

4. Fausett L. Fundamentals of Neural Networks. Architectures, Algorithms and Applications. – New Jersey: Prentice Hall Int., Inc., 1994. – 461 p.
5. Руденко О.Г., Кессонов А.А. Нейростеваемая сеть СМАС и ее применение в задачах идентификации и управления динамическими объектами // Кибернетика и системный анализ. – 2005. – № 5. – С. 16 – 28.
6. Carpenter G.A., Grossberg S. A. massively parallel architecture for self-organising neural pattern recognition machine // Computing, Vision, Graphics and Image Processing. – 1987. – Vol. 37. – P. 54 – 115.
7. Grossberg S. Competitive learning: From interactive activation to adaptive resonance // Cognitive Science. – 1987. – Vol. 11. – P. 23 – 63.
8. Дмитриенко В.Д., Расрас Р.Д., Сырой А.М. Специализированное вычислительное устройство для распознавания динамических режимов объектов управления // Інформаційно-керуючі системи на залізничному транспорті. – 2002. – № 1. – С. 15 – 22.
9. Дмитриенко В.Д., Кореунов Н.И. Основы теории нейронных сетей. – Белгород: БИИММАП, 2001. – 159 с.
10. Костылев А.В., Мезеушева Д.В. Опыт разработки систем управления на основе нейронных сетей для асинхронных электроприводов // Электротехника. – 2004. – № 9. – С. 39 – 42.
11. Ланкин Ю.П. Самоадаптирующиеся нейронные сети / Препринт ТО № 3. – Красноярск: Институт биофизики СО РАН, Теоротдел, 1997. – 21 с.
12. Ланкин Ю.П. Адаптивные сети с самостоятельной адаптацией / Препринт ТО № 4. – Красноярск: Институт биофизики СО РАН, Теоротдел, 1998. – 17 с.
13. Басканова Т.Ф., Ланкин Ю.П. Алгоритмы самостоятельной адаптации для нейронных сетей/ Препринт ТО № 5. – Красноярск: Институт биофизики СО РАН, Теоротдел, 1998. – 14 с.
14. Дмитриенко В.Д., Заковоротный А. Ю. Непрерывная нейронная сеть АРТ для распознавания режимов функционирования динамических объектов // Научные ведомости, серия “Информатика и прикладная математика”. – № 1. – 2005.

## **BIDIRECTIONAL ASSOCIATIVE MEMORY ON THE BASIS OF CONTINUOUS NEURAL NETWORKS OF ADAPTIVE RESONANT THEORY.**

*V.D.Dmitrienko, A.J.Zakovorotny*

The article deals with such an issue of the day as the problem of creating associative memory capable of keeping in mind new associations without complete retraining of neural network. A new network was created on the basis of neural networks of adaptive resonant theory with the property of “stability-plasticity”, i.e. neural networks capable of memorizing new information without distortion of memorized information.

УДК 519.673, 539.182

## **ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА ЛАНЦОША К РЕШЕНИЮ ОДНОМЕРНЫХ КВАНТОВЫХ ЗАДАЧ**

*Шкловский А.Г.<sup>1</sup>, Старовойтов А.С.<sup>1</sup>*

1 - Белгородский государственный университет Российская Федерация, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Описан алгоритм Ланцоша, применяемый для расчета собственных векторов и собственных значений одномерного уравнения Шредингера с гладким потенциалом. Оценка точности получаемых результатов дана на примере гармонического осциллятора.

### **ВВЕДЕНИЕ**

В настоящее время большое внимание уделяется так называемым «быстрым» алгоритмам линейной алгебры, которые применяются в различных моделях, в том числе и в задачах квантовой механики.

Для получения высокой точности расчетов в квантовой механике можно использовать прямые алгоритмы решения уравнения Шредингера, которые при малом

шаге сетки приводят к матрицам большого порядка  $N$ . Например, при  $N > 1000$  время вычислений обычными методами становится достаточно большим. Кроме того, многие одномерные задачи квантовой механики возникают в результате замены многочастичной задачи на одночастичную задачу в самосогласованном поле. В этом случае потенциал находится методом итераций. На каждой итерации используется матрица той же размерности, что увеличивает время счета пропорционально количеству необходимых итераций. При этом требования к скорости расчета собственных векторов на отдельной итерации естественно ужесточаются.

В данной работе для решения таких задач предлагается использовать модифицированный алгоритм Ланцоша, который обладает двумя преимуществами: во-первых, этот алгоритм быстродействующий, во-вторых, при его использовании можно находить только несколько собственных векторов, относящихся к требуемым наименьшим собственным значениям.

