

Список литературы

- [1] Козлов В.Н. Математическое моделирование зрительного восприятия // Математические вопросы кибернетики. Вып. 6. М.: Наука, 1996. С. 321-338.
- [2] Kozlov V.N. Image Coding and Recognition and Some Problems of Stereovision // Pattern Recognition and Image Analysis. 1997. V.7. N4. P. 448-466.
- [3] Козлов В.Н. О распознавании аффинно разных дискретных изображений // Интеллектуальные системы. 1998. Том 3. Вып. 3-4. С. 95-122.
- [4] Козлов В.Н. О зрительном образе, математических подходах к определению этого понятия и о распознавании изображений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1999. Том 39. №11. С. 1929-1946.

Оценка взаимной близости и превращения структур на основе их параметрических описаний

Д.М. Мазо

Структуры, составляющие единое множество, взаимодействующие или замещающие друг друга, описываются в пределах единого множества внутренних параметров. Систематизация их поведения в связи с изменением независимых внешних параметров позволяет оценить меру взаимной близости структур, число шагов, необходимых для взаимного превращения структур, и необходимое для этого направление изменения внешних параметров. Рассмотрена проблема идентификации структур в пределах множества. Возможности подхода декомпонируются на примере анализа переходов между правильными системами точек плоских групп симметрии и динамики развития шахматных партий.

1. Введение

Любая структура может быть трансформирована, без потери индивидуальности в пределах некоторого множества структур, объединяющих те же элементы. Эта возможность существует с момента зарождения структуры и вплоть до ее разрушения. Любые нарушения соответствия текущего состояния структуры сложившимся внешним условиям в пределах области ее существования компенсируются за счет обратной трансформации. По достижении некоторого критического уровня состояния (у границы области) возможности обратной трансформации исчерпываются и прогрессив-

но возрастающее несоответствие состояния структуры сложившимся внешним условиям может быть компенсировано лишь необратимым превращением — то есть замещением исходной структуры новой или сочетанием структур, включающих все элементы исходной структуры, но отличающихся по индивидуальным признакам. Превращенная структура в области своего существования также допускает обратимую трансформацию. Необратимость трансформации означает сохранение соотношений между внутренними параметрами новой структуры при сохранении направления непрерывного и мотонного изменения внешнего параметра, способствовавшего превращению исходной структуры.

Если для некоторого множества элементов установлена единая система уравнений состояния, определяющих поведение образующих ими структур в изменяющихся внешних условиях, эти структуры составляют единое множество. Различия в пределах множества определяются различиями в поведении каждого из параметров, входящих в уравнения состояния, и их текущих значений для конкретной структуры в конкретных условиях. Вопрос в том,

как измерить степень различия и сходства (подобия) структур и расположить их в некотором пространстве соответственно взаимной близости.

Репер такого пространства должен иметь минимальную размерность и не должен зависеть от природы множества, обеспечивая при этом максимально полное разрешение составляющих его структур и построение их сопряжений (фазовых диаграмм) в координатах, соответствующих изменению тех или иных внешних параметров.

В данной работе предпринята попытка обоснования выбора универсального трехмерного пространства VCP , обеспечивающего решение задачи. Ранее [1]–[9] нами были показаны возможности рассмотрения фазовых переходов в подробно систематизированных кристаллических структурах как изменение координат фигуративной точки в пространстве, репер которого составляют числа независимых степеней свободы V , неравных констант C и кратности P .

Ввиду инвариантности описания структур в предложенном репере подход был распространен на менее строго формализуемые множества — стратегические игры, из которых наиболее систематизированы шахматы [10]–[12].

Действительно, любое превращение подразумевает, в первую очередь, скачкообразное изменение по меньшей мере одного из индивидуальных признаков структуры, каковыми могут служить лишь внутренние параметры, сохраняющие свои значения в области существования структуры. Параметры, способные характеризовать индивидуальность структур множества, будучи указаны в единой последовательности, могут составить их идентификаторы. Трансформация подразумевает изменение текущих значений внутренних параметров структуры, являющихся переменными во всей этой области. Суммарное число параметров в уравнениях состояния множества определено априори, однако числа *независимых* переменных и неравных констант могут различаться для конкретных структур. Более того, параметр, являющийся независимой переменной в области существования одной из структур, может оказаться константой или одной из связанных переменных для соседней с ней.

Для обоснования предлагаемого подхода к анализу взаимных превращений структур наглядны и представительны компактные множества треугольников и ПСТ плоских групп симметрии. Предлагаемый подход к их систематизации и анализу переходов в полной мере применим не только в отношении $3d$ ПСТ, но и структур любой природы, что продемонстрировано на результатах анализа в том же репере VCP закономерностей развития шахматных партий.

В ряде конкретных случаев взаимные превращения кристаллических структур могут быть проанализированы на основе данных о соподчинении групп симметрии. На этом основании можно судить и об их роде по Ландау, то есть реализуются ли они со скачком термодинамического потенциала (I рода), или без такового (II рода) [13]–[15]. Однако, в отношении построения фазовых диаграмм кристаллических структур теоретико-групповая систематизация симметрии исторической силы не показала, в частности, из-за невозможности

связать направление превращения (изменения симметрии) с направлением изменения внешних условий [14].

2. Свободные и фиксированные параметры структур

В поле внешних, независимых относительно данной структуры S_i переменных параметров x_j (в общем случае — тензоров) система внутренних связей между ее элементами описывается системой уравнений состояния, среди параметров которых (внутренних параметров множества) имеются:

- фундаментальные константы множества,
- константы данной структуры $C_{ik}(x_j)$ и $D_{il}(x_j)$,
- переменные данной структуры $y_{im}(x_j)$.

В качестве x применительно к некоторым структурам и процессам выступают скаляры — время τ (процессы, связанные с передачей и приемом информации, переносом вещества и т.п.), температура (фазовые переходы в физике твердого тела и т.п.), в других случаях — компоненты тензоров более высоких рангов. Перечень оцениваемых внутренних параметров должен соответствовать рангу тензора x .

Очевидно, при любом способе сравнения структур в пределах множества фундаментальные константы могут быть из рассмотрения исключены.

