УДК 620:519.876.5:004

И. И. МАРЧЕНКО, ас. НТУ «ХПИ»

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ МЕТОД ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТНЫХ АТОМОВ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Предлагается метод обработки данных, полученных в результате моделирования процессов формирования тонких пленок методом молекулярной динамики, для нахождения поверхностных атомов материла. Данный метод был протестирован для ряда типичных примеров и показал корректные результаты. Результаты работы предложенного метода могут быть использованы для нахождения плотности, шероховатости, микронапряжений и пр.

Ключевые слова: математическое моделирование, молекулярная динамика, вычислительный алгоритм.

Введение. В настоящее время для исследования эффектов, происходящих при осаждении наноразмерных плёнок, широкое распространение получил метод молекулярной динамики (МД) [1–2]. Так, авторами в работах [3–4] был сформулирован метод молекулярной динамики с цветным шумом, который позволяет адекватно моделировать процесс осаждения металлических пленок в широком диапазоне температур. Результатом работы МД является в заданные моменты времени координаты всех атомов моделируемого образца.

Однако для получения макроскопических характеристик материла, таких, как плотность, шероховатость, величина удельной поверхности и пр. необходимо определить атомы, формирующую поверхность материала. В случае, когда материал имеет сложную дефектную структуру, задача нахождения таких частиц становится нетривиальной. Поэтому целью данной работы было разработка методов компьютерного анализа структуры поверхностных слоев.

Алгоритм идентификации поверхностных атомов. Исходными данными для идентификации поверхностных атомов являются линейные размеры расчетной ячейки $\left(x_s, y_s, z_s\right)$ и координаты частиц $\mathbf{x}_s^{(i)}$, где $i = 1..N$ – порядковый номер частицы, N – количество частиц в моделируемом образце.

В данной работе в качестве критерия принадлежности атома поверхности предложено использовать значение электронной плотности вокруг данной частицы. Для нахождения ее значения следует осуществить переход от непрерывного пространства к дискретному. То есть расчетная ячейка разбивается на k блоков, каждый из которых имеет линейные размерами $\left(cell_x, cell_y, cell_z\right)$. Линейные размеры выбираются таким образом, чтобы в любой блок не могло попасть больше одного атома. Также необходимо, чтобы в расчетной ячейке помещалось целое количество блоков, то есть $x_s / cell_x$, $y_s / cell_y$ и $z_s / cell_z$ являлись натуральными числами.

В качестве структуры данных для организации блоков используется 3-хмерный массив $D_{i,j,k}$, где i, j, k – индексы в данном массиве, $i \in [0, x_s / cell_x]$, $i \in [0, y_s / cell_y]$, $k \in [0, z_s / cell_z]$. Вещественные координаты расчетной ячейки $D_{i,j,k}$ могут быть найдены при помощи следующего выражения:

$$coord(i, j, k) = \left(i \cdot \frac{x_s}{cell_x}, j \cdot \frac{y_s}{cell_y}, k \cdot \frac{z_s}{cell_z} \right). \quad (1)$$

Характеристикой ячейки $D_{i,j,k}$ выступает значение электронной плотности ρ, которая приходится на геометрические координаты данной ячейки. Поэтому массив D будем в дальнейшем называть картой электронной плотности.

Для нахождения значения ячейки $D_{i,j,k}$ карты электронной плотности используется формула

$$D_{i,j,k} = \sum_{n=1}^{N} \psi^{(n)}\left(| \mathbf{x}^{(n)} - coord(i, j, k) | \right). \quad (2)$$

где $\psi^{(n)}(r)$ – функция электронной плотности для частицы n, r – расстояние между рассматриваемой ячейкой и n-м атомом материала. Вокруг атома функция электронной плотности $\psi^{(n)}(r)$ может быть аппроксимирована Гауссианом

$$\psi^{(n)}(r) = \exp\left(-\beta r^2\right) \quad (3)$$

где β – константа, выбираемая таким образом, чтобы плотность существенно уменьшалась и была близко к нулю на расстоянии превышающем α – постоянную кристаллической решетки.

После заполнения карты электронной плотности D, в ней можно выделить ячейки, в которых значения суммарной электронной плотности меньше определенного значения ψ_ρ. Данная величина является минимальной, начиная с которой можно считать, что ячейка характеризует заполненную частицами область материала. Значение ψ_ρ для конкретного материала можно найти, взяв значение ячейки $D_{i,j,k}$, координаты которой соответствует геометрическому центру единичной вакансии.

Для хранения результатов анализа создается массив признаков C, размеры которого соответствуют массиву D. Значение ячеек массива C находятся по формуле

$$C_{i,j,k} = \begin{cases} 1, & D_{i,j,l} > \delta_\rho \\ 0, & D_{i,j,l} \le \delta_\rho \end{cases} \tag{3}$$

где «0» характеризует «пустоту», «1» обозначает, что ячейка принадлежит материалу.

Для нахождения ячеек, которые формируют поверхность материала, используется модификация рекурсивного алгоритма растровой заливки изображений [5].