## 1. МОДИФИЦИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ ЛАНЦОША

Алгоритм Ланцоша применяется для улучшения итерационных методов нахождения собственных векторов и собственных значений эрмитовых матриц [1,2]. Идея этого алгоритма заключается в том, что можно построить последовательность векторов  $\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots, \vec{f}_n$  умножая  $n-1$  раз некий выбранный вектор  $\vec{f}_1$  на матрицу  $A$ . При этом в возникающих новых векторах  $\vec{f}_2, \vec{f}_3, \dots, \vec{f}_n$  доля собственного вектора с максимальным по модулю собственным значением матрицы  $A$  будет больше, чем в исходном векторе  $\vec{f}_1$ . Если теперь образовать  $n$ -мерное линейное пространство из ортонормированных векторов  $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$ , полученных процедурой ортогонализации и нормирования векторов  $\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots, \vec{f}_n$ , то нужный нам собственный вектор матрицы  $A$  достаточно быстро окажется в этом пространстве.

Совокупность ортонормированных векторов  $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$  можно использовать как базис для нахождения матричных элементов

$$A_{ik} = \vec{g}_i^+ \cdot A \cdot \vec{g}_k \quad (1)$$

где  $i, k = 1, 2, 3, \dots, n$ . Эти матричные элементы образуют новую матрицу размером  $n \times n$ , ранг которой много меньше ранга исходной матрицы. Среди собственных векторов и собственных значений получившейся матрицы найдется и собственный вектор исходной матрицы  $A$  с максимальным собственным значением.

Если нам требуется получить не максимальное собственное значение, то используют так называемый алгоритм Ланцоша со сдвигом, который будем рассматривать применительно к одномерным задачам квантовой механики с гладким потенциалом.

Рассмотрим одномерное уравнение Шредингера, представленное в виде разностной схемы [3]

$$-\frac{1}{2} \frac{y'_{k+1} - 2 \cdot y'_k + y'_{k-1}}{h^2} + V_k \cdot y'_k = e' \cdot y'_k, \quad (1)$$

где  $y'_k = \chi_i(x_k)$  – дискретный одномерный волновой вектор, получающийся как  $i$ -е решение системы уравнений (1);  $V_k$  – дискретный потенциал,  $x_k$  – множество точек, соответствующих равномерной сетке

$$\{x_k = -L + h \cdot k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N, \quad h \cdot N = 2L\}, \quad (2)$$

где  $h$  – расстояние между узлами сетки,  $L$  – длина волновой функции,  $k$  – номер узла решения,  $N+1$  – количество узлов сетки.

Предположим, что нам с некоторой точностью известны собственные значения энергии  $e'_0$ . Получить их можно, например, прямым методом решения уравнения Шредингера (1) с небольшим количеством узлов. Введем матрицу  $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{H - e'_0}, \quad (3)$$

где  $H$  – трёхдиагональная матрица коэффициентов системы уравнений (1),  $e'_0$  – первоначальное приближение  $i$ -го собственного значения энергии  $e^i$ .

Введем нормированный вектор с компонентами  $g'_{ik} = y'_{k0}$ , где  $y'_{k0}$  – произвольный нормированный вектор, который будем считать близким к собственному вектору матрицы  $H$  с собственным значением примерно равным  $e'_0$ . Отметим, что произвол в выборе этого вектора не влияет на точность решения, а сказывается только на используемой размерности базиса  $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$ .

В методе Ланцоша строится семейство ортонормированных векторов  $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$ , при помощи которых можно уточнить значение  $e^i$ . Из (3) очевидно, что для матрицы  $\mathbf{A}$  наибольшее собственное значение возникает для ближайшего к  $e'_0$  собственного значения матрицы  $H$ . Этот алгоритм и называется алгоритмом Ланцоша со сдвигом.