Часть параметров допускает непрерывное и монотонное изменение по мере непрерывного и монотонного изменения данного x_j для одной или нескольких структур множества, входя в список переменных $y_{im}(x_j)$ для этих структур. Однако, любой из этих параметров при изменении того же внешнего параметра может оказаться в списке констант $C_{ik}(x_j)$ по меньшей мере для одной из остальных структур множества, поскольку любая из переменных в принципе может изменяться в интервале или на отрезке, границы которых являются константами. И наоборот, константы типа $C_{ik}(x_j)$ данной структу-

ры в условиях непрерывного и монотонного изменения данного x_j окажутся в списке $y_{im}(x_j)$ хотя бы для одной из структур множества в условиях изменения того же внешнего параметра.

Множество параметров y_{im} может включать неоднородные группы однородных параметров, характеризующихся равными производными dy_{im}/dx_j . Соответственно, множество C_{ik} может включать группы равных по смыслу и по значению констант. Все однородные параметры одной группы входят в список y_{im} как одна независимая переменная. В список C_{ik} однородные параметры входят как одна константа лишь при условии равенства их абсолютных значений. При изменении характера внешнего воздействия число неоднородных групп однородных параметров может изменяться, в частности, за счет дробления вплоть до общего числа внутренних параметров множества или за счет группировки.

Константы типа $D_{il}(x_j)$, в отличие от $C_{ik}(x_j)$, не способны к непрерывному и монотонному изменению ни для одной из структур множества, и следовательно, если для пары структур они различны, то при монотонном изменении внешнего параметра смена их значений происходит исключительно дискретным образом. В пределах множества каждый из параметров $D_{il}(x_j)$ принимает по меньшей мере два фиксированных значения, причем изменение значения происходит в связи с переходом того или иного параметра из списка C в список y и наоборот.

Число независимых переменных внутренних параметров m_{\max} обозначает координату структуры вдоль V -компоненты репера пространства VCP , а число неравных констант k_{\max} — координату вдоль y -компоненты C .

Когда оценка какого-либо из параметров оказывается невозможной, возникает неопределенность: с некоторой вероятностью каждый из них может быть отнесен как к списку C , так и к списку y . Для всех оцениваемых параметров данной структуры можно указать значения (константы), соответствующие значениям данного параметра в описаниях других структур множества, или предельные значения. Достижение этих значений может провоцировать качественное

изменение структуры.

Если множество структур описывается списком из N неоднородных параметров типов $y(C)$, компоненты V и C являются связанными, ибо $k + m = N$. Число N является фундаментальной константой множества, и при сопоставлении структур в принципе может быть опущено. В пределах ячеек такого репера невозможно разрешить даже минимум различающихся структур, равный

$$\sum_{V=0}^N C_{V,N} C_{N-V,N},$$

где C — число сочетаний. Если же хотя бы часть из N параметров типов $y(C)$ является однородными, V и C становятся независимыми осями репера, поскольку выполняется более мягкое условие $M \leq k_{\max} + m_{\max} \leq N$, где M — число групп однородных параметров. Число занятых ячеек возрастает до $(N^2 - N)/2 - 1$, чего, однако, также недостаточно для разрешения структур. Пространство большей размерности лишь частично снимает проблему разрешения структур в пределах ячейки. Далее мы рассмотрим вопрос об увеличении размерности, однако система их информативной идентификации, очевидно, необходима.

3. Идентификаторы структур

В общем идентификаторами могут служить любые символы и их сочетания. Одним из вариантов является обозначение их порядковыми номерами. Недостаток его состоит в полном отсутствии содержательной информации о структуре. Информативность идентификации предполагает обозначение всех индивидуальных признаков любой из структур некоторого множества. Исчерпывающая система идентификации должна присваивать уникальные обозначения не только в пределах ячейки выбранного пространства, но и в пределах всего множества, описанного данной системой уравнений состояния, то есть в любой из занятых ячеек этого пространства.

В пространстве VC обозначение идентификаторов исключительно значениями констант типа C , составы списков которых для структур всего множества, в общем, различны, не гарантирует однозначности даже в пределах одной ячейки, где число констант для всех структур одинаково. Основная причина состоит в невозможности обеспечить единообразие их записи относительно порядка в общем перечне параметров множества. Кроме того такая идентификация зависима от того, какие внешние параметры вызывают трансформацию и превращения структур.

Упорядоченная последовательность записи дискретных констант типа D , состав которых одинаков для всех структур множества, сама по себе могла бы составить уникальные их идентификаторы, не зависящие от внешних условий. Условием полного разрешения всех структур множества является существование достаточного числа независимых параметров данного типа и/или допустимых значений каждого из них. Возможным недостатком такой идентификации является недостаточная информативность относительно значений других констант и списка переменных.

Максимально информативна, очевидно, упорядоченная запись символьных обозначений значений всей совокупности внутренних параметров структуры, включая переменные. Она, однако, не позволяет однозначно идентифицировать структуру, параметрическое описание которой содержит хотя бы одну переменную, ибо в пределах области сохранения индивидуальности структуры такой «идентификатор» изменялся бы по мере изменения внешнего параметра. Решением является внесение в идентификаторы условных обозначений переменных параметров символами, не зависящими от их текущих значений. Установив единую для всего множества последовательность записи параметров идентификатора, достаточно обозначить параметры, относящиеся к типу y в данной структуре, строчными и/или, например, курсивными символами, а в идентификаторах структур, для которых они относятся к типу C , — прописными в соответствующих позициях. Параметры типа D можно обозначать конкретными значениями. Порядок записи может быть произволь-

ным, однако единым, согласованным и логичным для определенного множества объектов и для определенного круга пользователей. Громоздкость такой системы идентификации компенсируется гарантированной уникальностью и информативностью.

