countable Random Frame. Archive for Mathematical Logic. 2003. V. 42, N 3. P. 221–243.
6. Goranko V. The Modal Logic of Almost Sure Frame Validities in the Finite. Advances in Modal Logic. 2020.
7. Verbrugge R. Zero-one laws for provability logic: Axiomatizing validity in almost all models and almost all frames. 2021 36th Annual ACM/IEEE Symposium on Logic in Computer Science, LICS 2021. IEEE Xplore. 2021. 06. Proceedings – Symposium on Logic in Computer Science.
8. Segerberg Krister. On the Logic of «To-morrow». Theoria. 1967. V. 33, N 1. P. 45–52.
9. Chagrov A. V., Zakharyashev M. Modal Logic. Oxford University Press, 1997. Oxford logic guides, V. 35.
10. Goranko Valentin, Otto Martino. Model Theory of Modal Logic. Studies in Logic and Practical Reasoning. 2007. 12. V. 3. P. 249–329.
11. de Bruijn N. G. Asymptotic Methods in Analysis. Bibliotheca Mathematica. North-Holland Publishing Co., 1958.
12. Miksa F. L., Moser L., Wyman M. Restricted Partitions of Finite Sets. Canadian Mathematical Bulletin. 1958. V. 1, N 2. P. 87–96.
13. Rényi A., Szekeres G. On the height of trees. Journal of The Australian Mathematical Society. 1967. V. 7. P. 497–507.

УДК 303.447.22, 519.254

A. M. Ченцов^{1,2}, Н. И. Торопов²¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

**Применение подхода двойного машинного обучения
для задачи анализа зависимости между отклонениями
от непокрытого паритета процентных ставок
и степенью открытости экономики**

Метод двойного машинного обучения был предложен Черножуковым и др. (2018) для оценки структурных параметров и эффектов воздействия в статистических моделях, содержащих мешающий параметр высокой размерности (например, контрольные переменные с неизвестной функциональной формой зависимости). В представленной работе анализируется применение такого подхода для оценки зависимости между степенью открытости экономики и отклонениями от непокрытого паритета процентных ставок, которая осложнена нелинейным влиянием мешающих переменных. Показано, что данный метод, несмотря на более слабые предположения о процессе порождения данных, позволяет получить более точные оценки, лучше согласующиеся с современными теоретическими представлениями, а также позволяет учитывать неоднородность эффекта. В частности, полученная в работе оценка связи является положительной для развивающихся стран и отрицательной для стран с наиболее высокими доходами, что соответствует механизму, предложеному в работе Ицхоки, Мухина (2017), который объясняет такой эффект различием эластичности стоимости чистого экспорта по цене.

Ключевые слова: двойное машинное обучение, оценка эффекта воздействия, мешающие параметры большой размерности, большие данные, макроэкономические данные

A. M. Chentsov^{1,2}, N. I. Toropov²¹M. V. Lomonosov Moscow State University²Moscow Institute of Physics and Technology

**Estimation of causal dependence between economic
openness and deviations from uncovered interest parity
using double machine learning**

The method of double machine learning was proposed by Chernozhukov et. al. (2018) for estimating structural parameters and treatment effects in statistical models containing a high-dimensional confounding parameter (e.g., control variables with an unknown functional form of dependence). In this work we apply double machine learning for estimation of the relationship between deviations from uncovered parity interest rates and the degree of economic openness, complicated by the nonlinear influence of confounding variables. It is shown that this method, despite weaker assumptions about the data generation process, allows obtaining more accurate estimates, which comply with modern theoretical constructions, and takes into account the heterogeneity of the effect. In particular, our estimate is positive for developing countries, and negative for the group of high income countries – which is consistent with the mechanism in Itskhoki, Mukhin (2017), which explains this effect by difference in net export elasticity.

Key words: double machine learning, treatment effect estimation, high-dimensional confounding parameters, big data, macroeconomic data

1. Введение

В макроэкономическом анализе международных отношений можно выделить ряд стилизованных фактов, для которых нет убедительного объяснения в рамках большинства современных теоретических моделей. Одним из ключевых таких фактов является *загадка отклонений* от непокрытого паритета процентных ставок (НППС), впервые отмеченная в работе Фамы [1]. В ней исследовалась эффективность валютных рынков и, в частности, использовалась линейная модель, в дальнейшем получившая название «регрессия Фамы»:

$$\Delta s_{t+1} = \alpha + \beta_F \Delta i_t + \varepsilon_t, \quad (1)$$

где $\Delta s_{t+1} = s_{t+1} - s_t$ – реализовавшийся прирост логарифма обменного валютного курса; $\Delta i_t = i_t - i_t^*$ – разность между домашней и зарубежной процентными ставками; ε_t – ошибка модели. Уравнение (1) при $\alpha = 0$ и $\beta_F = 1$ близко к логарифмической форме условия отсутствия арбитража на валютных парах при стратегии кэри-трейд:

$$\frac{\mathbb{E} S_{t,k}}{S_t} (1 + i_{t,k}^*) = 1 + i_{t,k}. \quad (2)$$

В оригинальной работе Фамы и в последующих эмпирических исследованиях были получены оценки β_F , свидетельствующие об устойчивом отклонении этого параметра от единицы; подробный обзор работ на эту тему можно найти в [2]. Для теоретического объяснения отклонений от непокрытого паритета процентных ставок существует несколько подходов. В работах [3], [4] предлагается объяснение, основанное на информационной асимметрии покупателей и продавцов валют, которая может приводить к переоценке текущего фундаментального курса валюты покупателями. В работе [5] отклонения от НППС объясняются рисками контроля над движением капитала и невозврата вкладов; другие объяснения включают финансовые шоки [6] и асимметрию, связанную с низкой ликвидностью финансовых активов [7]. Кроме того, в некоторых исследованиях указывается, что условие отсутствия арбитража при кэри-трейде следует изучать с помощью нелинейных моделей зависимости между Δs_{t+1} и Δi_t ; см. [8], [9].

В значительной степени сложность разрешения загадки отклонений от НППС связана с тем, что уравнение (1) с разными параметрами можно получить в качестве следствия из различных моделей общего равновесия, выбор между которыми затруднён. Тем не менее можно подойти к этой проблеме с другой стороны, выявляя и оценивая такие зависимости, причинно-следственная природа которых является достаточно убедительной. Следуя этому подходу, в данной работе представлена эмпирическая проверка влияния степени открытости экономик на отклонения от НППС – одного из центральных элементов теоретической модели, предложенной в работе [6] в рамках разработки унифицированного подхода к моделированию обменных курсов. Во втором разделе работы представлено описание механизма из [6], объясняющего эту связь; третий раздел содержит краткое изложение теоретических основ метода двойного машинного обучения и его специфику применительно к исследуемой задаче; в четвёртом разделе представлены результаты эмпирических исследований, в том числе – построение и оценка методом двойного машинного обучения структурных параметров механизма, устойчивая к возможной нелинейности зависимостей и наличию пропущенных переменных. Особое внимание уделяется особенностям методологии двойного машинного обучения и сравнению этого метода со стандартным методом оценки множественных регрессий с помощью метода наименьших квадратов.

2. Гипотеза о связи обменного курса валют с открытостью экономики

Механизм формирования отрицательной β_F , предложенный работе [6], в упрощённом виде можно описать следующим образом (рис. 1):

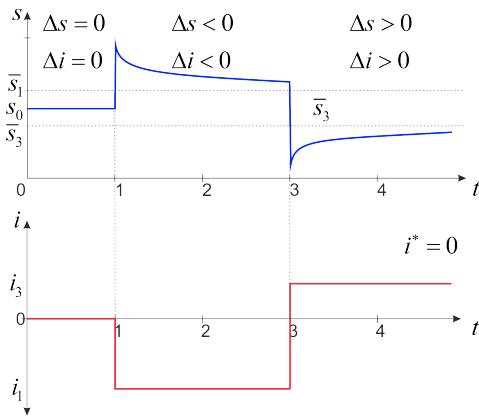


Рис. 1. Динамика обменного валютного курса (сверху) в зависимости от изменений процентной ставки (снизу). \bar{s}_1, \bar{s}_3 – стационарные уровни обменного курса, соответствующие текущим значениям процентной ставки. Для упрощения считаем, что зарубежная процентная ставка равна нулю

- В ответ на неожиданные финансовые шоки и изменения процентной ставки обменный курс изменяется для балансировки притока или оттока валюты на товарном и финансовом рынках. Изменения обменного курса происходят с «перелётом» – аналогично [10], из-за чего подстройка номинального обменного курса после шока происходит в сторону, соответствующую дифференциальному уравнению для процентных ставок, и, таким образом, все ожидаемые изменения курса происходят в соответствии с НППС. Отрицательные значения оценок β_F в таком случае объясняются тем, что при оценке моделей типа (1) учитываются все фактические изменения Δs_{t+1} , а не только ожидаемые.
- Для более открытых экономик реакция обменного курса на шоки будет более слабой, поскольку обеспечить нужный объём притока или оттока валюты на товарном рынке можно при меньшем изменении условий торговли. Вследствие этого мы ожидаем, что в такой модели параметр β_F , характеризующий отклонения от НППС, будет с ростом открытости экономики стремиться к единице.

Решение модели общего равновесия в [6] приводит к уравнению зависимости между показателем β_F , параметром открытости экономики γ и коэффициентом λ , связанным с эластичностью чистого экспорта:

$$\beta_F = -\frac{1}{\gamma\lambda}. \quad (3)$$

При $\lambda > 0$ эластичность низка, и удорожание домашней валюты приводит к увеличению стоимости чистого экспорта; обратная картина имеет место при $\lambda < 0$. Указанный механизм должен приводить к зависимости между мерой отклонения от НППС экономики и её открытостью в эмпирических данных; при этом коэффициент в линейной модели должен иметь разный знак в соответствии со спецификой товаров, обмениваемых между рассматриваемой парой стран (эластичный/неэластичный спрос на чистый экспорт). Кроме того, эта зависимость может иметь сложную структуру и быть чувствительной к пропущенным переменным. Например, можно предположить, что параметр эластичности спроса λ зависит от сезонности – и тогда пропущенные макроэкономические переменные, связанные с β_F и также зависящие от сезонности (например, инфляция), будут приводить к эндогенности ошибки в статистической модели.

Как следствие, при эмпирической оценке связи β_F и γ , мы включаем в рассмотрение большое число потенциальных контрольных переменных. Ограниченный размер выборок приводит к тому, что уравнение, включающее их в полном объеме, не может быть оценено непосредственно «наивными» методами, такими как метод наименьших квадратов. В современных условиях естественно напрашивается идея применения для оценивания неизвестной нелинейной зависимости методов машинного обучения, но в то же время известно,

что хотя непосредственное применение данных методов приводит к качественным прогнозам, оценки параметров при этом начинают сходиться либо медленнее типичного $n^{1/2}$, либо сходиться неравномерно. Решением этой проблемы является применение метода двойного машинного обучения, предложенного в [11], для оценки модели, содержащей максимально полный набор контрольных переменных в гибкой форме.

3. Метод двойного машинного обучения

Основы метода двойного машинного обучения были заложены в серии работ Черножукова и его коллег [12], [13], [14], [15], посвященных решению проблемы неравномерности статистических выводов в случае автоматического выбора модели, детально изложенной, в работах Либа и Потчера [16], [17]. Эта проблема возникает в задаче оценки структурного параметра модели в присутствии контрольных переменных и приводит к тому, что при использовании состоятельной процедуры выбора, для любого размера выборки найдется процесс порождения данных, при котором настоящее распределение оценки не будет близко к асимптотическому приближению.

Ключевая идея Черножукова и соавторов заключалась в том, что можно пожертвовать качеством выбора модели в тех её аспектах, которые не представляют самостоятельного интереса, таких как выбор инструментальных или контрольных переменных и коэффициенты при них. Этого можно добиться, если распределение оценок в некотором смысле ортогонально к ошибкам в оценке этих вторичных аспектов, а сами ошибки не очень велики. Такая ортогональность наблюдалась в некоторых существующих подходах (выбор оптимальных инструментов с помощью LASSO [18]), а некоторые другие подходы (выбор переменных в линейной регрессии с помощью LASSO [14]) потребовалось модифицировать. Метод двойного машинного обучения [11] стал естественным развитием этого подхода, и в его рамках авторы предложили общий способ получения подобной ортогональности к некоторым мешающим параметрам в широком классе моделей, а также предложили условия, позволяющие использовать различные методы машинного обучения для оценки этих параметров с достаточно малыми ошибками.

Оцениваемая нами модель состоит из двух уравнений (структурная частично линейная модель).

1. Основное уравнение зависимости для целевой переменной Y (мера отклонений от НППС):

$$Y_i = D_i^T \beta + g(X_i) + \varepsilon_i, \quad \mathbb{E}(\varepsilon_i | X_i, D_i) = 0, \quad i \in \{1, \dots, n\}, \quad (4)$$

где $X_i = (X_{i1}, \dots, X_{ip})^T$ и $D_i = (D_{i1}, \dots, D_{id})^T$ – н.о.р. случайные векторы объясняющих переменных, $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_d)^T$ – вектор структурных параметров, $g(\cdot)$ – неизвестная функция из \mathbb{R}^p в \mathbb{R} , а ε_i – ошибки модели.

2. Структурное уравнение зависимости переменной воздействия D (открытость экономики) от контрольных переменных X :

$$D_i = m(X_i) + v_i, \quad \mathbb{E}(v_i | X_i) = 0. \quad (5)$$

Здесь $m(\cdot)$ – неизвестная функция из \mathbb{R}^p в \mathbb{R}^d , а v_i – ошибки модели.

В качестве переменной воздействия D рассматривался показатель открытости экономики, равный отношению сумм экспорта и импорта к ВВП, причем эффект предполагался гетерогенным среди групп стран, разделенных в зависимости от уровня доходов на душу населения. В качестве оценки меры отклонения от НППС использовались в одном случае сами оценки β_F для регрессий Фамы, взятые из работ [19], [21] и [22], а в другом случае их отклонение по модулю от единицы.

Специфика метода двойного машинного обучения в нашей задаче заключается в оценке бесконечномерного мешающего параметра $(g(X), m(X))$ методами машинного обучения, после чего эти оцененные функциональные зависимости использовались при нахождении оценок структурных параметров в основном уравнении структурной ЧЛМ.

4. Статистическая оценка влияния открытости экономики на отклонения от НППС

В эмпирической части исследования в качестве оценки отклонений от НППС использовались оценки β_F в регрессии Фамы, полученные в работах [19], [21] и [22] для 33 стран; общий набор рассматриваемых нами контрольных переменных был получен совмещением данных Worldbank World Development Indicators, IFS Balance of Payments, Penn World Tables, классификации стран по уровню экономического развития ATLAS и ряда других показателей, за исключением показателей, которые могут являться частью исследуемого механизма. Отобранные контрольные переменные в спецификациях (2) – (5) в табл. 1 включали суммарные сбережения, чистые текущие трансферты, среднее число рабочих часов, реальный ВВП (подсчитанный через расходы по ППС), общую производительность факторов по ППС, накопленную инвестиционную позицию, накопленные общие обязательства, индекс финансовой открытости, численность населения, численность рабочей силы, год.

Среди оцениваемых спецификаций в табл. 1, помимо «наивной» модели, игнорирующей потенциальное влияние пропущенных переменных в столбце (1), и модели, оценённой методом *наименьших квадратов* с контрольными переменными в столбце (2), приводятся три разных оценки структурной ЧЛМ с одинаковыми контрольными переменными, но разными оценками мешающего параметра высокой размерности. В столбце (3) оценка $(g(X), m(X))$ была сделана с помощью метода случайного леса; в столбце (4) использовался *бустинг* для ансамбля случайных деревьев, а в столбце (5) неизвестные функции оценивались с помощью однослойной нейронной сети.

Для каждой спецификации исследовались два вида моделей с разными функциональными формами зависимой переменной. В первом случае использовались сами оценки β_F , а во втором – значения $|\hat{\beta}_F - 1|$, уравнивающие вклад отклонений от НППС в верхнюю и нижнюю стороны.

Таблица 1
Оценки коэффициента связи между отклонением от НППС и открытостью экономики

Спецификация	(1) МНК	(2) МНК, к.	(3) RF	(4) бустинг	(5) ANN
Зависимая переменная: $\hat{\beta}_F$					
Торговля/ВВП	1.37 (3.35)	0.63 (1.46)	0.59 (2.94)	-0.097 (-0.26)	0.88 (9.77)
Торговля/ВВП* высокий	-0.41 (-0.96)	-0.16 (-0.35)	0.54 (2.11)	0.304 (1.65)	0.13 (1.02)
Зависимая переменная: $ \hat{\beta}_F - 1 $					
Торговля/ВВП	-1.37 (-3.92)	-0.92 (-2.55)	-0.76 (-3.94)	-0.79 (-2.75)	-1.02 (-13.19)
Торговля/ВВП* высокий	0.35 (0.96)	0.19 (0.51)	-0.59 (-2.42)	0.063 (0.54)	-0.63 (-6.30)
Число наблюдений	443	443	443	443	443

Примечание: в скобках приводятся *t*-статистики полученных оценок.

В таблице 1 видно, что в четвёртой спецификации оценки структурных параметров оказались значимыми и существенно отличающимися от, например, оценок для множественной регрессии. Разные результаты в столбцах (3) – (5) связаны с разной предсказательной силой моделей для $(g(X), m(X))$, поэтому для выбора между полученными результатами мы оценили прогнозные качества оценок $g(X)$ и $m(X)$ (табл. 2), вычисляя среднеквадратичную ошибку прогноза на выборках, использовавшихся при оценке моделей в табл. 1 (метод

двойного машинного обучения использует кросс-валидационную процедуру).

Таблица 2
Метрики качества оценок мешающих параметров в двойном машинном
обучении

Переменная	(3) RF	(4) бустинг	(5) ANN
Среднеквадратическая ошибка прогноза			
Торговля/ВВП	0.0652	0.0422	0.624
Торговля/ВВП* высокий	0.0614	0.0397	0.690
Показатель $\hat{\beta}_F$ отклонения от НППС	0.437	0.179	4.28

Из таблицы 2 становится понятно, что наиболее точная оценка мешающего параметра получилась в случае использования *метода бустинга*, спецификация (4). Аналогичные результаты были получены при использовании $|\hat{\beta}_F - 1|$ в качестве зависимой переменной. Противоположные знаки оценок в табл. 1 для второго случая соответствуют тому, что в данных большинство случаев отклонений от НППС проявляется в значениях $\hat{\beta}_F$ ниже единицы. Во многих спецификациях оценки и *t*-статистики для двух разных зависимых переменных оказались очень близкими (с точностью до знака).

Полученный результат не противоречит гипотезе, предложенной в [6], предполагающей более низкие отклонения от НППС для стран, более открытых к торговле. Интересно заметить, что оценки, полученные методом двойного машинного обучения, заметно отличаются от линейных моделей (1) и (2), типично используемых в подобных эмпирических исследованиях. В частности, результаты в (3) – (5) дают меньше оснований предполагать, что зависимость между открытостью экономик и отклонениями от НППС будет иметь разный знак для более и менее богатых стран в соответствии с эластичностью спроса на чистый экспорт, что соответствовало бы разному знаку параметра λ в уравнении (3).

5. Заключение

Полученный результат демонстрирует возможности подхода, основанного на двойном машинном обучении, позволяющего применять современные алгоритмы машинного обучения для учета нелинейности зависимостей от мешающих параметров в сложных экономических моделях. Из оценок в табл. 1 видно, что использование достаточно гибкого метода оценки мешающих параметров приводит к существенно более достоверной и убедительной оценке эффекта воздействия, имеющей существенные отличия от результата, полученного с помощью типичных линейных моделей. Дальнейшее развитие данного исследования может включать более подробное изучение влияния выбора алгоритмов машинного обучения, а также их гиперпараметров на качество оценок как в данной задаче, так и в иных схожих проблемах. В частности, для этого может быть интересным детальное Монте-Карло исследование по данному вопросу. Также существенный интерес представляет возможное включение более широких наборов контрольных переменных, чем те, которые были доступны нам, и изучение возможной неоднородности изучаемого эффекта по другим возможным переменным. Наконец, наиболее амбициозным, но и наиболее интересным развитием может быть попытка применить алгоритмы машинного обучения одновременно к набору связанных зависимостей, вытекающих из теоретической модели, с целью получения более полной картины причинно-следственных связей.

Список литературы

1. *Fama E.* Forward and spot interest rates // *J. Monet. Econ.* 1984. P. 319–338.
2. *Божечкова А., Петрова Д., Синельникова-Мурылева Е., Трунин П., Ченцов А.* Построение моделей денежного и валютного рынков. Москва : Изд-во Ин-та Гайдара, 2018. С. 96.
3. *Burnside C., Eichenbaum M., Rebelo S.* Understanding the Forward Premium Puzzle: A Microstructure Approach // *American Econ. J.: Macroecon.* 2009. V. 1(2). P. 127–54.
4. *Burnside C., Han B., Hirshleifer D., Wang, T. Y.* Investor overconfidence and the forward premium puzzle // *Rev. Econ. Stud.* 2011. V. 78(2). P. 523–558.
5. *Dooley M.P., Isard P.* Capital controls, political risk, and deviations from interest rate parity // *J. Polit. Econ.* 1980. V. 2(88). P. 370–384.
6. *Itskhoki O., Mukhin D.* Exchange rate disconnect in general equilibrium // *J. Polit. Econ.* 2021. V. 129(8). P. 2183–2232.
7. *Kumar V.* Liquidity shocks: A new solution to the forward premium puzzle // *Econ. Modelling.* 2020. V. 91. P. 445–454.
8. *Hall S.G., Kenjegaliev A., Swamy P.A.V.B., Tavlas G.S.* The forward rate premium puzzle: a case of misspecification? // *Stud. Nonlin. Dyn. Econometrics.* 2013. V. 17(3). P. 265–279.
9. *Burnside C., Eichenbaum M., Rebelo S.* Forward-premium puzzle: is it time to abandon the usual regression? // *Applied Econ.* 2016. V. 48(30). P. 2852–2867.
10. *Dornbusch R.* Expectations and exchange rate dynamics // *J. Political Econ.* 1976. P. 1161–1176.
11. *Chernozhukov V., Chetverikov D., Demirer M., Duflo E., Hansen C., Newey W., Robins J.* Double/debiased machine learning for treatment and structural parameters // *Econom. J.* 2018. V. 21. P. C1–C68.
12. *Belloni A., Chernozhukov V., Hansen C.* High-dimensional methods and inference on structural and treatment effects // *J. Econ. Perspectives.* 2014. V.28. P. 29–50.
13. *Belloni, A., Chernozhukov V., Wei Y.* Post-Selection Inference for Generalized Linear Models With Many Controls // *J. Business Econ. Stat.* 2016. V. 34. P. 606–619.
14. *Belloni, A., Chernozhukov V., Hansen C., Kozbur D.* Inference in High-Dimensional Panel Models With an Application to Gun Control // *J. Business Econ. Stat.* 2016. V. 34. P. 590–605.
15. *Belloni A., Chernozhukov V., Hansen C.* Inference on Treatment Effects after Selection among High-Dimensional Controls // *Rev. Econ. Stud.* 2014. V. 81. P. 608–650.
16. *Leeb H., Potscher B.M.* Model selection and inference: facts and fiction // *Econometric Theor.* 2005. V. 21. P. 21–59.
17. *Leeb H., Potscher B.M.* Sparse estimators and the oracle property, or the return of Hodges' estimator. *Econometric Theor.* 2008. V. 142. P. 201–211.
18. *Belloni, A., Chen D., Chernozhukov V., Hansen C.* Sparse Models and Methods for Optimal Instruments with an Application to Eminent Domain. *Econometrica.* 2012. V. 80. P. 2369–2429.
19. *Chinn M.D., Zhang Y.* Uncovered interest parity and monetary policy near and far from the zero lower bound // *Open Econ. Rev.* 2018. V. 29. P. 1–30.
20. *Engel C.* Exchange rates, interest rates, and the risk premium // *Am. Econ. Rev.* 2016. V. 106(2). P. 436–474.

21. Chinn M. The (partial) rehabilitation of interest rate parity in the floating rate era: longer horizons, alternative expectations, and emerging markets // *J. Int. Money Finance*. 2006. V. 25. P. 7–21.
22. Frankel J., Poonawala J. The forward market in emerging currencies: less biased than in major currencies // *J. Int. Money Finance*. 2010. P. 585–598.

References

1. Fama E. Forward and spot interest rates. *J. Monet. Econ.* 1984. P. 319–338.
2. Bozhechkova A., Petrova D., Sinelnikova-Murilova E., Trunin P., Chentsov A. Building models of money and forex markets. Moscow : Gaidar Institute Press, 2018. P. 96. (in Russian).
3. Burnside C., Eichenbaum M., Rebelo S. Understanding the Forward Premium Puzzle: A Microstructure Approach. *American Econ. J.: Macroecon.* 2009. V. 1(2). P. 127–54.
4. Burnside C., Han B., Hirshleifer D., Wang, T. Y. Investor overconfidence and the forward premium puzzle. *Rev. Econ. Stud.* 2011. V. 78(2). P. 523–558.
5. Dooley M.P., Isard P. Capital controls, political risk, and deviations from interest rate parity. *J. Polit. Econ.* 1980. V. 2(88). P. 370–384.
6. Itskhoki O., Mukhin D. Exchange rate disconnect in general equilibrium. *J. Polit. Econ.* 2021. V. 129(8). P. 2183–2232.
7. Kumar V. Liquidity shocks: A new solution to the forward premium puzzle. *Econ. Modelling*. 2020. V. 91. P. 445–454.
8. Hall S.G., Kenjegaliev A., Swamy P.A.V.B., Tavlas G.S. The forward rate premium puzzle: a case of misspecification? *Stud. Nonlin. Dyn. Econometrics*. 2013. V. 17(3). P. 265–279.
9. Burnside C., Eichenbaum M., Rebelo S. Forward-premium puzzle: is it time to abandon the usual regression? *Applied Econ.* 2016. V. 48(30). P. 2852–2867.
10. Dornbusch R. Expectations and exchange rate dynamics. *J. Political Econ.* 1976. P. 1161–1176.
11. Chernozhukov V., Chetverikov D., Demirer M., Duflo E., Hansen C., Newey W., Robins J. Double/debiased machine learning for treatment and structural parameters. *Econom. J.* 2018. V. 21. P. C1–C68.
12. Belloni A., Chernozhukov V., Hansen C. High-dimensional methods and inference on structural and treatment effects. *J. Econ. Perspectives*. 2014. V. 28. P. 29–50.
13. Belloni, A., Chernozhukov V., Wei Y. Post-Selection Inference for Generalized Linear Models With Many Controls. *J. Business Econ. Stat.* 2016. V. 34. P. 606–619.
14. Belloni, A., Chernozhukov V., Hansen C., Kozbur D. Inference in High-Dimensional Panel Models With an Application to Gun Control. *J. Business Econ. Stat.* 2016. V. 34. P. 590–605.
15. Belloni, A., Chernozhukov V., Hansen C. Inference on Treatment Effects after Selection among High-Dimensional Controls. *Rev. Econ. Stud.* 2014. V. 81. P. 608–650.
16. Leeb H., Potscher B.M. Model selection and inference: facts and fiction. *Econometric Theor.* 2005. V. 21. P. 21–59.
17. Leeb H., Potscher B.M. Sparse estimators and the oracle property, or the return of Hodges' estimator. *Econometric Theor.* 2008. V. 142. P. 201–211.
18. Belloni A., Chen D., Chernozhukov V., Hansen C. Sparse Models and Methods for Optimal Instruments with an Application to Eminent Domain. *Econometrica*. 2012. V. 80. P. 2369–2429.

19. *Chinn M.D., Zhang Y.* Uncovered interest parity and monetary policy near and far from the zero lower bound. *Open Econ. Rev.* 2018. V. 29. P. 1–30.
20. *Engel C.* Exchange rates, interest rates, and the risk premium. *Am. Econ. Rev.* 2016. V. 106(2). P. 436–474.
21. *Chinn M.* The (partial) rehabilitation of interest rate parity in the floating rate era: longer horizons, alternative expectations, and emerging markets. *J. Int. Money Finance.* 2006. V. 25. P. 7–21.
22. *Frankel J., Poonawala J.* The forward market in emerging currencies: less biased than in major currencies. *J. Int. Money Finance.* 2010. P. 585–598.

Поступила в редакцию 01.07.2024

УДК 519.175.4, 519.179.1

Д. А. Шабанов, Т. М. Шайхеева

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Оценки пороговых вероятностей для свойств дробной раскрашиваемости случайных гиперграфов

В работе исследуется известная задача о поиске пороговых вероятностей для свойств раскрасок случайных гиперграфов. Рассматривается биномиальная модель случайного k -однородного гиперграфа $H(n, k, p)$ в разреженном режиме, когда среднее число ребер гиперграфа линейно по числу вершин. В качестве основного результата получены оценки точной пороговой вероятности для свойства правильной $(5 : 2)$ -дробной раскрашиваемости $H(n, k, p)$.

Ключевые слова: случайные гиперграфы, дробные раскраски, метод второго момента

D. A. Shabanov, T. M. Shaikheeva

Moscow Institute of Physics and Technology

Bounds for threshold probabilities for fractional colorability properties of random hypergraphs

The paper deals with the well-known problem concerning the threshold probabilities for coloring properties of random hypergraphs. We consider the binomial model of a random k -uniform hypergraph $H(n, k, p)$ in the sparse regime, when the expected number of edges is a linear function of the number of vertices. As the main result we obtain the estimates of the sharp threshold probability for the property of proper $(5 : 2)$ -fractional colorability of $H(n, k, p)$.

Key words: random hypergraphs, fractional colorings, second moment method

1. Введение

В работе исследуется задача о поиске пороговых вероятностей для свойства наличия правильной дробной раскраски в случайном гиперграфе в биномиальной модели $H(n, k, p)$. Сначала напомним основные определения.

1.1. Основные определения

Классической моделью случайного k -однородного гиперграфа является *биномиальная модель* $H(n, k, p)$. Напомним, что $H(n, k, p)$ формируется как схема Бернули на k -подмножествах n -элементного множества: каждое из них включается в качестве ребра в $H(n, k, p)$ независимо от других с вероятностью p . При $k = 2$ мы получаем знаменитую биномиальную модель случайного графа $G(n, p)$, также называемую моделью Эрдеша – Ренни. Модели $G(n, p)$ и $H(n, k, p)$ являются одними из центральных объектов изучения вероятностной комбинаторики, с их базовыми свойствами можно ознакомиться, например, в монографиях [1], [2], [3].

В работе исследуются дробные раскраски случайных гиперграфов. Пусть $H(n, k, p)$ — гиперграф, а $a > b \geq 1$ — натуральные числа. *Дробной* $(a : b)$ -раскраской множества вершин гиперграфа H называется произвольное отображение $f : V \rightarrow \binom{\{1, \dots, a\}}{b}$, т.е. каждой вершине мы сопоставляем ровно b цветов из единого множества, состоящего из a цветов. Дробная $(a : b)$ -раскраска f называется *правильной*, если в ней в каждом ребре нет одного и того же цвета, сопоставленного всем вершинам, формально: для любого $A \in E$ выполнено

$$\bigcap_{v \in A} f(v) = \emptyset.$$

В частности, при $b = 1$ правильная $(a : 1)$ -раскраска вершин гиперграфа совпадает с классической правильной раскраской, в которой нет одноцветных ребер. Дробным хроматическим числом гиперграфа H называется величина

$$\chi_f(H) = \inf \left\{ \frac{a}{b} : \text{для } H \text{ существует правильная дробная } (a : b)\text{-раскраска} \right\}.$$

Дробные хроматические числа графов и гиперграфов активно изучаются с 70-х годов прошлого века. С основным фактами по дробной теории графов можно ознакомиться, например, в [4].

Одним из наиболее важных направлений исследований по раскраскам случайных графов и гиперграфов является поиск пороговых вероятностей для свойств наличия раскрасок определенного вида. Напомним, что для фиксированных $k \geq 2$, $a > b \geq 1$ функция $\hat{p}_{k,a,b} = \hat{p}_{k,a,b}(n)$ является *точной пороговой вероятностью* для свойства наличия правильной дробной $(a : b)$ -раскраски, если для любого фиксированного $\varepsilon > 0$ выполнено

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(H(n, k, p) \text{ допускает правильную } (a : b)\text{-раскраску}) = \begin{cases} 1, & \text{если } p \leq (1 - \varepsilon)\hat{p}_{k,a,b}, \\ 0, & \text{если } p \geq (1 + \varepsilon)\hat{p}_{k,a,b}. \end{cases}$$

Существование точной пороговой вероятности для всех троек (k, a, b) , за исключением особого случая $(2, 2, 1)$, вытекает из общего результата Х. Хатами и М. Моллоя [5] о точных пороговых вероятностях для свойств, выражаемых гомоморфизмами. Целью настоящей работы является получение оценок для $\hat{p}_{k,5,2}(n)$.