Данный алгоритм был модифицирован для использования в трехмерном пространстве. В ячейку $C_{i,j,k}$ заносится значение «2», что соответствует «внешнему пустому пространству». Вокруг этой ячейки $D_{i,j,k}$ проверяются соседние $C_{i+\Delta i,j+\Delta j,k+\Delta k}$, $\Delta i = -1,0,1$, $\Delta j = -1,0,1$, $\Delta k = -1,0,1$. Если ячейка $C_{i+\Delta i,j+\Delta j,k+\Delta k}$ содержит характеристику «1», то она изменяет свое значение на «3». Характеристика «3» обозначает то, что данная ячейка участвует в формировании поверхности материала. Если же значение ячейки $C_{i+\Delta i,j+\Delta j,k+\Delta k}$ было равным «0», то идет рекурсивный вызов данной функции, но уже для ячейки $C_{i+\Delta i,j+\Delta j,k+\Delta k}$.

Процедура «раскраски» начинается с верней части массива, например, с ячейки $C_{0,0j,z_s/cell_z}$, так как данная ячейка будет всегда принадлежать внешнему пустому пространству. В результате получается 3-хмерный массив C, в котором содержится информация о пустотах и их границах.

Непосредственно для нахождения атомов, формирующих поверхность, используется следующий подход. Если ячейка $C_{i,j,k}$ имеет характеристику «3» и вклад в электронную плотность этой ячейки от атома n больше некоторого значения δ_ρ^*, то есть если

$$\left(C_{i,j,k} = 3\right) \wedge \left(\psi^{(n)}\left(\left|\,\mathbf{x}^{(n)} - coords(i,j,k)\right|\right) > \psi_\rho^*\right),$$

то считается, что атом участвует в формировании поверхности материала и добавляется в список атомов S. Пороговое значение электронной плотности ψ_ρ^* можно оценить, разделив ψ_ρ на количество первых соседей в кристаллической решетке для конкретного материала. Последовательно рассматривая для каждого атомы ячейки $C_{i,j,k}$, можно выделить все поверхностные атомы. Блок-схема данного алгоритма приведена на рис. 1.

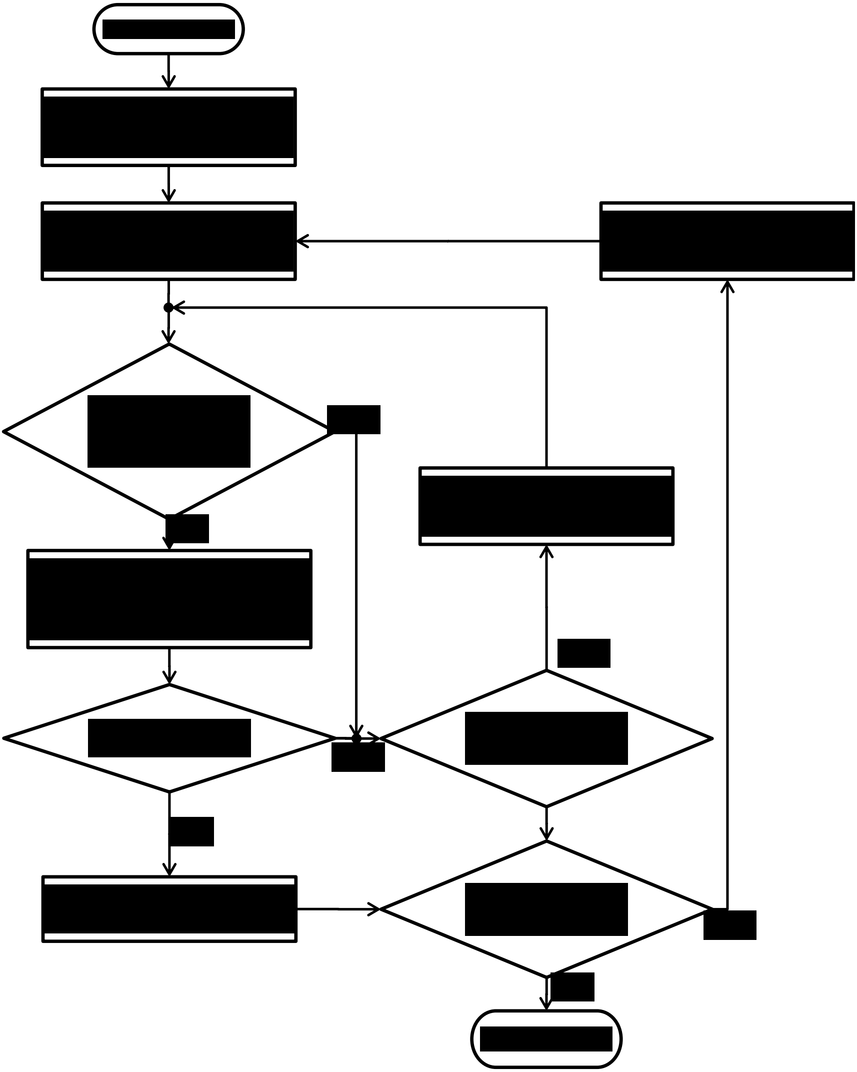

Рис. 1 – Блок-схема алгоритма нахождения поверхностных атомов

Верификация предложенного алгоритма. Разработанные алгоритмы были протестированы для набора типичных задач и для случаев со сложной геометрии поверхности, когда она неоднозначно определена по высоте. Так, на рис. 2 приведен срез мирокристаллита со сложной геометрией.

Для данного тестового примера была построена «карта плотности» (см. рис. 3, *а*), массив характеристик (см. рис. 3, *б*). Его обработка после нахождения поверхности приведена на рис. 3, *в*.