Любые иные варианты (нумерация, лингвистические обозначения и т.п.), можно рассматривать лишь в качестве «псевдонимов». Потеря индивидуальности структуры прямо связана со взаимным изменением состава и/или объема списков C_i и/или u_i ; по мере изменения данного параметра и соответствующим образом отражается в идентификаторе, поэтому именно в его пределах разумно найти дополнительные количественные характеристики структуры. Действительно, каждое изменение связей между элементами структуры, включая процессы ее создания, трансформации или разрушения, и, соответственно, составления или изменения идентификатора предложено, составлено или изменения идентификатора предложено вида, обусловлено некоторым элементарным действием и сопровождается изменением потенциальных возможностей трансформации соответствующей структуры. Элементами будем считать действия, сопровождающиеся изменением на единицу:

– числа V независимых переменных параметров за счет числа констант C (и наоборот), сопровождающиеся дискретным изменением любой из констант типа D ;

– числа независимых параметров V или C при сохранении числа C или V соответственно;

– общего перечня N параметров типов u и C (включая каждый из связанных параметров в пределах каждой из независимых групп), вне зависимости от числа параметров типа D ;

– числа связанных параметров в одной из групп типа u или C . В полном идентификаторе структуры S_i , включающей, в общем случае, связанные переменные и равные константы, суммарное число независимых переменных V_i и равных констант типа C_i , определяют число элементарных действий $N_i = V_i + C_i \leq N$. Эта величина количественно характеризует структуру в пределах множества независимо от состава списков переменных и констант. Объем N

общего перечня параметров типов u и C одинаков по условию для всех структур данного множества. Он определяет число элементарных действий, необходимых для создания идентификатора структуры (возможно, гипотетической), для которой все параметры перечня независимы.

4. «Потенциалы» структур

В качестве независимой от V и C дополнительной количественной характеристики, расширяющей размерность искомого пространства, которую условно назовем «потенциалом» структуры P_i , целесообразно выбрать один из дискретных параметров идентификатора D_i или некоторую их комбинацию. Положительные изменения ΔP_i будем связывать с любым из перечисленных ниже элементарных действий:

переход параметра из списка u в список C ,
увеличение числа C при $V = const$,
уменьшение числа V при $C = const$.

5. Мера близости в пространстве VCP

Полагая, что последовательность переходов от структуры к структуре определяется некоторой мерой их взаимной «близости», сопоставим этой мере размещение структур в ячейках пространства VCP . В отличие от дискретного $3d$ -пространства с независимыми компонентами репера X, Y, Z , в котором мерой близости является величина $\Delta R_{xyz} = |\Delta X| + |\Delta Y| + |\Delta Z|$, в пространстве VCP , гдевиду взаимосвязи компонент репера $\Delta V = \pm \Delta C$, и/или $\Delta V = \pm \Delta P$, и/или $\Delta P = \pm \Delta C$, меры близости могут вычисляться в виде

$$\begin{aligned}\Delta R_{vcp} &= |\Delta V \pm \Delta C| + |\Delta P|, \text{ и/или} \\ \Delta R_{vcp} &= |\Delta V \pm \Delta P| + |\Delta C|, \text{ и/или} \\ \Delta R_{vcp} &= |\Delta P \pm \Delta C| + |\Delta V|.\end{aligned}$$

Не исключает различия структур и вариант $\Delta V = 0, \Delta C = 0, \Delta P = 0$, если различаются по составу списки характеризующих их независимых свободных и/или различающихся фиксированных параметров. Структуры с различными идентификаторами, для которых в поле данного внешнего параметра совпадают списки y_i и списки C_i , будем называть подобными. Структуры, для которых кроме того совпадают абсолютные значения констант C_i , а значит идентификаторы и потенциалы, тождественны.

Разность «потенциалов» ΔP_{ij} двух структур в общем меньше числа F_{ij} единичных шагов, необходимых для превращения идентификатора одной из них в идентификатор другой. Равенство возможно лишь для пары структур, с одинаковыми значениями $V + C$. Разность «потенциалов» характеризует способность структур к взаимному превращению, а знак ΔV определяется направлением изменения внешнего параметра: способствующие увеличению числа степеней свободы приводят к переходу в направлении положительного изменения ΔV , и наоборот.

6. Примеры параметрических описаний

Треугольники. Безотносительно линейных размеров множество их описывается уравнением $\alpha + \beta = \pi$ ($0 \leq \alpha \leq \pi, 0 \leq \beta \leq \pi$) и может быть реализовано в ряде вариантов (таблица 1). В области существования косоугольных треугольников, например, переменные параметры α и β независимы, произвольны и не равны между собой, в области существования равноугольных треугольников картина обратная: углы равны между собой и строго фиксированы $\alpha = \beta = \pi/3$. Фундаментальная константа π в числе констант не учтена.

Каждый из перечисленных треугольников можно разместить в ячейках пространства VCP , используя в качестве координаты P максимальные кратности взаимно эквивалентных точек. Возможны и другие варианты: кратность оси симметрии, нормальная плоскости треугольника, кратность оси максимального порядка в плоско-

Таблица 1. Варианты реализации треугольников $\alpha + \beta = \pi$.

α	β	0	$\pi/4$	$\pi/3$	$\pi/2$	π	A	B
РБ	К		К	К	П		К	
0		ЛР				Л		
$\pi/4$	(к)		ПР	КФ	ПФ		КФ	
$\pi/3$	(к)		(кф)	РС	ПФ		КФ	
A	(к)		(кф)	(кф)	ПФ		РБФ	КФ

В скобках указаны варианты, эквивалентные указанным в верхней части таблицы

сти треугольника или число осей второго порядка в плоскости треугольника. Однако даже в сокращенных идентификаторах кратности точек разрешают три принципиально различные конфигурации произвольную, равнобедренную и равноугольную в зависимости лишь от соотношения между величинами углов. Если же в составе идентификаторов треугольников помимо максимальных кратностей точек включить другие параметры из таблицы 2 в единой последовательности (например приведенной в таблице), структуры могут быть разрешены полностью.

В ячейках VCP -пространства параметр D_1 в качестве компоненты P разрешает все варианты треугольников за исключением ЛР и ПР. Подробные варианты идентификации позволяют разрешить и эти варианты.

