

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «ИНФОРМАТИКА И УПРАВЛЕНИЕ»
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР им. А.А. ДОРОДНИЦЫНА

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ»

КОМПЬЮТЕРНАЯ АЛГЕБРА

Материалы международной конференции
Москва, 29 июня – 2 июля 2016



МОСКВА

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«ИНФОРМАТИКА И УПРАВЛЕНИЕ»
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР им. А. А. ДОРОДНИЦЫНА

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ»

КОМПЬЮТЕРНАЯ АЛГЕБРА COMPUTER ALGEBRA

Материалы международной конференции
International Conference Materials

Москва, 29 июня – 2 июля 2016 года
Moscow, June 29 – July 2, 2016



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР им. А. А. ДОРОДНИЦЫНА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
МОСКВА 2016

Ответственные редакторы
доктор физ.-матем. наук С. А. Абрамов,
доктор физ.-матем. наук Л. А. Севастьянов

Компьютерная алгебра. Сборник научных статей. Труды международной конференции «Компьютерная алгебра». Москва, 29 июня — 2 июля 2016 г. Под ред. С. А. Абрамова и Л. А. Севастьянова. М.: ФИЦ ИУ РАН, 2016.

Международная конференция проводится совместно Вычислительным центром им. А. А. Дородницына ФИЦ «Информатика и управление» РАН и Российским университетом дружбы народов при поддержке РФФИ. В представленных на конференции докладах обсуждаются актуальные проблемы компьютерной алгебры — научной дисциплины, алгоритмы которой ориентированы на точное решение математических задач с помощью компьютера.

Макет и компьютерная верстка: Д. С. Кулябов

Рецензенты: Ю. А. Трусова, К. П. Ловецкий

Научное издание

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Вычислительный центр им. А. А. Дородницына, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, 2016

Responsible editors
Doctor of Physical and Mathematical Sciences S. A. Abramov,
Doctor of Physical and Mathematical Sciences L. A. Sevastyanov

Computer algebra. A book of scientific articles. Proceedings of the International Conference “Computer Algebra.” Moscow, 29 June – 2 July 2016. Ed. S. A. Abramov and L. A. Sevastyanov. Moscow: Federal Research Center “Computer Science and Control” of RAS.

The international conference is organized jointly by Dorodnicyn Computing Center of Federal Research Center “Computer Science and Control” of RAS and Peoples’ Friendship University of Russia with a support of Russian Federal Property Fund. The talks presented at the conference discuss actual problems of computer algebra—the discipline whose algorithms are focused on the exact solution of mathematical problems using a computer.

Layout and DTP: D. S. Kulyabov

Reviewers: Yu. O. Trusova, K. P. Lovetskiy

Scientific publication

© Federal State Institution of Science Dorodnicyn Computing Centre, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 2016

Оглавление

Пленарные доклады

Брюно А. Д. Выпуклый многогранник в асимптотическом анализе	8
Евтушенко Ю. Г., Zubov B. И. Об обобщенной методологии быстрого автоматического дифференцирования	12
Гердт В. П. Описание перепутанных двухкубитных состояний в терминах полиномиальных инвариантов: вызов для компьютерной алгебры	16
Кулябов Д. С., Королькова А. В., Севастьянов Л. А. Свойства тензорных систем компьютерной алгебры	19
Ли З., Ву М. Преобразование линейных функциональных систем в полностью интегрируемые системы	22
Малых М. Д. Об интегрировании обыкновенных дифференциальных уравнений	25
Прокопена А. Н. Методы компьютерной алгебры для моделирования в небесной механике	29