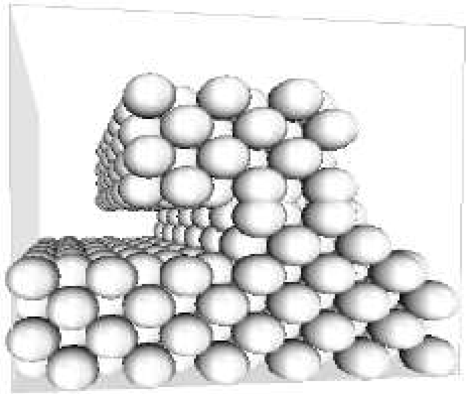

Рис. 2 – Срез материала с внутренней вакансией

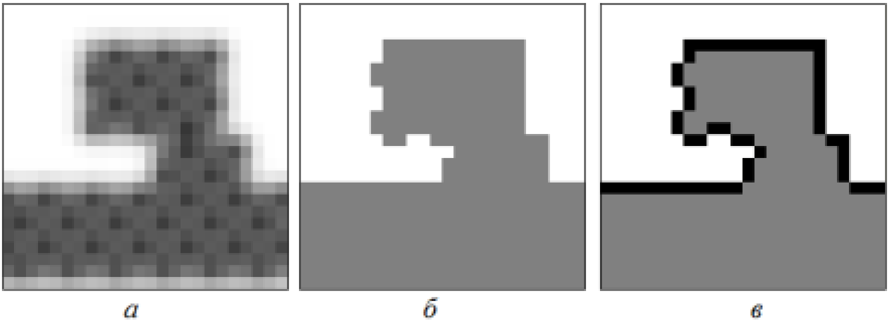

Рис. 3 – Этапы работы алгоритма обнаружения поверхности для сложных поверхностей: *а* – срез карты электронный плотности, *б* – срез массива характеристик до нахождения поверхности, *в* – обработанный массив характеристик

Далее были отобраны атомы, образующие поверхность материала. Результаты приведены на рис. 4. Как видно из рисунка, разработанные методы позволяют корректно находить поверхность материала со сложной геометрией. Тестовые расчеты для других примеров тоже дали корректные результаты.

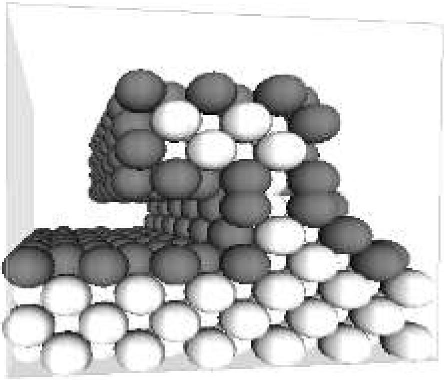

Рис. 4 – Атомы, формирующие поверхность и ограничивающие вакансию. Светлым цветом обозначены атомы внутри материала, серым – поверхностные атомы.

Выводы. Таким образом, в данной работе был предложен вычислительный метод, при помощи которого можно получать координаты частиц, которые формируют поверхность материала. Используя данный метод, могут быть найдены макрохарактеристики материала, такие как плотность, шероховатость, микронапряжения и пр.

Список литературы: **1.** *Haile J. M.* Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods / *J. M. Haile.* - Chichester : Wiley, 1992. – 489 p. **2.** *Rapaport D. C.* The Art of Molecular Dynamics Simulation / *D. C. Rapaport.* – Cambridge: Cambridge University Press, 1996. – 564 p. **3.** *Марченко И. Г.* Молекулярная динамика с квантовой статистикой для исследования динамических свойств металлов / *И. Г. Марченко, И. И. Марченко* // Вестник ХНУ. – 2010. – № 933 : Сер. «Ядра, частицы, поля». Вып. 4 (48). – С. 41 – 48. **4.** *Куценко А. С.* Компьютерная модель процесса низкотемпературного осаждения металлических пленок из атомно-ионных потоков / *А. С. Куценко, И. И. Марченко* // Вестник Нац. техн. ун-та "ХПИ" : сб. науч. тр. Темат. вып. : Системный анализ, управление и информационные технологии. – Харьков : НТУ "ХПИ". – 2013. – № 3 (977). – С. 153-158. **5.** *Павлидис Т.* Алгоритмы машинной графики и обработки изображений: Пер. с англ / *Т. Павлидис* – М. : Радио и связь, 1986. – 400 с.

Bibliography (transliterated): **1.** Haile, J. M. *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*. New York: Wiley, 1992. Print. **2.** Rapaport, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. New York: Cambridge UP., 1996. Print. **3.** Marchenko, I. G., and I. I. Marchenko. "Molekuljarnaja Dinamika S Kvantovoj Statistikoj Dlja Issledovanija Dinamicheskih Svojstv Metallov." *Vestnik Har'kovskogo Nacional'nogo Universiteta* Jadra, Chasticy, Polja 933.4(48) (2010): 41-48. Print. **4.** Kucenko, A. S., and I. I. Marchenko. "Komp'juternaja Model' Processa Nizkotemperaturnogo Osazhdenija Metallicheskih Plenok Iz Atomno-ionnyh Potokov." *Vestnik Nacional'nogo Universiteta "HPI"* 3.977 (2013): 153-58. Print. **5.** Pavlidis, T. *Algoritmy Mashinnoj Grafiki I Obrabotki Izobrazhenij*. Moscow: Radio I Svjaz', 1986. Print.