1.2. Известные результаты

Наиболее активно пороговая вероятность $\hat{p}_{k,a,b}(n)$ изучалась при $b = 1$, т.е. для случая классических правильных раскрасок. Первые результаты здесь были получены Н. Алоном и Дж. Спенсером [6] в начале 90-х годов прошлого века. Ими были получены первые оценки $\hat{p}_{k,2,1}(n)$, но из работы также можно сделать важный вывод о том, что каждой пороговой вероятности $\hat{p}_{k,a,b}(n)$ отвечает так называемый *разреженный* случай, когда среднее число ребер линейно по числу вершин. А именно функция $p = p(n)$ должна иметь вид $p = cn/\binom{n}{k}$, где величина $c > 0$ не зависит от n . Тем самым, удобно вместо самой p оценивать величину $p\binom{n}{k}/n$.

В дальнейшем оценки $\hat{p}_{k,2,1}(n)$ Алона и Спенсера были последовательно улучшены в работах [7–9], а наилучший из известных результатов был получен А. Коджа-Огланом и К. Панайоту в [10], который мы сформулируем в следующей теореме.

Теорема 1. (А. Коджа-Оглан, К. Панайоту, [10]) *Пусть $p = cn/\binom{n}{k}$, где $c > 0$ не зависит от n . Тогда существует такая функция $\varepsilon(k) = 2^{-k(1+o_k(1))}$, что*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(H(n, k, p) \text{ допускает правильную 2-раскраску}) =$$

$$= \begin{cases} 1, & \text{при } c < 2^{k-1} - \frac{\ln 2}{2} - \frac{1}{4} - \varepsilon(k), \\ 0, & \text{при } c > 2^{k-1} - \frac{\ln 2}{2} - \frac{1}{4} + \varepsilon(k). \end{cases}$$

Теорема 1 показывает, что критическое значение параметра c сконцентрировано в очень малом промежутке, чья длина экспоненциально быстро стремится к нулю с ростом k . Отметим, что для случая правильных раскрасок в большее, чем два, число цветов подобный результат неизвестен. В работах [11, 12] были получены оценки $\hat{p}_{k,a,1}(n)$, в которых критическое значение параметра c лежит просто в некотором ограниченном промежутке, чья длина не зависит от k и a . Однако, как оказалось, при $b > 1$ можно добиться гораздо более точных оценок в духе теоремы 1. Впервые подобный феномен был обнаружен в работах Д. Кравцова, Н. Крохмаль и Д. Шабанова [13, 14], которые рассматривали особый случай $b = a - 1$. Данный случай интересен тем, что существует взаимно-однозначное соответствие между правильными дробными $(a : a - 1)$ -раскрасками и полноцветными раскрасками в a цветов. Действительно, выбирая $a - 1$ цвет среди множества из a цветов, мы фактически выбираем тот цвет, который не берем. Но если, наоборот, в него и раскрасить вершину, то получится, что каждое ребро будет содержать каждый из a цветов. Результаты из [13, 14] можно суммировать следующим образом.

Теорема 2. (Д. Кравцов, Н. Крохмаль, Д. Шабанов, [13, 14]) *Пусть $p = cn/\binom{n}{k}$, где $c > 0$ не зависит от n . Существует такое k_0 , что при $k \geq k_0$ и $3 \leq a \leq 0.1\sqrt{k}$ выполнено*

1) если

$$c > \frac{\ln a}{a} \left(\frac{a}{a-1} \right)^k - \frac{\ln a}{2} + C \cdot \left(\frac{a(a-2)}{(a-1)^2} \right)^k \ln a$$

для некоторой абсолютной константы $C > 0$, то $\lim_{n \rightarrow \infty} P(H(n, k, p) \text{ допускает правильную дробную } (a : a - 1)\text{-раскраску}) = 0$;

2) если

$$c < \frac{\ln a}{a} \left(\frac{a}{a-1} \right)^k - \frac{\ln a}{2} - 20k^2 \cdot \left(\frac{a}{a-1} \max \left(a^{-\frac{1}{a-1}}, \frac{a^2}{(a+1)^2} \right) \right)^k \ln a,$$

то $\lim_{n \rightarrow \infty} P(H(n, k, p) \text{ допускает правильную дробную } (a : a - 1)\text{-раскраску}) = 1$.

Теорема 2 также показывает, что при фиксированном $a \geq 3$ критическое значение параметра c также лежит в промежутке, чья длина экспоненциально быстро стремится к нулю с ростом k .

Наконец, единственный результат относительно $(a : b)$ -раскрасок при $1 < b < a - 1$ был получен П. Захаровым и Д. Шабановым [15] для случая $a = 4$, $b = 2$.

Теорема 3. (П. Захаров, Д. Шабанов, [15]) *Пусть $p = cn/\binom{n}{k}$, где $c > 0$ не зависит от n . Существуют такие экспоненциально быстро стремящиеся к нулю положительные функции $g_1(k)$ и $g_2(k)$, что для всех достаточно больших k выполнено*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(H(n, k, p) \text{ допускает правильную дробную } (4 : 2)\text{-раскраску}) =$$

$$= \begin{cases} 1, & \text{при } c < 2^{k-2} \ln 6 - \frac{\ln 6}{2} - g_1(k), \\ 0, & \text{при } c > 2^{k-2} \ln 6 - \frac{\ln 6}{2} + g_2(k). \end{cases}$$

Как и ранее, теорема 3 дает очень сильную концентрацию, экспоненциально маленькую по k , критического значения параметра c .

1.3. Новый результат

Основной результат настоящей работы дает сильные оценки пороговой вероятности для свойства наличия правильной дробной $(5 : 2)$ -раскраски. Отметим сразу, что это первый результат экспоненциальной по k точности для случая $a/b > 2$.

Теорема 4. Пусть $p = cn/\binom{n}{k}$, где $c > 0$ не зависит от n . Существуют такие экспоненциально быстро стремящиеся к нулю положительные функции $w_1(k)$ и $w_2(k)$, что для всех достаточно больших k выполнено

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(H(n, k, p) \text{ допускает правильную дробную } (5:2)\text{-раскраску}) =$$

$$= \begin{cases} 1, & \text{при } c < \frac{\ln 10}{5} \left(\frac{5}{2}\right)^k - \frac{\ln 10}{2} - w_1(k), \\ 0, & \text{при } c > \frac{\ln 10}{5} \left(\frac{5}{2}\right)^k - \frac{\ln 10}{2} + w_2(k). \end{cases}$$

Утверждение теоремы 4, по сути, состоит из отдельных оценок пороговой вероятности, верхней и нижней. Переходим сначала к доказательству верхней оценки.

2. Доказательство верхней оценки

Будем использовать метод первого момента. Тонкость его применения состоит в том, что среднее число правильных дробных $(5:2)$ -раскрасок удобнее считать в другой модели случайного гиперграфа. А именно, рассмотрим равномерную модель $H(n, k, m)$, в которой $m = \lceil cn \rceil$ ребер выбираются независимо среди всех возможных k -подмножеств множества вершин. С помощью метода каплинга (см., например, [12]) легко проверить, что при $c' > c$ выполняется соотношение

$$\begin{aligned} P\left(H(n, k, c'n/\binom{n}{k}) \text{ допускает правильную дробную } (5:2)\text{-раскраску}\right) &\leqslant \\ &\leqslant P(H(n, k, m) \text{ допускает правильную дробную } (5:2)\text{-раскраску}) + o_n(1). \end{aligned}$$

Тем самым, достаточно доказать, что вероятность наличия правильной дробной $(5:2)$ -раскраски у $H(n, k, m)$ стремится к нулю при $m = \lceil cn \rceil$ и

$$c > \frac{\ln 10}{5} \left(\frac{5}{2}\right)^k - \frac{\ln 10}{2} + w_2(k) \tag{1}$$

для некоторой стремящейся к нулю функции $w_2(k)$.

Пусть X_n — число правильных дробных $(5:2)$ -раскрасок. Найдем его математическое ожидание. Для этого рассмотрим множество векторов \mathcal{V}_n размерности 10, индексированных парами (ij) , $1 \leq i < j \leq 5$, у которых все элементы являются целыми неотрицательными числами и их сумма равна n . Тем самым, $v \in \mathcal{V}_n$ имеет вид $v = (v_{(ij)})$, $1 \leq i < j \leq 5$. Несложно понять, что каждой дробной $(5:2)$ -раскраске соответствует такой вектор, где $v_{(ij)}$ будет равно количеству вершин, которым была присвоена пара цветов (ij) . Введем также обозначение $v_i = \sum_{j \neq i} v_{(ij)}$. Тогда

$$EX_n = \sum_{v \in \mathcal{V}_n} \frac{n!}{\prod_{(ij)} v_{(ij)}!} \cdot \left(1 - \frac{\sum_{i=1}^5 \binom{v_i}{k} - \sum_{(ij)} \binom{v_{(ij)}}{k}}{\binom{n}{k}}\right)^m.$$

Используя формулу Стирлинга, получаем следующую оценку EX_n :

$$EX_n = O\left(\sum_{v \in \mathcal{V}_n} \frac{\sqrt{n}}{\prod_{(ij)} \sqrt{v_{(ij)} + 1}} \cdot \exp[n \cdot (H(v/n) + c \cdot \ln(1 - G(v/n)))]\right),$$

где

$$H(x) = - \sum_{(ij)} x_{(ij)} \ln x_{(ij)}, \quad G(x) = \sum_{i=1}^5 x_i^k - \sum_{(ij)} x_{(ij)}^k, \quad x_i = \sum_{j \neq i} x_{(ij)}.$$

Далее, нам понадобится лемма об оценке выражения в экспоненте.

Лемма 1. *Существуют такие положительные функции $w_2(k)$ и $\alpha(k)$, что при $c \geq \ln 10 \left(\frac{1}{5} \left(\frac{5}{2} \right)^k - \frac{1}{2} + w_2(k) \right)$ для всех достаточно больших k и для любого вектора $x = (x_{(ij)}, 1 \leq i < j \leq 5)$ с неотрицательными элементами и $\sum_{(ij)} x_{(ij)} = 1$ выполнено*

$$H(x) + c \ln(1 - G(x)) \leq -\alpha(k) < 0.$$

При этом $w_2(k)$ можно выбрать экспоненциально быстро стремящейся к нулю с ростом k .

Из леммы 1 сразу вытекает искомая оценка EX_n , ведь мощность множества \mathcal{V}_n не превосходит n^{10} :

$$EX_n = O \left(\sum_{v \in \mathcal{V}_n} \frac{\sqrt{n}}{\prod_{(ij)} \sqrt{v_{(ij)} + 1}} \cdot e^{-n\alpha(k)} \right) = O \left(n^{10.5} e^{-n\alpha(k)} \right) \rightarrow 0.$$

Остается доказать лемму 1.

3. Доказательство леммы 1

Рассмотрим несколько случаев в зависимости от значений элементов вектора $x = (x_{(ij)}, 1 \leq i < j \leq 5)$. Зафиксируем малое число $\varepsilon > 0$, значение которого можно будет эффективно выбрать. Будем также считать, что $\varepsilon < 0.05$.

3.1. Случай 1

Пусть сначала для всех i, j выполняется неравенство $x_{ij} < \frac{4}{25}(1 - \varepsilon)$. Функция $H(x)$ является функцией энтропии, поэтому из неравенства Йенсена получаем, что $H(x) \leq \ln 10$. Оценим функцию $G(x)$ и $\ln(1 - G(x))$. Учитывая, что $\sum_{i=1}^5 x_i = 2$, получаем, что

$$G(x) = \sum_{i=1}^5 x_i^k - \sum_{(ij)} x_{(ij)}^k \geq 5 \left(\frac{2}{5} \right)^k - 10 \left(\left(\frac{2}{5} \right)^2 (1 - \varepsilon) \right)^k.$$

Далее,

$$\ln(1 - G(x)) \leq -G(x) - \frac{G^2(x)}{2} = -5 \left(\frac{2}{5} \right)^k + \frac{25}{2} \left(\frac{2}{5} \right)^{2k} + O \left(\left(\left(\frac{2}{5} \right)^2 (1 - \varepsilon) \right)^k \right).$$

Подставляя нижнюю оценку (1), получаем

$$\begin{aligned} H(x) + c \ln(1 - G(x)) &\leq \\ &\leq \ln 10 - \ln 10 \left(\frac{1}{5} \left(\frac{5}{2} \right)^k - \frac{1}{2} + w_2(k) \right) \cdot \left(5 \left(\frac{2}{5} \right)^k + \frac{25}{2} \left(\frac{2}{5} \right)^{2k} + O \left(\left(\left(\frac{2}{5} \right)^2 (1 - \varepsilon) \right)^k \right) \right) \leq \\ &\leq -5 \ln 10 \left(\frac{2}{5} \right)^k w_2(k) + O \left(\left(\frac{2}{5} \right)^k (1 - \varepsilon)^k \right) < 0 \end{aligned}$$

при подходящем выборе $w_2(k)$.

3.2. Случай 2

Пусть нашлось такое i , что $x_i \geq \frac{2}{5}(1 + \varepsilon)$. Тогда снова воспользуемся тем, что $H(x) \leq \ln 10$, а функцию $G(x)$ можно просто оценить снизу величиной x_i^k . В итоге, из (1) получаем, что

$$\begin{aligned} H(x) + c \ln(1 - G(x)) &\leq \ln 10 - c \cdot G(x) \leq \ln 10 - c \cdot \left(\frac{2}{5}\right)^k (1 + \varepsilon)^k \leq \\ &\leq \ln 10 - \frac{\ln 10}{5} (1 + \varepsilon)^k + O\left(\left(\frac{2}{5}\right)^k (1 + \varepsilon)^k\right) < 0 \end{aligned}$$

для всех достаточно больших k .

3.3. Случай 3

Пусть для некоторой пары (ij) выполнено $x_{(ij)} \geq \frac{4}{25}(1 - \varepsilon)$, но при этом для всех t, ℓ выполнено $x_t \leq \frac{2}{5}(1 + \varepsilon)$, и $x_{(t\ell)} < \frac{2}{5}(1 - \varepsilon)$. В этом случае функцию $G(x)$ можно оценить следующим образом:

$$G(x) = \sum_{t=1}^k x_t^k + O\left(\left(\frac{2}{5}\right)^k (1 - \varepsilon)^k\right) \geq 5 \cdot \left(\frac{2}{5}\right)^k + O\left(\left(\frac{2}{5}\right)^k (1 - \varepsilon)^k\right).$$

Благодаря тому, что у нас есть элемент, отделенный от $1/10$, функцию энтропии $H(x)$ можно оценить точнее, чем $\ln 10$:

$$H(x) = -x_{(ij)} \ln x_{(ij)} - \sum_{(t\ell) \neq (ij)} x_{(t\ell)} \ln x_{(t\ell)} \leq$$

(пользуясь неравенством Йенсена)

$$\leq -x_{(ij)} \ln x_{(ij)} - 9 \cdot \frac{1 - x_{(ij)}}{9} \ln \frac{1 - x_{(ij)}}{9} = -x_{(ij)} \ln x_{(ij)} - (1 - x_{(ij)}) \ln \frac{1 - x_{(ij)}}{9}.$$

Приведенная выше функция убывает по $x_{(ij)}$ при $x_{(ij)} > 1/10$, поэтому в силу условия рассматриваемого случая получается соотношение

$$H(x) \leq \frac{4}{25} \ln \frac{25}{4} + \frac{21}{25} \ln \frac{225}{21} + O(\varepsilon).$$

Собирая все вместе, получаем

$$\begin{aligned} H(x) + c \ln(1 - G(x)) &\leq \frac{4}{25} \ln \frac{25}{4} + \frac{21}{25} \ln \frac{225}{21} + O(\varepsilon) - cG(x) \leq \\ &\leq \frac{4}{25} \ln \frac{25}{4} + \frac{21}{25} \ln \frac{225}{21} + O(\varepsilon) - \ln 10 + O((1 - \varepsilon)^k) < 0 \end{aligned}$$

для всех достаточно больших k .

3.4. Случай 4

Осталось рассмотреть случай, когда для некоторой пары (ij) выполнено $x_{(ij)} \geq \frac{2}{5}(1 - \varepsilon)$, но при этом для всех t выполнено $x_t \leq \frac{2}{5}(1 + \varepsilon)$.

Заметим сначала, что такой большой элемент $x_{(ij)}$ может существовать только один. Если их хотя бы два, то индексы не могут повторяться, иначе будет слишком большой, например, $x_i \geq \frac{4}{5}(1 + \varepsilon)$. Но и в таком случае из тех же соображений получаем, что все остальные $x_{(t\ell)}$ не могут превышать $4\varepsilon/5$, что противоречит условию нормировки $\sum_{(t\ell)} x_{(t\ell)} = 1$ для достаточно малого ε .

Пусть $x_{(ij)} = \frac{2}{5} + \alpha$. Если $\alpha \leq 0$, то $G(x)$ легко оценивается снизу следующим образом:

$$G(x) \geq \sum_{t=1}^5 x_t^k - \left(\frac{2}{5}\right)^k + O\left(\left(\frac{2}{5}\right)^k (1-\varepsilon)^k\right) \geq 4\left(\frac{2}{5}\right)^k + O\left(\left(\frac{2}{5}\right)^k (1-\varepsilon)^k\right).$$

Если же $\alpha > 0$, то $\sum_{t=1}^5 x_t^k$ минимизируется при $x_i = x_j = \frac{2}{5} + \alpha$ и остальных $x_t = \frac{2}{5} - \frac{2\alpha}{3}$. Это вытекает из того факта, что для $\alpha > \beta > \delta$ верно, что $(\alpha + \delta)^k + (\beta - \delta)^k \geq \alpha^k + \beta^k$. Таким образом,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^5 x_i^k - x_{ij}^k &\geq \left(\frac{2}{5} + \alpha\right)^k + 3\left(\frac{2}{5} - \frac{2\alpha}{3}\right)^k \geq \\ &\geq \left(\frac{2}{5}\right)^k + \left(\frac{2}{5}\right)^{k-1} k\alpha + \alpha^2 \frac{k(k-1)}{2} \left(\frac{2}{5}\right)^{k-2} + 3\left(\frac{2}{5}\right)^k - 3\left(\frac{2}{5}\right)^{k-1} k\alpha \frac{2}{3}. \end{aligned}$$

Получился многочлен второй степени от α , который достигает своего минимума при $\alpha = \frac{2}{5(k-1)}$. Следовательно,

$$\begin{aligned} G(x) &= \sum_{t=1}^5 x_t^k - x_{ij}^k + O\left(\left(\frac{2}{5}\right)^k (1-\varepsilon)^k\right) \geq \\ &\geq \left(\frac{2}{5}\right)^k \left(4 - \frac{1}{2} \frac{k}{k-1}\right) = \left(3, 5 + O\left(\frac{1}{k}\right)\right) \left(\frac{2}{5}\right)^k. \end{aligned}$$

Осталось оценить функцию $H(x)$. Учитывая, что $x_{(ij)} \in [\frac{2}{5}(1-\varepsilon), \frac{2}{5}(1+\varepsilon)]$ и x_i, x_j лежат в том же отрезке, получаем, что $x_{(t\ell)} \leq \varepsilon$ для всех других пар $(t\ell)$, в которых присутствуют i или j . Остаются три элемента, которые в сумме должны давать $3/5 + O(\varepsilon)$, поэтому

$$H(x) \leq \frac{2}{5} \ln \frac{5}{2} + \frac{3}{5} \ln 5 + O(\varepsilon).$$

В итоге,

$$\begin{aligned} H(x) + c \ln(1 - G(x)) &\leq \frac{2}{5} \ln \frac{5}{2} + \frac{3}{5} \ln 5 + O(\varepsilon) - c \cdot G(x) \leq \\ &\leq \frac{2}{5} \ln \frac{5}{2} + \frac{3}{5} \ln 5 + O(\varepsilon) - 0.7 \cdot \ln 10 + O\left(\frac{1}{k}\right) < 0 \end{aligned}$$

для всех достаточно больших k .

4. Доказательство нижней оценки

Пусть $p = cn/\binom{n}{k}$. Нужно доказать, что при

$$c < \frac{\ln 10}{5} \left(\frac{5}{2}\right)^k - \frac{\ln 10}{2} - w_1(k) \tag{2}$$

случайный гиперграф $H(n, k, p)$ допускает правильную дробную $(5 : 2)$ -раскраску. Доказательство использует метод второго момента, подробную схему применения которого мы берем из работы [12]. Здесь лишь кратко опишем ее, не повторяя детали переходов.

Первый шаг состоит в том, чтобы использовать факт наличия точной пороговой вероятности. Это позволяет доказывать лишь то, что при c , удовлетворяющем (2), вероятность наличия правильной дробной $(5 : 2)$ -раскраски отделена от нуля, т.е.

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} P(H(n, k, p) \text{ допускает правильную дробную } (5 : 2)\text{-раскраску}) > 0. \tag{3}$$

Второй шаг состоит в том, чтобы рассмотреть другую модель случайного гиперграфа $H'(n, k, m)$, в которой выбираются $m = \lceil cn \rceil$ независимых случайных ребер, при этом в каждом ребре все вершины также выбираются независимо и равновероятно среди всего множества из n вершин. С помощью метода каплинга легко показать, что при $c' < c$ выполняется неравенство

$$P \left(H(n, k, c'n) \text{ допускает правильную дробную } (5:2)\text{-раскраску} \right) \geqslant \\ \geqslant P(H'(n, k, m) \text{ допускает правильную дробную } (5:2)\text{-раскраску}) + o_n(1).$$

Тем самым достаточно проверить неравенство, аналогичное (3), для модели $H'(n, k, m)$. Более того, достаточно рассматривать лишь подпоследовательность, по которой n делится на 10.

Далее, рассмотрим для n , кратных 10, случайную величину X_n , равную числу сбалансированных правильных дробных $(5:2)$ -раскрасок случайного гиперграфа $H'(n, k, m)$. Напомним, что дробная $(5:2)$ -раскраска называется *сбалансированной*, если любая пара цветов присвоена ровно $n/10$ вершинам. Согласно неравенству Пэли – Зигмунда имеет место соотношение:

$$P(H'(n, k, m) \text{ допускает правильную дробную } (5:2)\text{-раскраску}) \geqslant \frac{(EX_n)^2}{EX_n^2}.$$

Тем самым достаточно показать, что при условии (2) второй момент X_n не слишком велик по отношению к квадрату первого. А именно, мы хотим показать, что существует такая функция $\alpha(k) > 0$, что для всех достаточно больших n выполнено

$$EX_n^2 \leqslant \alpha(k) \cdot (EX_n)^2.$$

Вычислим первые два момента X_n .

Первый момент X_n вычисляется легко по стандартным комбинаторным формулам:

$$EX_n = \frac{n!}{((n/10)!)^{10}} \left(1 - 5 \left(\frac{2}{5} \right)^k + 10 \left(\frac{1}{10} \right)^k + O \left(\frac{1}{n} \right) \right)^m = \\ = \Theta \left(n^{1/2 - 5} e^{n \left[\ln 10 + c \ln \left(1 - 5 \left(\frac{2}{5} \right)^k + 10 \left(\frac{1}{10} \right)^k \right) \right]} \right). \quad (4)$$

Для вычисления второго момента введем некоторый набор матриц \mathcal{M}_n размера 10×10 . Обозначим через S набор всех пар чисел из набора $\{1, 2, 3, 4, 5\}$. Каждая матрица $M = (m_{(ij)(i'j')}, (ij), (i'j') \in S) \in \mathcal{M}_n$ состоит из целых неотрицательных чисел и имеет равные суммы элементов по всем строкам и столбцам: для любой пары $(ij) \in S$ выполнено

$$\sum_{(i'j') \in S} m_{(ij)(i'j')} = \frac{n}{10}, \quad \sum_{(i'j') \in S} m_{(i'j')(ij)} = \frac{n}{10}.$$

Тогда второй момент X_n можно представить как следующую сумму по элементам \mathcal{M}_n :

$$EX_n^2 = \sum_{M \in \mathcal{M}_n} \frac{n!}{\prod_{(ij), (i'j') \in S} m_{(ij)(i'j')}!} \left(1 - 2t + f(M/n) + O \left(\frac{1}{n} \right) \right)^m,$$

где

$$t = 5 \left(\frac{2}{5} \right)^k + 10 \left(\frac{1}{10} \right)^k,$$

$$f(M/n) = \sum_{i,i'=1}^5 \left(\sum_{j \neq i, j' \neq i'} \frac{m_{(ij)(i'j')}}{n} \right)^k - \sum_{(ij) \in S} \sum_{i'=1}^5 \left(\sum_{j' \neq i'} \frac{m_{(ij)(i'j')}}{n} \right)^k - \\ - \sum_{i=1}^5 \sum_{(i'j') \in S} \left(\sum_{j \neq i} \frac{m_{(ij)(i'j')}}{n} \right)^k + \sum_{(ij), (i'j') \in S} \left(\frac{m_{(ij)(i'j')}}{n} \right)^k. \quad (5)$$

Далее, рассмотрим отношение второго момента X_n к квадрату первого, из выражений (4) и (5) имеем

$$\frac{EX_n^2}{(EX_n)^2} = O \left(n^{19/2} \sum_{M \in \mathcal{M}_n} \prod_{(ij), (i'j') \in S} \frac{1}{\sqrt{1 + m_{(ij)(i'j')}}} \cdot \exp \left[-n \left(H\left(\frac{M}{n}\right) - c \ln(1 + G\left(\frac{M}{n}\right)) \right) \right] \right),$$

где функции $H(Q)$ и $G(Q)$ определены для матриц $Q = (q_{(ij)(i'j')}, (ij), (i'j') \in S)$ следующим образом:

$$H(Q) = \sum_{(ij), (i'j') \in S} q_{(ij)(i'j')} \ln(100q_{(ij)(i'j')}), \quad G(Q) = \frac{f(Q) - t^2}{(1-t)^2}.$$

Ключевую роль в доказательстве играет следующая лемма, обоснование которой мы опустим в силу его громоздкости.

Лемма 2. *Существуют две такие положительные функции $w_1(k)$ и $\beta(k)$, что если с удовлетворяет соотношению (2), то для любой матрицы $Q = (q_{(ij)(i'j')}, (ij), (i'j') \in S)$ с неотрицательными элементами и равными суммами $1/10$ по всем строкам и столбцам выполняется неравенство:*

$$H(Q) - c \ln(1 + G(Q)) \geq \beta(k) \cdot \sum_{(ij), (i'j') \in S} \left(q_{(ij)(i'j')} - \frac{1}{100} \right)^2.$$

При этом $w_1(k)$ можно выбрать экспоненциально быстро стремящейся к нулю с ростом k .

Применим лемму 2 к оценке отношения $EX_n^2/(EX_n)^2$:

$$\frac{EX_n^2}{(EX_n)^2} = O \left(n^{19/2} \sum_{M \in \mathcal{M}_n} \prod_{(ij), (i'j') \in S} \frac{1}{\sqrt{1 + m_{(ij)(i'j')}}} \cdot \exp \left[-n\beta(k) \sum_{(ij), (i'j') \in S} \left(\frac{m_{(ij)(i'j')}}{n} - \frac{1}{100} \right)^2 \right] \right).$$

Стандартными рассуждениями (см., например, [12]) легко проверить, что данное выражение оценивается сверху следующим гауссовским интегралом в степени 81:

$$O \left(\left(\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{n}} e^{-n\beta(k)(x/n - 0.01)^2} dx \right)^{81} \right) = O(1),$$

что и завершает доказательство нижней оценки в теореме 4.

5. Источники финансирования

Исследование первого автора выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00159.

Список литературы

1. *Bollobás B.* Random graphs. Cambridge University Press, 2001.
2. *Jansen S., Luczak T., Rucinski A.* Random graphs. Wiley-Interscience. New York, 2000.
3. *Frieze A., Karonski M.* Introduction to random graphs. Cambridge University Press, 2015.
4. *Scheinerman E.R., Ullman D.H.* Fractional Graph Theory. John Wiley and Sons, 2013.
5. *Hatami H., Molloy M.* Sharp thresholds for constraint satisfaction problems and homomorphisms // Random Structures and Algorithms. 2008. V. 33. P. 310–332.
6. *Alon N., Spencer J.* A note on coloring random k -sets. Unpublished manuscript. <http://cs.tau.ac.il/~nogaa/PDFS/kset2.pdf>
7. *Achlioptas D., Kim J.H., Krivelevich M., Tetali P.* Two-colorings random hypergraphs // Random Structures and Algorithms. 2002. V. 20, N 2. P. 249–259.
8. *Achlioptas D., Moore C.* On the 2-colorability of random hypergraphs // Lecture Notes in Computer Science. 2002. V. 2483. P. 78–90.
9. *Coja-Oghlan A., Zdeborová L.* The condensation transition in random hypergraph 2-coloring // Proc. 23rd Annual ACM SIAM Symposium on Discrete Algorithms. SIAM, 2012. P. 241–250.
10. *Coja-Oghlan A., Panagiotou K.* Catching the k -NAESAT threshold // Proc. 44th STOC. 2012. P. 899–908.
11. *Dyer M., Frieze A., Greenhill C.* On the chromatic number of a random hypergraph // Journal of Combinatorial Theory, Series B. 2015. V. 113. P. 68–122.
12. *Shabanov D.A.* Estimating the r -colorability threshold for a random hypergraph // Discrete Applied Mathematics. 2020. V. 282. P. 168–183.
13. *Kravtsov D.A., Krokhmal N.E., Shabanov D.A.* Panchromatic 3-colorings of random hypergraphs // European Journal of Combinatorics. 2019. V. 78. P. 28–43.
14. *Кравцов Д.А., Крохмаль Н.Е., Шабанов Д.А.* Полноцветные раскраски случайных гиперграфов // Дискретная математика. 2019. Т. 31, № 2. С. 84–113.
15. *Захаров П.А., Шабанов Д.А.* Дробные раскраски случайных гиперграфов // Успехи математических наук. 2023. Т. 78, № 6. С. 183–184.

References

1. *Bollobás B.* Random graphs. Cambridge University Press, 2001.
2. *Jansen S., Luczak T., Rucinski A.* Random graphs. Wiley-Interscience. New York, 2000.
3. *Frieze A., Karonski M.* Introduction to random graphs. Cambridge University Press, 2015.
4. *Scheinerman E.R., Ullman D.H.* Fractional Graph Theory. John Wiley and Sons, 2013.
5. *Hatami H., Molloy M.* Sharp thresholds for constraint satisfaction problems and homomorphisms. Random Structures and Algorithms. 2008. V. 33. P. 310–332.
6. *Alon N., Spencer J.* A note on coloring random k -sets. Unpublished manuscript. <http://cs.tau.ac.il/~nogaa/PDFS/kset2.pdf>
7. *Achlioptas D., Kim J.H., Krivelevich M., Tetali P.* Two-colorings random hypergraphs. Random Structures and Algorithms. 2002. V. 20, N 2. P. 249–259.
8. *Achlioptas D., Moore C.* On the 2-colorability of random hypergraphs. Lecture Notes in Computer Science. 2002. V. 2483. P. 78–90.

9. *Coja-Oghlan A., Zdeborová L.* The condensation transition in random hypergraph 2-coloring. Proc. 23rd Annual ACM SIAM Symposium on Discrete Algorithms. SIAM, 2012. P. 241–250.
10. *Coja-Oghlan A., Panagiotou K.* Catching the k-NAESAT threshold. Proc. 44th STOC. 2012. P. 899–908.
11. *Dyer M., Frieze A., Greenhill C.* On the chromatic number of a random hypergraph. Journal of Combinatorial Theory, Series B. 2015. V. 113. P. 68–122.
12. *Shabanov D.A.* Estimating the r-colorability threshold for a random hypergraph. Discrete Applied Mathematics. 2020. V. 282. P. 168–183.
13. *Kravtsov D.A., Krokhmal N.E., Shabanov D.A.* Panchromatic 3-colorings of random hypergraphs. European Journal of Combinatorics. 2019. V. 78. P. 28–43.
14. *Kravtsov D.A., Krokhmal N.E., Shabanov D.A.* Panchromatic colorings of random hypergraphs. Discrete Mathematics and Applications. 2021. V. 31, N 2. P. 84–113. (in Russian).
15. *Zakharov P.A., Shabanov D.A.* Fractional colourings of random hypergraphs. Russian Mathematical Surveys. 2023. V. 78, N 6. P. 183–184. (in Russian).

Поступила в редакцию 23.08.2024

УДК 532.533.2

M. A. Brutyan^{1,2}, U. G. Ibragimov¹¹Центральный аэрогидродинамический институт им. профессора Н. Е. Жуковского²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Точное решение уравнений Навье – Стокса, описывающее закрученные торнадообразные течения вязкого газа

Построено точное автомодельное решение уравнений Навье – Стокса для закрученного течения вязкого газа в безграничной области. Внутри узкого вязкого ядра и во внешней невязкой области с помощью асимптотического рассмотрения найдены аналитические решения. Обнаружено, что на некотором расстоянии от оси вихря возможно образование ударной волны. Путем численного анализа системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих автомодельные решения, построены картины линий тока течения внутри вязкого ядра.