При этом можно получить с заданной точностью и собственный вектор, соответствующий  $e^i$ . Для упрощения записи индекс  $i$  будем опускать. Введем вектор  $\vec{c}_1 = A\vec{g}_1$ , и вычислим матричный элемент  $B_{11} = \langle \vec{g}_1 | \vec{c}_1 \rangle$ , после чего введем вектор  $\vec{f}_2 = \vec{c}_1 - B_{11}\vec{g}_1$  и вычислим второй вектор из нужного нам подпространства  $\vec{g}_2 = \frac{1}{\sqrt{\langle \vec{f}_2 | \vec{f}_2 \rangle}} \vec{f}_2$ . Далее вводим вектор  $\vec{c}_2 = A\vec{g}_2$ , и вычисляем матричные элементы  $B_{12} = B_{21} = \langle \vec{g}_1 | \vec{c}_2 \rangle$  и  $B_{22} = \langle \vec{g}_2 | \vec{c}_2 \rangle$ , после чего вводим вектор  $\vec{f}_3 = \vec{c}_2 - B_{12}\vec{g}_1 - B_{22}\vec{g}_2$  и вычислим третий вектор  $\vec{g}_3 = \frac{1}{\sqrt{\langle \vec{f}_3 | \vec{f}_3 \rangle}} \vec{f}_3$ . Аналогично поступаем для нахождения остальных векторов базиса  $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$ .

Отметим, что рассмотренный алгоритм получения векторов  $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$  приводит к получению трехдиагональной матрицы  $A_{ik}$ . Это означает, что матричные элементы  $A_{13}, A_{14}, \dots, A_{1n}$  должны теоретически равняться нулю. Естественно возникающие ошибки численной реализации приводят к появлению не нулевых матричных элементов. И когда матричный элемент  $A_{1n}$  превышает по модулю некоторое заданное число  $\varepsilon$ , мы считаем базис  $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$  сформированным полностью, так как искусственное обнуление этих матричных элементов не улучшает точности нахождения собственных значений матрицы  $\mathbf{A}$ . Количество этих векторов  $n$ , обычно от 3 до 10, несмотря на то, что ранг  $N$  матрицы  $\mathbf{A}$  может быть много больше 1000. Точность метода может быть определена только в вычислительном эксперименте.

## 2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Для проверки адекватности и эффективности этого алгоритма рассмотрим его применение для конкретных задач, точное решение которых известно, например, гармонического осциллятора [4]. Для гармонического осциллятора дискретный потенциал  $V_k$  выбирается в виде:

$$V_k = \frac{x_k^2}{2}. \quad (4)$$

Граничные условия выбираются так, чтобы на концах отрезка функция обращалась в 0. Будем искать волновой вектор основного состояния.

В качестве начального вектора  $g_1$  используем параболу, обращающуюся в 0 на концах отрезка. Для осциллятора точное значение энергии основного состояния равно 0,5. В качестве начального приближения примем  $e_0 = 0,4$ . Важно отметить, что для всех векторов базиса граничные условия остаются одинаковыми.

Формула (1) позволяет легко организовать умножение произвольного вектора на трехдиагональную матрицу  $H$ , однако получить в явном виде матрицу оператора  $A$  по формуле (3), чтобы воспользоваться стандартными алгоритмами метода Ланцоша затруднительно. Поэтому предлагается вариант алгоритма Ланцоша, не требующий вычисления явного вида матрицы  $A$ .

Легко показать, домножая  $\vec{\zeta}_1 = A\vec{g}_1$  на  $A^{-1}$ , что для нахождения вектора  $\vec{\zeta}_1$  достаточно решить систему линейных уравнений:

$$-\zeta_1(k-1) + 2(1+h^2(V_k - e_0))\zeta_1(k) - \zeta_1(k+1) = 2h^2g_1(k), \quad (5)$$

где  $\zeta_1(k)$  –  $k$ -я компонента неизвестного вектора  $\vec{\zeta}_1$ ,  $g_1(k)$  – известная компонента заданного вектора  $\vec{g}_1$ . Видно, что при решении системы (5), не требуется явное умножение матрицы  $A$  на вектор  $\vec{g}_1$ .

Так как все коэффициенты системы уравнений известны, то можно применить эффективный метод прямой и обратной прогонки [3] для нахождения компонент вектора  $\vec{\zeta}_1$ . Тем самым решается проблема умножения матрицы  $A$  на известный вектор  $\vec{g}_1$  без вычисления явного вида этой матрицы. Аналогичный прием применяется для последовательного умножения матрицы  $A$  на вектора  $\vec{g}_2, \vec{g}_3, \dots, \vec{g}_{n-1}$ .

Для исследования быстродействия алгоритма было взято 10000 узлов и  $h=0,001$ . Для реализации описанного алгоритма Ланцоша потребовалось всего 4 вектора  $\vec{g}$ . При этом вычисленное значение энергии отличалось от точного на  $3,1 \cdot 10^{-8}$ . На рис. 1 представлены графики точной и приближенной волновых функций. Штрихпунктирная белая линия – вычисленная функция, сплошная черная – точная функция.