Сессионные доклады

Абрамов С. А., Петковшек М., Закрайшек Х. Лиувиллевы последовательности и конволюция	33
Батхин А. В. Резонансное множество многочлена и его приложения	36
Богданов Д. В., Садыков Т. М. Вычисление полиномиальных решений гипергеометрических систем	39
Гусев А. А., Чулуунбаатар О., Виницкий С. И., Хай Л. Л., Дербов В. Л. Численно-аналитический алгоритм решения задачи Штурма-Лиувилля при большом значении параметра	41
Гусев А. А., Чулуунбаатар О., Виницкий С. И., Хай Л. Л., Дербов В. Л. Алгоритмы решения краевых задач для системы ОДУ второго порядка с кусочно-постоянными потенциалами	44
Еферица Е. Г., Королькова А. В., Кулябов Д. С., Севастьянов Л. А. Системы компьютерной алгебры при исследовании статистических систем	47
Горбачев А. В., Севастьянов Л. А. Применение методов компьютерной алгебры для расчета переходных вероятностей атомов и ионов с одним валентным электроном в модели квантовых измерений	50
Гонцов Р. Р., Горючкина И. В. Теорема Майе-Мальгранжа для обобщенных степенных рядов	53
Гутник С. А., Сарычев В. А. Применение методов компьютерной алгебры для исследования влияния аэродинамических сил на стационарные движения спутника	56
Ильченко Е. А. О распараллеливании рекурсивных блочных алгебраических алгоритмов: алгоритмы и эксперименты	60
Хворов С. А. Параллельный алгоритм обращения матрицы: результаты экспериментов	63
Корняк В. В. Модель квантовой эволюции, основанная на симметрической группе	66
Малашонок Г. И. Math Partner — компьютерная алгебра нового поколения	69
Малашонок Н. А. Преобразование Лапласа при решении дифференциальных уравнений с запаздывающими аргументами	72
Малых М. Д. Курс математического анализа с точки зрения компьютерной алгебры	75
Нормов А. И. Аналитическая сложность кластерных деревьев в задачах анализа данных большого объема	77
Панферов А. А. Определение спутниковых неизвестных в линейных дифференциальных системах	79
Парамонов С. В. Об универсальном знаменателе решений в виде рациональных функций уравнений в частных производных и разностях	82
Погудин Г. А. Дифференциальный аналог теоремы о примитивном элементе	85
Рябенко А. А. Построение разрешающих последовательностей для систем, заданных полиномами Ore	87
Штефанеску Д. Эффективное вычисление границ корней полиномов	90

Жуков Т. А., Садыков Т. М. Система синтеза текста на русском языке <code>passage.ru</code>	93
Севастьянов А. Л., Севастьянов Л. А., Тютюнник А. А. Вывод системы уравнений для коэффициентных функций метода поперечных сечений для интегрально–оптического волновода с помощью пакета символьных вычислений Maple	95
Зобнин А. И., Тихонова М. И. Базисы Гребнера некоторых параметрических семейств	98
Авторский указатель	101

УДК 519.6:530.145.7:531.19

Системы компьютерной алгебры при исследовании статистических систем

Е. Г. Ефери́на*, А. В. Коро́лькова*, Д. С. Куля́бов*[†], Л. А. Севастьянов*[‡]

* Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей,
Российский университет дружбы народов,
ул. Миклуто-Маклая, д.6, Москва, Россия, 117198

[†] Лаборатория информационных технологий,
Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

[‡] Лаборатория теоретической физики,
Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

Методика стохастизации одношаговых процессов базируется на разложении основного кинетического уравнения и получении приближенных моделей. Для исследования самого основного кинетического уравнения предлагается использовать статистическую теорию возмущений, подобную реализованной в рамках квантовой теории поля. Для этого описана методика и создан аналитический программный комплекс приведения основного кинетического уравнения к операторной форме в фокковском представлении. Для решения получившегося уравнения в рамках программного комплекса проводится генерация фейнмановских диаграмм для соответствующего порядка теории возмущений. В качестве системы символьных вычислений была применена система FORM.

Ключевые слова: стохастические дифференциальные уравнения; основное кинетическое уравнение; уравнение Фоккера–Планка; системы компьютерной алгебры; система FORM.

1. Введение

При стохастизации одношаговых процессов в результате получается три вида дифференциальных уравнений: основное кинетическое уравнение, уравнение типа уравнения Фоккера–Планка и стохастическое дифференциальное уравнение типа уравнения Ланжевена [1]. Последние два получаются как приближенный вариант основного кинетического уравнения. И если методы решения стохастических дифференциальных уравнений хорошо известны (например, стохастические методы Рунге–Кутты), то решение дифференциальных уравнений в частных производных представляет определенную проблему.

В качестве методики решения данных уравнений предлагается использовать методы статистической теории возмущений, подобные методам, разработанным в рамках квантовой теории поля [2, 3].

Основное кинетическое уравнение записывается в представлении Фока. Схемам взаимодействия ставятся в соответствие диаграммы Фейнмана. Далее для основного кинетического уравнения вычисляются фейнмановские диаграммы для соответствующего порядка теории возмущения. Построение фейнмановских диаграмм производится на основе системы компьютерной алгебры FORM [4, 5].

2. Представление Фока

Для реализации абстрактного подхода используется представление чисел заполнения. Для изменения состояния системы используют операторы рождения и уничтожения. Методика применения формализма вторичного квантования для некантовых систем (статистических, детерминированных) была рассмотрена в целом ряде статей [2, 6].