Ключевые слова: уравнения Навье – Стокса, точные решения, закрученные течения газа

M. A. Brutyan^{1,2}, U.G. Ibragimov¹¹ Central Aerohydrodynamic Institute n.a. professor N.E. Zhukovsky² Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)

Exact solution of the Navier – Stokes equations for rotational tornado-like flow of a viscous gas

Exact self-similar solution of the Navier – Stokes equations for rotational flow of viscous gas in an infinite area is constructed. Within thin viscous core and external non-viscous regions analytical solutions are found making use of asymptotic method. It is observed that at some distance from vortex axis the formation of shock wave is possible. Using numerical analysis for systems of ordinary differential equations describing self-similar solutions, the picture of streamlines within viscous core are shown.

Key words: Navier – Stokes equations, exact solutions, rotational flow of gas

1. Введение

Точные решения уравнений Навье – Стокса для сжимаемого вязкого газа крайне редки и представляют большой интерес, поскольку именно изучение точных решений дает правильное представление об основах гидромеханики. В случае несжимаемой вязкой жидкости известен ряд точных решений, когда исходную систему уравнений в частных производных удается свести к обыкновенным дифференциальным уравнениям, а в некоторых случаях даже решить задачу аналитически до конца. Особое место в этом ряду занимают точное решение Бюргерса, описывающее стационарное вихревое течение вязкой жидкости с тремя ненулевыми компонентами скорости [1], и решение Джейфри – Гамеля для течения вязкой несжимаемой жидкости в плоском диффузоре [2].

Впервые автомодельные решения уравнений Навье – Стокса для течения вязкого сжимаемого газа от источника массы в плоских и осесимметричных конических диффузорах

теоретически изучались в работах [3–6]. В [3] рассматривается осесимметричное течение в конусе с непроницаемыми стенками и условием скольжения для скорости и температуры на стенке. В [4–6] изучается течение в осесимметричных и плоских каналах с массоотводом газа на стенке. В работах [7, 8] рассмотрено течение в клине при условии адиабатической стенки и показано, что автомодельные решения, удовлетворяющие условию сплошной среды, реализуются в каналах с малыми углами раствора. В работе [8] найдены аналитические решения для течения в плоском канале с коэффициентами динамической вязкости и теплопроводности, зависящими от температуры по степенному закону, а в работе [9] рассмотрено аналогичное автомодельное течение вязкого сжимаемого газа от струи (источника импульса), истекающей в область между двумя расходящимися стенками. В недавних работах [10, 11] получены новые автомодельные решения для течения вязкого газа при произвольной зависимости коэффициентов переноса от температуры, а в [11] найдены несимметричные автомодельные решения.

В работе [12] изучен новый класс автомодельных решений, в которых все параметры течения вдоль оси канала изменяются по экспоненциальному закону. При этом было изучено течение в ограниченной области, а именно в цилиндрическом канале.

Закрученные течения вязкого газа рассмотрены в работе [13]. Однако, как и в [12], автомодельные решения были получены только для ограниченной, на этот раз конической области, что не позволило авторам работы исследовать решения в дальнем поле.

В настоящей работе в предположении, что все параметры течения вдоль оси вихря изменяются по экспоненциальному закону, получено точное автомодельное решение уравнений Навье – Стокса для закрученного течения вязкого газа в неограниченной области. Система уравнений в частных производных при этом сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений.

Полученные в настоящей работе автомодельные течения авторы не склонны отождествлять с реальной картиной течения в атмосферном торнадо [14]. Однако в отдельных аспектах найденные решения качественно напоминают эту картину.

2. Постановка задачи

Рассмотрим течение вязкого теплопроводного газа, закрученного вокруг некоторой оси. Введем цилиндрическую систему координат (r, θ, z) так, чтобы ось z совпадала с осью вращения газа: $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$, $z = z$ (рис. 1).

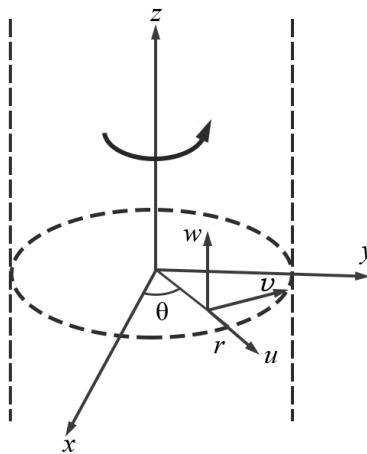


Рис. 1. Схема закрученного течения газа

Система уравнений Навье – Стокса в цилиндрических координатах имеет вид

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho u) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) = 0, \quad (1)$$

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial r} + \rho w \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{\rho v^2}{r} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rr}) + \frac{\partial}{\partial z} (\sigma_{rz}) - \frac{\sigma_{\theta\theta}}{r}, \quad (2)$$

$$\rho u \frac{\partial v}{\partial r} + \rho w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\rho u v}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{\theta r}) + \frac{\partial}{\partial z} (\sigma_{\theta z}) + \frac{\sigma_{\theta r}}{r}, \quad (3)$$

$$\rho u \frac{\partial w}{\partial r} + \rho w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rz}) + \frac{\partial}{\partial z} (\sigma_{zz}), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial h}{\partial r} + \rho w \frac{\partial h}{\partial z} &= u \frac{\partial p}{\partial r} + w \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \kappa \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \\ &+ 2\mu \{ \varepsilon_{rr}^2 + \varepsilon_{\theta\theta}^2 + \varepsilon_{zz}^2 \} + 4\mu \{ \varepsilon_{r\theta}^2 + \varepsilon_{rz}^2 + \varepsilon_{\theta z}^2 \} - \frac{2}{3} \mu (\operatorname{div} \mathbf{V})^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь ρ, u, v, w, h, p — соответственно плотность, радиальная, азимутальная и продольная компоненты скорости, энталпия и давления; μ, κ — коэффициенты динамической вязкости и теплопроводности. Предполагается, что течение не зависит от азимутальной координаты θ . Компоненты тензора напряжений σ :

$$\sigma_{rr} = 2\mu \varepsilon_{rr} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{V}, \quad \sigma_{\theta\theta} = 2\mu \varepsilon_{\theta\theta} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{V}, \quad \sigma_{zz} = 2\mu \varepsilon_{zz} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{V},$$

$$\sigma_{r\theta} = \sigma_{\theta r} = 2\mu \varepsilon_{r\theta}, \quad \sigma_{rz} = \sigma_{zr} = 2\mu \varepsilon_{rz}, \quad \sigma_{z\theta} = \sigma_{\theta z} = 2\mu \varepsilon_{\theta z},$$

$$\varepsilon_{rr} = \frac{\partial u}{\partial r}, \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{u}{r}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z},$$

$$\varepsilon_{r\theta} = \frac{r}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right), \quad \varepsilon_{rz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right), \quad \varepsilon_{\theta z} = \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial z}.$$

Газ предполагается совершенным, подчиняющимся уравнению состояния:

$$p = \rho R T.$$

Введем безразмерные переменные, пусть $r = \bar{r}L$, $\rho = \bar{\rho}\rho_0$, $u = \bar{u}w_0$, $v = \bar{v}w_0$, $w = \bar{w}w_0$, $p = \bar{p}p_0$, $T = \bar{T}T_0$, где переменные с индексом 0 берутся в некоторой точке на оси вихря. Компоненты вектора скорости отнесены к продольной компоненте скорости вдоль оси вихря w_0 ; L — некоторый линейный размер вдоль оси вихря. Тогда система уравнений (1) – (5) примет следующий вид:

$$\frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} (\bar{r} \bar{\rho} \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} (\bar{\rho} \bar{w}) = 0. \quad (6)$$

$$\bar{\rho} \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}} + \bar{\rho} \bar{w} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{z}} - \frac{\bar{\rho} \bar{v}^2}{\bar{r}} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{r}} + \frac{1}{\operatorname{Re}_0} \left\{ \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} (\bar{r} \bar{\sigma}_{rr}) + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} (\bar{\sigma}_{rz}) - \frac{\bar{\sigma}_{\theta\theta}}{\bar{r}} \right\}. \quad (7)$$

$$\bar{\rho} \bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{r}} + \bar{\rho} \bar{w} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{z}} + \frac{\bar{\rho} \bar{u} \bar{v}}{\bar{r}} = \frac{1}{\operatorname{Re}_0} \left\{ \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} (\bar{r} \bar{\sigma}_{\theta r}) + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} (\bar{\sigma}_{\theta z}) + \frac{\bar{\sigma}_{\theta r}}{\bar{r}} \right\}, \quad (8)$$

$$\bar{\rho} \bar{u} \frac{\partial \bar{w}}{\partial \bar{r}} + \bar{\rho} \bar{w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial \bar{z}} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{\operatorname{Re}_0} \left\{ \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} (\bar{r} \bar{\sigma}_{rz}) + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} (\bar{\sigma}_{zz}) \right\}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\bar{\rho}\bar{u}}{(\gamma-1)M_0^2} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{r}} + \frac{\bar{\rho}\bar{w}}{(\gamma-1)M_0^2} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{z}} = \bar{u} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{r}} + \bar{w} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{z}} + \\
& + \frac{1}{(\gamma-1)M_0^2 \text{Re}_0 \text{Pr}_0} \left\{ \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \bar{\mu} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{r}} \right) + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left(\bar{\mu} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{z}} \right) \right\} + \\
& + 2 \frac{\bar{\mu}}{\text{Re}_0} \left\{ \bar{\varepsilon}_{rr}^2 + \bar{\varepsilon}_{\theta\theta}^2 + \bar{\varepsilon}_{zz}^2 \right\} + 4 \frac{\bar{\mu}}{\text{Re}_0} \left\{ \bar{\varepsilon}_{r\theta}^2 + \bar{\varepsilon}_{rz}^2 + \bar{\varepsilon}_{\theta z}^2 \right\} - \frac{2}{3} \frac{\bar{\mu}}{\text{Re}_0} (\text{div} \bar{\mathbf{V}})^2. \quad (10)
\end{aligned}$$

Здесь $M_0 = w_0/\sqrt{\gamma RT_0}$, $\text{Re}_0 = \rho_0 w_0 L / \mu_0$, $\text{Pr}_0 = c_p \mu_0 / \kappa_0$ — числа Маха, Рейнольдса и Прандтля соответственно; $\gamma = c_p/c_v$ — показатель адиабаты.

Автомодельное решение системы уравнений (6) – (10) будем искать в виде

$$\bar{\rho} = \rho(\bar{r}) e^{\alpha \bar{z}}, \quad \bar{u} = u(\bar{r}) e^{\beta \bar{z}}, \quad \bar{v} = v(\bar{r}) e^{\beta \bar{z}}, \quad \bar{w} = w(\bar{r}) e^{\beta \bar{z}},$$

$$\bar{T} = T(\bar{r}) e^{2\beta \bar{z}}, \quad \bar{p} = p(\bar{r}) e^{(\alpha+2\beta) \bar{z}}, \quad \bar{\mu} = \bar{T}^n.$$

Нетрудно убедиться, что показатели степени вязких и конвективных членов совпадают при выполнении простого условия:

$$2\beta n = \alpha + \beta.$$

Тогда исходная система уравнений в частных производных принимает форму обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \rho u) + 2n\beta \rho w = 0, \quad (11)$$

$$\begin{aligned}
& \rho u u' + \rho w u \beta - \frac{\rho v^2}{r} = -p' + \frac{1}{r \text{Re}_0} \frac{d}{dr} \left(r T^n \left(\frac{4}{3} u' - \frac{2}{3} \frac{u}{r} - \frac{2}{3} \beta w \right) \right) + \\
& + \frac{\beta(2n+1)}{\text{Re}_0} T^n (w' + \beta u) - \frac{T^n}{r \text{Re}_0} \left(\frac{4}{3} \frac{u}{r} - \frac{2}{3} u' - \frac{2}{3} \beta w \right), \quad (12)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \rho u v' + \rho w v \beta + \frac{\rho u v}{r} = \frac{1}{r \text{Re}_0} \frac{d}{dr} \left(r T^n \left(v' - \frac{v}{r} \right) \right) + \\
& + \frac{\beta^2(2n+1)}{\text{Re}_0} T^n v + \frac{T^n}{r \text{Re}_0} \left(v' - \frac{v}{r} \right), \quad (13)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \rho u w' + \rho w^2 \beta = -\beta(2n+1)p + \frac{1}{r \text{Re}_0} \frac{d}{dr} (r T^n (w' + \beta u)) + \\
& + \frac{\beta(2n+1)}{\text{Re}_0} T^n \left(\frac{4}{3} \beta w - \frac{2}{3} u' - \frac{2}{3} \frac{u}{r} \right), \quad (14)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \rho \frac{u T' + 2\beta w T}{(\gamma-1)M_0^2} = u p' + \beta(2n+1) w p + 2 \frac{T^n}{\text{Re}_0} \left[u'^2 + \left(\frac{u}{r} \right)^2 + (\beta w)^2 \right] + \\
& + \frac{T^n}{\text{Re}_0} \left[\left(v' - \frac{v}{r} \right)^2 + (w' + \beta u)^2 + (\beta v)^2 \right] - \frac{2}{3} \frac{T^n}{\text{Re}_0} \left(u' + \frac{u}{r} + \beta w \right)^2 + \\
& + \frac{1}{(\gamma-1)M_0^2 \text{Re}_0 \text{Pr}_0} \left[\frac{1}{r} (r T^n T')' + 4\beta^2(n+1) T^{n+1} \right]. \quad (15)
\end{aligned}$$

В полученных формулах штрихом обозначены производные по переменной r . Здесь и далее для удобства записи опущены черточки у безразмерных переменных.

Коэффициент β может быть как положительным, так и отрицательным, и отвечает за скорость роста либо затухания газодинамических переменных. Введенный выше параметр L представляет собой расстояние вдоль оси z , на котором скорость u изменится в e раз.

Границные условия на оси вихря запишем в виде

$$\rho(0) = 1, \quad u(0) = 0, \quad v(0) = 0, \quad w(0) = 1,$$

$$T(0) = 1, \quad p(0) = \frac{1}{\gamma M_0^2}.$$

Из уравнения неразрывности (11) следует, что для производной на оси должно выполняться условие

$$u'(0) = -n\beta w(0) = -n\beta.$$

Для определения граничного условия на азимутальную компоненту скорости обратимся к формуле для завихренности течения:

$$\boldsymbol{\Omega} = \text{rot } \mathbf{V} = -\mathbf{e}_r \frac{\partial v(r, z)}{\partial z} + \mathbf{e}_\theta \left(\frac{\partial u(r, z)}{\partial z} - \frac{\partial w(r, z)}{\partial r} \right) + \mathbf{e}_z \frac{1}{r} \frac{\partial r v(r, z)}{\partial r},$$

или через автомодельные переменные:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} &= -\mathbf{e}_r \beta v e^{\beta z} + \mathbf{e}_\theta \left(\beta u - \frac{dw}{dr} \right) e^{\beta z} + \mathbf{e}_z \frac{1}{r} \frac{drv}{dr} e^{\beta z} = \\ &= \left(-\mathbf{e}_r \beta v + \mathbf{e}_\theta \left(\beta u - \frac{dw}{dr} \right) + \mathbf{e}_z \frac{1}{r} \frac{drv}{dr} \right) e^{\beta z}. \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_z$ — единичные направляющие векторы в цилиндрической системе координат. Откуда видно, что завихренность также автомодельна по переменной z :

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}(r) e^{\beta z}.$$

Компонента вектора завихренности вдоль оси z имеет вид

$$\Omega_z = \boldsymbol{\Omega}(r) \cdot \mathbf{e}_z = \frac{1}{r} \frac{drv}{dr}.$$

Раскладывая далее азимутальную компоненту скорости по формуле Тейлора, находим значение завихренности на оси, $r = 0$:

$$\Omega_z(0) = \frac{1}{r} \frac{\partial r^2 v'(0)}{\partial r} = 2v'(0).$$

Откуда $v'(0) = \Omega_z(0)/2 = \Omega_0/2$, где Ω_0 — завихренность вдоль оси z в центре вихря. Из условия симметрии имеем

$$w'(0) = T'(0) = p'(0) = 0.$$

Будем искать решения, в которых азимутальная компонента скорости затухает на бесконечности:

$$v \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Так как переменные r и z отнесены к L , то коэффициент β принимает значения ± 1 . Для определенности примем далее $\beta = -1$.

3. Течение в тонком вязком ядре вихря

Пусть $r = r_1\delta$, где $\delta \ll 1$. Предположим также, что выполняются условия

$$\frac{1}{\gamma M_0^2} \sim \frac{1}{\delta^2 Re_0} \gg 1.$$

Из уравнения неразрывности следует, что нетривиальное решение возможно только при $u \sim \delta$. Введем новую переменную $u_1 = u/\delta$. Тогда в нулевом приближении системы автомодельных уравнений (11) – (15) принимает вид

$$\frac{1}{r_1} \frac{d}{dr_1} (r_1 \rho u_1) + 2n\beta \rho w = 0,$$

$$-\frac{dp}{dr_1} = 0,$$

$$\frac{1}{r_1^2 Re_0} \frac{d}{dr_1} \left(r_1^2 T^n \left(v' - \frac{v}{r_1} \right) \right) = 0,$$

$$-\beta(2n+1)p + \frac{1}{r_1 Re_0} \frac{d}{dr_1} \left(r_1 T^n \frac{dw}{dr_1} \right) = 0,$$

$$\frac{1}{(\gamma-1)M_0^2 Re_0 Pr_0} \frac{1}{r_1} \frac{d}{dr_1} \left(r_1 T^n \frac{dT}{dr_1} \right) = 0,$$

решение которой при $\beta = -1$ записывается в конечной форме:

$$\rho = 1, \quad T = 1, \quad p = \frac{1}{\gamma M_0^2},$$

$$u_1 = nr_1 - \frac{n(2n+1)}{8\gamma M_0^2} Re_0 \delta^2 r_1^3, \quad v = \frac{\Omega_0}{2} \delta r_1, \quad w = 1 - \frac{(2n+1)Re_0}{4\gamma M_0^2} \delta^2 r_1^2,$$

или, возвращаясь к переменной r имеем:

$$u = nr - \frac{n(2n+1)}{8\gamma M_0^2} Re_0 r^3, \quad v = \frac{\Omega_0}{2} r, \quad w = 1 - \frac{(2n+1)Re_0}{4\gamma M_0^2} r^2.$$

Откуда легко видеть, что скорость w обращается в ноль на расстоянии r_* :

$$r_* = \sqrt{\frac{4\gamma M_0^2}{(2n+1)Re_0}},$$

а скорость u – на расстоянии r_{**} :

$$r_{**} = \sqrt{\frac{8\gamma M_0^2}{(2n+1)Re_0}} = \sqrt{2} r_*.$$

Вычислим теперь компоненту Ω_z завихренности поля течения:

$$\Omega_z = \frac{1}{r} \frac{dr v}{dr} = \Omega_0.$$

Таким образом, заключаем, что в нулевом приближении в тонком вязком ядре величина завихренности не зависит от r .

4. Течение вне вязкого ядра

При больших числах Рейнольдса $Re_0 \gg 1$ во внешней области вне вязкого ядра в нулевом приближении течение можно считать невязким. Автомодельные уравнения Эйлера тогда принимают вид

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \rho u) + 2n\beta \rho w = 0, \quad (16)$$

$$\rho u u' + \rho w u \beta - \frac{\rho v^2}{r} = -p', \quad (17)$$

$$\rho u w' + \rho w v \beta + \frac{\rho u v}{r} = 0, \quad (18)$$

$$\rho u w' + \rho w^2 \beta = -\beta(2n+1)p, \quad (19)$$

$$\rho \frac{u T' + 2\beta w T}{(\gamma - 1) M_0^2} = u p' + \beta(2n+1) w p. \quad (20)$$

Уравнение энергии записывается в виде

$$\frac{1}{r} \left(r \rho u \left(\frac{T}{(\gamma - 1) M_0^2} + \frac{V^2}{2} \right) \right)' + 2(n+1)\beta \rho w \left(\frac{T}{(\gamma - 1) M_0^2} + \frac{V^2}{2} \right) = 0,$$

где $V^2 = u^2 + v^2 + w^2$. Интегрирование полученного выражения с учетом уравнения неразрывности дает

$$\frac{\left(\frac{T}{(\gamma - 1) M_0^2} + \frac{V^2}{2} \right)}{\left(\frac{T_2}{(\gamma - 1) M_0^2} + \frac{V_2^2}{2} \right)} = \left(\frac{\rho u r}{\rho_2 u_2 r_2} \right)^{\frac{1}{n}},$$

где величины с индексом 2 относятся к внешней границе вязкого ядра. Второе уравнение импульсов можно также проинтегрировать:

$$\frac{r v}{r_2 v_2} = \left(\frac{\rho u r}{\rho_2 u_2 r_2} \right)^{\frac{1}{2n}}, \quad (21)$$

откуда находим выражение для температуры:

$$\frac{T}{(\gamma - 1) M_0^2} = \left(\frac{T_2}{(\gamma - 1) M_0^2} + \frac{u_2^2 + w_2^2}{2} + \frac{v_2^2}{2} \left(1 - \left(\frac{r_2}{r} \right)^2 \right) \right) \left(\frac{\rho u r}{\rho_2 u_2 r_2} \right)^{\frac{1}{n}} - \frac{u^2 + w^2}{2}. \quad (22)$$

Из системы уравнений (16) – (20), с учетом интегралов (21) и (22), при радиальной скорости $u \gg 1$ можно получить простое решение. Уравнение неразрывности в этом случае принимает вид

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \rho u) \approx 0,$$

откуда следует, что $r \rho u = \text{const}$. Тогда для азимутальной скорости имеем

$$v \approx \frac{r_2 v_2}{r}.$$

Из полученной формулы также видно, что проекция завихренности на ось z во внешней области мала:

$$\Omega_z = \frac{1}{r} \frac{drv}{dr} e^{\beta z} \approx 0.$$

Уравнения импульсов (17), (19) упрощаются:

$$\rho uu' \approx 0, \quad \rho uw' \approx 0,$$

откуда $u \approx \text{const}$, $w \approx \text{const}$. Тогда для плотности и температуры газа во внешней области (вне вязкого ядра) окончательно получаем

$$\rho \approx \frac{\rho_2 r_2}{r}, \quad T \approx T_2 + \frac{(\gamma - 1)}{2} M_0^2 v_2^2 \left(1 - \left(\frac{r_2}{r} \right)^2 \right),$$

т.е. азимутальная скорость v и плотность ρ при $r \rightarrow \infty$ убывают практически до нулевых значений.

5. Численное решение системы автомодельных уравнений

В произвольном случае нелинейная система обыкновенных дифференциальных уравнений (11) – (15) для аналитического исследования представляется архисложной, поэтому воспользуемся численными методами. Систему будем решать относительно функций $u(r)$, $v(r)$, $w(r)$, $T(r)$ и $\rho(r)$. Задача сводится к краевой, с начальными условиями в точке $r = 0$. В расчетах использована неявная схема второго порядка точности, шаг интегрирования: $\Delta r = 10^{-5}$.

В ходе численного решения оказалось, что на некотором расстоянии \tilde{r} от оси радиальная скорость u , плотность ρ и температура T претерпевают разрыв. Образуется косой скачек уплотнения, фронт которого расположен на поверхности цилиндра (рис. 1). Стоит, однако, отметить, что при более грубом шаге интегрирования $\Delta r > 10^{-4}$ разрыв может не наблюдаться. В этом случае численное интегрирование заканчивается в точке, где радиальная скорость u и температура T обращаются в ноль, а плотность ρ , азимутальная v и продольная w компоненты вектора скорости \mathbf{V} стремятся к бесконечности. Подобное поведение решения, связанное с большим шагом интегрирования, является либо артефактом, либо оно указывает на возможность непрерывного решения. Окончательно выяснить этот вопрос авторам не удалось.

В настоящей работе представлено разрывное решение. Для этого в расчетах с малым шагом интегрирования использована комбинированная расчетная схема, когда в вязком ядре вблизи оси ($0 < r < \tilde{r}$) решаются уравнения Навье – Стокса, а во внешней области ($r > \tilde{r}$) – уравнения Эйлера.

На рисунках 2а, 2б изображены профили радиальной скорости u соответственно во внутренней и внешней областях при $M_0 = 0.5$, $Re_0 = 10000$, $n = 1$, $\gamma = 1.4$. На рисунках 3а, 3б изображены соответствующие эпюры плотности (текущее направлено из бесконечности в сторону оси вихря).

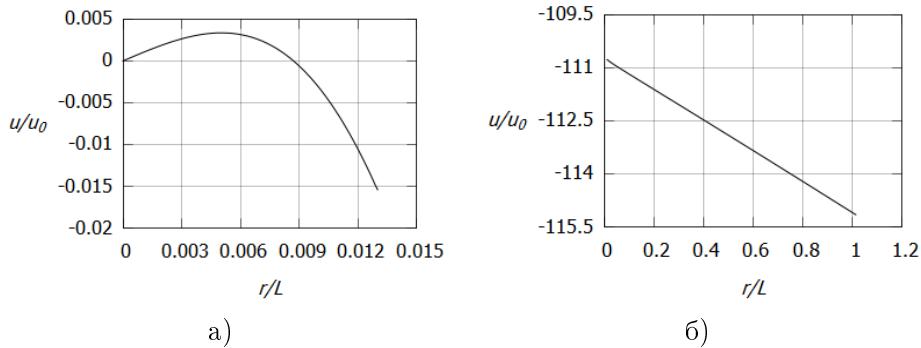
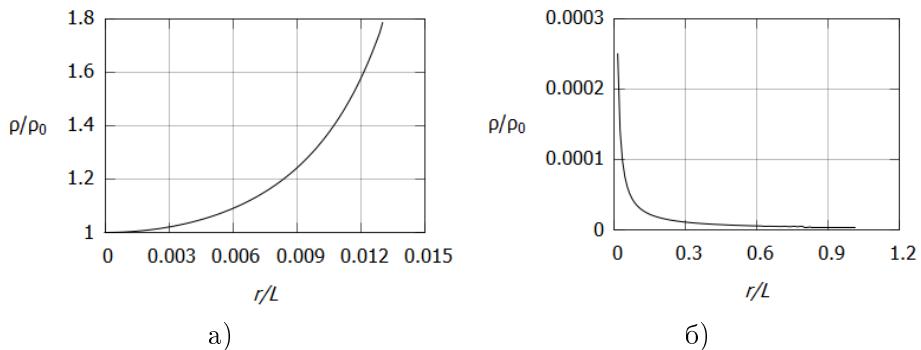
Как видно из рисунков 2, 3, перепад скорости и плотности перед и после ударной волны оказывается выше предельного теоретического значения, соответствующего течению совершенного газа без подвода/отвода тепла. Физически подобная картина течения возможна, например, если на ударной волне имеет место отвод энергии, например из-за протекающих эндотермических химических реакций.

Закон сохранения потоков массы, импульса и энергии в автомодельных переменных имеет вид

$$\rho_{out} u_{out} = \rho_{in} u_{in},$$

$$\rho_{out} u_{out}^2 + \frac{\rho_{out} T_{out}}{\gamma M_0^2} = \rho_{in} u_{in}^2 + \frac{\rho_{in} T_{in}}{\gamma M_0^2},$$

$$\frac{T_{out}}{(\gamma - 1) M_0^2} + \frac{u_{out}^2}{2} + q = \frac{T_{in}}{(\gamma - 1) M_0^2} + \frac{u_{in}^2}{2}.$$

Рис. 2. Распределение радиальной скорости u : а) в вязком ядре, б) во внешней областиРис. 3. Распределение плотности ρ : а) в вязком ядре, б) во внешней области

Здесь параметры ρ_{out} , u_{out} , T_{out} отнесены к внешней невязкой области, а ρ_{in} , u_{in} , T_{in} — к области вязкого ядра, находящейся за скачком уплотнения; q — теплота, которая поглощается при прохождении ударной волны, $q < 0$. В расчетах положение ударной волны оказалось на расстоянии $\tilde{r} \approx 0.013$ при $q = -6132$, $\rho_{in} = 1.7856$, $u_{in} = -0.0154$, $T_{in} = 0.5973$ и $\rho_{out} = 0.00025$, $u_{out} = -110.8$, $T_{out} = 0.293$. Заметим, что в произведенных расчетах значение \tilde{r} оказалось больше r_{**} .

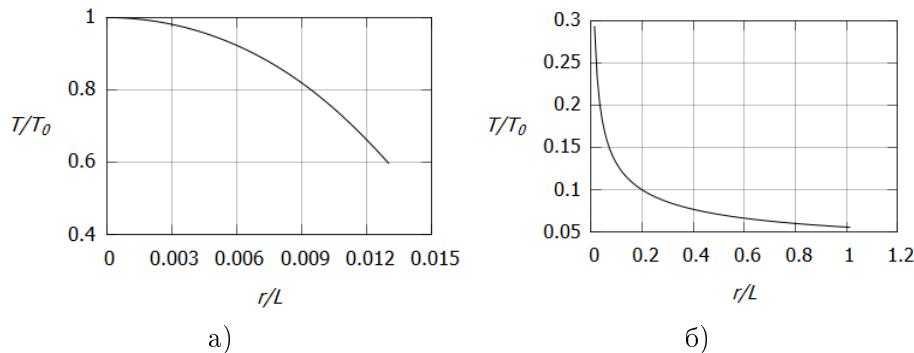


Рис. 4. Зависимость температуры от расстояния: а) в вязком ядре, б) во внешней области

На рисунках 4а и 4б, 5а и 5б, 6а и 6б изображены профили температуры T , азимутальной скорости v и осевой скорости w соответственно. Из рисунков 4, 5 видно, что температура и азимутальная компонента скорости убывают при $r \rightarrow \infty$.

Представляет интерес физическая картина течения в вязком ядре. Формула для линий тока имеет вид

$$\frac{dr}{u(r, z)} = \frac{rd\theta}{v(r, z)} = \frac{dz}{w(r, z)},$$

или в автомодельных переменных:

$$\frac{dr}{u(r)e^{\beta z}} = \frac{rd\theta}{v(r)e^{\beta z}} = \frac{dz}{w(r)e^{\beta z}}.$$

Отсюда можно выразить азимутальную и продольную координаты как функции от r :

$$\theta = \int \frac{v(r)dr}{ru(r)}, \quad z = \int \frac{w(r)dr}{u(r)}.$$

На рисунке 7 изображена полученная зависимость $z = z(r)$. На некотором расстоянии r_* от оси поток разворачивается и течет вниз от оси вихря. На расстоянии $r = r_{**}$ радиальная компонента скорости u обращается в ноль, и течение направлено строго вниз, а при $r > r_{**}$ поток течет из бесконечности в сторону оси z .

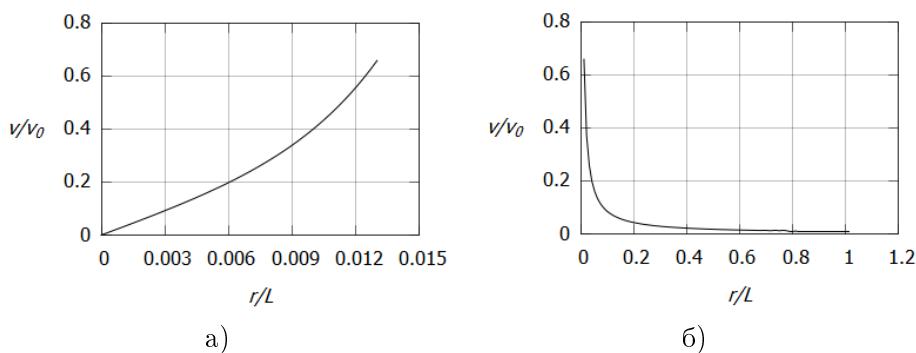


Рис. 5. Зависимость азимутальной скорости от расстояния: а) в вязком ядре, б) во внешней области

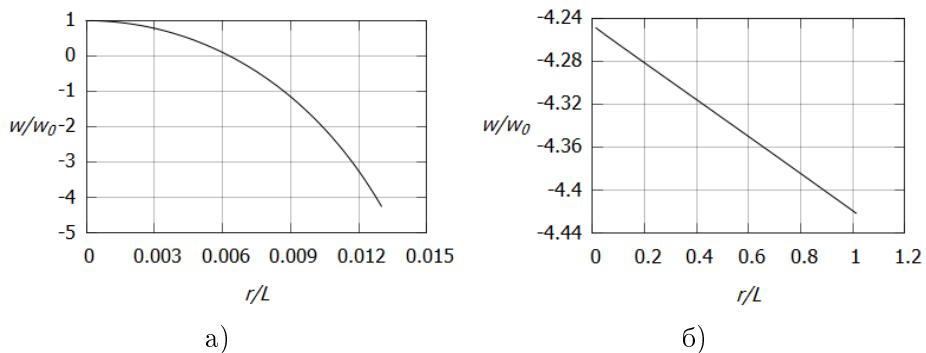


Рис. 6. Зависимость продольной скорости от расстояния: а) в вязком ядре, б) во внешней области

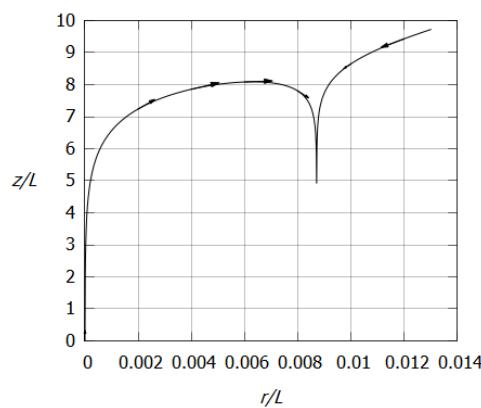


Рис. 7. Линии тока в вязком ядре в плоскости rz

На рисунке 8 дано качественное изображение винтовой линии в трехмерных координатах (приведен всего один виток). На расстоянии $r = r_{**}$ поток движется по окружности строго вниз, а линия тока в этом месте имеет излом. Для более наглядного представления вихря на рис. 9 изображена винтовая линия с большим числом витков.