Поступила (received) 05.12.2014

УДК 658.506

О. Є. ГОЛОСКОКОВ, канд. техн. наук, професор НТУ «ХПІ»;
І. Д. КРЮКОВ, студент НТУ «ХПІ»

ПРОЦЕДУРА РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ УПРАВЛІННЯ СТРУКТУРОЮ ІНВЕСТИЦІЙНОГО ПОРТФЕЛЯ ФІЗИЧНОЇ ОСОБИ

Пропонується підхід до управління структурою інвестиційного портфеля фізичної особи, в рамках якого потрібно визначити оптимальну стратегію управління інвестиційним портфелем шляхом знаходження ризикової структури портфеля і розподілу капіталу між різними видами активів. Розглядається одна з основних портфельних теорій – модель Марковіца, яка є фундаментальною у теорії портфельних інвестицій.

Ключові слова: інвестиції, портфель, управління, активи, ризики, акції, банківські вклади, фізична особа, формування інвестиційного портфеля.

Вступ. На даний час портфельне інвестування в Україні для фізичної особи – це ще одна можливість зберегти та примножити свої кошти. Нажаль в нашій країні цей спосіб не має такої великої популярності, як наприклад, в США. Зазвичай це пов'язано з не цілком ясним розуміння всього процесу формування інвестиційного портфеля. Проблема купівлі цінних паперів теж грає свою роль. Стає питання вибору брокерської компанії, яка надає послуги на фондовому ринку. Загальна схема процесу інвестування зображена нижче:

Рис. 1 – Загальна схема процесу інвестування для фізичної особи

Але куди важливішим є питання про те, в які саме активи та скільки грошей потрібно інвестувати, щоб отримати задовільний прибуток. Потрібна інформація, яка підтвердить правильність дій інвестора та буде це робити протягом усього горизонту інвестування. Будь-який інвестор повинен прийняти чи відкинути інвестиційний проект, керуючись правилом чистої поточної вартості, незалежно від індивідуальних переваг.

Таким чином, задача управління структурою інвестиційного портфеля завжди є актуальною та являє собою ключову роль в початку та продовженні успішної роботи інвестора. Саме від управління залежить муйбутній прибуток, а як раз це і є основною метою інвестування для фізичної особи.

Опис об’єкта управління. Сутність проблеми управління структурою інвестиційного портфеля фізичної особи. Інвестиційний портфель являє собою цілеспрямовано сформовану, відповідно до певної інвестиційної стратегії, сукупність вкладень в інвестиційні об’єкти. Суть портфельного інвестування полягає в доданні сукупності об’єктів інвестування певних інвестиційних якостей, які недосяжні з позиції окремо взятого об’єкта, а можливі лише при їх поєднанні.

Будь-які інвестиційні рішення пов’язані з певними ризиками. Чим більше пропонована за цінним папером прибутковість, тим вищий ризик використання таких фінансових інструментів. Інвестиційний портфель, в якому питома вага кожного з видів активів не є домінуючим, називають диверсифікованим. Такий портфель володіє меншим ступенем ризикованості в порівнянні з окремо взятим цінним папером того ж порядку прибутковості.

На кінцевий фінансовий результат від інвестиційної діяльності впливають безліч випадкових факторів. Істотну роль займає управління інвестиційним портфелем, ключовою метою якого є забезпечення найбільш ефективних шляхів реалізації потенційної інвестиційної стратегії шляхом підбору найбільш ефективних і надійних інвестиційних вкладень [1]. У даній роботі розглядається інвестиційний портфель, що складається з ризикових вкладень (звичайних акцій) і безризикового вкладу (банківського вкладу або надійних облігацій).

Основні підходи до вирішення задачі управління інвестиційним портфелем. Відповідно до класичного підходу, при формуванні портфеля інвестор хоче мінімізувати ризик портфеля та отримати бажану дохідність (в двоїстої постановці – максимізувати прибутковість при обмеженому ризику). Задача оптимізації структури портфеля (визначення оптимальних часток вкладень у різні види активів) вирішується в статичній постановці (одноперіодна модель) та зводиться до вирішення задач квадратичного, стохастичного або лінійного програмування, в залежності від вибору функції ризику і способів обліку невизначеності. У результаті отримують, так звану, «короткозору» стратегію управління портфелем, яка залежить тільки від поточних значень параметрів, що характеризують активи портфеля, незалежно від того будуть змінюватися ці значення в майбутньому чи ні, а також не залежить від поточного значення капіталу портфеля і цін активів [2].

Другий підхід заснований на побудові динамічних моделей інвестиційного портфеля в безперервному часі і використанні методів теорії стохастичного керування для вибору оптимальної структури портфеля. Еволюція портфеля описується стохастичним диференціальним рівнянням в агрегованому вигляді (рівнянням для капіталу портфеля в цілому), в якості керуючих впливів беруться частки вкладень загального капіталу в той чи інший актив. Класична оптимізаційна проблема в динамічній постановці полягає у визначенні стратегії управління портфелем, яка максимізує деяку інтегральну функцію корисності, залежну від рівня поточного споживання і кінцевого багатства. Зазвичай, такий підхід призводить до чисельного рішення рівнянь динамічного програмування [3].

Постановка задачі. Управління структурою інвестиційного портфеля є однією з основних і найбільш важливих задач в управлінні фінансами та представляє як теоретичний, так і практичний інтерес [2].

З метою мінімізації ризиків, мається інвестиційний портфель, що складається з ризикових вкладів (звичайних акцій) і безризикового вкладу (банківського вкладу) [4]. Управління портфелем складається з двох етапів. Перший етап – знаходження структури ризикової частини портфеля. Другий – розподіл наявного капіталу між ризиковою частиною портфеля та безризиковою.

