

ISSN 2305-9052 (Print)
ISSN 2410-7034 (Online)

ВЕСТНИК



ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА

BULLETIN

OF THE SOUTH URAL
STATE UNIVERSITY

СЕРИЯ

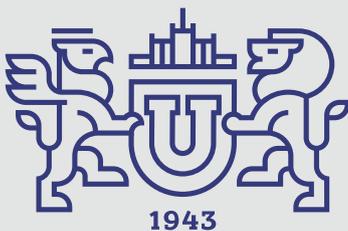
**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ
МАТЕМАТИКА
И ИНФОРМАТИКА**

2022, том 11, № 4

SERIES

**COMPUTATIONAL
MATHEMATICS
AND SOFTWARE ENGINEERING**

2022, volume 11, no. 4



ВЕСТНИК



ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА

2022
Т. 11, № 4

ISSN 2305-9052 (Print)
ISSN 2410-7034 (Online)

СЕРИЯ

«ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА»

Решением ВАК включен в Перечень научных изданий,
в которых должны быть опубликованы результаты диссертаций
на соискание ученых степеней кандидата и доктора наук

Учредитель — Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Южно-Уральский государственный университет
(национальный исследовательский университет)»

Тематика журнала:

- Вычислительная математика и численные методы
- Математическое программирование
- Распознавание образов
- Вычислительные методы линейной алгебры
- Решение обратных и некорректно поставленных задач
- Доказательные вычисления
- Численное решение дифференциальных и интегральных уравнений
- Исследование операций
- Теория игр
- Теория аппроксимации
- Информатика
- Искусственный интеллект и машинное обучение
- Системное программирование
- Перспективные многопроцессорные архитектуры
- Облачные вычисления
- Технология программирования
- Машинная графика
- Интернет-технологии
- Системы электронного обучения
- Технологии обработки баз данных и знаний
- Интеллектуальный анализ данных

Редакционная коллегия

Л.Б. Соколинский, д.ф.-м.н., проф., *гл. редактор*
В.П. Танана, д.ф.-м.н., проф., *зам. гл. редактора*
М.Л. Цымблер, д.ф.-м.н., доц., *отв. секретарь*
Г.И. Радченко, к.ф.-м.н., доц. (Австрия)
Я.А. Краева, *техн. секретарь*

Редакционный совет

С.М. Абдуллаев, д.г.н., профессор
А. Андряк, PhD, профессор (Германия)
В.И. Бердышев, д.ф.-м.н., акад. РАН, *председатель*
В.В. Воеводин, д.ф.-м.н., чл.-кор. РАН

Дж. Донгарра, PhD, профессор (США)
С.В. Зыкин, д.т.н., профессор
И.М. Куликов, д.ф.-м.н.
Д. Маллманн, PhD, профессор (Германия)
А.В. Панюков, д.ф.-м.н., профессор
Р. Продан, PhD, профессор (Австрия)
В.И. Ухоботов, д.ф.-м.н., профессор
В.Н. Ушаков, д.ф.-м.н., чл.-кор. РАН
М.Ю. Хачай, д.ф.-м.н., чл.-кор. РАН
А. Черных, PhD, профессор (Мексика)
П. Шумяцкий, PhD, профессор (Бразилия)



BULLETIN

OF THE SOUTH URAL
STATE UNIVERSITY

2022

Vol. 11, no. 4

SERIES

“COMPUTATIONAL
MATHEMATICS AND SOFTWARE
ENGINEERING”

ISSN 2305-9052 (Print)
ISSN 2410-7034 (Online)

Vestnik Yuzhno-Ural'skogo Gosudarstvennogo Universiteta.
Seriya “Vychislitel'naya Matematika i Informatika”

South Ural State University

The scope of the journal:

- Numerical analysis and methods
- Mathematical optimization
- Pattern recognition
- Numerical methods of linear algebra
- Reverse and ill-posed problems solution
- Computer-assisted proofs
- Numerical solutions of differential and integral equations
- Operations research
- Game theory
- Approximation theory
- Computer science
- Artificial intelligence and machine learning
- System software
- Advanced multiprocessor architectures
- Cloud computing
- Software engineering
- Computer graphics
- Internet technologies
- E-learning
- Database processing
- Data mining

Editorial Board

L.B. Sokolinsky, South Ural State University (Chelyabinsk, Russia)
V.P. Tanana, South Ural State University (Chelyabinsk, Russia)
M.L. Zymbler, South Ural State University (Chelyabinsk, Russia)
G.I. Radchenko, Silicon Austria Labs (Graz, Austria)
Ya.A. Kraeva, South Ural State University (Chelyabinsk, Russia)

Editorial Council

S.M. Abdullaev, South Ural State University (Chelyabinsk, Russia)
A. Andrzejak, Heidelberg University (Germany)
V.I. Berdyshev, Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the RAS (Yekaterinburg, Russia)
J. Dongarra, University of Tennessee (USA)
M.Yu. Khachay, Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the RAS (Yekaterinburg, Russia)
I.M. Kulikov, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of RAS (Novosibirsk, Russia)
D. Mallmann, Julich Supercomputing Centre (Germany)
A.V. Panyukov, South Ural State University (Chelyabinsk, Russia)
R. Prodan, Alpen-Adria-Universität Klagenfurt (Austria)
P. Shumyatsky, University of Brasilia (Brazil)
A. Tchernykh, CICESE Research Center (Mexico)
V.I. Ukhobotov, Chelyabinsk State University (Chelyabinsk, Russia)
V.N. Ushakov, Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the RAS (Yekaterinburg, Russia)
V.V. Voevodin, Lomonosov Moscow State University (Moscow, Russia)
S.V. Zykin, Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the RAS (Omsk, Russia)

Содержание

HIERARCHICAL MODEL OF ARCHITECTURE OF SUPERCOMPUTER SYSTEMS FOR COMPARISON AND RANKING D.A. Nikitenko	5
ВЫЯВЛЕНИЕ УСТОЙЧИВЫХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ ПОКАЗАТЕЛЯМИ КОННЕКТИВНОСТИ ЭЭГ И КОМПОНЕНТАМИ ИНТЕЛЛЕКТА Т.В. Авдеенко, А.Ю. Тимофеева, М.Ш. Муртазина, О.М. Разумникова	19
СГЛАЖИВАНИЕ ЛОМАННЫХ ЛИНИЙ СОСТАВНЫМИ СПЛАЙНАМИ БЕЗЪЕ В.А. Ромакин	37
DEVELOPING INTELLIGENT ASSISTANTS TO SEARCH FOR CONTENT ON WEBSITES OF A CERTAIN GENRE V.D. Rublev, E.A. Sidorova	51
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЗОВЗВЕСИ С УДАРНОЙ ВОЛНОЙ КONTИНУАЛЬНЫМИ МАТЕМАТИЧЕСКИМИ МОДЕЛЯМИ С ИДЕАЛЬНОЙ И ДИССИПАТИВНЫМИ НЕСУЩИМИ СРЕДАМИ Д.А. Тукмаков	67

Contents

HIERARCHICAL MODEL OF ARCHITECTURE OF SUPERCOMPUTER SYSTEMS FOR COMPARISON AND RANKING D.A. Nikitenko	5
IDENTIFICATION OF ROBUST CORRELATIONS BETWEEN EEG CONNECTIVITY METRICS AND INTELLIGENCE COMPONENTS T.V. Avdeenko, A.Yu. Timofeeva, M.Sh. Murtazina, O.M. Razumnikova	19
POLYLINE SMOOTHING WITH COMPOUND BEZIER SPLINES V.A. Romakin	37
DEVELOPING INTELLIGENT ASSISTANTS TO SEARCH FOR CONTENT ON WEBSITES OF A CERTAIN GENRE V.D. Rublev, E.A. Sidorova	51
NUMERICAL SIMULATION OF THE INTERACTION OF A GAS SUSPENSION WITH A SHOCK WAVE BY CONTINUAL MATHEMATICAL MODELS WITH IDEAL AND DISSIPATIVE CARRIER MEDIA D.A. Tukmakov	67



This issue is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution-Non Commercial 4.0 License which permits non-commercial use, reproduction and distribution of the work without further permission provided the original work is properly cited.

HIERARCHICAL MODEL OF ARCHITECTURE OF SUPERCOMPUTER SYSTEMS FOR COMPARISON AND RANKING

© 2022 D.A. Nikitenko

Lomonosov Moscow State University, Research Computing Center

(Leninskie Gory 1 bld. 4, Moscow, 119991 Russia)

E-mail: dan@parallel.ru

Received: 07.11.2022

The task of comparing the capabilities of computing systems with each other and forming various ratings has many possible goals. Here, there is the identification of trends, the promotion of proven general-purpose architectures, and the demonstration of superiority in a certain class of tasks, etc. It is, of course, not enough to describe the achieved performance for all these purposes, various rankings and comparisons use different levels of abstraction and generalization up to that level, which would allow to associate the identified performance indicators with certain features of the system. In practice, descriptions of the architectural peculiarities of systems in ratings are rather scarce, and the authors of the work solve the problem of development a formal description of computer systems of a relatively high level, which, at the same time, would allow to increase the required level of detail, corresponding to the goals of applied research. Such a hierarchical system description model has been proposed and tested on well-known systems from the Top50 and Top500 lists.

Keywords: model of a supercomputer system, description of the architecture of supercomputer systems, comparison of performance of computing systems, performance ratings.

FOR CITATION

Nikitenko D.A. Hierarchical Model of Architecture of Supercomputer Systems for Comparison and Ranking. Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering. 2022. Vol. 11, no. 4. P. 5–18. DOI: 10.14529/cmse220401.

Introduction

The problem of a detailed description of the architectures of computing systems for their comparative analysis is sufficiently manifested when considering the current ratings of computing systems. Indeed, the desire and need to highlight significant characteristics that affect achievable performance are understandable, but, the key obstacles to the high detail of such descriptions are: firstly, the available information about systems is largely limited, and for advanced systems there is know-how and trade secrets, and, secondly, the real goals of the ratings, which are, to a greater extent, in a competitive way than in a research one. The logical result is that the data on the configuration of top supercomputer systems, presented in the world ratings, are limited to a description of an administrative and marketing nature and the most basic description of the configuration [1], in fact, consisting in a description of the scale of systems and the generations of components used. The Russian Top50 rating demonstrates a significantly larger backlog, but in its form it is not suitable for comparing two different architectures, but only allows you to get more rating slices on the results of using certain components on the HPL.

A common weakness of the existing ratings is a narrow focus on ranking according to a certain criterion. Importantly, within the framework of the problem being solved, it is also necessary to take into account the principles of co-design, according to which the choice of a software and hardware platform is carried out based on the characteristics of the problem being

solved, and vice versa, for a certain configuration, recommendations can be made on what kind of applications can potentially work on it with higher efficiency. From here, a fundamentally important conclusion is made — the developed methods of comparative analysis should be able to operate with various benchmarking results and should be described in a way for joint and complex analysis, this is their fundamental difference from traditional ratings with ranking by a fixed parameter.

In the Section 1 we give a brief overview of the state of the art. Section 2 introduces the new method of system description and model. Section 3 provides details on the approbation of the proposed approach on well-known systems from Top50 and Top500 lists. In the final section we summarize the paper.

1. Related work

World ratings are characterized by the fact that, on the one hand, they actually allow to see trends in the HPC systems market, on the other hand, in view of the large number of participants and applicants, rating compilers often deliberately limit the details in the participant's application so as not to scare participants away, and on the other hand, to cope with the flow of heterogeneous information.

Regional ratings allow much more ordinary systems to get into the area of attention. In view of the relatively low rate of renewal, it is necessary to speak about global trends based on regional ratings with caution, but, at the same time, such ratings reflect the distribution of computing resources in the region by industry.

One possible way to look at supercomputer ratings is with regard to their specialization. There is no rating that accurately reflects the capabilities of systems in relation to solving specific applied problems. Therefore, in order to determine the properties of systems that are important and outline characteristic of systems that perform best on the class of problems of interest, one should, first of all, evaluate the systems participating in the ratings according to the closest benchmarks. In particular, regarding I/O — IO500, regarding working with memory — Graph500, regarding machine learning — MLPerf. Regarding the descriptive part of the architectures, only basic information about the system and its components is available in the Top500 rating. This is enough to build sections and analyze trends in the use of certain technologies, however, the lack of information about the structure of the system, the structure of its nodes and memory subsystems makes it impossible to use it to compare systems. A formal description of the model is not available in the literature. So, we evaluate its capabilities and parameters based on the results of discussions with Top500 authors at supercomputer conferences of previous years.

In the Top50 rating, the situation is significantly different: the concepts of nodes are highlighted, their basic characteristics are identified by processor models, the categories of networks and their topologies are highlighted. So, there is a good foundation for analyzing architectures. The model is described in detail in [1]. However, the model used has a number of significant drawbacks — a weak description of the memory hierarchy, no description of intranodal connections, etc.

The description model, that is being developed within the Algo500 project [2, 3], should also be mentioned. At the moment, the project uses a hierarchical description model based on XML [4], while it is designed in such a way that it allows to get by with a minimum of descriptions of components and their properties, and does not involve the introduction of new nested entities (for example, to describe a computational group or an interconnect between

GPU). Unfortunately, in our opinion, this significantly limits the prospects for the development and application of such a model, as well as its processing in the event of a significant increase in the number of attributes and the described systems. The questions of system modelling are also touched upon in many adjacent areas like simulation of Database Systems [5] and others, but they target different of the project aims. Some other models are discussed in [6], which more correspond to the models of computing. Thus, regarding the research goals, the model used in the Top50 rating seems to be the most developed of the existing ones, however, it is not suitable for solving the problem of comparing architectures.

2. Proposed method

To describe the configuration of computing systems, it is proposed to use a hierarchical graph shown (Fig. 1). Green shades of vertices correspond to compute items on various layers. Shades of grey depict various levels of interconnects and networks, blues are for accelerators, including GPUs, yellow stands for RAM, and orange is for the local on-node storage.

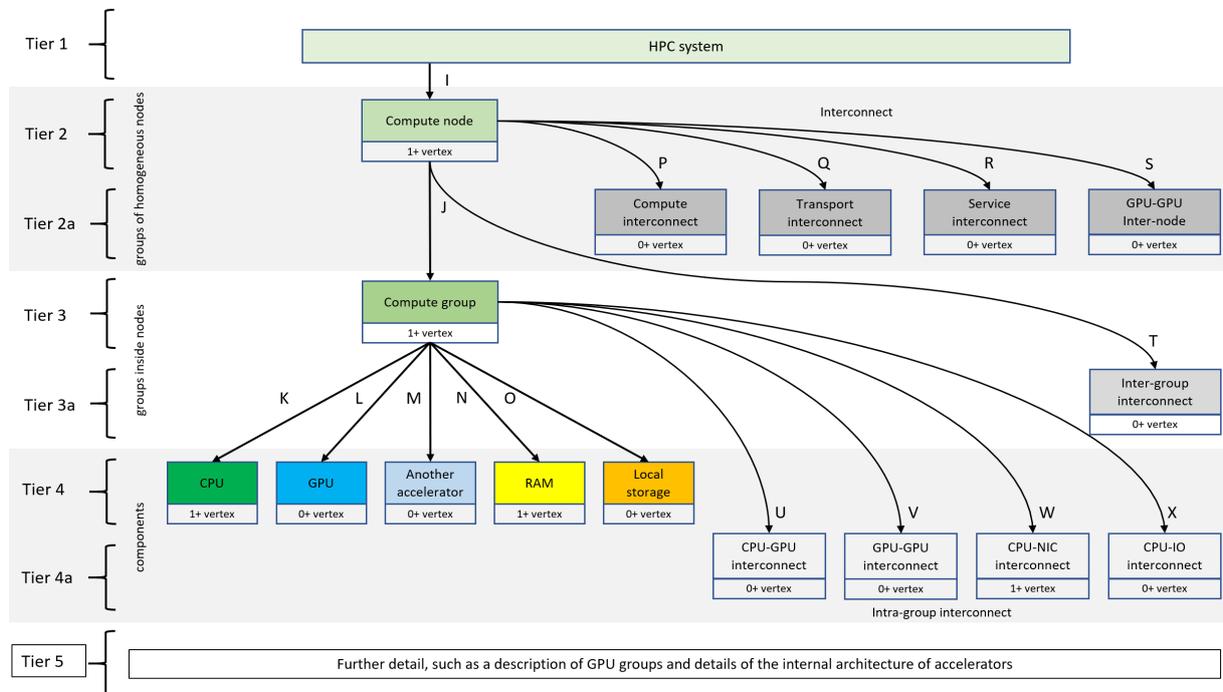


Fig. 1. Graph tiered hierarchical model for describing supercomputers

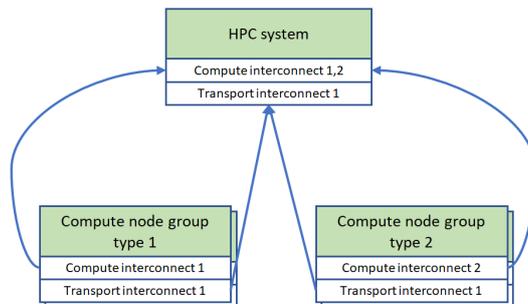


Fig. 2. Inheritance of properties from groups of computing nodes to the system as a whole

Such graphs are called models because they are modelling the general features of architecture. Of course, we should not consider this as a model of the system itself. The model of architecture consists of objects located at the vertices of the graph, connected by links — edges. Each object and relationship has attributes. The vertices are divided into the tiers. The examples of attributes for different vertex objects are given in Tab. 1.

- **Tier 1.** The level of the computing system is the root vertex of the graph, which describes the system itself and its characteristics as a whole.
- **Tier 2.** The level of description of groups of nodes. Each vertex corresponds to a group of nodes of the same configuration. The edge parameter I corresponds to the number of nodes of the type it belongs to.
- **Tier 2a.** The level of description of inter-node connections at the level of groups of nodes and, transitively, above (Fig. 2):
 - computer network (for MPI transfers, etc.);

Table 1. Preliminary attributes of vertex objects for the objects of top tiers and interconnect

Tier 1. System description	
– Name – Place of installation – Date of described configuration – Date when the configuration is expired – Peak performance (FP64, FP32, FP16, ...) – Achieved performance (FP64, FP32, FP16, ...) on the relevant tests/criteria – Power consumption – Resource manager and version – Links to other system descriptions – Link to previous configuration	
Tier 2. Node type description	Tier 2a. Inter-node interconnect
– Manufacturer of the base server – Base server model – Communication network – Transport network – Service network – Intergroup interconnect – Operating system (family, type, kernel, ...) – File system (family, version)	– Name – Family – Bandwidth – Latency – Topology – Carrier (copper, fiber) – Number of interfaces per node
Tier 3. Compute group configuration	Tier 3a&4a. Intra-node interconnect
– CPU model and number – GPU model and number – RAM – Local storage – Memory access model (SMP/NUMA) – Interconnects: CPU-CPU, CPU-GPU, GPU-GPU, CPU-NIC, CPU-IO, GPU-I/O, GPU-NIC	– Name – Version – Bandwidth – Latency – Topology – Number of interfaces per unit – Developer of the standard – Type

-
- transport (network file system);
 - service network (image management, monitoring, etc.);
 - internodal connection between accelerators.
 - **Tier 3.** The level of the computing group. Each vertex corresponds to a computational group of a certain type. Computing group refers to the central processor and controlled or accelerators, directly addressable memory, local storage on the node. The arc parameter J corresponds to the number of computational groups on the node that it connects.
 - **Tier 3a.** The intra-node communication level on the node. For example, QPI/Infinity/X-BUS for two or more CPUs per node, or NVLink/Infinity for GPU-to-GPU communication.
 - **Tier 4.** The level of description of the computational group components. At the moment, the central processor, graphics accelerator, other type of accelerator, RAM, local storage (top) are allocated.
 - **Tier 4a.** Level of description of intra-group relations:
 - communication between the central processor and the graphic accelerator;
 - communication between graphics accelerators;
 - communication between the CPU/GPU and network adapters;
 - communication between the CPU/GPU and local storage.
 - **Tier 5.** Provided for a more detailed description of the components. For example, a graphics accelerator chip or a memory hierarchy on an accelerator can be described separately.

It is supposed that the level of detail is such as is required for the analysis of the model, that is, in principle, it is allowed to use an incompletely described model. For example, if there is no information about intra-site connections, their description can be omitted, while the description of the system will remain correct, but with a lower level of detail.

The storage of performance data is intended to be in a format such that:

- saving a lot of measurement results for each configuration;
- selection of subsets of the system components that were involved in performance measurements;
- construction of various ratings, slices according to customizable criteria.

3. Experimental evaluation

We have tested the model on 20 leading systems from the top of Top50 and Top500 lists, with 10 from each. Let us consider several of these well-known systems in terms of the model.

3.1. Frontier, Oak Ridge National Laboratory, USA

Frontier [7, 8] is the most productive system in the world according to Top500 edition No. 59 dated 06.2022. The system is based on HPE Cray EX235a, and consists of 9,408 nodes (Fig. 3).

Each node (Fig. 4) contains one 64-core AMD “3rd generation optimized” processor, 4 AMD MI250X graphics accelerators and 512Gb of DDR4 memory. Logically, the cores are divided into 4 NUMA groups, each of which works with a separate accelerator, consisting of two integrated GPUs. Each node has two local NVMe SSDs of 1.92Tb each.

The nodes are interconnected by a proprietary Slingshot-11 interconnect, 4 interfaces per node. CPU-GPU and GPU-GPU are interconnected by AMD Infinity Fabric.

3.2. Summit, Oak Ridge National Laboratory, USA

The Summit system [10, 11] ranks fourth in the Top500 list of edition No. 59 dated 06.2022.

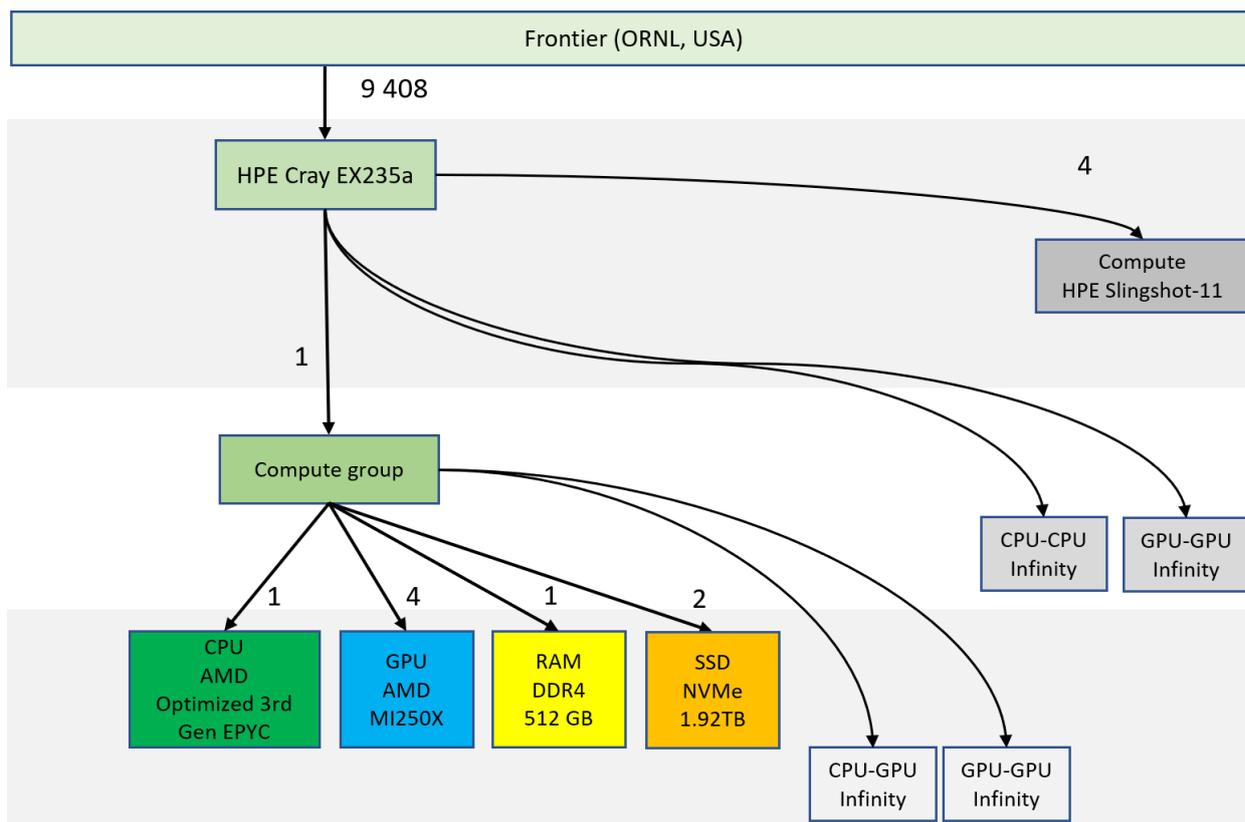


Fig. 3. Description of the Frontier system model

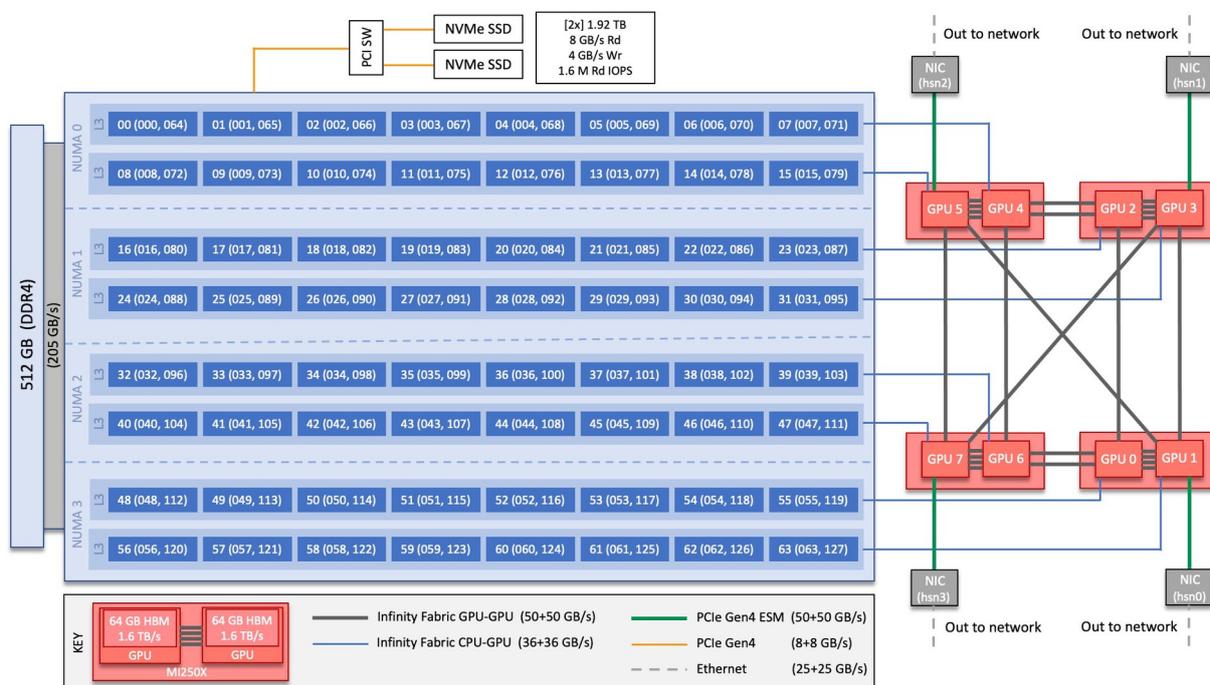


Fig. 4. Frontier system node architecture [9]

The system is based on IBM POWER SYSTEM AC922, contains 4608 computing nodes, each of which contains 2 IBM POWER9 CPUs and 6 NVIDIA GV100 GPUs (Fig. 5). The structure of the node is remarkable (Fig. 6), the computing groups are pronounced, however, the

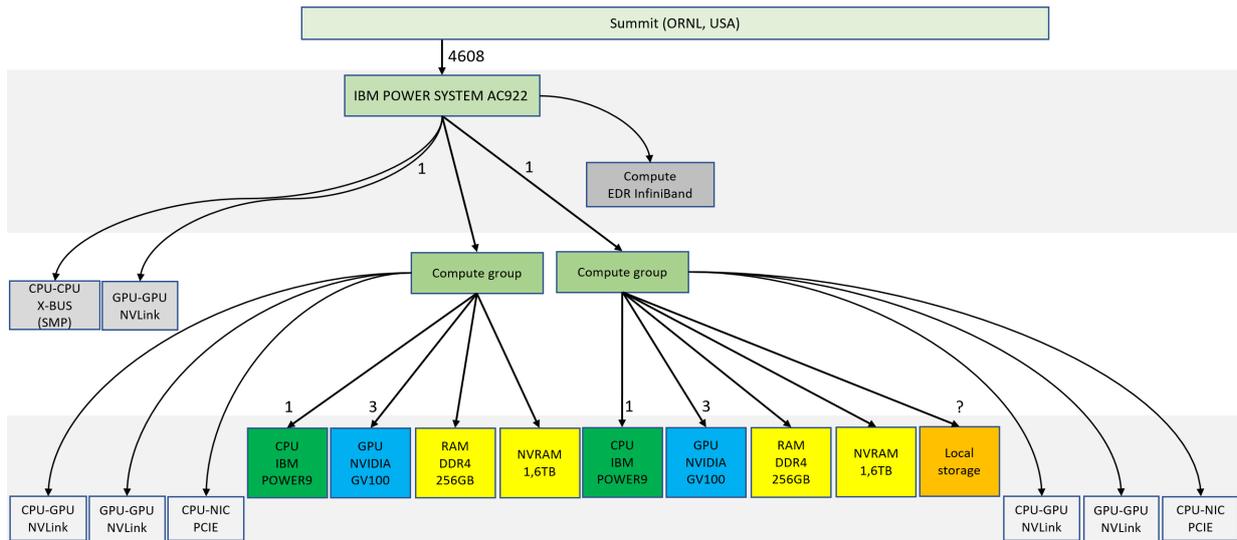


Fig. 5. Description of the Summit system model

X-BUS bus that unites them is SMP. The 22-core processors used are interesting, they already have NVLink support built in them, which avoids the traditionally used PCIe.

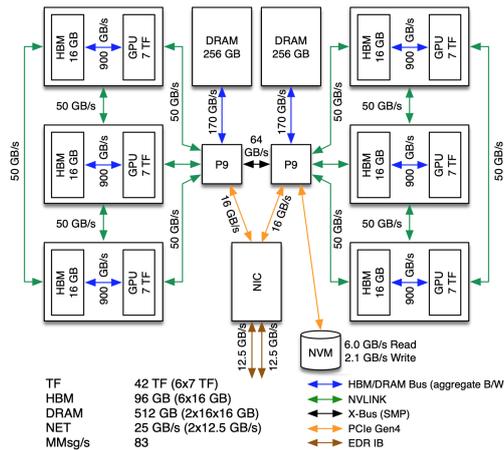


Fig. 6. Summit supercomputer node [12]

In addition to DDR4 memory, non-volatile NVRAM is also available on the node. The computing nodes of this system are interconnected by an EDR InfiniBand interconnect.

3.3. Selene, NVIDIA, USA

The Selene supercomputer [13, 14] was built by NVIDIA in accordance with the DGX SuperPOD principle [15] from DGX A100 nodes. By the way, one of the leading Russian Christofari Neo systems is built using the same SuperPOD technology.

The Selene system consists of 560 nodes, each of them with 8 high-performance NVIDIA Ampere A100 GPU accelerators allowed this system to take the 8th place in the TOP500 edition of June 2022.

Each node (NVIDIA DGX A100) is hybrid, and contains 2 AMD Epyc Rome 7742 CPUs and 8 NVIDIA A100 GPUs connected by an NVLink interconnect (Fig. 7). The AMD Epyc Rome 7742 processor contains 48 cores. The NVIDIA Ampere A100 GPU accelerator consists of

108 multiprocessors (SM), each of which can execute 64 CUDA cores or 4 “tensor” cores. Each node is equipped with 1024Gb of DDR4 RAM in NUMA mode, $2 \times 1.92\text{Tb}$ local NVMe SSDs and $4 \times 3.84\text{Tb}$ NVMe SSDs. The computing nodes of this system are interconnected by an HDR InfiniBand interconnect using the Fat Tree topology.

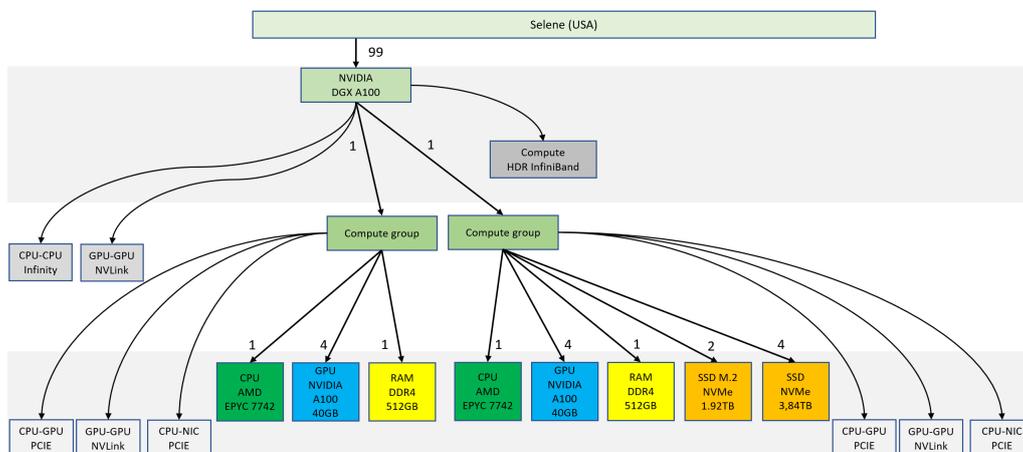


Fig. 7. Description of the Selene system model

Let us consider more spreading architectures that have developed historically as a result of multi-stage development. Both described systems can be found in the top of the Top50 list of the most powerful installations in Russia. Good news is that most of system holder from the Top50 list are open for discussions and are interested in developing the tools aimed at improving the efficiency of systems at all levels [16].

3.4. Lomonosov-2, Moscow State University, Russia

Lomonosov-2 with a performance of FP64 2.478 PFLOP/s (FP64 4.95 PFLOP/s peak) achieved on the HPL, the Lomonosov-2 system [17], installed at the HPC center of Moscow State University [18, 19], ranks the sixth in the Top50 list of the current edition (No. 37 dated 09.2022) [20, 21].