Плоские группы симметрии. Основу описания реальных кристаллических структур, представляющих обширные возможности экспериментальной проверки эвристических возможностей предлагаемой систематизации, составляют правильные системы точек. ПСТ ограничены пределами элементарных ячеек бесконечно протяженных решеток. Составляющие их точки взаимно эквивалентны в отношении действующих элементов симметрии, а число их определяется перемножением кратностей этих элементов симметрии. Учет исключительно симметричных признаков не позволяет построить фа-

Таблица 2. Параметры треугольников множества $\alpha + \beta = \pi$.

Виды треугольников	Углы	V	Кратности			Число точек осей \perp пл. осей \parallel пл. осей ² \parallel пл.
			D_1	D_2	D_3	
Линейные	0,0	0 2 1	1	1	0	0
Лин Равнобедр.	0,0	0 1 2	2	1	1	1
Косоугольные	α, β	2 0 1	1	1	0	0
Косоугольные Фиксир.	A, B	0 2				
Равнобедренные	α, α	1 0 2	1	2	1	1
Равнобедренные Фиксир.	A, A	0 1				
Равносторонние	$\pi/3, \pi/3$	0 1 3	3	2	3	3
Прямоугольные	$\alpha, \pi/2$	1 1 1	1	1	0	0
Прямоуг. Равнобедренные	$\pi/4, \pi/4$	0 1 2	1	2	1	1
Прямоуг. с Фиксир. углом	$\pi/2, \pi/n$	0 2 1	1	1	1	1

зовые диаграммы, но, в максимально подробном варианте, придает им весьма содержательные символические имена (примеры – в таблице 4).

ПСТ общего положения, то есть имеющие координаты x, y в соответствующем репере, наиболее полно характеризуют соответствующие решетки. Сопоставим в пространстве VCP решетки плоских групп симметрии [15], приняв в качестве координаты P кратности таких ПСТ в пересчете на один узел решетки Браве – таблица 4. Параметрами описания множества решеток являются линейные размеры ребер элементарной ячейки, угол между осями репера, кратность точек и параметр, характеризующий наличие вектора центрирования (решетка типа c) элементарной ячейки. Для примитивной решетки (типа p) число фиксированных параметров при прочих равных условиях на единицу меньше, чем для решетки c .

Координатные параметры ПСТ частных положений в соответствующем репере также могут быть свободными (xx, yy), фиксированными ($1/2, 0; 1/2, 1/2$, и т.п.), однородными или неоднородными ($x, 1/2$ и т.п.). Соответственно, числа V и C для них определяются

Таблица 3. VCP -пространство треугольников множества $\alpha + \beta = \pi$.

V	0	1	2	C	$P = D_1$
0		РС(1) РВФ(1) ЛР(1) ПР(1) Л(1)	ЛР(1) ПР(1) КФ(4) ПФ(3)		3 2 1
1	РВ(1)	—	К(3) П(1)		2 1 1
2	К(1)				

В скобках указано число реализаций (табл. 1)

Таблица 4. VCP -пространство реперов плоских решеток.

V	0	1	2	C
0				
1		р6mm ($a, a, 2\pi/3, 12$) р4mm ($a, a, \pi/2, 8$) р2mm ($a, b, \pi/2, 4$)		
2	р2 ($a, b, \gamma, 2$)			

суммированием решеточных и координатных значений. Результат систематизации ПСТ представлен в таблице 5. Обратим внимание на то, что кратности ПСТ дискретны. При этом в списках ПСТ групп, характеризующихся присутствием осей, кратных трем, могут сосуществовать ПСТ с кратностями

$$K_1 = 1 + 2^P \quad \text{и} \quad K_3 = 3 * 2^P$$

(одинаковыми числами свободных параметров (или без таковых). В таблице 5, в отличие от таблицы 4, в качестве «потенциала» принято значение показателя степени P . Тем самым обеспечивается соразмерность всех осей репера VCP . Ряд ПСТ, за исключением ПСТ с координатами x, y (обозначенных жирным курсивом ПСТ общего положения), могут присутствовать в списках групп более низкой

симметрии, относящихся к одному реперу (в таблице 5 обозначенных мелким шрифтом).

Таблица 5. *VCP*-пространство ПСТ плоских групп симметрии.

V	0	1	2	3	СР
0	—	—	—	—	3
1	—	—	—	—	2
2	—	—	—	—	1
3	—	—	—	—	0
—	(10a-11a) (13a-14a-15a-16a-17a)	(10c-11c, 12ab) (15b-16b-17b)	(10b-11b) (13bc-14bc, 16c-17c)	—	—
—	11df	11e 12c	—	—	3
—	17de	7ab 8ab 9c	—	—	2
—	14d 15c	6a	6bcd 9abc	—	1
—	11g	12d	—	—	0
—	10d 17f	—	—	—	3
—	13d 14e 15d 16d	6eg	6fh 7c 9de	—	2
2a	—	3a 2(bcd) 3b 5a	—	—	1
4	—	—	—	—	0
—	6i	7d 8c 9f	—	—	3
—	3c 4a	—	—	—	2
—	—	—	—	5b	1
—	—	—	—	—	0
5	—	—	—	—	3
2e	—	—	—	—	2
1a	—	—	—	—	1
—	—	—	—	—	0

7. Принцип наименьшего действия и род перехода

Применение принципа наименьшего действия позволяет выделить те из превращений, которые могут происходить без скачкообразного изменения параметрических описаний (по Ландау фазовые переходы второго рода происходят без скачкообразного изме-

нения термодинамического потенциала). Такого рода переходы, сопровождающиеся изменением числа степеней свободы, должны удовлетворять условию равенства результата вызвавшему его действию

$$|\Delta R_{\text{ср}}| = |dV|.$$

В противном случае возможность превращения посредством непрерывной и монотонной трансформации исключается.

8. Анализ превращений в пространстве *VCP*

Полагая, что трансформация структур происходит за счет непрерывного и монотонного изменения текущих значений свободных параметров вплоть до значений, являющихся константами для структуры другого типа, очевидно, что трансформация структуры «без изменения числа степеней свободы» $|dV| = 0$ вначале так или иначе направлена от исходной структуры, имеющей V степеней свободы в сторону реальной или гипотетической структуры в ячейке ± 1 . Местабильное состояние структур в этой ячейке может быть заменено стабильным состоянием превращенной структуры в исходной ячейке пространства *VCP* за счет включения в действие другого внешнего параметра.

