

Казанский государственный университет
Кафедра радиоастрономии

Тептин Г.М., Хуторова О.Г. , Журавлёв А.А.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Казань – 2009

Печатается по решению Редакционно-издательского совета
физического факультета

УДК 681.324

Тептин Г.М., Хуторова О.Г. Журавлёв А.А., Математическое моделирование.
Учебно-методическое пособие. Казань. 2009. 19 с.

Настоящее Учебно-методическое пособие предназначено для использования при выполнении практических работ по курсу «Информатика» студентами, аспирантами и слушателями ФПК естественно-научных специальностей.

Материал и задания представлены в удобном для понимания виде и порядке, соответствующем последовательности выполнения практических работ по курсу «Информатика» студентами 1-го и 2-го курса физического факультета КГУ.

Рецензент: зам. директора НИИММ КГУ д.ф.-м.н. Храмченков М.Г.

© Физический факультет Казанского
государственного университета, 2009.
© Журавлёв А.А., Тептин Г.М.,
Хуторова О.Г., 2007.

Предисловие

Познание закономерностей в физике, радиофизике и других науках всегда развивалось с помощью экспериментальных и теоретических методов. После появления компьютеров и другой вычислительной техники появились прекрасные возможности применить для этих целей методы математического моделирования, которые бурно развиваются в последние десятилетия, особенно в связи с использованием для этих целей высокопроизводительных параллельных вычислений на кластерных и других системах.

Виды моделирования

Модель - это такой материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе изучения замещает объект-оригинал, сохраняя некоторые важные для данного исследования типичные его черты.

Моделирование - метод научного познания, при котором исследуемый объект или система замещаются другими, более простыми объектом или системой, результат исследования которых позволяет получить новые интересующие нас знания о реальном объекте или системе.

Хорошо построенная модель, как правило, доступнее для исследования, нежели реальный объект. Более того, некоторые объекты вообще не могут быть изучены непосредственным образом: недопустимы, например, эксперименты с экономикой страны в познавательных целях; принципиально неосуществимы эксперименты с прошлым или, скажем, с планетами Солнечной системы и т.п.

Различают *материальное и идеальное* моделирование.

Материальное моделирование, в свою очередь, делится на физическое и аналоговое моделирование.

Физическим принято называть моделирование, при котором реальному объекту противопоставляется его увеличенная или уменьшенная копия, допускающая исследование (как правило, в лабораторных условиях) с помощью последующего перенесения свойств изучаемых процессов и явлений с модели на объект на основе теории подобия.

Примеры: в астрономии - планетарий, в архитектуре - макеты зданий, в самолетостроении - модели летательных аппаратов и т.п.

Аналоговое моделирование основано на аналогии процессов и явлений, имеющих различную физическую природу, но одинаково описываемых формально (одними и теми же математическими уравнениями).

Основным типом идеального моделирования является **математическое** моделирование, при котором исследование объекта осуществляется посредством модели, сформулированной на языке математики. Классическим примером математического моделирования является описание и исследование законов механики Ньютона средствами математики.

В зависимости от степени замещения оригинала различают физическое, математическое и полунатурное моделирование (аэродинамическая модель самолета, полная замена математическим аппаратом и частичная замена - реаль-

ные датчики и математическая модель системы регулирования температуры, давления).

Наиболее эффективным является математическое моделирование по следующим причинам:

- ✓ Возможность интенсификации процесса исследований и разработки систем.
- ✓ Возможность решения задач, не поддающихся решению традиционными методами.
- ✓ Высокая экономическая рентабельность.

Существуют 4 типа математических моделей, соответствующих различным проблемам исследования:

1. Если система разрабатывается и известен лишь предполагаемый алгоритм ее работы, то строится *расчетная* модель.

2. Если система уже существует, структура и алгоритм ее работы известны и требуется исследовать ее поведение в заданных условиях, то есть дать прогноз ее работы, то строится *прогностическая* модель.

3. Если система уже существует, ее структура и алгоритм работы известен, но требуется изменить ее параметры так, чтобы улучшить систему по какому-либо показателю: производительности, надежности, весу и т.д., то строится *оптимизационная* модель.

4. Если система уже существует, но ее структура и алгоритм неизвестны, а требуется дать прогноз ее работы в заданных условиях, то строится *идентификационная* модель.

Этапы математического моделирования

Компьютерное моделирование начинается как обычно с объекта изучения, в качестве которого могут выступать: явления, процесс, предметная область, жизненные ситуации, задачи. После определения объекта изучения строится модель, процесс построения которой состоит из последовательно выполняемых следующих этапов:

1. Постановка задачи – определяется цель, исходная ситуация, тип модели
2. Системный анализ - описание системы. Выделяются отдельные элементы системы, численно определяются их параметры. Математически или логически описываются соотношения между элементами.
3. Построение математической модели:
 - а) Разделение (если это возможно) процесса функционирования системы на этапы, разделенные во времени и построение моделей для каждого этапа.
 - б) Разделение системы на каждом этапе на отдельные блоки (декомпозиция системы) с построением моделей различных блоков.
 - в) Спецификация блочных моделей, т.е. расчет или оптимизация по одному или нескольким параметрам при предположении об идеальном значении остальных параметров.
 - д) Разбиение диапазона входных воздействий и реакции системы на поддиапазоны, в пределах которых свойства системы можно считать постоянными или линейно меняющимися.

