Применение предметно-ориентированных систем компьютерной алгебры при моделировании марковских процессов

Еферина Е. Г., Королькова А. В., Кулябов Д. С., Севастьянов Л. А.

Российский университет дружбы народов

23 сентября 2015 г.

Содержание

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.

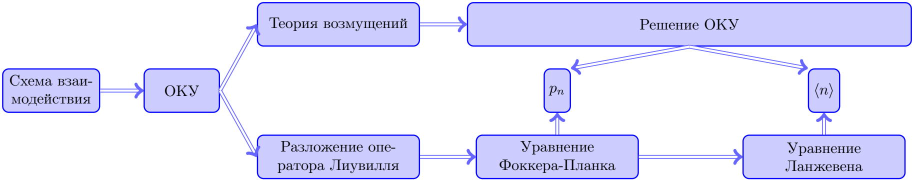


Схема взаи-
модействия
ОКУ
Теория возмущений
Решение ОКУ
Разложение опе-
ратора Лиувилля
p_n
$\langle n \rangle$
Уравнение
Фоккера-Планка
Уравнение
Ланжевена

Основное кинетическое уравнение

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

ОКУ для подансамбля:

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

При дискретной области определения φ ОКУ имеет вид:

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

Метод стохастизации одношаговых процессов I

Схема взаимодействия

$$I_j^{i\alpha}\varphi^j \underset{{}^-k_\alpha}{\overset{{}^+k_\alpha}{\rightleftharpoons}} F_j^{i\alpha}\varphi^j$$

Операторы состояния системы $\mathbf{I}_{\mathbf{j}}^{\mathbf{i}\alpha}$ и $\mathbf{F}_{\mathbf{j}}^{\mathbf{i}\alpha}$

Оператор изменения состояния системы $\mathbf{r}_{\mathbf{j}}^{\mathbf{i}\alpha}$

$$r_j^{i\alpha} = F_j^{i\alpha} - I_j^{i\alpha}$$

Интенсивности переходов ${}^+\mathbf{s}_{\underline{\alpha}}$ и ${}^-\mathbf{s}_{\underline{\alpha}}$

$${}^+s_{\underline{\alpha}} = {}^+k_{\underline{\alpha}} \prod_{\underline{i}=1}^{n} \frac{\varphi^{\underline{i}}!}{(\varphi^{\underline{i}} - I^{\underline{i\alpha}})!},$$

$${}^-s_{\underline{\alpha}} = {}^-k_{\underline{\alpha}} \prod_{\underline{i}=1}^{n} \frac{\varphi^{\underline{i}}!}{(\varphi^{\underline{i}} - F^{\underline{i\alpha}})!},$$

$${}^{+}_{\mathrm{fp}}s_{\underline{\alpha}} = {}^+k_{\underline{\alpha}} \prod_{\underline{i}=1}^{n} (\varphi^{\underline{i}})^{I^{\underline{i\alpha}}}, \; {}^{-}_{\mathrm{fp}}s_{\underline{\alpha}} = {}^-k_{\underline{\alpha}} \prod_{\underline{i}=1}^{n} (\varphi^{\underline{i}})^{F^{\underline{i\alpha}}}.$$

Основное кинетическое уравнение

Разложение Крамерса-Мойала

Уравнение Фоккера–Планка

$$A^i := A^i(\varphi^k) = r^{i\underline{\alpha}} \left[{}^{+}_{\mathrm{fp}}s_{\underline{\alpha}} - {}^{-}_{\mathrm{fp}}s_{\underline{\alpha}} \right],$$

$$B^{ij} := B^{ij}(\varphi^k) = r^{i\underline{\alpha}} r^{j\underline{\alpha}} \left[{}^{+}_{\mathrm{fp}}s_{\underline{\alpha}} - {}^{-}_{\mathrm{fp}}s_{\underline{\alpha}} \right].$$

Уравнение Ланжевена

Операторный метод I

Схема взаимодействия

$$I_j^{i\alpha}\varphi^j \underset{{}^-k_\alpha}{\overset{{}^+k_\alpha}{\rightleftharpoons}} F_j^{i\alpha}\varphi^j$$

Операторы состояния системы $\mathbf{I}_\mathbf{j}^{\mathbf{i}\alpha}$ и $\mathbf{F}_\mathbf{j}^{\mathbf{i}\alpha}$