Структуру ризикової частини портфеля пропонується знаходити на основі портфельної теорії Марковіца, а саме, пошуку портфеля мінімального ризику. При розподілі капіталу між ризиковою та безризиковою частинами портфеля пропонується використовувати управління у формі зворотного зв'язку на основі принципу максимуму Понтрягіна [5].

Пропонується визначати стратегію управління портфелем шляхом розподілу капіталу між різними видами інвестицій так, щоб капітал реального портфеля з мінімально можливими відхиленнями (з мінімально можливим ризиком) слідував капіталу деякого обумовленого інвестором еталонного портфеля із заданою їм прибутковістю на всьому горизонті інвестування.

Інакше кажучи, задачею управління є відстеження бажаної траєкторії зростання капіталу, яка задається інвестором [4]. Наочна схема управління структурою інвестиційного портфеля фізичної особи наведена нижче:

Рис. 2 – Управління структурою інвестиційного портфеля

Знаходження структури ризикової частини інвестиційного портфеля фізичної особи на основі моделі Марковіца.

Початковою інформацією для вибору оптимального портфеля є n ризикових активів, історичний горизонт L, статистичні дані дохідності ризикових активів на історичному горизонті, вектор очікуваної прибутковості $\mu = (\mu_1, \ldots, \mu_n)$ та матриця коваріацій прибутковостей C, елементами якої є коефіцієнти кореляції між прибутковістю ризикових активів.

Елементи вектора очікуваної прибутковості знаходяться за формулою:

$$\mu_i = \frac{\sum_{s=1}^{L} R_s^i}{L}, i = \overline{1,n},$$

де R_s^i – прибутковість i-го ризикового активу в s-й проміжок часу;

L – історичний горизонт (довжина ковзного вікна);

Елементи матриці коваріацій розраховуються наступним чином:

$$C_{ij} = \frac{\sum_{s=1}^{L}\left(\left(R_s^i - M\left(R^i\right)\right)\cdot\left(R_s^j - M\left(R^j\right)\right)\right)}{L-1}, i, j = \overline{1,n},$$

де $M\left(R^i\right)$ та $M\left(R^j\right)$ – середні прибутковості i-го та j-го активів;

R_s^i та R_s^j – прибутковості i-го та j-го активів в s-й проміжок часу.

Ризикова структура портфеля представляється у вигляді вектора $x = \left(x_1, \ldots, x_n\right)^T$, де x_i – частка початкового капіталу, інвестованого в i-й актив. При цьому має виконуватися обмеження $\sum_{i=1}^{n} x_i = 1, x_i \geq 0, i = \overline{1,n}$.

Характеристиками структури ризикової частини інвестиційного портфеля є прибутковість і ризик:

$$E_p = \sum_{i=1}^{n} \mu_i x_i, \quad V_p = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} C_{ij} x_i x_j,$$

де C_{ij} – елемент матриці коваріацій, $i = \overline{1,n}$, $j = \overline{1,n}$;

Клас допустимих портфелів визначається додатковими обмеженнями. У моделі Марковіца розглядаються інвестиційні портфелі тільки з невід'ємними компонентами. Ефективна диверсифікація по Марковіцу передбачає таке об'єднання цінних паперів в портфель, яке при заданій прибутковості портфеля забезпечує найменший рівень ризику. Позначимо через x_i – частку вкладень в ризиковий цінний папір i-го виду ($i = 1,...,n$), n – кількість паперів у портфелі [6]. Тоді задачу вибору оптимальної структури ризикової частини інвестиційного портфеля можна сформулювати наступним чином: знайти вектор $X = \left(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_n\right)^T$, де x_i є вкладом в цінний папір i-го виду, що мінімізує дисперсію портфеля:

$$V_p = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} C_{ij} x_i x_j \to \min,$$

за умови, що значення очікуваної прибутковості дорівнює $\sum_{i=1}^{n} \mu_i x_i = r_0$, де r_0 є вказане інвестором бажане значення прибутковості портфеля, та сума часток всіх активів, що входять в портфель, повинна дорівнювати одиниці. Таким чином, задача Марковіца представляє собою задачу на умовний екстремум.

Формалізуємо задачу Марковіца в матричній формі: знайти вектор X, такий, що $V_p = X^T CX \to \min$ при обмеженнях $\mu^T X = r_0$ та $I^T X = 1$. Тут:

- C – коваріаційна матриця розмірністю $n \times n$;
- μ – вектор-стовпець очікуваної прибутковості розмірністю $n \times 1$;
- I – одиничний вектор-стовпець розмірністю $n \times 1$;
- X – вектор-стовпець невідомих часток розмірністю $n \times 1$.

Складемо функцію Лагранжа задачі, яка являє собою суму цільової функції задачі і скалярного добутку вектора множників Лагранжа на вектор різниці між функціями обмежень і постійними обмеженнями. Умовний екстремум задачі Марковіца збігається з безумовним екстремумом спеціально складеної функції Лагранжа. Множники Лагранжа визначають ступінь чутливості оптимального значення цільової функції до змін констант обмежень. Функція Лагранжа задачі має вигляд:

$$L(X, \lambda_1, \lambda_2) = X^T CX + \lambda_1 \left(\mu^T X - r_0\right) + \lambda_2 \left(I^T X - 1\right),$$

де $X^T CX$ – цільова функція (дисперсія порт.), екстремум якої визначається;

$\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)^T$ – вектор-стовпець множників Лагранжа.