За счет изменения одного (скалярного) внешнего параметра можно ожидать реализации переходов с изменением числа независимых внутренних параметров $|dV| = 1$ и только. Ожидать синхронного достижения несколькими независимыми переменными параметрами одной структуры сочетания значений, характерных для некоторой другой структуры, за счет изменения одного (скалярного) внешнего параметра нельзя.

Для обеспечения синхронизации необходимо дополнительными средствами обеспечивать корреляцию изменений соответствующего числа скалярных внешних воздействий, или применять соответствующего ранга и структуры тензорные воздействия. Затраты на осу-

ществование обратной связи и управления изменением нескольких независимых параметров, очевидно, тем ниже, чем меньше их число. В материальных структурах эти затраты могут возрастать также по мере приближения к заданной цели ввиду необходимости повышения точности компенсации возможных отклонений, особенно вблизи значений, соответствующих нежелательным альтернативным структурам, или снижаться по мере удаления от них и/или за счет увеличения вклада автокорреляции. Внутренняя корреляция может возникнуть в процессе непрерывной трансформации или нарушиться: примером могут служить структуры, в которых сила взаимодействия элементов зависит от расстояния между ними. Любая корреляция независимых параметров означает реализацию перехода как первого рода. Тензорные внешние воздействия способны обеспечить реализацию переходов с соответствующими их рангу изменениями $|\Delta V|$.

Для реализации непрерывных переходов необходимо взаимное совпадение трех оценок:

$$\Delta R_{vcr} = |\Delta V + \Delta C| + |\Delta P|, \quad \Delta R_{vcr} = |\Delta V + \Delta P| + |\Delta C|$$

$$\text{и} \quad \Delta R_{vcr} = |\Delta P - \Delta C| + |\Delta V|$$

и взаимное соответствие двух других оценок

$$\Delta R_{vcr} = |\Delta V - \Delta P| + |\Delta C| \text{ и } \Delta R_{vcr} = |\Delta P + \Delta C| + |\Delta V|$$

ибо, при неизменном объеме списка параметров множества структур:

число V может изменяться как в связи, так и независимо от C , но всегда в связи с P ,

число C может изменяться только в связи с изменением V и/или P , число P — только в связи с изменением C .

Превращения, не подтвержденные всем сочетанием оценок, очевидно, непрерывным образом реализоваться не могут, хотя возможна их реализация через промежуточные этапы и только как переходы I рода.

Стабилизация превращенной структуры обеспечивается тем, что после реализации переходов параметры исходной структуры, активные в поле данных внешних параметров, выбывают из списка активных. Возврат в исходную ячейку пространства VCP возможен за счет изменения другого свободного параметра — уже из списка переменных превращенной структуры.

Таблица 6. Компоненты $\Delta V, \Delta C, \Delta P$ и оценки взаимной близости ΔR_{vcr} треугольников: в последовательности

$$(|\Delta V + \Delta C| + |\Delta P|), (|\Delta V + \Delta P| + |\Delta C|) (|\Delta V - \Delta P| + |\Delta C|),$$

$$(|\Delta P + \Delta C| + |\Delta V|) (|\Delta P - \Delta C| + |\Delta V|).$$

Компоненты (выше диагонали) и взаимная близость треугольников (внизу)											
Л	ЛР	К	КФ	РБ	РБФ	РС	П	ПР	ПФ	Л	ЛР
Л	0	212	010	112	001	002	010	001	010	Л	ЛР
ЛР	1,11,11	0	211	110	000	001	101	000	011	ЛР	0
К	3,51,35	2,24,42	0	011	000	001	110	011	000	К	ЛР
КФ	1,11,11	2,22,02	0,22,22	0	011	211	212	110	211	КФ	ЛР
РБ	2,42,24	0,22,22	2,02,02	0	121	011	012	110	001	РБ	ЛР
РБФ	1,11,11	0	2,24,42	2,22,02	0	110	111	011	110	РБФ	ЛР
РС	2,22,22	1,11,11	3,15,53	3,33,13	1,13,31	1,11,11	0	101	000	РС	ЛР
П	1,11,11	2,02,22	0,22,22	2,22,02	2,20,22	3,13,33	0	102	001	П	ЛР
ПР	1,11,11	0	2,24,42	1,11,11	0,22,22	0	1,11,11	2,02,02	0	ПР	ЛР
ПФ	1,11,11	1,12,02	0,44,44	0	2,42,24	2,22,02	3,33,13	0,22,22	2,22,02	ПФ	ЛР

Выше диагонали отмечены варианты переходов, реализующиеся непрерывным образом без каких-либо скачков.

Треугольники. Из данных таблицы 6 следует, что принцип наименьшего действия $\Delta R_{vcr} = |\Delta V| = 1$ соблюдается для превращений РС-РБ-РС, а на уровне $\Delta R_{vcr} = |\Delta V| = 2$ — для превращений К-РБ-К, К-ЛР-К и К-ПР-К. Смысл этого результата очевиден: равнобедренный треугольник можно превратить в равносторонный непрерывным перемещением любой одной из вершин относительно других. Соблюдение взаимной эквивалентности обеспечивает соответствующее перемещение других точек исходной структуры и не требует внешней корреляции. Превращения К-РБ-К, К-ЛР-К и К-ПР-К не обеспечиваются внутренней корреляцией при непрерыв-

Таблица 7. Кратчайшие вектора $\Delta V, \Delta C, \Delta P$, связывающие между собой ПСТ общего положения, и допустимые варианты превращений всех ПСТ плоских групп симметрии.