Интенсивности переходов ${}^+\mathbf{s}_{\underline{\alpha}}$ и ${}^-\mathbf{s}_{\underline{\alpha}}$

$${}^+s_{\underline{\alpha}} = {}^+k_{\underline{\alpha}}\Big((\pi_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}} - (\pi_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}}\Big)(a_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}}$$

$${}^-s_{\underline{\alpha}} = {}^-k_{\underline{\alpha}}\Big((\pi_{\underline{i}})^{I^{i\alpha}} - (\pi_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}}\Big)(a_{\underline{i}})^{F^{i\alpha}}$$

Оператор Лиувилля

$$L = \sum_{\underline{\alpha}}[{}^+s_{\underline{\alpha}} + {}^-s_{\underline{\alpha}}]$$

Основное кинетическое уравнение

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

Разложение по теории возмущений

Уравнение Фоккера–Планка

Уравнение Ланжевена

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

$$\pi \left|n\right\rangle = \left|n+1\right\rangle ,$$
$$a \left|n\right\rangle = n \left|n-1\right\rangle .$$

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

Уравнение Лиувилля

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

Правило получения оператора Лиувилля

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

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

Оператор Лиувилля

$$I^{i\alpha}_{j}\varphi^{j} \underset{{}^{-}k_{\alpha}}{\overset{{}^{+}k_{\alpha}}{\rightleftharpoons}} F^{i\alpha}_{j}\varphi^{j},$$

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

Модель Ферхюльста I

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

Схемы взаимодействия

$$\varphi \underset{\gamma}{\overset{\lambda}{\rightleftharpoons}} 2\varphi,$$

$$\varphi \xrightarrow{\beta} 0.$$

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

$$L = \lambda(\pi^2 - \pi)a + \gamma(\pi - \pi^2)a^2 + \beta(1 - \pi)a =$$
$$= \lambda\left(a^\dagger - 1\right)a^\dagger a + \beta\left(1 - a^\dagger\right)a + \gamma\left(1 - a^\dagger\right)a^\dagger a^2.$$

Основное кинетическое уравнение

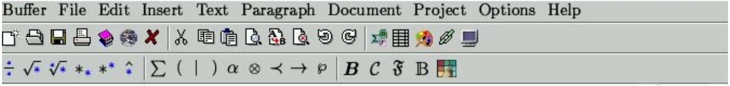
$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = \frac{1}{n!}\langle n| L |\varphi\rangle = \frac{1}{n!}\langle n| - \left[\lambda a^\dagger a + \beta a^\dagger a + \gamma a^\dagger a^\dagger a a\right] +$$
$$+ \left[\beta a + \gamma a^\dagger a a\right] + \lambda a^\dagger a^\dagger a |\varphi\rangle = -[\lambda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

Виды систем компьютерной алгебры

- Интерактивные (Maxima, 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.




```
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))
```

$$\begin{pmatrix} -k2\mathrm{xy} + k1x \\ -k3 + k2\mathrm{xy} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} k2\mathrm{xy} + k1x & -k2\mathrm{xy} \\ -k2\mathrm{xy} & k3y + k2\mathrm{xy} \end{pmatrix}$$

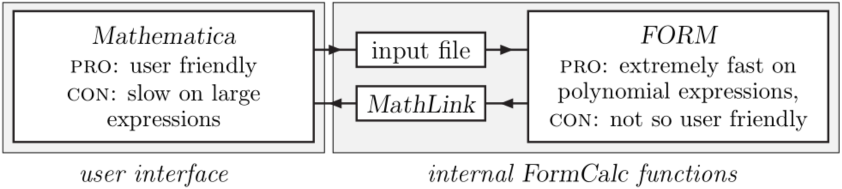
СКА и пакеты, работающие с диаграммами Фейнмана

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

MATHEMATICA I

Diagram generation	• Create the topologies • Insert fields • Apply the Feynman rules • Paint the diagrams	*FeynArts*
↓		
Algebraic simplification	• Contract indices • Calculate traces • Reduce tensor integrals • Introduce abbreviations	*FormCalc*
↓		
Numerical evaluation	• Convert *Mathematica* output to Fortran code • Supply a driver program	*FormCalc*
	• Implementation of the integrals	*LoopTools*

MATHEMATICA II



CompHEP

- 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 [A_'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) - Smin
us(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 [lol] = 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.