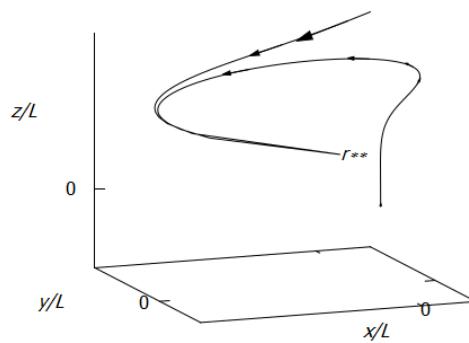


Рис. 8. Винтовая линия тока в вязком ядре

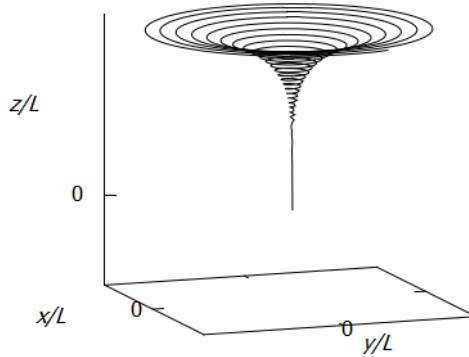


Рис. 9. Винтовая линия тока для восходящего потока

В центре вихря наблюдается сильное восходящее течение с дальнейшей закруткой потока вверх по течению. На внешней границе области поток напротив обладает нисходящим движением, что напоминает картину течения в торнадо.

6. Заключение

Получено точное автомодельное решение уравнений Навье – Стокса, описывающее закрученные течения вязкого совершенного теплопроводного газа. Для течения в узком вязком ядре вблизи оси вращения и во внешней невязкой области получены аналитические решения в рамках асимптотического приближения.

С помощью численного исследования обнаружено, что на некотором критическом расстоянии от оси вихря образуется интенсивная цилиндрическая ударная волна. Сразу за ударной волной течение направлено вниз, а вблизи оси (центра вихря) – вверх. Подобная картина течения может иметь место при отводе тепла на поверхности разрыва.

Построены картины полученного вихревого течения, которые напоминают течение в атмосферном торнадо.

Список литературы

1. Брутян М.А., Вышинский В.В., Ляпунов С.В. Основы дозвуковой аэродинамики. Москва : Наука, 2021. 269 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. Москва : Наука. 1986, 735 с.

3. *Williams J.C.* Conical nozzle flow with velocity slip and temperature jump // AIAA Journal. 1967. V 5, N 12. P. 2128–2134.
4. *Быркин А.П.* О точных решениях уравнений Навье – Стокса для течения сжимаемого газа в каналах // Ученые записки ЦАГИ. 1970. Вып. 1, № 6. С. 15–21.
5. *Быркин А.П.* Об одном точном решении уравнений Навье – Стокса для сжимаемого газа // ПММ. 1969. Вып. 33, № 1. С. 152–157.
6. *Быркин А.П., Межиров И.И.* О некоторых автомодельных течениях вязкого газа в канале // Изв. АН СССР. МЖГ. 1969. Вып. 1, С. 100–105.
7. *Брутян М.А., Ибрагимов У.Г.* Автомодельные турбулентные течения вязкого газа в клине // Труды МФТИ. 2020. Вып. 12, № 3. С. 141–149.
8. *Брутян М.А.* Автомодельные решения типа Джейфери – Гамеля для течения вязкого сжимаемого газа // Ученые записки ЦАГИ. 2017. Вып. XLVIII, № 6. С. 13–22.
9. *Брутян М.А. Крапивский П.Л.* Точные решения стационарных уравнений Навье–Стокса вязкого теплопроводного газа для плоской струи из линейного источника // ПММ. 2018. Вып. 82, № 5. С. 644–656.
10. *Брутян М.А., Ибрагимов У.Г.* Автомодельные течения вязкого газа в плоском канале при произвольной зависимости коэффициентов переноса от температуры // ПММ. 2021. Т. 85, № 6. С. 755–764.
11. *Брутян М.А., Ибрагимов У.Г.* Автомодельные несимметричные течения вязкого газа в клине // ПММ. 2022. Т. 86, № 5. С. 741–752.
12. *Быркин А.П.* Автомодельные течения вязкого газа в каналах с тепло- и массообменом на стенке // Ученые записки ЦАГИ. 1976. Т. VII, № 2. С. 25–36.
13. *Быркин А.П., Щенников В.В.* О конически подобных течениях жидкости и газа. Часть II. Сжимаемый газ // Ученые записки ЦАГИ. 2002. Т. XXXIII, № 3–4. С. 46–62.
14. *Краснов Ю.К.* Эволюция «смерчей». В сб. Нелинейные волны. Структуры и бифуркации. Москва : Наука, 1987. С. 174–189.

References

1. *Brutyan M.A., Vyshinsky V.V., Lyapunov S.V.* Foundation of Subsonic Aerodynamics. Moscow : Nauka, 2021. P. 269. (in Russian).
2. *Landau L.D., Lifschitz E.M.* Fluid Mechanics. Moscow : Nauka, 1986. P. 735. (in Russian).
3. *Williams J.C.* Conical nozzle flow with velocity slip and temperature jump. AIAA Journal. 1967. V 5, N 12. P. 2128–2134.
4. *Byrkin A.P.* Concerning exact solutions of the Navier – Stokes equations for compressible gas flow in channels. Uch. Zapiski TsAGI. 1970. V. 1, N 6. P. 15–21. (in Russian).
5. *Byrkin A.P.* Concerning one exact solution of the Navier – Stokes equations for compressible gas. PMM. 1969. V. 33, N 1. P. 152–157. (in Russian).
6. *Byrkin A.P. Mezhirov I.I.* Concerning some exact solution of viscous compressible gas flow in a channel. Fluid Dynamics. 1969. V. 1. P. 100–105. (in Russian).
7. *Brutyan M.A. Ibragimov U.G.* Self–similar turbulent flow of viscous gas in a wedge. Proceedings of MIPT. 2020. V. 12. № 3. P. 141–149. (in Russian).
8. *Brutyan M.A.* Self-similar solutions of Jeffrey-Gamel type for compressible viscous gas flow. Uch. Zapiski TsAGI. 2017. V. XLVIII, N 6. P. 13–22 (in Russian).
9. *Brutyan M.A. Krapivsky P.I.* Exact solutions of the stationary Navier – Stokes equations of a viscous heat-conducting gas for a flat jet from a linear source. PMM. 2018. V. 82, N 5. P. 644–656. (in Russian).

10. *Brutyam M.A. Ibragimov U.G.* Two-dimensional self-similar flow in a channel of viscous gas with transfer coefficients arbitrarily depending on temperature. PMM. 1969. V. 85, N 6. P. 755–764. (in Russian).
11. *Brutyam M.A. Ibragimov U.G.* Self-similar asymmetrical flow of viscous gas in a channel. PMM. 2022. V. 86, N 5. P. 741–752. (in Russian).
12. *Byrkin A.P.* Self-similar flows of a viscous gas in ducts with heat and mass transfer at the wall. Uch. Zapiski TsAGI. 1976. V. VII, N 2. P. 25–36. (in Russian).
13. *Byrkin A.P., Shchennikov V.V.* Considering conical-like flow of fluid and gas. Part II. Compressible gas. Uch. Zapiski TsAGI. 2002. V. XXXIII, N 3–4. P. 46–62. (in Russian).
14. *Krasnov Y.K.* Evolution of «Tornado». Nonlinear Waves. Structures and Bifurcations. Moscow : Nauka. 1987. P. 174–189. (in Russian).

Поступила в редакцию 23.08.2024

УДК 629.7.054.07

П. А. Илюшин, В. П. Наумченко, Д. Г. Пикунов

АО «ЦЭНКИ» – филиал «НИИ ПМ им. академика В. И. Кузнецова»

Анализ системы амортизации инерциального прибора как решение задачи многокритериальной оптимизации

В настоящей работе продолжается исследование системы амортизации и демпфирования инерциального прибора, включающего в свой состав вибрационно-струнные акселерометры. Рассматривается работа прибора как основного компонента бесплатформенной инерциальной навигационной системы космического аппарата в условиях вибровоздействий, превышающих штатные уровни. Для определения оптимального исполнения системы амортизации и демпфирования вводятся базовые критерии эффективности прибора и проводится их последующая скаляризация. Для решения задачи многокритериальной оптимизации численными методами осуществляется доработка имеющейся матмодели в скрипте на Python в части использования функций из загружаемых пакетов SciPy и Deap. В качестве итогов работы приводятся результаты итерационного моделирования и параметры оптимального исполнения системы амортизации и демпфирования прибора.

Ключевые слова: инерциальный прибор, бесплатформенная инерциальная измерительная система, система амортизации и демпфирования, многокритериальная оптимизация, скаляризация

P. A. Plushin, V. P. Naumchenko, D. G. Pikunov

JSC «TsENKI» – branch «NII PM named after academician V. I. Kuznetsov»

Inertial measurement unit amortization system analysis as a solution to the multi-criteria optimization problem

We continue the investigation of inertial measurement unit based on vibrational-string accelerometers amortization and dampening system in this paper. We consider the unit operation as the main part of spacecraft strapdown inertial navigation system under vibration above normal levels. Introduced unit effectivity criteria allow to determine the optimal sample of amortization and dampening system after their scalarization. We modified the model in Python in terms of using functions from downloadable packages SciPy and Deap to solve the problem of multi-criteria optimization by numerical methods. Results of iterative simulation and parameters of amortization and dampening system optimal sample are outcomes of the work.

Key words: inertial measurement unit, strapdown inertial measurement system, amortization and dampening system, multicriterion optimization, scalarization

1. Введение

В филиале АО «ЦЭНКИ» – «НИИ ПМ им. академика В. И. Кузнецова» (НИИ ПМ) проводится разработка бесплатформенного измерительного прибора космического назначения (прибор). Особенностью этого прибора является предъявление требований к повышенной точности измерений при его работе в составе космического аппарата (КА) [1], одновременно с требованиями к повышенной вибостойкости при движении ракеты-носителя, в том

числе в нештатных режимах ее полета [2]. Прибор является важной подсистемой бесплатформенной инерциальной навигационной системы (БИНС) [3], в которой определяются координаты объекта как результат решения навигационной задачи [4] по данным из акселерометрических (АК) и гироскопических (ГК) измерительных каналов.

Для выполнения целевой задачи в АК прибора применены прецизионные вибрационно-струнные акселерометры (ВСА) [5], а в ГК – волоконно-оптические гироскопы (ВОГ) [6] собственной разработки НИИ ПМ. ВСА обладают высокой чувствительностью и широким диапазоном измерения полезного линейного ускорения [7, 8] благодаря применению струны из определенного материала с сечением, вносящим минимальные искажения в показания АК. Но вместе с этим струна крайне чувствительна и к вредным перегрузкам. Для обеспечения виброзащиты ВСА реализована внутренняя система амортизации и демпфирования (САД) [9], которая обеспечивает защиту струны при штатных режимах полета [10], но при нештатных ее недостаточно, и, предположительно, возникают удары [11] подвижных элементов [12] о корпус ВСА с закономерным разрывом струны. Для исключения этого процесса требуется применение дополнительной САД [13, 14].

Поэтому первичной задачей при разработке прибора стало обеспечение вибростойкости ВСА [15, 16]. Но, поскольку прибор является основным компонентом БИНС КА, важным становится и обеспечение вибростойкости алгоритма определения координат в целом [17, 18]. Кроме того, на прибор накладываются и иные ограничения, связанные с технологическими возможностями его изготовления в НИИ ПМ и его конструктивными особенностями, существенными при монтаже в КА. Вследствие вышеизложенного целью настоящей работы является поиск наиболее эффективного исполнения САД с использованием методов многокритериальной оптимизации [19].

2. Описание модели

Принципиальная конструкция САД включает в себя блок чувствительных элементов (БЧЭ), на котором жестко установлены ВСА. БЧЭ связан с корпусом прибора через равножесткие пружины. Для гашения собственных колебаний БЧЭ применяются виброгасящие демпферы (ВД) и демпферы сухого трения. ВСА сам по себе также является колебательной системой. Рассматриваемая конструкция САД приведена ниже (рис. 1).

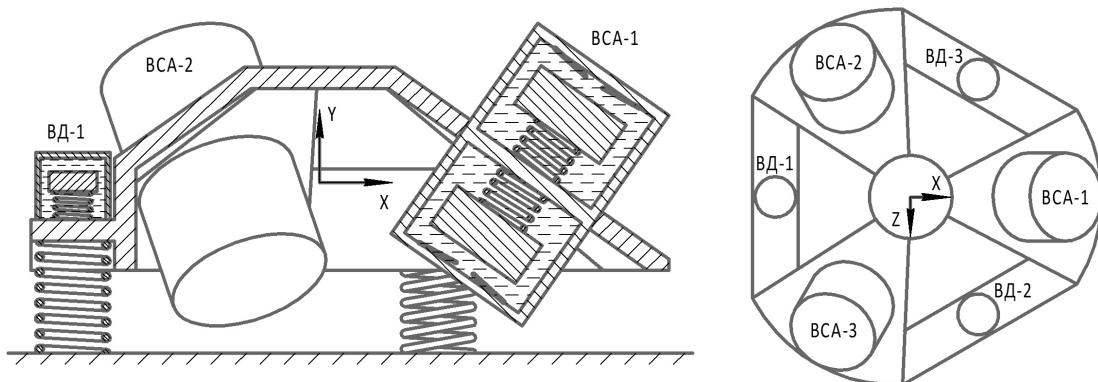


Рис. 1. Схема моделируемой конструкции САД

Такое исполнение с математической точки зрения имеет вид многомассовой колебательной системы. Движение подвижных элементов конструкции описывается следующей нелинейной системой дифференциальных уравнений [20]:

$$\left\{ \begin{array}{l}
\left[\begin{array}{l}
M_b \times \left(\ddot{\vec{R}}_b - \vec{g} \right) + \sum_{i=1}^3 \left(\vec{F}_{fi} \right) \\
\sum_{i=1}^3 \left((\beta_{bi} + \beta_{vi}) \times \left(\dot{\vec{R}}_{bi} - \dot{H}_b \times \vec{R}_{bi} - \dot{\vec{R}}_k \right) \right) + \\
\sum_{i=1}^3 \left(C_{bi} \times \left(\vec{R}_{bi} - (H_b - E) \times \vec{R}_{bi} - \vec{R}_k \right) \right) - \\
\sum_{i=1}^3 \left(H_{ai}^{-1} \times (C_{ai} + C_{ui}) \times H_{ai} \times \left(\vec{R}_{ai} - (H_b - E) \times \vec{R}_{ai} - \vec{R}_b \right) \right) - \\
\sum_{i=1}^3 \left(C_{di} \times \left(\vec{R}_{di} - (H_b - E) \times \vec{R}_{di} - \vec{R}_k \right) \right) = \vec{0}
\end{array} \right] \\
\left[\begin{array}{l}
M_{ai} \times H_{ai} \times \left(\ddot{\vec{R}}_{ai} - \vec{g} \right) + (\beta_{ai} + \beta_{ui}) \times H_{ai} \times \left(\dot{\vec{R}}_{ai} - \dot{H}_b \times \vec{R}_{ai} - \dot{\vec{R}}_b \right) + \\
(C_{ai} + C_{ui}) \times H_{ai} \times \left(\vec{R}_{ai} - (H_b - E) \times \vec{R}_{ai} - \vec{R}_b \right) = \vec{0}, i = 1, 2, 3
\end{array} \right] \\
\left[\begin{array}{l}
M_{di} \times \left(\ddot{\vec{R}}_{di} - \vec{g} \right) + \beta_{di} \times \left(\dot{\vec{R}}_{di} - \dot{H}_b \times \vec{R}_{di} - \dot{\vec{R}}_b \right) + \\
C_{di} \times \left(\vec{R}_{di} - (H_b - E) \times \vec{R}_{di} - \vec{R}_b \right) = \vec{0}, i = 1, 2, 3
\end{array} \right] \\
\left[\begin{array}{l}
J_b \times \ddot{\vec{\varepsilon}}_b + \sum_{i=1}^3 \left(\vec{R}_{fi} \times \vec{F}_{fi} \right) + \\
\sum_{i=1}^3 \left(\vec{R}_{bi} \times (\beta_{bi} + \beta_{vi}) \times \left(\dot{\vec{R}}_{bi} - \dot{H}_b \times \vec{R}_{bi} - \dot{\vec{R}}_{in} \right) \right) + \\
\sum_{i=1}^3 \left(\vec{R}_{bi} \times C_{bi} \times \left(\vec{R}_{bi} - (H_b - E) \times \vec{R}_{bi} - \vec{R}_k \right) \right) - \\
\sum_{i=1}^3 \left(\vec{R}_{ai} \times H_{ai}^{-1} \times (C_{ai} + C_{ui}) \times H_{ai} \times \left(\vec{R}_{ai} - (H_b - E) \times \vec{R}_{ai} - \vec{R}_b \right) \right) - \\
\sum_{i=1}^3 \left(\vec{R}_{di} \times C_{di} \times \left(\vec{R}_{di} - (H_b - E) \times \vec{R}_{di} - \vec{R}_{bi} \right) \right) = \vec{0}
\end{array} \right] , \\
\left[\begin{array}{l}
\left(J_b + M_b \times \vec{R}_{fj} \right) \times \ddot{\vec{\varepsilon}}_b + \sum_{i=1}^3 \left(\left(\vec{R}_{fi} - \vec{R}_{fj} \right) \times \vec{F}_{fi} \right) + \\
\sum_{i=1}^3 \left(\left(\vec{R}_{bi} - \vec{R}_{fj} \right) \times (\beta_{bi} + \beta_{vi}) \times \left(\dot{\vec{R}}_{bi} - \dot{H}_b \times \vec{R}_{bi} - \dot{\vec{R}}_k \right) \right) + \\
\sum_{i=1}^3 \left(\left(\vec{R}_{bi} - \vec{R}_{fj} \right) \times C_{bi} \times \left(\vec{R}_{bi} - (H_b - E) \times \vec{R}_{bi} - \vec{R}_k \right) \right) - \\
\sum_{i=1}^3 \left(\left(\vec{R}_{ai} - \vec{R}_{fj} \right) \times H_{ai}^{-1} \times (C_{ai} + C_{ui}) \times H_{ai} \times \left(\vec{R}_{ai} - (H_b - E) \times \vec{R}_{ai} - \vec{R}_b \right) \right) - \\
\sum_{i=1}^3 \left(\left(\vec{R}_{di} - \vec{R}_{fj} \right) \times C_{di} \times \left(\vec{R}_{di} - (H_b - E) \times \vec{R}_{di} - \vec{R}_{bi} \right) \right) = \vec{0}, j = 1..3
\end{array} \right]
\end{array} \right.$$

где k, b, a, u, d, v, f – элементы конструкции: корпус, БЧЭ, ВСА, контактные демпферы в ВСА, ВД, дополнительные вязкое и сухое трение соответственно; M, β, C, J – масса, вязкость, жесткость, момент инерции элемента; $\ddot{\varepsilon}, \dot{\varepsilon}, \varepsilon$ – угловые ускорение, скорость и поворот БЧЭ; H, \dot{H} – матрица поворота элемента и ее производная, определяемые из $\dot{\varepsilon}, \varepsilon$; E – единичная матрица; $\vec{R}, \dot{\vec{R}}, \vec{R}$ – линейные ускорение, скорость и перемещение элемента; i – номер элемента; j – номер элемента силы трения; F_f – сила трения; g – ускорение свободного падения.

Для поиска решений в несколько этапов [21–23] разработана нелинейная матмодель на Python, в которой система уравнений решается посредством дискретного интегрирова-

ния [24] с использованием метода «LSODA» в функции `scipy.integrate.solve_ivp`. В качестве входных данных модели применяются параметры, связанные с конструкционными характеристиками САД БЧЭ и ВД (масса, частота, добротность) и однозначно идентифицирующие экземпляр САД для последующего анализа.

В приборе, как компоненте БИНС КА требуется измерение абсолютного перемещения в неподвижной системе координат. Поэтому необходимо осуществить преобразование относительных линейных координат, измеряемых в АК, с применением абсолютных угловых координат в ГК [25]. Возможны несколько вариантов размещения АК и ГК: на БЧЭ, подвижном относительно корпуса прибора, или напрямую на самом корпусе. При использовании иных вибростойких акселерометров возможно их закрепление на корпусе прибора. Выбор места установки ГК связан в том числе с наличием его чувствительности к линейному ускорению. В настоящей работе принимается, что ВОГ как оптоэлектронное устройство [26] малочувствителен к линейному ускорению и его показания зависят только от угловых колебаний. В настоящей работе, как и в реальном приборе принимается, что ГК жестко связан с корпусом прибора, а АК расположен на БЧЭ (рис. 2).

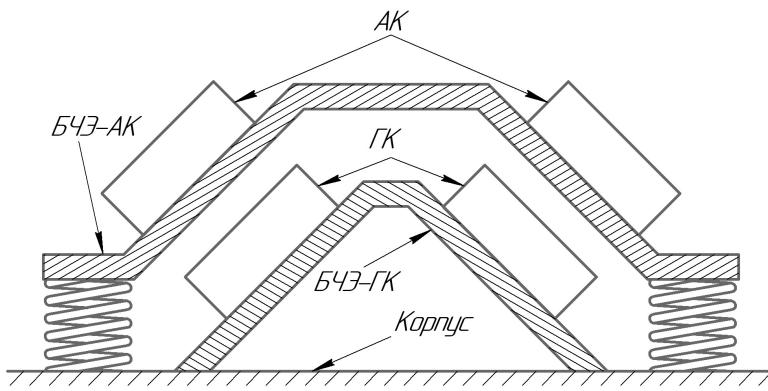


Рис. 2. Текущее исполнение САД АК и ГК БИНС

При подобной компоновке чувствительных элементов возникает противоречие при разработке САД – необходимо уменьшить как опасное относительное перемещение в ВСА, так и погрешность решения целевой задачи в БИНС. Исходя из особенностей эксплуатации прибора, в том числе требований к минимальным габаритным размерам при использовании в составе КА, важным является поиск исполнения САД с минимальным относительным перемещением БЧЭ и минимальной массой БЧЭ и ВД.

3. Решение задачи напрямую

Для поиска оптимального исполнения САД [27] были введены нормированные базовые критерии, описывающие погрешность измерения координат (M) – ошибку построения траектории, уязвимость (F) – запас перемещения до появления касания в ВСА, габариты (S) – массу и геометрические размеры БИНС, сложность изготовления (D) – то насколько в НИИ ПМ сложно изготовить прибор с заданными характеристиками:

$$F = \max_{i=1..3} \sqrt{\left(\frac{r_x^{ai}}{3 \cdot x_{max}^a}\right)^2 + \left(\frac{r_y^{ai}}{3 \cdot y_{max}^a}\right)^2 + \left(\frac{r_z^{ai}}{3 \cdot z_{max}^a}\right)^2};$$

$$M = \sqrt{\frac{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2}{3 \cdot 9}} - 4;$$

$$S = \frac{M_b + 3 \cdot M_d - 0,6}{2 \cdot 3,3} + \sqrt{\frac{r_x^{b2} + r_y^{b2} + r_z^{b2}}{4 \cdot 3 \cdot r_{max}^b}};$$

$$D = \frac{33 \cdot \beta_b - 1}{9 \cdot \beta_b} + \frac{3 \cdot \beta_d}{10}.$$

где r_x^{ai} , r_y^{ai} , r_z^{ai} – проекции перемещения подвижной массы i -го ВСА относительно его корпуса на его характерные оси X , Y , Z соответственно; x_{max}^a , y_{max}^a , z_{max}^a – предельные перемещения по соответствующим осям ВСА, при которых происходят его касания о корпус; r_x^b , r_y^b , r_z^b – проекции перемещения подвижной массы БЧЭ относительно корпуса прибора на его характерные оси X , Y , Z соответственно; r_{max}^b – предельное перемещение вдоль любой оси БЧЭ, при котором происходит касание о корпус прибора; σ_x , σ_y , σ_z – СКО при измерении соответствующих координат траектории движения КА.

Наилучшим значением любого приведённого критерия является 0, а наихудшим – 1. Таким образом, поиск наилучшего исполнения САД с математической точки зрения является задачей минимизации. За первичную область поиска был принят технически допустимый диапазон отклонений конструктивных характеристик САД от номинальных значений, реализованных в реальном приборе. Было проведено итерационное моделирование с изменением массы, добротности САД и частоты САД БЧЭ и ВД. Масса и добротность входят напрямую в принятые критерии, а частота является косвенным фактором.

В итоге моделирования получены данные для 2300 экземпляров САД. Из них 1730 запусков оказались успешными, т.е. в них не было касания ни в БЧЭ, ни в ВСА. В первую очередь была предпринята попытка решения многокритериальной задачи оптимизации напрямую, при помощи поиска неулучшаемых исполнений методом Парето. В результате моделирования было определено, что единого Парето-фронта для всех критериев не существует, и поэтому невозможно обнаружить гиперплоскость неулучшаемых исполнений. При исключении одного или нескольких критериев можно будет добиться создания области оптимальных решений, но предпочтительно не терять важную информацию о различных исполнениях САД (рис. 3).

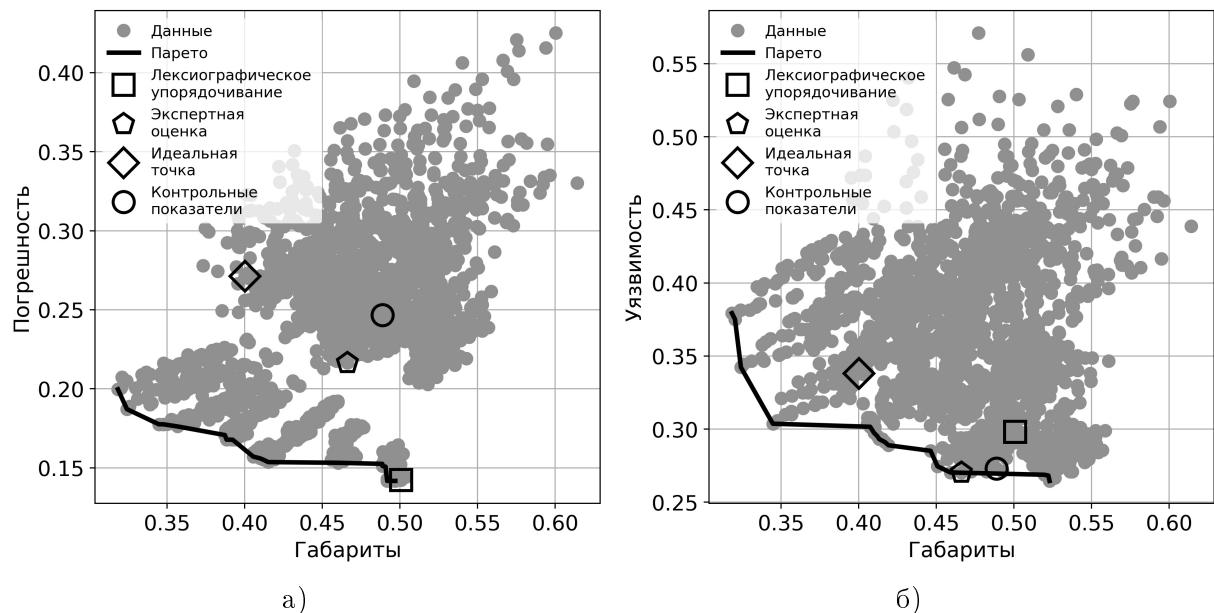


Рис. 3. Примеры Парето-фронтов при исследовании взаимосвязи двух критериев (а – Габариты и Погрешность, б – Габариты и Уязвимость)

Дополнительно для рассмотренных исполнений был проведен анализ погрешности при различном расположении АК и ГК. Было обнаружено, что различия между вариантами несущественны и для дальнейшего исследования будет приниматься текущий вариант САД, состоящий из ВОГ, размещенного на корпусе прибора, и ВСА размещенного на БЧЭ. Для наглядности результаты были отсортированы по увеличению погрешности при расположении ГК и АК на БЧЭ, с сохранением их относительного расположения в каждой точке. Значения по оси X вследствие их неинформативности не приводятся (рис. 4).

4. Сведение задачи к однокритериальной

Поскольку напрямую не удалось обнаружить подходящее исполнение, были введены скалярные критерии оценки эффективности, учитывающие величины базовых критериев. Для удобства последующих работ вначале был введен барьер (T), определяемый прошлым модельным временем от старта замера, при котором произошло касание в БЧЭ или в ВСА:

$$T = 1000 \cdot (1 - t_{\text{уд}}/t_{\text{зам}}).$$

где $t_{\text{уд}}$ – модельное время от старта замера при котором произошло первое касание в БЧЭ или в ВСА; $t_{\text{зам}}$ – планируемая модельная продолжительность замера.

Были предложены четыре разноплановых критерия, основанных на способах скаляризации многокритериальной задачи оптимизации. Причем с целью дальнейшей автоматизации процесса вычисления для всех критериев определяется максимальное значение между вычисленным критерием и барьером. Критерий, вычисленный по методу идеальной точки (I) подразумевает определение модуля вектора, построенного из желаемой точки к точке пространства критериев, описывающей конкретное желаемое исполнение. Среди всего массива векторов находится наименьший, в рассматриваемом случае это точка ближе всего расположенная к началу координат, в которой все базовые критерии равны 0:

$$I = \max \left(\left[0,5 \cdot \sqrt{M^2 + F^2 + S^2 + D^2} \right], T \right).$$

Критерий, вычисленный по методу контрольных показателей (K) основан на поиске наиболее удаленной от критического значения точки, в рассматриваемой задаче от точки, для которой все базовые критерии равны 1:

$$K = \max \left(1 - \left[0,5 \cdot \sqrt{(1 - M)^2 + (1 - F)^2 + (1 - S)^2 + (1 - D)^2} \right], T \right).$$

Среди экспертов был проведен опрос о приоритетности расположения базовых критериев по их мнению. В результате был введен критерий по методу экспертной оценки (E) с весовыми коэффициентами, определяемыми исходя из нормированных результатов опроса экспертов:

$$E = \max ([0,375 \cdot M + 0,275 \cdot F + 0,25 \cdot S + 0,1 \cdot D], T).$$

После сортировки весовых коэффициентов из метода экспертной оценки был введен критерий по методу лексикографического упорядочивания (L):

$$L = \max ([0,9 \cdot M + 0,09 \cdot F + 0,009 \cdot S + 0,001 \cdot D], T).$$

По имеющемуся набору данных с результатами моделирования 2300 исполнений были вычислены скалярные критерии. Найдено наименьшее значение среди результатов каждого критерия и построен сводный лепестковый график распределения базовых критериев (рис. 5).