По диагонали обозначены номера групп симметрии согласно [15]. Жирным шрифтом обозначены варианты превращений II рода ПСТ общего положения, обычным — все остальные. Ниже диагонали варианты переходов $|\Delta R_{VCP}| = |\Delta V| = 1, 2, 3$ обозначены, соответственно, символами 2, 22 и 222

1	001	111	131	112	122	122	122	212	213	223	211	211	211	211	211	212
	2	110	110	130	111	121	121	211	212	222	210	210	210	210	210	211
2		3	000	020	001	011	011	101	102	112	100	100	100	100	100	101
			4	020	001	011	011	101	102	112	100	100	100	100	100	101
			2	5	021	011	011	121	122	112	120	120	120	120	121	
22	2			6	010	010	010	100	101	111	101	101	101	101	100	
					7	000	000	110	111	101	111	111	111	111	110	
						8	000	110	111	101	111	111	111	111	110	
							9	110	111	101	111	111	111	111	110	
								10	001	011						
									11	010						
										12						
22											13	000	000	000	001	
22												14	000	000	001	
22													15	000	001	
22														16	001	
222	2, 22	22									2					17

ном перемещении одной из точек. Необходимо обеспечить векторное управление движением одной точки или внешней корреляцию перемещения двух точек.

Плоские группы симметрии. Многочисленные варианты переходов между ними представлены в таблице 7 с привязкой знаков к направлению от групп с меньшими порядковыми номерами к большим. В отношении ПСТ выполняются те же правила отбора превращений, что и для треугольников. Отметим запреты на прямые превращения ПСТ, характеризующихся присутствием оси L_4 , в ПСТ

осями L_3 и L_6 и переходов между ПСТ общего положения без изменения параметров элементарных ячеек, а также возможность реализации переходов $|\Delta V| = 3$ (для треугольников максимальный вариант $|\Delta V| = 2$).

9. О возможности термодинамических оценок в пространстве VCP

Параметрические описания позволяют сопоставлять в пространстве VCP аналоги термодинамических функций любых структур. «Энтропию», как меру неопределенности, можно оценивать на основе числа степеней свободы, общего числа параметров в перечне, числа и объема групп однородных независимых параметров типа $y(C)$. Термодинамический потенциал может быть использован в качестве одного из независимых измерений (P) пространства.

Описание рассмотренного множества треугольников включает исключительно однородные параметры. Энтропия того или иного треугольника определяется числом реализаций каждого из различающихся сочетаний параметров (таблица 1). Сопоставляя эти числа с мерой близости структур РС-РБ-РС, К-РБФ-К, К-ЛР-К и К-ЛР-К, нетрудно видеть, что отсутствие скачка энтропии подтверждает возможность реализации этих превращений как переходов II рода при соблюдении принципа наименьшего действия.

10. Шахматы в пространстве VCP

Степенями свободы шахматной фигуры являются поля, которые она может занять в текущей ситуации согласно шахматным правилам, включая взятие фигуры противника. Ограничения определяются числом полей, закрытых для данной фигуры фигурами своего цвета или фигурами противника. «Потенциал» фигуры, в отличие от традиционного для шахмат способа (пропорция относительно «силы» пешки), определим числом полей, которые она могла бы занять,

будучи расположена в центре пустой доски (табл. 8).

Таблица 8. Потенциалы шахматных фигур.

Фигура	Король	Ферзь	Слон	Конь	Ладья	Пешка
P_i	8	27	13	8	14	2-4 1-3 8-27

Для пешек величины потенциалов меняются в зависимости от горизонтали и вражеского окружения.

В исходной позиции возможности партнеров исчерпываются $V = 20$ степенями свободы (8 пешек и два коня имеют по 2 разрешенных правилами игры варианта хода). Учитывая, что остальные фигуры располагаются не в центре доски, и их, не равные максимальным, возможности ограничены (для коней - частично), число ограничений составляет: $C = 2 * (14 + 1 + 7) + 5 + 21 = 70$ для ладей, коней, слонов, короля и ферзя соответственно. Суммарный потенциал полного набора фигур равен $P = 2 * (14 + 8 + 13) + 8 + 27 + 8 * 2 = 121$.

Любым, разрешенным правилами ходом исходный порядок нарушается, число V растет и, за исключением хода конем, число C сокращается (первый ход конем увеличивает число ограничений за счет закрытия одной из пешек). Задачей партнеров является создание некоторого нового порядка, при котором противник лишен степеней свободы, то есть $V = 0$. Таким образом, траектория фигур активной точки должна иметь экстремум в проекции на плоскость VC по крайней мере для результативных партий. Величина P по ходу партии может возрастать лишь по двум причинам: приближение пешек к крайним горизонталям и замена пешки на фигуру с большим потенциалом. Снижение потенциала связано со взятием фигур. По аналогии с фазовыми переходами в кристаллах этапы шахматной партии можно интерпретировать следующим образом:

дебют - раупорядочение исходной структуры, задача состоит в максимально полной реализации потенциала ансамбля фигур в степенях свободы,

миттельшпиль - создание «зародышей» упорядочения (ансам-

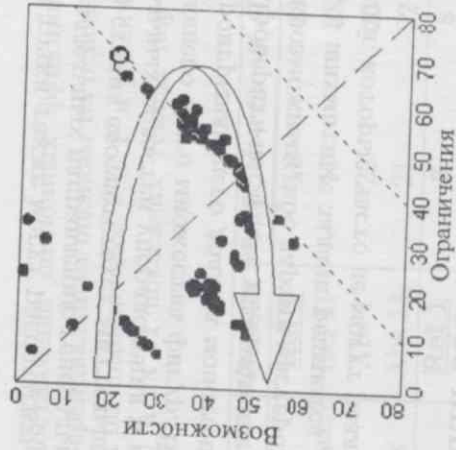


Рис. 1. VC проекция фазовой диаграммы проигравшего партнера шахматной партии между двумя компьютерами. Стрелка показывает генеральное направление развития партии. Острые показывают точку, соответствующей матовой позиции. Линия $V + C = 120$ ограничивает область допустимых значений координат. Линия $V + C = 90$ соответствует простейшим, наиболее часто встречающимся вариантам. Дебюты заканчиваются в непосредственной близости к линии $V = C$.

блей активных фигур), и

эндшпиль - «упорядочение» структуры, обеспечивающее нейтральную позицию противника.