3) Выбор математического аппарата. Математический аппарат, применяемый при построении модели, зависит от типа модели. Так для алгоритмизации расчетных моделей используются аналитические формулы любой сложности, системы линейных или дифференциальных уравнений (законы Кирхгофа, метод узловых токов и контурных напряжений).

Для алгоритмизации прогностических моделей используются известные алгоритмы расчетных моделей, с выделением исходных данных и прогнозируемых параметров системы.

Для математического описания оптимизационных моделей применяются специальные математические методы - методы оптимизации.

3. Третий этап - реализация построенного алгоритма модели на ЭВМ.

4. Исследование результатов численного моделирования, оценка их адекватности, и общей пригодности модели для использования.

5. Интерпретация результатов моделирования и принятие решения об использовании математической модели или необходимости ее развития. Здесь определяется жизненный цикл модели и необходимость актуализаций модели, то есть изменения ее параметров в связи с изменением условия функционирования.

Методы оптимизации

Люди, приступая к осуществлению своих мероприятий, оценивают над их последствия и принимают решения, выбирая тем или другим образом зависящие от них параметры - способы организации мероприятий и процессов. В теории принятия решений используются оптимизационные модели и решаются задачи оптимизации.

Цель оптимизации - улучшение некоторого показателя моделируемой системы или процесса путем подбора условий протекания процесса или выбора некоторых параметров системы.

За критерий оптимальности принимается некоторая функция $F(x)$, называемая целевой функцией. Целевая функция аналитически выражает зависимость оптимизируемого показателя от некоторых параметров x , значения которых можно изменять, называемых управляемыми параметрами

$$x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Управляемые параметры x_i являются независимыми друг от друга и в процессе оптимизации могут изменяться в известных пределах (допустимой области) D_x . Аналитически область допустимых значений может задаваться аналитически в виде набора функций

$$\Psi_k(x_1, \dots, x_n) = 0$$

В общем виде математическую задачу оптимизации можно сформулировать следующим образом:

Минимизировать (максимизировать) целевую функцию с учетом ограничений на управляемые переменные.

Под минимизацией (максимизацией) функции n переменных $F(x)=F(x_1, \dots, x_n)$ на заданном множестве D_x понимается определение глобального минимума (максимума) этой функции на заданном множестве D_x .

Допустимая область изменения управляемых параметров не всегда выпукла и может быть неодносвязанной. Часто невозможно аналитическое решение системы нелинейных ограничений, и аналитическое нахождение точки экстремума сложной нелинейной целевой функций.

Максимизация целевой функции ($F(x) \rightarrow \max$) эквивалента минимизации противоположной величины ($-F(x) \rightarrow \min$), поэтому можно рассматривать только задачи минимизации.

Не существует универсальных, методов решения задач нелинейной оптимизации, но развито большое количество методов, применяемых для решения задач оптимизации одномерных унимодальных, многомерных унимодальных, одномерных полимодальных или многомерных полимодальных целевых функций.

Численные методы решения задач одномерной оптимизации

Задачи одномерной минимизации представляют собой простейшую математическую модель оптимизации, в которой целевая функция зависит от одной переменной, а допустимым множеством является отрезок вещественной оси:

$$F(x) \rightarrow \min, \quad x \text{ принадлежит } [a, b].$$

К математическим задачам одномерной минимизации приводят прикладные задачи оптимизации с одной управляемой переменной. Кроме того, необходимость в минимизации функций одной переменной возникает при реализации некоторых методов решения более сложных задач оптимизации.

Для решения задачи минимизации функции $F(x)$ на отрезке $[A, B]$ на практике, как правило, применяют приближенные методы. Они позволяют найти решения этой задачи с необходимой точностью в результате определения конечного числа значений функции $F(x)$ и ее производных в некоторых точках отрезка $[A, B]$. Методы, использующие только значения функции и не требующие вычисления ее производных, называются прямыми методами минимизации.

Большим достоинством прямых методов является то, что от целевой функции не требуется дифференцируемости и, более того, она может быть не задана в аналитическом виде. Единственное, на чем основаны алгоритмы прямых методов минимизации, это возможность определения значений $F(x)$ в заданных точках.

Самым слабым требованием на функцию $F(x)$, позволяющим использовать эти методы, является ее унимодальность (наличие одного минимума в области допустимых значений). Поэтому далее будем считать функцию $F(x)$ унимодальной на отрезке $[A, B]$.

Метод перебора

Метод перебора или равномерного поиска является простейшим из прямых методов минимизации и состоит в следующем.

Разобьем отрезок $[A, B]$ на n равных частей точками деления:

$$x_i = A + i \cdot (B - A) / n, \quad i = 0, \dots, n$$

Вычислив значения $F(x)$ в точках x_i , путем сравнения найдем точку x_m , где m - это число от 0 до n , такую, что

$$F(x_m) = \min F(x_i) \text{ для всех } i \text{ от } 0 \text{ до } n.$$

Погрешность определения точки минимума x_m функции $F(x)$ методом перебора не превосходит величины $\varepsilon = (B - A) / n$.