Характерно, что для каждого скалярного критерия в разрезе базовых критериев получилось свое уникальное наилучшее исполнение, а не единственное для всех. Для обхода этой проблемы можно выбрать, к примеру, 10 лучших исполнений каждого скалярного критерия и найти пересечение четырех полученных массивов для поиска исполнения, удовлетворяющего всем критериям. На практике этот способ не сработал из-за того, что скалярный критерий построенный по методу лексикографического упорядочивания практически игнорирует базовый критерий сложности. Если исключить его из рассмотрения, то среди наилучших 10 исполнений по каждому оставшемуся скалярному критерию пересечение присутствует в экземпляре:

$$M_b = 0,9 \text{ кг}; f_b = 29 \text{ Гц}; Q_b = 33; M_d = 0,2 \text{ кг}; f_d = 23 \text{ Гц}; Q_d = 3.$$

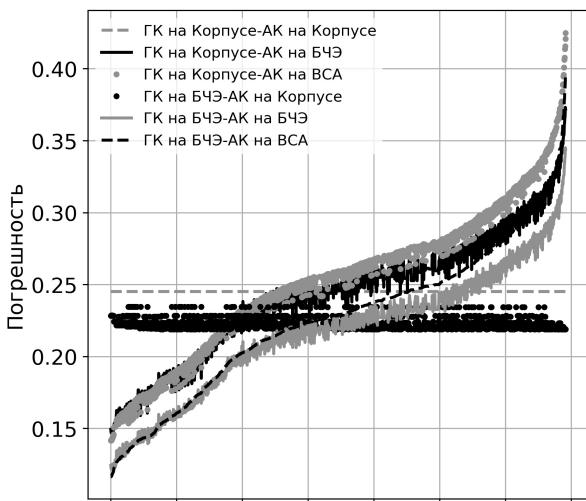


Рис. 4. Влияние расположения ГК и АК в приборе на погрешность решения задачи навигации

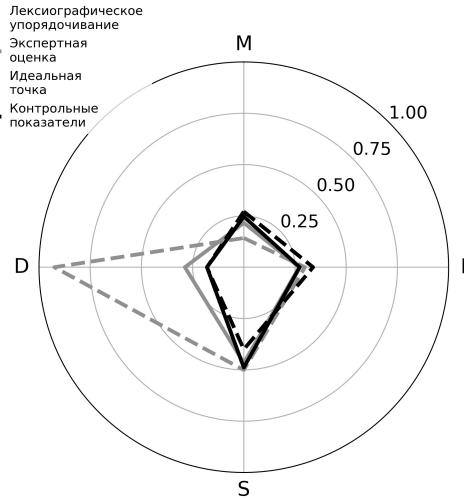


Рис. 5. Наилучший результат, полученный при использовании разных скалярных критериев оптимизации

5. Решение задачи численными методами

Для дальнейших работ было решено использовать метод контрольных показателей, так как он по своей сути обеспечивает наибольший запас надежности при принятии решения об исполнении САД. Для того чтобы автоматизировать в Python [28] задачу определения оптимального решения и перейти к нахождению глобального минимума за пределами исследованной ранее области, применяются стохастические и детерминированные методы поиска экстремума функции [29]. Для удобства вычислений в скрипт была введена функция преобразования целых чисел из диапазона от 0 до 100 во входные параметры модели. Для поиска решения детерминированным методом использовался пакет scipy. Решение искалось прямым методом сопряженных направлений Пауэлла при помощи функции `scipy.optimize.minimize`. При использовании других доступных в функции прямых методов («Nelder-Mead», «CG», «COBYLA», «SLSQP») происходило завершение вычислений с признаком успеха после небольшого числа итераций при наличии касаний в ВСА и БЧЭ, т.е. функция не преодолевала барьер. Следующим примененным методом стал квазиньютоновский метод «BFGS», подразумевающий вычисление градиента функции. Для учета дискретности изменения параметров САД в нем было введено ограничение на выбор шага вычисления градиента только областью целых чисел. Вероятно, из-за этого при его работе наблюдается неустойчивый процесс, проявляющийся как колебания вокруг точки локального минимума (рис. 6).

Для поиска решения стохастическим методом также использовался пакет `scipy`. Решение искалось при помощи распространенного генетического алгоритма, реализованного в функции `scipy.optimize.differential_evolution`. Изменение величины критерия с увеличением номера итерации приведено ниже. Дополнительно использовался и другой способ решения задачи при помощи генетического алгоритма – применялись пакет `deap` и функция `deap.algorithms.eaSimple`. Второй вариант позволяет настраивать условия поиска при решении задачи более подробно. Для обнаружения эффективных исполнений САД в большем диапазоне параметров при использовании `deap` решение искалось с меньшими вероятностями мутации (0,3) и скрещивания (0,8), чем при использовании `scipy` – 0,7 и 0,9 соответственно (рис. 7).

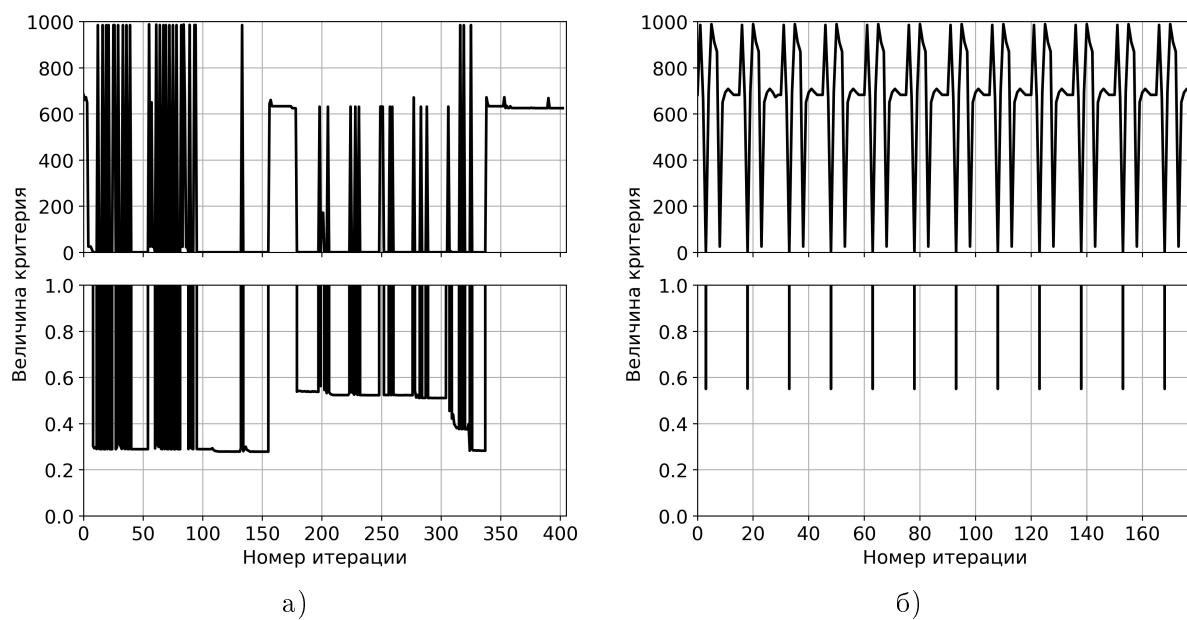


Рис. 6. Изменение величины скалярного критерия с увеличением номера итерации при использовании `scipy.optimize.minimize` (а – «Powell», б – «BFGS»)

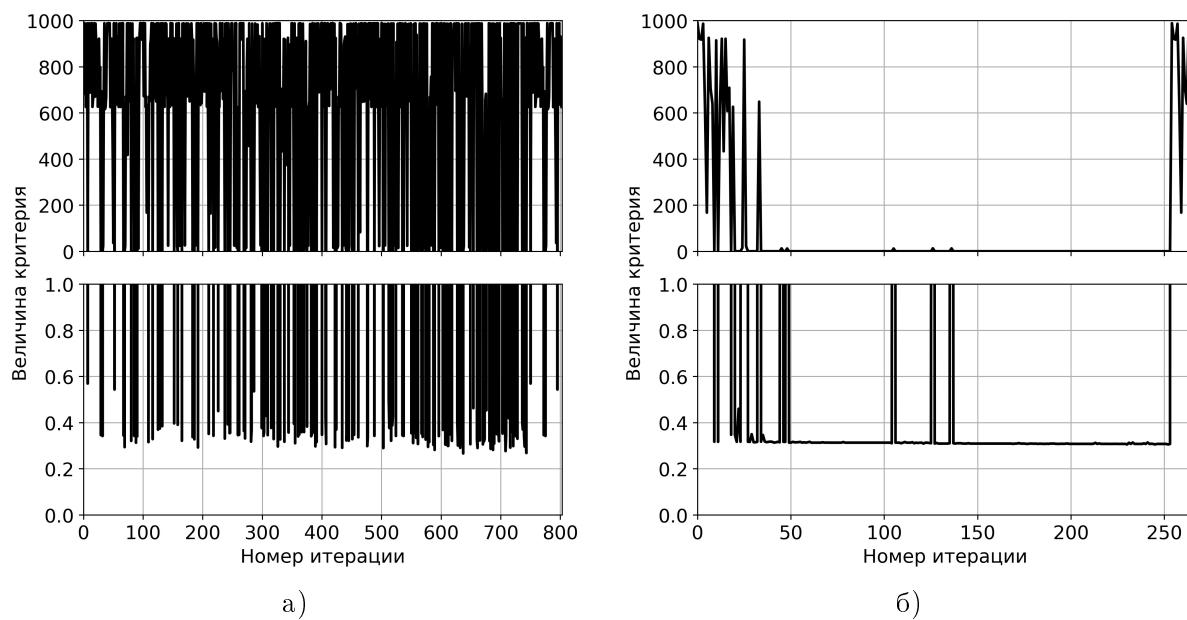


Рис. 7. Изменение величины скалярного критерия с увеличением номера итерации (а – при использовании `scipy.optimize.differential_evolution`, б – при использовании `deap.algorithms.eaSimple`)

После завершения итерационного моделирования получен набор исполнений для каждого метода, среди которых определено одно наилучшее по критерию контрольных показателей. Параметры наилучшего исполнения были использованы как начальные значения для запуска повторного цикла моделирования. Наилучшие по итогам цикла запусков результаты приведены ниже (табл. 1).

Таким образом оптимальным решением по критерию контрольных показателей, т.е. с точки зрения его удаленности от критической точки, является следующее исполнение САД:

$$M_b = 0,8 \text{ кг}; f_b = 26,3 \text{ Гц}; Q_b = 35,6; M_d = 0,07 \text{ кг}; f_d = 27,2 \text{ Гц}; Q_d = 8,2.$$

Таблица 1

Результат работы методов оптимизации

Параметр	Перебор	Powell	BFGS	Генетический алгоритм	
				Deap	SciPy
M_b , кг	0,9	1,6	1,5	1,6	0,8
f_b , Гц	29	25,4	25,3	25,4	26,3
Q_b , б/п	33	37	39,4	37	35,6
M_d , кг	0,2	0,2	0,18	0,2	0,07
f_d , Гц	23	29,6	29,3	29,6	27,2
Q_d , б/п	5	15,2	9,9	9,1	8,2
S , б/п	0,489	0,616	0,588	0,614	0,426
F , б/п	0,273	0,225	0,214	0,224	0,202
M , б/п	0,247	0,183	0,246	0,248	0,251
D , б/п	0,180	0,052	0,080	0,091	0,105
L , б/п	0,251	0,191	0,246	0,249	0,248
E , б/п	0,308	0,290	0,306	0,317	0,267
I , б/п	0,319	0,341	0,339	0,353	0,272
C , б/п	0,288	0,239	0,258	0,268	0,237

6. Заключение

В результате проведенных работ создана комплексная математическая модель, обеспечивающая решение следующих вопросов:

- 1) задание входного воздействия в форме любого типа полезного или вредного сигнала из приведенных в техническом задании прибора;
- 2) исследование движения в САД прибора при выбранном входном воздействии и контроль превышения допустимых перемещений в БЧЭ и ВСА;
- 3) вычисление координат движущегося объекта по законам, закладываемым в типовой алгоритм навигации БИНС;
- 4) введение базовых и скалярных критериев оценки эффективности исполнения САД;
- 5) итерационное моделирование с варьированием параметров САД для обнаружения наилучшего исполнения методами многокритериальной оптимизации.

Можно верифицировать матмодель для нахождения оптимальной САД более приближенной к реальности. Однако вследствие технологических и конструктивных ограничений при изготовлении компонентов САД эта работа будет излишней и достаточно применить полученные результаты моделирования для качественной оценки путей улучшения изготовленной в НИИ ПМ САД.

Более перспективным видится применение разработанного математического аппарата для решения других задач оптимизации, более явных и с достаточно изученной математической моделью. Например, для подбора компонентов аналоговых электрических цепей и коэффициентов в цифровых вычислителях для минимизации шумов в выходной информации прибора.

Список литературы

1. Козлов Д.И., Аншаков Г.П., Мостовой Я.А., Сологуб А.В. Управление космическими аппаратами зондирования Земли: Компьютерные технологии. Москва : Машиностроение, 1998. С. 366.

2. *Беляев А.В.* Пять доступных лекций по наведению ракет. Изд. 2, испр. и доп. Москва : Едиториал УРСС, 2018. С. 88.
3. *Сапожников И.Н., Неизвестных Ю.И., Духанин Н.Н. [и др.]*. Приоритет – точность. Москва : Рестарт, 2006. С. 192.
4. *Чуб В.Ф.* Основы инерциальной навигации (Гиперкомплексные и теоретикогрупповые методы в теории инерциальной навигации). Москва : Ленанд, 2014. С. 200.
5. *Харьков И.А., Шустров А.Д., Селиванова Л.М.* Трехкомпонентный дифференциальный вибрационно-струнный акселерометр // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2003 № 4. С. 120–125;
6. *Курбатов А.М., Курбатов Р.А., Горячкун А.М.* Повышение точности волоконно-оптического гироскопа за счет подавления паразитных эффектов в интегральнооптических фазовых модуляторах // Гироскопия и навигация. 2019. Т. 27, № 2. С. 52–69.
7. *Наумченко В.П., Илюшин П.А., Пикунов Д.Г., Соловьев А.В.* Обработка показаний инерциальных приборов на унифицированном программно-математическом комплексе // Вопросы электромеханики. Труды ВНИИЭМ. 2023. Т. 195, № 4. С. 8–16.
8. *Илюшин П.А., Наумченко В.П., Соловьев А.В.* Анализ шумовых характеристик бесплатформенного инерциального блока космического назначения // Тезисы докладов XXII Научно-технической конференции, посвященной 60-летию полета Ю.А. Гагарина, 75-летию ракетно-космической отрасли и основанию ПАО «РКК «Энергия». Сборник тезисов докладов. 2021. С. 261–263.
9. *Нашиф А., Джоунс Д., Хендерсон Дж.* Демпфирование колебаний: пер. с англ. Москва : Мир, 1988. С. 448.
10. *Илюшин П.А., Наумченко В.П., Пикунов Д.Г.* Анализ качества работы инерциальных приборов при воздействии внешних вибрационных возмущений // Новые материалы и технологии в ракетно-космической авиационной и других высокотехнологичных отраслях промышленности. Сборник материалов 17-й молодежной конференции. ООО «12 апреля». 2021. С. 72.
11. *Иванов А.П.* Динамика систем с механическими соударениями. Москва : Международная программа образования, 1997. С. 336.
12. *Вульфсон И.И.* Краткий курс теории механических колебаний. Москва : ВНТР, 2017. С. 241.
13. *Росин Э.И., Малышев В.В.* Пружинный амортизатор. СССР. Пат. SU 507723 A1. Заявка: 2092904, 1975.01.06. Опубликовано: 1976.03.25.
14. *Росин Э.И., Богданова В.Д., Рыбкин В.К.* Пространственный виброгаситель. СССР. Пат. SU 557219 A. Заявка: 2305820, 1975.12.30. Опубликовано: 1977.05.05.
15. *Топильская С.В., Бородулин Д.С., Корнюхин А.В.* Обеспечение стойкости к механическим воздействиям малогабаритного гироскопического измерителя вектора угловой скорости. Космическая техника и технологии. 2018. № 3(22). С. 61–68.
16. *Подчезерцев В.П., Топильская С.В.* К обоснованию выбора параметров амортизации инерциальной системы ориентации. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2021. № 3(136). С. 113–128.
17. *Сукачина М.Л., Гайнов С.И.* Обзор методов и устройств виброзащиты приборных платформ // Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева. 2013. С. 311–319.
18. *Гаврилин Б.Н., Галаев В.В., Голубев К.А. [и др.]*. Амортизованный блок датчиков первичной информации бесп платформенных инерциальных навигационных систем. Пат. RU 121364 U1. Заявка: 2011151326/28, 2011.12.16. Опубликовано: 2012.10.20.
19. *Овсянников Г.Н.* Факторный анализ в доступном изложении: Изучение многопараметрических систем и процессов. Москва : ЛЕНАНД, 2022. С. 176.

20. Ким Д.П. Теория автоматического управления: учебник и практикум для вузов. Москва : Юрайт, 2022. С. 276.
21. Максимов С.А., Наумченко В.П., Илюшин П.А., Пикунов Д.Г., Соловьев А.В. Анализ системы амортизации и демпфирования бесплатформенного инерциального измерительного прибора // Труды МАИ. 2023. № 129. URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=173032> (дата обращения 31.03.2024).
22. Илюшин П.А., Наумченко В.П., Пикунов Д.Г., Соловьев А.В. Исследование обеспечения стойкости к внешним вибрационным возмущениям бесплатформенного инерциального измерительного прибора при помощи нелинейных элементов системы амортизации // Молодежь. Техника. Космос: труды четырнадцатой общероссийской молодежной научно-технической конференции. 2022. Т. 2. С. 29–31.
23. Илюшин П.А., Наумченко В.П., Пикунов Д.Г., Соловьев А.В. Моделирование работы нелинейной системы амортизации и демпфирования бесплатформенного инерциального измерительного прибора // Вестник НИЯУ МИФИ. 2022. № 11(6). С. 403–412.
24. Медведева Н.В., Скряга Е.С. Сравнение численных методов решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений // Международный студенческий научный вестник. 2018. № 2. URL: <https://eduherald.ru/ru/article/view?id=18343> (дата обращения: 12.04.2023).
25. Арнольд В.И. Геометрия кватернионов. Москва : МЦНМО, 2017, С. 144.
26. Курбатов Л.Н. Оптоэлектроника видимого и инфракрасного диапазонов спектра. Москва : Физматкнига, 2013. С. 404.
27. Карпенко А.П. Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учебное пособие. Москва : МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. С. 446.
28. Хватов А.А., Никитин Н.О., Калюжная А.В. Современные методы оптимизации с примерами на Python. Санкт-Петербург : Университет ИТМО, 2023, С. 48.
29. Агibalov О.И.. Оптимизация многомерных задач на основе комбинирования детерминированных и стохастических алгоритмов // Современные наукоемкие технологии. 2017. № 9. С. 7–11.

References

1. Kozlov D.I., Anshakov G.P., Mostovoy Ya.A., Sologub A.V. Control of Earth-Sensing Spacecraft: Computer technologies. Moscow : Mashinostroenie, 1998. P. 366. (in Russian).
2. Belyav A. V. Five available lectures about missile guidance Edit. 2, rev. and upd. Moscow : Editorial URSS, 2018. P. 88. (in Russian).
3. Sapozhnikov I.N., Neizvestnih Yu.I., Duhanin N.N., et al., Priority precision. Moscow : Restart, 2006. P. 192. (in Russian).
4. Tchub V.F. Inertial navigations basics. (Hypercomplex and group - theoretical methods in the inertial navigation theory) Moscow : Lenand, 2014, P. 200. (in Russian).
5. Harkov I.A., Shustrov A.D., Selivanova L.M. Three-component differential vibrational-string accelerometer. Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Instrument Engineering. 2003. N 4. P. 120–125. (in Russian).
6. Kurbatov A.M., Kurbatov R.A., Goryackin A.M. Fiber-Optic Gyroscope Accuracy Improvement by Suppressing the Parasitic Effects in Integrated Optic Phase-Shift Modulators. Gyroscopy and navigation. 2019. V. 27, N 2(105). P. 52–69. (in Russian).
7. Naumchenko V.P., Ilushin P.A., Pikunov D.G., Solovyov A.V. Processing of inertial devices readings on unified software and mathematical complex. Electromechanical matters. VNIIEM studies. 2023 V. 195, N 4. P. 8–16. (in Russian).

8. *Ilushin P.A., Naumchenko V.P., Solovyov A.V.* Strapdown inertial unit for spacecraft noise characteristics analysis. Abstracts of the reports of the XXII Scientific and Technical Conference devoted to the 60th anniversary of Yu.A. Gagrin's flight, 75th anniversary of the rocket and space industry and the foundation of PJSC RSC Energy. Collection of reports. 2021. P. 261–263. (in Russian).
9. *Nashif A., Jones D., Henderson J.* Vibrational dampening: translated from English. Moscow : Mir, 1988. P. 448. (in Russian).
10. *Ilushin P.A., Naumchenko V.P., Pikunov D.G.* Analysis of the inertial units performance under the external vibration disturbances influence. New materials and technologies in space-rocket aviation and other high-tech industries. Collection of materials of the 17th Youth Conference. LLC April 12. 2021. P. 72. (in Russian).
11. *Ivanov A.P.* Systems dynamic with mechanical impacts. Moscow : International education programm, 1997. P. 336. (in Russian).
12. *Vulfson I.I.* Short Course in Mechanical Oscillation Theory. Moscow : VNTR, 2017. P. 241. (in Russian).
13. *Rosin E.I., Malyshev V.V.* Spring amortizator. USSR. Pat. SU 507723 A1. Request: 2092904, 1975.01.06. Published: 1976.03.25. (in Russian).
14. *Rosin E.I., Bogdanova V.D., Rybkin V.K.* Dimensional vibration dampener. USSR. Pat. SU 557219 A. Request: 2305820, 1975.12.30. Published: 1977.05.05. (in Russian).
15. *Topilskaya S.V., Borodulin D.S., Kornyukhin A.V.* Making a compact gyroscopic angular rate vector meter resistant to mechanical forces. Space engineering and technology. 2018. N 3(22). P. 61–68. (in Russian).
16. *Podchezertcev V.P., Topilskaya S.V.* Choosing damping parameters for the inertial orientation system. Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Instrument Engineering. 2021. N 3(136). P. 113128. (in Russian).
17. *Sukonkina M.L., Gainov S.I.* Overview of the methods and devices of devices board vibroprotection. NSTU n.a. R.E. Alekseev studies. 2013. P. 311–319. (in Russian).
18. *Gavrilin B.N., Galavkin V.V., Golubev K.A. and others* Dampened primary information sensors unit of strapdown inertial navigation systems. Pat. RU 121364 U1. Request: 2011151326/28, 2011.12.16. Published: 2012.10.20. (in Russian).
19. *Ovsyannikov G.N.* Quotient analysis in accessible terms: Study of multi-parameter systems and processes. Moscow : LENAND, 2022. P. 176. (in Russian).
20. *Kim D.P.* Automatic control theory: textbook and workshop for universities. Moscow : Urait, 2022. P. 276. (in Russian).
21. *Maksimov S.A., Naumchenko V.P., Ilyushin P.A., Pikunov D.G., Solovyov A.V.* Strapdown inertial measurement unit shock absorption and damping linear system analysis. Trudy MAI. 2023. N 129. URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=173032>, (accessed 31.03.2024). (in Russian).
22. *Ilyushin P.A., Naumchenko V.P., Pikunov D.G., Solovyov A.V.* Research to ensure resistance to external vibration disturbances of the strapdown inertial measurement unit with nonlinear dampening system elements. Youth. Engineering. Space: Writings of the fourteenth All-Russian Youth Scientific and Technical Conference. 2022. V. 2. P. 29–31. (in Russian).
23. *Ilyushin P.A., Naumchenko V.P., Pikunov D.G., Solovyov A.V.* Modeling of the nonlinear system of damping and damping of a strapless inertial measuring device. Herald of the NRNU MEPhI. 2022. N 11(6). P. 403–412. (in Russian).

24. *Medvedeva N.V., Skryaga E.S* Comparison of numerical methods for solving the Cauchy problem for ordinary differential equations. International student science bulletin. 2018. N 2. URL: <https://eduherald.ru/ru/article/view?id=18343> (accessed: 12.04.2023). (in Russian).
25. *Arnold V.I.* Quaternions geometry. Moscow : MCCME, 2017. P. 144. (in Russian).
26. *Kurbatov L.N.* Visible and infrared spectrum optoelectronics. Moscow : Fizmatkniga, 2013. P. 404. (in Russian).
27. *Karpenko A.P.* Modern search engine optimization algorithms. Algorithms inspired by nature: manual. Moscow : MSTU n.a. N.E. Bauman, 2014. P. 446. (in Russian).
28. *Hvatov A.A., Nikitin N.O., Kalyuzhnaya A.V.* Modern optimization methods with examples on Python. Sankt-Peterburg : ITMO University, 2023. P. 48. (in Russian).
29. *Agibalov O.I.* Combination of deterministic and stochastic algorithms for multidimensional tasks optimization. Modern high technologies. 2017. N 9. P. 7–11. (in Russian).

Поступила в редакцию 29.05.2024

УДК 533.9

P. A. Сартан

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

***Ab initio* исследование разогретого плотного аргона**

Исследуется разогретый плотной аргон *ab initio* методами в рамках теории функционала плотности. Построено уравнение состояния в области температур до 25 000 К и плотностей до 12 г/см³. Рассчитаны значения электрической проводимости. Качественно результаты схожи с предсказаниями аналитических моделей: с ростом давления (температуры) аргон плавно переходит в металлическое состояние. Дополнительно произведена оценка параметра неидеальности плазмы. Скачков плотности и резкого роста электропроводности, характерных плазменному фазовому переходу, не обнаружено.

Ключевые слова: квантовая молекулярная динамика, теория функционала плотности, разогретый плотный аргон, плазма, плазменный фазовый переход

R. A. Sartan

Moscow Institute of Physics and Technology
Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences

***Ab initio* study of warm dense argon**

Warm dense argon is studied by *ab initio* methods in the framework of density functional theory. The equation of state in the region of temperatures up to 25000 K and densities up to 12 g/cm³ is calculated. The electrical conductivity is estimated. Qualitatively, the results are similar to the predictions of analytical models: argon smoothly transits to a metal-like state with the increase of pressure (or temperature). Additionally, the non-ideality parameter of the plasma is estimated. No density jumps or sharp increases in the electrical conductivity characteristic of the plasma phase transition are found.

Key words: quantum molecular dynamics, density functional theory, warm dense argon, plasma, plasma phase transition.

1. Введение

Исследование разогретого плотного вещества представляет большой интерес в физике конденсированного состояния и физике плазмы [1]. Разогретое плотное вещество находится в следующей области параметров: температура $10^3 - 10^6$ К, плотность $10^{-1} - 10^2$ г/см³, и давление $10^1 - 10^4$ ГПа. При таких условиях плазма является неидеальной с сильным межчастичным взаимодействием. В природе подобные состояния реализуются в первую очередь в астрофизических объектах, таких как белые и коричневые карлики и газовые гиганты; в лабораторных условиях — с помощью ударных волн, Z -машин, в алмазных наковальнях и разнообразных лазерных установках (см. обзор [2]). Часто исследуются элементы с полностью заполненной электронной оболочкой: водород (дейтерий) [3–5] или благородные газы: гелий [6, 7], неон [7], аргон [8–11], криpton [12], ксенон [7, 10, 13]. В экспериментах обнаруживается высокая проводимость газов (флюидов) при больших давлениях и плотностях,

но и при температурах, заметно ниже энергии ионизации. Возникает вопрос о природе фазового перехода диэлектрик-проводник, или, по-другому, о металлизации.

В случае водорода (дейтерия) фазовый переход с резким ростом проводимости можно рассматривать как близкий к плазменному фазовому переходу [14]. Важная особенность плазменного фазового перехода – то, что он первого рода и имеет скачок плотности. Впервые скачок плотности был получен в разогретом плотном водороде в работе [4], а в работах [15, 16] обнаружена скрытая теплота перехода (см. обзор [17]). Возможность подобного перехода также отмечена и для благородных газов [18]. Однако для них в экспериментах скачок плотности внутри жидкой фазы обнаружен не был, хотя наблюдался рост проводимости на несколько порядков в диапазоне плотностей единиц г/см³.

Методы молекулярной динамики (МД) повторяют результаты экспериментов как минимум на качественном уровне. Из-за необходимости учета квантовых эффектов расчеты проводят в рамках теории функционала плотности (ТФП). Для водорода был воспроизведен скачок плотности [5, 19, 20]; для увеличения точности в [5] использовались интегралы по траекториям. В работе [21] был воспроизведен рост проводимости для гелия, но признаков фазового перехода первого рода обнаружено не было. Вычисления для неона [22] указывают на ионизацию первой и второй электронных оболочек. Моделирование криптона также указывает на переход в проводящее состояние [23].

В работе [11] была получена ударная адиабата аргона на *Z*-машине и достаточно точно воспроизведена методом квантовой МД. Расчеты проводимости с помощью МД, как и её измерения в эксперименте, в [11] не проводились. В рамках аналитических моделей аргон рассчитывался с помощью химической модели «САХА» в [18] и с использованием модифицированной модели «3+» в [24]; ни в одной из моделей плазменный фазовый переход явно обнаружен не был.

В этой работе методами квантовой молекулярной динамики исследуется разогретый плотный аргон на предмет наличия предполагаемого плазменного фазового перехода. Рассчитано уравнение состояния в области температур $T = 4000 - 25000$ К и плотностей $\rho = 1 - 20$ г/см³. Рассчитаны значения электрической проводимости вдоль полученных изотерм, результат сравнивается с существующими аналитическими моделями. Дополнительно произведена оценка параметра неидеальности плазмы.

2. Методы

Расчеты выполнены в рамках метода квантовой молекулярной динамики с использованием теории функционала плотности. По координатам ионов составляются уравнения Кона – Шема. Решением этих уравнений являются волновые функции ψ и их собственные значения E . По теореме Гельмана – Фейнмана из волновых функций вычисляются силы, действующие на ионы. А из сил вычисляются ускорения атомов по классическим уравнениям Ньютона. По скоростям и ускорениям определяются их новые координаты.

В расчетной ячейке с периодическими граничными условиями содержится 64 атома. Шаг по времени составляет 0.5 фс, длина всей молекулярно-динамической траектории составляет 8 – 45 пс. Стартовая конфигурация – простая кубическая. В качестве обменно-корреляционного функционала был выбран PBE (Perdew – Burke – Ernzerhof [25]), поскольку в работе [11] с помощью него была воспроизведена ударная адиабата. Для расчета использовался код Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) версии 5.4.4 [26, 27]. В качестве k -сетки использовалась всего одна гамма точка, поскольку результаты расчетов как самой динамики, так и электропроводности не изменялись при увеличении k -сетки. Была проверена сходимость вычисляемого давления от числа атомов: при их увеличении в два раза (и увеличении ячейки для сохранения плотности) давление не менялось. Аналогично была проверена зависимость расчета электропроводности от размера плоско-волнового базиса, она достигается при 800 эВ.

Электропроводность $\sigma(\omega)$ вычислялась как

$$\sigma(\omega) = \varepsilon_0 \omega \varepsilon^{(2)}(\omega), \quad (1)$$

где ε_0 — диэлектрическая постоянная, $\varepsilon^{(2)}(\omega)$ — мнимая часть диэлектрической функции $\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i\varepsilon^{(2)}$. Напрямую из формулы (1) нельзя определить значение статической проводимости σ_0 , поскольку наличие частоты ω в сомножителях обращает её в ноль. Для оценки σ_0 зависимость $\sigma(\omega)$, полученная по формуле (1), аппроксимировалась формулой Друде $\sigma(\omega) = \sigma_0 / (1 + (\omega t)^2)$ в диапазоне малых ω параметром t .

Мнимая часть диэлектрической функции $\varepsilon^{(2)}(\omega)$ вычислялась по формуле Кубо — Гринвуда [28]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_T^{(2)}(\omega, \mathbf{R}_I) = & \frac{4\pi^2 e^2 \hbar^2}{3m^2 \omega^2 \Omega} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow \infty} \sum_{n, n', \alpha, \mathbf{k}} 2w_{\mathbf{k}} [f(T, E_{n, \mathbf{k}}) - f(T, E_{n', \mathbf{k} + \mathbf{q}})] \times \\ & \times |\langle u_{n', \mathbf{k}} | \nabla_{\alpha} - i\mathbf{k}_{\alpha} | u_{n, \mathbf{k}} \rangle|^2 \delta(E_{n', \mathbf{k} + \mathbf{q}} - E_{n, \mathbf{k}} - \hbar\omega), \end{aligned} \quad (2)$$

где T — температура, \mathbf{R}_I — ионная конфигурация, e — заряд электрона, m — масса электрона, Ω — объем системы, \mathbf{q} — волновой вектор падающего излучения, n, n' — электронные состояния, α — пространственные координаты, \mathbf{k} — точки в зоне бриллюэна (k -сетка), $w_{\mathbf{k}}$ — вес точек в зоне бриллюэна, $f(T, E)$ — распределение Ферми — Дирака, $E_{n, \mathbf{k}}$ — собственные значения (энергетические уровни) соответствующей волновой функции $\psi_{n, \mathbf{k}}$ в уравнении Кона — Шема. Сама $\psi_{n, \mathbf{k}}$ представляется в виде суммы плоских волн с помощью блоховских функций $\psi_{n, \mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n, \mathbf{k}}$.

Формула Кубо — Гринвуда (2) включается в себя суммирование по всему спектру частот. Технически спектр дискретен из-за конечного объема расчетной ячейки, и вместо суммы с δ -функцией берется сумма с функцией Гаусса в сомножителях. По умолчанию, в коде VASP ширина функции Гаусса берется равной электронной температуре, устанавливаемой как параметр для распределения Ферми — Дирака. Подобный выбор ширины гауссиана ведет к недооценке проводимости при высоких температурах, где электронная температура достигает порядка единиц эВ [29]. В этой работе ширина функции Гаусса для расчета проводимости предустановлена равной 0.05 эВ.