На рис. 1 представлены VC -проекции траектории фигуративных точек разделено для белых и черных фигур. Проверкой по энциклопедии шахматных дебютов [16] установлено, что вне зависимости от шахматной классификации завершение дебюта соответствует переходу любой или обеих фигуративных точек через линию $V = C$. Степень развития фигур в дебютной стадии тем выше, чем ближе точка перехода через линию $V = C$ к линии $V + C = 120$. В дальнейшем фигуративная точка должна двигаться в направлении $V = 0$ темпами, опережающими темп фигуративной точки противника. По

окончании дебюта точки также могут располагаться вблизи линий $V+C = const$, параллельных направлению генеральной линии развития в дебюте. Эта стадия соответствует миттельшпиллю – процессу образованию локальных областей упорядочения и их разупорядочения, не затрагивающего всего множества фигур. В эндшпиле фигуративная точка проигрывающего должна монотонно приближаться к уровню $V = 0$. Проверить последнее утверждение по базам данных не представляется возможным, ибо партии мастеров завершаются до постановки мата, а шахматные задачи решаются для искусственно созданных ситуаций, которые часто не могут реализоваться в игре.

11. Оценочная функция для играющей компьютерной шахматной программы

Проще всего при оценке ситуации предполагать, что положение партнера тем лучше, чем больше его V и P и меньше C . Простейшей дифференциальной оценочной функцией в таком случае были бы функция $\Delta R_{чб} = \Delta V_{чб} - \Delta C_{чб} + \Delta P_{чб}$. Ввиду частично неиспользуемых возможностей $V + C \leq P$. Пассив сводит эту оценку к $\Delta R_{чб} = \Delta V_{чб} + \Delta(P_{чб})_{чб}$, что вряд ли справедливо, ибо passiv может быть как признаком преимущества, достигнутого «малыми силами», так и признаком наличия фигур «вне игры». На самом деле преимущество партнера должно оцениваться некоторой совокупностью перевеса по отдельным компонентам V, C, P и/или их различным сочетаниям.

Среди вариантов оценок, основанных на особенностях выбранного пространства, явный приоритет должен быть отдан сочетанию преимуществ по V, P и $V + C$. Основанием для такого заключения является минимум ошибочных и максимум правильных прогнозов сделанных *безотносительно шахматных теорий и опыта* разработанной нами программой ChesSyne, по результатам статистической обработки базы данных программой ChesStat (таблица 9).

На базе этой оценочной функции в таблице 10 сопоставлены ре-

Таблица 9. Сопоставление оценочных функций для шахматных партий по дифференциальным оценкам на основе абсолютных значений и перевеса по компонентам V, C, P и различных их сочетаний на последнем (1) и на 11 последних темпах партий Камского (не позднее 1993 г.).

Результат	Оценки	$V, P, V + C$	V, C, P	$V - C + P$
ChesSyne – в пользу черных, судейская – победа белых	Rel 1	18	28	28
	Rel 11	17	28	28
	Abs 1	22	25	23
Abs 11	21	22	22	
ChesSyne – в пользу белых, судейская – победа черных	Rel 1	6	8	9
	Rel 11	5	9	9
	Abs 1	6	10	9
Abs 11	6	9	9	
Победа черных подтверждена, %	Rel 1	43	35	36
	Rel 11	44	36	36
	Abs 1	40	34	38
	Abs 11	42	36	36
Победа белых подтверждена, %	Rel 1	58	52	50
	Rel 11	57	50	50
	Abs 1	54	52	52
	Abs 11	53	53	53

ультаты статистического анализа базы данных партий ряда известных шахматистов вплоть до 1994 г. Достоверность прогнозов программы ChesSyne по этому сочетанию критериев довольно высока; для партий, сыгранных каждым из мастеров фигурами одного цвета против всех, она достигает 78% при ошибках, сводящихся в ряде случаев до 1%. В таблице приведены максимальные значения.

Недостающие проценты приходятся на партии с ничейными исходами, точность прогноза которых, как и можно было предполагать, ничтожна. В партиях, сыгранных черными фигурами, достоверность

Таблица 10. Доля (ошибочных/точных) прогнозов при игре белыми (W) и черными (B) фигурами против всех партнеров, средние (W) по базе и число учтенных партий (N).

	Alechine	Fisher	Karlov	Kasparov	Kamsky	Polgar J	Polgar S	Polgar Z
W	4/78	3/78	2/56	1/63	3/63	6/70	13/52	3/50
B	6/77	5/70	8/40	4/51	8/47	12/58	9/68	11/50
W B		12/56	10/35	23/42	43/58			
N	333	672	1855	1414	318	372	157	614

для большинства шахматистов ниже, а ошибок больше (исключение составляет Алехин, но это можно отнести к тому, что база содержит в основном лучшие из сыгранных им партий). Партии начинающих шахматистов в достаточном числе оказались недоступны, за исключением более или менее ранних партий Камского и сестер Полгар.

Нетрудно видеть, что спортивные результаты лучших из лучших шахматистов максимально часто совпадают с нашими оценками, не содержащими никаких подгоночных коэффициентов. По оценкам, сделанным на основе имеющейся в нашем распоряжении базы данных, это Алехин и Фишер, причем равно в партиях игравших белыми и черными. Остальные в большей мере сильны в игре фигурами какого-либо одного цвета: для них доля совпадений с нашими оценками при игре этим цветом в массе своей превышает (при одновременном снижении доли ошибок) результат для массы партий сыгранных фигурами другого цвета (Карпов, Каспаров и др.).

На примере шахматных партий с участием достаточно большого числа фигур [14] нами было продемонстрировано качественное совпадение «термодинамических» и чисто шахматных оценок «Энтропия» определялась числом степеней свободы противника, не включая «непопулярных» и «нелогичных» с точки зрения шахматных теорий и опыта вариантов. «Температура» шахматной структуры партнера определялась максимальной из компонент, связанных с продвижением пешек противника к последней горизонтали, с реги-

ментом (чем меньше времени остается и больше ходов необходимо сделать до контрольного срока, тем выше «накал страстей» и более вероятны ошибочные решения), или с числом угроз королю и его окружению. «Объему» W можно сопоставить сумму $N + V$, где N — число фигур данного цвета. «Давление» на противника суммирует число степеней свободы его фигур, находящихся под боем и под угрозой.

