

За допомогою тестових задач переконалися, що ШНМ дає вигреш в 5-10 разів перед звичайним мультисітковим методом. Це є дуже суттєво. Йому під силу розв'язувати рівняння, для яких звичайний мультисітковий метод не може дати точного розв'язку. Разом з цим отримано результати, які показали, що метод дуже чутливий до точності. Це пов'язано з тим, що наступне апроксимоване значення залежить від попереднього. Відповідно зроблено висновок використовувати точність 0,00001, або оптимальніше 0,000001.

Було виявлено доцільність використання саме рекурентних ШНМ для такого типу задач, так як даний вид ШНМ дозволяє найпростішим способом застосувати ітераційні методи. Рекурентні ШНМ здатні до навчання без вчителя, а отже не потребують множини розв'язків для навчання, на відміну від ШНМ прямого поширення. В даній роботі показано, що доцільно застосовувати нейронну підмережу прямого поширення

для підвищення швидкості збіжності, разом з цим отримано результати, згідно з якими доцільно використовувати більше 2 сіток та кількістю ітерацій згладжування на грубих сітках більше 5.

References

- [1] Трушевський, Н.Щербина «Розв'язання лінійних крайових задач мультисітковим ітераційним нейронним методом». Вісник Львів УН-ТУ Сер. Прикл. Мат. Та інформатики 2006 Вип. 11 С 82-98
- [2] М.А. Новотарський, Б.Б. Нестеренко Штучні нейронні мережі: обчислення // Праці Інституту математики НАН України. - Т51. -Київ: Ін-т математики НАН України. 2004. - 408 с.
- [3] Глушков В.М., Цейтлін Г.Е., Ющенко Е.Л. «Алгебра. Язика. Программирование» Київ 1978
- [4] Цейтлін Г.О. «Теорія клонів та її додатки», Київ 2003

Дослідження впливу металевого підкладу на потенціал міжелектронної взаємодії в плівці

Іван Задворняк

Кафедра прикладної математики, Національний університет "Львівська політехніка", УКРАЇНА, м.Львів, вул.С.Бандери, 12, E-mail: ivanZadv@yahoo.com

Problem of influence of metallic surface on electron-electron interaction in semiinfinity jellium is consider. Numerical and analytic results of calculation of effective potential are obtain.

Ключові слова – electron-electron interaction, effective potential.

I. Вступ

Досліджено вплив металевого підкладу на потенціал взаємодії між електронами в плівці. Плівка нанесена на поверхню підкладу, що моделюється напівобмеженим «желе». Обчислено ефективний і кулонівський потенціали міжелектронної взаємодії в плівці. За допомогою чисельних розрахунків отримано протабульовані значення потенціалу міжелектронної взаємодії по нормальних до площини поділу координатах електронів z_1, z_2 та віддалі між електронами в площині поділу $R_{||}$.

II. Моделювання потенціалу міжелектронної взаємодії

Розглядається система, яка містить N електронів, що знаходяться в плівці об'ємом $V = S d$, де d – товщина плівки, S – площа поверхні плівки. Площу поверхні плівки вважаємо макроскопічно великою ($\frac{S}{\langle r \rangle^2} \gg 1$, $\langle r \rangle$ – середня віддаль між

частинками, що визначається з умови $\frac{4\pi}{3} \langle r \rangle^3 = \frac{V}{N}$).

Для забезпечення умови електронейтральності вважаємо, що в об'ємі плівки рівномірно розподілено додатний заряд з густиною $\rho = \rho(\bar{\eta})$, тобто виконується умова

$$\int d\bar{\eta} \rho(\bar{\eta}) = e N, \quad e > 0$$

Гамільтоніан моделі, яку розглядаємо, запишемо в такому вигляді:

$$\begin{aligned} H &= H_{nl} + H_{jell} + V_{nl-jell} = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N V(\bar{R}_i) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{e^2}{|R - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^N \sum_{j=1}^{N_{jel}} \frac{e^2}{|r_j - R_m|}, \end{aligned} \quad (1)$$

де $\sum_{i=1}^N V(\bar{R}_i)$ – енергія взаємодії електронів плівки з поверхнями розділу, N – кількість електронів у плівці, N_{jel} – кількість електронів у підкладі, e –

заряд електрона, \bar{R} – координати електронів у плівці, \bar{r} – координати електронів підкладу.