Для визначення безумовного екстремуму функції Лагранжа, її треба продіференцювати по всіх аргументах та прирівняти похідні нулю. Отриману систему рівнянь запишемо в матричній формі та покоординатно:

$$\begin{pmatrix} 2C_{11} & 2C_{12} & \dots & 2C_{1n} & \mu_1 & 1 \\ 2C_{21} & 2C_{22} & \dots & 2C_{2n} & \mu_2 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 2C_{n1} & 2C_{n2} & \dots & 2C_{nn} & \mu_n & 1 \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_n & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ r_0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Матриця отриманої системи має размірність $(n + 2) \times (n + 2)$ та складається з подматриці ризику, розмірністю $n \times n$; n-мірного стовпця та рядка очікуваних прибутковостей активів; n-мірного одиничного стовпця та рядка; нульової матриці розмірністю 2×2.

Якщо позначити матрицю отриманої системи через $\mathbf{A}$ (матриця «ризик-прибутковість»), вектор-стовпець невідомих через $\mathbf{X} = (X, \lambda)^T$, вектор правої частини через $\mathbf{B}$, то треба вирішити систему $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$, звідки $\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$, де $\mathbf{A}^{-1}$ – матриця, обернена по відношенню до квадратної матриці $\mathbf{A}$.

Дане рішення визначає структуру оптимального портфеля з n видів ризикових цінних паперів, яка реалізує заданий рівень очікуваної прибутковості при мінімальній дисперсії. Після знаходження структури x ризикової частини потрфеля, n ризикових активів можна замінити одним еквівалентним активом з очікуваною прибутковістю $x^T \mu$ та ризиком $x^T Cx$, а потім вирішувати задачу поділу капіталу між еквівалентним ризиковим активом і безризиковим.

Поділ капіталу між ризиковою та безризиковою частинами інвестиційного портфеля за допомогою принципа максимуму Понтрягіна.

Позначимо через $W(t)$ капітал інвестиційного портфеля в момент t. У кожен момент часу капітал може бути розподілений таким чином: частка капіталу $u(t)$ вкладається в ризиковий актив, частка $1-u(t)$ – в безризиковий актив. Завжди $0 \le u(t) \le 1$. Капітал портфеля $W(t)$ [7] задовольняє рівнянню:

$$dW(t) = h(u)W(t)dt + \sigma u(t)W(t)d\omega(t)\,,\ W(0) = W_0\,,$$

де W_0 – початковий капітал;

$h(u)$ – тем росту капіталу, дорівнює $(a - r)u + r$;

a – середнє значення прибутковості ризикового активу s;

σ – волатильність;

$\omega(t)$ – винерівський процес.

Таке рівняння є рівнянням квазілінійного типу, для яких характерно те, що рівняння для перших двох моментів утворюють замкнуту систему [8]. Перші два початкових момента процесу $W(t)$, позначені як $m(t)$ та $M(t)$, задовольняють рівнянням:

$$\dot{m} = h(u)\,,\ m(0) = W_0 \text{ та } \dot{M} = g(u)M\,,\ M(0) = W_0^2\,,$$

Тут $g(u) = 2h(u) + \sigma^2 u^2$ [9].

Якщо управління $u(t)$ задано, то:

$$m(t) = W_0 \exp\int_0^t h(u)dt \text{ та } M(t) = W_0^2 \exp\int_0^t g(u)dt = m^2(t)\exp\sigma^2\int_0^t u^2 dt\,.$$

Знайдемо таку функцію $u(t)$, при котрій значення $m(T)$ максимально. Тут T – заданий момент часу. Темп зростання середнього капіталу визначається функцією $h(u)$. Управління $u(t)$ дорівнює 0, якщо $r > a$, та 1, якщо $r < a$.

Можлива велика дисперсія значення $W(T)$. Щоб її зменшити при великому $W(t)$ будемо обирати управління $u(t)$ достатньо малим, щоб зменшити випадкову складову в рівнянні капіталу портфеля. Однак при малому a управління $u(t)$ має давати прийнятний результат. На інтервалі часу $[0,\ T]$ треба знайти таку функцію $u(t)$, при котрій є максимальним значення:

$$J = E\{(W(T) - f^*)\} = M(T) - 2m(T)f^* + f^{*2},$$

де $E\{\}$ – математичне очікування;

f^* – бажане значення кінцевого капіталу $W(T)$.

Скористаємося принципом максимуму Л.С. Понтрягіна [9]. Введемо допоміжні змінні $p_1(t)$ та $p_2(t)$ і складемо функцію Гамільтона:

$$H(m, M, p_1, p_2, u) = p_1 h(u) m + p_2 g(u) M = H_0 + H_1 u + H_2 u^2,$$

$$H_0 = rs,\ H_1 = (a - r)s,\ H_2 = \sigma^2 p_2 M,\ s = p_1 m + 2 p_2 M.$$

Значення змінних $p_1(t)$ та $p_2(t)$ дорівнюють відповідно:

$$p_1(t) = 2f^* \exp\int_t^T h(u)dt \text{ та } p_2(t) = -\exp\int_t^T g(u)dt.$$

Якщо не враховувати обмеження $0 \le u(t) \le 1$, то максимум функції H по u досягається при:

$$u^*(t) = -\frac{H_1}{2H_2} = -\left(\frac{a-r}{\sigma^2}\right)\frac{s(t)}{2p_1(t)M(t)} = -\left(\frac{a-r}{\sigma^2}\right)\left(\frac{p_1(t)m(t)}{2p_2(t)M(t)} + 1\right).$$

З урахуванням даного обмеження управління $u(t)$ дорівнює 0 при $u^*(t) \le 0$, $u^*(t)$ при $0 < u^*(t) < 1$ та 1 при $1 \le u^*(t)$. Управління у формі зворотного зв'язку можна побудувати наступним чином. Значення змінних $m(t)$ та $M(t)$ не вимірюються і не відомі, тому їх можна замінити на поточні значення $W(t)$ та $W^2(t)$, які вимірюються в кожен момент часу. Отримуємо:

$$u^*(t) = (a-r)/\sigma^2\,[q(t)/W(t) - 1],\ q(t) = -\frac{p_1(t)}{2p_2(t)} = f^* \exp\left\{-\int_t^T \left(h(u) + \sigma^2 u^2\right)dt\right\}.$$

Останній вираз і визначає закон управління у формі зворотнього зв’язку.

Розробка програмного забезпечення для вирішення поставленої задачі. Вирішення поставленої задачі являє собою трудомісткий з точки зору обчислень процес. Отже, така задача не може бути вирішена без використання сучасних інформаційних технологій. Для вирішення поставленої задачі необхідно розробити базу даних, програмні засоби для роботи з розробленою базою даних, та програмні засоби, що реалізують відповідне математичне та алгоритмічне забезпечення. Базу даних було реалізовано згідно з розробленою моделлю даних (рис. 3).

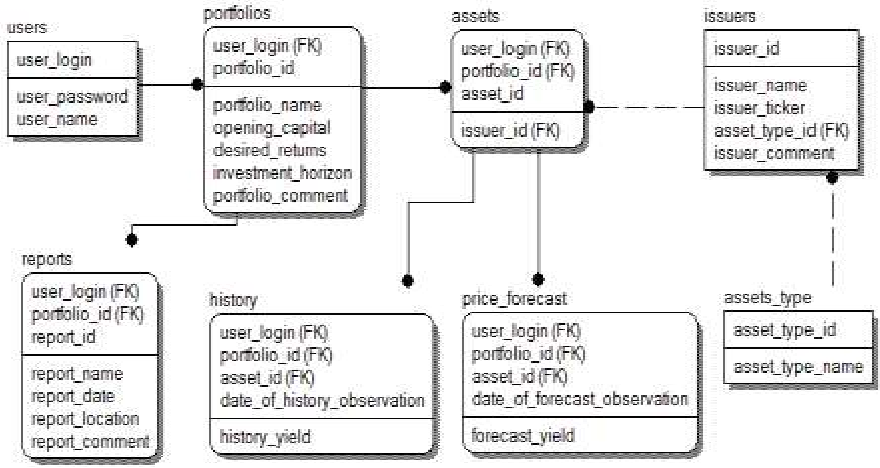

Рис. 3 – Модель даних

Для реалізації бази даних було використано систему управління базами даних MySQL. Програмне забезпечення розроблено за допомогою мови програмування PHP та веб-серверу Apache. Основною перевагою використання розробленого веб-додатку є відсутність необхідності встановлення додаткового клієнтського програмного забезпечення на комп’ютер користувача – достатньо мати звичайний веб-браузер.

Контрольні розрахунки та аналіз отриманих результатів.

Розглядається задача управління структурою інвестиційного портфеля з початковим та бажаним капіталом 10000 у.о. та 13000 у.о. відповідно. До портфеля входять банківський вклад з прибутковістю 16% та три ризикові активи, серед яких акції компаній «Донбассэнерго», «Райффайзен Банк Аваль», «Центрэнерго». Історичний горизонт (довжина ковзного вікна) – 35 торгових днів. Інвестиційний період – 1 рік (252 торгові дні).

Нижче наведена динаміка цін акцій «Донбассэнерго», «Райффайзен Банк Аваль» та «Центрэнерго» протягом року.

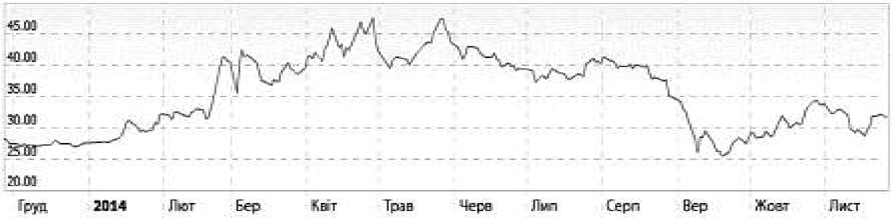

Рис. 4 – Динаміка ціни акцій «Донбассэнерго»

Рис. 5 – Динаміка ціни акцій «Райффайзен Банк Аваль»

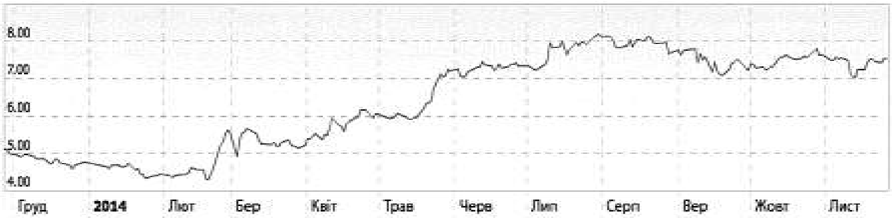

Рис. 6 – Динаміка ціни акцій «Центрэнерго»

Структура ризикової частини портфеля знаходиться на основі моделі Марковіца шляхом мінімізації дисперсії (ризику) портфеля. Для поділу капіталу між ризиковою та безризиковою частинами інвестиційного портфеля застосовується принцип максимуму Понтрягіна. Нижче наведена динаміка зміни величини капіталу інвестиційного портфеля протягом року.