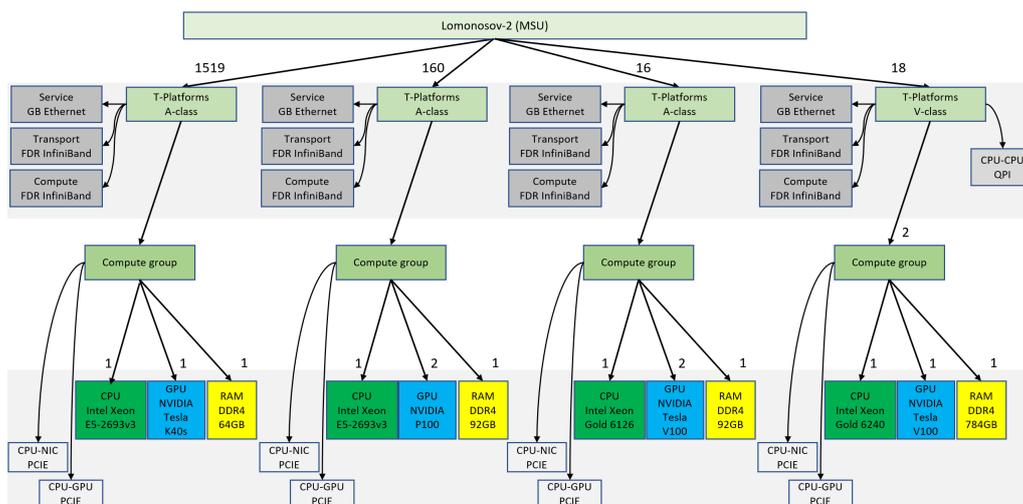


Fig. 8. Description of the Lomonosov-2 system model

The system has been the leader in the list of Russian supercomputers for many years and consists of a number of heterogeneous nodes based on the A-Class and V-Class of the T-Platform company. The nodes are predominantly uniprocessor, except for one segment (Fig. 8). There are no local disks on the nodes. The computing nodes of the Lomonosov-2 supercomputer are connected by an FDR InfiniBand interconnect, the transport network is FDR InfiniBand, and the service network is GB Ethernet.

3.5. cCHARISMa, Higher School of Economics, Russia

In the tenth place in terms of performance achieved on HPL FP64 927.4 PFLOP/s (FP64 2027.27 PFLOP/s peak) in the Top50 list of the current edition (No. 37 dated 09.2022) is the cCHARISMa system [22], installed at the HSE [23]. The system is heterogeneous, consisting of

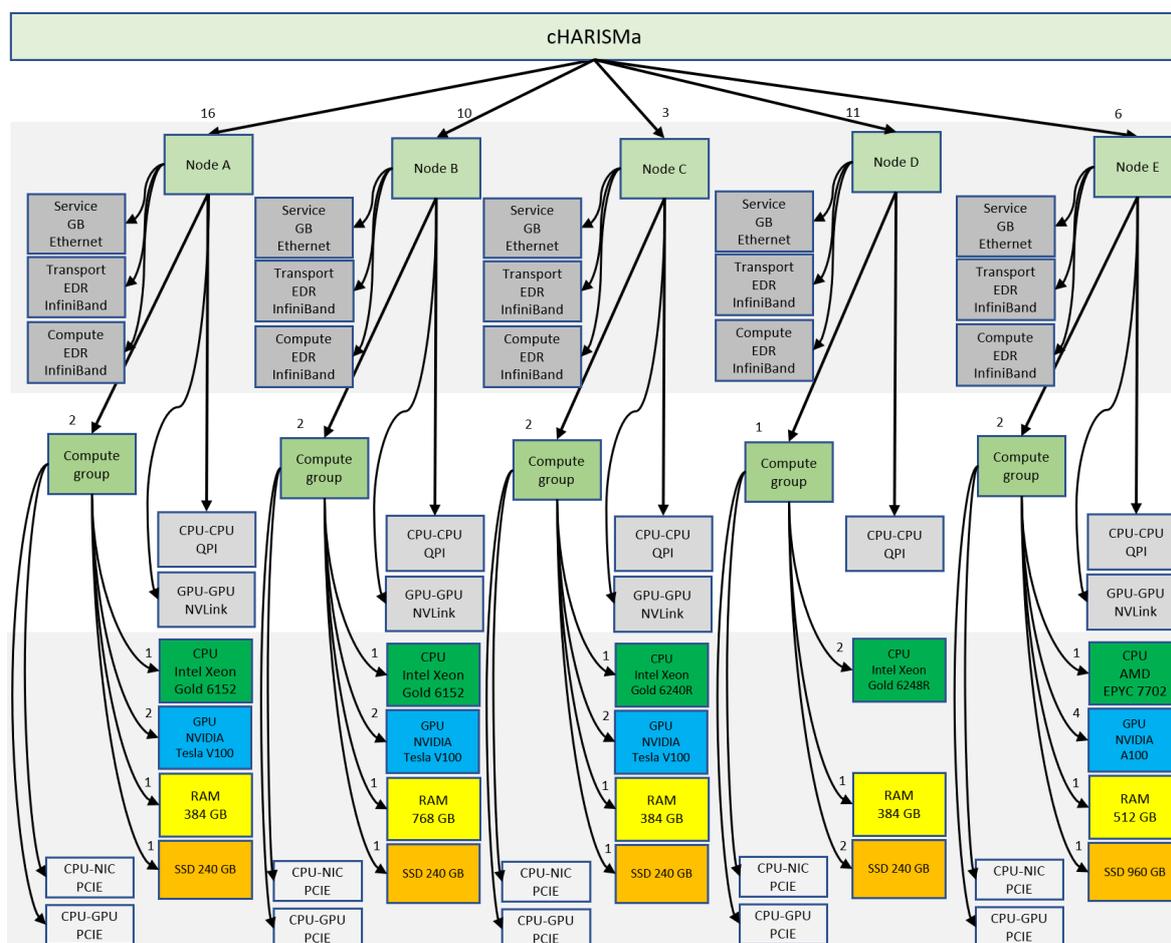


Fig. 9. Description of the cCHARISMa system model

five types of nodes, both based on Intel and AMD processors (Fig. 9). Most part of the nodes are equipped with GPU like NVIDIA A100 and V100, small part are classic dual-processor servers. Heterogeneity is due to different classes of computational problems that are solved on the supercomputer. Each node type has two SSD drives in RAID 1. Computing nodes of the cCHARISMa are connected by two aggregated EDR InfiniBand NICs ($2 \times 100\text{Gb/s}$), and also has Gigabit Ethernet service and monitoring networks.

Conclusion

A basic version of the model of supercomputer systems has been developed for their comparative analysis. The developed model is hierarchical and supports the introduction of additional levels and relationships between levels.

Basic versions of models of supercomputer systems architectures make it possible to calculate the characteristics of supercomputer systems, in particular, higher-level parameters from the parameters of lower levels. It also makes it possible to calculate the characteristics of the components of supercomputer systems according to given general characteristics, in particular, by limiting the sample of systems by a certain parameter, as a result of screening, only records with a finite number of components remain, all of whose characteristics are known. The proposed approach allows processing the results of calculations: all performance results are stored in accordance with the model, which allows a comprehensive comparison of systems.

The model was tested on the leading and latest promising systems in Russia and the world: the top 10 Russian computing systems from the Top50 rating of the current edition were considered and described; reviewed and described the top 10 computing systems of the world from the Top500 rating of the current edition. Some of the models are given in this article. At this stage, the number of systems considered, does not allow for meaningful analysis of described systems but for some general conclusions. The description of the systems is carried out in order to test the approach and to provide its further adjustment. We will gladly report the analysis results next year after analysing considerable number of other outstanding systems.

From the point of view of the development of the proposed model, testing showed the feasibility of a detailed consideration at the next stage of work of the following aspects: description of the hierarchy of memory and the means of exchange with memory; ability to describe the nesting of the GPU (revealed on the example of AMD MI250X in the Frontier system, etc.).

From the point of view of the development of comparative analysis methods, it is necessary to ensure work with the promising criteria identified in the previous sections: for computing nodes, groups of nodes and systems as a whole — the specific amount of memory per computing core; for processors and accelerators — the specific amount of cache memory per computing core, the number of channels for working with memory.

In addition, it is necessary to ensure the possibility of ranking in the generated slices and ratings simultaneously by several characteristics.

The research is carried out using the equipment of the shared research facilities of HPC computing resources at Lomonosov Moscow State University.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics (“National Center for Supercomputer Architecture Research” project).

This paper is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution-Non Commercial 4.0 License which permits non-commercial use, reproduction and distribution of the work without further permission provided the original work is properly cited.

References

1. Nikitenko D.A., Zheltkov A.A. The Top50 list vivification in the evolution of HPC rankings. *Parallel Computational Technologies*. Vol. 753 / ed. by L. Sokolinsky, M. Zymbler. Cham: Springer, 2017. P. 14–26. *Communications in Computer and Information Science*. DOI: 10.1007/978-3-319-67035-5_2.
2. Antonov A., Dongarra J., Voevodin V. AlgoWiki Project as an Extension of the Top500 Methodology. *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2018. Vol. 5, no. 1. P. 4–10. DOI: 10.14529/jsfi180101.
3. Antonov A.S., Nikitenko D.A., Voevodin V.V. Algo500 – A New Approach to the Joint Analysis of Algorithms and Computers. *Lobachevskii J Math*. 2020. Vol. 41, no. 6. P. 1435–1443. DOI: 10.1134/S1995080220080041.
4. Antonov A.S., Maier R.V. Development and Implementation of the Algo500 Scalable Digital Platform Architecture. *Lobachevskii J Math*. 2022. Vol. 43, no. 7. P. 837–847. DOI: 10.1134/S1995080222070058.
5. Kostenetskii P.S., Sokolinsky L.B. Simulation of Hierarchical Multiprocessor Database Systems. *Programming and Computer Software*. 2013. Vol. 39, no. 1. P. 10–24. DOI: 10.1134/S0361768813010040.
6. Zhang Y., Chen G., Sun G., Miao Q. Models of Parallel Computation: A Survey and Classification, *Frontiers Comput. Sci. China*. 2007. Vol. 1, no. 2. P. 156–165. DOI: 10.1007/s11704-007-0016-1.
7. Official Frontier website at ORNL. URL: <https://www.olcf.ornl.gov/frontier> (accessed: 07.11.2022).
8. Frontier system at Top500 rating. URL: <https://www.top500.org/system/180047> (accessed: 07.11.2022).
9. Frontier system User Guide. URL: https://docs.olcf.ornl.gov/systems/frontier_user_guide.html (accessed: 07.11.2022).
10. Official Summit website at ORNL. URL: <https://www.olcf.ornl.gov/frontier> (accessed: 07.11.2022).
11. Summit system at Top500 rating. URL: <https://www.top500.org/system/179397> (accessed: 07.11.2022).
12. Summit system User Guide. URL: https://docs.olcf.ornl.gov/systems/frontier_user_guide.html (accessed: 07.11.2022).
13. Official Selene website. URL: <https://www.nvidia.com/en-us/on-demand/session/gtcspring21-s31700/> (accessed: 07.11.2022).
14. Selene system at Top500 rating. URL: <https://www.top500.org/system/179842/> (accessed: 07.11.2022).
15. NVIDIA SuperPOD. URL: <https://www.nvidia.com/en-us/data-center/dgx-superpod/> (accessed: 07.11.2022).
16. Voevodin V.V., Chulkevich R.A., Kostenetskiy P.S., *et al.* Administration, Monitoring and Analysis of Supercomputers in Russia: a Survey of 10 HPC Centers. *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2021. Vol. 8, no. 3. P. 82–103. DOI: 10.14529/jsfi210305.

17. Voevodin V.V., Antonov A.S., Nikitenko D.A., *et al.* Supercomputer Lomonosov-2: Large scale, deep monitoring and fine analytics for the user community. *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2019. Vol. 6, no. 2. P. 4–11. DOI: 10.14529/jsfi190201.
18. Lomonosov-2 User's Guide. URL: <https://parallel.ru/cluster/lomonosov2.html> (accessed: 07.11.2022). (in Russian)
19. Voevodin V., Antonov A., Nikitenko D., *et al.* Lomonosov-2: Petascale supercomputing at Lomonosov Moscow State University. *Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale*. Vol. 3. Boca Raton, United States: CRC Press, 2019. P. 305–330. DOI: 10.1201/9781351036863-12.
20. Lomonosov-2 system at Top50 rating. URL: <http://top50.supercomputers.ru/systems/4568> (accessed: 07.11.2022). (in Russian)
21. Lomonosov-2 system at Top500 rating. URL: <https://www.top500.org/system/178444/> (accessed: 07.11.2022).
22. HSE cHARISMa system at Top50 rating. URL: <http://top50.supercomputers.ru/systems/6294> (accessed: 07.11.2022). (in Russian)
23. Kostenetskiy P.S., Chulkevich R.A., Kozyrev V.I. HPC Resources of the Higher School of Economics. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1740, no. 1. P. 012050. DOI: 10.1088/1742-6596/1740/1/012050.

УДК 004.2, 004.7

DOI: 10.14529/cmse220401

ИЕРАРХИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АРХИТЕКТУРЫ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ СРАВНЕНИЯ И РАНЖИРОВАНИЯ

© 2022 Д.А. Никитенко

Научно-исследовательский вычислительный центр

Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

(119991 Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 4)

E-mail: dan@parallel.ru

Поступила в редакцию: 07.11.2022

Задача сравнения возможностей вычислительных систем между собой и формирования различных рейтингов преследует множество возможных целей. Здесь и выявление трендов, и продвижение отработанных архитектур общего назначения, и демонстрация превосходства на определенном классе задач и др. Одного лишь описания достигнутой производительности для всех этих целей, конечно, недостаточно, в различных рейтингах и сравнения используются различные уровни абстракции и обобщения до того уровня, который бы позволил связать выявленные показатели производительности с теми или иными особенностями системы. На практике описания архитектурных особенностей систем в рейтингах достаточно скудны, и авторами работы решается задача по составлению формального описания вычислительных систем относительно высокого уровня, которое при этом позволило бы увеличивать требуемый уровень детализации, соответствующий целям прикладных исследований. Такая иерархическая модель описания систем предложена и апробирована на известных системах из списков Top50 и Top500.

Ключевые слова: модель суперкомпьютерной системы, описание архитектуры суперкомпьютерных систем, сравнение производительности вычислительных систем, рейтинги производительности.

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Nikitenko D.A. Hierarchical Model of Architecture of Supercomputer Systems for Comparison and Ranking // Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2022. Т. 11, № 4. С. 5–18. DOI: 10.14529/cmse220401.

Литература

1. Nikitenko D.A., Zheltkov A.A. The Top50 list vivification in the evolution of HPC rankings // Parallel Computational Technologies. Vol. 753 / ed. by L. Sokolinsky, M. Zymbler. Cham: Springer, 2017. P. 14–26. Communications in Computer and Information Science. DOI: 10.1007/978-3-319-67035-5_2.
2. Antonov A., Dongarra J., Voevodin V. AlgoWiki Project as an Extension of the Top500 Methodology // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2018. Vol. 5, no. 1. P. 4–10. DOI: 10.14529/jsfi180101.
3. Antonov A.S., Nikitenko D.A., Voevodin V.V. Algo500 — A New Approach to the Joint Analysis of Algorithms and Computers // Lobachevskii J Math. 2020. Vol. 41, no. 6. P. 1435–1443. DOI: 10.1134/S1995080220080041.
4. Antonov A.S., Maier R.V. Development and Implementation of the Algo500 Scalable Digital Platform Architecture // Lobachevskii J Math. 2022. Vol. 43, no. 7. P. 837–847. DOI: 10.1134/S1995080222070058.
5. Kostenetskii P.S., Sokolinsky L.B. Simulation of Hierarchical Multiprocessor Database Systems // Programming and Computer Software. 2013. Vol. 39, no. 1. P. 10–24. DOI: 10.1134/S0361768813010040.
6. Zhang Y., Chen G., Sun G., Miao Q. Models of Parallel Computation: A Survey and Classification // Frontiers Comput. Sci. China. 2007. Vol. 1, no. 2. P. 156–165. DOI: 10.1007/s11704-007-0016-1.
7. Official Frontier website at ORNL. URL: <https://www.olcf.ornl.gov/frontier> (дата обращения: 07.11.2022).
8. Frontier system at Top500 rating. URL: <https://www.top500.org/system/180047> (дата обращения: 07.11.2022).
9. Frontier system User Guide. URL: https://docs.olcf.ornl.gov/systems/frontier_user_guide.html (дата обращения: 07.11.2022).
10. Official Summit website at ORNL. URL: <https://www.olcf.ornl.gov/frontier> (дата обращения: 07.11.2022).
11. Summit system at Top500 rating. URL: <https://www.top500.org/system/179397> (дата обращения: 07.11.2022).
12. Summit system User Guide. URL: https://docs.olcf.ornl.gov/systems/frontier_user_guide.html (дата обращения: 07.11.2022).
13. Official Selene website. URL: <https://www.nvidia.com/en-us/on-demand/session/gtcspring21-s31700/> (дата обращения: 07.11.2022).
14. Selene system at Top500 rating. URL: <https://www.top500.org/system/179842/> (дата обращения: 07.11.2022).

15. NVIDIA SuperPOD. URL: <https://www.nvidia.com/en-us/data-center/dgx-superpod/> (дата обращения: 07.11.2022).
16. Voevodin V.V., Chulkevich R.A., Kostenetskiy P.S., *et al.* Administration, Monitoring and Analysis of Supercomputers in Russia: a Survey of 10 HPC Centers // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2021. Vol. 8, no. 3. P. 82–103. DOI: 10.14529/jsfi210305.
17. Voevodin V.V., Antonov A.S., Nikitenko D.A., *et al.* Supercomputer Lomonosov-2: Large scale, deep monitoring and fine analytics for the user community // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2019. Vol. 6, no. 2. P. 4–11. DOI: 10.14529/jsfi190201.
18. Lomonosov-2 User's Guide. URL: <https://parallel.ru/cluster/lomonosov2.html> (дата обращения: 07.11.2022).
19. Voevodin V., Antonov A., Nikitenko D., *et al.* Lomonosov-2: Petascale supercomputing at Lomonosov Moscow State University // Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale. Vol. 3. Boca Raton, United States: CRC Press, 2019. P. 305–330. DOI: 10.1201/9781351036863-12.
20. Lomonosov-2 system at Top50 rating. URL: <http://top50.supercomputers.ru/systems/4568> (дата обращения: 07.11.2022).
21. Lomonosov-2 system at Top500 rating. URL: <https://www.top500.org/system/178444/> (дата обращения: 07.11.2022).
22. HSE CHARISMa system at Top50 rating. URL: <http://top50.supercomputers.ru/systems/6294> (дата обращения: 07.11.2022).
23. Kostenetskiy P.S., Chulkevich R.A., Kozyrev V.I. HPC Resources of the Higher School of Economics // Journal of Physics: Conference Series. 2021. Vol. 1740, no. 1. P. 012050. DOI: 10.1088/1742-6596/1740/1/012050.

Никитенко Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н., Научно-исследовательский вычислительный центр Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова (Москва, Российская Федерация)

ВЫЯВЛЕНИЕ УСТОЙЧИВЫХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ ПОКАЗАТЕЛЯМИ КОННЕКТИВНОСТИ ЭЭГ И КОМПОНЕНТАМИ ИНТЕЛЛЕКТА*

© 2022 Т.В. Авдеенко, А.Ю. Тимофеева,
М.Ш. Муртазина, О.М. Разумникова

*Новосибирский государственный технический университет
(630073 Новосибирск, пр. К. Маркса, д. 20)*

*E-mail: tavdeenko@mail.ru, a.timofeeva@corp.nstu.ru,
murtazina@corp.nstu.ru, razumnikova@corp.nstu.ru*

Поступила в редакцию: 14.11.2022

Согласно гипотезе «нейронной эффективности» показатели интеллекта связаны со специфическими пространственными особенностями оптимальной функциональной активности мозга. Так как имеются исследования, не подтверждающие такой взаимосвязи, актуальным остается исследование вопроса ее устойчивости. Поэтому основная задача исследования заключается в поиске метрик коннективности ЭЭГ в состоянии покоя, устойчиво коррелирующих с показателями вербального и зрительно-пространственного компонентов интеллекта. В качестве потенциальных мер взаимосвязи исследуемых параметров выбраны коэффициенты корреляции Пирсона, Спирмена, полихорический коэффициент корреляции и их устойчивые аналоги, вычисленные на основе усечения, метода MCD, метода знаков. Для оценки устойчивости к выбросам применялся критерий поэлементного удаления (leave-one-out test, LOOT), на основе которого рассчитывался взвешенный робастный аналог коэффициентов корреляции. По степени отклонения от его исходного значения, рассчитанного на всей выборке, можно судить о чувствительности к выбросам. Показано, что коэффициенты корреляции, основанные на рангах и использующие усечение, наиболее устойчивы к выбросам. В результате выявлены устойчивые значимые корреляции между показателями интеллекта и коннективностью ЭЭГ в состоянии покоя, свидетельствующие о потенциально эффективной преднастройке функциональных нейронных сетей с объединением локальных и дистантно распределенных нейронных ансамблей.

Ключевые слова: ЭЭГ, состояние покоя, коннективность сетей мозга, интеллект, меры на графах, робастность, корреляция.

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Авдеенко Т.В., Тимофеева А.Ю., Муртазина М.Ш., Разумникова О.М. Выявление устойчивых связей между показателями коннективности ЭЭГ и компонентами интеллекта // Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2022. Т. 11, № 4. С. 19–36. DOI: 10.14529/cmse220402.

Введение

Трендом последних лет являются исследования взаимосвязи эффективности когнитивной деятельности человека и структурно-функциональной организации активности мозга. В ранних исследованиях [1, 2] с использованием метода позитронно-эмиссионной томографии было обнаружено, что участники с более высокими баллами при тестировании интеллекта с использованием прогрессивных матриц Равена характеризовались метаболически менее затратной по потреблению глюкозы активностью мозга по сравнению с теми, кто имел более низкие баллы. На основе этих данных была сформулирована гипотеза «нейронной

*Статья рекомендована к публикации программным комитетом Международной конференции «Data Analytics and Management in Data Intensive Domains — 2022».

эффективности» интеллекта, которая в настоящее время является одним из подходов к пониманию связи между функционированием мозга и когнитивной деятельностью. Согласно этой гипотезе, мозг людей с высоким интеллектом работает более эффективно при выполнении сложных когнитивных задач по сравнению с функциональной активностью мозга при более низком интеллекте.

Для проверки этой гипотезы используются разные методы измерения и анализа электрической (электроэнцефаллограмма и магнитоэнцефалограмма, соответственно ЭЭГ и МЭГ) и метаболической (например, позитронной и функциональной магнитно-резонансной томографии, соответственно ПЭТ и фМРТ) активности мозга и разные способы тестирования интеллекта. В ходе этих исследований было обнаружено, что эффективное функционирование мозга может отражаться не только в большей или меньшей степени активации мозга, но и в показателях функциональной связи между различными областями мозга, в том числе префронтальных [3] или взаимодействии префронтальных и теменных отделов [4] или теменных и центрально-височных [5]. Таким образом, интеллект человека не локализован в какой-либо одной области мозга, а представлен распределенной сетью нейронных ансамблей как динамической системы, которую можно изучать с помощью методов оценки функциональной связи.

Структуру и динамику функциональных изменений этой сложной системы и паттернов коннективности внутри нее можно изучать с помощью сетевого моделирования, в основе которого лежит математическая теория графов. Данная теория предлагает ряд сетевых метрик, которым можно придать содержательный смысл, с тем чтобы впоследствии судить о влиянии топологии сети на особенности когнитивного поведения и оценивать эффективность когнитивной деятельности.

В соответствии с гипотезой нейронной эффективности уровень когнитивных способностей коррелирует с активностью мозга во время когнитивной нагрузки. Что касается взаимосвязи активности мозга в состоянии покоя и интеллектуальных способностей человека, в литературе имеются противоречивые результаты по этому поводу. Так, в работах [6, 7] утверждается о выявленной устойчивой связи метрик коннективности в альфа диапазоне с невербальным интеллектом, измеренным с помощью матриц Равена. Результаты, полученные в [8], показывают, что при выполнении теста Векслера IQ отрицательно коррелирует с общей мощностью ЭЭГ и положительно — с общим показателем коннективности без значимой дифференциации этой связи в зависимости от частотного диапазона.

С использованием матриц связности для данных фМРТ в состоянии покоя с привлечением к исследованию 884 человек удалось объяснить около 20 % дисперсии общего интеллекта, однако ни одна анатомическая структура мозга или сеть не была выделена [9]. В рамках еще более крупномасштабного исследования с использованием фМРТ [10], включающего 1200 субъектов, также не было обнаружено существенных связей между показателями динамики состояния покоя мозга и общего, кристаллизованного и флюидного интеллекта.

В связи с этим целью настоящего исследования стал поиск устойчивых корреляций между метриками связности, полученных с помощью измерения ЭЭГ в состоянии покоя, и вербальных или невербальных компонентов интеллекта. Мы рассмотрели 7 метрик коннективности, предположительно характеризующих нейронную эффективность мозга, а также 4 субтеста, используемые при определении структуры интеллекта согласно методике Амтхауэра, два из которых предназначены для оценки вербальных способностей (IQ3, IQ4) и

два — зрительно-пространственных (IQ7, IQ8). Для обеспечения результатов, устойчивых к выбросам, мы исследовали корреляционные меры, основанные на рангах, знаках и процедурах усечения, а также процедуру вычисления корреляции с помощью бутстрепа для тестовой и контрольной выборок, использованную в [7]. Полученные робастные процедуры использованы для поиска устойчивых связей метрик коннективности с показателями интеллекта.

Работа организована следующим образом. Раздел 1 содержит описание исследуемых показателей и особенностей сбора данных. В разделе 2 содержится описание процесса построения графа (бинарного и взвешенного вариантов) и вычисления метрик коннективности, а также процедуры анализа робастности корреляционных мер. В разделе 3 описываются вычислительные эксперименты и их результаты. Заключение подводит итоги проделанной работы.

1. Сбор экспериментальных данных

ЭЭГ регистрировали в состоянии спокойного бодрствования с закрытыми глазами с помощью аппаратно-программного электроэнцефалографического комплекса «Мицар-201» (ООО «Мицар», Санкт-Петербург, РФ) в 19 отведениях (Fp1, Fp2, F7, F3, Fz, F4, F8, T3, C3, Cz, C4, T4, T5, P3, Pz, P4, T6, O1, O2), размещенных по системе 10-20. Референтным был объединенный ушной электрод.

Участки, содержащие артефактную активность, связанную с движением глаз или напряжением мышц и т.п., удаляли методом независимых компонент.

Коэффициент интеллекта (IQ) отражает эффективность выполнения различных когнитивных операций (памяти, понимания, сравнения, анализа, синтеза и т.д.) в ограниченное время. Для определения IQ используется отношение ментального и хронологического возраста, т.е. 100 баллов соответствует норме: среднему количеству правильно решенных заданий в соответствующей возрастной популяции.

Одним из широко применяемых методов, используемых в России для измерения общего интеллекта и его отдельных компонентов, является тест структуры интеллекта Амтхауэра [11]. Общее время тестирования составляет 90 минут. Результаты теста позволяют получить развернутый профиль вербальных, арифметических и зрительно-пространственных интеллектуальных способностей испытуемого.

Таблица 1. Субтесты структуры интеллекта Амтхауэра

Идентификатор	Суть задачи	Исследуемые способности
IQ2	удалить лишнее слово из пяти слов	способности к оперированию вербальными понятиями
IQ3	понять смысл связи в первой паре слов и на основании этого указать пропущенное слово во второй паре слов	комбинаторные способности операций с вербальными ассоциациями
IQ7	найти фигуру, соответствующую такой же, но разбитой на несколько частей	комбинаторные способности операций с пространственными признаками объектов
IQ8	сопоставить кубы со специально обозначенными гранями	пространственное воображение

В нашем исследовании были использованы результаты двух вербальных субтестов (IQ2 и IQ3) и двух зрительно-пространственных (невербальных) субтестов (IQ7 и IQ8), содержание которых представлено в табл. 1.

В исследовании принимали участие 107 обучающихся (25 мужчин и 82 женщины) Новосибирского государственного технического университета (НГТУ). Возраст участников варьировался от 17 до 41 лет ($\text{mean} = 18.73$, $\text{SD} = 2.76$).

2. Методы исследования

2.1. Построение графа и вычисление метрик коннективности сетей мозга

Синхронизация между двумя ЭЭГ-каналами может быть оценена на основе показателей взаимосвязи между парой сигналов на определенной частоте. Одним из таких показателей является мнимая когерентность (iМОСН), которая определяется следующим образом. Сначала для (комплексных) преобразований Фурье $x_i(f)$ и $x_j(f)$ временных рядов $\hat{x}_i(t)$ и $\hat{x}_j(t)$ каналов i и j , соответственно, определяется кросс-спектр

$$S_{ij}(f) \equiv \langle x_i(f)x_j^*(f) \rangle,$$

где $*$ означает комплексное сопряжение, а $\langle \rangle$ означает ожидаемое значение. Далее, мнимая когерентность определяется следующим образом

$$icoh_{ij}(f) \equiv \frac{Im(S_{ij}(f))}{\sqrt{S_{ii}(f)S_{jj}(f)}},$$

где $Im(S_{ij}(f))$ — мнимая часть $S_{ij}(f)$. Обычно используется абсолютное значение мнимой когерентности, поскольку интерес представляет величина связности пары сигналов. В нашем исследовании iМОСН рассчитывался с помощью программного обеспечения MNE Python для пяти частотных диапазонов: дельта (менее 4 Гц), тета (4–8 Гц), альфа (8–13 Гц), бета (13–30 Гц), гамма (более 30 Гц) [12].

Таким образом, для каждого субъекта исследования и каждого частотного диапазона была построена матрица, содержащая 19×19 пар значений (для 19 рассмотренных каналов) мнимой когерентности (матрица значений iМОСН). На практике, для увеличения отношения сигнал/шум некоторые «слабые» связи удаляются, так как они не содержат никакого релевантного физиологического сигнала. Для этого в качестве порога обнуления могут использоваться различные значения квантилей q (от 10 % до 90 %) силы связей, вычисленных для каждого субъекта исследований. Связи ниже порога q полагаются равными нулю.

На основе матрицы значений iМОСН строится матрица смежности графа. В настоящем исследовании были рассмотрены два варианта построения графа — бинарный и взвешенный. Бинарный граф строится естественным образом. Если абсолютное значение iМОСН больше выбранного порога, то соответствующий элемент матрицы смежности полагается равным единице, в противном случае — нулю.

Для построения взвешенного графа после обнуления значений ниже заданного порога матрица iМОСН, как и в [13], нормировалась путем деления всех ее значений на максимальное значение когерентности в пределах этой матрицы. Этот шаг приводит к тому, что все полученные значения ограничены интервалом от 0 до 1, что также направлено на устранение группового смещения, которое могло быть вызвано зависящей от группы силой функциональной связности [14].

Для выявления корреляций сетевой модели мозга, определенной построенным графом, с подтестами интеллекта мы воспользовались подходом, при котором графовое описание заменяется некоторым числом метрик, характеризующих связность графа с различных сторон. В теории графов существует множество показателей, количественно характеризующих связность сети. Мы рассмотрели и исследовали метрики, наиболее часто встречающиеся в подобных исследованиях. Далее приведем используемые метрики и их смысл.

Средняя и характерная длина пути (Average and Characteristic Path Length, APL, CPL) рассчитываются на основе расстояния $d(v_i, v_j)$ между парой узлов i и j в графе. При расчете средней длины пути находится среднее арифметическое этих расстояний, при расчете характерной длины пути — медиана. Расстояние между вершинами — это длина кратчайшего пути от одной вершины к другой. Заметим, что если большинство вершин в графе не связаны (например, при задании высокого порогового значения для коэффициентов iMCOH), то медиана расстояний будет равна бесконечности. Кроме того, для бинарного графа медиана расстояний принимает целые значения и, как правило, слабо меняется в зависимости от субъектов. В таком случае она становится бесполезной для задач классификации индивидов. По этой причине далее в исследовании построен взвешенный граф.

Коэффициент кластеризации — это мера склонности узлов графа создавать взаимосвязанные группы. Он измеряет вероятность того, что ближайшие соседи некоторого узла соединены:

$$CC = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{2L_i}{k_i(k_i - 1)},$$

где k_i — степень i -го узла, N — число узлов графа, L_i — число ребер между соседями узла i -го. Для неориентированного графа определяется как соотношение количества треугольников и связанных троек в графе.

Модулярность сети — мера функциональной сегрегации, которая определяет, насколько хорошо сеть может быть разделена на непересекающиеся группы узлов или модулей (кластеров, сообществ). Для ее расчета лучше разбить граф на кластеры с помощью выбранного алгоритма оптимизации модулярности, например, с помощью жадных алгоритмов, алгоритмов на основе случайного блуждания, многоуровневых алгоритмов на базе иерархического подхода. Тогда модулярность будет характеризовать концентрацию связей в выделенных кластерах по сравнению со случайным распределением связей между всеми узлами без учета кластеров:

$$Q = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \sum_r (A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m}) S_{ir} S_{jr},$$

где m — число ребер, A_{ij} — элемент матрицы смежности A , $S_{ir} = 1$, если i -й узел принадлежит группе r , иначе $S_{ir} = 0$.

Диаметр — наибольшее расстояние между любой парой узлов внутри сети:

$$D = \max(d(v_i, v_j)).$$

Для этой мере существует такая же проблема, как и для CPL. В случае невзвешенного графа диаметр принимает малое число дискретных значений, которые не позволяют выявить различия в сети интеллекта между индивидами.

Центральность по собственному вектору EC — мера влияния узла в сети. Выбирается собственный вектор, соответствующий максимальному собственному значению λ_{\max} мат-

рицы смежности A графа. Высокие значения собственного вектора соответствуют узлам, которые соединены со многими узлами, имеющим высокие значения центральности. Максимальное собственное значение и является коэффициентом центральности.

Центральность по близости вершины определяется как величина, обратная средней длине кратчайших путей ко всем другим вершинам графа:

$$C_i = \frac{1}{\sum_j d(v_i, v_j)}.$$

Таким образом, чем более центральна вершина, тем ближе она ко всем другим вершинам. Для вычисления коэффициента центральности по близости \bar{C} значения центральностей вершин усредняются с помощью среднего арифметического.

Метрики коннективности на графах были рассчитаны с использованием пакета `igraph` в среде `R`.