Метод дихотомии

Метод применяется для нахождения экстремума-максимума или экстремума-минимума нелинейных одномерных унимодальных целевых функций.

Суть метода в следующем. Пусть целевая функция $F(x)$ задана на интервале $A \leq x \leq B$. Отрезок на каждом этапе делится пополам. За первые две поисковые точки принимаются

$$x_1 = \frac{A+B}{2} - \varepsilon, \quad x_2 = \frac{A+B}{2} + \varepsilon, \text{ где } \varepsilon \text{ величина, меньшая}$$

половины требуемой абсолютной погрешности решения. Вычисляя значения целевой функции $F(x)$ в точках x_1, x_2 уточняется направление поиска. Если отыскивается экстремум-минимум и $F(x_1) < F(x_2)$, то смещается правая граница первоначального интервала неопределенности $[B-A]$, т.е. полагается $B = x_2$, если $F(x_1) > F(x_2)$, то смещается левая граница $A = x_1$. Если новый интервал неопределенности $[B-A]$ больше заданной погрешности решения ε , то деление пополам продолжается. Если $B-A \leq \varepsilon$, то решение получено $x^* = \frac{A+B}{2}$,

$F(x) = F(x^*)$.

Метод Фибоначчи

Метод дихотомии, позволяя последовательно сокращать интервал неопределенности, требует вычисления двух значений обычно сложной целевой функции или постановки двух поисковых экспериментов при оптимизации идентификационной модели. Этот недостаток отсутствует в поиске Фибоначчи. Метод Фибоначчи основан на использовании последовательности чисел Фибоначчи для формирования уменьшающихся интервалов неопределенности, в пределах которых находится решение. Последовательность чисел Фибоначчи задается рекуррентной формулой

$$N_n = N_{n-1} + N_{n-2}, \text{ при } N_1 = N_2 = 1.$$

Первоначальный интервал неопределенности $[B-A]$ принимается пропорциональным некоторому числу Фибоначчи F_n , определенному в зависимости

от требуемой абсолютной погрешности решения ε как первое число Фибоначчи, большее $(B-A)/\varepsilon$, т.е.

$$N_n > (B-A)/\varepsilon.$$

Координаты первых двух поисковых точек x_1, x_2 делят отрезок $[B-A]$ на участки, пропорциональные N_{n-2} и N_{n-1} , т.е. $x_1 = A + \frac{N_{n-2}}{N_n}(B-A), x_2 = A + \frac{N_{n-1}}{N_n}(B-A)$.

Если измеренное или вычисленное значение целевой функции $F(x_1) < F(x_2)$ при необходимости отыскания экстремума-минимума, то смещается правая граница первоначального интервала неопределенности, т.е. $B = x_2$. Если $F(x_1) > F(x_2)$, то смещается левая граница, т.е. принимается $A = x_1$. Тогда длина нового интервала неопределенности становится пропорциональной N_{n-1} , то есть равной $\frac{F_{n-1}}{F_n}$

части первоначального интервала неопределенности. После k -ой итерации длина k -го интервала неопределенности становится равной $\frac{N_{n-k}}{N_n}$ части первоначального интервала неопределенности, а поисковые точки в нем будут иметь координаты $x_1^{(k)} = A + \frac{N_{n-k-2}(B-A)}{N_{n-k}}, x_2^{(k)} = A + \frac{N_{n-k-1}(B-A)}{N_{n-k}}$ Число итераций

m необходимых для получения решения с заданной абсолютной погрешности ε известно заранее и равно $n-2$, так как $N_1=N_2=1$.

При каждой итерации в качестве одной из поисковых точек всегда оказывается одна из поисковых точек предыдущей итерации, значение целевой функции для которой уже вычислено или измерено. Следовательно, поиск Фибоначчи вдвое сокращает число поисковых экспериментов или вычислений целевой функции.

Оптимизация полимодальных одномерных целевых функций.

Метод ломаных

Метод ломаных разработан для оптимизации одномерных полимодальных функций. Функция $J(U)$ называется липшицируемой на $[a, b]$, если существует такое число L (константа Липшица), что для любых x, y из $[a, b]$ верно неравенство $|f(x)-f(y)| \leq L \cdot |x-y|$. Т.е. постоянная Липшица - положительное число, равное или большее модуля максимального значения производной $J'(U)$ на $[a, b]$.

Необходимо найти значение управляемого параметра U , доставляющее глобальный экстремум-минимум нелинейной целевой функции с заданной абсолютной погрешностью при заданных ограничениях на управляемый параметр $A \leq U \leq B$. Выбирается произвольно начальная поисковая точка $U_0 \in [A, B]$ и составляется ломаная функция

$$g(U, U_0) = J(U_0) - L(U - U_0).$$

Очевидно, функция $g(U, U_0)$ состоит из двух отрезков и расположена ниже $J(U)$, только в точке $U = U_0$, т.е. $g(U_0) = J(U_0)$. Затем вводится ломанная огибающая по максимуму $P_0(U_1) = g(U, U_0)$. Следующая поисковая точка U_1 определяется условием $P_0(U_1) = \min P_0(U)$. Для точки U_1 опять рассматривается ломаная $g(U, U_1) = J(U_1) - L|U - U_1|$, и вводится огибающая по максимуму $P_1(U) = \max \{P_0(U), g(U, U_1)\}$ (ломаная FEСВ на рис.). Следующая поисковая точка U_2 определяется опять по условию $P_1(U_2) = \min P_1(U)$. Однако, это будет точка пересечения $P_0(U) = g(U, U_0)$ и $g(U, U_1)$. Значение U_2 , следовательно, определяется из уравнения $g(U, U_0) = g(U, U_1)$ и равно