3. Результаты

Всего рассчитаны 8 изотерм в области температур $T = 4000 — 25\,000$ К и плотностей $\rho = 1 — 20$ г/см³. Для ясности на рис. 1 представлена серия изотерм до 12 г/см³, начиная только от 8000 К. В случае фазового перехода первого рода ожидалось обнаружить ступеньку на уравнении состояния подобно той, которая обнаруживается при моделировании фазового перехода в разогретом плотном водороде [19, 20]. В разогретом плотном аргоне давление растет плавно с ростом плотности вдоль изотерм, что указывает на отсутствие перехода. Теоретически скачок плотности может быть малым, и имеющийся дискретизация сетки плотность-температура может быть недостаточно, чтобы увидеть излом. Поэтому дополнительно рассчитана одна изохора 6 г/см³ с медленным остыванием, начиная с 14 000 К и заканчивая твердой фазой (рис. 2). Значения температуры и давления на рис. 2 взяты как среднее в промежутке одной пикосекунды моделирования (2000 МД-шагов). Для случая медленного изменения температуры излом также не обнаруживается.

Данные по электропроводности представлены на рис. 3. Изотермы, полученные методом квантовой молекулярной динамики, качественно схожи с полученными с помощью аналитических моделей [18, 24]: есть минимумы, которые сглаживаются с увеличением температуры (см. врезку на рис. 3), хотя положения минимумов отличаются на порядки по как по плотности. При любых моделях изотермы сходятся с увеличением плотности, что можно интерпретировать как переход в металлоподобное состояние. Проводимость разогретого

плотного аргона изменяется плавно как с ростом плотности, так и с ростом температуры. Последнее говорит об отсутствии плазменного фазового перехода, так как тот предполагает скачок проводимости.

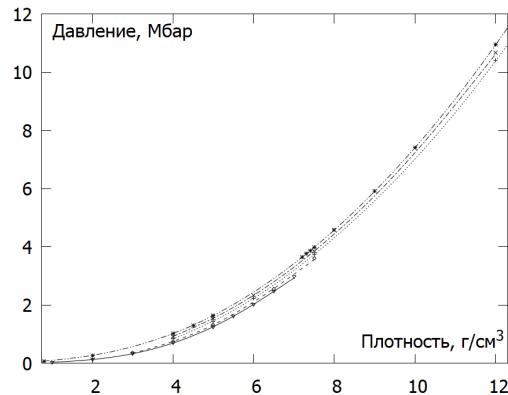


Рис. 1. Уравнение состояния разогретого плотного аргона. Изотермы снизу вверх: 8000 К (сплошная линия с треугольниками), 10 000 К (пунктир с кружками), 15 000 К (пунктир точками с крестами-плюсами), 20 000 К (штрих-пунктир с крестами-иксами), 25 000 К (штрих-пунктир с двумя точками со звездочками). Линии, построенные по точкам, являются аппроксимацией сплайнами

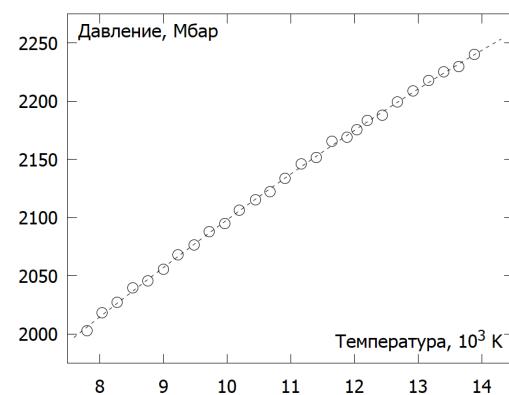


Рис. 2. Изохора 6 г/см³ разогретого плотного аргона. Рассчитана путём медленного изменения температуры термостатом Нозе – Гувера. Термодинамические параметры получены рассчитаны как среднее в промежутке одной пикосекунды моделирования (2000 МД-шагов). Пунктирная линия проведена для удобства восприятия

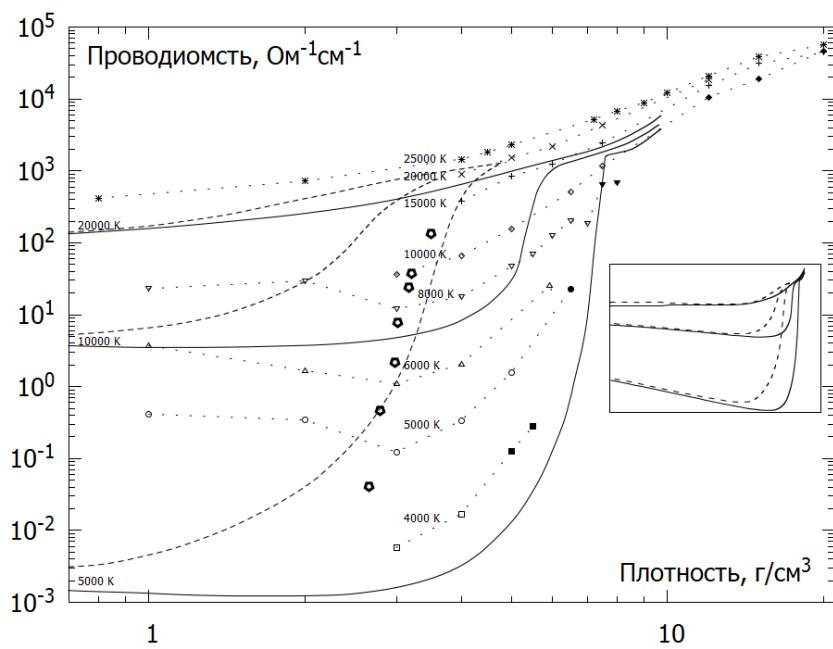


Рис. 3. Электрическая проводимость разогретого плотного аргона. Сплошные линии – изотермы из [18] (химическая модель «САХА»), пунктирные линии – изотермы из [24] (химическая модель «3+»). Точки, соединенные прореженным пунктиром – результат данной работы. Закрашенные квадраты, кружки, треугольники и ромбы – твердая фаза, все остальные точки – жидкая (флюид). Полужирными пятиугольниками обозначены экспериментальные данные [9]. На врезке – результат тех же аналитических работ [18, 24] в тех же координатах, но с увеличенным масштабом по плотности

Результаты МД количественно отличаются от экспериментальных данных [9]. Ударная

адиабата [9] (полужирные пятиугольники на рис. 3) получена в диапазоне плотностей $\rho = 2.5 - 3.5 \text{ г/см}^3$ и температур $T = 7300-24400 \text{ К}$. Экспериментальная температура примерно в 2 раза больше, чем предсказывают МД и аналитические модели [18, 24]. Это можно объяснить сложностью определения температуры в эксперименте: измерялась только яркостная температура, а реальная — высчитывалась. Подобное расхождение между МД и экспериментом на ударных волнах можно найти в исследовании дейтерия [30].

В ходе моделирования был получен проводящий твердый аргон (закрашенные точки на рис. 3). Это качественно новый факт, так как использовавшиеся ранее аналитические модели [18, 24] применимы только для жидкости (флюида), а в экспериментах твердый аргон измерялся только при значительно более низких температурах. Расчет этой работы показывает, что электропроводность продолжает расти вдоль изотерм с ростом плотности несмотря на пересечение линии плавления.

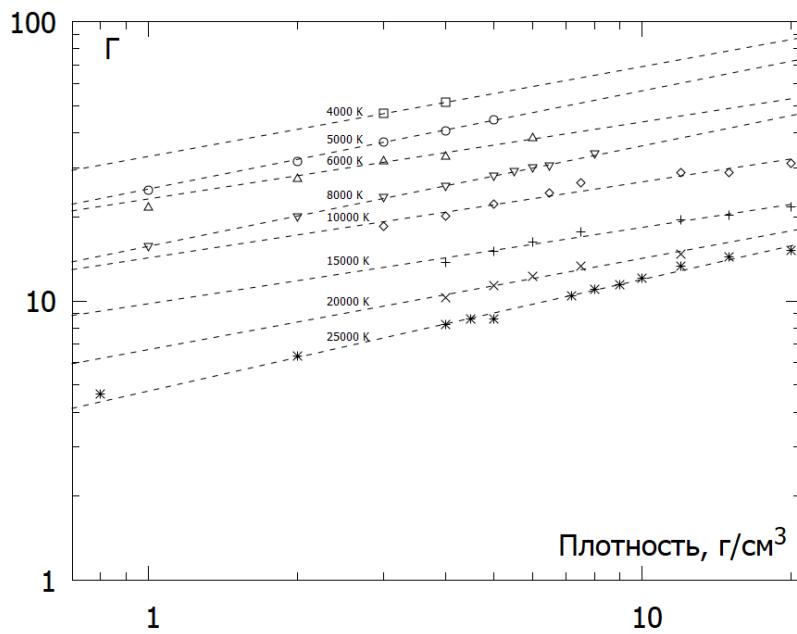


Рис. 4. Параметр неидеальности плазмы Γ . Прямые линии проведены как аппроксимация степенной функцией $\Gamma(\rho) = A\rho^\alpha$

Дополнительно рассчитан параметр неидеальности Γ по формуле [31]:

$$\Gamma = \frac{e^2}{r_e k T} = \left(\frac{3}{4} \pi n_e \right)^{1/3} \frac{e^2}{k T}, \quad (3)$$

где e — заряд электрона, k — постоянная Больцмана, T — температура, r_e — радиус ячейки Вигнера — Зейца, n_e — концентрация свободных электронов.

Для оценки n_e использовалось правило сумм, позволяющее оценить плазменную частоту [32]:

$$\int_0^\infty \omega \varepsilon^{(2)}(\omega) d\omega = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 = \frac{2\pi^2 e^2 n_e}{m}.$$

В рамках теории функционала плотности нет разделения на связанные и свободные электроны. Для аргона учитывалось 8 валентных электронов. Оценка n_e ограничивается только внутризонными переходами.

Результаты расчета параметра неидеальности представлены на рис. 4. В исследуемой области плотностей и температур аргон представляет собой сильно неидеальную плазму: параметр неидеальности варьируется от 5 до 50. Эта оценка примерно в два раза больше, чем в [8], где применялась самосогласованная вариационная модель жидкости. В двойном

логарифмическом масштабе изотермы ложатся на прямые с примерно одним и тем же наклоном, т.е. $\Gamma \sim \rho^\alpha$, $\alpha = 0.27 - 0.36$. По формуле (3) α и должно быть в районе 0.33 из-за зависимости от концентрации электронов в степени одна треть.

4. Заключение

Проведено исследование разогретого плотного аргона методами квантовой молекулярной динамики. Воспроизведен рост электропроводности в области температур $T = 4000 - 25\,000$ К и плотностей $\rho = 1 - 20$ г/см³. Результат качественно согласуется с предсказаниями аналитических моделей [18, 24] и с экспериментальными данными [9]. Металлизация происходит плавно с ростом плотности и температуры. Построено уравнение состояния по сериям изотерм; скачков плотности не обнаружено. Признаков плазменного фазового перехода в исследуемой области параметров не обнаружено.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ по гранту 20-32-90023 (Аспиранты). Расчеты были выполнены на суперкомпьютерном кластере МСЦ РАН.

Список литературы

1. *Фортов В.Е.* Физика высоких плотностей энергии. Москва : Физматлит, 2013.
2. *Falk K.* Experimental methods for warm dense matter research // High Power Laser Sci. Eng. 2018. V. 6. P. E59.
3. *Dias R., Silvera I.F.* Observation of the Wigner-Huntington transition to metallic hydrogen // Science. 2017. V. 355. P. 715–718.
4. *Fortov V.E., Ilkaev R.I., Arinin V.A., Burtzev V.V., Golubev V.A., Iosilevskiy I.L., Khrustalev V.V., Mikhailov A.L., Mochalov M.A., Ternovoi V.Y., Zhernokletov M.V.* Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-Isentropical Compression at Megabar Pressures // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. P. 185001–4.
5. *Knudson M.D., Desjarlais M.P., Becker A., Lemke R.W., Cochrane K.R., Savage M.E., Bliss D.E., Mattsson T.R., Redmer R.* Direct observation of an abrupt insulator-to-metal transition in dense liquid deuterium // Science. 2015. V. 348. P. 1455–1460.
6. *Celliers P.M., Loubeyre P., Eggert J.H., Brygoo S., McWilliams R.S., Hicks D.G., Boehly T.R., Jeanloz R., Collins G. W.* Insulator-to-Conducting Transition in Dense Fluid Helium // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 104. P. 184503–4.
7. *McWilliams R.S., Dalton D.A., Konopkova Z., Mahmood M.F., Goncharov A.F.* Opacity and conductivity measurements in noble gases at conditions of planetary and stellar interiors // PNAS. 2015. V. 112. P. 7925–7930.
8. *Zheng J., Chen Q., Yunjun G., Li Zh., Shen Zh.* Multishock Compression Properties of Warm Dense Argon // Scientific Reports. 2015. V. 5. P. 16041–10.
9. *Гатилов Л.А., Глуходедов В.Д., Григорьев Ф.В., Кормер С.Б., Кулешова Л.В., Мочалов М.А.* Электропроводность ударно-сжатого конденсированного аргона при давлениях от 20 до 70 ГПа // ПМТФ. 1985. Т. 1. С. 99.
10. *Шилкин Н.С., Дудин С.В., Грязнов В.К., Минцов В.Б., Фортов В.Е.* Измерение электронной концентрации и проводимости частично ионизованной плазмы инертных газов // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. С. 1030–1040.
11. *Carpenter J.H., Root S., Cochrane R.K., Flicker D.G., Mattsson T.R.* Equation of state of argon: experiments on Z, density functional theory (DFT) simulations, and wide-range model // Sandia Report. 2012. V. 7991. P. 1–54.
12. *Глуходедов В.Д., Киршанов С.И., Лебедева Т.С., Мочалов М.А.* Свойства ударно-сжатого криптона до 90 ГПа // ЖЭТФ. 1999. Т. 116. С. 551.

13. *Zaporoghets Y., Mintsev V., Gryaznov V., Fortov V., Reinholtz H., Raitza T., Ropke G.* Reflectivity in shock wave fronts of xenon // *J. Phys. A Math. Gen.* 2006. V. 39. P. 4329.
14. *Норман Г.Э., Саитов И.М.* Плазменный фазовый переход // УФН. 2021. Т. 191. С. 1153–1186.
15. *Dzyabura V., Zaghou M., Silvera I.F.* Evidence of a liquid–liquid phase transition in hot dense hydrogen // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2013. V. 110. P. 8040.
16. *Ohta K., Ichimaru K., Einaga M., Kawaguchi Sh., Shimizu K., Matsuoka T., Hirao N., Ohishi Y.* Phase boundary of hot dense fluid hydrogen // *Sci. Rep.* 2015. V. 5. P. 16560.
17. *Утюэж А.Н., Михеенков А.В.* Водород и его соединения при экстремальных давлениях // УФН. 2017. Т. 187. С. 953–970.
18. *Фортов В.Е., Терновой В.Я., Жерноклетов М.В., Мочалов М.А., Михайлова А.Л., Филимонов А.С., Пяллинг А.А., Минцев В.В., Грязнов В.К., Иосилевский И.Л.* Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динамических давлений // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. С. 288–309.
19. *Lorenzen W., Holst B., Redmer R.* First-order liquid-liquid phase transition in dense hydrogen // *Phys. Rev. B.* 2010. V. 82. P. 195107.
20. *Norman G.E., Saitov I.M.* Plasma phase transition (by the fiftieth anniversary of the prediction) // *Contr. to Pl. Phys.* 2019. V. 59. P. 201800182.
21. *Preising M., Redmer R.* Metallization of dense fluid helium from ab initio simulations // *Phys. Rev. B.* 2020. V. 102. P. 224107.
22. *Driver K. P., Militzer B.* First-principles simulations and shock Hugoniot calculations of warm dense neon // *Phys. Rev. B.* 2015. V. 91. P. 045103.
23. *Wang Zh.Q., Li Zh.G., Wang Yu F., Liu L., Gu Yu.J., Chen Q.F., Chen X.R.* Equation of state, ionic structure, and phase diagram of warm dense krypton // *Phys. Rev. E.* 2019. V. 100. P. 033214.
24. *Хомкин А.Л., Шумихин А.* Эффект металлизации при сжатии инертных газов // ЖЭТФ. 2019. Т. 155. С. 869–877.
25. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865.
26. *Kresse G., Hafner J.* Ab initio molecular dynamics for liquid metals // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 47. P. 558.
27. *Kresse G., Furthmuller J.* Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. P. 11169.
28. *Ehrenreich H., Cohen M.H.* Self-Consistent Field Approach to the Many-Electron Problem // *Phys. Rev.* 1959. V. 115. P. 786.
29. *Norman G., Saitov I., Stegailov V., Zhilyaev P.* Ab initio calculation of shocked xenon reflectivity // *Phys. Rev. E.* 2015. V. 91. P. 023105.
30. *Chentsov A. V., Levashov P.R.* Isentropic Compression of Deuterium by Quantum Molecular Dynamics // *Contrib. Plasma Phys.* 2012. V. 52. P. 33.
31. *Фортов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.* Физика неидеальной плазмы. 2-е изд. Москва : Физматлит, 2010.
32. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. 4-е изд., стереот. Москва : Физматлит, 2005.

References

1. *Fortov V.E.* Physics of high energy densities. Moscow : Fizmatlit, 2013. (in Russian).
2. *Falk K.* Experimental methods for warm dense matter research. *High Power Laser Sci. Eng.* 2018. V. 6. P. E59.
3. *Dias R., Silvera I.F.* Observation of the Wigner-Huntington transition to metallic hydrogen. *Science.* 2017. V. 355. P. 715–718.
4. *Fortov V.E., Ilkaev R.I., Arinin V.A., Burtzev V.V., Golubev V.A., Iosilevskiy I.L., Khrustalev V.V., Mikhailov A.L., Mochalov M.A., Ternovoi V. Y., Zhernokletov M. V.* Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-Isentropical Compression at Megabar Pressures. *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 99. P. 185001–4.
5. *Knudson M.D., Desjarlais M.P., Becker A., Lemke R.W., Cochrane K.R., Savage M.E., Bliss D.E., Mattsson T.R., Redmer R.* Direct observation of an abrupt insulator-to-metal transition in dense liquid deuterium. *Science.* 2015. V. 348. P. 1455–1460.
6. *Celliers P.M., Loubeyre P., Eggert J.H., Brygoo S., McWilliams R.S., Hicks D.G., Boehly T.R., Jeanloz R., Collins G.W.* Insulator-to-Conducting Transition in Dense Fluid Helium. *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. P. 184503–4.
7. *McWilliams R.S., Dalton D.A., Konopkova Z., Mahmood M.F., Goncharov A.F.* Opacity and conductivity measurements in noble gases at conditions of planetary and stellar interiors. *PNAS.* 2015. V. 112. P. 7925–7930.
8. *Zheng J., Chen Q., Yunjun G., Li Zh., Shen Zh.* Multishock Compression Properties of Warm Dense Argon. *Scientific Reports.* 2015. V. 5. P. 16041–10.
9. *Gatilov L.A., Glukhodedov V.D., Grigoriev F.V., Kormer S.B., Kuleshova L.V., Mochalov M.A.* Electrical conductivity of shock-compressed condensed argon at pressures from 20 to 70 GPa. *Applied mechanics and technical physics.* 1985. V. 1. P. 99. (in Russian).
10. *Shilkin N.S., Dudin S.V.V., Gryaznov V.K., Mintsev V.B., Fortov V.E.* Measurement of electron concentration and conductivity of partially ionized plasma of noble gases. *JETP.* 2003. V. 124. P. 1030–1040. (in Russian).
11. *Carpenter J.H., Root S., Cochrane R.K., Flicker D.G., Mattsson T.R.* Equation of state of argon: experiments on Z, density functional theory (DFT) simulations, and wide-range model. *Sandia Report.* 2012. V. 7991. P. 1–54.
12. *Glukhodedov V.D., Kirshanov S.I.I., Lebedeva T.S., Mochalov M.A.* Properties of shock-compressed krypton up to 90 GPa. *JETP.* 1999. V. 116. P. 551. (in Russian).
13. *Zaporoghets Y., Mintsev V., Gryaznov V., Fortov V., Reinholz H., Raitza T., Ropke G.* Reflectivity in shock wave fronts of xenon. *J. Phys. A Math. Gen.* 2006. V. 39. P. 4329.
14. *Norman G.E., Saitov I.M.* Plasma phase transition. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk.* 2021. V. 191. P. 1153–1186. (in Russian).
15. *Dzyabura V., Zagho M., Silvera I.F.* Evidence of a liquid–liquid phase transition in hot dense hydrogen. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2013. V. 110. P. 8040.
16. *Ohta K., Ichimaru K., Einaga M., Kawaguchi Sh., Shimizu K., Matsuoka T., Hirao N., Ohishi Y.* Phase boundary of hot dense fluid hydrogen. *Sci. Rep.* 2015. V. 5. P. 16560.
17. *Utyuzh A.N., Mikheenkov A.V.* Hydrogen and its compounds at extreme pressures. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk.* 2017. V. 187. P. 953–970. (in Russian).
18. *Fortov V.E., Ternovoy V.Y., Zhernokletov M.V., Mochalov M.A., Mikhailov A.L., Filimonov A.S., Pyalling A.A.A., Mintsev V.B., Gryaznov V.K., Iosilevsky I.L.* Pressure ionization of a non-ideal plasma in the megabar range of dynamic pressures. *JETP.* 2003. V. 124. P. 288–309. (in Russian).

19. Lorenzen W., Holst B., Redmer R. First-order liquid-liquid phase transition in dense hydrogen. *Phys. Rev. B*. 2010. V. 82. P. 195107.
20. Norman G.E., Saitov I.M. Plasma phase transition (by the fiftieth anniversary of the prediction) // *Contr. to Pl. Phys.* 2019. V. 59. P. 201800182.
21. Preising M., Redmer R. Metallization of dense fluid helium from ab initio simulations. *Phys. Rev. B*. 2020. V. 102. P. 224107.
22. Driver K. P., Militzer B. First-principles simulations and shock Hugoniot calculations of warm dense neon. *Phys. Rev. B*. 2015. V. 91. P. 045103.
23. Wang Zh.Q., Li Zh.G., Wang Yu F., Liu L., Gu Yu.J., Chen Q.F., Chen X.R. Equation of state, ionic structure, and phase diagram of warm dense krypton. *Phys. Rev. E*. 2019. V. 100. P. 033214.
24. Khomkin A.L., Shumikhin A. Metallization effect at compression of inert gases. *JETP*. 2019. V. 155. P. 869–877. (in Russian).
25. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865.
26. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Phys. Rev. B*. 1993. V. 47. P. 558.
27. Kresse G., Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. P. 11169.
28. Ehrenreich H., Cohen M.H. Self-Consistent Field Approach to the Many-Electron Problem. *Phys. Rev.* 1959. V. 115. P. 786.
29. Norman G., Saitov I., Stegailov V., Zhilyaev P. Ab initio calculation of shocked xenon reflectivity. *Phys. Rev. E*. 2015. V. 91. P. 023105.
30. Chentsov A. V., Levashov P.R. Isentropic Compression of Deuterium by Quantum Molecular Dynamics. *Contrib. Plasma Phys.* 2012. V. 52. P. 33.
31. Fortov V.E., Khrapak A.G., Yakubov I. Physics of non-ideal plasma. 2nd ed. Moscow : Fizmatlit, 2010. (in Russian).
32. Landau L.D., Lifshits E.M. Electrodynamics of continuous media. 4th ed., stereot. Moscow : Fizmatlit, 2005. (in Russian).

Поступила в редакцию 10.06.2024

УДК 539.216.2, 539.23

З. М. Хамдохов, З. Ч. Маргушев

Институт информатики и проблем регионального управления КБНЦ РАН

Особенности структуры композитных пленок Cu–C, полученных ионно-плазменным методом

Решается задача нанесения и определения фазового состава медно-углеродного покрытия субмикронной толщины на кремниевой подложке. Пленка осаждалась ионно-плазменным методом одновременного электродугового распыления меди и углерода из двух испарителей. Преимущество такого подхода состоит в возможности управления концентрацией соответствующих компонент в дуговом разряде и тем самым получать гладкие пленки разного химического и фазового состава. В результате анализа состава и структуры пленок различными методами установлено, что в осажденной пленке образуются аморфный углерод, нанографиты размером ~ 5 нм и наночастицы соединения карбида меди Cu_2C_2 . Полученный результат представляет интерес для решения задачи создания эффективных автоэмиссионных катодов.

Ключевые слова: композитная пленка, одновременное электродуговое распыление меди и углерода из двух испарителей, автоэмиссионный катод, методы исследования состава и структуры поверхности

Z. M. Khamdokhov, Z. Ch. Margushev

Institute for Informatics and Problems of Regional Management of K-B SC RAS

Features of the structure of Cu–C composite films obtained by the ion-plasma method

The problem of applying and determining the phase composition of a copper-carbon coating of submicron thickness on a silicon substrate is being solved. The film was deposited using the ion-plasma method of simultaneous electric arc sputtering of copper and carbon from two evaporators. The advantage of this approach is the ability to control the concentration of the corresponding components in the arc discharge and thereby obtain smooth films of different chemical and phase compositions. As a result of analyzing the composition and structure of the films using various methods, it was established that amorphous carbon, nanographites with a size of ~ 5 nm, and nanoparticles of the copper carbide compound Cu_2C_2 are formed in the deposited film. The result obtained is of interest for solving the problem of creating efficient field emission cathodes.

Key words: composite film, simultaneous electric arc sputtering of copper and carbon from two evaporators, field emission cathode, methods for studying the composition and structure of the surface

1. Введение

Интерес к получению композитных металл-углеродных пленок различной структуры и фазового состава за последнее время значительно возрос в связи с расширением их использования в электронных приборах.

Для улучшения прочности и улучшения адгезии в углеродные пленки включают металлы [1]. Сплавы металла и углерода применяются для большей части промышленных

изделий. Свойства сплава (прочность, стойкость к коррозии и т.д.) зависят от содержания углерода в сплаве и от способа его получения. Авторы работы [2] методом распыления композитного катода титан/углерод в атмосфере инертного газа Ar получили твердую композитную металл-углеродную пленку состава TiC–C. В работе [3] показана зависимость свойств защитных алмазоподобных кремний-углеродных покрытий от содержания титана. В работе [2] методом активного реактивного испарения высокочистой меди в атмосфере рабочего газа CH_4/Ar была синтезирована стабильная стехиометрическая фаза Cu_2C_2 в форме наночастиц, имеющих тетрагональную структуру [4]. Образцы Cu_2C_2 обладают полупроводниковыми свойствами и используется для производства оптоэлектронных приборов. Особый интерес представляет разработка ионно-плазменных методов получения композитных металл-углеродных пленок, содержащих углеродные наноструктуры, для автоэмиссионных (холодных) катодов [5–7].

Цель настоящей работы – исследование фазового состава композитных покрытий на основе Cu_2C_2 , полученных методом одновременного электродугового распыления графита и меди из двух испарителей.

2. Эксперимент и обсуждение результатов

На первом этапе получены композитные медно-углеродные пленки на кремниевой подложке, покрытые диффузионно-барьерным слоем нитрида титана. Барьерный слой улучшает адгезию композитной пленки к подложке и предотвращает образование напряжений между ними. Исследуемые пленки были осаждены методом одновременного электродугового распыления графита и меди из двух испарителей на установке вакуумного нанесения износостойких покрытий УВНИПА. Для испарителя с графитовым катодом использовалась система магнитной сепарации, которая предназначена для удаления микрочастиц графита из потока плазмы. Преимуществом данного метода является возможность варьирования в процессе напыления содержанием углерода и меди в плазменных потоках, получая при этом гладкие пленки Cu–C разного химического и фазового состава. Вакуум обеспечивался при помощи форвакуумного механического насоса НВР-16Д и диффузионного насоса Н-400/7000. Ток дуги при горении катода из графита или меди равнялся приблизительно 90 А, температура осаждения не превышала 800 °С. Отрицательный потенциал смещения, подаваемый на образец, составлял 150 В. Толщина осажденной пленки составляла ~ 0.5 мкм. Перед осаждением поверхность подложки подвергалась обработке ионами аргона в течение 15 минут. Непрерывность горения дугового разряда обеспечивалась путем напуска в откаченную камеру аргона до парциального давления $2 \cdot 10^{-1}$ Па.

На рисунке 1 приведена микрофотография поверхности пленки Cu–C, полученная с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ). Видно, что поверхность пленки характеризуется отсутствием упорядоченной структуры и состоит из случайно ориентированных блоков разных размеров.

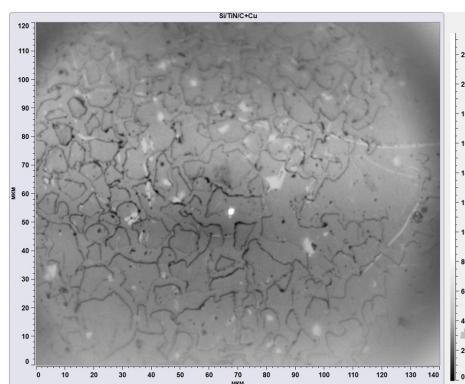


Рис. 1. Микрофотография поверхности пленки Cu–C

На следующем этапе для идентификации химических связей в композитной пленке Cu–C использовался метод комбинационного рассеяния света (КРС). Соответствующий спектр снят с помощью спектрометра Centaur U HR, ООО «Нано Скан Технология». Длина волны лазера 532.8 нм при мощности лазера 25 мВт (рис. 2). Спектр содержит пики G (~ 1610 см $^{-1}$) и D (~ 1360 см $^{-1}$), указывающие на образование в пленке нанокластеров с деформированными связями углерода с sp 2 -типом гибридизации. Отношение интенсивностей пиков G и D равно $\sim 0,87$. Согласно расчету, на основании экспериментальных данных [8], размер нанокластеров близок к 5 нм.

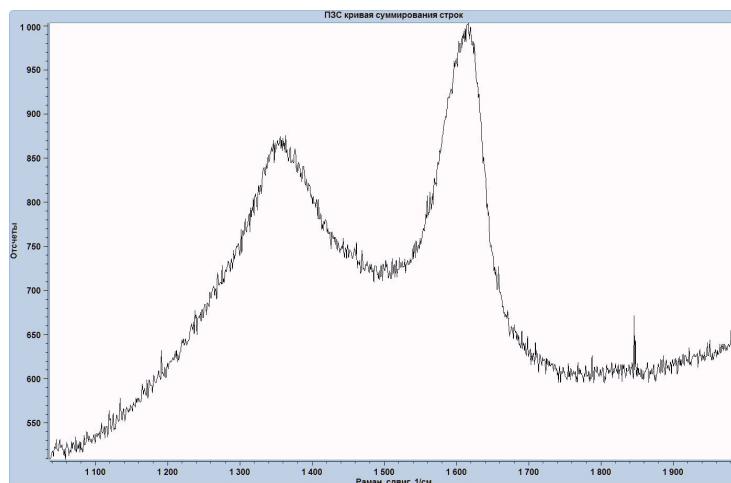


Рис. 2. Спектр КРС пленки Cu–C

Анализ химического состава поверхности образца проводили методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на спектрометре «K-Alpha» фирмы Thermo Scientific с источником рентгеновского излучения Al-K α (1486,6 эВ) при вакууме не хуже $4,7 \cdot 10^{-9}$ мбарр. При обработке спектров вычитание фона вторичных электронов производилось методом Ширли. Спектрометр колибровался по пикам Au4f $_{7/2}$, Cu2p $_{3/2}$, Ag3d $_{5/2}$, которые соответствовали энергиям связи 83.96, 932.62 и 368.21 эВ. Для корректировки положения пика C1s использовали значение энергии связи пика Cu2p $_{3/2}$ металлической меди, присутствующей в системе. Для определения состава пленки по глубине проводили послойное травление пленки пучком ионов Ar $^+$ с энергией 1 кэВ с одновременным контролем состава поверхности. Обзорный спектр РФЭС (рис. 3) был снят для оценки химического состава пленки Cu–C в целом. Обработка спектра по соответствующим пикам показала присутствие в пленке меди (56.6 ат.%), углерода (36.8 ат.%) и кислорода (11.6 ат.%).

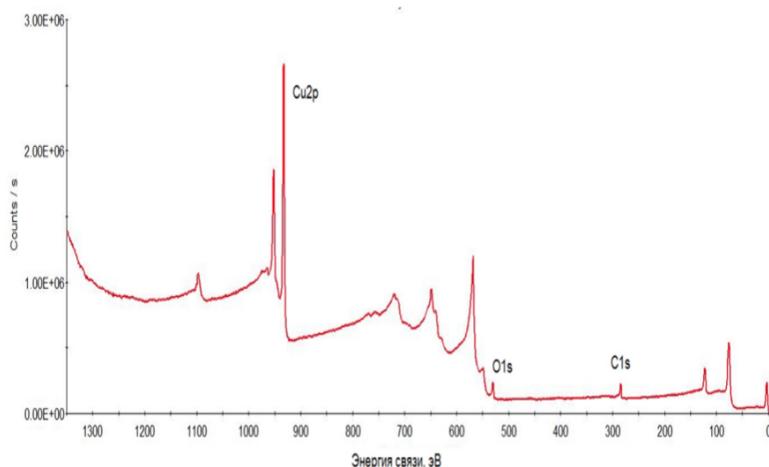


Рис. 3. Обзорный спектр пленки Cu–C

Идентификация состояния меди после ионной очистки образца проводилась по спектрам линий Cu2p и оже-пика Cu LMM (рис. 4). При этом найден оже-параметр, как сумма кинетической энергии оже-пика и энергии связи пика Cu2p_{3/2}, равный 1851,1 эВ. Значение этого параметра указывает на металлическое состояние меди [9].