2.2. Робастные оценки коэффициентов корреляции

В целом при анализе взаимосвязей с использованием данных ЭЭГ проблема робастности стоит остро, поскольку для таких данных характерна высокая доля выбросов. Частично эта проблема решается на этапе предварительной обработки данных ЭЭГ. Но показатели, рассчитанные на основе данных ЭЭГ, все же содержат выбросы. Это хорошо видно по примерам корреляционных полей мер коннективности на графах и невербального интеллекта, приведенным в статье [7].

Однако обычно для оценки связи при изучении данных ЭЭГ используют коэффициент корреляции Пирсона. В работе [7] применили следующий подход, используемый в области машинного обучения [15]. Вся выборка была случайным образом разделена на две подгруппы: тестовая и валидационная выборки. Затем с помощью бутстрепа были отдельно рассчитаны коэффициенты корреляции для двух выборок — для показателей интеллекта и всех типов показателей связности. В качестве порога использовались медианные значения показателей синхронизации между ЭЭГ-каналами для индивида (то есть 50 % пар каналов с наивысшими оценками синхронизации использовались для расчета метрик графа). Из этой процедуры были взяты только те показатели, которые достоверно коррелировали с показателями интеллекта в обеих подвыборках.

Такая процедура не гарантирует получение устойчивых к выбросам результатов, поскольку, как известно, коэффициент корреляции Пирсона сильно чувствителен к выбросам. Поэтому в нашей статье мы рассмотрим робастные корреляционные меры, устойчивые к засорению, основанные на рангах, знаках и процедурах усечения. Таких робастных коэффициентов корреляции в литературе предложено множество [16]. Поэтому выбор более подходящего коэффициента должен быть обоснован исходя из особенности конкретных данных. Ранее применимость робастных коэффициентов корреляции к проблеме засорения мер коннективности на графах, построенных по данным ЭЭГ, не исследовалась. Для оценки робастности предложено использовать показатель отклонения выборочной оценки коэффициента корреляции от его робастного аналога.

Поскольку коэффициент корреляции Пирсона не устойчив при появлении в выборке выбросов, имеет смысл рассмотреть робастные оценки коэффициентов корреляции. Ряд таких оценок основаны на рангах, например, коэффициент корреляции Спирмена. Поскольку он учитывает только отношение порядка, а не количественную разницу между значениями признаков, то он устойчив, если в выборке есть отдаленные от основной совокупности точ-

ки. Тем не менее он дает сбои, если данные содержат много повторяющихся значений, то есть имеют высокую степень дискретизации. Это касается показателей IQ, которые принимают целочисленные значения. Кроме того ряд показателей связности невзвешенного графа могут принимать ограниченное число целых значений.

По этой причине имеет смысл проанализировать поведение полихорического коэффициента корреляции [17], который аналогично коэффициенту корреляции Спирмена устойчив к аномальным наблюдениям, но в отличие от него предназначен для анализа порядково-категориальных признаков. Тем не менее он основан на предположении, что латентные непрерывные переменные, вместо которых наблюдаются соответствующие им дискретные переменные, имеют совместное нормальное распределение. Следовательно, в случае отклонения от этого предположения, в том числе и по причине выбросов, полихорический коэффициент корреляции будет давать сбои.

Другой вариант использования рангов, а также знакового метода, — квадрантный (знаковый) коэффициент корреляции [18]. Он представляет собой выборочный коэффициент корреляции между знаками отклонений от медиан.

Другими стандартными подходами к работе с выбросами являются методы усечения, то есть исключение части наиболее удаленных от основной массы наблюдений. Обычно задается доля α отсекаемых наблюдений (в упорядоченном ряду $\alpha/2$ минимальных и $\alpha/2$ максимальных). Самая простая модификация обычного коэффициента корреляции Пирсона — это замена средних значений медианой и взятие сумм усеченных значений, то есть:

$$r_\alpha = \frac{\sum_\alpha (x_i - \text{med}(x))(y_i - \text{med}(y))}{(\sum_\alpha (x_i - \text{med}(x))^2 \sum_\alpha (y_i - \text{med}(y))^2)^{1/2}},$$

где $\text{med}(x)$ — медиана x , \sum_α — оператор суммирования по усеченной подвыборке. При $\alpha = 0.1, 0.2$ коэффициент использовался в работе [19]. Обозначим этот коэффициент как trimmed median coefficient.

Еще один подход предполагает использование робастных главных переменных:

$$u_i = \frac{x_i - \text{med}(x)}{\sqrt{2MAD(x)}} + \frac{y_i - \text{med}(y)}{\sqrt{2MAD(y)}}, \quad v_i = \frac{x_i - \text{med}(x)}{\sqrt{2MAD(x)}} - \frac{y_i - \text{med}(y)}{\sqrt{2MAD(y)}},$$

где $MAD(z) = \text{med}(|z - \text{med}(z)|)$ — медианное абсолютное отклонение. На их основе рассчитывается усеченный коэффициент корреляции.

Шевляков [20] ввел робастный коэффициент корреляции, который использует медианы абсолютных отклонений Хампеля для получения медианного коэффициента корреляции:

$$r_{med} = \frac{\text{med}^2|u| - \text{med}^2|v|}{\text{med}^2|u| + \text{med}^2|v|}.$$

Задача оценки коэффициента корреляции непосредственно связана с задачей линейной регрессии — подгонки прямой условного математического ожидания. Отсюда, используя робастные оценки наклона, полученные с помощью метода наименьших медиан квадратов [21], приходим к робастной оценке вида:

$$r_{LMS} = \sqrt{\hat{\beta}_{x|y} \hat{\beta}_{y|x}},$$

где $\hat{\beta}_{x|y}, \hat{\beta}_{y|x}$ — устойчивые оценки коэффициентов наклона в регрессии x от y и y от x , соответственно.

Наконец, для устойчивой оценки ковариационной матрицы может быть использован метод MCD (Minimum Covariance Determinant). В методе MCD минимизируется объем гауссовского доверительного эллипсоида, что эквивалентно определителю классической ковариационной матрицы. Среднее значение подмножества обеспечивает начальную оценку параметров сдвига, а перемасштабированная ковариационная матрица — начальную оценку разброса. Рассчитываются расстояния Махаланобиса от оценки сдвига до всех точек для этой ковариационной матрицы, и точки, находящиеся в пределах эллипсоида с 97.5 % доверительным уровнем, объявляются хорошими. Окончательные оценки представляют собой среднее значение и перемасштабированную ковариацию хороших точек.

Чтобы проверить устойчивость оценок коэффициентов корреляции, использовался критерий поэлементного удаления (leave-one-out test, LOOT), при котором одна точка удаляется из набора данных, а корреляция пересчитывается [22]. Эту процедуру можно повторить n раз для набора данных с n точками, каждый раз удаляя другую точку данных. Результатом является n рассчитанных коэффициентов корреляции.

С использованием такой процедуры может быть рассчитан робастный коэффициент корреляции, предложенный в [22]. Он основан на идее средневзвешенного значения корреляций, рассчитанных в LOOT. Идея состоит в том, чтобы взвесить корреляции в соответствии с их отличием от фактической корреляции следующим образом:

$$w_i = |r_{actual} - r_{i,LOOT}|^a,$$

где r_{actual} — значение коэффициента корреляции, рассчитанное по всей выборке, $r_{i,LOOT}$ — значение коэффициента корреляции при удалении i -й точки данных в LOOT, $a = 1 + n/12$. Соответственно, робастный коэффициент рассчитывается следующим образом:

$$r_{Rob} = \frac{\sum_i^n w_i r_{i,LOOT}}{\sum_i^n w_i}.$$

Тогда по модулю отклонения r_{actual} от r_{Rob} можно судить об устойчивости коэффициента корреляции. Значимость робастного коэффициента можно проверить с помощью перестановочного критерия.

3. Вычислительные эксперименты

Описанный в предшествующем разделе подход был использован для анализа данных записей ЭЭГ 107 испытуемых в состоянии покоя, а также значений их компонентов IQ2, IQ3, IQ7, IQ8 структуры интеллекта по методу Амтхауэра.

Для оценки синхронизации между парой сигналов использовалась мнимая когерентность (iМОСН). Она рассчитана с помощью программного обеспечения MNE Python. В качестве порога q использовался 60-процентный квантиль показателя мнимой когерентности между ЭЭГ-каналами для каждого человека. Значения iМОСН ниже порога обнулялись. На основе матрицы значений iМОСН построен взвешенный граф.

При анализе вариации значений мер коннективности на графах обнаружена проблема наличия выбросов. Для их выявления использовались расстояния Махаланобиса, рассчитанные для каждой пары переменных отклика (показателя IQ) и объясняющей переменной (мер коннективности на графах). В качестве порогового значения взят квантиль распределения хи-квадрат уровня 95 % с 2 степенями свободы. В результате доля выбросов достигала 7.5 %. Все пары показателей разбиты на три группы в зависимости от уровня засорения:

- низкий (меньше 3 %),
- средний (3–5 %),
- высокий (больше 5 %).

Для каждой из этих групп отдельно оценивалась робастность коэффициентов корреляции.

Таблица 2. Средние значения абсолютных отклонений r_{actual} от r_{Rob} в зависимости от доли выбросов

Коэффициент корреляции	Весь набор	<3 %	3–5 %	>5 %
Пирсона	0.0283	0.0270	0.0247	0.0307
LMS	0.1790	0.2642	0.2015	0.1507
MCD	0.0390	0.0291	0.0320	0.0448
Полихорический	0.0294	0.0303	0.0260	0.0314
Медианный Шевлякова	0.0483	0.0416	0.0530	0.0463
Квадрант (знаковый)	0.0160	0.0204	0.0156	0.0156
Спирмена	0.0142	0.0122	0.0122	0.0157
Усеченный	0.0186	0.0172	0.0167	0.0200
Усеченный медианный	0.0157	0.0179	0.0143	0.0163

Для четырех показателей IQ рассчитывались корреляции с каждым из семи показателей связности графа в пяти диапазонах частот. Тем самым суммарно 140 коэффициентов. В табл. 2 приведены средние значения абсолютных отклонений r_{actual} от r_{Rob} , рассчитанные по множеству из 140 коэффициентов и по подмножеству коэффициентов, соответствующих группам с различной долей выбросов.

Интересно, что максимальные отклонения актуального от робастного коэффициента корреляции наблюдаются для совершенно разных входных показателей в зависимости от выбранной меры корреляции. Максимальное отклонение для LMS объясняется тем, что в качестве знака коэффициента r_{LMS} взят знак оценки коэффициента наклона $\hat{\beta}_{y|x}$. В случае слабой взаимосвязи эта оценка принимает как положительные, так и отрицательные значения, поэтому знаки коэффициентов $r_{i,LOOT}$ варьируются от отрицательных к положительным. При этом абсолютные значения $r_{i,LOOT}$ в среднем составляют 0.3589. Это противоречит тому, что связь между переменными достаточно слабая.

Минимальные отклонения r_{actual} от r_{Rob} имеют коэффициенты корреляции с использованием усечения, а также на основе рангов (коэффициент корреляции Спирмена). Такие преимущества обнаруживаются для любой рассматриваемой доли выбросов. Лучше всего себя показывает коэффициент корреляции Спирмена. Поэтому, хотя в данных обнаруживается проблема связок (дискретности), оценки коэффициента корреляции Спирмена остаются устойчивыми к выбросам. Можно порекомендовать его использование в дальнейших исследованиях.

Значимость робастного коэффициента корреляции Спирмена можно проверить с помощью перестановочного критерия. Для этого из исходной выборки извлекалась подвыборка того же объема 500 раз с возвращением. В табл. 3 приведены средние оценки робастных коэффициентов корреляции Спирмена, при этом коэффициенты, значимые на уровне 5 %, помечены символами **, на уровне 10 % — символом *. Результаты представлены для тех

Таблица 3. Значимые корреляции между показателями интеллекта и метриками коннективности, взвешенный граф

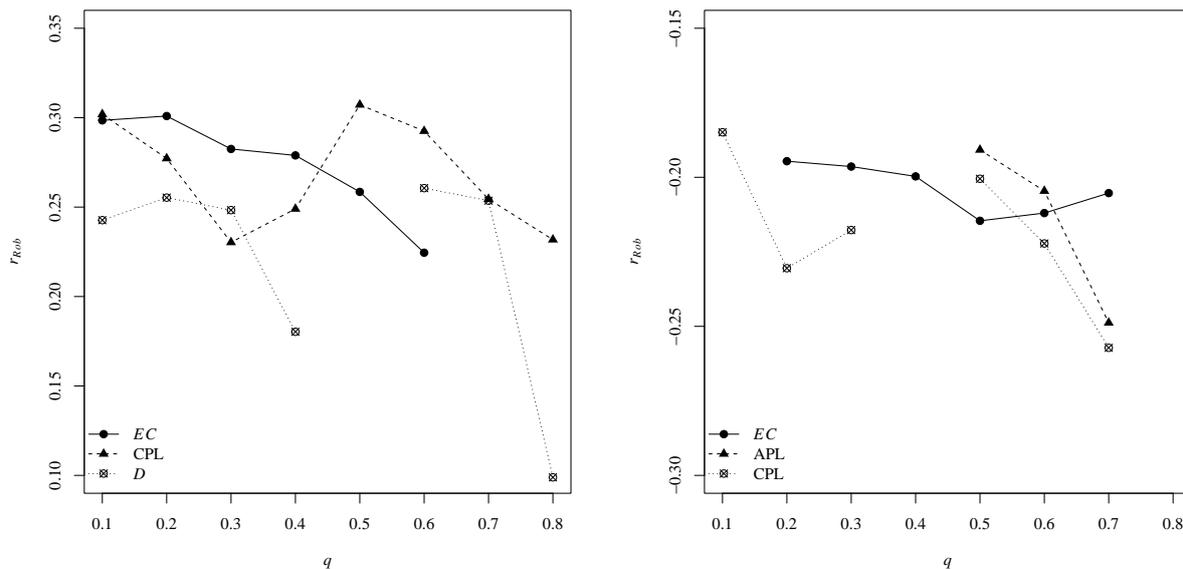
Метрика	IQ2 гамма	IQ3 дельта	IQ7 тэта	IQ7 альфа	IQ8 тэта
Центральность по собственному вектору	-0.1365	-0.1179	0.1235	-0.212**	0.2245**
Модулярность	0.292**	-0.0185	-0.0379	0.042	0.0322
APL	-0.1112	-0.0302	0.1829*	-0.2046*	0.2960**
CPL	-0.1063	-0.0216	0.1616	-0.2222**	0.2925**
Диаметр	-0.1786*	-0.1192	0.1232	-0.1992*	0.2606**
Коэффициент кластеризации	-0.0313	-0.2472**	-0.1051	-0.0187	0.0130
Центральность по близости	0.1088	0.0397	-0.1945**	0.1871*	-0.2971**

показателей IQ и частотных диапазонов, для которых обнаружена устойчивая значимая связь.

Наибольшее количество показателей коннективности, рассчитанных для ЭЭГ в тета-диапазоне, коррелирует с IQ8. Однако вследствие их мультиколлинеарности ($VIF > 5$) подмножество мер коннективности было сокращено до трех (центральность по собственному вектору, CPL, диаметр) с приемлемыми значениями VIF.

Следовательно, обнаруженные связи выделенных метрик коннективности в тета-диапазоне для IQ8 указывают, что его повышению соответствуют широко распределенные по коре нейронные сети, обеспечивающие преднастройку к эффективным комбинаторным операциям со зрительно различающимися пространственно представленными объектами при тестировании этих способностей. Этот результат соответствует функциональной специализации тета ритма, который связывают с формированием и сохранением пространственной памяти и коммуникацией отдаленных областей мозга [23]. Связь этих метрик с другим зрительно-пространственным компонентом интеллекта — IQ7 для тета диапазона подобна IQ8, но менее выражена (см. табл. 3), а в большей степени представлена на альфа частотах. Негативные корреляции IQ7 с CPL и показателем центральности по собственному вектору можно рассматривать как диффузно представленные активированные центры взаимосвязи корковых областей, необходимых для поиска и анализа элементарных характеристик сравниваемых геометрических фигур.

Метрики коннективности устойчиво и значимо связанные с вербальными компонентами интеллекта представлены показателем модулярности на гамма частотах для IQ2 и коэффициентом кластеризации низкочастотных дельта колебаний для IQ3. Высокочастотные бета и гамма ритмы связывают с готовностью решения разнообразных проблем, в том числе решения вербальных задач [24], а дельта осцилляции — с процессами интернальной концентрации внимания и выполнения семантических заданий [25]. Следовательно, эта функциональная специфика гамма и дельта ритмов хорошо соответствует обнаруженным устойчивым связям показателей коннективности ЭЭГ и вербальных компонентов интеллекта.



а) IQ8 тета-диапазон

б) IQ7 альфа-диапазон

Рис. 1. Значимые корреляции между метриками связности и компонентами интеллекта для различных пороговых значений, взвешенный граф

Для проверки устойчивости выявленных корреляций аналогичные процедуры были выполнены для других порогов (квантили уровня от 0.1 до 0.8 показателя когерентности). На рис. 1 представлены значения робастных коэффициентов корреляции Спирмена, значимых на уровне 10 %, полученные в ходе перестановочного критерия. Как правило, связь обнаруживается в широком диапазоне пороговых значений. Кроме этого для компонента IQ7 выявлена устойчивая положительная связь (корреляции в среднем 0.2) с центральностью по близости, значимая при пороговых значениях от 0.4 до 0.7.

Таблица 4. Значимые корреляции между показателями интеллекта и метриками связности, бинарный граф

Метрика	IQ2 дельта	IQ2 альфа	IQ3 дельта	IQ3 тэта	IQ7 дельта
Центральность по собственному вектору	-0.0861	-0.0455	-0.1507	-0.0632	0.035
Модулярность	0.2132**	-0.001	-0.0502	-0.2743**	8.00E-04
APL	-0.1941*	0.2603**	0.0443	0.0765	-0.1935*
Диаметр	-0.0106	-0.0292	0.0036	0.0435	-0.1436**
Коэффициент кластеризации	0.0660	0.0196	-0.2447**	-0.1708*	0.0662
Центральность по близости	0.1260	-0.2613**	-0.0784	-0.0602	0.1974*

Для сравнения тот же анализ был проведен для невзвешенного графа. В табл. 4 показаны значимые результаты для порога 0.6. Есть только одно совпадение с результатами, полученными для взвешенного графа (см. табл. 3): отрицательная связь между IQ3 и коэффициентом кластеризации в дельта-диапазоне. В целом, единичные веса графов приводят

к более слабым корреляциям. Кроме того, возникает упомянутая выше проблема низкого числа уникальных значений. В некоторых случаях это приводит к нулевой вариации меры связности среди индивидуумов, например, для CPL.

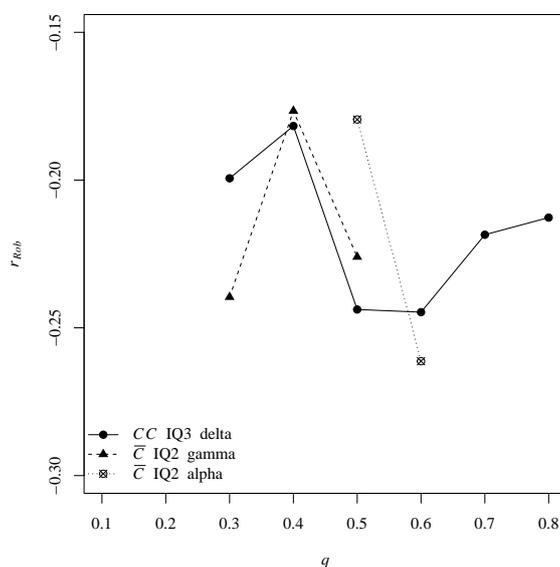


Рис. 2. Значимые корреляции между метриками коннективности и компонентами интеллекта для различных пороговых значений, бинарный граф

Анализ вариации коэффициентов корреляции при изменении пороговых значений для бинарного графа показал, что в целом результаты менее стабильны. На рис. 2 представлены отдельные случаи, когда коэффициент корреляции Спирмена оказывался значим не для единичных, а для нескольких пороговых значений подряд.

Для сравнения применена процедура, описанная в статье [7]. Хотя коэффициент корреляции Пирсона по результатам нашего исследования также оказался не сильно чувствителен к выбросам, тем не менее процедура из статьи [7] не позволила выделить каких-либо значимых закономерностей во взаимосвязи интеллекта и метрик коннективности ЭЭГ. В частности, на 5 %-м уровне одновременно в тестовой и валидационной выборках оказались значимы только две взаимосвязи: коэффициент кластеризации с IQ3 в тета-диапазоне и с IQ8 в бета-диапазоне. Обе корреляции отрицательные. Первая взаимосвязь выявлена и с помощью коэффициента Спирмена, хотя с помощью робастного аналога ее значимость не подтвердилась (см. табл. 3). Вторая взаимосвязь не подтверждается с помощью коэффициента Спирмена, поскольку пара показателей коэффициент кластеризации в бета-диапазоне и IQ8 характеризуются высокой долей выбросов. Следовательно, процедура из статьи [7] приводит к обнаружению некорректных корреляций, обусловленных влиянием выбросов, тем самым ее нельзя считать робастной.

Таким образом, в ходе исследования получены следующие результаты.

1. Мы не подтвердили эффективность процедуры расчета корреляций с помощью бутстрепа для тестовой выборки и проверочной выборки из [7]. Она не позволила выявить корректных корреляций.
2. Получены следующие стабильные результаты при использовании взвешенного метода построения графа коннективности:

- выявлена устойчивая связь невербального компонента IQ8 с пятью метриками коннективности в тета диапазоне для последовательности порогов от 20 % до 70 % включительно (положительная связь с такими метриками, как центральность по собственному вектору, APL, CPL, диаметр и отрицательная — с метрикой центральность по близости);
 - выявлена устойчивая связь невербального компонента IQ7 с четырьмя метриками коннективности в альфа диапазоне для порогов от 20 % до 70 % включительно (отрицательная связь с метриками центральность по собственному вектору, APL, CPL и положительная — с центральностью по близости);
 - выявлена устойчивая отрицательная связь вербального компонента IQ3 с метрикой коннективности коэффициент кластеризации в дельта диапазоне для порогов от 30 % до 80 % включительно;
 - положительная связь вербального компонента IQ2 с метрикой коннективности модулярность в альфа диапазоне значима для порогов 30 % и 70 % и в гамма диапазоне только для порога 60 %.
3. При использовании бинарного метода построения графа коннективности:
- подтверждена полученная с помощью взвешенного метода устойчивая отрицательная связь вербального компонента IQ3 с метрикой коннективности коэффициент кластеризации в дельта диапазоне для порогов от 30 % до 80 % включительно;
 - получены менее стабильные результаты о существовании связи вербального компонента IQ2 с метриками коннективности в альфа и гамма диапазонах в зависимости от значения порога в диапазоне 30 %–60 %.

Заключение

В работе была исследована проблема робастности коэффициентов корреляции при оценивании связи между показателями интеллекта и метриками связности графа ЭЭГ в состоянии покоя. В первоначальный исследуемый набор вошли усеченные и ранговые коэффициенты корреляции, знаковая корреляция, также рассмотрены устойчивые методы оценивания, такие как MCD и LMS. Для оценки робастности были использованы отклонения выборочного коэффициента корреляции от взвешенного робастного коэффициента. В результате оказалось, что популярные робастные методы оценивания (MCD и LMS) дают худшие результаты, поскольку очень чувствительны к выбросам. Усеченная корреляция, а также ранговая корреляция (коэффициент корреляции Спирмена) оказались наиболее устойчивыми. На основании значимой устойчивости коэффициента корреляции Спирмена, именно он был использован для получения и интерпретации результатов оценки взаимосвязи метрик коннективности с компонентами интеллекта.

Применяя предложенный подход, были выявлены устойчивые взаимосвязи между графовыми метриками связности ЭЭГ и показателями интеллекта, таким образом, получила очередное подтверждение гипотеза «нейронной эффективности» интеллекта. Более того, выявление значимой связи компонента IQ7, который можно отнести к невербальным компонентам интеллекта, с метриками коннективности APL и CP в альфа диапазоне соответствуют ранее полученным результатам для этого диапазона ЭЭГ, представленным в работе [7].

Однако следует отметить, что обнаруженные устойчивые связи отличаются разнообразием их распределения в различных частотных диапазонах ЭЭГ для различных показате-

лей интеллекта. Разные формы обнаруженных устойчивых связей вербальных и невербальных компонентов интеллекта с метриками коннективности для высокочастотных и низкочастотных ритмов ЭЭГ свидетельствуют о дифференциации преднастройки функциональных нейронных сетей с объединением локальных и дистантно распределенных нейронных ансамблей, обеспечивающих эффективность выполнения соответствующих вербальных или зрительно-пространственных заданий.

Авторы выражают благодарность студентам и аспирантам кафедры психологии и педагогики НГТУ, принимавшим участие в регистрации и первичной обработке ЭЭГ.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSUN-2020-0009).

Литература

1. Haier R.J., Siegel B.V.Jr., Nuechterlein K.H., *et al.* Cortical glucose metabolic rate correlates of abstract reasoning and attention studied with positron emission tomography // *Intelligence*. 1988. Vol. 12, no. 2. P. 199–217. DOI: 10.1016/0160-2896(88)90016-5.
2. Haier R.J., Siegel B., Tang C., *et al.* Intelligence and changes in regional cerebral glucose metabolic rate following learning // *Intelligence*. 1992. Vol. 16, no. 3–4. P. 415–426. DOI: 10.1016/0160-2896(92)90018-M.
3. Neubauer A.C., Fink A. Intelligence and neural efficiency: measures of brain activation versus measures of functional connectivity in the brain // *Intelligence*. 2009. Vol. 37, no. 2. P. 223–229. DOI: 10.1016/j.intell.2008.10.008.
4. Jung R.E., Haier R.J. The parieto-frontal integration theory (P-FIT) of intelligence: Converging neuroimaging evidence // *Behavioral and Brain Sciences*. 2007. Vol. 30, no. 2. P. 135–154. DOI: 10.1017/S0140525X07001185.
5. Dreszer J., Grochowski M., Lewandowska M., *et al.* Spatiotemporal complexity patterns of resting-state bioelectrical activity explain fluid intelligence: Sex matters // *Human brain mapping*. 2020. Vol. 41, no. 17. P. 4846–4865. DOI: 10.1002/hbm.25162.
6. Langer N., Pedroni A., Gianotti L.R.R., *et al.* Functional brain network efficiency predicts intelligence // *Hum. Brain Map*. 2012. Vol. 33, no. 6. P. 1393–1406. DOI: 10.1002/hbm.21297.
7. Zakharov I., Tabueva A., Adamovich T., *et al.* Alpha Band Resting-State EEG Connectivity Is Associated With Non-verbal Intelligence // *Front. Hum. Neurosci*. 2020. Vol. 14. P. 10. DOI: 10.3389/fnhum.2020.00010.
8. Luo S., Chen R., Yang Z., Li K. Intelligence level might be predicted by the characteristics of EEG signals at specific frequencies and brain regions // *Journal of Mechanics in Medicine and Biology*. 2021. Vol. 21, no. 9. P. 2140047. DOI: 10.1142/S0219519421400479.
9. Dubois J., Galdi P., Han Y., *et al.* Resting-state functional brain connectivity best predicts the personality dimension of openness to experience // *Personality neuroscience*. 2018. Vol. 1. P. e6. DOI: 10.1017/pen.2018.8.
10. Kruschwitz J.D., Waller L., Daedelow L.S., *et al.* General, crystallized and fluid intelligence are not associated with functional global network efficiency: a replication study with the human connectome project 1200 data set // *Neuroimage*. 2018. Vol. 171. P. 323–331. DOI: 10.1016/j.neuroimage.2018.01.018.

11. Coemets E.H., Liimets H.I. Intellectual Tasks—Series 730. Russian Version of The Amthauer's Test Based on the Estonian Methodic. Novosibirsk: Novosibirsk NSU Publisher, 1973. 24 p.
12. Li T., Xue T., Wang B., Zhang J. Decoding Voluntary Movement of Single Hand Based on Analysis of Brain Connectivity by Using EEG Signals // *Frontiers in human neuroscience*. 2018. Vol. 12. P. 381. DOI: 10.3389/fnhum.2018.00381.
13. Mehraram R., Kaiser M., Cromarty R., *et al.* Weighted network measures reveal differences between dementia types: An EEG study // *Human brain mapping*. 2020. Vol. 41, no. 6. P. 1573–1590. DOI: 10.1002/hbm.24896.
14. Onnela J.P., Saramäki J., Kertész J., Kaski K. Intensity and coherence of motifs in weighted complex networks // *Physical Review E*. 2005. Vol. 71, no. 6. P. 065103. DOI: 10.1103/PhysRevE.71.065103.
15. Gareth J. *An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R*. Berlin: Springer, 2013.
16. Shevlyakov G., Smirnov P. Robust estimation of the correlation coefficient: An attempt of survey // *Austrian Journal of Statistics*. 2011. Vol. 40, no. 1–2. P. 147–156.
17. Roscino A., Pollice A. A generalization of the polychoric correlation coefficient // *Data analysis, classification and the forward search* / ed. by S. Zani, A. Cerioli, M. Riani, *et al.* Springer, 2006. P. 135–142. DOI: 10.1007/3-540-35978-8_16.
18. Blomqvist N. On a measure of dependence between two random variables // *The Annals of Mathematical Statistics*. 1950. Vol. 21. P. 593–600.
19. Gnanadesikan R., Kettenring J.R. Robust estimates, residuals and outlier detection with multiresponse data // *Biometrics*. 1972. Vol. 28. P. 81–124.
20. Shevlyakov G.L. On robust estimation of a correlation coefficient // *Journal of Mathematical Sciences*. 1997. Vol. 83, no. 3. P. 434–438. DOI: 10.1007/BF02400929.
21. Rousseeuw P.J. Least median of squares regression // *Journal of the American Statistical Association*. 1984. Vol. 79. P. 871–880.
22. Niven E.B., Deutsch C.V. Calculating a robust correlation coefficient and quantifying its uncertainty // *Computers and Geosciences*. 2012. Vol. 40. P. 1–9. DOI: 10.1016/j.cageo.2011.06.021.
23. Coglein L.L. Mechanisms and functions of theta rhythms // *Annual Rev. Neurosci*. 2013. Vol.36, no. 1. P. 295–312. DOI: 10.1146/annurev-neuro-062012-170330.
24. Kumar J., Bhuvaneshwari P. Analysis of electroencephalography (EEG) signals and its categorization A study // *Procedia engineering*. 2012. Vol. 38. P. 2525–2536. DOI: 10.1016/j.proeng.2012.06.298.
25. Harmony T. The functional significance of delta oscillations in cognitive processing // *Frontiers in Integrative Neuroscience*. 2013. Vol. 7. P. 83. DOI: 10.3389/fmint.2013.00083.

Авдеенко Татьяна Владимировна, д.т.н., профессор, кафедра теоретической и прикладной информатики, Новосибирский государственный технический университет (Новосибирск, Российская Федерация)

Тимофеева Анастасия Юрьевна, к.э.н., кафедра теоретической и прикладной информатики, Новосибирский государственный технический университет (Новосибирск, Российская Федерация)

Муртазина Марина Шамильевна, к.ф.н., к.т.н., кафедра автоматизированных систем управления, Новосибирский государственный технический университет (Новосибирск, Российская Федерация)

Разумникова Ольга Михайловна, д.б.н., доцент, кафедра психологии и педагогики, Новосибирский государственный технический университет (Новосибирск, Российская Федерация)

DOI: 10.14529/cmse220402

IDENTIFICATION OF ROBUST CORRELATIONS BETWEEN EEG CONNECTIVITY METRICS AND INTELLIGENCE COMPONENTS

© 2022 T.V. Avdeenko, A.Yu. Timofeeva,
M.Sh. Murtazina, O.M. Razumnikova

Novosibirsk State Technical University (pr. K. Marksa 20, Novosibirsk, 630073 Russia)

E-mail: tavdeenko@mail.ru, a.timofeeva@corp.nstu.ru,

murtazina@corp.nstu.ru, razumnikova@corp.nstu.ru

Received: 14.11.2022

According to the “neural efficiency” hypothesis, intelligence indicators are associated with specific spatial features of the optimal functional activity of the brain. Since there are studies that do not confirm such a relationship, the study of the issue of its stability remains relevant. Therefore, the main task of the study is to find metrics of EEG connectivity at rest that are stably correlated with indicators of the verbal and visual-spatial components of intelligence. Pearson’s and Spearman’s correlation coefficients, polychoric correlation coefficient and their stable analogs calculated on the basis of truncation, the MCD method, and the sign method were chosen as potential measures of the relationship of the studied parameters. To assess the robustness to outliers, the “leave-one-out test” (LOOT) procedure was used, on the basis of which a weighted robust analog of the correlation coefficients was calculated. By the degree of deviation from its initial value, calculated for the entire sample, one can judge the sensitivity to outliers. It is shown that rank-based correlation coefficients using truncation are the most resistant to outliers. As a result, stable significant correlations were found between intelligence indicators and EEG connectivity at rest, indicating a potentially effective pre-tuning of functional neural networks with the combination of local and distantly distributed neural ensembles.

Keywords: EEG, resting state, brain network connectivity, intelligence, graph measures, robustness, correlation.

FOR CITATION

Avdeenko T.V., Timofeeva A.Yu., Murtazina M.Sh., Razumnikova O.M. Identification of Robust Correlations between EEG Connectivity Metrics and Intelligence Components. Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering. 2022. Vol. 11, no. 4. P. 19–36. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse220402.

This paper is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution-Non Commercial 4.0 License which permits non-commercial use, reproduction and distribution of the work without further permission provided the original work is properly cited.