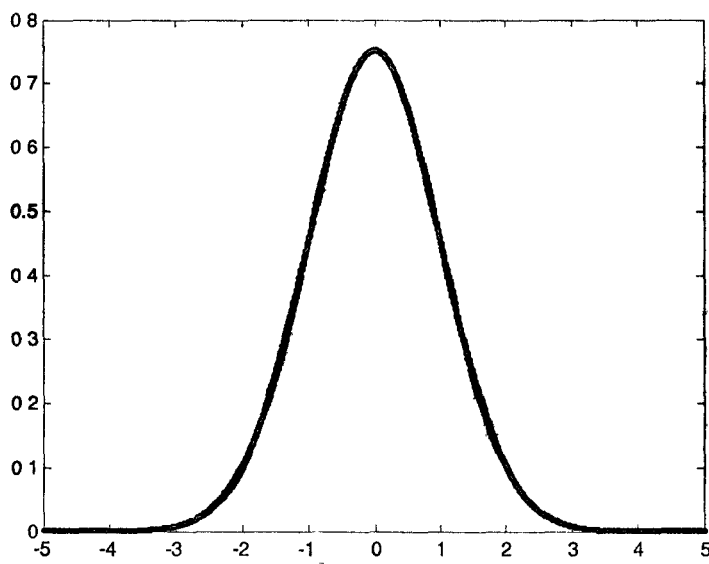


Рис 1 График волновой функции основного состояния осциллятора

На рис. 1 видно совпадение графиков точной и вычисленной волновых функций, поэтому для оценки точности вычислений на рис. 2 приведен график разности этих функций. Видно, что в основном отличия сосредоточены на концах отрезка ( $3 \cdot 10^{-6}$ ), так как точное решение существует для всей числовой оси, а для приближенного решения были заданы нулевые граничные условия в точках  $x=-5$  и  $x=5$ . На остальном отрезке отличия на порядок меньше, не более  $3 \cdot 10^{-7}$ .

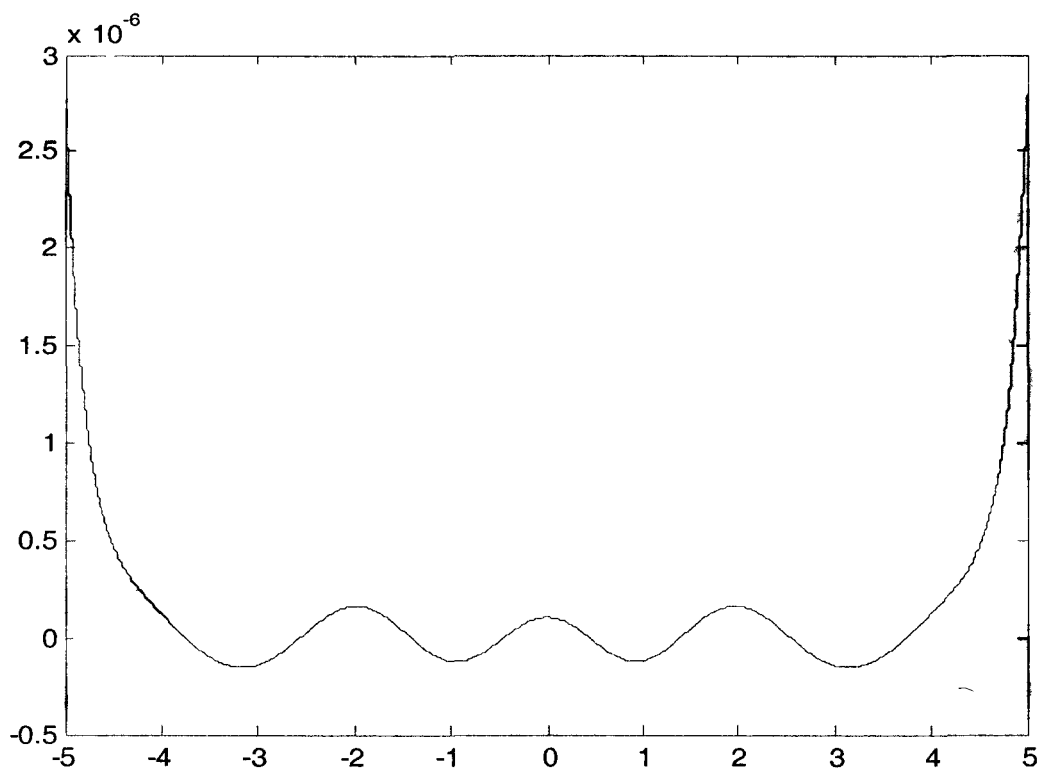


Рис. 2. Разность между точным решением и вычисленной функцией для гармонического осциллятора.