$$U_2 = \frac{J(U_0) - J(U_1)}{2L} + \frac{U_0 + U_1}{2},$$

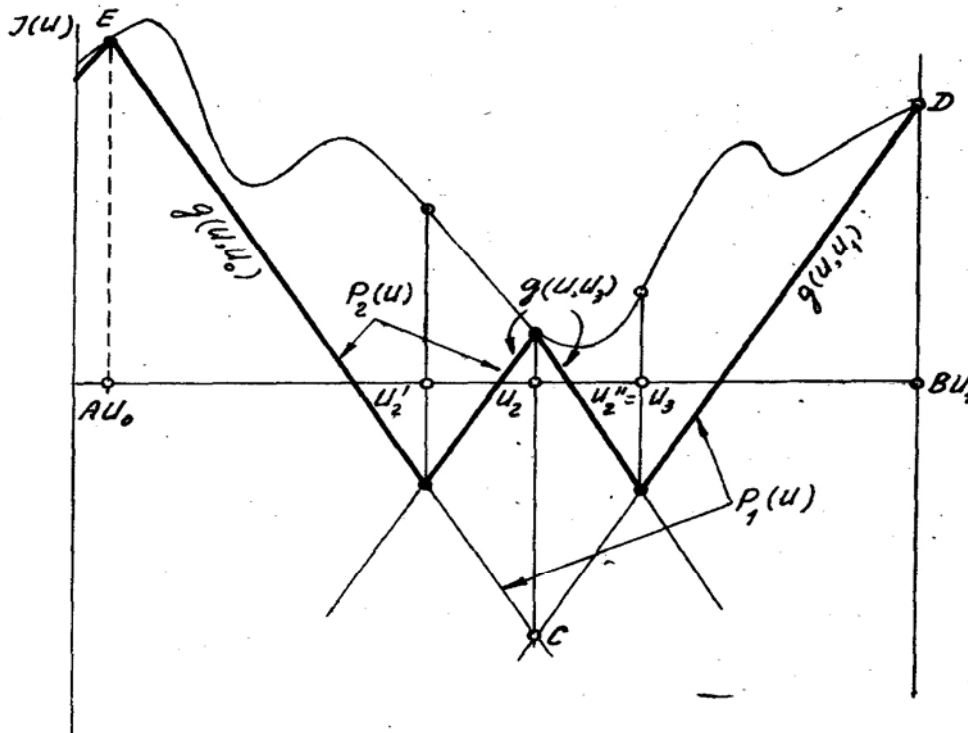


Рисунок 1 Метод ломаных

Если $J(U_0) > J(U_1)$, то $U_2 > \frac{U_0 + U_1}{2}$, то есть следующая поисковая точка смещается относительно середины отрезка в сторону минимума $J(U)$. Затем вводятся ломаная функция для точки U_2 $g(U_1, U_2) = J(U_2) - L|U - U_2|$ и огибающая по максимуму $P_2(U) = \max \{P_1(U), g(U, U_2)\}$. Следующая поисковая точка определяется по условию $P_2(U_3) = \min P_2(U)$. Однако в данном случае точек минимума будет две - это точки пересечения $g(U, U_2)$ с $P_1(U)$

$$U_2' = \frac{J(U_0) - J(U_2)}{2L} + \frac{U_0 + U_2}{2} \text{ и } U_2'' = \frac{J(U_2) - J(U_1)}{2L} + \frac{U_2 + U_1}{2}.$$
 Так как $\frac{U_2' + U_2''}{2} = U_2$ то $U_2' = U_2 - (U_2'' - U_2) = 2U_2 - U_2''$. Из двух точек минимума за следующую поисковую принимается та, для которой целая функция имеет меньшее значение. Так, если $J(U_2') < J(U_2'')$ то $U_3 = U_2'$. Отсюда вытекает итерационный алгоритм поиска. Имея значения $U_0, U_1, \dots, U_n, P_n(U), g(U, U_n)$ следующая U_{n+1} поисковая точка определяется из условия $P_n(U_{n+1}) = \min P_n(U)$ как одна из абсцисс 2-х новых промежуточных минимумов

$$U_n'' = \frac{J(U_n) - J(U_{n-1})}{2L} + \frac{U_{n+1}}{2}, U_n' = 2U_n - U_n'',$$

соответствующая меньшему значению целевой функции.

