

начальных точек, как правило, используются различные “жадные” алгоритмы. Однако эти алгоритмы не гарантируют получение любых начальных точек. Кроме того, вычислительные затраты для построения начальных точек значительно возрастают в трехмерном случае. В связи с этим в работе предлагается подход, который позволяет расширить размерность задачи за счет введения переменных метрических характеристик размещаемых объектов и решения последовательности вспомогательных задач нелинейного программирования.

Для поиска локальных экстремумов используется метод последовательного улучшения значений функции цели на последовательности подобластей. При этом поиск локального экстремума на каждой подобласти осуществляется с использованием библиотеки IPOPT. В данной библиотеке реализованы алгоритмы внутренней точки, которые для поиска вектора движения используют матрицу Гессе левой части системы ограничений, описывающей область допустимых решений. Кроме того, данная библиотека демонстрирует эффективность на задачах с матрицами, которые имеют блочную структуру и высокую степень разреженности, а также на плохо обусловленных задачах.

Эффективность предложенного метода решения задачи заключается в реализации последовательных изменений размерности пространства решений при осуществлении непрерывных переходов между вспомогательными задачами.

ОБРАБОТКА ИЗОБРАЖЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ НА АТОМНО-СИЛОВОМ МИКРОСКОПЕ

Стародубцев И. Е.

ГГУ им. Ф.Скорины, Гомель, Республика Беларусь

Введение. Для изучения структуры поверхности объектов с высоким (нанометровым) разрешением в материаловедении, биологии и медицине применяется атомно-силовой микроскоп (АСМ). В отличие от других типов микроскопов АСМ обладает целым рядом преимуществ: он позволяет получить трехмерный рельеф поверхности, пространственное распределение микро- и наномеханических свойств и некоторые локальные механические характеристики (например, модуль Юнга). Кроме того, для его работы не требуется предварительное нанесение специального покрытия на образец.

Из первичных АСМ-данных (массив точек, характеризующих поверхность и распределение механических свойств на ней) при помощи специальных алгоритмов обработки может быть получен ряд характеристик поверхности. Одной из характеристик является размерность поверхности. Выделяют топологическую (целочисленную) и фрактальную (дробную) размерности [1]. Как правило, реальные природные структуры характеризуются фрактальной размерностью.

Фрактальная размерность используется для описания структур биологических клеток и тканей, а также для анализа изменений, имеющих место в этих структурах. Например, фрактальную размерность используют при анализе структур высушенных капель биологических жидкостей (слюны, мочи и т.п.), томографии головного мозга, поверхностей клеток при различных патологиях (диабете, раке, окислительном стрессе) [2].

В математике используются различные методы расчета фрактальной размерности (метод подсчета кубов, метод триангуляций, метод спектра мощностей, вариационный метод и другие).

Целью работы являлось создание программного обеспечения для оценки фрактальной размерности поверхностей (включая поверхности биологических клеток) и карт их механических свойств на основе АСМ-данных методом подсчета кубов (бокс алгоритм, box counting).

Методы и результаты. Для расчета фрактальной размерности поверхностей использовалась формула $D = \lim_{\delta \rightarrow 0} [\ln N(\delta) / \ln(1/\delta)]$, где $N(\delta)$ – минимальное число кубов со стороной δ , покрывающих в совокупности искомую поверхность. Программное обеспечение (ПО) разработано на языке C++ в среде C++ Builder 6.

Для работы разработанного ПО необходимо ввести пространственные размеры области (размеры области АСМ-сканирования) и координаты всех распознанных точек поверхности (АСМ-массивы данных (x, y, z), включающие геометрический и механический образы поверхности).

Бокс алгоритм реализован следующим образом: область пространства, включающая исследуемую поверхность, разбивается кубической решеткой (с ребром куба, меньшим наименьшего абсолютного значения координат). Затем перебирается точки массива АСМ-данных и подсчитывается количество кубов решетки, в которых попадает хотя бы одна точка. Затем ребро куба решетки уменьшается в 2 раза, после чего процесс повторяется с начала до тех пор, пока ребро куба не станет меньше шага АСМ-сканирования, умноженного на некую константу. Экспериментальные данные показывают, что данная константа (например, для биологических клеток) должна быть >10 . Это связано с тем, что при меньших значениях шага алгоритма АСМ-изображение перестает быть поверхностью с фрактальной размерностью >2 .

По полученным данным строится массив пар: логарифм количества кубов и логарифм величины, обратной размеру ребра куба. Данные массива представляют собой точки двухмерного графика в логарифмическом масштабе. Так как поверхности клеток, как правило, обладают хорошими масштабными инвариантными (скейлинговыми) свойствами, то полученную зависимость можно аппроксимировать линейной функцией, причем тангенс угла наклона аппроксимирующей прямой будет являться фрактальной размерностью исходной поверхности (рис. 1).