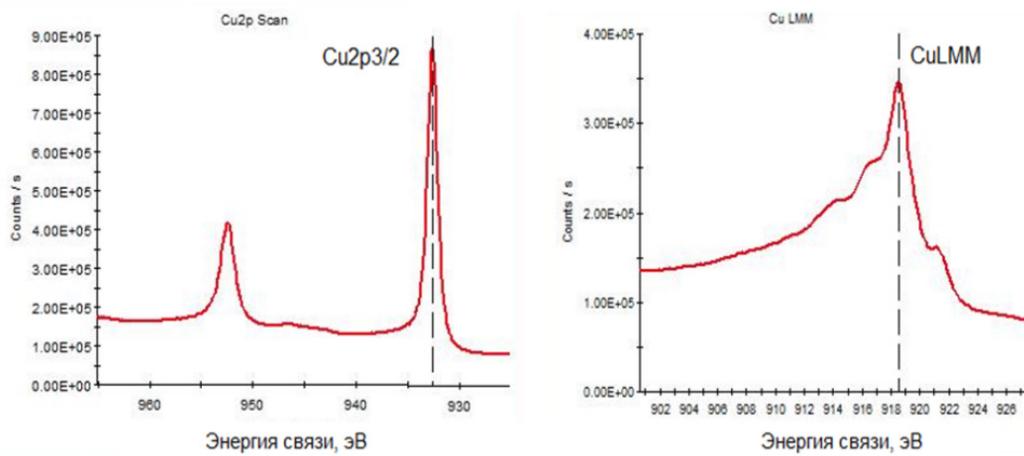


Рис. 4. Спектры дублета Cu2p и оже-пика Cu LMM меди

Анализ химических состояний атомов углерода производился методом разложения пика C1s на составляющие функции Гаусса – Лоренца (функции Войта) в соотношении 30% Лоренца и 70% Гаусса. Результаты такого разложения видны на рис. 5. Наиболее интенсивный пик соответствует пику углерода C–C/C–H на 284,8 эВ, а плечо с более высокими энергиями связи идентифицированы с учетом состояний – C–OH/C–O–C (286,4 эВ), C=O (287,7 эВ), O–C=O (289,2 эВ) и пика плазмонных потерь на 291 эВ. Для корректного описания спектра углерода C1s необходимо учесть еще один пик на 285,3 эВ, который соответствует атомам углерода, связанных с медью. Согласно литературным данным [4], этот пик обусловлен образованием в пленке Cu–C наночастиц стехиометрического соединения Cu₂C₂.

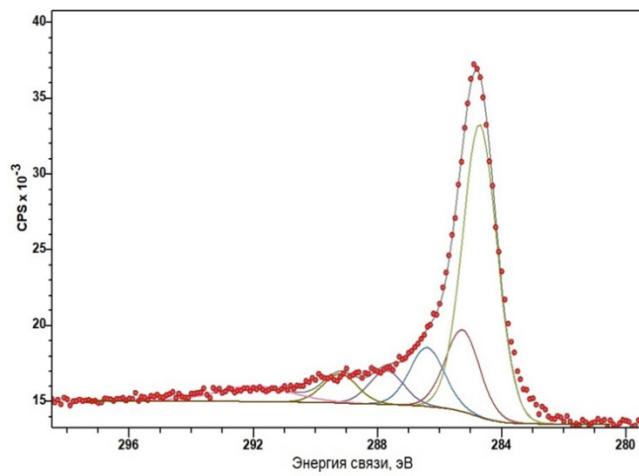


Рис. 5. Результаты разложения спектра углерода C1s

3. Заключение

Методом одновременного электродугового распыления графита и меди из двух испарителей на кремниевые подложки с диффузионно-барьерными слоями нитрида титана осаждены композитные пленки Cu–C. Методами комбинационного рассеяния света и рентгено-

новской фотоэлектронной спектроскопии установлено, что в пленках образуются аморфный углерод, нанографиты размером ~ 5 нм и наночастицы стехиометрического соединения карбида меди. Полученный результат представляет интерес для решения задачи создания эффективных автоэмиссионных катодов на основе углеродных наночастиц.

Список литературы

1. *Andrievskiy R.A.* Синтез и свойства пленок фаз внедрения // Успехи химии. 1997. Т. 66. № 1. С. 57.
2. *Kuznetsov M.V., Borisov S.V., Shepatkovskii O.P., Veksler Yu.G., Kozhevnikov V.L.* Investigation of TiC-C coatings by X-ray photoelectron spectroscopy // Journal of surface investigation. X-ray, synchrotron and neutron techniques. 2009. V. 3. P. 331–337.
3. *Баринов А.Д., Попов А.И., Чуканова Т.С., Емец В.М., Воронцов В.А.* Модификация диэлектрических свойств алмазоподобных кремний-углеродных пленок путем введения титана // Материалы XII Международной научно-технической конференции «Микро- и нанотехнологии в электронике». 2021. С. 293–298.
4. *Balamurugan B., Mehta B.R., Shivaprasad S.M.* «Nanoparticleroute» for the synthesis of a stable and stoichiometric Cu_2C_2 phase – a semiconductor material // Applied physics letters. 2003. V. 82. N 1. P. 115–117.
5. *Khamdokhov Z.M., Kalazhokov Z.K., Naumkin A.V., Karamurzov B.S., Kalazhokov K.K., Tarala V.A., Krandievsky S.O.* Features of the Phase Composition of Films Prepared by the Simultaneous Electric Arc Sputtering of Graphite and Chromium from Two Evaporators // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2021. V. 15. P. 158–163.
6. *Khamdokhov Z.M., Margushev Z.Ch., Kalazhokov Z.Kh., Kalazhokov Kh.Kh., Levin D.D.* Investigation of the Chemical Composition of Films Deposited by the Electric-Arc Sputtering of Graphite and Titanium from Two Sources // Semiconductors. 2022. V. 56. N 13. P. 411–415.
7. *Khamdokhov Z.M., Margushev Z.C., Kalazhokov Z.K., Kushkhov K.B., Kalazhokov K.K., Teshev R.S.* On the Phase Composition of Nanoscale Metal-Carbon Films Produced by the Two-Evaporator Method // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2023. V. 17. N Suppl 1. P. S317–S321.
8. *Пул Ч., Оуенс Ф.* Нанотехнологии. 2-е, доп. изд. Москва : Техносфера, 2006. С. 119–120.
9. *Capece F.M., Dicastro V., Furlani C., Mattogno G., Fragale C., Gargano M., Rossi M.J.* Electron «Copper chromite» catalysts: XPS structure elucidation and correlation with catalytic activity // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 1982. V. 27. N 2. P. 119–128.

References

1. *Andrievskiy R.A.* Synthesis and properties of interstitial phase films. Advances in Chemistry. 1997. V. 66. N 1. P. 57. (in Russian).
2. *Kuznetsov M.V., Borisov S.V., Shepatkovskii O.P., Veksler Yu.G., Kozhevnikov V.L.* Investigation of TiC-C coatings by X-ray photoelectron spectroscopy. Journal of surface investigation. X-ray, synchrotron and neutron techniques. 2009. V. 3. P. 331–337.
3. *Barinov A.D., Popov A.I., Chukanova T.S., Emets V.M., Vorontsov V.A.* Modification of the dielectric properties of diamond-like silicon-carbon films by introducing titanium. Proceedings of the XII International Scientific and Technical Conference «Micro- and nanotechnology in electronics». 2021. P. 293–298. (in Russian).

4. *Balamurugan B., Mehta B.R., Shivaprasad S.M.* «Nanoparticleroute» for the synthesis of a stable and stoichiometric Cu₂C₂ phase – a semiconductor material. *Applied physics letters*. 2003. V. 82. N 1. P. 115–117.
5. *Khamdokhov Z.M., Kalazhokov Z.K., Naumkin A.V., Karamurzov B.S., Kalazhokov K.K., Tarala V.A., Krandieovsky S.O.* Features of the Phase Composition of Films Prepared by the Simultaneous Electric Arc Sputtering of Graphite and Chromium from Two Evaporators. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2021. V. 15. P. 158–163.
6. *Khamdokhov Z.M., Margushev Z.Ch., Kalazhokov Z.Kh., Kalazhokov Kh.Kh., Levin D.D.* Investigation of the Chemical Composition of Films Deposited by the Electric-Arc Sputtering of Graphite and Titanium from Two Sources. *Semiconductors*. 2022. V. 56. N 13. P. 411–415.
7. *Khamdokhov Z.M., Margushev Z.C., Kalazhokov Z.K., Kushkhov K.B., Kalazhokov K.K., Teshev R.S.* On the Phase Composition of Nanoscale Metal-Carbon Films Produced by the Two-Evaporator Method. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2023. V. 17. N Suppl 1. P. S317–S321.
8. *it Poole Ch., Owens F.* Nanotechnology. 2nd, add. ed. Moscow : Technosphere, 2006. P. 119–120. (in Russian).
9. *Capece F.M., Dicastro V., Furlani C., Mattogno G., Fragale C., Gargano M., Rossi M.J.* Electron «Copper chromite» catalysts: XPS structure elucidation and correlation with catalytic activity. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 1982. V. 27. N 2. P. 119–128.

Поступила в редакцию 30.05.2024

УДК 539.216.2, 539.23

З. М. Хамдохов¹, З. Ч. Маргушев¹, З. Х. Калажоков^{1,3}, Э. А. Ильичев²,
А. В. Ромашкин²

¹Институт информатики и проблем регионального управления КБНЦ РАН

²Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

³Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова

Ионно-плазменный метод модификации слоя на основе поликристаллической алмазной пленки

Исследованы структура и свойства слоя поликристаллической пленки алмаза после облучения ионами N+ и He+ с энергией 7 кэВ. По данным спектроскопии комбинационного рассеяния, в облученном ионами азота слое, кроме обладающих высокой степенью кристалличности алмазных кластеров, присутствует существенная доля углерода с sp²-типом гибридизации. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия показывает, что после облучения ионами гелия содержание sp²-углерода в графитизированном слое алмаза увеличивается в 1,7 раз за счет существенного снижения доли C=N связей. Также имеет место рост интенсивности люминесценции от NV-центров почти в два раза и заметное ослабление образования вклада от связей C–N и C=N после облучения ионами He+.

Ключевые слова: алмаз, ионное облучение, гелий, азот, автоэмиссионный катод, спектроскопия комбинационного рассеяния света, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, наночастицы углерода

З. М. Камдохов¹, З. Ч. Маргушев¹, З. Х. Калажоков^{1,3}, Э. А. Ильичев²,
А. В. Ромашкин²

¹Institute for Informatics and Problems of Regional Management of KBSC RAS

² National Research University of Electronic Technology (MIET)

³ Berbekov Kabardino-Balkarian State University

Ion-plasma layer modification method based on polycrystalline diamond film

The structure and properties of a polycrystalline diamond film layer after irradiation with N+ and He+ ions with an energy of 7 keV were studied. According to Raman spectroscopy data, in the layer irradiated with nitrogen ions, in addition to diamond clusters with a high degree of crystallinity, there is a significant proportion of carbon with the sp²-type of hybridization. X-ray photoelectron spectroscopy shows that after irradiation with helium ions, the sp²-carbon content in the graphitized diamond layer increases by 1.7 times due to a significant decrease in the proportion of C–N bonds. There is also an almost twofold increase in the luminescence intensity from NV centers and a noticeable weakening in the formation of the contribution from the C–N and C=N bonds after irradiation with He+ ions.

Key words: diamond, ion irradiation, helium, nitrogen, autoemission cathode, raman spectroscopy, X-ray photoelectron spectroscopy, carbon nanoparticles

1. Введение

Алмаз обладает наибольшей твердостью и химически инертен. Применение алмаза в эмиссионной электронике обусловлено возможностью его использования в условиях технического вакуума и устойчивостью к бомбардировке ионами остаточных газов. Алмазные поликристаллические пленки являются предметом интенсивного изучения, что связано с возможностью создания холодных многоострийных катодов с алмазным покрытием [1, 2]. Однако эти катоды не нашли широкого применения в приборах вакуумной электроники из-за высоких требований к точности воспроизведения геометрических характеристик при изготовлении микроострий. Альтернативным материалом для изготовления автоэмиссионных углеродных сред являются графитоподобные пленки, содержащие наночастицы sp^2 -углерода [3]. Недостатком этих пленок является то, что они не имеют хорошего сцепления с подложкой. Проблему адгезии можно решить, если сформировать графитизированную среду в приповерхностном слое алмазной пленки. Кроме того, это позволит значительно улучшить тепловые характеристики холодных катодов благодаря высокой теплопроводности алмаза. В работе [4] показано, что облучение алмаза ионами с целью легирования алмаза приводит к графитизации приповерхностного ионно-модифицированного слоя и образованию наночастиц sp^2 -углерода. Азот является наиболее пригодной примесью для получения слоя алмаза с электронной проводимостью [5]. В связи с этим в настоящей работе проведены исследования химического и структурного состояния ионно-модифицированного приповерхностного слоя поликристаллической пленки алмаза после облучения ионами N^+ и He^+ с использованием рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (СКР).

2. Эксперимент

Для исследований применялись поликристаллические пленки алмаза, выращенные с использованием PECVD-метода на подложке из кварцевого стекла. Толщина пленки составляла $\sim 1,5$ мкм. Облучение ионами азота и гелия с энергией 7 кэВ проводилось при комнатной температуре на установке УВНИП. Плотность тока составляла ~ 1 мА/см². Исследования методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии были выполнены с помощью спектрометра «K-Alpha» фирмы Thermo Scientific с источником рентгеновского излучения Al-Ka (1486,6 эВ) при вакууме не хуже $4,7 \cdot 10^{-9}$ мбарр. Калибровка спектрометра осуществлялась по пикам Au 4f_{7/2}, Cu 2p_{3/2}, Ag 3d_{5/2}, которым были приписаны энергии связи 83,96, 932,62 и 368,21 эВ соответственно. Спектры комбинационного рассеяния света были получены с помощью спектрометра Centaur U HR, ООО «Нано Скан Технология». Длина волны лазера 532 нм при мощности лазера 0,4 мВт.

3. Результаты и обсуждение

Толщина поверхностного слоя, исследуемого методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, равна ~ 2 нм [6]. На рисунке 1 приведены спектры РФЭС исходной пленки поликристаллического алмаза (образец № 1) после облучения ионами азота (образец № 2) и после облучения образца № 2 ионами гелия (образец № 3).

На спектрах отчетливо видны пики при энергиях связи 286,2 эВ и 284,8 эВ. Для получения информации о химических группах, присутствующих на поверхностях образцов, были проанализированы химические сдвиги в энергиях связи атомов углерода на окисленной поверхности алмазного образца, аналогично приведенному в [7]. При этом для описания пика C1s в области низких энергий был использован пик sp^2 – гибридизированного атома углерода с характерной асимметрией [8]. Спектры C1s были разложены на компоненты, соответствующие различным химическим состояниям углерода (рис. 2).

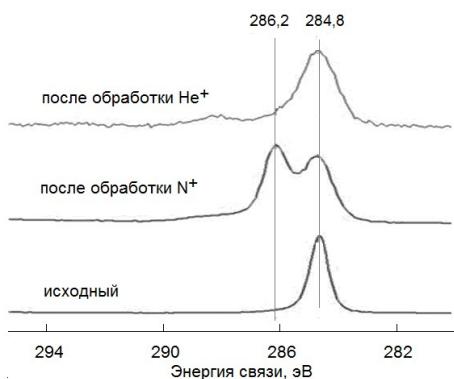


Рис. 1. Спектры РФЭС исходной пленки поликристаллического алмаза (образец № 1) после облучения ионами N^+ (образец № 2) и после облучения образца № 2 ионами He^+ (образец № 3)

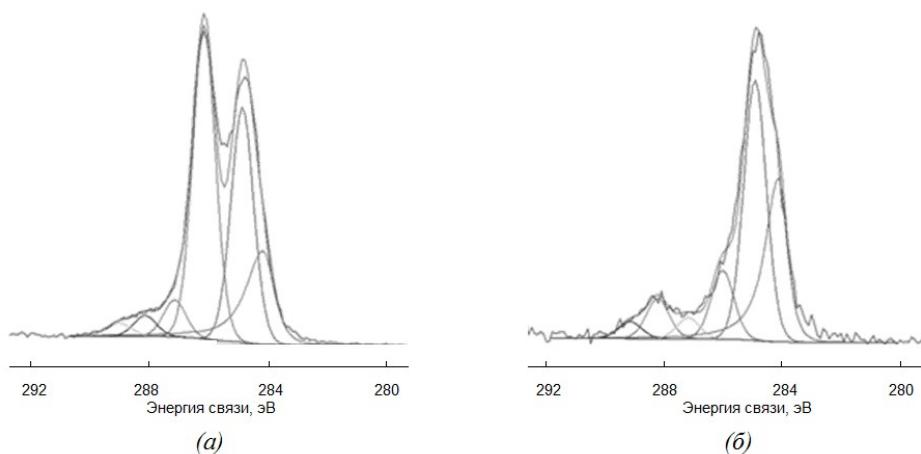


Рис. 2. Результаты разложения пиков C1s: а) после облучения ионами N^+ (образец № 2); б) после облучения образца № 2 ионами He^+ (образец № 3)

Формирование связей C–N осуществляется посредством переноса заряда от менее электроотрицательных атомов углерода к атомам азота, обладающего большей электроотрицательностью. Уменьшение электронной плотности приводит к сдвигу энергий связи в линии C1s и добавлению двух компонент с более высокими энергиями связи относительно пика C–C sp³ при 286,2 эВ и 287,1 эВ, которые соответствуют структурам связи C=N и C–N [9, 10]. Появление интенсивного пика при 286,2 эВ после облучения ионами азота алмаза указывает на формирование преимущественно состояния C=N. Возможным механизмом образования этих связей также может быть замена водорода на гранях нанокристаллов алмаза атомами азота, как это описано в работе [9]. Дальнейшая обработка ионами гелия поверхности образца № 2, легированного азотом, приводит к заметному ослаблению компонента, соответствующего связи C=N, как это видно на рис. 2б и из данных табл. 1.

Таблица 1 показывает, что бомбардировка ионами гелия легированного азотом поверхностного слоя алмаза уменьшает вклад химических состояний, связанных с атомами N, и приводит к увеличению доли sp² – гибридизированных атомов углерода с 18,78 ат.% до 32,52 ат.%. На рисунке 3 представлены в сравнении фотоэлектронные спектры азота N1s для образцов после обработки ионами азота и гелия (а) и результаты разложения пиков N1s образцов по химическим состояниям после обработки ионами азота (б) и гелия (в). Химические состояния азота образуют три группы аналогично тому, как это показано в [9]. В таблице 2 представлено их относительное содержание и соответствующие энергии связи на поверхности исследуемых образцов, из которого видно снижение почти в два раза доли атомов азота, образующих группы C=N, после облучения ионами гелия.

Таблица 1

Содержание функциональных групп углерода и энергии связи на поверхности образцов после обработки ионами N^+ (образец № 2), ионами N^+ и He^+ (образец № 3)

Группы	Энергия связи, эВ	Обработка N^+ , эВ	Обработка He , эВ
$C=C$ sp^2	284,2	18,78	32,52
$C-C$ sp^3	284,8	30,79	43,14
$C-OH$ и $C=N$	286,2	41,04	11,42
$C-N$	287,1	4,83	3,47
$C=O$	288,2	2,74	6,68
$O-C=O$	289,3	1,82	2,77

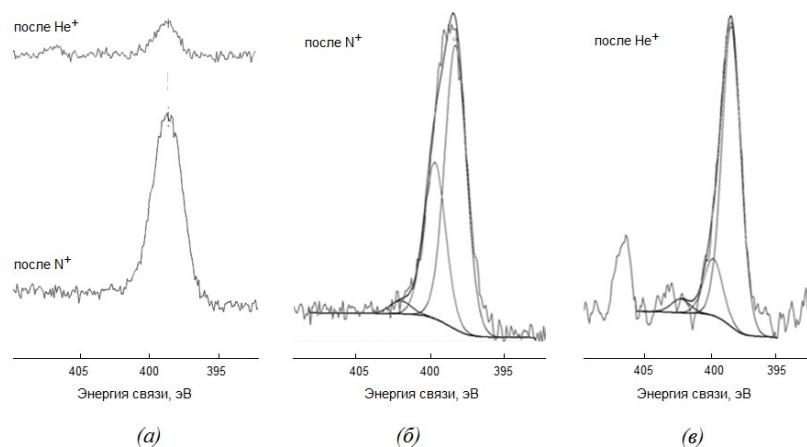


Рис. 3. Сравнение пиков $N1s$ до и после обработки ионами азота и гелия (а), а также результаты разложения пиков $N1s$ поверхности образцов по химическим состояниям после обработки ионами азота образца № 2 (б) и гелия образца № 3 (в)

Таблица 2

Содержание функциональных групп азота и энергии связи на поверхности образцов после облучения ионами азота и гелия

Группы	Энергия связи, эВ	Обработка N^+ , эВ	Обработка He^+ , эВ
$C-N$	398,4	62,65	80,98
$C=N$	399,8	34,48	15,28
$N-O$ или $N-N$	402,2	2,87	3,74

На рисунке 4 представлены спектры СКР поликристаллического алмаза после облучения ионами N^+ (образец № 2) и после облучения образца № 2 ионами He^+ (образец № 3). В спектрах, несмотря на частичное присутствие sp^2 -углерода (около 79% для образца № 2 и 83% для образца № 3), ввиду частичной графитизации слоя при формировании и последующем облучении ионами азота и гелия, доминирует по интенсивности (ввиду высокой степени кристалличности и соответственно узкого пика) пик алмаза в области 1333 cm^{-1} (вклад по площади в спектре лишь 21% для образца № 2 и 17% для образца № 3). Об образовании нанокластеров sp^2 -углерода свидетельствуют наличие характерных D-пика около 1460 cm^{-1} и G-пика в области $1560-1570\text{ cm}^{-1}$ [11-14].

На рисунке 5 представлены спектры люминесценции от различных центров в сравниваемых образцах № 2 и № 3.

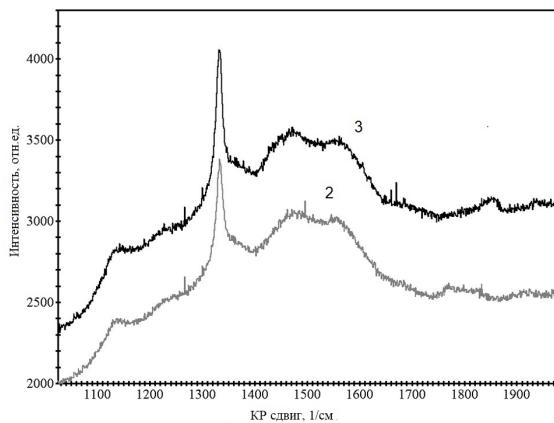


Рис. 4. Спектры СКР поликристаллического алмаза после облучения ионами N+ (образец № 2) и после облучения образца № 2 ионами He+ (образец № 3)

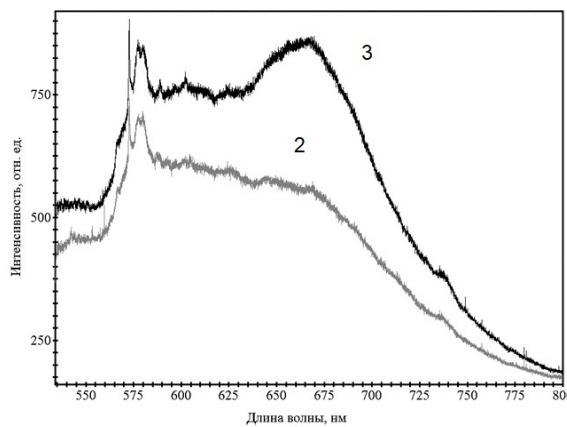


Рис. 5. Спектры люминесценции поликристаллического алмаза после облучения ионами N+ (образец № 2, линия 2) и после облучения образца № 2 ионами He+ (образец № 3, линия 3)

Анализ детального рассмотрения спектров в области 650–720 нм показал, что основной вклад в люминесценцию демонстрируют NV-центры [15, 16]. После бомбардировки ионами гелия интенсивность люминесценции от NV-центров увеличилась в 1,91 раза. Это указывает на преобразование комплексов ${}^* \pi$ C–N в NV-центры за счет генерации точечных радиационных дефектов – вакансий в процессе бомбардировки. Также следует указать на снижение вклада SiV-центров при обработке He+ почти в четыре раза. Несоответствие величин вкладов sp^3 и sp^2 углерода в СКР и РФЭС обусловлено тем, что СКР получает сигнал от слоя почти всей толщины – до ~ 1 мкм ввиду высокой прозрачности при 532 нм, а РФЭС дает информацию именно о приповерхностном слое толщиной несколько нанометров и функциональных группах на поверхности, которые не имеют существенного значения для СКР.

4. Заключение

Исследованы структура и свойства поверхностного слоя поликристаллической пленки алмаза после облучения ионами N+ и He+ с энергией 7 кэВ. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия показывает, что после обработки гелием ионно-легированного азотом слоя алмаза содержание sp^2 -углерода в нем увеличивается в 1,7 раз, а также происходит заметное снижение доли атомов углерода участвующих в C=N-связи, образовавшихся после легирования азотом. По данным СКР, после обработки He+ имеет место рост интенсивности люминесценции от NV-центров почти в два раза и снижение от SiV-центров

в четыре раза в сравнении с обработкой N+. Также по данным РФЭС установлено заметное ослабление образования связей $^*\pi$ C–N и C=N в процессе бомбардировки ионами He+.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания FSMR-2023-0002 (Спектроскопия комбинационного рассеяния алмазоподобных слоев).

Список литературы

1. *Zhirnov V.V. [et al.]*. Characterization of field emission cathodes with different forms of diamond coatings // *J. Vac. Sci. Technol. B. Microelectronics and nanometer structure*. 1999. V. 17. P. 666–669.
2. *Tyler T. [et al.]*. Electron emission from diamond nanoparticles on metal tips // *Appl. Phys. Lett.* 2003. V. 82. N 17. P. 2904–2906.
3. *Хамдохов З.М. [и др.]*. Особенности структуры и состава пленок, полученных с помощью аэрозольного распыления растворов коллоидного графита // *Известие вузов. Электроника*. 2022. № 5. С. 581–590.
4. *Борисов А.М. [и др.]*. Динамический отжиг ионно-индуцированных радиационных нарушений при повышенной температуре облучаемого алмаза // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2019. № 4. С. 44–52.
5. *Ku T.K. [et al.]*. Enhanced electron emission from phosphorus-and boron-doped diamond-clad Si field emitter arrays // *Thin solid films*. 1996. V. 290. P. 176–180.
6. *Фелдман Л., Майер Д.* Основы анализа поверхности и тонких пленок. Химия, 1989. 344 с.
7. *Klauser E. [et al.]*. Comparison of different oxidation techniques on single crystal and nanocrystalline diamond surfaces // *Diamond and Related Materials*. 2010. V. 19(5–6). P. 474–478.
8. *Biesinger M.C.* Assessing the robustness of adventitious carbon for charge referencing (correction) purposes in XPS analysis: Insights from a multi-user facility data review // *Appl. Surf. Sci.* 2022. V. 597. P. 153681.
9. *Zkria A. [et al.]*. Correlated electrical conductivities to chemical configurations of nitrogenated nanocrystalline diamond films // *Nanomaterials*. 2022. V. 12(5). P. 854.
10. *Peng J. [et al.]*. Influence of nitrogen doping on the thermal stability of hydrogenated amorphous diamond coating // *Thin Solid Films*. 2020. V. 709. P. 138188.
11. *Ferrari A.C., Robertson J.* Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon // *Physical review B*. 2000. V. 61(20). P. 14095.
12. *Файзрахманов И.А. [и др.]*. Синтез новых углерод-азотных нанокластеров при термическом отжиге в атмосфере азота алмазоподобных пленок углерода // *Физика и техника полупроводников*. 2003. Т. 37. № 2. С. 230–234.
13. *Пигулов Р.В. [и др.]*. РФЭС-анализ пленок алмазоподобного углерода // *Вестник Северо-Кавказского федерального университета*. 2014. № 5. С. 29–34.
14. *Ferrari A.C.* Determination of bonding in diamond-like carbon by Raman spectroscopy // *Diamond and related materials*. 2002. V. 11(3–6). P. 1053–1061.
15. *Jeske J. [et al.]*. Stimulated emission from nitrogen-vacancy centres in diamond // *Nature communications*. 2017. V. 8(1). P. 14000.
16. *Beha K. [et al.]*. Diamond nanophotonics // *Beilstein journal of nanotechnology*. 2012. V. 3(1). P. 895–908.

References

1. *Zhirnov V.V., et al.*, Characterization of field emission cathodes with different forms of diamond coatings. *J. Vac. Sci. Technol. B. Microelectronics and nanometer structure.* 1999. V. 17. P. 666–669.
2. *Tyler T., et al.*, Electron emission from diamond nanoparticles on metal tips. *Appl. Phys. Lett.* 2003. V. 82. N 17. P. 2904–2906.
3. *Khamdokhov Z.M., et al.*, Features of the structure and composition of films obtained using aerosol spraying of colloidal graphite solutions. *Izvestiya vuzov.Elektronika.* 2022. N 5. P. 581–590. (in Russian).
4. *Borisov A.M., et al.*, On the dynamic annealing of ion-induced radiation damage in diamond under irradiation at elevated temperatures. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 2019. V. 13. P. 306–313. (in Russian).
5. *Ku T.K., et al.*, Enhanced electron emission from phosphorus-and boron-doped diamond-clad Si field emitter arrays. *Thin solid films.* 1996. V. 290. P. 176–180.
6. *Feldman L., Mayer D.* Fundamentals of surface and thin film analysis. *Chemistry,* 1989. 344 p. (in Russian).
7. *Klauser E., et al.*, Comparison of different oxidation techniques on single crystal and nanocrystalline diamond surfaces. *Diamond and Related Materials.* 2010. V. 19(5–6). P. 474–478.
8. *Biesinger M.C.* Accessing the robustness of adventitious carbon for charge referencing (correction) purposes in XPS analysis: Insights from a multi-user facility data review. *Appl. Surf. Sci.* 2022. V. 597. P. 153681.
9. *Zkria A., et al.*, Correlated electrical conductivities to chemical configurations of nitrogenated nanocrystalline diamond films. *Nanomaterials.* 2022. V. 12(5). P. 854.
10. *Peng J., et al.*, Influence of nitrogen doping on the thermal stability of hydrogenated amorphous diamond coating. *Thin Solid Films.* 2020. V. 709. P. 138188.
11. *Ferrari A.C., Robertson J.* Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon. *Physical review B.* 2000. V. 61(20). P. 14095.
12. *Faizrakhmanov I.A., et al.*, Synthesis of new carbon-nitrogen nanoclusters by annealing diamond-like carbon films in nitrogen. *Semiconductors.* 2003. V. 37. P. 220–223. (in Russian).
13. *Pigulev R.V., et.al.*, XPS-analysis of diamond-like carbon films. *Bulletin of the North Caucasus Federal University.* 2014. N 5. P. 29–34. (in Russian)
14. *Ferrari A.C.* Determination of bonding in diamond-like carbon by Raman spectroscopy. *Diamond and related materials.* 2002. V. 11(3–6). P. 1053–1061.
15. *Jeske J., et.al.*, Stimulated emission from nitrogen-vacancy centres in diamond. *Nature communications.* 2017. V. 8(1). P. 14000.
16. *Beha K., et.al.*, Diamond nanophotonics. *Beilstein journal of nanotechnology.* 2012. V. 3(1). P. 895–908.

УДК 621.317.757

И. В. Эпов^{1,2}, А. Ю. Резник¹, А. С. Соболев¹¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
²АО НИИМЭ

**Метод измерения частоты максимального согласования
радиочастотной метки с помощью векторного
анализатора цепей и разработанных калибровочных
и измерительных плат**

Разработаны калибровочные и измерительная платы, выполненные в виде специальной микрополосковой линии передач, волновое сопротивление которой составляет 50 Ом. Каждая плата имеет соединение с гнездом «SMA-female» (сопротивление 50 Ом) для возможности подключения к измерительному устройству. Калибровочные платы представлены в трех видах: в первой плате электрическое соединение между проводниками линии передач отсутствует (режим холостого хода), во второй плате проводники линии передач на ее конце соединены проводящей полоской из меди методом пайки (режим короткого замыкания), в последнем случае электроды соединяются через резистор номиналом 50 Ом (режим нагрузки). Измерительная плата рассчитана на подключение к измерительному устройству, например, к векторному анализатору цепей. Предлагаемая конструкция плат может быть применима для измерения входного импеданса антенн различных форм или RFID-чипов с помощью векторного анализатора цепей.