Інтегральне рівняння для визначення кореляційної функції «густина-густина» в наближенні Хаббарда має вигляд

$$\bar{M}(q | z_1, z_2) = M^0(q | z_1, z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \times \int dz \int dz' M^0(q | z_1, z) (V(q | z - z') - \bar{V}(q | z - z')) \times \bar{M}(q | z', z_2), \quad (2)$$

$$\text{де } \bar{V}(q | z - z') = \frac{\pi e^2}{\sqrt{q^2 + p_F^2}} e^{-\sqrt{q^2 + p_F^2} |z - z'|},$$

$$M^0(q | z_1, z_2) = \frac{L^2}{\beta} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(q) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \times \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2),$$

$$\Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(q) = \frac{2m S}{\hbar^2 2\pi} \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2}{q^2} \times$$

$$\left[1 - \sqrt{1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2}} \right] \times$$

$$\times \theta \left(1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2} \right) \times \theta(p_F - \alpha_1),$$

$\theta(x)$ – функція Хевісайда, $p_F = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s}$ –

імпульс Фермі, r_s – параметр Бранкнера в одиницях радіуса Бора a_B .

Для чисельного розв'язування інтегрального рівняння (2) використовується метод зведення рівняння до системи лінійних алгебричних рівнянь.

Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії $\tilde{V}(q | z_1, z_2)$ є розв'язком інтегрального рівняння

$$\tilde{V}(q | z_1, z_2) = V(q | z_1 - z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \times$$

$$\times \int dz \int dz' V(q | z_1 - z) \bar{M}(q | z, z') \tilde{V}(q | z', z_2),$$

$$\text{де } V(q | z_1 - z_2) = \frac{2\pi e^2}{q S} e^{-q|z_1 - z_2|}, \quad z_1, z_2 -$$

нормальні до площини поділу координати електронів.

Потенціал міжелектронної взаємодії обчислюється за формулою

$$v(R_{\parallel}, z_1, z_2) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} q J_0(q R_{\parallel}) \tilde{V}(q | z_1, z_2) dq,$$

де $J_0(x)$ – функція Беселя нульового порядку.

III. Результати обчислень

Отримано протабульовані значення потенціалу міжелектронної взаємодії при різних нормальних до поверхні поділу координатах електронів z_1 і z_2 . При $z_1 > 10$ та $z_2 > 10$ ефективний потенціал міжелектронної взаємодії наближається до кулонівського. Це показано на Рис.1:

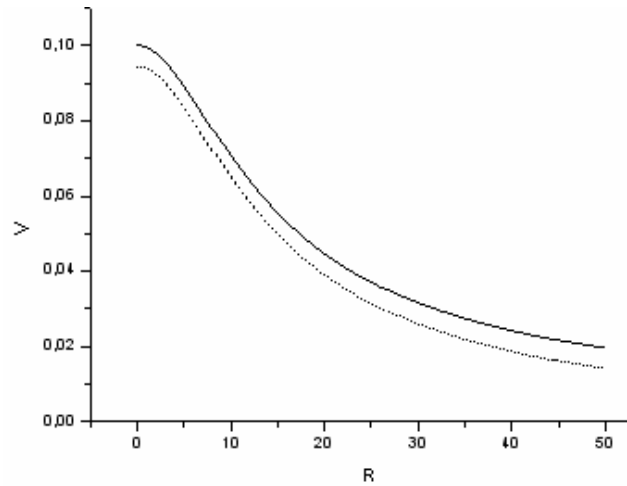


Рис. 1. Потенціал міжелектронної взаємодії як функція віддалі між електронами в площині поділу

На Рис.1 суцільною лінією позначено кулонівський потенціал, а штриховою – ефективний.

Зі збільшенням координат z_1 і z_2 різниця між ефективним потенціалом міжелектронної взаємодії і кулонівським потенціалом зменшується.