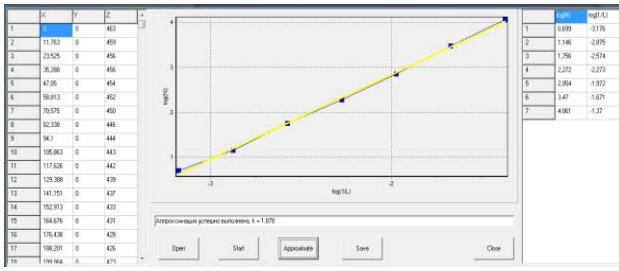


Рис. 1. Вывод результатов аппроксимации.

Заключение. Разработанное программное обеспечение применяется для обработки данных, полученных на АСМ «NT – 206» (Беларусь, Гомель), для анализа структуры и механических свойств поверхностей биологических клеток (лейкоцитов, эритроцитов и раковых клеток).

ЛИТЕРАТУРА

1. Чумак, О. В. Энтропии и фракталы в анализе данных. – М.: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2011. – 164с.
2. Мандельброт, Б. Фрактальная геометрия природы. М.: Институт компьютерных исследований, 2002. – 656 с.

ДИНАМИЧЕСКАЯ ГРУППА ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА И НУЛИ ДЗЕТА-ФУНКЦИИ РИМАНА

Степановский Ю.П.

ХНУ им. В.Н. Каразина, Харьков, Украина,
ННЦ ХФТИ, Харьков, Украина

На стр. 252 книги Е.К. Титчмарша [1] приведена формула, с хорошей точностью при $n \gg 0$ определяющая нули дзета-функции Римана $\zeta(z)$ в комплексной плоскости на прямой $z = 1/2 + iE$:

$$\frac{1}{2} E \ln \frac{E}{2\pi e} + \frac{7}{8} \pi = (n + \frac{1}{2})\pi. \quad (1)$$

Эта формула очень напоминает формулу, определяющую спектр некоторого квантово-механического гамильтониана в квазиклассическом приближении (при $\hbar = 2\pi$, \hbar – постоянная Планка):

$$\iint P(X) dX = (n + \frac{1}{2} + I_M), \quad (2)$$

где I_M – индекс Маслова. В 1999 г. Берри и Киттинг [2] обнаружили, что очень простой гамильтониан $H = XP$ приводит к формуле (1). Разумеется, у гамильтониана $H = XP$ (в квантовом случае $\hat{H} = (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})/2$) вообще нет никакого дискретного спектра, поскольку он описывает инфинитное движение, но, как это принято у физиков, Берри и Киттинг применили «регуляризацию»: они ввели условия $X > \sqrt{2\pi}$, $P > \sqrt{2\pi}$ (см. Рис. 1 из работы [2]).

Результат Берри и Киттинга столь же замечателен, сколь и загадочен. Цель настоящего сообщения – указать еще на одно замечательное свойство гамильтониана $\hat{H} = (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})/2$.



Рис. 1. Область в фазовой плоскости, определяющая нули ζ – функции Римана

В 1965 г. С. С. Санников [3] обнаружил, что три оператора, связанные с лагранжианом, гамильтонианом и пфаффианом гармонического осциллятора

$$\begin{aligned} J_1 &= -i(\hat{P}^2 - \hat{X}^2)/4, \\ J_2 &= (\hat{P}^2 + \hat{X}^2)/4, \\ J_3 &= i(\hat{P}\hat{X} + \hat{X}\hat{P})/4, \\ J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 &= -3/16, \end{aligned} \quad (3)$$

представляют собой инфинитезимальные операторы унитарного представления группы Лоренца $SO(2,1)$, реализуемого операторами $\Lambda = \exp(i\vec{\phi}\vec{J})$. Роль времени играет ось $x_2 = it$. Угол поворота в плоскости 1–3 ϕ_2 – вещественный, а чисто мнимые «углы» $\phi_1 = \text{Arth } V_1$ и $\phi_3 = \text{Arth } V_3$ соответствуют преобразованиям Лоренца для относительного движения инерциальных систем отсчета вдоль осей 1 и 3 со скоростями V_1 и V_3 . Найденное Санниковым унитарное представление группы Лоренца реализует динамическую группу симметрии гармонического осциллятора.

Отметим также, что еще в 1932 г. Э. Майорана исследовал решения бесконечно-компонентного релятивистского волнового уравнения, описывающего частицу с произвольным спином и не имеющего решений с отрицательной энергией [4]. В нашем упрощенном случае трехмерного пространства-времени уравнение Майораны имеет вид

$$\left[i(\vec{J} \frac{\partial}{\partial \vec{X}}) + m \right] |\psi\rangle = 0, \quad (4)$$

(Майорана не связывал операторы \vec{J} с гармоническим осциллятором и использовал довольно громоздкую реализацию операторов \vec{J} бесконечно-компонентными матрицами).

Таким образом, существует связь между нулями дзета-функции Римана и бесконечномерными унитарными представлениями группы Лоренца $SO(2,1)$. Изучение этой связи может быть полезным для решения проблемы Римана о нулях дзета-функции.

ЛИТЕРАТУРА

1. Титчмарш Е.К. Теория дзета-функции Римана. – Москва: ИЛ, 1952. – 407 с.