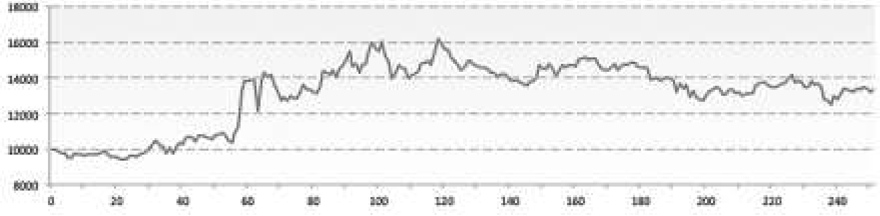

Рис. 7 – Динаміка капіталу інвестиційного портфеля протягом року

Висновки. У представленій роботі було розглянуто процедуру рішення задачі управління структурою інвестиційного портфеля фізичної особи. Для вирішення поставленої задачі було розроблено математичне та алгоритмічне забезпечення, програмні засоби для його реалізації. Розглянута одна з основних портфельних теорій – модель Марковіца, яка є фундаментальною у теорії портфельних інвестицій і застосовується при знаходженні структури ризикової частини портфеля. При розподілі капіталу між ризикової і безризиковою частинами портфеля використовується управління у формі зворотного зв'язку на основі принципу максимуму Понтрягіна. За допомогою розробленого програмного забезпечення були проведені контрольні розрахунки задачі управління структурою інвестиційного портфеля фізичної особи. На основі аналізу результатів розрахунків, отриманих за допомогою розробленого програмного забезпечення, були сформовані рекомендації щодо дій інвестора протягом усього горизонту інвестування.

Список літератури: **1.** *Игонина Л. Л.* Инвестиции. – М. : Экономисть, 2005. – 478 с. **2.** *Герасимов Е. С.* Многомерные динамические сетевые модели управления инвестиционным портфелем. – Томск : Изд-во Томск. гос. ун-та, 2005. – 210 с. **3.** *Домбровский В. В.* Динамическое управление инвестиционным портфелем в пространстве состояний с использованием рыночной модели / *В. В. Домбровский, Д. В. Домбровский*. – Томск : Изд-во Томск. гос. ун-та, 2003. – 45 с. **4.** *Домбровский В. В.* Динамическая оптимизация инвестиционного портфеля при ограничениях на объемы вложений в финансовые активы / *В. В. Домбровский, Д. В. Домбровский, Е. А. Ляшенко*. – Томск : Изд-во Томск. гос. ун-та, 2008. – 25 с. **5.** *Параев Ю. И.* Исследование инвестиционных стратегий управления портфелем ценных бумаг / *Ю. И. Параев, С. А. Цветницкая*. – Томск : Изд-во Томск. гос. ун-та, 2009. – 34 с. **6.** *Касимов Ю. Ф.* Введение в теорию оптимального портфеля ценных бумаг. – М. : Анкил, 2005. – 144 с. **7.** *Merton R.* Continuous-time finance. – Cambr. MA. Blackwell, 1990. – 700 c. **8.** *Параев Ю. И.* Введение в статистическую динамику процессов управления и фильтрации. – М. : Сов. радио, 1976. – 178 с. **9.** *Параев Ю. И.* Управление инвестиционным портфелем / *Ю. И. Параев, С. А. Цветницкая*. – Томск : Изд-во Томск. гос. ун-та, 2004. – 77 с.

Bibliography (transliterated): **1.** Igonina, L. L. *Investitsii.* Moscow: Ekonomist', 2005. Print. **2.** Gerasimov, E. S. *Mnogomernyie dinamicheskie setevyie modeli upravleniya investitsionnyim portfelem.* Tomsk: Publishing of Tomsk State Univ., 2005. Print. **3.** Dombrovskiy, V. V., and D. V. Dombrovskiy. *Dinamicheskoe upravlenie investitsionnyim portfelem v prostranstve sostoyaniy s ispolzovaniem ryinochnoy modeli.* Tomsk: Publishing of Tomsk State Univ., 2003. Print. **4.** Dombrovskiy, V. V., D. V. Dombrovskiy, and E. A. Lyashenko. *Dinamicheskaya optimizatsiya investitsionnogo portfelya pri ogranicheniyah na ob'emyi vlozheniy v finansovyie aktivyi*. Tomsk: Publishing of Tomsk State Univ., 2008. Print. **5.** Paraev, Y. I., and S. A. Tsvetnitskaya. *Issledovanie investitsionnyih strategiy upravleniya portfelem tsennyih bumag*. Tomsk: Publishing of Tomsk State Univ., 2009. Print. **6.** Kasimov, Y. F. *Vvedenie v teoriyu optimalnogo portfelya tsennyih bumag*. Moscow: Ankil, 2005. Print. **7.** Merton, R. *Continuous-time finance.* Cambr. MA. Blackwell, 1990. Print. **8.** Paraev, Y. I. *Vvedenie v statisticheskuyu dinamiku protsessov upravleniya i filtratsii*. Moscow: Sov. radio, 1976. Print. **9.** Paraev, Y. I., and S. A. Tsvetnitskaya. *Upravlenie investitsionnyim portfelem.* Tomsk: Publishing of Tomsk State Univ., 2004. Print.

Надійшла (received) 27.11.2014