Процесс поиска заканчивается по достижению заданной точности ξ вычисления минимума целевой функции J^* , оцениваемой очевидным графическим соотношением $0 \leq J(U_{n+1}) - J^* \leq J(U_{n+1}) - P(U_{n+1})$. Решение получено с абсолютной погрешностью вычисления экстремума-минимума целевой функции ξ , если $J(U_{n+1}) - P_n(U_{n+1}) \leq \varepsilon$

Методы минимизации функций многих переменных

Рассмотрим методы решения минимизации функции нескольких переменных $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$, которые опираются только на вычисление значений функции, не используют вычисление производных, т.е. прямые методы минимизации. Важно отметить, что для применения этих методов не требуется не только дифференцируемости целевой функции, но даже аналитического задания. Нужно лишь иметь возможность вычислять или измерять значения F в произвольных точках. Такие ситуации часто встречаются в практически важных задачах оптимизации.

Метод циклического покоординатного спуска

В этом методе в качестве направлений поиска используются координатные векторы. Таким образом, при поиске по направлению d_j меняется только переменная x_j , в то время как все остальные переменные остаются зафиксированными.

Начальный этап. Выбрать точность приближения к минимуму - $\varepsilon > 0$, которая будет использоваться для остановки алгоритма. Выбрать начальное приближение - точку $x^0 = \{x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0\}$.

Метод покоординатного спуска состоит из применения последовательно-сти шагов

1. Ищется минимум функции одной переменной $F_1(x) = F(x, x_2^0, \dots, x_n^0)$, то есть функции $F(x)$ при фиксированной первой переменной. Первое приближение для этой координаты помещается в точку минимума $x_1^1 = x_{\min}$.
2. Фиксируется вторая переменная, производится поиск минимума функции одной переменной $F_2(x) = F(x_1^1, x, x_3^0, \dots, x_n^0)$. Новое значение координаты присвоить значению минимума этой функции $x_2^1 = x_{\min}$.

3. Продолжать минимизацию во всем координатам, придя к следующему приближению $x^1 = \{x^1_1, x^1_2, \dots, x^1_n\}$.
4. Аналогично вычислить x^2, x^3 и т.д., пока $|x^k - x^{k-1}|$ не станет меньше заданной точности ε .

Метод прямого поиска Хука-Дживса

Начальный этап. Выбрать точность приближения к минимуму - $\varepsilon > 0$, которая будет использоваться для остановки алгоритма. Выбрать начальное приближение - точку $x^0 = \{x^0_1, x^0_2, \dots, x^0_n\}$. Выбрать длину шага h_j для каждой переменной $x_j, j = 1, 2, \dots, n$.

Поиск состоит из последовательно выполняемых до получения решения с заданной погрешностью двух этапов.

Первый этап - "исследующий поиск" вокруг базисной точки для выбора направления изменения управляемых параметров, движение по которому минимизирует целевую функцию.

- ✓ Вычислить $F(x^0)$ в базисной точке.
- ✓ Каждая переменная по очереди изменяется прибавлением длины шага. Таким образом, мы вычисляем значение функции $F(x^0 + h_1 e_1)$, где e_1 - единичный вектор в направлении оси x_1 . Если это приводит к уменьшению значения функции, то x^0 заменяется на $x^0 + h_1 e_1$. В противном случае вычисляется значение функции $F(x^0 - h_1 e_1)$, и если ее значение уменьшилось, то x^0 заменяем на $x^0 - h_1 e_1$. Если ни один из проделанных шагов не приводит к уменьшению значения функции, то точка x^0 остается неизменной и рассматриваются изменения в направлении оси x_2 , т. е. находится значение функции $F(x^0 + h_2 e_2)$ и т. д. Когда будут рассмотрены все n переменные, мы будем иметь новую базисную точку x^1 .

Второй этап - "поиск по образцу по правилу акселерации".

- ✓ При поиске по образцу используется информация, полученная в процессе исследования, и минимизация функции завершается поиском в направлении, заданном образцом. Поэтому вычислим функцию в точке

$$x^2 = x^0 + 2(x^1 - x^0).$$

В общем случае $x^{k+1} = x^k + 2(x^k - x^{k-1})$.

После вычисления значений всех управляемых параметров для следующей поисковой точки производится вычисление значения целевой функции для этой точки $F(x^{(k+1)})$. Если значение $F(x^{(k+1)})$ изменяется в требуемом направлении по сравнению со значением $F(x^{(k)})$, то поиск по образцу продолжается.

Если значение $F(x^{(k+1)})$ на $(k+1)$ шаге итерации изменилось в нежелательном направлении, то последняя удачная точка $x^{(k)}$ в поиске по образцу принимается за следующую базисную, уменьшается приращение управляемых параметров и повторяется "исследующий поиск", но уже из новой базисной точки и с меньшим приращением управляемых параметров.

Завершить этот процесс, когда длина шага h будет уменьшена до заданного малого значения.

Первые две итерации процедуры показаны на рисунке. При заданном начальном векторе x_1 исследующий поиск по координатным направлениям приводит в точку x_2 . Последующий поиск по образцу в направлении $x_1 - x_2$ приводит в точку y . Затем исследующий поиск, начинающийся из точки y , дает точку x_3 . Следующий этап поиска по образцу вдоль направления $x_3 - x_2$ дает y^* . Затем процесс повторяется.