References

1. Haier R.J., Siegel B.V.Jr., Nuechterlein K.H., *et al.* Cortical glucose metabolic rate correlates of abstract reasoning and attention studied with positron emission tomography. *Intelligence*. 1988. Vol. 12, no. 2. P. 199–217. DOI: 10.1016/0160-2896(88)90016-5.
2. Haier R.J., Siegel B., Tang C., *et al.* Intelligence and changes in regional cerebral glucose metabolic rate following learning. *Intelligence*. 1992. Vol. 16, no. 3–4. P. 415–426. DOI: 10.1016/0160-2896(92)90018-M.
3. Neubauer A.C., Fink A. Intelligence and neural efficiency: measures of brain activation versus measures of functional connectivity in the brain. *Intelligence*. 2009. Vol. 37, no. 2. P. 223–229. DOI: 10.1016/j.intell.2008.10.008.
4. Jung R.E., Haier R.J. The parieto-frontal integration theory (P-FIT) of intelligence: Converging neuroimaging evidence. *Behavioral and Brain Sciences*. 2007. Vol. 30, no. 2. P. 135–154. DOI: 10.1017/S0140525X07001185.
5. Dreszer J., Grochowski M., Lewandowska M., *et al.* Spatiotemporal complexity patterns of resting-state bioelectrical activity explain fluid intelligence: Sex matters. *Human brain mapping*. 2020. Vol. 41, no. 17. P. 4846–4865. DOI: 10.1002/hbm.25162.
6. Langer N., Pedroni A., Gianotti L.R.R., *et al.* Functional brain network efficiency predicts intelligence. *Hum. Brain Map*. 2012. Vol. 33, no. 6. P. 1393–1406. DOI: 10.1002/hbm.21297.
7. Zakharov I., Tabueva A., Adamovich T., *et al.* Alpha Band Resting-State EEG Connectivity Is Associated With Non-verbal Intelligence. *Front. Hum. Neurosci*. 2020. Vol. 14. P. 10. DOI: 10.3389/fnhum.2020.00010.
8. Luo S., Chen R., Yang Z., Li K. Intelligence level might be predicted by the characteristics of EEG signals at specific frequencies and brain regions. *Journal of Mechanics in Medicine and Biology*. 2021. Vol. 21, no. 9. P. 2140047. DOI: 10.1142/S0219519421400479.
9. Dubois J., Galdi P., Han Y., *et al.* Resting-state functional brain connectivity best predicts the personality dimension of openness to experience. *Personality neuroscience*. 2018. Vol. 1. P. e6. DOI: 10.1017/pen.2018.8.
10. Kruschwitz J.D., Waller L., Daedelow L.S., *et al.* General, crystallized and fluid intelligence are not associated with functional global network efficiency: a replication study with the human connectome project 1200 data set. *Neuroimage*. 2018. Vol. 171. P. 323–331. DOI: 10.1016/j.neuroimage.2018.01.018.
11. Coemets E.H., Liimets H.I. Intellectual Tasks—Series 730. Russian Version of The Amthauer’s Test Based on the Estonian Methodic. Novosibirsk: Novosibirsk NSU Publisher, 1973. 24 p.
12. Li T., Xue T., Wang B., Zhang J. Decoding Voluntary Movement of Single Hand Based on Analysis of Brain Connectivity by Using EEG Signals. *Frontiers in human neuroscience*. 2018. Vol. 12. P. 381. DOI: 10.3389/fnhum.2018.00381.
13. Mehraram R., Kaiser M., Cromarty R., *et al.* Weighted network measures reveal differences between dementia types: An EEG study. *Human brain mapping*. 2020. Vol. 41, no. 6. P. 1573–1590. DOI: 10.1002/hbm.24896.

14. Onnela J.P., Saramäki J., Kertész J., Kaski K. Intensity and coherence of motifs in weighted complex networks. *Physical Review E*. 2005. Vol. 71, no. 6. P. 065103. DOI: 10.1103/PhysRevE.71.065103.
15. Gareth J. *An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R*. Berlin: Springer, 2013.
16. Shevlyakov G., Smirnov P. Robust estimation of the correlation coefficient: An attempt of survey. *Austrian Journal of Statistics*. 2011. Vol. 40, no. 1–2. P. 147–156.
17. Roscino A., Pollice A. A generalization of the polychoric correlation coefficient. *Data analysis, classification and the forward search* / ed. by S. Zani, A. Cerioli, M. Riani, *et al.* Springer, 2006. P. 135–142. DOI: 10.1007/3-540-35978-8_16.
18. Blomqvist N. On a measure of dependence between two random variables. *The Annals of Mathematical Statistics*. 1950. Vol. 21. P. 593–600.
19. Gnanadesikan R., Kettenring J.R. Robust estimates, residuals and outlier detection with multiresponse data. *Biometrics*. 1972. Vol. 28. P. 81–124.
20. Shevlyakov G.L. On robust estimation of a correlation coefficient. *Journal of Mathematical Sciences*. 1997. Vol. 83, no. 3. P. 434–438. DOI: 10.1007/BF02400929.
21. Rousseeuw P.J. Least median of squares regression. *Journal of the American Statistical Association*. 1984. Vol. 79. P. 871–880.
22. Niven E.B., Deutsch C.V. Calculating a robust correlation coefficient and quantifying its uncertainty. *Computers and Geosciences*. 2012. Vol. 40. P. 1–9. DOI: 10.1016/j.cageo.2011.06.021.
23. Coglein L.L. Mechanisms and functions of theta rhythms. *Annual Rev. Neurosci.* 2013. Vol. 36, no. 1. P. 295–312. DOI: 10.1146/annurev-neuro-062012-170330.
24. Kumar J., Bhuvanewari P. Analysis of electroencephalography (EEG) signals and its categorization A study. *Procedia engineering*. 2012. Vol. 38. P. 2525–2536. DOI: 10.1016/j.proeng.2012.06.298.
25. Harmony T. The functional significance of delta oscillations in cognitive processing. *Frontiers in Integrative Neuroscience*. 2013. Vol. 7. P. 83. DOI: 10.3389/fnint.2013.00083.

СГЛАЖИВАНИЕ ЛОМАНЫХ ЛИНИЙ СОСТАВНЫМИ СПЛАЙНАМИ БЕЗЬЕ

© 2022 В.А. Ромакин

Институт проблем управления им. В.А.Трапезникова РАН

(117997 Москва, ул. Профсоюзная, д. 65)

E-mail: insight.ru@gmail.com

Поступила в редакцию: 08.08.2022

В работе рассматривается новый итеративный метод построения на плоскости гладкого сплайна, состоящего из кубических кривых Безье и повторяющего форму заданной ломаной линии с требуемой точностью. На каждой итерации метода выполняются следующие операции: выбор количества узлов интерполяции сплайна, размещение их на заданной ломаной линии по определенному правилу, построение гладкого составного сплайна Безье, проходящего через эти узлы, и оценка точности аппроксимации, то есть, близости построенного сплайна и заданной ломаной линии. Выбор положения узлов интерполяции сплайна на заданной ломаной линии выполняется с помощью сопоставления мер близости смежных кривых Безье, из которых состоит сплайн, и участков ломаной линии, которые аппроксимируют эти кривые. Приводятся примеры сглаживания ломаных линий различной сложности, в том числе ломаных линий с самопересечениями, подтверждающие эффективность предложенного метода. Результаты работы можно использовать в различных приложениях, например, при построении траектории движения автоматических транспортных средств и мобильных роботов, при проектировании технических объектов в системах автоматизированного проектирования, при картографической генерализации линейных картографических объектов, при проектировании шрифтов и др.

Ключевые слова: сглаживание ломаных линий, составные сплайны, кривые Безье, мера близости, интерполяция, аппроксимация.

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Ромакин В.А. Сглаживание ломаных линий составными сплайнами Безье // Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2022. Т. 11, № 4. С. 37–50. DOI: 10.14529/cmse220403.

Введение

Задача сглаживания ломаных линий возникает в различных приложениях, например, при построении траектории движения автоматических транспортных средств и мобильных роботов [1–3], при проектировании технических объектов в системах автоматизированного проектирования [4], при картографической генерализации линейных картографических объектов [5, 6], при проектировании шрифтов [7], при распознавании образов [8], при обработке результатов вычислительных или натуральных экспериментов [9] и др.

В настоящей работе под сглаживанием ломаной линии подразумевается построение гладкой кривой, которая достаточно точно повторяет форму этой ломаной линии. В качестве гладкой кривой рассматривается составной сплайн, состоящий из нескольких кубических кривых Безье. Порядок кривых Безье выбран таким, чтобы, с одной стороны, обеспечить гладкость сплайна, а с другой — снизить вычислительную сложность алгоритмов при программной реализации.

Один из важных вопросов при построении составного сплайна заключается в том, сколько кривых Безье должен содержать сплайн и как именно расположить на плоско-

сти опорные точки этих кривых, чтобы обеспечить достаточную точность сглаживания ломаной линии.

В известных методах сглаживания ломаных линий с помощью сплайнов сначала проводится предварительное упрощение ломаной линии, т.е. удаление из ломаной линии части вершин, затем в оставшихся вершинах размещаются узлы интерполяции и контрольные точки кривых, и далее по этим узлам строится сплайн. Например, в [7] в заданной ломаной линии определяются особые, так называемые угловые вершины, используемые в дальнейшем для построения составного кубического сплайна Безье. В [1] из заданной ломаной линии удаляются вершины, не попадающие в заданный линейный допуск, после чего через оставшиеся вершины проводится составной кубический сплайн Безье. В [3, 10] перед построением составного сплайна Безье из заданной ломаной линии вместо каждого подмножества близко расположенных вершин ломаной линии оставляется только одна вершина. В [5] предлагается предварительно упрощать заданную ломаную линию с использованием алгоритма Свентека с оценкой значимости исходных вершин и удалением вершин с низкой значимостью. В [9] заданная ломаная линия упрощается с использованием модифицированного алгоритма упрощения линейных данных Дугласа—Пейкера с адаптивной шириной коридора. В [8] вдобавок к наиболее значимым вершинам ломаной линии добавляются дополнительные вершины ломаной линии, которые служат для снижения неравномерности расстояний между соседними значимыми вершинами.

В перечисленных методах предлагается проводить сплайн через некоторое множество вершин исходной ломаной линии. В настоящей работе предлагается метод, в котором решается размещать узлы интерполяции сплайна не только на вершинах исходной ломаной линии, но и в любой точке ломаной линии. Отличительная особенность метода состоит в том, что он автоматически выбирает количество узлов интерполяции и их положение на ломаной линии таким образом, чтобы составной сплайн проходил как можно ближе к этой линии. Поскольку узлы интерполяции сплайна могут быть размещены в любой точке ломаной линии, то предварительного упрощения или разбиения ломаной линии не требуется.

Дальнейшее изложение статьи построено следующим образом. В разделе 1 описан предлагаемый метод сглаживания ломаных линий. В разделе 2 рассмотрены особенности программной реализации метода. В разделе 3 приведены примеры сглаживания ломаных линий с использованием предложенного метода. В заключении содержатся основные полученные результаты.

1. Итеративный метод сглаживания ломаных линий

В настоящей работе предлагается новый итеративный метод построения гладкого сплайна, состоящего из кубических кривых Безье и аппроксимирующего заданную ломаную линию с требуемой точностью. На каждой итерации выполняются следующие операции: выбор количества узлов интерполяции сплайна, размещение их на заданной ломаной линии, построение проходящего через них гладкого составного сплайна Безье и оценка точности аппроксимации.

Пусть задана ломаная линия $P_1P_2 \dots P_M$, см. рис. 1а. Зафиксируем количество узлов интерполяции сплайна $N \geq 3$ и равномерно расположим узлы интерполяции Q_1, Q_2, \dots, Q_N на ломаной линии, так чтобы два крайних узла Q_1 и Q_N совпадали соответственно с начальной и конечной вершинами ломаной линии P_1 и P_M , а длины участков ломаной линии между соседними узлами Q_i и Q_{i+1} были равны друг другу ($i = 1, \dots, N-1$). Построим гладкий

сплайн, проходящий через выбранные узлы интерполяции. Для этого воспользуемся известным способом построения гладкого сплайна, проходящего через N заданных точек (узлов интерполяции) и состоящего из $N - 1$ кубической кривой Безье B_i ($i = 1, \dots, N - 1$) [11]. Исходными данными в этом способе являются узлы интерполяции Q_1, Q_2, \dots, Q_N , а координаты контрольных точек кривых Безье вычисляются с помощью системы из $2N - 2$ линейных уравнений, решение которой обеспечивает непрерывность первой и второй производной сплайна в узлах интерполяции. На рис. 1б показано исходное размещение узлов интерполяции (обозначены красными точками) для заданной ломаной линии при $N = 5$ и сплайн, проходящий через эти узлы и состоящий из четырех кривых Безье (обозначен коричневым цветом).

Вычислим Δ — меру близости построенного сплайна и заданной ломаной линии. Обозначим через L_i участок ломаной линии между узлами интерполяции Q_i и Q_{i+1} ($i = 1, \dots, N - 1$). Будем вычислять Δ как сумму $\Delta_1 + \dots + \Delta_{N-1}$, где Δ_i — мера близости кривой Безье B_i и участка ломаной линии L_i , который аппроксимируется кривой B_i . В качестве Δ_i можно использовать, например, площадь области, ограниченной кривой Безье B_i и участком ломаной линии L_i (далее в работе используется именно эта мера), или расстояние Фреше между B_i и L_i ($i = 1, \dots, N - 1$). Если вычисленное Δ превышает допустимое значение, то будем считать точность аппроксимации недостаточной и попытаемся повысить ее, изменив расположение узлов интерполяции на ломаной линии. Для каждого промежуточного узла интерполяции Q_i ($i = 2, \dots, N - 1$) сравним значения Δ_{i-1} и Δ_i , вычисленные для двух смежных с ним кривых B_{i-1} и B_i . Переместим узел интерполяции Q_i по ломаной линии в направлении узла Q_{i+1} , если $\Delta_{i-1} < \Delta_i$, или в направлении узла Q_{i-1} , если $\Delta_{i-1} > \Delta_i$ (то есть, в сторону смежной области с большим значением площади), уменьшая тем самым площадь большей из двух смежных областей. Таким образом, значения Δ_i используются, с одной стороны, для оценки точности аппроксимации, а с другой стороны — для итеративного перемещения узлов интерполяции. Расстояние, на которое перемещается узел интерполяции, следует выбирать таким образом, чтобы не нарушалась последовательность размещения промежуточных узлов на ломаной линии. На рис. 1б области между кривыми Безье и соответствующими им участками ломаной линии для наглядности закрашены разными цветами, а положения, в которые будут перемещены узлы интерполяции на следующей итерации, обозначены желтыми точками.

После перемещения всех промежуточных узлов интерполяции снова построим проходящий через них гладкий сплайн и оценим точность аппроксимации. На рис. 1в показан сплайн, построенный на второй итерации после перемещения промежуточных узлов, а желтыми точками обозначены положения, в которые будут перемещены узлы интерполяции на третьей итерации. Продолжим выполнять итерации, см. рис. 1г, д, до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность аппроксимации Δ^* или заранее заданное максимальное число итераций K^* . При необходимости, обусловленной прикладной задачей, помимо оценки точности аппроксимации можно выполнять дополнительные проверки, например, что у построенного сплайна нет самопересечений, что его кривизна не превышает заданного значения, или что он не выходит за пределы заданного коридора.

По результатам итераций, выполненных с зафиксированным значением N , выберем сплайн с наименьшим значением Δ , см. рис. 1е. Если не удастся достичь требуемой точности и выполнения дополнительных условий за максимальное число итераций K^* , тогда увеличим количество узлов интерполяции N и повторим всю процедуру заново, начиная

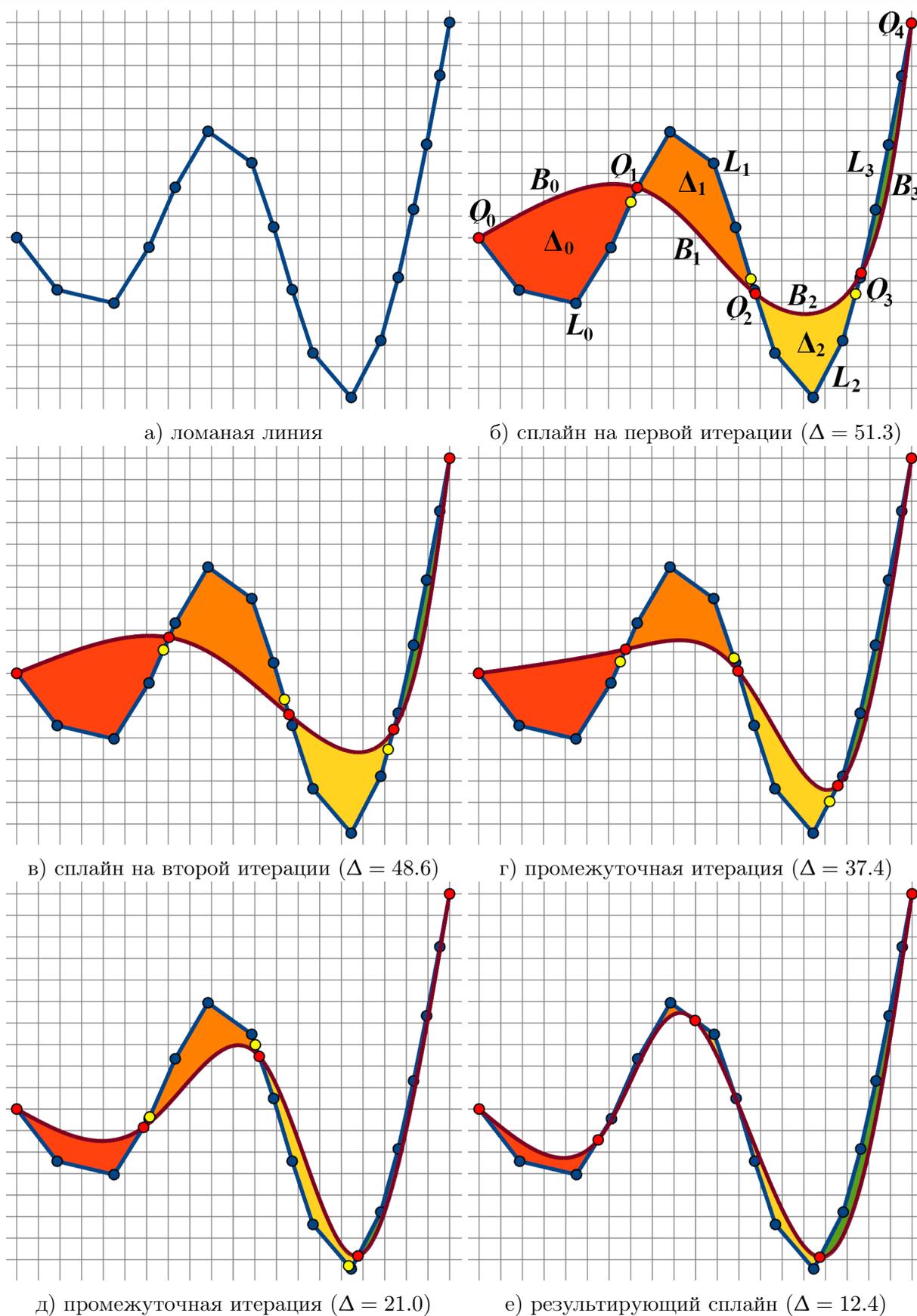


Рис. 1. Сглаживание ломаной линии при фиксированном значении N

с равномерного размещения узлов интерполяции на ломаной линии [4]. Если количество узлов интерполяции N превысило заранее заданное максимальное количество узлов N_{max} , тогда будем считать, что при заданных параметрах исходную ломаную линию аппроксимировать предложенным методом невозможно; в этом случае следует изменить параметры метода Δ^* , K^* , N_{max} и коэффициент s , который будет определен ниже.

Остановимся более подробно на правиле перемещения узлов интерполяции сплайна в сторону смежной области с большим значением меры близости. При $N = 3$ составной сплайн состоит из двух кривых Безье. В этом случае разрешается перемещение только одного, среднего узла интерполяции. В результате итераций с применением предложенного правила, этот узел будет стремиться к положению, в котором меры близости двух смежных кривых равны. При $N = 4$ составной сплайн состоит уже из трех кривых Безье. В этом случае разрешается перемещение двух средних узлов интерполяции. В результате итераций с применением предложенного правила, каждый из узлов будет стремиться к положению, в котором меры близости двух смежных с ним кривых равны. А значит, оба узла будут стремиться к такому совокупному положению, в котором меры близости всех кривых Безье, из которых состоит сплайн, равны. И так далее. Таким образом, предложенное правило формирует сплайн, у которого все составляющие кривые приблизительно одинаково близки к соответствующим им участкам ломаной линии. Если одна или несколько кривых менее близки к ломаной линии, то применение правила начинает «проталкивать» соответствующие им узлы интерполяции, а вслед за ними — и другие узлы интерполяции, к такому положению, в котором все кривые имеют приблизительно одинаковую близость к ломаной линии. Количество итераций, которые требуется выполнить для достижения необходимой точности сглаживания, зависит, в том числе, от расстояния, на которое перемещаются узлы интерполяции по ломаной линии на каждой итерации. В рассмотренном примере использовалась следующая формула для расстояния:

$$D_i = s C_i \frac{\max(\Delta_{i-1}, \Delta_i)}{\Delta_{i-1} + \Delta_i}, \quad (1)$$

где s — коэффициент, определяющий скорость перемещения узлов интерполяции, C_i — длина отрезка ломаной линии, по которой будет перемещаться узел интерполяции Q_i . Дробный множитель в правой части построен таким образом, чтобы увеличение разницы между значениями Δ_{i-1} и Δ_i приводило к увеличению расстояния D_i . Коэффициент s влияет на скорость и точность сходимости сплайна к исходной ломаной линии. На рис. 2 показаны графики темпа сходимости сплайна, показанного на рис. 1е, при $s = 0.1$ и $s = 0.01$. Видно, что при большем значении s выше скорость сходимости, а при меньшем значении s выше точность аппроксимации. Выбор в пользу скорости или точности сходимости должен определяться прикладной задачей.

2. Программная реализация предложенного метода

Разработано программное обеспечение на языке C++, реализующее предложенный метод сглаживания ломаных линий составными сплайнами. На рис. 3 показана блок-схема алгоритма построения составного сплайна. Входными данными для алгоритма являются ломаная линия, заданная координатами своих вершин P_i , коэффициент s , определяющий скорость перемещения узлов интерполяции, требуемая точность аппроксимации Δ^* , максимальное число итераций K^* , начальное и максимальное количество узлов сплайна N_0 и N_{max} . Алгоритм включает два вложенных цикла: внешний цикл перебирает количество

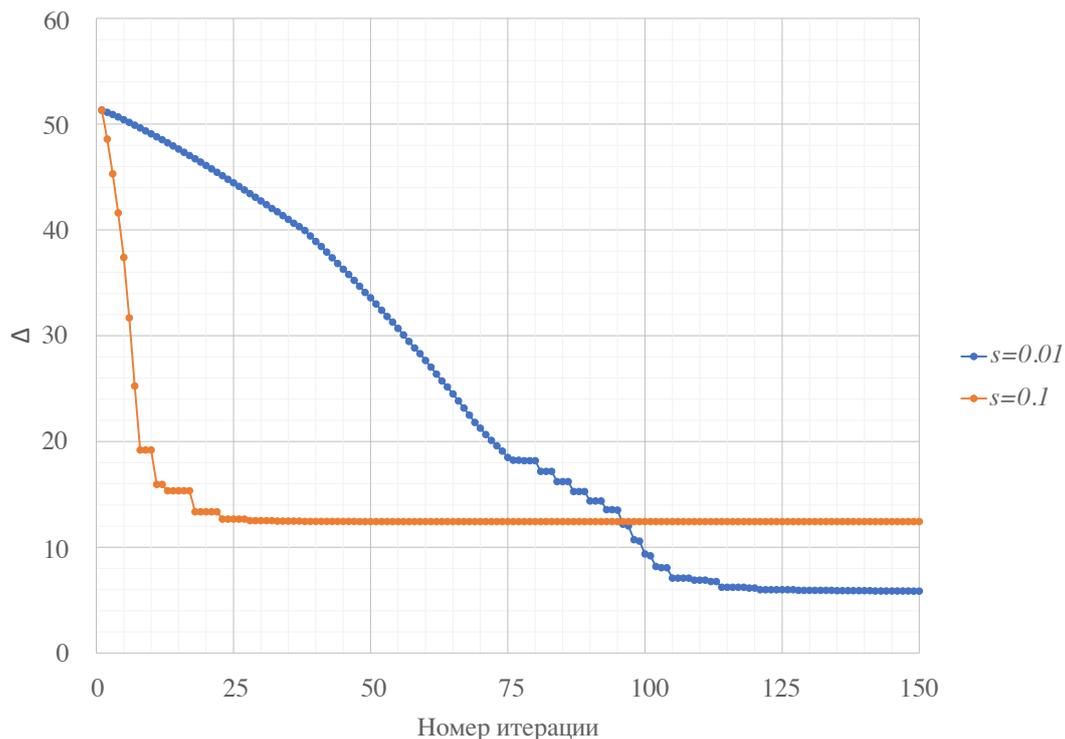


Рис. 2. Сходимость сплайна при различных значениях s

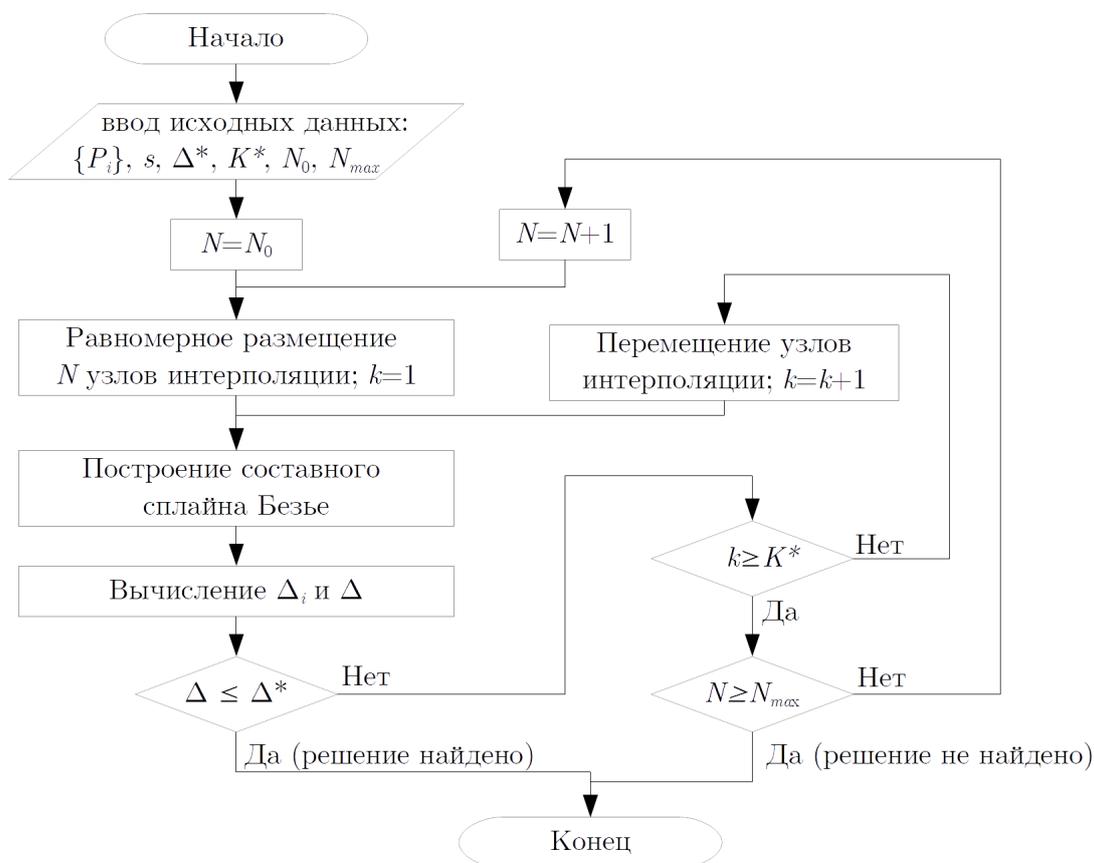


Рис. 3. Блок-схема алгоритма построения сплайна

узлов N от N_0 до N_{max} , а внутренний цикл на каждой итерации перемещает N узлов интерполяции по ломаной линии, строит составной сплайн и вычисляет его меру близости с исходной ломаной линией. Критериями останова являются достижение требуемой точности аппроксимации Δ^* или максимального количества узлов сплайна N_{max} . В первом случае задача считается решенной, во втором случае для получения решения следует изменить параметры метода.

В качестве меры близости Δ_i выбрана площадь области между кривой Безье B_i и соответствующим ей участком ломаной линии L_i . Вычисление приблизительного значения этой площади выполняется следующим образом. На кривой Безье B_i равномерно располагается некоторое количество точек $E_i^1, E_i^2, \dots, E_i^T$, а на участке ломаной линии L_i — такое же количество точек $F_i^1, F_i^2, \dots, F_i^T$ (см. рис. 4). Искомая площадь вычисляется как сумма площадей двух треугольников $Q_i E_i^1 F_i^1$ и $Q_{i+1} E_i^T F_i^T$ и $T - 1$ четырехугольников $E_i^j F_i^j F_i^{j+1} E_i^{j+1}$ ($j = 1, \dots, T - 1$).

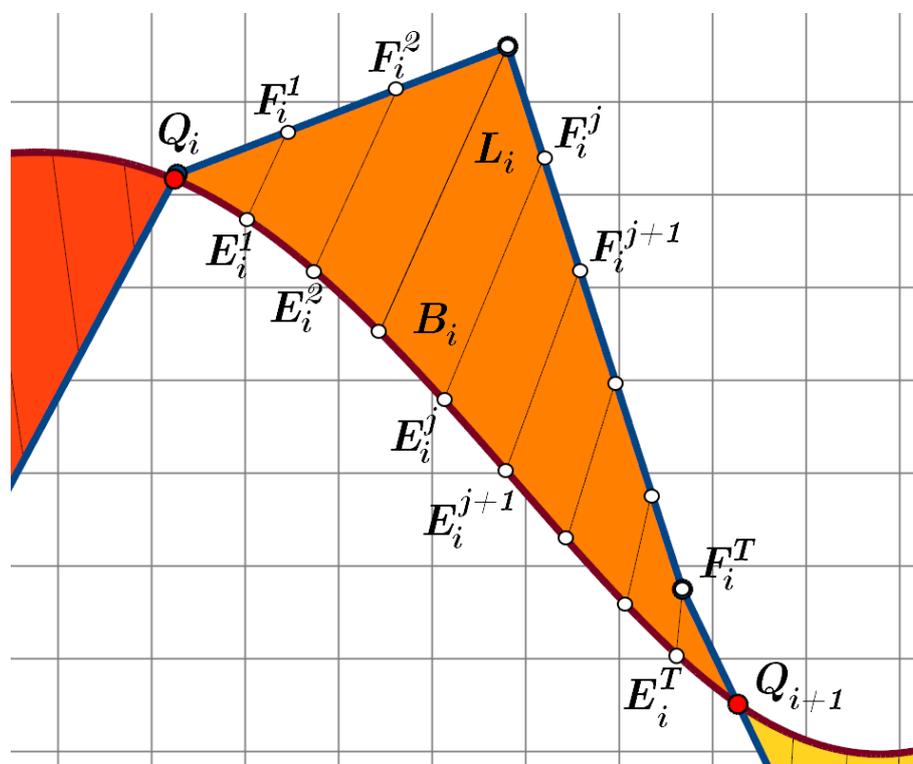


Рис. 4. Аппроксимация меры близости

3. Примеры сглаживания ломаных линий

Рассмотрим несколько примеров сглаживания ломаной линии с использованием предложенного метода. Для каждого примера приводится рисунок с исходной ломаной линией, которую требуется сгладить, и сплайнами, полученными в результате выполнения итераций с различным количеством узлов интерполяции. Для каждого сплайна в подписи к рисунку указано количество узлов N и значение площади Δ , равной сумме площадей, ограниченных кривыми Безье и соответствующими им участками ломаной линии. Размер сетки на рисунках равен 1×1 .

Пример 1. На рис. 5а изображен пример простой ломаной линии в форме буквы «П», а на рис. 5б, в — сплайны, полученные в результате выполнения итераций при фиксированном значении $N = 5$ и 6 соответственно.

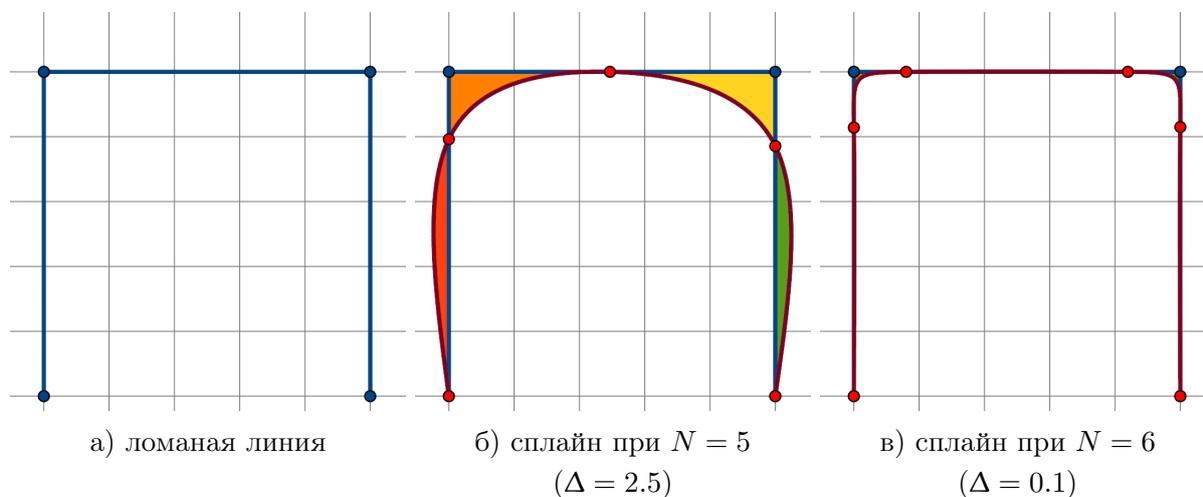


Рис. 5. Пример 1

Пример 2. На рис. 6а изображен пример более сложной ломаной линии в форме архимедовой спирали, а на рис. 6б, в — сплайны, полученные в результате выполнения итераций при фиксированном значении $N = 7$ и 10 соответственно.