У випадку інтегрального рівняння для визначення екранованого потенціалу взаємодії між електронами у плівці

$$\tilde{V}(q | z_1, z_2) = V(q | z_1 - z_2) - \frac{1}{d^2} \times$$

$$\times \int_0^d dz_3 \int_0^d dz_4 V(q | z_1 - z_3) \times \quad (3)$$

$$\times M(q, z_3, z_4) \tilde{V}(q | z_4 - z_2),$$

де d – товщина плівки, отримано розв’язок, який має вигляд

$$G(q, z_1, z_2) = \frac{2\pi e^2 \beta d}{S \lambda} \times \left(\left(e^{-\frac{\lambda}{d} |z_1 - z_2|} - e^{\frac{\lambda}{d} (z_1 - z_2)} \right) + \frac{1}{1 + Q^2 e^{2\lambda}} \times \left(Q^2 e^{\lambda \left(2 + \frac{1}{d} (z_1 - z_2) \right)} - Q e^{\frac{\lambda}{d} (z_1 + z_2)} + Q e^{\lambda \left(2 - \frac{1}{d} (z_1 + z_2) \right)} - e^{-\frac{\lambda}{d} (z_1 - z_2)} \right) \right)$$

$$\text{де } Q = \frac{\lambda + qd}{\lambda - qd}, \lambda = \sqrt{q^2 d^2 + \kappa^2 d^2}.$$

Висновок

Досліджено потенціал міжелектронної взаємодії в плівці у наближенні Хаббарда. Показано, що зі зменшенням відстані між електронами і поверхнею металу зменшується кулонівська взаємодія між ними. І навпаки, чим далі електрони розташовані від поверхні металу, тим більше ефективний потенціал наближається до кулонівського.

[1] Kostrobij P.P., Markovych B.M. An effective potential of electron-electron interaction in semiinfinite jellium // Condens. Matter Phys. – 2006. – Vol.9, No4(48), p.747–756.

Оптимізація на основі штучних імунних систем

Сергій Зайцев, Сергій Субботін

Кафедра програмних засобів, Запорізький національний технічний університет, УКРАЇНА, м.Запоріжжя, вул.Жуковського, 64, E-mail: zaitsev.serge@gmail.com

Abstract – The optimization method based on artificial immune system is presented. This method can be used for multimodal function optimization. It is inspired on the theory of Clonal Selection. The experiments on method testing are carried out and proved the practical applicability of the method.

Ключові слова – оптимізація, імунні системи, генетичні алгоритми.

I. Вступ

Більшість інженерних задач можна звести до виду задач оптимізації, і в багатьох випадках цільові функції є мультимодальними, а отже не можуть бути розв’язані класичними методами. Перспективним засобом вирішення завдань багатовимірної нелінійної мультимодальної оптимізації є штучні імунні системи. Імунну систему вирізняє здатність до визначення та знищення об’єктів, не властивих системі, витрачаючи малу кількість ресурсів.

Розглянемо застосування штучної імунної системи в задачах оптимізації.

II. Постановка задачі

В імунних системах біологічного походження основним типом клітин, що формують імунну відповідь, є лімфоцити. Крім них в організмі циркулюють допоміжні клітини – фагоцити, основна функція яких полягає в знищенні антигенів.

При появі антигена в організмі лише незначна частина клітин імунної системи має здатність до розпізнавання його пептидів. Це стимулює процеси розмноження та диференціювання лімфоцитів і приз-

водить до клонування ідентичних клітин (лімфоцитів). Розмноження клона імунних клітин веде до знищення або нейтралізації антигена. Частина клонованих клітин зберігається надалі в імунній пам’яті. Завдяки цьому наступна взаємодія зі схожим антигеном призводить до більш швидкої реакції. Таке явище називають вторинною відповіддю.

З математичної точки зору різноманітність клітин можна розглядати як задачу оптимізації мультимодальної функції. При розв’язанні подібних задач імунним пошуком антигени розглядаємо як задачу, яку необхідно вирішити, а антитіла – як вектор, що найкраще відповідає рішенню цієї задачі, тобто можливий оптимум. Отже, метою імунного пошуку є генерація таких антитіл, які б найкраще відповідали заданому антигену.

При постанові задачі вводиться поняття афінності, яке визначає ступінь схожості антигена та антитіла. Афінність може виступати чисельним вираженням помилки. У найпростішому випадку, якщо антитіло представляє собою вектор аргументів цільової функції, афінність цього антитіла з іншим або з антигеном визначається як евклідова відстань. У випадку, коли значення антигена невідоме і задача зводиться до пошуку мінімуму, то більшу афінність має те антитіло, яке відповідає меншому значенню цільової функції.

III. Метод оптимізації на основі штучної імунної системи

Метод оптимізації з використанням клональної селекції в імунних системах виглядає наступним чином: