

Применение предметно-ориентированных систем компьютерной алгебры при моделировании марковских процессов

Ефери́на Е. Г., Коро́лькова А. В., Куля́бов Д. С.,
Севастья́нов Л. А.

Российский университет дружбы народов

23 сентября 2015 г.

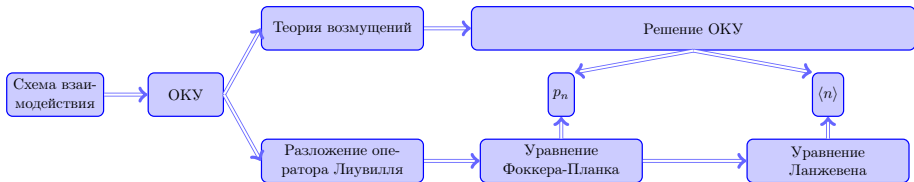
Содержание

- 1 Цель
- 2 Задачи
- 3 Схема подходов
- 4 Основное кинетическое уравнение
- 5 Метод стохастизации одношаговых процессов
- 6 Операторный метод
- 7 Правило получения оператора Лиувилля
- 8 Модель Ферхюльста
- 9 Системы компьютерной алгебры
- 10 Заключение
- 11 Литература

Цель

Обосновать использование предметно-ориентированной системы форм при моделировании марковских процессов

- Построение модели и получение уравнений Фоккера–Планка и Ланжевена;
- Выбор методики исследования ОКУ;
- Получение модели Ферхюльста;
- Эквивалентность комбинаторного и операторного метода;
- Обоснование выбора системы компьютерной алгебры и реализация метода стохастизации модели.



Основное кинетическое уравнение

$$\frac{\partial p(\varphi_2, t_2 | \varphi_1, t_1)}{\partial t} = \int \left[w(\varphi_2 | \psi, t_2) p(\psi, t_2 | \varphi_1, t_1) - w(\psi | \varphi_2, t_2) p(\varphi_2, t_2 | \varphi_1, t_1) \right] d\psi.$$

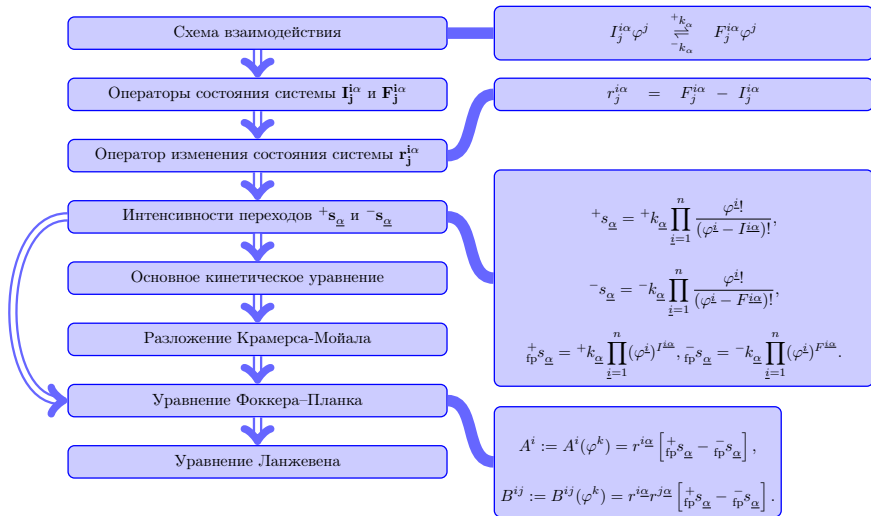
ОКУ для подансамбля:

$$\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} = \int [w(\varphi | \psi, t) p(\psi, t) - w(\psi | \varphi, t) p(\varphi, t)] d\psi.$$

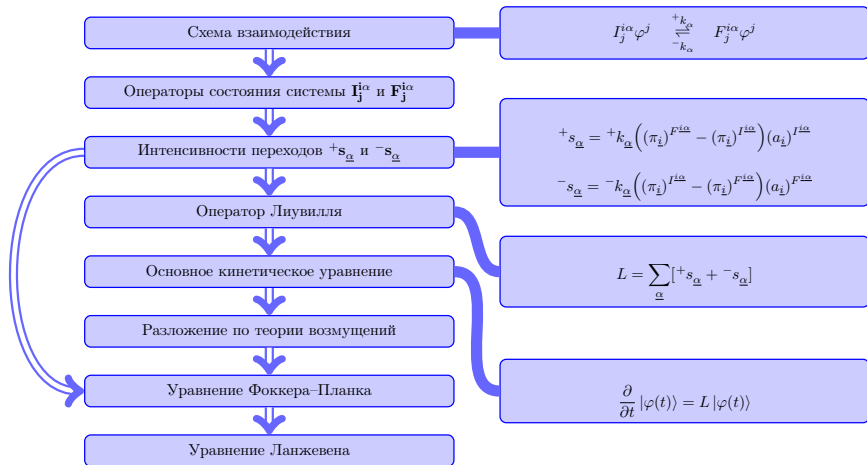
При дискретной области определения φ ОКУ имеет вид:

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = \sum_m [w_{nm} p_m(t) - w_{mn} p_n(t)]$$

Метод стохастизации одношаговых процессов I



Операторный метод I



Компоненты векторов состояний

$$\varphi_n = p_n(\varphi, t)$$

Скалярное произведение в пространстве Фока

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_n n! p_n^*(\varphi) p^n(\psi) = \sum_n n! \varphi_n^*(\varphi) \varphi^n(\psi)$$

Нормировка:

$$\langle n | m \rangle = n! \delta_n^m.$$

Операторы рождения и уничтожения

$$\begin{aligned}\pi |n\rangle &= |n + 1\rangle, \\ a |n\rangle &= n |n - 1\rangle.\end{aligned}$$

Коммутационное соотношение $[a, \pi] = 1$.
 $\pi = a^\dagger$ — оператор рождения.

Уравнение Лиувилля

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

Правило получения оператора Лиувилля

$$I\varphi \xrightarrow{+k} F\varphi,$$

$$L = +k[a^\dagger F a^I - a^\dagger I a^I].$$

Оператор Лиувилля

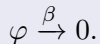
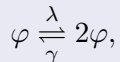
$$I_j^{i\alpha} \varphi^j \xrightleftharpoons[\substack{+k_\alpha \\ -k_\alpha}]{} F_j^{i\alpha} \varphi^j,$$

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

Модель Ферхюльста I

$$\frac{d\varphi}{dt} = \lambda\varphi - \beta\varphi - \gamma\varphi^2.$$

Схемы взаимодействия



Модель Ферхюльста II

Метод стохастизации одношаговых процессов

Интенсивности перехода

$$\begin{aligned} +s_1 &= \lambda\varphi, \\ -s_1 &= \gamma\varphi(\varphi - 1), \\ +s_2 &= \beta\varphi. \end{aligned}$$

Основное кинетическое уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} &= -[\lambda\varphi + \beta\varphi + \gamma\varphi(\varphi - 1)]p(\varphi, t) + \\ &+ [\beta(\varphi + 1) + \gamma(\varphi + 1)\varphi]p(\varphi + 1, t) + \lambda(\varphi - 1)p(\varphi - 1, t). \end{aligned}$$

Модель Ферхюльста III

Представление чисел заполнения

Оператор Лиувилля

$$\begin{aligned}
 L &= \lambda(\pi^2 - \pi)a + \gamma(\pi - \pi^2)a^2 + \beta(1 - \pi)a = \\
 &= \lambda(a^\dagger - 1)a^\dagger a + \beta(1 - a^\dagger)a + \gamma(1 - a^\dagger)a^\dagger a^2.
 \end{aligned}$$

Основное кинетическое уравнение

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial p_n(t)}{\partial t} &= \frac{1}{n!} \langle n | L | \varphi \rangle = \frac{1}{n!} \langle n | - \left[\lambda a^\dagger a + \beta a^\dagger a + \gamma a^\dagger a^\dagger a a \right] + \\
 &+ \left[\beta a + \gamma a^\dagger a a \right] + \lambda a^\dagger a^\dagger a | \varphi \rangle = -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n - 1)]p_n(t) + \\
 &+ [\beta(n + 1) + \gamma(n + 1)n]p_{n+1}(t) + \lambda(n - 1)p_{n-1}(t).
 \end{aligned}$$

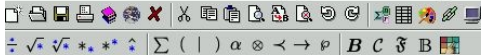
Виды систем компьютерной алгебры

- Интерактивные (Mathima, Axiom);
- Пакетные.

Особенности FriCAS

- Строго типизирована для лучшего отображения математических объектов и взаимосвязей;
- Имеет графическую подсистему;
- Возможно добавление модулей;
- Документированность;
- Символьные вычисления;
- Возможна интеграция в графическую оболочку.

Buffer File Edit Insert Text Paragraph Document Project Options Help



```
osp ([[1,0],[1,1],[0,1]],[[2,0],[0,2],[0,0]],vector([k1,k2,k3]),vector([0,0,0]),vector([x,y]))
```

FriCAS will attempt to step through and interpret the code.

Cannot compile map: calcProd

We will attempt to interpret the code.

```
Compiling function Ai with type (List(Matrix(Integer)),List(
  Polynomial(Integer)),List(Polynomial(Integer)),NonNegativeInteger
) -> Matrix(Polynomial(Integer))
```

```
Compiling function A with type (List(Matrix(Integer)),List(
  Polynomial(Integer)),List(Polynomial(Integer)),NonNegativeInteger
) -> Matrix(Polynomial(Float))
```

```
Compiling function Bi with type (List(Matrix(Integer)),List(
  Polynomial(Integer)),List(Polynomial(Integer)),NonNegativeInteger
) -> Matrix(Polynomial(Integer))
```

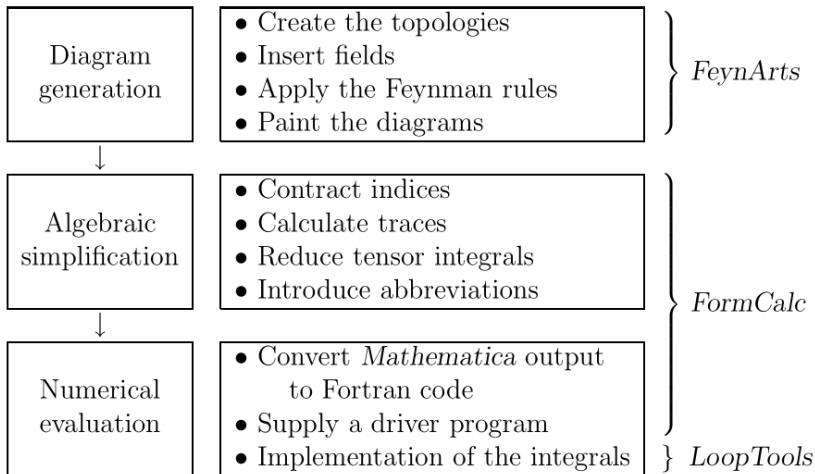
```
Compiling function B with type (List(Matrix(Integer)),List(
  Polynomial(Integer)),List(Polynomial(Integer)),NonNegativeInteger
) -> Matrix(Polynomial(Float))
```

$$\begin{pmatrix} -k2xy + k1x \\ -k3 + k2xy \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} k2xy + k1x & -k2xy \\ -k2xy & k3y + k2xy \end{pmatrix}$$

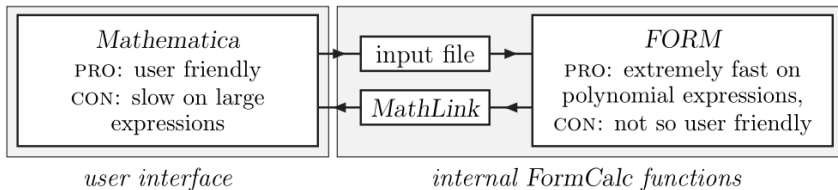
СКА и пакеты, работающие с диаграммами Фейнмана

- MAPLE;
- MATHEMATICA;
- FORM;
- FormCalc;
- FeynArts;
- FeynCalc;
- LoopTools;
- CompHEP;
- XLOOPS.

MATHEMATICA I



MATHEMATICA II



CompNER

- Графический интерфейс;
- Отсутствие документации;
- Однопетлевые диаграммы.

Особенности FORM

- Математические выражения произвольной длины (размеры ограничены только дисковым пространством).
- Многопоточное исполнение, распараллеливание (MPI).
- Быстрое вычисление следа (γ – матрицы).
- Вывод в различных форматах (текст, Fortran).
- Интерфейс для связи с внешними программами.

```

.sort
Index i,j,k;
Symbol fx, n;

Off Statistics;
#do i = 1, 'Ksize'
  Local Splus i' = Splus('i');
  Local Sminus i' = Sminus('i');
#enddo

#do j = 1, 'Xsize'
  Local [R_'j'] = sum_i( 1, 'Ksize', R(i,'j') * (Splus(i) - Sminus(i)));
#enddo
#do i = 1, 'Xsize'
  #do j = 1, 'Xsize'
    Local [B_'i','j'] = sum_k( 1, 'Ksize', R(k,'i') * R(k,'j') * (Splus(k) - Sminus(k)));
  #enddo
#enddo
#do i = 1, 'Ksize'
  * Local [Spp('i')] = Spp('i');
#enddo

+Local test = 1/((x-1)/(y-1));
+Local test = facdm(x, 3) * facdm(y, 1);
+Local [Smp(2)] = Smp(2);
+Local [l0l] = x / (x-2);
+.sort
.sort
id Splus(i?) = Kplus(i) * Spp(i);
id Sminus(i?) = Kminus(i) * Smp(i);

id R(i?,j?) = (M(i,j) - N(i,j));

id Spp(i?) =
#do j = 1, 'Xsize'
  facdm(X('j'), N(i, 'j')) *
#enddo
1;
id Smp(i?) =
#do j = 1, 'Xsize'
  facdm(X('j'), M(i, 'j')) *
#enddo
1;

.sort

repeat:
id facdm(fx?, 0) = 1;
id facdm(fx?, 1) = fx;
id facdm(fx?, n?) = (fx-(n-1)) * facdm(fx, (n-1));

```

Определение параметров для модели Ферхюльста I

```

#define Xsize "1"
#define Ksize "3"

Functions R, Splus, Sminus, Spp, Smp;
*CFunction M;
CFunction facdm;
*PolyFun fac;
Table N(1:'Ksize',1:'Xsize');
Table M(1:'Ksize',1:'Xsize');
Table X(1:'Xsize');
Table Kplus(1:'Ksize');
Table Kminus(1:'Ksize');
#if 'Xsize' == 1
#if 'Ksize' == 3
* Ferhulst
Symbols lambda, gamma, beta;
Symbols x;

```

```

Fill N(1,1) =
  1,
  1,
  0;
Fill M(1,1) =
  2,
  2,
  1;
Fill X(1) =
  x;

Fill Kplus(1) =
  lambda, 0, 0;

Fill Kminus(1) =
  0, gamma, beta;
#endif
#endif

```


Пример запуска скрипта

```
python2 forg.py < $input_file > $output_file
```

или, например:

```
python2 forg.py >test_2.frm <<EOF osp ([[1],[1],[0]],  
[[2],[2],[1]], [lambda,0,0],[0,gamma,beta],[x]) EOF
```


Литература I

- [1] M. Doi.
Stochastic theory of diffusion-controlled reaction.
Journal of Physics A: Mathematical and General, (9):1479–1495,
1976.
- [2] M. Hnatič, J. Honkonen, and T. Lučivjanský.
Field-theoretic technique for irreversible reaction processes.
Physics of Particles and Nuclei, (2):316–348, 2013.
- [3] M. Doi.
Second quantization representation for classical many-particle
system.
Journal of Physics A: Mathematical and General, (9):1465–1477,
1976.