Следует отметить, что при реализации этого алгоритма на ЭВМ ввиду быстро нарастающей вычислительной погрешности происходит накопление ложных матричных элементов и продолжение процесса формирования векторов  $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$  не приведет к нахождению других собственных векторов и собственных значений. Поэтому для их нахождения необходимо каждый раз начинать процесс заново с другими значениями  $e'_0$  и другими векторами начального приближения  $\vec{g}_1$ .

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Достигнутая в численном эксперименте точность указывает на адекватность и высокую эффективность предложенной модификации алгоритма Ланцоша.

Предложенный алгоритм может рассматриваться как перспективный для решения одномерных квантово-механических задач с гладкими потенциалами.

#### Библиографический список

1. Акритас А. Основы компьютерной алгебры с приложениями. М.: Мир, 1994.
2. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: Наука, 1987.
3. Гулин А.В. Самарский А.А. Численные методы. М.: Наука, 1989.
4. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974.

# APPLICATION OF ALGORITHM OF LANZOSH TO SOLVING ONE-DIMENSIONAL QUANTUM PROBLEMS

*Shclovsky A.G., Starovoitov A.S.*

Algorithm of Lanzosh is describing in the article. This algorithm applies to calculation eigenvectors and eigenvalues of one-dimensional equation of Shredinger with smooth potential. The error estimate of receiving results is giving by the example of harmonic oscillator.

УДК 519.673

## НЕПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ОБЪЕКТОВ И МНК-РЕШЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВОЛЬТЕРРА 1-ГО РОДА

*Капалин В.И.<sup>1</sup>, Попович Д.Е.<sup>1</sup>, Нгуен Мань Кыонг<sup>2</sup>*

1 – Московский государственный институт электроники и математики (технический университет)

2 – Вьетнамский морской университет, г. Хайфон

Предложен метод непараметрическая идентификация объектов позволяющих использовать аппарат функциональных рядов Вольтера для расчёта нелинейных систем с обратной связью.

Задача идентификации формулируется как задача построения математической модели объекта по экспериментально измеренным его реакциям на заданные входные сигналы. В случае параметрической идентификации это задача сводиться к отысканию параметров заданной математической модели – обычно дифференциального уравнения. В общем случае, когда объект идентификации является «черным ящиком» т.е. когда структура математической модели неизвестна используются методы непараметрической идентификации. В этом случае уравнение математической модели задается в форме интегрального оператора Вольтерра или Винера и задача идентификации сводиться к оценке ядер Волтерра и Винера по результатам измерения входных и выходных сигналов системы [1]. Эта задача, однако, является некорректной в том смысле, что малые погрешности в измерениях, в исходных данных могут дать сколь угодно большие погрешности в ядрах Вольтерра и Винера. В этой связи при непараметрической идентификации объектов при обработке экспериментальных данных можно применить теорию методов решения некорректных задач [2]. Рассмотрим постановку задачи идентификации в общем виде (рис.1),

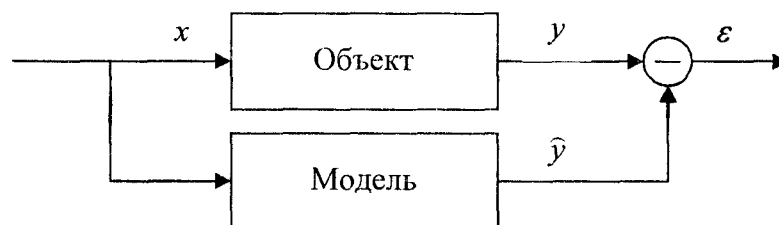


Рис. 1

как задачу минимизации квадратичного функционала

$$\varepsilon^2(t) = (y(t) - \hat{y}(t))^2. \quad (1)$$

Модель при этом может задаваться как линейным, так и нелинейным оператором Волтерра. Для отыскания ядер этого оператора необходимо на одном из этапов решения осуществить дискретизацию задачи. При этом возможны два варианта. При первом – модель и функционал записывается для непрерывного времени. Далее, находятся