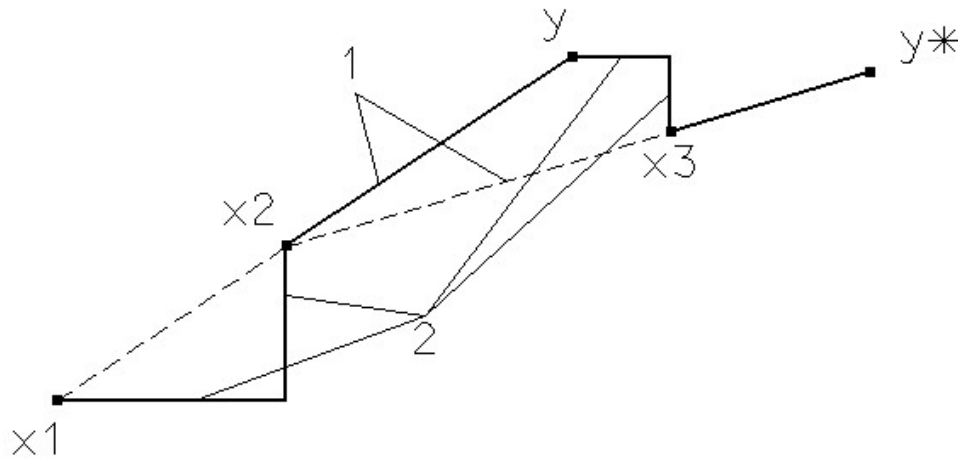


Рисунок 2 1-поиск по образцу; 2- исследующий поиск вдоль координатных осей.

Минимизация по правильному симплексу

Правильным симплексом в n - мерном пространстве (E_n) множества независимых переменных называется множество из $n+1$ равноудаленных друг от друга точек (вершин симплекса). Отрезок, соединяющий две вершины, называется ребром симплекса. В двумерном пространстве правильным симплексом является совокупность вершин равностороннего треугольника, а в трехмерном - правильного тетраэдра.

Работа алгоритма начинается с построения регулярного симплекса в пространстве управляемых параметров и оценивания значений целевых функции в каждой точке.

Затем определяется вершина с максимальным значением целевой функции и проектируется через центр тяжести оставшихся вершин в новую точку. Процедура продолжается до тех пор, пока не будет накрыта точка минимума. Поиск заканчивается когда, когда размеры симплекса или разность значений целевой функции становятся меньше заданной точности. При заданной начальной точке $x^{(0)}$ и масштабном множителе α , координаты остальных N вершин симплекса в N – мерном пространстве вычисляются по формуле:

$$x^{(i)} = \begin{cases} x_j^{(0)} + \delta_1, & i \neq j \\ x_j^{(0)} + \delta_2, & i = j \end{cases}$$

Приращения δ_1 и δ_2 определяются по формулам:

$$\delta_1 = \left(\frac{\sqrt{N+1} + N - 1}{N\sqrt{2}} \right) \cdot \alpha$$

$$\delta_2 = \left(\frac{\sqrt{N+1} - 1}{N\sqrt{2}} \right) \cdot \alpha$$

Величина α выбирается исследователем, исходя из характеристики решаемой задачи.

Вычисление центра тяжести:

Если $x^{(i)}$ – точка, подлежащая отражению, то координаты центра тяжести определяется по формуле:

$$x_c = \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} x^{(j)}$$

Координаты новой вершины удовлетворяют уравнению:

$$x_{new}^{(i)} = x^{(j)} - \lambda(x_c - x^{(i)})$$

Для того, чтобы симплекс обладал свойством регулярности, отображение должно быть симметричным, т.е.

$$x_{new}^{(i)} = 2x_c - x^{(i)}$$

Если некоторая вершина симплекса не исключается на протяжении нескольких итераций, то необходимо уменьшить размер симплекса и построить новый симплекс, выбрав в качестве базовой точку с минимальным значением целевой функции.

Интерполяция

Эмпирические данные, как правило, задаются числовыми рядами значений двух величин: независимой (x_k). и зависимой (y_k), они служат исходными данными задачи.

Самыми простыми способами обработки таблиц являются линейная и квадратичная интерполяции, которые выполняются по уравнениям:

$$f(x)_{\text{лин}} = a_0 + a_1x. \quad f(x)_{\text{кв}} = a_0 + a_1x + a_2x^2.$$

При кусочно-линейной интерполяции вычисления дополнительных точек выполняются по линейной зависимости. При небольшом числе узловых точек (менее 10) линейная интерполяция оказывается довольно грубой. Первая производная функции аппроксимации испытывает резкие скачки в узловых точках. Линейная и квадратичная аппроксимация являются частным случаем полиномиальной интерполяции с помощью аппроксимирующего полинома:

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n = \sum_{i=0}^n a_i x^i.$$

Для выполнения полиномиальной интерполяции достаточно по этому выражению составить систему линейных уравнений для n узловых точек и определить n значений коэффициентов a_i .

Для практического использования более удобны формулы многочлена Лагранжа:

$$P(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n)} y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_n)} y_1 + \dots$$

$$\dots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\dots(x_n-x_{n-1})} y_n.$$

При интерполяции Лагранжа, по всем N точкам задания функции, степень полинома равна $N-1$.