12. Заключение

Репер VCP позволяет анализировать взаимные превращения структур в пределах множества вне зависимости от его природы. Единый для множества перечень параметров должен быть упорядочен. Параметры конкретной структуры должны быть оценены с точки зрения их поведения в области ее равновесия при изменении внешних параметров и подразделены на три группы: переменные, способные принимать значения, не зависящие от изменения внешних параметров, константы, допускающие непрерывное и монотонное изменение по меньшей мере для одной из структур множества, и константы, допускающие исключительно дискретный набор значений в пределах множества.

Приняв в качестве координат структуры число независимых переменных V , число неравных констант C и значение P одного из дискретных параметров (или их некоторого сочетания), можно оценить взаимную близость структур множества

$$\Delta R_{vcp} = |\Delta V \pm \Delta C| + |\Delta P| \text{ и/или } \Delta R_{vcp} = |\Delta V \pm \Delta P| + |\Delta C|$$

$$\text{и/или } \Delta R_{vcp} = |\Delta P \pm \Delta C| + |\Delta V|.$$

Предполагая, что последовательность переходов определяется мерой взаимной близости структур, получаем возможность выстроить кратчайшую цепочку переходов от некоторой исходной структуры к любой из структур данного множества и указать способы ее реализации за счет соответствующей последовательности изменения внешних параметров.

Принцип наименьшего действия позволяет подразделить непрерывные переходы между структурами на два рода по Ландау по признаку соблюдения (для переходов II-го рода) или нарушения (для переходов I-го рода) равенства $\Delta R_{\text{ср}} = |\Delta V|$. Разрешение структур в пределах одной ячейки пространства $V_{\text{СР}}$ достигается присоединением всем структурам множества идентификаторов, составляемых из обозначений состояния параметров типа $y(C)$ и значений (или обозначений) уровней дискретных параметров в единой для всего множества последовательности. В сокращенном виде можно ограничиться только значениями (или обозначениями) уровней дискретных параметров.

Введение оценок, основанных на возможностях пространства $V_{\text{СР}}$, позволяет увеличить точность принятия решений в компьютерных шахматных программах, что подтверждается статистикой совпадения спортивных результатов чемпионов мира по шахматам с указанными оценками, полученными с использованием аналитической программы ChesSyne и статистической программы ChesStat. Рассмотрение турниров Каспаров-Деер Blue 1996 и 1997 гг. показало, что не только отдельные партии, но турниры и даже творческий путь шахматистов в целом можно интерпретировать как цепочки фазовых переходов.

Список литературы

- [1] Mazo D.M. On the systematization of continuous transformations for structural types // Acta Crystallographica. V. A40 Suppl. 1984. P. C128-C129.
- [2] Mazo D.M. Packings and rearrangements of particles in crystallography, material science and technology // J. Bolvai mathematical society. Hungary, 1985. P. 317-318.
- [3] Ляхов Г.А., Мазо Д.М. Геометрический подход к определению последовательности переходов между кристаллическими фазами. Препринт ИОФ АН СССР. 1988. №89.

- [4] Ляхов Г.А., Мазо Д.М. Параметрическая оценка последовательности переходов между кристаллическими фазами. Препринт ИОФ АН СССР. 1989. №11.
- [5] Ляхов Г.А., Мазо Д.М. Параметрическая оценка последовательности переходов между кристаллическими фазами // Краткие сообщения по физике. Сб. ФИАН. 1989. 11, 17-20.
- [6] Mazo D.M. Parametrisation of the structures and formation of the exclusion principles for direction and kind of transitions in the field of scalar external parameters // Twelfth European Crystallographic Meeting. 1989. V. 1. P. 218.
- [7] Mazo D.M. Perfection and genealogy of structures, in particular, of crystal structures // Symmetry and structure. Budapest, 1989. V. 2. P. 369-371.
- [8] Mazo D.M. Synergetic aspects in symmetry evaluation // Symmetry: Culture and Science. 1995. V. 6. #4. P. 364-367.
- [9] Мазо Д.М. Фазовые переходы как следствие изменения числа степеней свободы элементов структуры // Сб. ИМАШ. 1998.
- [10] Mazo D.M., Girenko D.V., Burov V.V. Synergetics in games // Symmetry: Culture and Science. 1995. V. 6. #4. P. 661-663.
- [11] Mazo D.M. Human and computer decisions in the Kasparov vs Deep Blue tournaments // Proceedings of the Second International Conference «Mathematics & Design-98». San-Sebastian, Spain, 1-4 June 1998. P. 301-309.
- [12] Мазо Д. Партии и турниры «Каспаров - Деер Блю» как цепь фазовых переходов // Мой компьютерный журнал. М.: Компьютерный Лог, 1998. №1-2, 17-22.
- [13] Ландау Л.Д. ЖЭТФ. 7, 19. 1937.

- [14] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. М.: Наука, 1964.
- [15] Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975.
- [16] International Tables for Crystallography. A, IUC, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht/Boston/Lancaster, 1984.

Математические модели расчета цены опциона американского типа

А.Н. Моисеев

1. Введение

Динамический переход России к рыночной экономике предопределил создание и развитие рынка ценных бумаг, как одной из составляющих финансового рынка. Рынок ценных бумаг характеризуется большим количеством инвестиционных возможностей, значительным объемом информации о потенциальных вариантах выбора, что делает актуальной задачу выбора оптимального портфеля ценных бумаг из бесконечного числа возможных.

Анализ и прогноз поведения рынка ценных бумаг остается достаточно сложной задачей. Рынок подвержен значительным колебаниям курсовых стоимостей, которые во многом определяются спекулятивным настроением участников торгов. В связи с этим возросла роль рынка производных ценных бумаг (опционов, фьючерсов и др.) и увеличилась потребность в моделировании поведения инвестора в различного рода опционных и фьючерсных контрактах, так как перед инвесторами возникает необходимость защиты своих инвестиций от возможных потерь из-за неопределенности будущих стоимостей ценных бумаг. Опционом называется контракт, заключенный между двумя лицами, в соответствии с которым одно лицо предоставляет другому лицу право купить определенный актив по определенной цене в рамках определенного периода времени (опцион call) или продать определенный (базовый) актив по определенной цене в рамках определенного периода времени (опцион put). Лицо, кото-