Ключевые слова: радиочастотная метка, частота максимального согласования радиочастотной метки, импеданс, векторный анализатор цепей, измерительная плата, опорная плоскость

I. V. Epov^{1,2}, A. Yu. Reznik¹, A. S. Sobolev¹¹Moscow Institute of Physics and Technology
^{1,2}JSC MERI

**Method for measuring the resonant frequency of an RFID
tag using a vector network analyzer and developed
calibration and measuring boards**

Calibration and measuring boards, made in the form of a special microstrip transmission line, have been developed. A wave resistance of the line is 50 Ohm. Each board has a connection to the «SMA-female» socket (50 Ohm resistance) for connection to the measuring device. Calibration boards are presented in three types: in the first board, there is no electrical connection between the transmission line conductors (open type), in the second board, the transmission line conductors at its end are connected by a conductive strip of copper by soldering (short type), in the last case, the electrodes are connected via a 50 Ohm resistor (load type). The measuring board is designed to be connected to the measuring device, for example, to a vector circuit analyzer. The proposed design of the boards can be used to measure the input impedance of antennas of various shapes or RFID chips using a vector circuit analyzer.

Key words: Radio Frequency Identification – RFID, RFID-tag's resonant frequency, impedance, vector network analyzer, measuring board, reference plane.

1. Введение

Радиочастотная идентификация (Radio Frequency IDentification или сокращенно RFID) — технология, позволяющая удаленно идентифицировать промаркованные RFID-меткой различные объекты посредством обмена радиосигналами между радиометкой и считывателем (или ридером). В общем случае RFID-метка прикрепляется к поверхности объекта, который необходимо идентифицировать, и далее информация от нее считывается ридером, с которым уже непосредственно взаимодействует пользователь.

Конструкция RFID-метки состоит из антенны и микросхемы. Антenna принимает радиочастотный сигнал от считывателя, преобразуя его в электрический ток, который поступает на микросхему и запитывает ее, что позволяет микросхеме сформировать ответ считывателю на его запрос. Микросхема отвечает за хранение индивидуальных данных радиометки (имя, номер и т.д.) и их передачу к считывателю. Большинство готовых решений из представленных RFID-меток работают в двух диапазонах частот: HF (13.56 МГц) и UHF-диапазонах (867–920 МГц) [1].

Основными параметрами RFID-метки являются ее дальность считывания и частота максимального согласования (далее ЧМС). Дальность считывания (максимальная дальность считывания) радиометки — максимальное расстояние между меткой и считывателем, при котором возможна идентификация радиометки. ЧМС — это частота радиосигнала, при котором достигается наибольшая дальность считывания радиометки. Оба параметра зависят от конфигурации радиометки и считывателя, а именно от таких величин как: выходная мощность сигнала ридера, коэффициент усиления антенны ридера, согласования между микросхемой и антенной радиометки и многих других переменных.

Стоит отметить различие в определениях резонансной частоты для RFID-метки и антены, как излучающего устройства. В первом случае ЧМС определяется согласованием микросхемы и антены, образующих вместе колебательный контур. Во втором случае резонансная частота определяется характеристикой входного импеданса антены: при резонансе импеданс становится действительным, а вне резонанса в нем появляется индуктивная составляющая [2].

Актуальность работы заключается в том, что для RFID-антенн и микросхем отсутствуют разъемы, к которым есть возможность подключиться и измерить импеданс. В работе предложен и рассмотрен метод определения частоты максимального согласования RFID-метки с помощью векторного анализатора цепей и разработанных измерительных плат, предназначенных для измерения импеданса RFID-чипа или антены RFID-метки. Применяя данный метод, можно создавать различные топологии RFID-меток, заранее определяя их ЧМС в широком диапазоне. Преимуществом данного метода является возможность исследования RFID-меток с помощью общедоступных векторных анализаторов цепей и предложенных конструкций калибровочных и измерительной плат без использования специального оборудования, например «Voyantic Tagformance Pro».

2. Основные параметры RFID-метки

Как было ранее упомянуто, основными параметрами RFID-метки являются ее дальность считывания и ЧМС. Дальность считывания RFID-метки, находящейся в свободном пространстве, можно оценить с помощью формулы Фрииса [3], [4]:

$$R = \frac{\lambda}{4\pi} \sqrt{\frac{P_r G_r G_a \tau}{P_{th}}}, \quad (1)$$

где λ — длина волны радиосигнала, P_r — мощность, поступающая на антенну считывателя, P_{th} — минимальная мощность, необходимая микросхеме для работы, G_r — коэффициент усиления антенны считывателя, G_a — коэффициент усиления антенны RFID-метки, τ — коэффициент согласования между микросхемой и антенной радиометки (коэффициент передачи мощности), который меньше или равен единице.

Для определения коэффициента согласования между микросхемой и антенной RFID-метки последнюю рассматривают в виде последовательного RLC-контура (рис. 1), в котором микросхема представлена в виде емкости и резистора, а антenna – в виде индуктивности и резистора.

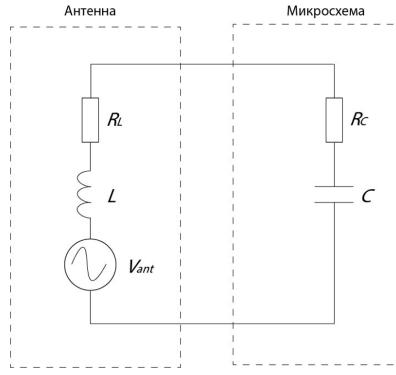


Рис. 1. Изображение эквивалентной схемы RFID-метки с микросхемой и антенной [3]

Обе части RFID-метки имеют собственный импеданс:

$$Z_C = R_C + jX_C = R_C - \frac{j}{\omega C}, \quad (2)$$

$$Z_L = R_L + jX_L = R_L + j\omega L, \quad (3)$$

где C – емкость микросхемы, L – индуктивность антенны, ω – круговая частота радиосигнала. В таком случае коэффициент согласования определяется как отношение мощности, поступающей от антенны радиометки к микросхеме, к ее максимальному значению по следующей формуле [3]:

$$\tau = \frac{4R_C R_L}{|Z_C + Z_L|^2} = \frac{4R_C R_L}{(R_C + R_L)^2 + (X_C + X_L)^2}. \quad (4)$$

Из данной формулы следует, что в случае, когда мнимые части импедансов микросхемы и антенны RFID-метки равны друг другу по модулю и противоположны по знаку, то при постоянных значениях действительных частей величина коэффициента передачи мощности τ достигает максимума при данных условиях. Если данные импедансы являются комплексно-сопряженными, то значение параметра τ равно единице, и достигается максимально возможная дальность считывания RFID-метки. В таком случае говорят, что достигается полное согласование между антенной и микросхемой. ЧМС согласно (1) – (4) определяется согласованием реактивных частей импедансов и может быть оценена с помощью формулы Томпсона.

$$f = \frac{1}{2\pi\sqrt{LC}}. \quad (5)$$

В действительности очень редко удается добиться случая, когда на необходимой частоте импедансы микросхемы и антенны будут комплексно-сопряжены. Во многих RFID-метках необходимая ЧМС и дальность считывания определяются лишь согласованием реактивных частей импедансов. Что касается активных частей импедансов, то разработчики стараются добиться ситуации, когда на полученной ЧМС они будут принимать не равные, но хотя бы близкие значения. Очевидно, что при этом наибольшее значение коэффициента передачи мощности будет меньше единицы, и максимально возможная дальность считывания не будет достигнута. В данной работе предлагается метод определения ЧМС RFID-метки, исходя из результатов измерения импедансов микросхемы и антенны с помощью векторного анализатора цепей и разработанных плат и последующего расчета ЧМС радиометки.

3. Применение векторного анализатора цепей для измерения импеданса исследуемого устройства

При выполнении работы использовался векторный анализатор цепей «Обзор TR1300/1» с диапазоном рабочих частот от 0.3 до 1300 МГц, который в однопортовом режиме работы подает на выходной порт испытательный сигнал на заданной частоте, а затем измеряет амплитуду и фазу отраженного от порта сигнала. К выходному порту с помощью коаксиального кабеля подключается измерительная плата, к которой методом пайки подключено исследуемое устройство. В данном режиме работы с помощью векторного анализатора можно определить входной импеданс антенны или микросхемы на нужной частоте, используя соотношение между коэффициентом отражения и импедансом нагрузки:

$$\dot{\Gamma} = \frac{Z_l - Z_0}{Z_l + Z_0}, \quad (6)$$

где Z_l — импеданс подключенного устройства, Z_0 — опорный импеданс векторного анализатора, равный 50 Ом. Визуально на экране компьютера, на котором установлена программа управления анализатором, результат измерения появляется в виде диаграммы Вольперта — Смита, которая предназначена для определения импеданса нагрузки в линии по значениям коэффициента бегущей волны. Для работы используется коаксиальный кабель с разъемами N-male и SMA-male длиной 1 м и волновым сопротивлением 50 Ом, потери сигнала которого не превышают 0.15 дБ. Для корректных измерений импеданса устройства и уменьшения погрешностей всей измерительной системы перед работой необходимо произвести калибровку векторного анализатора с помощью разработанных калибровочных и измерительных плат. В данном случае разработанная оснастка (калибровочные и измерительная платы) сдвигает опорную плоскость векторного анализатора к точкам подключения RFID-чипа или антенны (рис. 2).

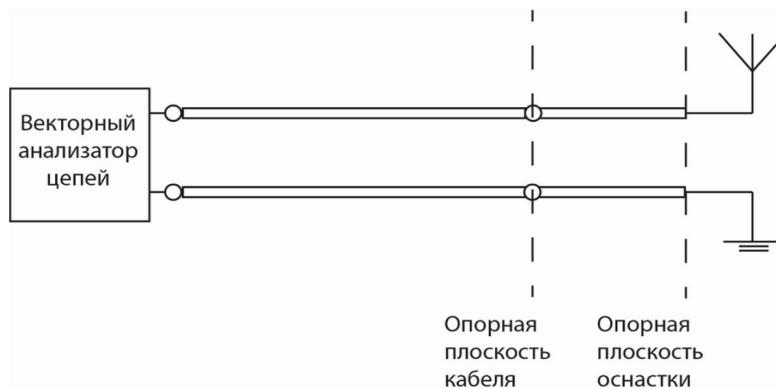


Рис. 2. Изображение схемы подключения разработанной оснастки к исследуемой антенне и векторному анализатору цепей через коаксиальный кабель

Измерительная и калибровочные платы сделаны в виде специальной микрополосковой линии передач (рис. 3), которая имеет волновое сопротивление 50 Ом и соединена с гнездом «SMA-female» (сопротивление 50 Ом) методом пайки. В качестве диэлектрика использовался материал «Arlon AD255C» толщиной 2.032 мм с диэлектрической проницаемостью 2.55. Электроды выполнены из меди и имеют толщину 18 мкр. Ширина верхнего электрода составляет 5.7 мм, а нижнего — 50 мм. Волновое сопротивление данной структуры согласно модели Хаммерстада — Дженсена [5] составляет 50 Ом.

Приведенная здесь конструкция измерительной платы позволяет методом пайки соединить ее с большим числом различных вариантов исследуемых антенн. Также имеется возможность использования данной конструкции платы для измерения импеданса микросхемы в корпусе, выводы которой находятся на расстоянии около 2 мм, например, для корпуса SOT 143.

Ключевым недостатком предлагаемой оснастки является несбалансированность разработанной линии передач. Микрополосковая линия передач в своей конструкции имеет проводники, отличающиеся друг от друга погонным сопротивлением и размерами, что приводит к наличию посторонних шумов в самой линии и взаимодействию линии с подключенными исследуемым устройством. Данные помехи приводят к искажению результатов измерений импеданса исследуемого устройства. Ключевым допущением предлагаемой работы является пренебрежение влиянием упомянутых шумов на точность определения ЧМС RFID-метки с помощью измерения импеданса ее антенны и микросхемы.

Калибровочные платы были выполнены в трех экземплярах: первая – для режима «холостой ход», где замыкание между электродами отсутствует; вторая – для режима «короткое замыкание», где на конце линии передач электроды соединяются проводящей полоской из меди методом пайки; и для режима «нагрузка», где на конце линии методом пайки электроды соединяются через резистор номиналом 50 Ом.

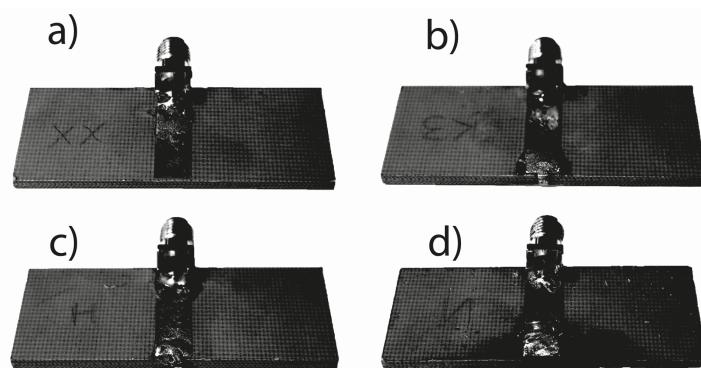


Рис. 3. Изображение разработанных плат: а) калибровочная плата для режима «холостой ход», б) калибровочная плата для режима «короткое замыкание», в) калибровочная плата для режима «нагрузка», г) измерительная плата

После калибровки векторного анализатора с помощью разработанных калибровочных плат к нему подключается измерительная плата вместе с исследуемым устройством. В данной работе такими устройствами являются антенна или микросхема RFID-метки.

4. Методика определения рабочей частоты RFID-метки

Для проведения измерений использовалась экспериментальная радиометка UHF диапазона частот, антенна которой имеет рамочную форму, внутри которой находится диэлектрик – полиэтилен высокого давления с диэлектрической проницаемостью 2.2. В качестве микросхемы был выбран микрочип MIK601 в корпусе SOT 143 (рис. 4).



Рис. 4. Изображение экспериментальной RFID-метки

В первую очередь было проведено измерение дальности считывания данной радиометки в безэховой камере с помощью специального прибора «Voyantic Tagformance Pro», работающего в диапазоне частот от 800 до 1000 МГц. Результаты измерения представлены на рис. 5. Данный прибор-считыватель постепенно уменьшает с помощью аттенюатора мощность сигнала с заданной частотой, поступающую на антенну прибора, затем регистрирует ее минимальное значение, при котором все еще возможно считывание метки и далее, сравнивая ее с калибровочным значением, с помощью (1) рассчитывает теоретическое значение дальности считывания метки на заданной частоте.

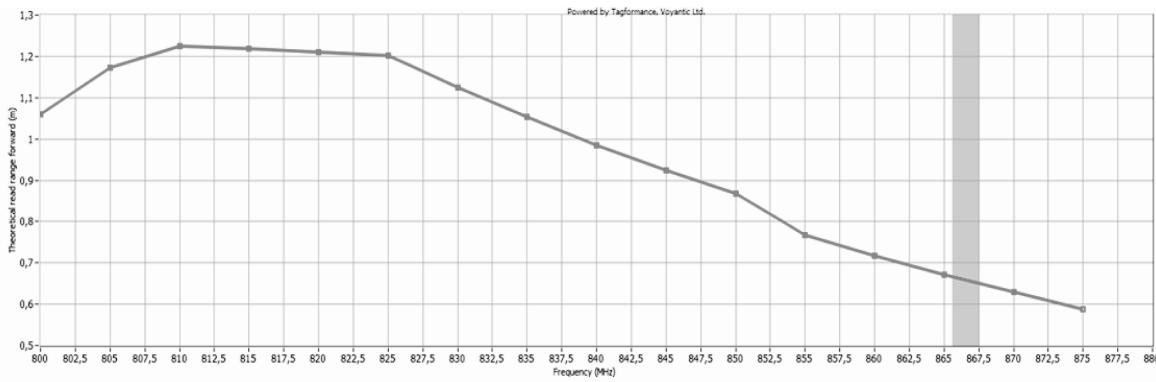


Рис. 5. График зависимости дальности считывания экспериментальной метки от частоты

Из графика видно, что экспериментальная радиометка достигает максимальной дальности считывания 1,2 метра на частоте, равной 810 МГц, причем данное значение дальности практически сохраняется в диапазоне частот от 810 до 820 МГц. Для определения ЧМС представленной радиометки с помощью векторного анализатора на выбранных частотах сначала был измерен импеданс антенны, а затем – микросхемы. Изображение измерительной платы с припаянной антенной в точках, где к последней подключается микрочип, представлено на рис. 6. Аналогичным образом к измерительной плате присоединяется микросхема (рис. 7).

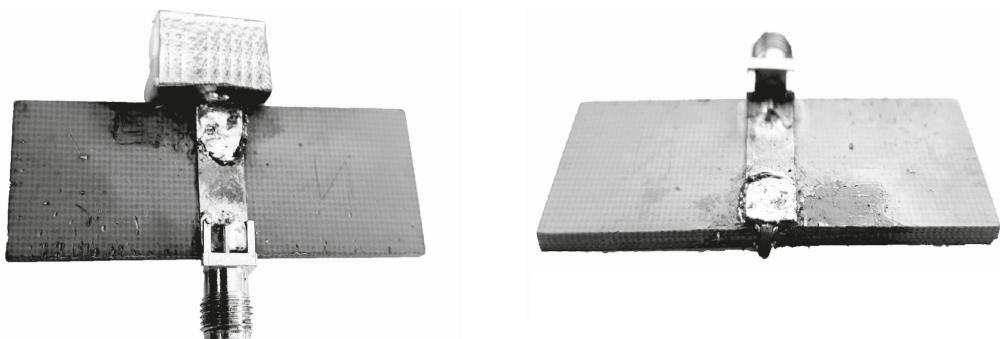


Рис. 6. Изображение измерительной платы, к которой присоединена микросхема МИК601 к которой присоединена антенна

Рис. 7. Изображение измерительной платы, в корпuse SOT 143

Так как ЧМС должна иметь значение (рис. 5), близкое к диапазону 810–820 МГц (т.к. в данном диапазоне дальность считывания имеет максимальное значение), то в качестве точек измерения значений импедансов предлагаются следующие значения: 800, 810, 820, 867, 900, 1000 МГц. Результат измерений импеданса антенны радиометки с помощью векторного анализатора показан в виде графика на рис. 8. Аналогичный результат для микросхемы МИК 601 представлен на рис. 9. Для наглядности все полученные результаты продублированы в табл. 1. К измерениям также добавлены рассчитанные по формуле (4) значения коэффициента передачи мощности для каждой измеренной частоты.

Наилучшее совпадение мнимых частей импедансов микросхемы и антенны RFID-метки

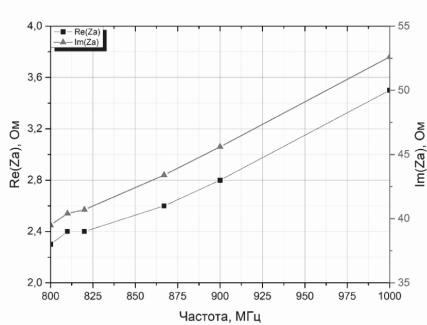


Рис. 8. Изображение измерительной платы, к которой присоединена антенна

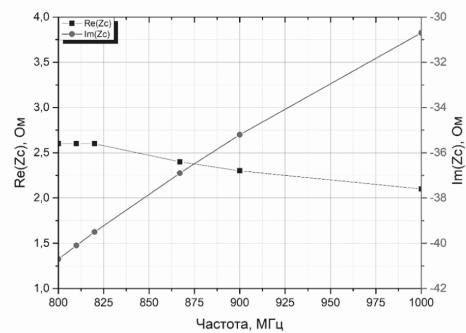


Рис. 9. Изображение измерительной платы, к которой присоединена микросхема МК601 в корпусе SOT 143

по модулю достигается на частоте 810 МГц (табл. 1).

Таблица 1

Результаты измерений импедансов антенны и микросхемы радиометки

f , МГц	$Re(Z_a)$, Ом	$Im(Z_a)$, Ом	$Re(Z_c)$, Ом	$Im(Z_c)$, Ом	Коэффициент передачи мощности
800	2.3	39.5	2.6	-40.7	0.94
810	2.4	40.4	2.6	-40.1	0.99
820	2.4	40.7	2.6	-39.5	0.94
867	2.6	43.4	2.4	-36.9	0.37
900	2.8	45.6	2.3	-35.2	0.19
1000	3.5	52.6	2.1	-30.7	0.06

Для данной радиометки, исходя из (5), эта частота будет являться частотой максимального согласования, что хорошо согласовывается с (1) и результатом измерения дальности считывания метки с помощью считывателя Voyantic Tagformance Pro (рис. 5). Также данный результат позволяет говорить о справедливости предложенного допущения о пренебрежении влиянием посторонних шумов в разработанной оснастке, вызванной ее несбалансированностью.

5. Заключение

Разработана оснастка в виде калибровочных и измерительных плат, выполненных в виде микрополосковой линии передач. Калибровочные платы настроены на режимы холостого хода, короткого замыкания и нагрузки (50 Ом). Измерительная плата предназначена для подключения к исследуемому устройству – антенне RFID-метки или микросхемы. Предлагаемая оснастка имеет возможность подключения к векторному анализатору цепей через коаксиальный кабель для последующего измерения импеданса устройства.

В работе представлено возможное применение оснастки для определения частоты максимального согласования RFID-метки. Полученные результаты показали, что проводимые с помощью разработанных плат измерения частоты максимального согласования обладают высокой точностью.

Список литературы

1. *Rao K.V.S., Nikitin P.V., Lam S.F.* Antenna design for UHF RFID tags: A review and a practical application // IEEE Transactions on antennas and propagation. 2005. V. 53, N 12. P. 3870–3876.
2. *Ротхаммель К., Кришке А.* Антенны. Учебное пособие. Том 1. ДМК Пресс, 2009.
3. *Yeoman M.S., O'neill M.A.* Impedance matching of tag antenna to maximize RFID read ranges & design optimization // 2014 COMSOL Conference, Cambridge, UK. 2014.
4. *Андренко А.С. [и др.]*. Согласование антенны тэга с микрочипом для систем радиочастотной идентификации // Журнал радиоэлектроники. 2007. № 12.
5. *Hammerstad E., Jensen O.* Accurate models for microstrip computer-aided design // 1980 IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest. IEEE. 1980. P. 407–409.

References

1. *Rao K.V.S., Nikitin P.V., Lam S.F.* Antenna design for UHF RFID tags: A review and a practical application. IEEE Transactions on antennas and propagation. 2005. V. 53, N 12. P. 3870–3876.
2. *Rothammel K., Krischke A.* Antennas. Study guide. Volume 1. DMK Press, 2009. (in Russian).
3. *Yeoman M.S., O'neill M.A.* Impedance matching of tag antenna to maximize RFID read ranges & design optimization. 2014 COMSOL Conference, Cambridge, UK. 2014.
4. *Andreenko A.S., et al.*, Matching the tag antenna with a microchip for radio frequency identification systems. Journal of Radio Electronics. 2007. N 12. (in Russian).
5. *Hammerstad E., Jensen O.* Accurate models for microstrip computer-aided design. 1980 IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest. IEEE. 1980. P. 407–409.

Поступила в редакцию 22.11.2023

Сведения об авторах статей (на момент подачи статьи)

Метод порождения графов с контролем статистических свойств

Бишуку Антон Юрьевич (МФТИ) anton.bishuk@mail.ru

Зухба Анастасия Викторовна (МФТИ) azukhba@mail.ru

Максимальные индуцированные пути в случайных двудольных графах

Буитраго Оропеса Хуан Карлос (МФТИ) buitrago.ohk@phystech.edu

Аппроксимация диффузионного процесса на бесконечномерном пространстве при помощи усреднения случайных сдвигов общего вида

Бусовиков Владимир Михайлович (МФТИ) treonon38@mail.ru

Глубокое обучение в задаче прогнозирования финансовых временных рядов

Зелезецкий Даниил Владимирович (МФТИ) zlc.28.02@gmail.com

Оптимизация стохастического градиентного бустинга с помощью out-of-sample оценок качества

Ибрагимов Булат Ленарович (МФТИ) ibrbulat@yandex.ru

Гусев Глеб Геннадьевич (Лаборатория Искусственного Интеллекта, Сбер) gleb57@gmail.com

Почти достоверная модальная логика шкал Крипке с функциональным отношением

Смосарев Владислав Владимирович (МФТИ) vnvdvc@gmail.com

Применение подхода двойного машинного обучения для задачи анализа зависимости между отклонениями от непокрытого паритета процентных ставок и степенью открытости экономики

Ченцов Александр Михайлович (МФТИ) achensov@nes.ru

Торопов Никита Игоревич (МФТИ) ntoropov@nes.ru

Оценки пороговых вероятностей для свойств дробной раскрашиваемости случайных гиперграфов

Шабанов Дмитрий Александрович (МФТИ) shabanov.da@mipt.ru

Шайхеева Талия Маратовна (МФТИ) talia.shaikheeva@yandex.ru

Точное решение уравнений Навье – Стокса, описывающее закрученные торнадообразные течения вязкого газа

Брутян Мурад Абрамович (ФАУ «ЦАГИ», МФТИ) m_brut@mail.ru

Ибрагимов Умар Гарунович (ФАУ «ЦАГИ») umar.ibragimov94@yandex.ru

Анализ системы амортизации инерциального прибора как решение задачи многокритериальной оптимизации

Илюшин Павел Алексеевич (АО «ЦЭНКИ» – филиал «НИИ ПМ имени академика В.И. Кузнецова») P.Ilyushin@russian.space

Наумченко Владислав Павлович (АО «ЦЭНКИ» – филиал «НИИ ПМ имени академика В.И. Кузнецова») V.Naumchenko@russian.space

Пикунов Дмитрий Григорьевич (АО «ЦЭНКИ» – филиал «НИИ ПМ имени академика В.И. Кузнецова») D.Pikunov@russian.space

Ab initio исследование разогретого плотного аргона

Сартан Роман Александрович (МФТИ, ОИВТ РАН) r.sartan@gmail.com

Особенности структуры композитных пленок Cu-C, полученных ионно-плазменным методом

Хамдохов Залим Мухамедович (Институт информатики и проблем регионального управления КБНЦ РАН) hamdokhov@mail.ru

Маргушев Заур Чамилович (Институт информатики и проблем регионального управления КБНЦ РАН) zmargush@yandex.ru

Ионно-плазменный метод модификации слоя на основе поликристаллической алмазной пленки

Хамдохов Залим Мухамедович (Институт информатики и проблем регионального управления КБНЦ РАН) hamdokhov@mail.ru

Маргушев Заур Чамилович (Институт информатики и проблем регионального управления КБНЦ РАН) zmargush@yandex.ru

Калаажеков Замир Хамидбекович (Институт информатики и проблем регионального управления КБНЦ РАН) z-kalazh@yandex.ru

Ильичев Эдуард Анатольевич (МИЭТ) kfn@miee.ru

Ромашкин Алексей Валентинович (МИЭТ) romaleval@gmail.com

Метод измерения частоты максимального согласования радиочастотной метки с помощью векторного анализатора цепей и разработанных калибровочных и измерительных плат

Эпов Илья Владимирович (МФТИ, АО НИИМЭ) iepov@niiime.ru

Резник Анатолий Юрьевич (МФТИ) areznik@mikron.ru

Соболев Александр Сергеевич (МФТИ) sobolev.as@mipt.ru

Ссылки на опубликованные статьи (в соответствии с ГОСТ Р 7.0.5-2008)

Бишукук А.Ю., Зухба А.В. Метод порождения графов с контролем статистических свойств // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 5–16.

Bishuk A.Y., Zukhba A.V. Method for generating graphs with control of statistical properties. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 5–16.

Буитраго Оропеса Х.К. Максимальные индуцированные пути в случайных двудольных графах // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 17–23.

Buitrago Oropesa J.C. Maximum induced paths in random bipartite graphs. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 17–23.

Бусовиков В.М. Аппроксимация диффузионного процесса на бесконечномерном пространстве при помощи усреднения случайных сдвигов общего вида // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 24–34.

Busovikov V.M. Approximation of a diffusion process on an infinite-dimensional space using averaging of random shifts of general form. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 24–34.

Зелезецкий Д.В. Глубокое обучение в задаче прогнозирования финансовых временных рядов // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 35–48.

Zelezetsky D.V. Deep learning in financial time series forecasting. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 35–48.

Ибрагимов Б.Л., Гусев Г.Г. Оптимизация стохастического градиентного бустинга с помощью out-of-sample оценок качества // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 49–56.

Ibragimov B.L., Gusev G.G. Optimizing stochastic gradient boosting with out-of-sample evaluation metrics. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 49–56.

Слюсарев В.В. Почти достоверная модальная логика шкал Кripке с функциональным отношением // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 57–71.

Sliusarev V.V. Almost sure modal logic of Kripke frames with a functional relation. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 57–71.

Ченцов А.М., Торопов Н.И. Применение подхода двойного машинного обучения для задачи анализа зависимости между отклонениями от непокрытого паритета процентных ставок и степенью открытости экономики // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 72–80.

Chentsov A.M., Toropov N.I. Estimation of causal dependence between economic openness and deviations from uncovered interest parity using double machine learning. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 72–80.

Шабанов Д.А., Шайхеева Т.М. Оценки пороговых вероятностей для свойств дробной раскрашиваемости случайных гиперграфов // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 81–91.

Shabanov D.A., Shaikheeva T.M. Bounds for threshold probabilities for fractional colorability properties of random hypergraphs. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 81–91.

Брутян М.А., Ибрагимов У.Г. Точное решение уравнений Навье – Стокса, описывающее закрученные торнадообразные течения вязкого газа // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 92–104.

Brutyan M.A., Ibragimov U.G. Exact solution of the Navier – Stokes equations for rotational tornado-like flow of a viscous gas. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 92–104.

Илюшин П.А., Наумченко В.П., Пикунов Д.Г. Анализ системы амортизации инерциального прибора как решение задачи многокритериальной оптимизации // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 105–117.

Ilushin P.A., Naumchenko V.P., Pikunov D.G. Inertial measurement unit amortization system analysis as a solution to the multi-criteria optimization problem. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 105–117.

Сартан Р.А. *Ab initio* исследование разогретого плотного аргона // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 118–126.

Sartan R.A. *Ab initio* study of warm dense argon. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 118–126.

Хамдохов З.М., Маргушев З.Ч. Особенности структуры композитных пленок Cu–C, полученных ионно-плазменным методом // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 127–132.

Khamdokhov Z.M., Margushev Z.Ch. Features of the structure of Cu–C composite films obtained by the ion-plasma method. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 127–132.

Хамдохов З.М., Маргушев З.Ч., Калаажоков З.Х., Ильичев Э.А., Ромашкин А.В. Ионно-плазменный метод модификации слоя на основе поликристаллической алмазной пленки // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 133–139.

Khamdokhov Z.M., Margushev Z.Ch., Kalazhokov Z.Kh., Ilyichev E.A., Romashkin A.V. Ion-plasma layer modification method based on polycrystalline diamond film. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 133–139.

Эпов И.В., Резник А.Ю., Соболев А.С. Метод измерения частоты максимального согласования радиочастотной метки с помощью векторного анализатора цепей и разработанных калибровочных и измерительных плат // Труды МФТИ. 2024. Т. 16, № 3. С. 140–147.

Eporov I.V., Reznik A.Yu., Sobolev A.S. Method for measuring the resonant frequency of an RFID tag using a vector network analyzer and developed calibration and measuring boards. Proceedings of MIPT. 2024. V. 16, N 3. P. 140–147.

ТРУДЫ МФТИ

ТОМ 16, № 3(63)

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи,
информационных технологий и массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации ПИ №ФС 77-35274 от 10.02.2009

Подписные индексы Э88583, Э88584 в Объединённом каталоге «Пресса России»

Журнал «Труды МФТИ» входит в базу данных РИНЦ
(Российский Индекс Научного Цитирования)
и доступен в электронной библиотеке elibrary.ru.

Журнал Труды МФТИ входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и
изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты
диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук –
Перечень ВАК от 2023 г.

Первоначально журнал Труды МФТИ был включен в Перечень ВАК в мае 2010 года.
В соответствии с распоряжением Минобрнауки России от 28 декабря 2018 г. № 90-р
журнал Труды МФТИ сохранен в Перечне ВАК с уточненными специальностями.

Журнал Труды МФТИ включен в базу данных RSCI – Список российских журналов,
вашедших в Russian Science Citation Index (RSCI) на платформе Web of Science.

Редакторы и корректоры: *В. А. Дружинина, И. А. Волкова, Н. Е. Кобзева*

Компьютерная верстка: *Е. А. Казённовой*

Подписано в печать 27.09.2024. Формат 60 × 84¹/8.

Усл. печ. л. 19,0. Тираж 40 экз. Заказ № 192.

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

141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9

Телефон: +7(495) 408-58-22

E-mail: journal_trudy@mipt.ru

Сайт: <http://mipt.ru/science/trudy/>

Отпечатано в полном соответствии с качеством предоставленного электронного оригинала-макета
Отдел оперативной полиграфии «Физтех-полиграф»

141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9

Телефон: +7(495) 408-84-30

E-mail: polygraph@mipt.ru