Взаимодействие элементов системы описывается с помощью схем взаимодействия (рис. 1 и 2):

$$I_j^{i\alpha} \varphi^j \xrightleftharpoons[-k_\alpha]{+k_\alpha} F_j^{i\alpha} \varphi^j, \quad (1)$$

здесь греческие индексы задают количество взаимодействий, а латинские — размерность системы. Коэффициенты ${}^+k_{\underline{\alpha}}$ и ${}^-k_{\underline{\alpha}}$ имеют смысл интенсивности (скорости) взаимодействия.

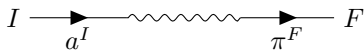


Рис. 1. Прямая реакция

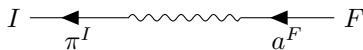


Рис. 2. Обратная реакция

Здесь используются операторы рождения (π) и уничтожения (a):

$$\pi |n\rangle = |n+1\rangle, \quad a |n\rangle = n |n-1\rangle, \quad [a, \pi] = 1. \quad (2)$$

В формализме чисел заполнения основное кинетическое уравнение переходит в уравнение Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = L |\varphi(t)\rangle. \quad (3)$$

Оператор Лиувилля, записывается через схемы взаимодействия (1) в следующем виде:

$$L = \sum_{\underline{\alpha}, \underline{i}} \left[{}^+k_{\underline{\alpha}} \left(\pi_{\underline{i}}^{F^{i\alpha}} - \pi_{\underline{i}}^{I^{i\alpha}} \right) a_{\underline{i}}^{I^{i\alpha}} + {}^-k_{\underline{\alpha}} \left(\pi_{\underline{i}}^{I^{i\alpha}} - \pi_{\underline{i}}^{F^{i\alpha}} \right) a_{\underline{i}}^{F^{i\alpha}} \right]. \quad (4)$$

3. Заключение

Введенный формализм представляется удобным для унифицированного описания стохастических систем.

Программный комплекс содержит две принципиальные части. Первая часть реализует методику стохастизации одношаговых процессов. Вторая создает структуру для решения основного кинетического уравнения в операторном подходе теории возмущений.

Данный подход представляется крайне продуктивным при решении статистических задач: популяционная динамика, эпидемиологические модели, моделей телекоммуникационных систем [7]. Данный подход не ограничен рамками одношаговых моделей. Вполне возможным представляется его расширение и на другие стохастические процессы.

Благодарности

Работа частично поддержана грантами РФФИ №№ 14-01-00628, 15-07-08795 и 16-07-00556.

Список литературы

1. Demidova A. V., Korolkova A. V., Kulyabov D. S., Sevastianov L. A. The method of stochastization of one-step processes // *Mathematical Modeling and Computational Physics*. — Dubna : JINR, 2013. — P. 67.
2. Doi M. Second quantization representation for classical many-particle system // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 1976. — Vol. 9, no. 9. — P. 1465–1477.
3. Hnatič M., Eferina E. G., Korolkova A. V. et al. Operator Approach to the Master Equation for the One-Step Process // *EPJ Web of Conferences*. — 2016. — Vol. 108. — P. 02027. — 1603.02205.

4. *Hahn T.* Generating and Calculating One-loop Feynman Diagrams with FeynArts, FormCalc, and LoopTools. — 1999. — P. 5. — 9905354.
5. *Vermaseren J. A. M., Kuipers J., Tentyukov M. et al.* FORM version 4.1 Reference manual. — 2013.
6. *Doi M.* Stochastic theory of diffusion-controlled reaction // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 1976. — Vol. 9, no. 9. — P. 1479–1495.
7. *Demidova A. V., Korolkova A. V., Kulyabov D. S., Sevastyanov L. A.* The method of constructing models of peer to peer protocols // 6th International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops (ICUMT). — IEEE, 2014. — P. 557–562. — 1504.00576.

UDC 519.6:530.145.7:531.19

Application of Computer Algebra Systems for the Study of the Statistical Systems

E. G. Eferina*, A. V. Korolkova*, D. S. Kulyabov*[†], L. A. Sevastianov*[‡]

* *Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str. 6, Moscow, 117198, Russia*

[†] *Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

[‡] *Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

Methodology of stochastization of one-step processes is based on the expansion of the master equation and obtaining the approximate models. It is proposed to treat the master equation with the help of statistic perturbation theory (as in the frame of quantum field theory). For this purpose, the methodology was described and the analytical software complex was constructed to put the main kinetic equation in the operator form in the Fock representation. To solve the resulting equation the software complex generates Feynman diagrams of the corresponding order of perturbation theory. We applied the FORM system as a system of symbolic computation.

Key words and phrases: stochastic differential equations; master equation; Fokker–Planck equation; computer algebra software; FORM CAS.