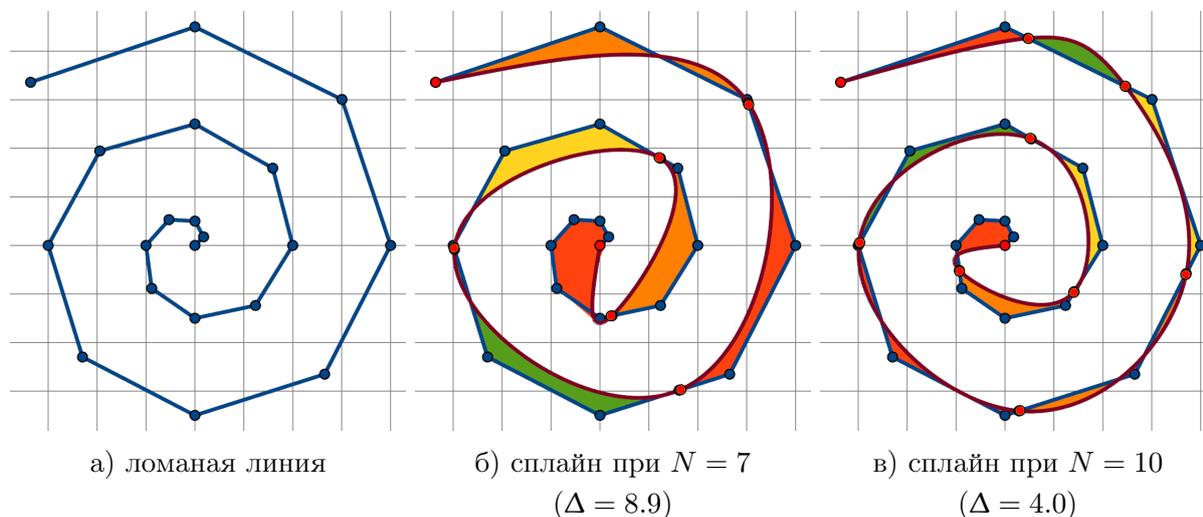


Рис. 6. Пример 2

Пример 3. На рис. 7а изображен пример ломаной линии в форме прямоугольной спирали, а на рис. 7б, в — сплайны, полученные в результате выполнения итераций при фиксированном значении $N = 10$ и 15 соответственно.

Пример 4. На рис. 8а изображен пример ломаной линии в форме зигзага, а на рис. 8б, в — сплайны, полученные в результате выполнения итераций при фиксированном значении $N = 9$ и 14 соответственно.

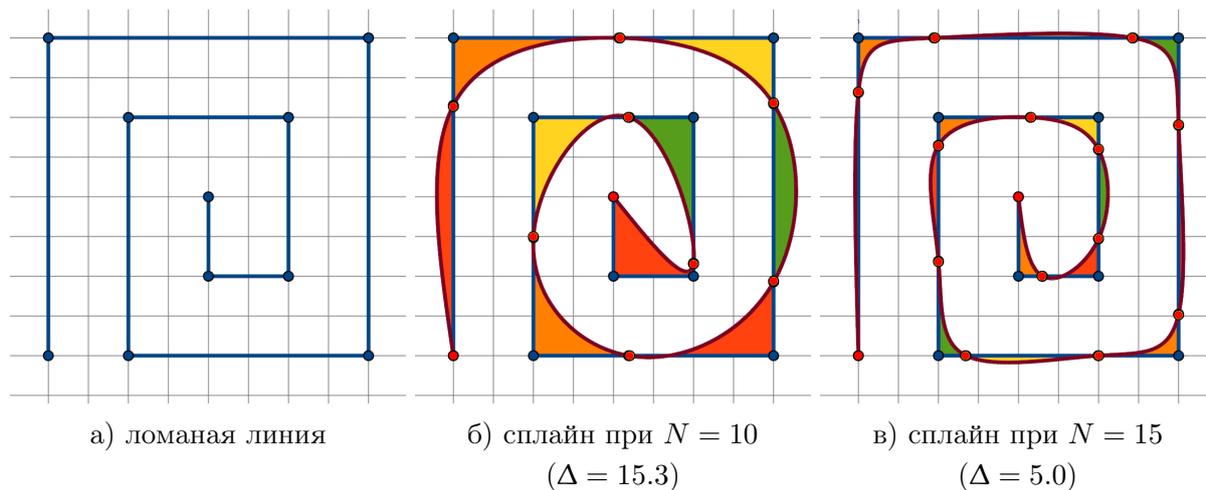


Рис. 7. Пример 3

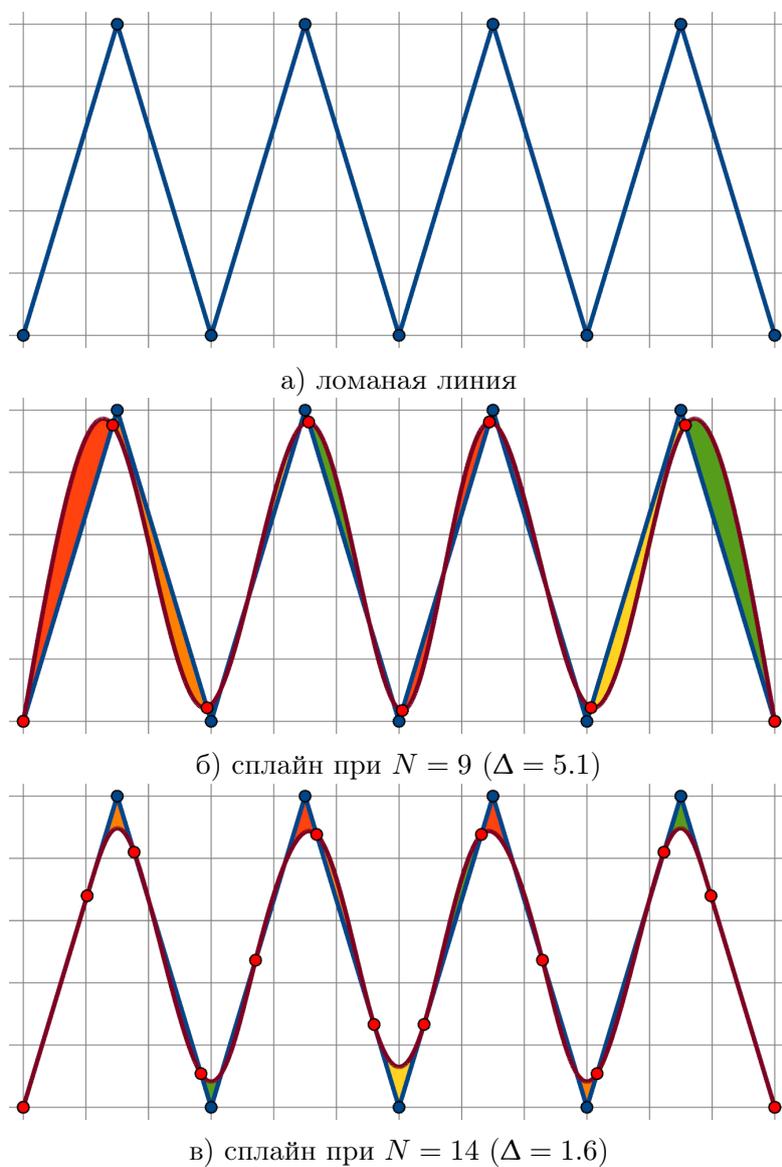


Рис. 8. Пример 4

Пример 5. На рис. 9а изображен пример ломаной линии с самопересечениями, а на рис. 9б, в, г — сплайны, полученные в результате выполнения итераций при фиксированном значении $N = 7, 13$ и 15 соответственно.

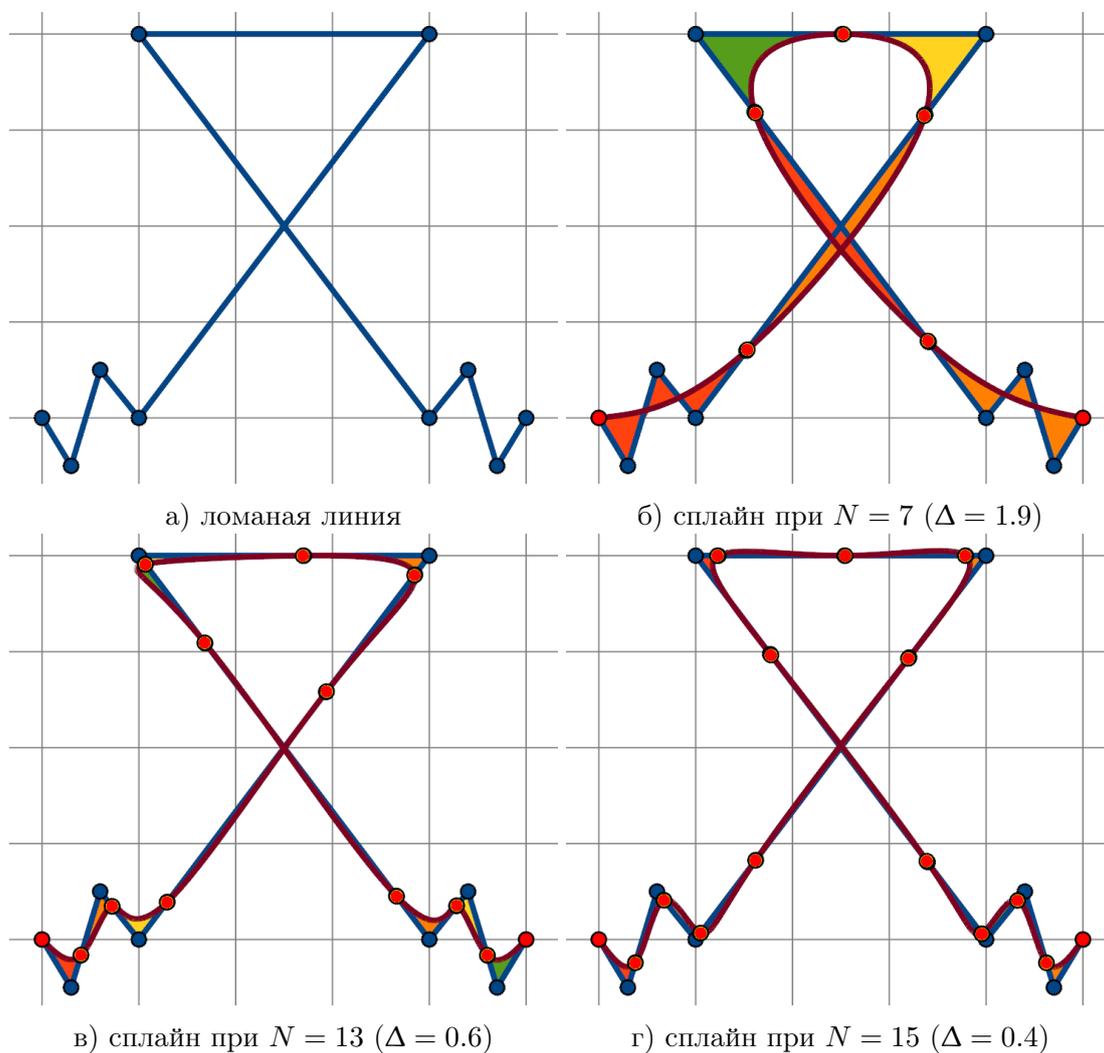


Рис. 9. Пример 5

Пример 6. Рассмотрим ломаную линию, изображенную на рис. 10а. Эта ломаная линия взята из [1], где решалась аналогичная задача проведения составного сплайна Безье по возможности ближе к исходной ломаной линии. Для этого авторы предлагают определить наиболее важные вершины исходной ломаной линии и провести составной сплайн через них. На рис. 10б показан результат этого метода — составной сплайн, проведенный через значимые вершины исходной ломаной линии (на рисунке эти вершины отмечены оранжевыми точками). На рис. 10в показан составной кубический сплайн, построенный методом, предложенным в настоящей работе. Видно, что полученные разными методами сплайны практически идентичны. Сплайн, построенный предложенным методом имеет на одну вершину больше, но зато проходит ближе к ломаной линии.

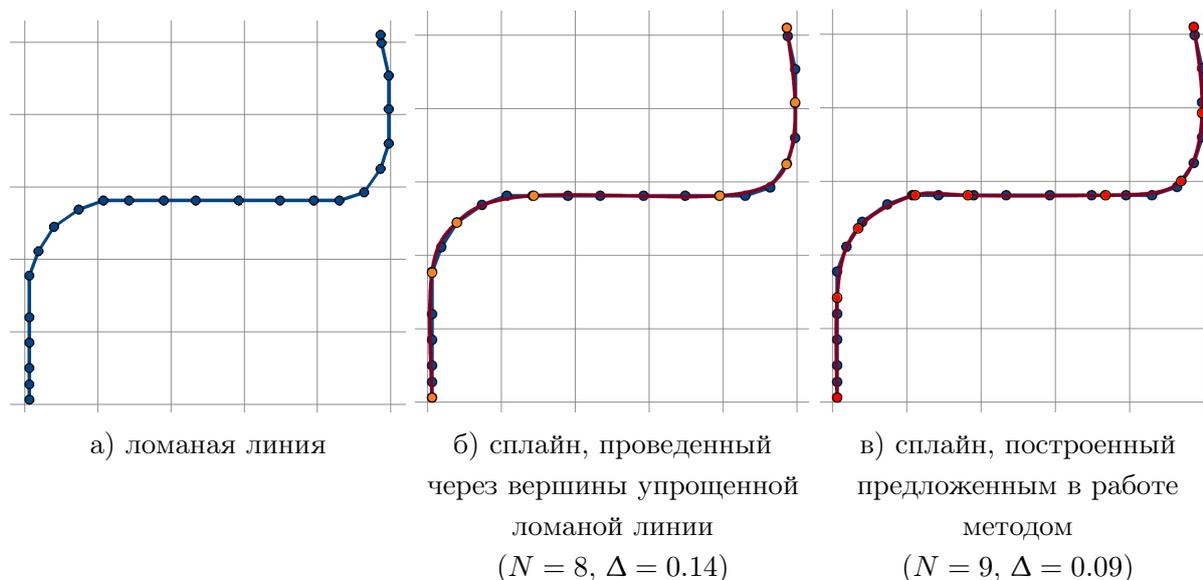


Рис. 10. Пример 6

Заключение

Приведенные примеры сглаживания ломаных линий подтверждают эффективность предложенного метода применительно к ломаным линиям различной сложности, в том числе к ломаным линиям с самопересечениями. Показано, что в отличие от существующих методов сглаживания ломаных линий, предложенный метод не требует предварительного упрощения или разбиения исходной ломаной линии. Практический пример использования разработанного метода описан в [4], где решалась задача трассировки соединений струйных устройств, то есть построение на плоскости платы струйного устройства гладких каналов между входами и выходами струйных элементов. Модель струйного устройства задавалась с помощью многоугольной фигуры, у которой внешняя граница описывала границу платы струйного устройства, а «дыры» — контуры струйных элементов, размещенных на плате. Затем строился прямолинейный скелет многоугольной фигуры и на графе прямолинейного скелета для каждого соединения между струйными элементами находился путь, соединяющий выход одного элемента со входом другого элемента. Полученные ломаные линии, представляющие найденные пути на графе, сглаживались с помощью предложенного метода. Затем для каждого сплайна строились границы канала, так чтобы сплайн проходил по центру канала, а ширина канала линейно менялась от ширины выхода струйного элемента до ширины входа приемного струйного элемента.

Таким образом, разработан метод сглаживания ломаных линий составными сплайнами Безье, автоматически выбирающий количество узлов интерполяции сплайна и их положение на заданной ломаной линии таким образом, чтобы результирующий сплайн проходил достаточно близко к заданной ломаной линии и повторял ее форму с заданной точностью. Разработано программное обеспечение, реализующее предложенный метод. Возможные области применения метода: задачи построения траекторий движения роботов, проектирование технических объектов, обработка результатов вычислительных или натуральных экспериментов и прочие сферы, где требуется построение гладких линий на основе предварительно построенных ломаных линий.

Литература

1. Hwang J.H., Arkin R., Kwon D. Mobile robots at your fingertip: Bezier curve on-line trajectory generation for supervisory control // Proceedings of IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS 2003). Vol. 2. IEEE, 2003. P. 1444–1449. DOI: 10.1109/IROS.2003.1248847.
2. Ravankar A., Ravankar A.A., Kobayashi Y., *et al.* Path Smoothing Techniques in Robot Navigation: State-of-the-Art, Current and Future Challenges // Sensors. 2018. Vol. 18, no. 9. Article number 3170. DOI: 10.3390/s18093170.
3. Zhou F., Song B., Tian G. Bezier curve based smooth path planning for mobile robot // Journal of Information and Computational Science. 2011. Vol. 8, no. 12. P. 2441–2450.
4. Romakin V.A. Routing of fluidic circuits using skeletons of polygonal figures and compound splines // International Conference on Modern Trends in Manufacturing Technologies and Equipment (ICMTMTE 2021). Vol. 346. 2021. Article number 03060. DOI: 10.1051/mateconf/202134603060.
5. Берлянт А.М., Мусин О.Р., Собчук Т.В. Картографическая генерализация и теория фракталов. Москва, 1998. 136 с.
6. Мусин О.Р., Ухалов А.Ю., Эдельсбруннер Г., Якимова О.П. Применение методов фрактальной и вычислительной геометрии для картографической генерализации линейных объектов // Моделирование и анализ информационных систем. 2012. Т. 19, № 6. С. 152–160.
7. Sarfraz M., Khan M.A. Automatic Outline capture of Arabic fonts // Information Sciences. 2002. Vol. 140. P. 269–281. DOI: 10.1016/S0020-0255(01)00176-1.
8. Soheli F.A., Karmakar G.C., Dooley L.S. A generic shape descriptor using Bezier curves // International Conference on Information Technology: Coding and Computing (ITCC'05). Vol. 2. IEEE, 2005. P. 95–100. DOI: 10.1109/ITCC.2005.11.
9. Коднянко В.А. Направленные сплайны и их использование для сглаживания выбросов и изломов интерполянта // Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2021. Т. 10, № 1. С. 5–19. DOI: 10.14529/cmse210101.
10. Ho Y.J., Liu J.S. Collision-free curvature-bounded smooth path planning using composite Bezier curve based on Voronoi diagram // Proceedings of IEEE International Symposium on Computational Intelligence in Robotics and Automation. IEEE, 2009. P. 463–468. DOI: 10.1109/CIRA.2009.5423161.
11. Борисенко В.В. Построение оптимального сплайна Безье // Фундаментальная и прикладная математика. 2016. Т. 21, № 3. С. 57–72.

Ромакин Владимир Александрович, к.т.н., лаборатория компьютерной графики, Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН (Москва, Российская Федерация)

POLYLINE SMOOTHING WITH COMPOUND BEZIER SPLINES

© 2022 V.A. Romakin

V.A. Trapeznikov Institute of Control Sciences of Russian Academy of Sciences
(Profsoyuznaya 65, Moscow, 117997 Russia)

E-mail: insight.ru@gmail.com

Received: 08.08.2022

The paper considers a new iterative method for constructing a smooth spline on a plane, consisting of cubic Bezier curves and repeating the shape of a given polyline with the required accuracy. At each iteration of the method, the following operations are performed: choosing the number of spline interpolation nodes, placing them on a given polyline according to certain rule, constructing a smooth compound Bezier spline passing through these nodes, and estimating the approximation accuracy, that is, the proximity of the constructed spline to a given polyline. The choice of the position of the spline interpolation nodes on a given polyline is performed by comparing the proximity measures of adjacent Bezier curves that make up the spline and the segments of the polyline that approximate these curves. The examples of smoothing polylines of varying complexity, including polylines with self-intersections, are given, confirming the effectiveness of the proposed method. The results of the work can be used in various applications, for example, when constructing the trajectory of automatic vehicles and mobile robots, when designing technical objects in computer-aided design systems, when performing cartographic generalization of linear cartographic objects, when designing fonts, etc.

Keywords: polyline smoothing, compound splines, Bezier curves, measure of proximity, interpolation, approximation.

FOR CITATION

Romakin V.A. Polyline Smoothing with Compound Bezier Splines. Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering. 2022. Vol. 11, no. 4. P. 37–50. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse220403.

This paper is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution-Non Commercial 4.0 License which permits non-commercial use, reproduction and distribution of the work without further permission provided the original work is properly cited.

References

1. Hwang J.H., Arkin R., Kwon D. Mobile robots at your fingertip: Bezier curve on-line trajectory generation for supervisory control. Proceedings of IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS 2003). Vol. 2. IEEE, 2003. P. 1444–1449. DOI: 10.1109/IROS.2003.1248847.
2. Ravankar A., Ravankar A.A., Kobayashi Y., *et al.* Path Smoothing Techniques in Robot Navigation: State-of-the-Art, Current and Future Challenges. Sensors. 2018. Vol. 18, no. 9. Article number 3170. DOI: 10.3390/s18093170.
3. Zhou F., Song B., Tian G. Bezier curve based smooth path planning for mobile robot. Journal of Information and Computational Science. 2011. Vol. 8, no. 12. P. 2441–2450.
4. Romakin V.A. Routing of fluidic circuits using skeletons of polygonal figures and compound splines. International Conference on Modern Trends in Manufacturing Technologies and

- Equipment (ICMTMTE 2021). Vol. 346. 2021. Article number 03060. DOI: 10.1051/mateconf/202134603060.
5. Berlyant A.M., Musin O.R., Sobchuk T.V. Cartographic generalization and fractal theory. Moscow, 1998. 136 p. (in Russian).
 6. Musin O.R., Ukhalov A.Y., Edelsbrunner G., Yakimova O.P. Application of fractal and computational geometry methods for cartographic generalization of linear objects. Modeling and analysis of information systems. 2012. Vol. 19, no. 6. P. 152–160. (in Russian).
 7. Sarfraz M., Khan M.A. Automatic Outline capture of Arabic fonts. Information Sciences. 2002. Vol. 140. P. 269–281. DOI: 10.1016/S0020-0255(01)00176-1.
 8. Soheli F.A., Karmakar G.C., Dooley L.S. A generic shape descriptor using Bezier curves. International Conference on Information Technology: Coding and Computing (ITCC'05). Vol. 2. IEEE, 2005. P. 95–100. DOI: 10.1109/ITCC.2005.11.
 9. Kodnyanko V.A. Directional Splines and Their Use for Smoothing Ejections and Fractures of Interpolant. Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering. 2021. Vol. 10, no. 1. P. 5–19. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse210101.
 10. Ho Y.J., Liu J.S. Collision-free curvature-bounded smooth path planning using composite Bezier curve based on Voronoi diagram. Proceedings of IEEE International Symposium on Computational Intelligence in Robotics and Automation. IEEE, 2009. P. 463–468. DOI: 10.1109/CIRA.2009.5423161.
 11. Borisenko V.V. Construction of Optimal Bézier Splines. Journal of Mathematical Sciences. 2019. Vol. 237, no. 3. P. 375–386. DOI: 10.1007/s10958-019-04164-6.

DEVELOPING INTELLIGENT ASSISTANTS TO SEARCH FOR CONTENT ON WEBSITES OF A CERTAIN GENRE*

© 2022 V.D. Rublev, E.A. Sidorova

*A.P. Ershov Institute of Informatics Systems,
Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
(Lavrentieva Avenue 6, Novosibirsk, 630090 Russia)
E-mail: rubleffvlad@gmail.com, lsidorova@iis.nsk.su*

Received: 06.11.2022

This paper discusses an approach to automatic generation of intelligent assistants, which provide information search on the content of a website. A feature of the approach is to use genre models, developed for a given type of resource (educational, informational, etc.), on the basis of which the genre structuring and subsequent thematic clustering of the content of the target website is performed. The resulting genre structures allow us to define more precisely the boundaries of thematic clusters related to the topic of the user's search query. The search quality evaluation for the Russian-language websites showed an F-score of 87.8% and originality of 80.9%, which exceeds the Yandex search engine results by 1.1% and 9.1%, respectively. In order to predict user information needs, a method for refining the resulting sample is proposed. It allows a user to get information implicitly, based on current and previous queries, about what the user was not satisfied with in the previous search results. A model of user's search intentions has been developed and its computational component includes a method for evaluating query closeness based on the FRiS function. Based on the proposed methods, a chatbot was created on the Telegram messenger platform to search the websites of educational institutions. The experiments showed that the user needs the average of 1.75 qualifying questions to find the necessary information.

Keywords: information retrieval, intelligent assistant, website genre model, thematic analysis, information retrieval system, user search intent model.

FOR CITATION

Rublev V.D., Sidorova E.A. Developing Intelligent Assistants to Search for Content on Websites of a Certain Genre. Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering. 2022. Vol. 11, no. 4. P. 51–66. DOI: 10.14529/cmse220404.

Introduction

Rapid development of information technologies, in particular, the development of the Internet has generated a large amount of electronic information. The simplicity and accessibility of creating and distributing data has led to a huge flow of necessary and unnecessary information. Currently, information search is developing, since from a large amount of data it is necessary to find only the information in which the user is interested. One of the ways to improve the quality of search is to use methods of analyzing the content of Internet sources based on knowledge.

This paper proposes an approach that integrates different search methods based on cluster analysis, uses genre models, a model of user search intentions and relies on the Internet genre of the site. We consider genre characteristics for two levels of resource representation: the site as a whole (macro level) and the site page (micro level) [1]. When analyzing web genres, functional, formal (compositional and lexico-grammatical) and content aspects are usually considered, which correlate with different levels of physical representation (the site as a whole, the page, individual

*This article has been recommended for publication by the Program Committee of the International Conference on Data Analytics and Management in Data Intensive Domains – 2022.

components of pages) [2]. And to test the proposed approach, a chatbot is being implemented to search through the websites of educational institutions in Novosibirsk. To analyze and build a genre model of the site, and conduct experiments, a corpus of websites of educational institutions with a size of 9052 pages was compiled, which contains the content of 137 sites.

The article is organized as follows. Section 1 of this work provides an overview of related works, Section 2 offers a way to describe the genre model of educational institutions' websites, Section 3 describes cluster analysis for thematic clustering of genre fragments of the site, Section 4 presents a model of the user's search intentions, Section 5 presents the proposed architecture of the search engine, in Section 6, the implementation of a chatbot for information search is described, and in Section 7, experimental study of the quality of search and user information support on the corpus of educational organizations websites is presented. In Conclusion, a brief summary of the results obtained in the work is given, and directions for further research are indicated.

1. Related works

There are special search engines for searching, taking into account the deep analysis of the query. The functionality of these products varies, ranging from rearranging the search results of other search engines, and to full-text search of information in indexed texts for key user queries, taking into account morphological features, syntax and semantics of words. The systems can also perform searches taking into account synonyms and related words, which are grouped according to their semantic meaning. Thus, the Nigma system [3] is a meta-search engine that provides a search for textual information, taking into account the meaning of the query given in natural language. This service allows you to improve the quality of the search due to the fact that based on the user's entered query, the system generates a list of documents divided into several clusters so that the user can choose in which cluster to continue the search. To do this, a forming phrase is formed for each cluster and the number of documents in it is indicated. There are also search engines based on thematic cluster analysis, for example, Carrot2 [4]. This system offers two specialized clustering algorithms: Lingo, an algorithm based on singular value decomposition, and STC, the suffix tree method, a classic search results clustering algorithm that very quickly creates a flat cluster with an adequate description. The search in the Yippy system [5] is based on IBM Watson, a supercomputer that has natural language processing technologies and is able to analyze complex, unstructured data and even understand professional slang. Yippy has expanded the capabilities of IBM Watson and added features such as trend tracking, concept clustering, entity extraction, relevance monitoring and sentiment analysis. AskNet [6] consists of two subsystems that allow both the search for information on the Internet and the search for information on users' computers in the corporate network. The system differs from other search engines in that it provides not only links to documents and resources to the user's request, but also text information that is the answer to the user's question. Hakia [7] contains its own linguistic database, in which words are divided into various "meanings" that they convey. It extracts all possible queries related to the content (using its database), and they become paths to the source document. And then independently ranks the content based on additional analysis of offers. It also uses the authenticity and age of the content to determine relevance. Modern search engines such as Yandex and Google in recent years have done much to improve the Internet search, for example, using knowledge graphs [8] or neural network representation of queries and lyrics [9],

but in this work, we study local search sites of one functional genre, and not a global search across the Internet which focused on these systems.

Despite the fact that many of the above systems take into account the semantic features of the text, they do not use preliminary thematic clustering and do not take into account the genre features of indexed web resources. The Nigma and Hakia systems have stopped working. It should also be noted that most of these systems are focused on working with texts in English.

Information search methods are used in various applications today and one of the most popular applications is a messenger with a built-in intelligent assistant or chatbot. There are 6 main methods of building chatbots [10]: rule-based methods, search, generative approach, ensemble methods, grounded learning and interactive learning. Rule-based systems [11] are trained based on a predefined hierarchy of rules that determine how to convert user input into a response or action. Search-based methods [12] are used today in most chatbots. Such systems operate using directed graphs and are trained to provide the best possible answer from their database of predefined answers. Instead of using predefined answers, a conversational chatbot using generative methods [13] receives a large amount of data (real dialogs) and learns to generate a new dialog that is similar to them. Modern conversational chatbots that can talk on any topic were created using ensemble methods [14], which, depending on the context, use some combination of rule-based approaches, search and generative approach. An intelligent assistant using informed learning [15], analyzing a user-entered query, generates a neural network that is configured for this specific query and task. Such an intelligent assistant is better “grounded” due to its ability to learn and use representations of real-world knowledge. Interactive machine learning is algorithms and intelligent user interface structures that simplify machine learning through human interaction. This development allows computers to learn from people by interacting with them in natural language and observing them.

2. The model for presenting a site of a certain genre

In this approach, the search is based on preliminary indexing of the site based on its genre structure. Each site has certain features that are determined by the specifics of the field of activity and are formed due to the similarity of subject matter, composition and style, which corresponds to the classical definition of the speech genre formulated by M.M. Bakhtin [16]. Genre is a typical model of constructing a speech whole. A genre model representing its “typical reproducible genre form” can be defined for each type of site. Each genre model represents a general structure of sites inherent in this model. Thus, the content of each site can be divided into genre fragments representing some aspects of the content. To analyze and build a genre model of the site, it is necessary to have a corpus of texts of a given subject, therefore, a corpus of educational institutions with a size of 9052 pages of 137 sites was collected. Based on the analysis of this corpus, a genre model of the educational institution’s website has been developed, the upper level of which is presented in Tab. 1.

Content (content part) of the site is a sequence of text blocks. To determine the genre of these blocks, a set of genre markers and a marker language are used, which allows you to specify terms, their combination or enumeration. To describe the genre model, the language proposed in [17] is used, which allows for the description of aspects of the content of any genre block based on genre markers. The genre model contains sets of markers, each set describes some aspect of the content, and for each genre typical aspects of the content are described and in which part

Table 1. The range of genres of text fragments, depending on the genre of the site

Site genre: educational institution		
	Higher educational institution	Secondary educational institution
Type of the fragment	Description of the scientific institution	Admission to school
	Description of faculties	Parents
	Description of the campus	Teachers
	Incoming	The final essay
	Students	GIA
	Graduates	
	Employees	
	Graduate students	
	News Feed	
	Comment	
	Description of the event	
	Frequently Asked Questions	

of the HTML markup they are located. In Fig. 1, we show some examples of genre markers for describing the genre model using the above-mentioned markup language.

```

1 # Template for describing content aspects
2 Content aspect: ["Marker11 "]["Marker21 "]["Marker31 "]
   ["Marker41 ", "Marker42 "]
3
4 # Template for genre descriptions
5 "Genre ID": [<Content aspect 11, tag>]
   [<Content aspect 21, tag> < Content aspect 22, tag>]
6
7 # Examples of content aspects
8 For applicants: ["to enroll "]["admission committee "]["admission "]
   ["admission rules "]["entrant "]["admission campaign "]["rating list "]
   ["tuition fees "]
9 Education Levels: ["postgraduate "]["master 's degree "]
   ["bachelor 's degree "]["specialty "]
10
11 # Example of a page genre description
12 "For applicants": [<For applicants , text >]
   [<For applicants , all × Education Levels , all >]
    
```

Fig. 1. Examples of genre markers for describing the genre model

The developed genre model is used to highlight genre fragments in the content of the website.

3. Thematic clustering of texts

After segmentation of the text content of the site, its thematic clustering is carried out — the allocation of thematic clusters, which will be searched in the future.

A dictionary is needed to cluster content and analyze a user's query, so a dictionary of terms was created in the KLAN subject vocabulary extraction system [18]. This system supports the

main stages of text analysis: syntactic, semantic and morphological. The dictionary, created on the basis of the corpus of websites of educational institutions, contains one-word and multi-word terms, its size is 17,500 terms for which statistics are collected. K-means algorithm was used [19], due to the fact that it has a high learning rate, and agglomerative hierarchical clustering [20], because it allows you to interpret the result well.

Each document is represented by a vector in the space R_n , where n is the dimension of the dictionary. To obtain such a representation, the statistical measure tf-idf [21] is used, which evaluates the importance of the term in the text, relative to other texts of the corpus. The distance between vectors can be calculated using various metrics, cosine similarity and Euclidean metric have been tested,

$$\rho(a, b) = \frac{\sum_{k=1}^n a_k \cdot b_k}{\sqrt{\sum_{k=1}^n a_k^2} \cdot \sqrt{\sum_{k=1}^n b_k^2}} \quad (1)$$

and

$$\rho(a, b) = \sqrt{\sum_{k=1}^n (a_k - b_k)^2} \quad (2)$$

respectively. The Euclidean metric works statistically worse on the collected corpus of texts, therefore, cosine similarity is used in this study.

Centroid (cluster center) is a vector whose elements represent the average values calculated for all proposals (presented in vector form) from the cluster. Thus, the centroid is a vector representation of the thematics of the proposals included in the cluster.

There are many metrics for assessing the quality of clustering and a large number of their comparisons have been carried out [22–24]. One of these metrics is the “Silhouette score” [25], which statistically significantly shows results better than other metrics. The Silhouette coefficient is calculated separately for each object from the cluster using the following formula:

$$S = \frac{b - a}{\max\{a, b\}}, \quad (3)$$

where a is the average distance from the selected object to the objects of its cluster, b — the average distance from the selected object to the objects of the nearest cluster (not containing the selected object). To assess the quality of clustering, the average value of the “Silhouette” coefficients for all clustered objects is calculated. With the help of this metric, the proposed clustering methods were evaluated and the results were ambiguous, since the outcome strongly depended on the input data.

4. The model of the user’s search intentions

In order to improve the quality of user information support, a model of user search intentions has been developed, which allows recognizing intentions through message analysis.

Let us define a formal model of the user’s search intentions at the current step of information search as a system of the form

$MSI = \langle Q_{prev}, Q_{next}, Res_{prev}, F_{SS}, Tr, P \rangle$, where

Q_{prev} — previous search query,

Q_{next} — new search query,

Res_{prev} — previous search result,

Tr — request proximity threshold,

$P = P_{new}, P_{expand}, P_{reduce}, P_{excecp}$ — multiple search engine states (search parameters): new, expand, narrow, exclude and expand.

F_{SS} – the function of calculating the states of the search engine

$$F_{SS} = Q_{next} \times Q_{prev} \times Res_{prev} \rightarrow P. \quad (4)$$

The proximity of queries is calculated using the Function of Rival Similarity (FRiS) in competition with the previous search result. Let p be a metric, then the FRiS function is calculated as follows [26]:

$$FRIS(Q_{next}, Q_{prev} | Res_{prev}) = \frac{\rho(Q_{next}, Res_{prev}) - \rho(Q_{next}, Q_{prev})}{\rho(Q_{next}, Res_{prev}) + \rho(Q_{next}, Q_{prev})}, \quad (5)$$

$$F_{SS}(Q_{next}, Q_{prev}, Res_{prev}) = \begin{cases} P_{new}, Q_{next} \cap Q_{prev} = \emptyset \\ P_{expand}, Q_{next} \cap Q_{prev} = Q_{next} \\ P_{reduce}, Q_{next} \cap Q_{prev} = Q_{prev} \vee \\ \vee FRIS(Q_{next}, Q_{prev} | Res_{prev}) \geq Tr \\ P_{excecp}, FRIS(Q_{next}, Q_{prev} | Res_{prev}) < Tr. \end{cases} \quad (6)$$

The main idea of the user’s search intent model is that with a new search query, we can use information about the previous search results and the previous query, and determine whether this is a new search query or whether the user is not satisfied with something in the results and wants to refine the query. If the request is refined, we can understand the user’s intentions (what exactly did not suit him in the request) and perform a search with some parameter that changes the search method. In the case when the model of the user’s search intentions came to a state of reduce, then we assume that the user received the necessary information, but along with it he received a large amount of noise and it is necessary to reduce the search selection in order to get rid of the noise and get only the necessary information. In the case of an expand, we assume that the user did not find the necessary information and expand the search selection. Based on the proposed model, Fig. 2 presents an algorithm for analyzing the user’s search intentions.

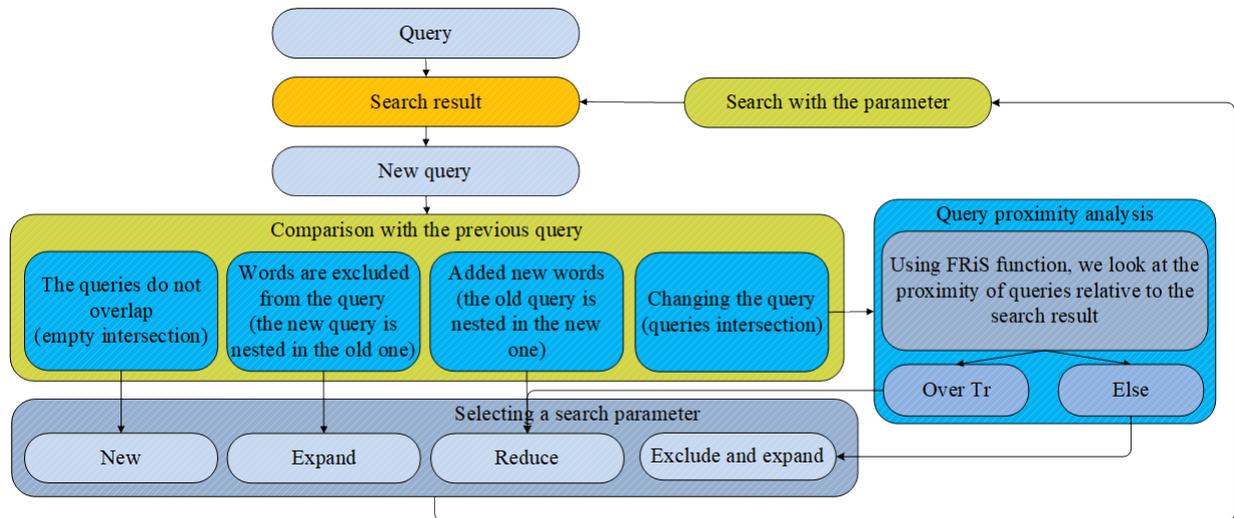


Fig. 2. The scheme of the analysis of the user’s search intentions

After receiving the user’s request, it is compared with the previous request in order to select one of the four parameters for repeated search. The parameters change the search method: exclusion of previous results, expansion of the sample, narrowing of the sample, and a new search.

To compare queries, lemmatization is performed and service words are excluded. Queries are compared in a set-theoretic way. When the queries do not contain the same lemmas (empty

intersection), a new search is performed without parameters. If the words were removed from the query (the new query is nested in the old one), then a search is performed with the “expand” parameter. If new words were added to the query (the old query is nested in the new one), then “reduce” parameter is used.

For example, when querying “Dorm” after the query “Is there a dorm at the university”, the intersection of the queries (“Dorm”) is equal to the new query, so a search will be performed with the “expand” parameter. But if the previous request is “Submission of documents”, and the new one is “Deadlines for submission of documents”, then a search is performed with the “reduce” parameter. In the case when there was a more serious change in the request (intersection of requests), then the proximity of requests is calculated. For example: “How to transfer from one faculty to another” and “How to transfer to another group in your course”. The average value of the FRiS function (formula 5) is calculated for all search results and if the average is greater than the preset threshold, then reducing parameter is used, otherwise a search is performed with the exclusion and expansion parameter.

5. Intelligent assistant architecture

Figure 3 shows the architecture of the intelligent assistant, which includes three main modules: a preprocessing subsystem, a search engine subsystem, and a user interaction subsystem.

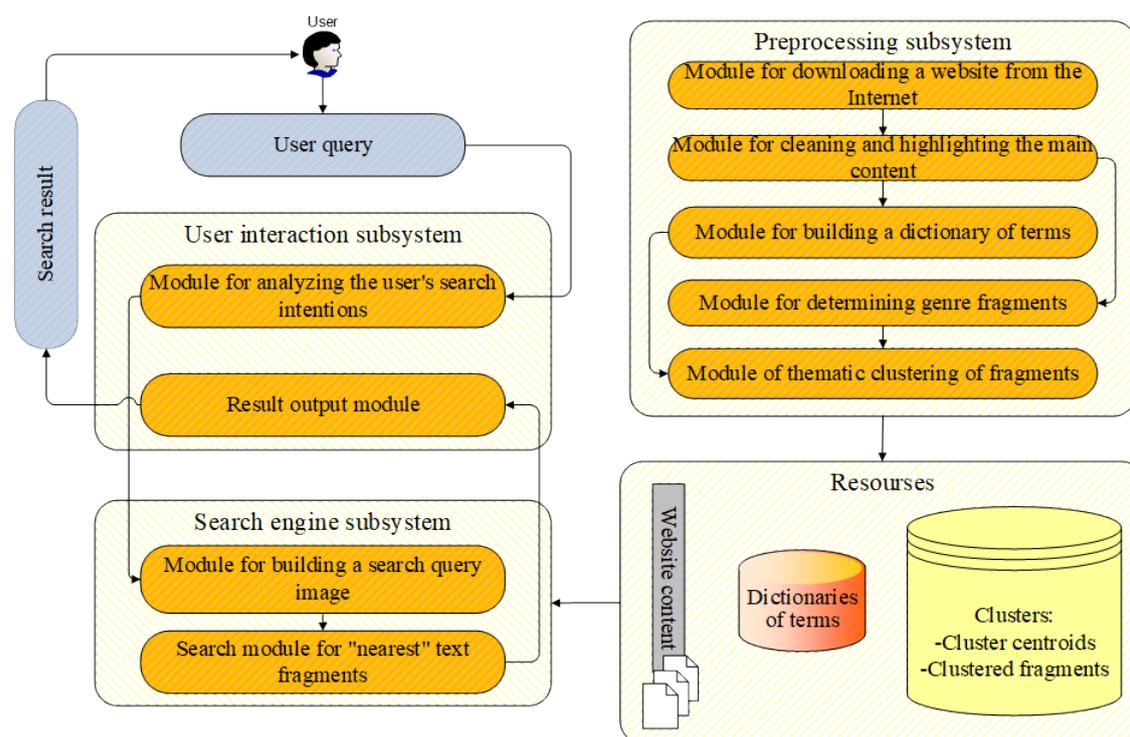


Fig. 3. Architecture of the intelligent assistant

The preliminary processing of the site is done in advance and consists of the following stages:

1. Downloading a website from the Internet — recursive search for all links to the pages of the site and sequential downloading of pages.
2. Cleaning and highlighting of the main content — on all pages of the site, data that is not the main text content is searched and deleted (header, drop-down menu, footer, etc.). All html tags are removed, except for the allowed ones: h1, h2, h3, h4, h5, h6, a, b, ul, ol, li.

3. Site dictionary generation — the received texts with the main content of the site are loaded into the dictionary system, where all terms are automatically located and statistics are collected for them. Lemmatization is performed, as well as the removal of stop words and words that are too rare.
4. Genre segmentation — based on the developed genre model, the presence of genre fragments on the page is determined, the site content is divided into fragments from title to title and the genres of these fragments are determined. Fragments of one genre following each other are combined into one, and fragments whose genre could not be determined are excluded from consideration.
5. Thematic clustering — one of the available clustering algorithms is selected, fragments obtained at the previous stage are taken as text and presented in vector form using the tf-idf measure, the number of clusters into which the text will be divided is determined, depending on the genre and volume of the fragment. Clustering is performed by the selected method for a given number of clusters. Clusters are formed within a single site.

The results of the site preprocessing are saved as the following resources: the clustering result, a text collection of content and a dictionary of site terms.

The search subsystem for each user request produces:

- 1) building a search query image;
- 2) search for the “nearest” thematic fragments taking into account the search parameter and their ranking.

The result of the search subsystem will be a set of arranged thematic fragments corresponding to the search query.

The user subsystem receives a user request for input and executes:

- 1) analysis of the user’s search intentions — the parameter of repeated search or its absence (new search) is determined;
- 2) request to the search subsystem;
- 3) generating the search result and sending it to the user.

6. Intelligent assistants as messenger chatbots

The developed approach does not depend on messengers and can work with any API, but the Telegram messenger API was chosen for testing the approach because of its popularity, simplicity and free access to the API.

Telegram provides Telegram Bot API for writing chatbots [27]. Figure 4 shows the scheme of the intelligent assistant based on the Telegram messenger.

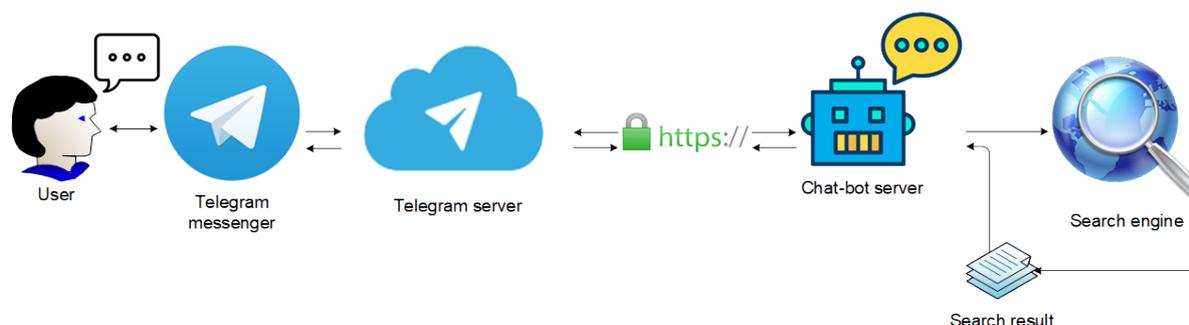


Fig. 4. The scheme of the intelligent assistant based on the Telegram messenger

Messages sent by users are transmitted to the software running on the server. The Telegram intermediate server handles all encryption and communication with the Telegram API independently. Communication with this server takes place using a simple HTTPS interface. All requests are served via HTTPS and should be presented in the following form:

```
https://api.telegram.org/bot<token>/METHOD_NAME?Param1=<p1>&ParamN=<pn>,
```

where <token> — unique chatbot key, METHOD_NAME — the method to be called from the chatbot, Param1, paramN — parameters of the called method (may be missing), p1, pn — parameter values.

The response to requests comes in the form of a JSON object, in which there will always be a Boolean ok field and an optional string description field containing a description of the query result in a format that is easily perceived by a person. If ok:true, the request was successful and the result of its execution can be seen in the result field (Fig. 5).

```

1 {
2   "ok": true ,
3   "result": {
4     "message_id": 759,
5     "from": {
6       "id": 457281743,
7       "is_bot": true ,
8       "first_name": "SearchBot ",
9       "username": "SearchBot ",
10      "language_code": "ru"
11    },
12    "chat": {
13      "id": 254188525,
14      "first_name": "Vladislav ",
15      "last_name": "Rublev ",
16      "username": "spac1k ",
17      "type": "private"
18    },
19    "date": 1648962474,
20    "text": "Hello"
21  }
22 }
```

Fig. 5. The response to the successful request

In case of an error (ok:false) the response will have an error_code field with an integer error code and its causes will be described in the description field (Fig. 6).

```

1 {
2   "ok": false ,
3   "error_code": 400,
4   "description": "Bad Request: message text is empty"
5 }
```

Fig. 6. The response to the request in case of an error

7. Experimental research

To assess the quality of the search assistant, a corpus of 90 questions with “reference” answers from the sections of frequently asked questions and answers on educational websites has been collected. Their small number is related to the methodology of preparing data for testing, as to ensure the “profitability” of queries, they were taken in the chapters of frequently asked questions and duplications of queries similar in meaning were removed.

To assess the quality of the search, classical measures were used [28] — cosine similarity, recall, precision, F-measure and originality.

Let rel be the set of all relevant documents, det — be the set of detected documents.

1. Cosine similarity is a measure of the proximity of two texts (in vector form), which is used to measure the cosine of the angle between them. It is calculated by the formula:

$$S_c = \cos(\theta) = \frac{A \cdot B}{\|A\| \cdot \|B\|} = \frac{\sum_{i=1}^n A_i \cdot B_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n A_i} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n B_i}}. \quad (7)$$

2. Recall determines how well the system finds the documents the user needs, it is the ratio of the relevant documents found to the total number of relevant documents:

$$R = \frac{|rel| \cap |det|}{|rel|}. \quad (8)$$

3. Precision determines the ability of the system to issue only relevant documents to the user, it is calculated as the ratio of the relevant documents found to the total number of documents found:

$$P = \frac{|rel| \cap |det|}{|det|}. \quad (9)$$

4. F-measure is a weighted harmonic mean of recall and precision, and allows you to give different weight to recall and precision if you need to give priority to one of these metrics:

$$F = \frac{1}{\alpha \frac{1}{P} + (1 - \alpha) \frac{1}{R}}, \alpha \in [0, 1]. \quad (10)$$

For $\alpha = 1/2$, a balanced F-measure is obtained and calculated using the following formula:

$$F = \frac{2PR}{P + R}. \quad (11)$$

5. Originality determines the number of different search results (documents with different content).

The following experiments were carried out:

- 1) evaluation of the distribution of genres across the pages of educational sites;
- 2) evaluation of the average proximity of search results to the “reference” answers;
- 3) evaluation of the quality of the work of an intelligent assistant in comparison with the Yandex search engine;
- 4) estimation of the average number of clarifying questions needed to find information.

Using the corpus of sites, a study was conducted on the distribution of genres by pages — on average, there are 1.84 genres per page. The results of this experiment allow us to determine the number of clusters at the stage of thematic clustering. To determine the number of clusters, its genre and volume are looked at for each fragment, and depending on these indicators, the number of clusters is selected.

With the help of a corpus of frequently asked questions and “reference” answers, an experiment was conducted to assess the quality of search based on the proximity measure (formula 7). The average proximity of the first search result of an intelligent assistant to the “reference” answers is calculated. The experiment was conducted for the website of Novosibirsk State University: size of 153 pages, the average number of words per page is 863. The average proximity turned out to be 0.81.

When evaluating the quality of the search for an intelligent assistant in comparison with the Yandex search engine, the search was carried out on the website of Novosibirsk State University. Frequently asked questions from educational websites were taken as search queries, for example, “How can I apply?”, “How to get an increased state academic scholarship?”, “How many budget places have been allocated this year?”, etc. The average values of recall, precision, F-measure and originality for all questions of the corpus and the first three results of search engine results are calculated. The results obtained are shown in Tab. 2.

Table 2. Evaluation of search quality

	Recall	Precision	F-measure	Originality
Yandex search engine	82.16%	91.83%	86.73%	71.84%
Informational chatbot	83.37%	92.75%	87.81%	80.92%

To conduct an experiment to estimate the number of clarifying questions required to find the necessary information, 4 experts were involved, who were given the task to find some information with the help of an intelligent assistant and record the number of clarifying questions required. 40 experiments were conducted and as a result it turned out that the average of 1.75 clarifying questions are required to find the necessary information. For example, after the query “How much does it cost to study?” one of the variants of the query refinement may be “How much does it cost to study at a master’s degree?”, after the request “How to apply?” there may be a request “Is it possible to send documents by e-mail?”. The data on the experiment are presented in Tab. 3.

Table 3. Statistics of the experiment to estimate the number of clarifying questions

	Expert 1	Expert 2	Expert 3	Expert 4
Maximum search time	5	3	3	4
Minimum search time	1	0	1	0
Average search time	2.2	1.1	2.5	1.2

The main errors occur when the search selection is already small, and the user reduces it with a new query. Such situations should be tracked separately and a new search throughout the site should be performed.

Conclusion

The paper proposes an approach to creating intelligent assistants in the form of chatbots that provide site search based on a model of user intentions, genre model and preliminary thematic clustering of text content. A feature of the approach is the use of genre models developed for a given type of resource (educational, informational, etc.), on the basis of which genre structuring of the content of a particular site is carried out. The resulting genre structures allow you to more accurately determine the boundaries of thematic clusters related to the topic of the user’s

search query. Further search is carried out by standard methods. In order to improve the quality of information support for the user, a model of the user's search intentions has been developed, which allows you to implicitly get information about what the user was not satisfied with in the search results and refine a new search query. The conducted experimental study showed that the created intelligent assistant provides a good quality of searching for useful information and reduces the search time.

Thus, the scientific contribution is the use of genre models to solve the problems of automatic construction of chatbots and local information search, and in the future this approach can be useful for solving individual text processing tasks (annotation construction, text classification, etc.). The developed system scales well, in particular, the resources created are applicable to arbitrary educational sites, and in order to configure the system for other types of sites, it is enough to write a new genre model and index the specified sites of a new type (for this purpose, an independent indexing module has been developed in the system).

Further direction of work: other methods of text preprocessing (word2vec, FastText), add synonyms dictionaries, apply clustering based on FRiS functions, correction of errors in the request, auto-completion of the query (based on context search).

This paper is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution-Non Commercial 4.0 License which permits non-commercial use, reproduction and distribution of the work without further permission provided the original work is properly cited.

References

1. Mehler A., Sharoff S., Santini M. Genres on the Web. Computational Models and Empirical Studies. Dordrecht, Springer, 2010. 362 p.
2. Dong L., Watters C., Duffy J., Shepherd M. An Examination of Genre Attributes for Web Page Classification. Proceedings of the 41st Annual Hawaii International Conference on System Sciences (HICSS'08). IEEE, 2008. P. 133–143. DOI: 10.1109/HICSS.2008.53.
3. Kutovenko A. Professional internet search. St. Petersburg, Piter Publishing House, 2011. P. 70–73. (in Russian)
4. Osinski S., Weiss D. Carrot2 Project. Carrot2 – Open Source Search Results Clustering Engine. URL: <http://project.carrot2.org/> (accessed: 30.08.2022).
5. Kutovenko A. Professional internet search. St. Petersburg, Piter Publishing House, 2011. P. 74–77. (in Russian)
6. Official website of the question and answer search engine AskNet. URL: <http://asknet.ru/> (accessed: 30.08.2022). (in Russian)
7. Radhakrishnan A. Haki's Semantic Search: The Answer to Poor Keyword Based Relevancy. Search Engine Journal. URL: <https://www.searchenginejournal.com/hakias-semantic-search-the-answer-to-poor-keyword-based-relevancy/5246/> (accessed: 30.08.2022).
8. Introducing the Knowledge Graph: things, not strings. URL: <https://blog.google/products/search/introducing-knowledge-graph-things-not> (accessed: 30.08.2022).
9. The Palekh Algorithm: how neural networks help Yandex search. URL: <https://yandex.ru/blog/company/algorithm-palekh-kak-neyronnye-seti-pomogayut-poisku-yandeksa> (accessed: 30.08.2022). (in Russian)

10. Technical Approaches for Building Conversational AI. URL: <https://www.topbots.com/building-conversational-ai/> (accessed: 30.08.2022).
11. Nimavat K., Champaneria T. Chatbots: an overview of types, architecture, tools and future possibilities. *International Journal for Scientific Research and Development*. 2017. Vol. 5, no. 7. P. 1019–1024.
12. Wu Y., Wu W., Xing C., *et al.* Sequential Matching Network: A New Architecture for Multi-turn Response Selection in Retrieval-based Chatbots. *Proceedings of the 55th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (ACL 2017)*, Vancouver, Canada, July 30 – August 4, 2017. P. 496–505. DOI: 10.18653/v1/P17-1046.
13. Kapočiūtė-Dzikienė J. A Domain-Specific Generative Chatbot Trained from Little Data. *Applied Sciences*. 2020. Vol. 10, no. 7. Article no. 2221. DOI: 10.3390/app10072221.
14. Cuayáhuitl H., Lee D., Ryu S., *et al.* Ensemble-based deep reinforcement learning for chatbots. *Neurocomputing*. 2019. Vol. 366. P. 118–130. DOI: 10.1016/j.neucom.2019.08.007.
15. Kim S., Kwon O.-W., Kim H. Knowledge-Grounded Chatbot Based on Dual Wasserstein Generative Adversarial Networks with Effective Attention Mechanisms. *Applied Sciences*. 2020. Vol. 10, no. 9. P. 3335. DOI: 10.3390/app10093335.
16. Bahtin M.M. The problem of speech genres. *Jestetika slovesnogo tvorcestva (Aesthetics of Verbal Creation)*. Moscow, Iskusstvo, 1986. P. 250–296. (in Russian)
17. Kononenko I.S., Sidorova E.A. Genre aspects of website classification. *Software Engineering*. 2015. Vol. 8. P. 32–40. (in Russian)
18. Sidorova E.A. A comprehensive approach to the study of lexical characteristics of the text. *Vestnik SibGUTI*. 2019. Vol. 3. P. 80–88. (in Russian)
19. MacQueen J.B. Some Methods for classification and Analysis of Multivariate Observations. *Proceedings of 5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*. University of California Press, 1967. P. 281–297.
20. Guo J., Hartung S., Komusiewicz C., *et al.* Exact algorithms and experiments for hierarchical tree clustering. *Proceedings of the Twenty-Fourth AAAI Conference on Artificial Intelligence, AAAI 2010, Atlanta, Georgia, USA, July 11–15, 2010*. AAAI Press, 2010. P. 1–6.
21. Manwar A., Mahalle H., Chinchkhede K., *et al.* A vector space model for information retrieval: a MATLAB approach. *Indian Journal of Computer Science and Engineering*. 2012. Vol. 3. P. 222–230.
22. Rendon E., Abundez I., Arizmendi A., *et al.* Internal versus external cluster validation indexes. *International Journal of computers and communications*. 2011. Vol. 5, no. 1. P. 27–34.
23. Liu Y., Li Z., Xiong H., *et al.* Understanding of internal clustering validation measures. *IEEE International Conference on Data Mining, Sydney, NSW, Australia, December 13–17, 2010*. IEEE, 2010. P. 911–916. DOI: 10.1109/tsmcb.2012.2220543.
24. Arbelaiz O., Gurrutxaga I., Muguerza J., *et al.* An extensive comparative study of cluster validity indices. *Pattern Recognition*. 2013. Vol. 46. P. 243–256. DOI: 10.1016/j.patcog.2012.07.021.

25. Rousseeuw P.J. Silhouettes: a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. Journal of computational and applied mathematics. 1987. Vol. 20. P. 53–65. DOI: 10.1016/0377-0427(87)90125-7.
26. Zagoruiko N.G., Borisova I.A., Kutnenko O.A., Dyubanov V.V. Constructing a compressed description of data using the competitive similarity function. Industry math. 2013. Vol. 16, no. 1. P. 275–286.
27. Telegram Bot API. URL: <https://core.telegram.org/bots/api> (accessed: 30.08.2022).
28. Manning C. D., Raghavan P., Schütze H. Introduction to Information Retrieval. Cambridge University Press, 2008. P. 151–175. DOI: 10.1017/CBO9780511809071.

УДК 004.912

DOI: 10.14529/cmse220404

РАЗРАБОТКА ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ ПОМОЩНИКОВ ДЛЯ ПОИСКА ПО КОНТЕНТУ ВЕБ-САЙТА ОПРЕДЕЛЕННОГО ЖАНРА

© 2022 В.Д. Рублев, Е.А. Сидорова

Институт систем информатики им. А.П. Ершова СО РАН

(630090 Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 6)

E-mail: rubeffvlad@gmail.com, lsidorova@iis.nsk.su

Поступила в редакцию: 06.11.2022

В данной работе предлагается подход к созданию интеллектуальных помощников в виде чат-ботов, поддерживающих информационный поиск на основе модели намерений пользователя, предварительной жанровой и тематической кластеризации контента веб-сайта. Особенностью подхода является использование жанровых моделей, разрабатываемых для заданного типа ресурса (образовательный, информационный и т.п.), на основе которых осуществляется жанровая структуризация контента конкретного сайта. Полученные жанровые структуры позволяют более точно определять границы тематических кластеров, относящиеся к теме поискового запроса пользователя. Оценка качества поиска по сайту НГУ показала F-меру 87.8% и оригинальность 80.9%, что превосходит результаты поисковой системы Яндекс на 1.1% и 9.1% соответственно. С целью повышения качества информационной поддержки пользователя разработана модель поисковых намерений пользователя, которая позволяет неявно получить информацию о том, что пользователя не устроило в поисковой выдаче и уточнить новый поисковый запрос. В практической части работы реализован чат-бот на платформе мессенджера Telegram для информационного поиска по сайтам образовательных организаций. Проведенные эксперименты показали, что пользователю в среднем требуется 1.75 уточняющих вопросов для нахождения необходимой информации.

Ключевые слова: поисковая система, интеллектуальный помощник, жанровая модель веб-сайта, тематический анализ, модель поисковых намерений пользователя.

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Rublev V.D., Sidorova E.A. Developing Intelligent Assistants to Search for Content on Websites of a Certain Genre // Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2022. Т. 11, № 4. С. 51–66. DOI: 10.14529/cmse220404.

Литература

1. Mehler A., Sharoff S., Santini M. Genres on the Web. Computational Models and Empirical Studies. Dordrecht: Springer, 2010. 362 p.

2. Dong L., Watters C., Duffy J., Shepherd M. An Examination of Genre Attributes for Web Page Classification // Proceedings of the 41st Annual Hawaii International Conference on System Sciences (HICSS'08), 2008. P. 133–143. DOI: 10.1109/HICSS.2008.53
3. Кутовенко А. Профессиональный поиск в интернете. СПб.: Питер, 2011. С. 70–73.
4. Osinski S., Weiss D. Carrot2 Project. Carrot2 – Open Source Search Results Clustering Engine, URL: <http://project.carrot2.org/> (дата обращения: 30.08.2022).
5. Кутовенко А. Профессиональный поиск в интернете. СПб.: Питер, 2011. С. 74–77.
6. Официальный сайт вопросно-ответной поисковой системы AskNet. URL: <http://asknet.ru/> (дата обращения: 30.08.2022).
7. Radhakrishnan A. HAKIA's Semantic Search: The Answer to Poor Keyword Based Relevancy. Search Engine Journal. URL: <https://www.searchenginejournal.com/hakias-semantic-search-the-answer-to-poor-keyword-based-relevancy/5246/> (дата обращения: 30.08.2022).
8. Introducing the Knowledge Graph: things, not strings. URL: <https://blog.google/products/search/introducing-knowledge-graph-things-not> (дата обращения: 30.08.2022).
9. Алгоритм «Палех»: как нейронные сети помогают поиску Яндекса. URL: <https://yandex.ru/blog/company/algorithm-palekh-kak-neyronnye-seti-pomogayut-poisku-yandeksa> (дата обращения: 30.08.2022).
10. Technical Approaches for Building Conversational AI. URL: <https://www.topbots.com/building-conversational-ai/> (дата обращения: 30.08.2022).
11. Nimavat K., Champaneria T. Chatbots: an overview of types, architecture, tools and future possibilities // International Journal for Scientific Research and Development. 2017. Vol. 5, no. 7. P. 1019–1024.
12. Wu Y., Wu W., Xing C., *et al.* Sequential Matching Network: A New Architecture for Multi-turn Response Selection in Retrieval-based Chatbots // Proceedings of the 55th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (ACL 2017), Vancouver, Canada, July 30 – August 4, 2017. P. 496–505. DOI: 10.18653/v1/P17-1046.
13. Kapočiūtė-Dzikienė J. A Domain-Specific Generative Chatbot Trained from Little Data. Applied Sciences. 2020. Vol. 10, no. 7. Article no. 2221. DOI: 10.3390/app10072221.
14. Cuayáhuatl H., Lee D., Ryu S., *et al.* Ensemble-based deep reinforcement learning for chatbots // Neurocomputing. 2019. Vol. 366. P. 118–130. DOI: 10.1016/j.neucom.2019.08.007.
15. Kim S., Kwon O.-W., Kim H. Knowledge-Grounded Chatbot Based on Dual Wasserstein Generative Adversarial Networks with Effective Attention Mechanisms // Applied Sciences. 2020. Vol. 10, no. 9. P. 3335. DOI: 10.3390/app10093335.
16. Бахтин М.М. Проблема речевых жанров // Эстетика словесного творчества. Искусство, 1986. С. 250–296.
17. Кононенко И.С., Сидорова Е.А. Жанровые аспекты классификации веб-сайтов // Программная инженерия. 2015. № 8. С. 32–40.
18. Сидорова Е.А. Комплексный подход к исследованию лексических характеристик текста // Вестник СибГУТИ. 2019. № 3. С. 80–88.

19. MacQueen J.B. Some Methods for classification and Analysis of Multivariate Observations // Proceedings of 5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability. University of California Press, 1967. P. 281–297.
20. Guo J., Hartung S., Komusiewicz C., *et al.* Exact algorithms and experiments for hierarchical tree clustering // Proceedings of the Twenty-Fourth AAAI Conference on Artificial Intelligence, AAAI 2010, Atlanta, Georgia, USA, July 11–15, 2010. AAAI Press, 2010. P. 1–6.
21. Manwar A., Mahalle H., Chinchkhede K., *et al.* A vector space model for information retrieval: a MATLAB approach // Indian Journal of Computer Science and Engineering. 2012. Vol. 3. P. 222–230.
22. Rendon E., Abundez I., Arizmendi A., *et al.* Internal versus external cluster validation indexes // International Journal of computers and communications. 2011. Vol. 5, no. 1. P. 27–34.
23. Liu Y., Li Z., Xiong H., *et al.* Understanding of internal clustering validation measures // IEEE International Conference on Data Mining, Sydney, NSW, Australia, December 13–17, 2010. IEEE, 2010. P. 911–916. DOI: 10.1109/tsmcb.2012.2220543.
24. Arbelaitz O., Gurrutxaga I., Muguerza J., *et al.* An extensive comparative study of cluster validity indices // Pattern Recognition. 2013. Vol. 46. P. 243–256. DOI: 10.1016/j.patcog.2012.07.021.
25. Rousseeuw P.J. Silhouettes: a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis // Journal of computational and applied mathematics. 1987. Vol. 20. P. 53–65. DOI: 10.1016/0377-0427(87)90125-7.
26. Загоруйко Н.Г., Борисова И.А., Кутненко О.А., Дюбанов В.В. Построение сжатого описания данных с использованием функции конкурентного сходства // Сибирский журнал индустриальной математики. 2013. № 1. С. 29–41.
27. Telegram Bot API. URL: <https://core.telegram.org/bots/api> (дата обращения: 30.08.2022).
28. Manning C. D., Raghavan P., Schütze H. Introduction to Information Retrieval. Cambridge University Press, 2008. P. 151–175. DOI: 10.1017/CBO9780511809071.

Рублев Владислав Дмитриевич, аспирант, Институт систем информатики им. А.П. Ершова Сибирского отделения Российской академии наук, Лаборатория ИИ (Новосибирск, Россия)

Сидорова Елена Анатольевна, с.н.с., к.ф.-м.н., Институт систем информатики им. А.П. Ершова Сибирского отделения Российской академии наук, Лаборатория ИИ (Новосибирск, Россия)

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЗОВЗВЕСИ С УДАРНОЙ ВОЛНОЙ КОНТИНУАЛЬНЫМИ МАТЕМАТИЧЕСКИМИ МОДЕЛЯМИ С ИДЕАЛЬНОЙ И ДИССИПАТИВНЫМИ НЕСУЩИМИ СРЕДАМИ

© 2022 Д.А. Тукмаков

Федеральный исследовательский центр

«Казанский научный центр Российской академии наук»

(420100 Казань, ул. Лобачевского, д. 2/31)

E-mail: tukmakovda@imm.knc.ru

Поступила в редакцию: 18.06.2022

В данной работе проводится сопоставление компьютерных реализаций численных алгоритмов решения уравнений математических моделей динамики газовзвесей с вязкой теплопроводной, невязкой теплопроводной и идеальной несущими средами. Математические модели разработаны в рамках континуальной методики моделирования динамики многофазных сред. В исследовании моделировался часто встречающийся в горной промышленности процесс взаимодействия ударной волны, движущейся из однородного газа в газовзвесь. Актуальность исследования данного течения неоднородных сред связана с экранированием аэрозольными завесами промышленных взрывов. При моделировании для вязкой среды задавались однородные граничные условия Дирихле, для невязкой среды однородные граничные условия Неймана. Уравнения математической модели интегрировались конечно-разностным методом Мак–Кормака. Для преодоления численных осцилляций применялась нелинейная схема коррекции сеточных функций. Программа, реализующая континуальную методику динамики многофазных сред, состояла из блока задания граничных условий, блока, реализующего численное решение, блока учета межфазного взаимодействия. В результате сопоставления численных расчетов математических моделей динамики газовзвеси с идеальной, невязкой теплопроводной и вязкой теплопроводной несущими средами было выявлено, что в процессе движения газовзвеси наибольшее влияние на интенсивность межфазного обмена импульсом оказывает учет вязкости несущей среды газовзвеси.

Ключевые слова: численное моделирование, конечно-разностная схема, многофазные среды, континуальная модель, межфазное взаимодействие, уравнение Эйлера, уравнение Навье–Стокса.

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Тукмаков Д.А. Численное моделирование взаимодействия газовзвеси с ударной волной континуальными математическими моделями с идеальной и диссипативными несущими средами // Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2022. Т. 11, № 4. С. 67–87. DOI: 10.14529/cmse220405.

Введение

Моделирование гидродинамических процессов в связи с нелинейностью систем уравнений связано с применением различных численных алгоритмов [1]–[28]. В статье [3] представлена конечно-разностная модель газовой динамики применительно к задачам физики атмосферы. В работе [5] исследована возможность применения математической модели исследования и прогнозирования погоды для изучения характеристик пограничного слоя атмосферы и его изменений над крупным промышленным городом в условиях зимнего антициклона. Получено, что математическая модель относительно хорошо описывает наблюдаемую структуру пограничного слоя. В публикации [6] проводится анализ результатов в области

численного моделирования тепломассообмена в различных объектах атомной энергетики. В исследовании [7] на основе конечно-разностного решения уравнений Навье—Стокса разработан комплекс программ моделирования гидродинамического воздействия водных потоков на берегозащитные сооружения и прибрежные конструкции. В статье [8] проводится верификация турбулентной модели для различных струйных течений, проведены численные исследования осесимметричных струй для различных температур и скоростей течения.

Одним из развивающихся разделов современной механики жидкости и газа является динамика неоднородных сред. В монографии [9] представлены теоретические основы механики многофазных сред, описаны различные методики моделирования течений неоднородных сред, в том числе многофазных сред (смесей), компоненты которых имеют различное агрегатное состояние. В монографии [10] разработаны одномерные модели динамики газозвесей, взвешенных в газе твердых частиц или жидких капель, с невязкой несущей средой. В монографии [11] представлены одномерные и плоские стационарные и нестационарные математические модели запыленных сред. В работе [12] разработана математическая модель и ее компьютерная реализация, позволявшая исследовать акустические процессы в неоднородных средах. Модель описывает процессы тепломассообмена для капли жидкости, покрытой эластичной оболочкой, в центре которой находится парогазовый пузырь. Система уравнений волновых процессов включала в себя уравнения теплопроводности и конвективной диффузии, а также граничные условия, описывающие межфазный тепло- и массоперенос между парогазовой смесью, жидкой фазой, вязкоупругой оболочкой и жидкостью-носителем. В публикации [13] рассмотрена задача моделирования сейсмического поля в неоднородной слоистой среде с включениями, построены алгоритмы моделирования сейсмических процессов в неоднородных средах с учетом влияния электромагнитного поля. В публикации [14] с использованием трехмерной нелинейной математической модели изучаются динамические процессы в однородной среде с примесью, изучены особенности трансформации примеси в море, вызванные действием переменного ветра и атмосферного давления при наличии морских течений. В исследовании [15] представлена математическая модель и численный алгоритм, а также программное средство для проведения вычислительных экспериментов, разработанные на основе методов гидродинамики для моделирования процессов многокомпонентной фильтрации. В исследовании [16] описан метод Годунова, предназначенный для расчетов течений смеси на криволинейных сетках, проведен анализ уравнений математической модели, показана их гиперболичность. В публикации [17] исследованы задачи взаимодействия ударной волны с ограниченным слоем газозвеси. Для расчетов используется гибридный метод крупных частиц второго порядка аппроксимации по пространству и времени. Исследованы зависимости ослабления ударной волны слоем газозвеси. Изучены ударно-волновые структуры в двумерных областях и влияние на них релаксационных процессов. Без применения полного гидродинамического подхода, используя уравнения акустики в исследовании [18] численно моделировалось конденсация атмосферного аэрозоля, рассмотрены различные механизмы конденсации капель аэрозоля. В работе [19] численно моделировалось нестационарное течение газа с дисперсными включениями в гиперзвуковой ударной трубе с момента начала движения возмущения до момента формирования стационарного течения. Для газа численно решалась полная гидродинамическая система уравнений, в двухмерном осесимметричном приближении, с учетом сжимаемости газа, но без учета вязкости газа. Динамика частиц описывалась с учетом полей скорости газа с помощью обыкновенных дифференциальных уравнений учи-

тывающих газодинамические силы несущей среды, приложенные к частицам. Влияние частиц на течение несущей среды не учитывались, что является корректным для описания динамики дисперсной среды лишь при малых объемных содержания дисперсной компоненты [9]. В работе [20] моделировалось взаимодействие ударной волны с объемом газокapельной взвеси. Получена математическая модель двухкомпонентной сжимаемой среды. В публикации [21] разработана модель течения для численного моделирования многофазных течений с фазовыми переходами. Модель представляет собой многокомпонентную систему уравнений невязкой среды. В статье [22] численно моделировалась динамика процесса детонации, инициируемой ударным схлопыванием заполненной газом эллипсоидальной полости, заложеной во взрывчатом веществе с конденсированной фазой. Математическая модель описывала динамику многокомпонентной смеси, для численного решения уравнений математической модели использовалась конечно-разностная схема Годунова. В публикации [23] получена двухмерная численная модель детонации в неоднородной среде, основанная на методе Эйлера—Лагранжа и учитывающая дробление капель. Модель учитывала межфазный обмен массой, импульсом и межфазный теплообмен. Было обнаружено существенное влияние межфазного взаимодействия на интенсивность процесса детонации.

Из анализа публикаций в отечественных и зарубежных периодических изданиях следует, что при разработке математических моделей динамики неоднородных сред основной задачей является описание эффектов взаимодействия компонент смеси. В различных исследованиях взаимодействие компонент в движущихся смесях сопровождается не только механическими, но и термодинамическими или даже химическими процессами. При этом во многих исследованиях для упрощения математических моделей пренебрегают геометрией или же полным описанием гидродинамических свойств течений. Таким образом, дальнейшее развитие математического моделирования гидродинамики неоднородных сред может состоять как в наиболее полном описании гидродинамики процесса, так и в более подробном описании разнородных эффектов межкомпонентного взаимодействия в движущихся смесях.

Для моделирования динамики неоднородных сред в литературе существует несколько подходов [9]. В равновесном подходе динамики неоднородных сред за счет введения коэффициентов, дающих поправки на неоднородность, динамика смеси описывается как динамика однородной жидкости или газа. Диффузионный подход предполагает, что уравнения сохранения массы описывают непрерывность плотности отдельно каждой компоненты, а уравнения сохранения импульса и энергии интегрируются для всей смеси. Также существует континуальный подход, в котором для каждой компоненты смеси решается полная гидродинамическая система уравнений, включающая в себя уравнения непрерывности плотности, массы и энергии с учетом взаимодействия компонент смеси в процессе движения.

При движении газодисперсной среды (газовзвеси) движение дисперсной компоненты формируется под действием движения несущей среды. Но при этом на несущую среду оказывает воздействие дисперсная компонента смеси. Таким образом при близких массовых долях компонент смеси возможны взаимообратные эффекты, выявить которые можно лишь при моделировании процесса математическими моделями, учитывающими взаимодействие компонент. В данной работе проводится сопоставление математических моделей динамики неоднородных сред, реализующих континуальный подход динамики многофазных сред (газовзвесей). Актуальность данного исследования заключается в том, что динамические процессы в газовзвесах возникают в различных областях техники, в частно-

сти ударно-волновые процессы встречаются в технологиях экранирования промышленных взрывов аэрозольными завесами, в различных агрегатах аэрокосмической техники. Интерес к развитию математических моделей динамики газозвесей вызван необходимостью моделирования такого рода процессов в различных аппаратах и промышленных технологиях. Новизна исследования заключается в том, что сопоставляются расчеты ударно-волнового взаимодействия однородного газа с газозвесью, полученные различными математическими моделями динамики газозвесей. В работе исследованы течения газозвесей при таких объемных содержаниях дисперсной фазы, когда невозможно пренебречь взаимобратными эффектами динамики неоднородной среды, как это делается в работе [19]. В данной работе для моделирования ударно-волновой динамики газозвесей применяется модель, в которой помимо теплообмена и обмена импульсом между компонентами смеси, а также учета сжимаемости и теплопроводности несущей среды [10], учитывается вязкость газовой фазы смеси. В рамках континуального подхода моделирования динамики газозвесей определяется влияние свойств (сжимаемость, теплопроводность, вязкость) математической модели динамики несущей среды на результаты расчетов. Сопоставление расчетов континуальных моделей несущей среды, которые отличаются между собой различными газодинамическими описаниями несущих сред, позволит определить то как параметры несущей среды влияют на межкомпонентное взаимодействие при моделировании ударно-волновых процессов в аэрозольных средах. Целью исследования является сопоставление результатов расчетов, полученных континуальными моделями с различным описанием несущей среды. Моделировались такие режимы течений газодисперсных сред, в которых возможно определить различия результатов расчетов межкомпонентного взаимодействия, полученных математическими моделями с разными описаниями динамики газовой компоненты. Задачи исследования заключаются в проведении ряда численных экспериментов для математических моделей с различными свойствами несущей среды. В рамках одного программного комплекса с помощью изменения решаемых уравнений рассматривались математические модели динамики газозвесей с вязкой теплопроводной, невязкой теплопроводной и идеальной несущими средами. Для полученных расчетов ударно-волновой динамики газозвесей проводится анализ влияния параметров модели.

Статья имеет следующую структуру. В разделе 1 представлены уравнения математических моделей динамики газозвесей с идеальной и невязкой теплопроводной несущими средами, что соответствует методике моделирования описанной в монографии [10], а также вязкой теплопроводной несущей средой. Далее в разделе 1 описан численный алгоритм решения уравнений математических моделей. Раздел 2 посвящен программной реализации численного алгоритма решения системы уравнений динамики газозвеси. В разделе 3 приведены результаты численных экспериментов, проведенных с помощью программного комплекса, описанного в разделе 2 для реализации основной идеи работы — сопоставления различных математических моделей течений газозвеси. Также в разделе 3 анализируются результаты моделирования динамики дисперсной компоненты и межкомпонентного взаимодействия в ударной волне при различных методиках моделирования движения несущей среды газозвеси. В заключении приводится краткая сводка результатов, полученных в работе, и указаны направления дальнейших исследований.

1. Математическая модель

Для описания динамики дисперсных включений, распределенных дискретно, вводится понятие «средней плотности» — произведения постоянной величины «физической плотности» дисперсной фазы на объемное содержание, которое является функцией временной и пространственных переменных, что позволяет моделировать динамику совокупности частиц как однородную среду. В представленной модели смесь состоит из двух континуумов [9] — газовой и дисперсной фазы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_1 v_1)}{\partial y} = 0. \quad (2)$$

Уравнение (1) описывает непрерывность плотности сжимаемого газа, уравнение (2) описывает непрерывность «средней плотности» дисперсной фазы, также описываемой как сжимаемая среда [10, 11]. При моделировании ударно-волновых процессов в газе [1, 2] и газодисперсных средах [10, 11] существенным является свойство сжимаемости.

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p - \tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv - \tau_{xy}) = -F_x + \alpha \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv + p - \tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p - \tau_{yy}) = -F_y + \alpha \frac{\partial p}{\partial y}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv) = -F_x + \alpha \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv + p) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p) = -F_y + \alpha \frac{\partial p}{\partial y} \quad (6)$$

Уравнения (3) и (4) в совокупности составляют систему уравнений Навье—Стокса, описывающую сохранение пространственных составляющих импульса вязкого газа, уравнения (5) и (6) составляют систему уравнений Эйлера, описывающую сохранение импульса невязкого газа. Отличие от классических уравнений гидродинамики заключается в наличии правых частей уравнений, отвечающих за обмен импульсом с дисперсной компонентой.

$$\frac{\partial(\rho_1 u_1)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_1 u_1^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_1 u_1 v_1) = F_x - \alpha \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial(\rho_1 v_1)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_1 u_1 v_1) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_1 v_1^2) = F_y - \alpha \frac{\partial p}{\partial y} \quad (8)$$

Уравнения (7) и (8) описывают сохранение пространственных составляющих импульса дисперсной фазы и не зависят от вязких свойств несущей среды напрямую, а лишь опосредовано, так как в этих уравнениях присутствуют слагаемые, отвечающие за обмен импульсом между компонентами смеси.

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}([e + p - \tau_{xx}]u - \tau_{xy}v + \lambda \frac{\partial T}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}([e + p - \tau_{yy}]v - \tau_{xy}u + \lambda \frac{\partial T}{\partial y}) = \quad (9)$$

$$= -6\alpha\lambda N u_1(T - T_1)/(d)^2 - |F_x|(u - u_1) - |F_y|(v - v_1)) + \alpha \left(\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right),$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}([e + p]u + \lambda \frac{\partial T}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}([e + p]v + \lambda \frac{\partial T}{\partial y}) = -6\alpha\lambda N u_1 (T - T_1)/(d)^2 - \quad (10)$$

$$-|F_x|(u - u_1) - |F_y|(v - v_1)) + \alpha \left(\frac{\partial(pu)}{\partial x} + \frac{\partial(pv)}{\partial y} \right),$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}([e + p]u) + \frac{\partial}{\partial y}([e + p]v) = -|F_x|(u - u_1) - \quad (11)$$

$$-|F_y|(v - v_1)) + \alpha \left(\frac{\partial(pu)}{\partial x} + \frac{\partial(pv)}{\partial y} \right)$$

Уравнения (9)–(11) описывают сохранение энергии вязкой теплопроводной, невязкой теплопроводной и идеальной несущих сред соответственно. В уравнениях учитывается обмен импульсом и теплообмен газа с дисперсной компонентой, в случае идеальной среды в уравнении учитывается только обмен импульсом.

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(e_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial y}(e_1 v_1) = N u_1 \frac{6\alpha}{(d)^2} \lambda (T - T_1), \quad (12)$$

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(e_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial y}(e_1 v_1) = 0 \quad (13)$$

Уравнения (12) и (13) описывают сохранение энергии для вязкой теплопроводной и невязкой теплопроводных сред (12) и для идеальной среды (13). В уравнениях применяются следующие обозначения: ρ — плотность (для несущей среды плотность газа, а для дисперсной компоненты «средняя плотность») компонент, u_i , v_i — составляющие векторов скорости, компонент смеси — V_i , e_i и T_i — энергия и температура компонент смеси, p — давление газа. Индекс «1» относится к физическим величинам дисперсной компоненты смеси, переменные без индекса описывают изменение физических параметров несущей среды. Здесь λ , μ , γ — коэффициенты теплопроводности, вязкости и постоянная адиабаты для несущей газообразной среды, $I = RT_1/(\gamma - 1)$ — внутренняя энергия несущей среды (R — газовая постоянная) [2], τ_{xx} , τ_{xy} , τ_{yy} — составляющие тензора вязких напряжений несущей сред (14):

$$p = (\gamma - 1)(e - \rho(u^2 + v^2)/2), \quad e = \rho(I + (u^2 + v^2)/2), \quad e_1 = \alpha \rho_{10} C_{p1},$$

$$\tau_{xx} = \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} D \right), \quad \tau_{yy} = \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} D \right), \quad \tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (14)$$

$$D = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right).$$

Используются обозначения: α — объемное содержание дисперсной фазы, C_{p1} , ρ_{10} — удельная теплоемкость и физическая плотность вещества твердых частиц, d — диаметр частиц, предполагается, что все частицы имеют сферическую форму. Компоненты силы межфазного взаимодействия F_x (15) и F_y (16) определяются следующим образом [9]–[11]:

$$F_x = \frac{3\alpha}{4d} C d_1 \rho \sqrt{(u - u_1)^2 + (v - v_1)^2} (u - u_1), \quad (15)$$

$$F_y = \frac{3\alpha}{4d} C d_1 \rho \sqrt{(u - u_1)^2 + (v - v_1)^2} (v - v_1). \quad (16)$$

Обмен импульсом компонент смеси определяется коэффициентом сопротивления C_{d1} . Теплообмен и обмен импульсом составляющих газозвеси определяются [10] относительным числом Маха M_1 , относительным числом Рейнольдса Re_1 , относительным числом Нуссельта Nu_1 и числом Прандтля Pr_1 , выражения для определения коэффициентов взаимодействия компонент смеси имеют следующий вид (17):

$$C_{d1} = C_{d1}^0 \phi(M_1) \phi(\alpha), \quad C_{d1}^0 = \frac{24}{Re_1} + \frac{4}{Re_1^{0.5}} + 0.4, \quad \phi(M_1) = 1 + \exp\left(-\frac{0.427}{M_1^{0.63}}\right),$$

$$\phi(\alpha) = (1 - \alpha)^{-2.5}, \quad Re_1 = d\rho|\mathbf{V} - \mathbf{V}_1|/\mu, \quad M_1 = |\mathbf{V} - \mathbf{V}_1|,$$

$$Pr_1 = c_{p1}\mu(\lambda)^{-1}, \quad Nu_{12} = 2 \exp(-M_1) + 0/459 Re_1^{0.55} Pr_1^{0.33}.$$

Для векторов скорости компонент смеси используется обозначение $\mathbf{V} = [u, v]$, $\mathbf{V}_1 = [u_1, v_1]$. Система уравнений (1), (2), (5)–(8), (11), (13) описывает динамику газозвеси с идеальной (невязкой и нетеплопроводной несущей средой) с учетом обмена импульсом между несущей средой и дисперсной компонентой. Уравнения (1), (2), (5)–(8), (10), (12) соответствуют математической модели динамики газозвеси с несущей средой (невязким теплопроводным газом), разработанной в монографии [10]. Система уравнений (1)–(4), (7)–(9), (12) описывает движение газозвеси с сжимаемой, теплопроводной и вязкой несущей средой. Система уравнений дополнялась соответствующими граничными условиями. На границах расчетной области задавались однородные граничные условия Дирихле для составляющих скорости несущей и дисперсной фазы при моделировании динамики вязкой среды и однородные граничные условия Неймана при моделировании динамики невязкой среды, для остальных функций в обоих случаях задавались однородные граничные условия Неймана [1, 2]. Для интегрирования систем уравнений применялся явным конечно-разностный метод Мак–Кормака [2]. Рассмотрим численный алгоритм на примере скалярного нелинейного дифференциального уравнения в частных производных (18) от функции f , где $a(f)$, $b(f)$, $c(f)$ — нелинейные функции:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial a(f)}{\partial x} + \frac{\partial b(f)}{\partial y} = c(f).$$

Для нелинейного уравнения (18) численное решение явным конечно-разностным методом Мак–Кормака на n -ом временном слое записывается следующим образом [2] (19):

$$f_{jk}^* = f_{jk}^{n-1} - \frac{\Delta t}{\Delta x}(a_{j+1k}^{n-1} - a_{jk}^{n-1}) - \frac{\Delta t}{\Delta y}(b_{jk+1}^{n-1} - b_{jk}^{n-1}) + \Delta t c_{jk}^{n-1},$$

$$f_{jk}^n = 0.5(f_{jk}^* + f_{jk}^n) - 0.5 \frac{\Delta t}{\Delta x}(a_{jk}^* - a_{j-1k}^*) - 0.5 \frac{\Delta t}{\Delta y}(b_{jk}^* - b_{jk-1}^*) + 0.5 \Delta t c_{jk}^*.$$

Здесь Δt , Δx , Δy — шаги по переменной времени и пространственным направлениям.

С целью подавления численных осцилляций использовалась схема нелинейной коррекции сеточной функции (20) [3, 4]. Пусть $Z_{j,k}^n$ — произвольная независимая функция на n -ом временном слое в узле j, k . Тогда алгоритм коррекции имел бы следующий вид:

$$Z_{j,k}^{n*} = Z_{j,k}^n + \kappa(\delta Z_{j+1/2,k}^n - \delta Z_{j-1/2,k}^n),$$

где $Z_{j,k}^{n*}$ — скорректированная функция. Данный алгоритм выполняется в случае, когда $(\delta Z_{j-1/2,k}^n \delta Z_{j+1/2,k}^n) < 0$ или $(\delta Z_{j+1/2,k}^n \delta Z_{j+3/2,k}^n) < 0$. Здесь используются обозначения

$\delta Z_{j-1/2,k}^n = Z_j^n - Z_{j-1,k}^n$, $\delta Z_{j+1/2,k}^n = Z_{j+1,k}^n - Z_{j,k}^n$, $\delta Z_{j+3/2,k}^n = Z_{j+2,k}^n - Z_{j+1,k}^n$, где κ — коэффициент коррекции. Величина шага по времени при реализации численного алгоритма выбирается исходя из условия Куранта—Фридрихса—Леви [2].

2. Компьютерная реализация

Программный комплекс, с помощью которого проводились вычислительные эксперименты в данной работе, реализует математическую модель, составленную из уравнений (1)–(4), (7)–(9), (12), описывающую динамику газозвеси с вязкой, сжимаемой, теплопроводной несущей средой. Изменения в структуре численно интегрируемых уравнений позволяет проводить расчеты как для математической модели динамики газозвеси с невязкой теплопроводной несущей средой, описанной в монографии [10], так и для математической модели, в которой отсутствует вязкость и теплопроводность несущей среды.

В вычислительной гидродинамике компьютерная реализация конечно-разностной модели течения жидкости или газа состоит из следующих частей: определение геометрических параметров физической области течения, формирование конечно-разностного разбиения области моделирования, задание граничных условий и непосредственно самого процесса численного интегрирования системы аэро-гидродинамических уравнений. В данной работе компьютерная программа написана на языке программирования Fortran. Программный код, составляющий компьютерную модель, представляет собой набор последовательно реализуемых компонент. Алгоритм программной реализации численной модели динамики газозвеси имеет следующую последовательность:

- 1) задаются физические параметры газа и твердых частиц;
- 2) из файлов считываются начальные значения функций, геометрия области и характеристики ее сеточного разбиения;
- 3) строится сеточное разбиение области течения смеси;
- 4) определяется значение величин межфазного обмена импульсом и межфазного теплообмена;
- 5) реализуется конечно-разностное решение уравнений динамики смеси;
- 6) проводится нелинейная коррекция сеточных функций.
- 7) значения искомым функций в узлах сетки на каждом временном слое выводятся в файл.

Вычисление значений параметров неоднородной среды на каждом последующем временном слое осуществляется последовательным применением шагов 4)–6). Программный комплекс состоит из нескольких компонент: подпрограмма задания граничных условий, подпрограмма формирования конечно-разностного разбиения физической области, подпрограмма расчета взаимодействия компонент смеси, основная численного решения уравнений динамики газозвеси.

На рис. 1 изображена структура программы моделирования динамики аэрозолей. Расчеты течения газозвеси формируются программой численного решения уравнений динамики неоднородной среды, для функционирования основной программы необходимы подпрограммы: подпрограмма формирования сеточного разбиения физической области, подпрограмма задания граничных условий системы уравнений математической модели, подпрограмма межкомпонентного взаимодействия, описывающая обмен импульсом и теплообмен компонент смеси. Для работы объектного модуля необходима информация о физических параметрах моделируемой смеси и геометрических параметрах физической области и количестве узлов конечно-разностного разбиения области. Начальные параметры содержат-

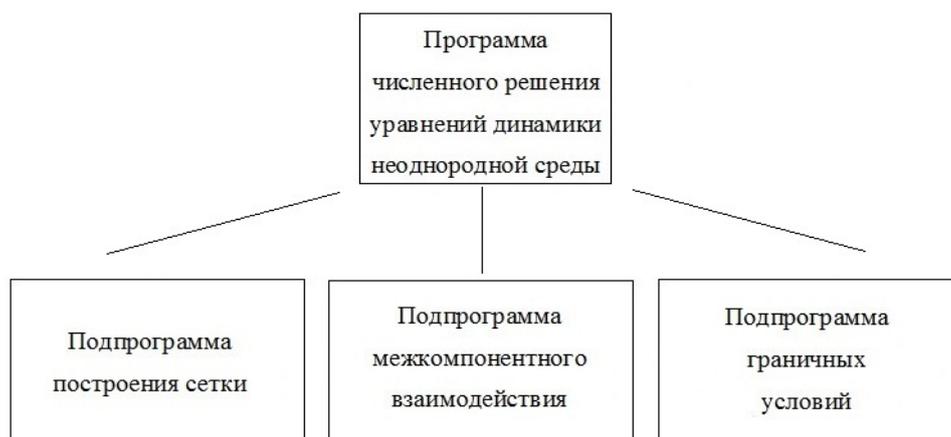


Рис. 1. Структура программного комплекса моделирования динамики двухфазной смеси

ся в двух файлах: файл с данными о физических свойствах движущихся сред и файл с данными области течения и параметрами ее конечно-разностного разбиения. Вызов подпрограммы построения сетки осуществляется перед циклом численного решения системы уравнений в основной программе, построения конечно-разностного решения явного метода Мак–Кормака. Вызов подпрограммы граничных условий осуществляется на каждом временном слое в основной программе. В основной программе реализуются метод конечно-разностного решения и схема нелинейной коррекции сеточных функций, необходимая для преодоления численных осцилляций и применяемая после получения численных решений на каждом временном слое. После вычисления функций динамики компонент смеси рассчитываются величины межкомпонентного взаимодействия. Вычисленные на предыдущем временном слое значения межкомпонентного обмена импульсом и теплообмена применяются при определении значений искомых функций на следующем временном слое. Функции динамики компонент смеси в программе задаются двумерными динамическими массивами двойной точности (`double precision`). Файл с начальными значениями параметров неоднородной среды считывается в основной программе. При написании алгоритма численного решения для математических операций применялись встроенные функции языка Fortran. При помощи оператора `COMMON` осуществляется связь переменных и массивов, которые используются одновременно и в основной программе расчета динамики газозвеси, а также во вспомогательных подпрограммах. В основной программе на каждом временном слое с помощью оператора `CALL` производится вызов вспомогательных подпрограмм. Таким образом, структура кода программы, численного решения уравнений континуальной математической модели динамики неоднородной среды, отличается от кода программы моделирования динамики однородной среды наличием дополнительной подпрограммы расчета взаимодействия компонент смеси.

Программный комплекс, примененный в данной работе, разработан на основе континуального подхода [9] методики моделирования динамики дисперсных сред в сжимаемой газовой среде [10] в процессе работы над диссертацией [24]. Программный комплекс моделирования динамики газозвеси с учетом взаимодействия компонент смеси был развитием уже существовавшего программного комплекса численного моделирования динамики одиночной частицы в сжимаемом газе [4]. Развитие программного комплекса заключалось

в добавлении расчета полной гидродинамической системы уравнений движения для дисперсной компоненты и в учете взаимобратного (воздействующего на каждую компоненту смеси) межкомпонентного взаимодействия. В работе [25] проводится сопоставление физического эксперимента по ударно-волновому течению газозвеси с численными расчетами, полученными вышеописанным программным комплексом.

3. Вычислительные эксперименты

В работе исследовалось распространение прямого скачка давления из однородного газа в газозвесь, моделировалось течение происходящее в ударной трубе [1, 10]. С учетом наличия поверхности раздела сред «неоднородная среда — однородная среда», наиболее адекватно такой процесс может быть описан только в рамках континуального подхода динамики неоднородных сред [10, 11]. Ударная труба представляет собой канал, разделенный мембраной, часть канала заполнена газом с меньшим давлением — камера низкого давления, часть канала заполнена газом имеющим большее давление — камера высокого давления. В отличие от классических работ по ударным трубам предполагалось, что в камере низкого давления расположена газозвесь — взвесь твердых частиц. Начальный разрыв давления задавался через температуру газа $T = T_{20} = 2 \cdot T_{10}, x \leq L/2$, таким образом давление в камере высокого давления ударной трубы вдвое превосходит давление газа в камере низкого давления $p_{20} = 2 \cdot p_{10} = 196$ кПа. Длина канала $L=2$ м, ширина канала $h=0.1$ м. Несущая среда описывалась как воздух. Физическая плотность материала дисперсной компоненты и теплоемкость материала дисперсной компоненты составляла $\rho_{10}=2700$ кг/м³, $p_1=903$ Дж/кг·К, дисперсность частиц — $d=2$ мкм.

Рассмотрим результаты применения конечно-разностного метода (15) при интегрировании системы уравнений (1)–(13) программным комплексом, описанным в разделе 2.

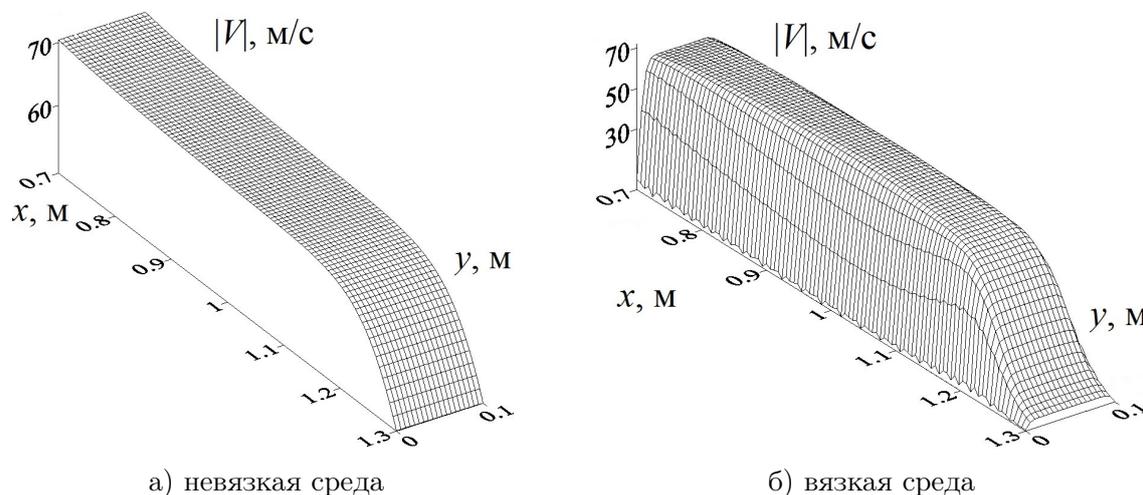


Рис. 2. Двухмерное распределение модуля скорости газа, при распространении ударной волны

На рис. 2 изображено распределение модуля скорости газа $V = \sqrt{u^2 + v^2}$ при моделировании движения ударной волны в канале с однородными граничными условиями Неймана для невязкой среды (рис. 2а) и с однородными граничными условиями Дирихле (рис. 2б) для вязкой среды. Можно наблюдать равномерное в y -направлении распределение скорости для невязкой среды, в случае движение ударной волны в канале в вязкой среде, можно

наблюдать «параболический» [1, 2] профиль скорости несущей среды. При моделировании течений сплошных сред в узких каналах более предпочтительным, чем модель невязкой среды, является описание течения с учетом пристеночной вязкости в канале [1, 2].

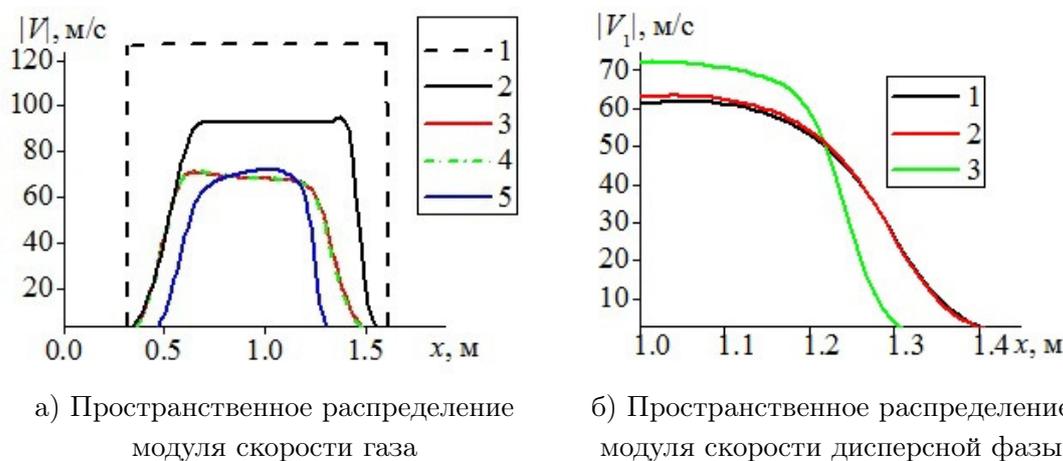


Рис. 3. Сопоставление расчетов модуля скорости спутного потока газа и модуля скорости дисперсной фазы для различных математических моделей

На рис. 3а представлены сопоставления скорости газа как при распространении ударной волны из газа в газозвесь, так и в однородной среде, на оси симметрии канала, где достигаются наибольшие значения скоростей. Кривые 1 и 2 — соответственно аналитическое решение скорости спутного потока, полученное для идеального газа в работе [1] и численный расчет для распространения ударной волны в идеальном газе. Аналитически рассчитанное решение имеет большую интенсивности спутного потока газа. Кривые 3 и 4 — результаты расчетов динамики ударной волны из однородного газа в газозвесь, полученные по моделям идеальной несущей среды и теплопроводной несущей среды [10]. Кривая 5 — результаты расчетов распространения ударной волны из однородного газа в газозвесь с учетом вязкости несущей среды. Численные расчеты динамики несущей среды до взаимодействия ударной волны с газозвесью по математическим моделям с идеальной и невязкой теплопроводной несущей средой [10] совпадают с численными расчетами спутного потока в однородном идеальном газе. Наибольшее значение скорости дисперсной компоненты при движении ударной волны по газозвеси достигается в расчетах по математической модели с вязкой несущей средой (рис. 3, кривая 3). Скорость дисперсной компоненты при расчетах по математической модели с теплопроводной невязкой несущей средой [10] (кривая 2) немного больше, чем скорость дисперсной компоненты с идеальной несущей средой (кривая 1). Модуль скорости дисперсной компоненты при учете вязкости несущей среды имеет большее значение, при этом можно наблюдать, что непосредственно ударно-волновое возмущение по дисперсной фазе распространяется с меньшей скоростью относительно расчетов с невязкими несущими средами.