Интерполяция сплайном

При сплайновой интерполяции обычно используются локальные полиномы не выше третьей степени. Так, например, кубические сплайны проходят через три смежные узловые точки (текущие опорные точки вычислений), при этом в граничных точках совпадают как значения полинома и функции, так и значения их первых и вторых производных. Коэффициенты полиномов, проходящих через три смежные узловые точки, рассчитываются так, чтобы непрерывными были первая и вторая его производные.

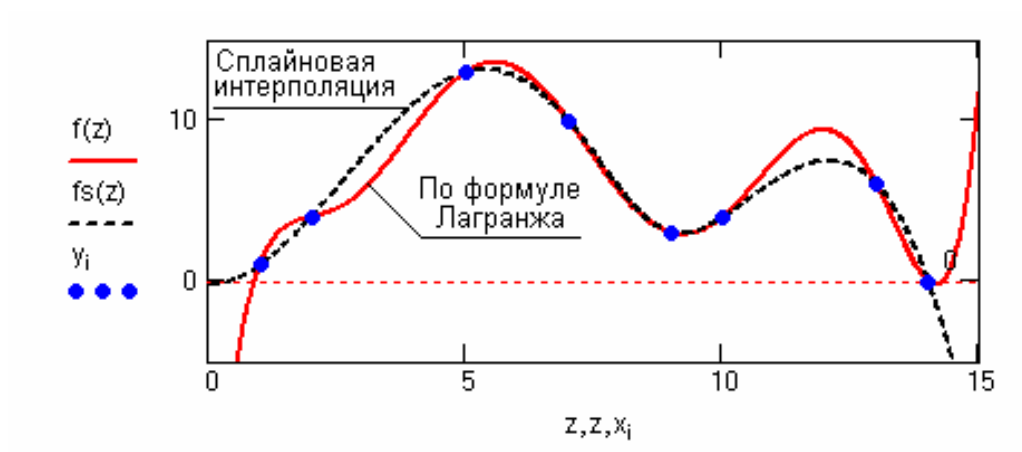


Рисунок 3 Сплайновая интерполяция и интерполяция по Лагранжу.

Сплайновая аппроксимация может применяться для достаточно быстро изменяющихся функций, не имеющих разрывов функции и производных. Основной недостаток сплайнов – отсутствие единого аналитического выражения для описания функции.

Метод наименьших квадратов

Наиболее распространенный способ аппроксимации экспериментальных данных - метод наименьших квадратов. Предположим, что предметом наблю-

дений (измерений) в исследуемой системе служит переменная y , значения которой меняются в зависимости от некоторого аргумента x .

Задачей регрессионного анализа является подбор математических формул, наилучшим образом описывающих экспериментальные данные. Математическая постановка задачи регрессии заключается в следующем. Зависимость величины Y от другого переменного X зарегистрирована на множестве точек x_k множеством значений y_k , при этом в каждой точке зарегистрированные значения y_k и x_k отображают действительные значения $Y(x_k)$ со случайной погрешностью σ_k , распределенной, как правило, по нормальному закону. По совокупности значений y_k требуется подобрать такую функцию

$f(x_k, a_0, a_1, \dots, a_n)$, которой зависимость $Y(x)$ отображалась бы с минимальной погрешностью. Отсюда следует условие приближения:

$$y_k = f(x_k, a_0, a_1, \dots, a_n) + \sigma_k.$$

Аппроксимирующая функция f может быть математической функцией любого типа, линейной комбинацией различных функций или функциональным рядом из степенных, тригонометрических и любых других функций. В основу ее построения желательно закладывать априорные (теоретические) предположения о сущности изучаемого явления. При полном отсутствии априорной информации о распределении случайной составляющей данных, на начальном этапе обычно используется квадратичная мера приближения (дисперсия).

Функцию $f(x_k, a_0, a_1, \dots, a_n)$ называют регрессией величины y на величину x . Регрессионный анализ предусматривает задание вида функции $f(x_k, a_0, a_1, \dots, a_n)$ и определение численных значений ее параметров a_0, a_1, \dots, a_n , обеспечивающих наименьшую погрешность приближения к множеству значений y_k . Как правило, при регрессионном анализе погрешность приближения вычисляется методом наименьших квадратов (МНК). Для этого выполняется минимизация функции квадратов остаточных ошибок:

$$\sigma(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_k [f(x_k, a_0, a_1, \dots, a_n) - y_k]^2.$$

Для определения параметров a_0, a_1, \dots, a_n функция остаточных ошибок дифференцируется по всем параметрам, полученные уравнения частных производных приравниваются нулю и решаются в совокупности относительно всех значений параметров. Виды регрессии обычно называются по типу аппроксимирующих функций: полиномиальная, экспоненциальная, логарифмическая и т.п.

Требование минимального разброса будет удовлетворено, если минимизировать выражение $(\Delta y_i)^2$. Как известно, необходимым условием того, что функция приобретает минимальное значение, является то, что ее первая производная (или частные производные для функции многих переменных) равна нулю. Применение метода наименьших квадратов имеет смысл, если число экспериментальных точек n больше числа определяемых коэффициентов.