На рис. 4а представлено распределение модуля скорости газа в канале при различных сеточных разбиениях области в момент времени $t=1$ мс, для математической модели с несущей средой (идеальным газом). Для разбиений сетки $N_x=120$, $N_y=24$ ширина области затронутой спутным потоком газа за ударной волной в камере низкого давления и спутным потоком за волной разряжения, в камере высокого давления, составляет $L_w=1282$ мм, для разбиений расчетной области $N_x=140$, $N_y=28$, $N_x=160$, $N_y=32$, $N_x=180$, $N_y=36$, $N_x=200$,

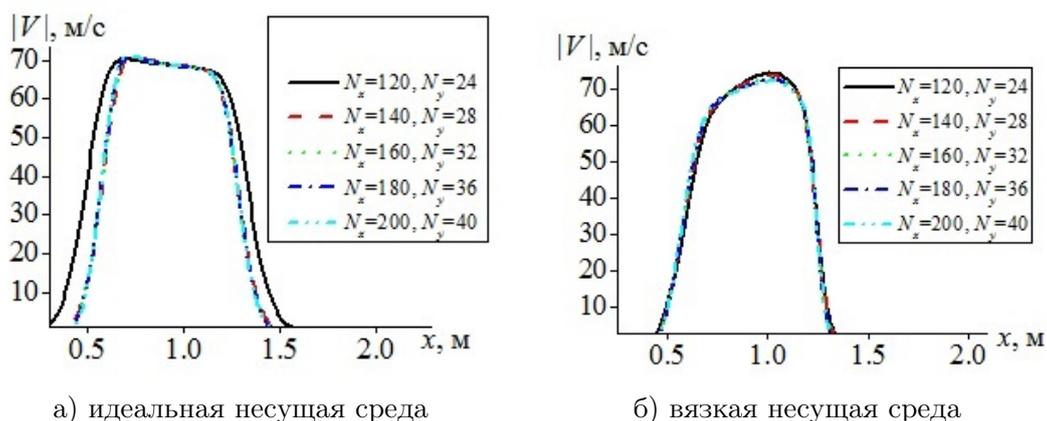


Рис. 4. Пространственное распределение модуля скорости газа, для различных сеточных разбиений

$N_y=40$ ширина зоны движения газа составляет соответственно $L_w=1083$ мм, $L_w=1053$ мм, $L_w=1031$ мм, $L_w=1026$ мм. Для данных сеточных разбиений скорости ударной волны составляют соответственно $\theta = 521$ м/с, $\theta = 445$ м/с, $\theta = 430$ м/с, $\theta = 418$ м/с, $\theta = 416$ м/с. Аналогичны результаты для математической модели с вязкой теплопроводной несущей средой в тот же момент времени изображены на рис. 4б Для разбиения расчетной области $N_x=120$, $N_x=24$ ширина области затронутой движением газа составляет $L_w=892$ мм для разбиений расчетной области $N_x=140$, $N_y=28$, $L_w=872$ мм, $N_x=160$, $N_y=32$, $L_w=858$ мм, $N_x=180$, $N_y=36$, $L_w=852$ мм, $N_x=200$, $N_y=40$, $L_w=848$ мм ширина зоны движения газа составляет соответственно $L_w=1083$ мм, $L_w=1053$ мм, $L_w=1031$ мм, $L_w=1026$ мм. Скорости движения ударных волн для указанных разбиений составляют $\theta = 314$ м/с, $\theta = 305$ м/с, $\theta = 298$ м/с, $\theta = 294$ м/с, $\theta = 292$ м/с. При измельчении сеточных разбиений как для невязкой, так и для вязкой несущих сред происходит равномерное уменьшение скорости ударно-волнового возмущения и области, затронутой движением газа — ударной волны в камере низкого давления и волны разряжения в камере высокого давления.

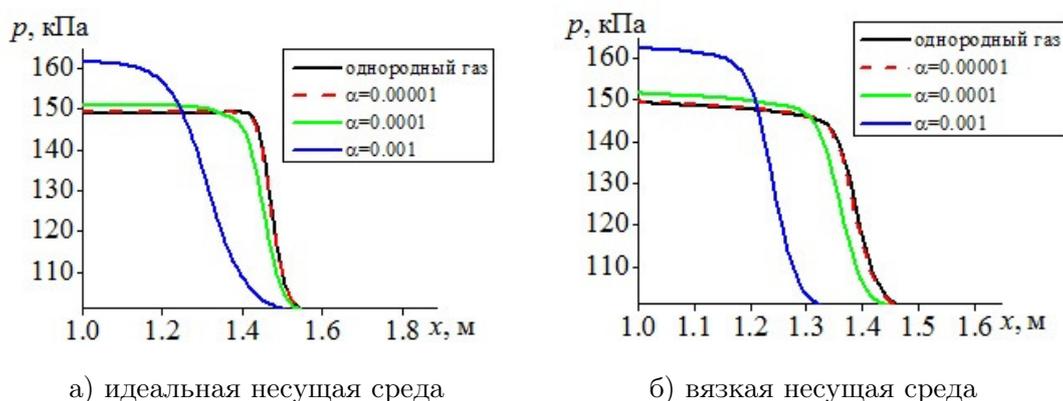


Рис. 5. Пространственное распределение давления газа для различных объемных содержаний дисперсной фазы и однородной среды

На рис. 5 представлены пространственные распределения давления в ударной волне, движущейся в однородном газе и газозвесьях с различными объемными содержаниями дисперсной фазы, для математических моделей несущей среды, описываемой как идеальный

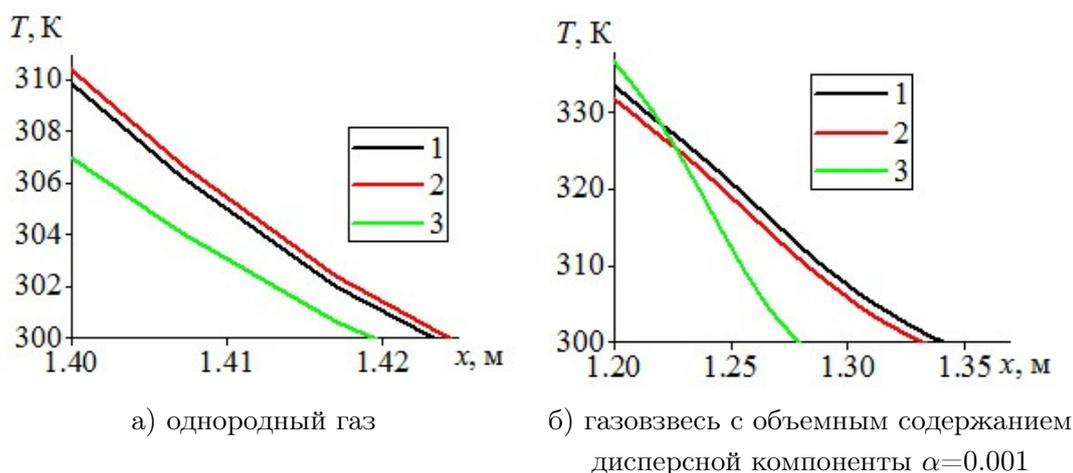


Рис. 6. Пространственное распределение температуры газа при моделировании однородной и неоднородной сред, кривые: 1 — идеальная несущая среда, 2 — невязкая теплопроводная несущая среда, 3 — вязкая несущая среда

газ (рис. 5а) и вязкий теплопроводный газ (рис. 5б). Для объемного содержания дисперсной фазы $\alpha=0.0001$ скорость ударной волны в расчетах по модели несущей среды (идеального газа) составляет 99.67% от скорости движения однородного газа, для модели динамики вязкого теплопроводного газа скорость ударной волны для того же объемного содержания дисперсной фазы составляет 94.36% от скорости движения ударной волны в однородном вязком газе. При объемном содержании дисперсной фазы $\alpha=0.001$ скорость ударной волны в расчетах, проведенных для несущей среды (идеального газа), составляет 86% от скорости движения однородного газа, для модели динамики вязкого теплопроводного газа скорость ударной волны составляет 69.9% от скорости движения ударной волны в однородном вязком газе.

На рис. 6 изображены распределения температуры газа вдоль координаты x вблизи переднего края ударной волны в однородном газе (рис. 6а) и в газовзвеси (рис. 6б), полученные для различных математических моделей динамики газа. При моделировании распространения возмущения поля температуры в однородном газе скорость распространения возмущения в невязком теплопроводном и вязком теплопроводном газе составляют 99.71% и 97.62% от скорости распространения возмущения в идеальном газе. В газовзвеси с объемным содержанием дисперсной фазы $\alpha=0.001$ скорость движения возмущения поля температуры газовой компоненты газовзвеси в невязкой теплопроводной среде, которая рассматривается в качестве газовой фазы при составлении математических моделей в монографии [10] и в вязком теплопроводном газе составляют соответственно 97.26% и 81.33% от скорости движения возмущения температуры несущей среды рассчитанной по модели динамики идеального газа. Таким образом выявлено, что для континуального подхода моделирования, учитывающего температурную неравновесность несущей среды и дисперсной фазы, влияние, которое оказывает дисперсная компонента на распространение ударно-волнового возмущения полей давления и температуры несущей среды имеет существенные отличия при расчетах с газовой компонентой — вязкой теплопроводной средой, невязкой теплопроводной и идеальной средой.

На рис. 7 представлены распределения величин модуля скоростного скольжения $|\mathbf{V} - \mathbf{V}_1| = \sqrt{(u - u_1)^2 + (v - v_1)^2}$ для газовзвесей с различными объемными содержаниями дис-

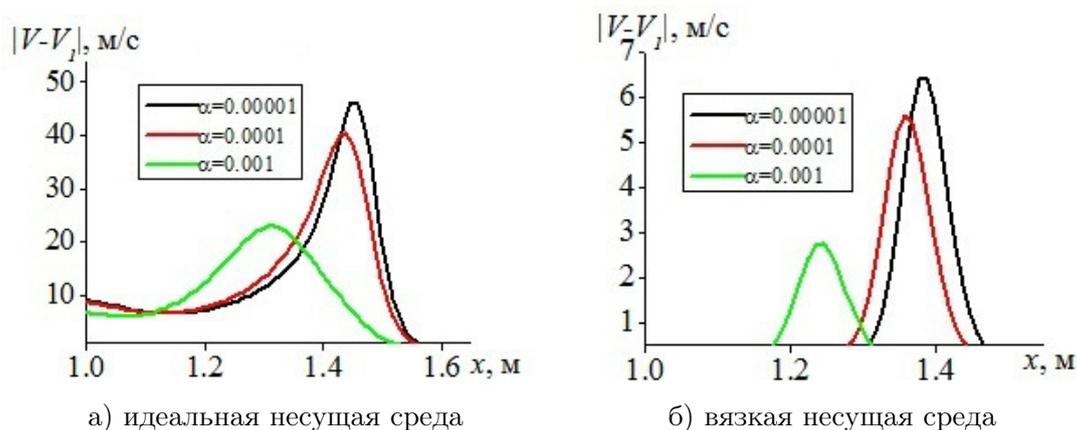


Рис. 7. Пространственное распределение модуля межфазного скоростного скольжения в газозвесах с различным объемным содержанием дисперсной компоненты

персной фазы. Величина скоростного скольжения существенно выше в модели идеального газа (рис. 7а). Меньшая интенсивность скоростного скольжения в вязкой среде (рис. 7б) может объясняться большим межфазным взаимодействием, в связи с чем менее существенны различия в скоростях компонент двухфазной смеси.

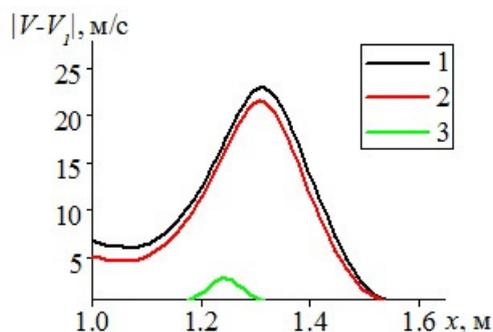


Рис. 8. Пространственное распределение модуля скоростного скольжения, кривые: 1 — идеальная несущая среда, 2 — невязкая теплопроводная несущая среда, 3 — вязкая несущая среда

Интенсивность скоростного скольжения рис. 8 при моделировании динамики несущей среды моделями идеального газа и невязкого теплопроводного газа имеет близкое значение, существенно большее, чем в вязкой среде. Данная закономерность демонстрирует, то, что при моделировании движения ударной волны по газозвеси в канале определяющим фактором является вязкость несущей среды, а такое свойство несущей среды как теплопроводность имеет существенно меньшее значение.

На рис. 9 представлено пространственное распределение величины кинетической энергии несущей среды газозвеси ρV^2 (рис. 9а) и дисперсной компоненты $\rho_1 V_1^2$ (рис. 9б) при распространении ударной волны из однородного газа в газозвесь с объемным содержанием дисперсной компоненты $\alpha=0.001$, для различных моделей динамики несущей среды: кривая 1 — идеальный газ, кривая 2 — невязкий теплопроводный газ, кривая 3 — вязкий теплопроводный газ. При моделировании несущей среды как невязкой теплопроводной и при моделировании несущей среды как идеальной кинетическая энергия несущей среды достигает больших максимальных значений, чем в случае учета вязкости газовой компо-

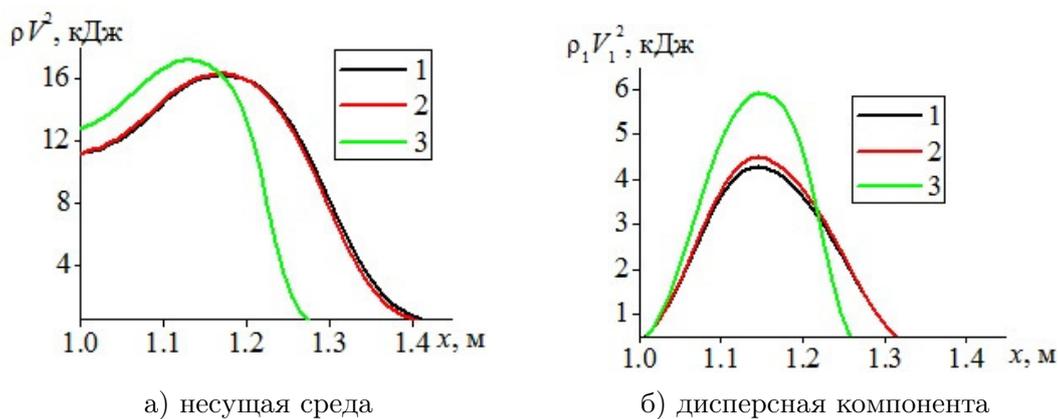


Рис. 9. Пространственное распределение кинетической энергии компонент газозвеси

ненты. При этом максимальное значение кинетической энергии дисперсной фазы в ударной волне от соответствующей величины для модели несущей среды (идеального газа) для модели вязкого газа составляет 138.76%, а для модели невязкого теплопроводного газа — 105.3 % соответственно. Столь существенное отличие в кинетической энергии дисперсной компоненты может иметь критическое значение при моделировании процессов отражения промышленных взрывов применяемых в геотехнологиях [10]. Сопоставление численных расчетов кинетической энергии дисперсной компоненты и скоростного скольжения газовой и дисперсной фаз смеси в ударной волне демонстрирует, что в вязкой среде межфазное взаимодействие, которое является определяющим при моделировании смесей с равными массовыми долями компонент, имеет большую интенсивность, чем в невязких средах. Что является более правильным с точки зрения физики таких процессов, так как существующие в природе газы и жидкости являются вязкими, в то время как отсутствие вязкости или теплопроводности является допущением, применяемым при разработке математических моделей динамики сплошных сред.

Заключение

В работе проведено сопоставление численных расчетов распространения ударной волны из однородного газа в газозвесь, полученных для различных математических моделей динамики несущей среды. В работе выявлено, что при моделировании динамики вязкой теплопроводной среды величины скоростного скольжения фаз смеси существенно меньше, чем аналогичные величины при описании несущей среды как идеальной. Определено, что при моделировании ударно-волновой динамики газозвесей в каналах, влияние вязкости несущей среды наиболее существенный фактор взаимодействия газовой и дисперсной компонент смеси. При описании газовой компоненты газозвеси как вязкой среды межфазное скоростное скольжение достигает меньших величин, чем в случае невязкой несущей среды. Также при учете вязкости несущей среды кинетическая энергия дисперсной компоненты имеет большую величину. Учет теплопроводности невязкой несущей среды также приводит к результатам расчетов с несколько меньшим скоростным скольжением фаз и большей кинетической энергией дисперсной компоненты в сравнении с результатами, полученными для несущей среды — идеального газа. Данные эффекты можно объяснить большей интенсивностью взаимодействия между компонентами смеси при учете вязких напряжений газа в ударно-волновом течении. Представленные сопоставления моделей показали, что в

зависимости от выбора математической модели описания несущей среды могут наблюдаться важные (при расчете технологических процессов и агрегатов) отличия в интенсивности межкомпонентного взаимодействия и кинетической энергии дисперсной компоненты в ударно-волновом течении. Таким образом данное исследование выявило, что в континуальном подходе динамики неоднородных сред при моделировании динамики несущей среды системами уравнений Навье—Стокса и Эйлера результаты расчетов, кроме отличий в полях скоростей несущей среды, отличаются также интенсивностью взаимодействия компонент в моделируемых течениях. Выявленные закономерности, возможно использовать при разработке вычислительных моделей скоростных потоков в газозвесах с большим объемным содержанием дисперсной фазы. Дальнейшим развитием представленной математической модели динамики газозвесей можно предположить увеличение геометрии с плоской до трехмерной, а также учет взаимодействия между частицами дисперсной компоненты смеси.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН по теме «Развитие динамики многофазных сред, аэрогидроупругих систем и механики оболочек с приложениями в машиностроении и нефтедобыче» № 121021800126-4.

Литература

1. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. Москва: Изд-во «Дрофа», 2003. 784 с.
2. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей: В 2-х т.: Т. 2. Пер. с англ. Москва: Изд-во «Мир», 1991. 552 с.
3. Музафаров И.Ф., Утюжников С.В. Применение компактных разностных схем к исследованию нестационарных течений сжимаемого газа // Математическое моделирование. 1993. Т. 2, № 3. С. 74–83.
4. Тукмаков А.Л. Зависимость механизма дрейфа твердой частицы в нелинейном волновом поле от ее постоянной времени и длительности прохождения волновых фронтов // Прикладная механика и техническая физика. 2011. Т. 52, № 4. С. 106–115.
5. Ленская О.Ю., Абдуллаев С.М., Приказчиков А.И., Соболев Д.Н. Численное моделирование характеристик пограничного слоя атмосферы крупного промышленного города (на примере г. Челябинска) // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2013. Т. 2, № 2. С. 65–82. DOI: 10.14529/cmse130206.
6. Волков В.Ю., Голибродо Л.А., Крутиков А.А. и др. Разномасштабные задачи теплообмена в атомной энергетике // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2017. Т. 6, № 4. С. 60–73. DOI: 10.14529/cmse170405.
7. Проценко С.В., Атаян А.М., Чистяков А.Е. и др. Экспериментальное исследование силовых нагрузок на опоры надводной конструкции на основе математической модели волновых процессов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2019. Т. 8, № 3. С. 27–42. DOI: 10.14529/cmse190302.
8. Мадалиев М.Э. Численное исследование осесимметричных струйных течений на основе турбулентной модели ν_t -92 // Вестник Южно-Уральского государственного университета.

- тата. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2020. Т. 9, № 4. С. 67–78. DOI: 10.14529/cmse200405.
9. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. Москва: Изд-во «Наука», 1987. 464 с.
10. Кутушев А.Г. Математическое моделирование волновых процессов в аэродисперсных и порошкообразных средах. Санкт-Петербург: Изд-во «Недра», 2003. 284 с.
11. Федоров А.В., Фомин В.М., Хмель Т.А. Волновые процессы в газозвесах частиц металлов. Новосибирск: Изд-во «Параллель», 2015. 301 с.
12. Fedorov Y.V., Panin K.A. Heat and mass transfer in the acoustics of liquid with encapsulated droplets // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2022. Vol. 43, no. 2. P. 376–380. DOI: 10.1134/S1995080222050122.
13. Хачай О.А., Хачай А.Ю. Моделирование сейсмического поля в акустическом приближении двухфазных, иерархически неоднородных сред // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2014. Т. 3, № 1. С. 33–43. DOI: 10.14529/cmse140103.
14. Черкесов Л.В., Шульга Т.Я. Исследование влияния стационарных течений на динамические процессы и эволюцию загрязнений в азовском море // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2017. Т. 6, № 1. С. 56–72. DOI: 10.14529/cmse170104.
15. Равшанов Н., Курбонов Н.М. Компьютерное моделирование процесса фильтрации флюидов в пористых средах // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2015. Т. 4, № 2. С. 89–106. DOI: 10.14529/cmse150207.
16. Суров В.С. Гиперболическая модель односкоростной теплопроводной смеси с учетом межфракционного теплообмена // *Теплофизика высоких температур*. 2018. Т. 56, № 6. С. 914–923. DOI: 10.31857/S004036440003570-1.
17. Садин Д.В., Голиков И.О., Давидчук В.А. Моделирование взаимодействия ударной волны с ограниченным неоднородным слоем газозвеси гибридным методом крупных частиц // *Вычислительные методы и программирование*. 2021. Т. 22, № 1. С. 1–13. DOI: 10.26089/NumMet.v22r101.
18. Liu C., Zhao Y., Tian Z., Zhou H. Numerical Simulation of Condensation of Natural Fog Aerosol under Acoustic Wave Action // *Aerosol Air and Quality Reserch*. 2021. Vol. 21, no. 4. P. 1–21. DOI: 10.4209/aaqr.2020.06.0361.
19. Веревкин А.А., Циркунов Ю.М. Течение дисперсной примеси в сопле Лаваля и рабочей секции двухфазной гиперзвуковой ударной трубы // *Прикладная механика и техническая физика*. 2008. Т. 49, № 5. С. 102–113.
20. Yeom G.S., Chang K.S. Shock wave diffraction about a wedge in a gas-microdroplet mixture // *International journal of heat and mass transfer*. 2010. Vol. 53. P. 5073–5088. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.07.056.
21. Saurel R., Boivin P., Le Metayer O. A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flows // *Computers and Fluids*. 2016. Vol. 128. P. 53–64. DOI: 10.1016/j.compfluid.2016.01.004.

22. Kapila A.K., Schwendeman D.W., Gambino J.R., Henshaw W.D. A numerical study of the dynamics of detonation initiated by cavity collapse // *Shock Waves*. 2015. Vol. 25. P. 545–572. DOI: 10.1007/s00193-015-0597-9.
23. Watanabe H., Matsuo A., Chinnayya A., *et al.* Numerical analysis of the mean structure of gaseous detonation with dilute water spray // *Journal of Fluid Mechanics*. 2020. Vol. 887. DOI: 10.1017/jfm.2019.1018.
24. Тукмаков Д.А. Численное исследование динамики газозвесей в нелинейных волновых полях: дис. канд. физ-мат. наук: 01.02.05. Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, 2015. 135 с. URL: https://kpfu.ru/dis_card?p_id=1958 (дата обращения: 08.09.2022).
25. Нигматулин Р.И., Губайдуллин Д.А., Тукмаков Д.А. Ударно-волновой разлет газозвесей // *Доклады академии наук*. 2016. Т. 466, № 4. С. 418–421. DOI: 10.7868/S0869565216040101.
26. Тукмаков Д.А. Численное исследование влияния плотности материала дисперсной компоненты на интенсивность генерации акустического импульса в электрически заряженной газозвеси // *Математические заметки СВФУ*. 2020. Т. 27, № 4. С. 99–109. DOI: 10.25587/SVFU.2020.77.39.008.
27. Тукмаков Д.А. Сопоставление математических моделей динамики электрически заряженных газозвесей для различных концентраций дисперсной компоненты // *Прикладная информатика*. 2022. Т. 17, № 1. С. 39–54. DOI: 10.37791/2687-0649-2022-17-1-39-54.
28. Тукмаков А.Л., Тукмаков Д.А. Численное исследование влияния параметров дисперсных частиц на осаждение твердой фазы электрически заряженной полидисперсной газозвеси // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика*. 2022. Т. 12, № 1. С. 90–102. DOI: 10.18500/1816-9791-2022-22-1-90-102.

Тукмаков Дмитрий Алексеевич, к.ф.-м.н., н.с., Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (Казань, Российская Федерация)

NUMERICAL SIMULATION OF THE INTERACTION OF A GAS SUSPENSION WITH A SHOCK WAVE BY CONTINUAL MATHEMATICAL MODELS WITH IDEAL AND DISSIPATIVE CARRIER MEDIA

© 2022 D.A. Tukmakov

Federal Research Center “Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences”

(Lobachevsky 2/31, Kazan, 420100 Russia)

E-mail: tukmakovda@imm.knc.ru

Received: 18.06.2022

This paper compares computer implementations of numerical algorithms for solving the equations of mathematical models of the dynamics of gas suspensions with viscous heat-conducting, inviscid heat-conducting and ideal carrier media. Mathematical models are developed within the framework of the continuum technique for modeling the dynamics of multiphase media. In the study, the process of interaction of a shock wave moving from a homogeneous gas into a gas suspension, which is often encountered in the mining industry, was modeled. The relevance of the study of this flow of inhomogeneous media is associated with the shielding of industrial explosions by aerosol curtains. When modeling for a viscous medium, homogeneous Dirichlet boundary conditions were set, for an inviscid medium, homogeneous Neumann boundary conditions. The equations of the mathematical model were integrated by the McCormack finite difference method. To overcome numerical oscillations, a nonlinear scheme for correcting grid functions was used. The program that implements the continuum method for the dynamics of multiphase media consisted of a block for specifying boundary conditions, a block that implements a numerical solution, and a block for accounting for interfacial interaction. As a result of comparing numerical calculations of mathematical models of the dynamics of a gas suspension with an ideal, inviscid heat-conducting and viscous heat-conducting carrier media, it was found that during the movement of a gas suspension, the viscosity of the carrier medium of the gas suspension has the greatest influence on the intensity of interfacial momentum exchange.

Keywords: numerical simulation, finite difference scheme, multiphase media, continuum model, interfacial interaction, Euler equation, Navier–Stokes equation.

FOR CITATION

Tukmakov D.A. Numerical Simulation of the Interaction of a Gas Suspension with a Shock Wave by Continual Mathematical Models with Ideal and Dissipative Carrier Media. Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering. 2022. Vol. 11, no. 4. P. 67–87. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse220405.

This paper is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution-Non Commercial 4.0 License which permits non-commercial use, reproduction and distribution of the work without further permission provided the original work is properly cited.

References

1. Loitsyansky L.G. Fluid and Gas Mechanics. Moscow: Publishing “Drofa”, 2003. 784 p. (in Russian)
2. Fletcher C.A. Computation Techniques for Fluid Dynamics. Berlin: Publishing Springer-Verlang, 1988. 409 p. DOI: 10.1007/978-3-642-97071-9.

3. Muzafarov I.F., Utyuzhnikov S.V. Application of compact difference schemes to the study of unsteady compressible gas flows. *Mathematical Modeling*. 1993. Vol. 5, no. 3. P. 74–83. (in Russian)
4. Tukmakov A.L. Dependence of the mechanism of solid particle drift in a nonlinear wave field on the time constant and wave front passage time. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 2011. Vol. 52, no. 4. P. 590–598. DOI: 10.1134/S0021894411040122.
5. Lenskaya O.Yu., Abdullaev S.M., Prikazchikov A.I., Sobolev D.N. Numerical modeling of the characteristics of the boundary layer of the atmosphere of a large industrial city (on the example of Chelyabinsk). *Bulletin of the South Ural State University. Computational Mathematics and Software Engineering*. 2013. Vol. 2, no. 2. P. 65–82. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse130206.
6. Volkov V.Y., Golibrodo L.A., Krutikov A.A., *et al.* Multiscale problems of heat and mass transfer in nuclear energy. *Bulletin of the South Ural State University. Computational Mathematics and Software Engineering*. 2017. Vol. 6, no. 4. P. 600073. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse170405.
7. Protsenko S.V., Atayan A.M., Chistyakov A.E., *et al.* Experimental study of power loads on the supports of a surface structure based on a mathematical model of wave processes. *Bulletin of the South Ural State University. Computational Mathematics and Software Engineering*. 2019. Vol. 8, no. 3. P. 27–42. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse190302.
8. Madaliev M.E. Numerical study of axisymmetric jet flows based on the turbulent model ν_t -92. *Bulletin of the South Ural State University. Computational Mathematics and Software Engineering*. 2020. Vol. 9, no. 4. P. 670078. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse170405.
9. Nigmatulin R.I. *Dinamika mnogofaznyh sred.* Dynamics of multiphase media. Part 1. Moscow: Publishing “Nauka”, 1987. 464 p. (in Russian)
10. Kutushev A.G. *Mathematical modeling of wave processes in aerodisperse and powder media.* St. Petersburg: Publishing “Nedra”, 2003. 284 p. (in Russian)
11. Fedorov A.V., Fomin V.M., Khmel T.A. *Wave processes in gas suspensions of metal particles.* Novosibirsk: Publishing “Parallel”, 2015. 301 p. (in Russian)
12. Fedorov Y.V., Panin K.A. Heat and mass transfer in the acoustics of liquid with encapsulated droplets. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2022. Vol. 43, no. 2. P. 376–380. DOI: 10.1134/S1995080222050122.
13. Khachai O.A., Khachai A.Y. Modeling of a seismic field in the acoustic approximation of two-phase, hierarchically inhomogeneous media. *Bulletin of the South Ural State University. Computational Mathematics and Software Engineering*. 2014. Vol. 3, no. 1. P. 33–43. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse140103.
14. Cherkesov L.V., Shulga T.Y. Study of the influence of stationary currents on dynamic processes and the evolution of pollution in the Sea of Azov. *Bulletin of the South Ural State University. Computational Mathematics and Software Engineering*. 2017. Vol. 6, no. 1. P. 56–72. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse170104.
15. Ravshanov N., Kurbonov N.M. Computer modeling of the process of fluid filtration in porous media. *Computational Mathematics and Software Engineering*. 2015. Vol. 4, no. 2. P. 89–106. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse150207.

16. Surov V.S. Hyperbolic model of a single speed, heat conductive mixture with interfractional heat transfer. *High Temperature*. 2018. Vol. 56, no. 6. P. 890–899. DOI: 10.1134/S0018151X1806024X.
17. Sadin D.V., Golikov I.O., Davidchuk V.A. Modeling the interaction of a shock wave with a limited inhomogeneous layer of a gas suspension by a hybrid method of large particles. *Computational methods and programming*. 2021. Vol. 22, no. 1. P. 1–13. (in Russian) DOI: 10.26089/NumMet.v22r101.
18. Liu C., Zhao Y., Tian Z., Zhou H. Numerical Simulation of Condensation of Natural Fog Aerosol under Acoustic Wave Action. *Aerosol air and quality reserch*. 2021. Vol. 21, no. 4. P. 1–21. DOI: 10.4209/aaqr.2020.06.0361.
19. Verevkin A.A., Tsirkunov Y.M. Flow of a dispersed phase in the laval nozzle and in the test section of a two-phase hypersonic shock tunnel. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 2008. Vol. 49, no. 5. P. 789–798. DOI: 10.1007/s10808-008-0099-y.
20. Yeom G.S., Chang K.S. Shock wave diffraction about a wedge in a gas-microdroplet mixture. *International journal of heat and mass transfer*. 2010. Vol. 53. P. 5073–5088. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.07.056.
21. Saurel R., Boivin P., Le Metayer O. A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flows. *Computers and Fluids*. 2016. Vol. 128. P. 53–64. DOI: 10.1016/j.compfluid.2016.01.004.
22. Kapila A.K., Schwendeman D.W., Gambino J.R., Henshaw W.D. A numerical study of the dynamics of detonation initiated by cavity collapse. *Shock Waves*. 2015. Vol. 25. P. 545–572. DOI: 10.1007/s00193-015-0597-9.
23. Watanabe H., Matsuo A., Chinnayya A., *et al.* Numerical analysis of the mean structure of gaseous detonation with dilute water spray. *Journal of Fluid Mechanics*. 2020. Vol. 887. DOI: 10.1017/jfm.2019.1018.
24. Tukmakov D.A. Numerical study of the dynamics of gas suspensions in nonlinear wave fields: dis. cand. physics and mathematics sciences: 01.02.05 Kazan (Volga Region) Federal University, Kazan, 2015. 135 p. URL: https://kpfu.ru/dis_card?p_id=1958 (accessed: 08.09.2022). (in Russian)
25. Nigmatulin R.I., Gubaidullin D.A., Tukmakov D.A. Shock Wave Dispersion of Gas-Particle Mixtures. *Doklady Physics*. 2016. Vol. 61, no. 2. P. 70–73. DOI: 10.1134/S1028335816020038.
26. Tukmakov D.A. Numerical study of the influence of the density of the material of the dispersed component on the intensity of the generation of an acoustic pulse in an electrically charged gas suspension. *Mathematical notes of NEFU*. 2020. Vol. 27, no. 4. P. 99–109. (in Russian) DOI: 10.25587/SVFU.2020.77.39.008.
27. Tukmakov D.A. Comparison of mathematical models of the dynamics of electrically charged gas suspensions for various concentrations of the dispersed component. *Applied Informatics*. 2022. Vol. 17, no. 1. P. 39–54. (in Russian) DOI: 10.37791/2687-0649-2022-17-1-39-54.
28. Tukmakov A.L., Tukmakov D.A. Numerical study of the influence of the parameters of dispersed particles on the deposition of the solid phase of an electrically charged polydisperse gas suspension. *Bulletin of the Saratov University. New series. Series: Mathematics. Mechanics. Informatics*. 2022. Vol. 22, no. 1. P. 90–102. (in Russian) DOI: 10.18500/1816-9791-2022-22-1-90-102.

СВЕДЕНИЯ ОБ ИЗДАНИИ

Научный журнал «Вестник ЮУрГУ. Серия «Вычислительная математика и информатика» основан в 2012 году.

Учредитель — Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет).

Главный редактор — Л.Б. Соколинский.

Свидетельство о регистрации ПИ ФС77-57377 выдано 24 марта 2014 г. Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНИТИ; индексируется в библиографической базе данных РИНЦ. Журнал размещен в открытом доступе на Всероссийском математическом портале MathNet. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory».

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук» по научным специальностям и соответствующим им отраслям науки: 2.3.5 – Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей (физико-математические науки), 05.13.17 – Теоретические основы информатики (физико-математические науки).

Подписной индекс научного журнала «Вестник ЮУрГУ», серия «Вычислительная математика и информатика»: 10244, каталог «Пресса России». Периодичность выхода — 4 выпуска в год.

Адрес редакции, издателя: 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76, Издательский центр ЮУрГУ, каб. 32.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

1. Правила подготовки рукописей и пример оформления статей можно загрузить с сайта серии <http://vestnikvmi.susu.ru>. Статьи, оформленные без соблюдения правил, к рассмотрению не принимаются.
2. Адрес редакционной коллегии научного журнала «Вестник ЮУрГУ», серия «Вычислительная математика и информатика»:
Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, ЮУрГУ, кафедра СП,
ответственному секретарю Цымблеру М.Л.
3. Адрес электронной почты редакции: vestnikvmi@susu.ru
4. Плата с авторов за публикацию рукописей не взимается, и гонорары авторам не выплачиваются.

ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия
«ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА»
Том 11, № 4
2022

16+

Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 30.11.2022. Дата выхода в свет 23.12.2022. Формат 60×84 1/8. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 10,69. Тираж 500 экз. Заказ 388/349. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ.
454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76.