Линейная регрессия

Рассмотрим реализацию метода наименьших квадратов применительно к уравнению вида

$$y = ax + b.$$

Для нахождения коэффициентов a , b искомой прямой необходимо минимизировать сумму квадратов расстояний Δy_i по ординате от точки $(x_i; y_i)$ до прямой. Расстояния Δy_i определяются

$$\Delta y_i = y_i - ax_i - b.$$

Для минимизации

$$\sum_{i=1}^n \Delta y_i^2$$

приравняем к нулю производные этой суммы по параметрам a , b :

$$\frac{\partial}{\partial a} = \left[\sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2 \right]' = 2 \sum (y_i - ax_i - b)(-x_i) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial b} = \left[\sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2 \right]' = 2 \sum (y_i - ax_i - b)(-1) = 0$$

Преобразуем эту систему

$$\begin{cases} a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i - \sum_{i=1}^n y_i x_i = 0 \\ a \sum_{i=1}^n x_i + bn - \sum_{i=1}^n y_i = 0 \end{cases}$$

Получим систему нормальных уравнений метода наименьших квадратов.

Решая ее относительно a , b получаем:

$$\hat{a} = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2};$$

Полученные значения коэффициентов используем в уравнении регрессии $y(t) = a+bt$. По аналогичной методике вычисляются коэффициенты и любых других видов регрессии, отличаясь только громоздкостью соответствующих выражений.

Численное решение дифференциальных уравнений

Метод Эйлера

В основе метода Эйлера лежит идея графического построения решения дифференциального уравнения. Этот метод дает одновременно и способ нахождения искомой функции в численной (табличной) форме.

Идея метода заключается в том, что на малом промежутке изменения независимой переменной $x_0 \leq x \leq x_0 + h = x_1$

интегральная кривая дифференциального уравнения $y' = f(x, y)$

заменяется отрезком прямой (касательной) $y - y_0 = f(x_0, y_0) \cdot (x - x_0)$.

Отсюда

$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0) \cdot h$$

Процесс можно повторить для промежутка

$$x_1 \leq x \leq x_1 + h = x_2 \text{ и т.д.}$$

Таким образом, интегральная кривая заменяется при этом ломаной, называемой ломаной Эйлера (рис.).

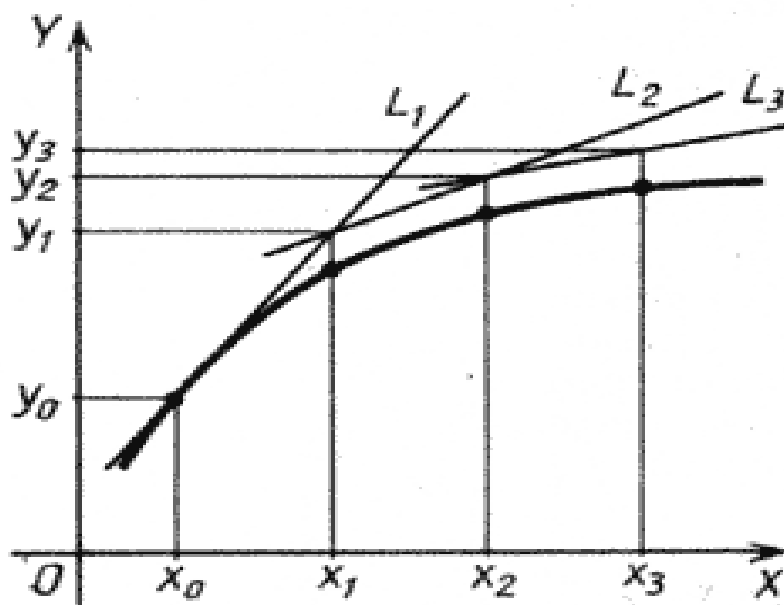


Рисунок 4

Метод Эйлера обладает удовлетворительной точностью лишь при достаточно малых h

Метод Рунге — Кутты

Этот метод более точный и относится к одношаговым методам численного интегрирования, т. е. к таким методам, которые позволяют найти приближенное значение решения заданной задачи в узле y_{i+1} по информации об этом решении лишь в одной предыдущей узловой точке y_i .

Метод описывается следующими соотношениями:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i,$$

$$\Delta y_i = \frac{1}{6}(K_1^{(i)} + 2K_2^{(i)} + 2K_3^{(i)} + K_4^{(i)}),$$

$$K_1^{(i)} = hf(x_i, y_i), \quad K_2^{(i)} = hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{K_1^{(i)}}{2}\right),$$

$$K_3^{(i)} = hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{K_2^{(i)}}{2}\right), \quad K_4^{(i)} = hf(x_i + h, y_i + K_3^{(i)}).$$

Как видно, с алгоритмической точки зрения метод Рунге — Кутта не имеет принципиальных различий от метода Эйлера. Разница лишь в объеме вычислений: для получения нового значения y на каждом шаге необходимо проделать все действия, предусмотренные формулами выше.

Литература

- Сухарев А.Г., Тимохов А.В., Федоров В.В. Курс методов оптимизации. - М.: Наука, 1986.
- Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. - М.: Наука, 1983.
- Банди Б. Методы оптимизации (вводный курс). - М.: Радио и связь, 1988.
- Макс Ж. Методы и техника обработки сигналов при физических измерениях: В 2-х томах. - М.: Мир, 1983.
- Корн Г., Корн Е. Справочник по математике для научных работников и инженеров. - М.: Наука, 1984.