

УДК 681.3.06:519.651

Чепинога А.В.

АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ ЗАСТОСУВАННЯ ЧИСЕЛЬНИХ МЕТОДІВ ДЛЯ ПОШУКУ ПАРАМЕТРІВ ПОЛІГАУСОВИХ МОДЕЛЕЙ

Черкаський державний технологічний університет, м. Черкаси, toxacher@ukr.net

В роботі проаналізовано питання вибору та обґрунтування чисельного методу для вирішення систем нелінійних рівнянь, які входять до складу полігаусових моделей на основі перфорованого моментно-кумулянтного опису. Проведено аналіз ефективності та швидкісних характеристик збіжності методів при застосуванні їх для бігаусових моделей різних типів.

Ключові слова: чисельні методи, бігаусова модель, система нелінійних рівнянь, метод Ньютона, метод простих ітерацій, метод найшвидшого спуску, кількість ітерацій.

Вступ

Неможливо уявити собі сучасну науку без широкого застосування математичного моделювання. Робота не з самим об'єктом (явищем, процесом), а з його моделлю дає можливість безболісно, відносно швидко і без істотних витрат досліджувати його властивості і поведінку в будь-яких мислимих ситуаціях. В той же час обчислювальні (комп'ютерні, симуляційні, імітаційні) експерименти з моделями об'єктів дозволяють, спираючись на потужність сучасних обчислювальних методів і технічних інструментів, детально і глибоко вивчати об'єкти в достатній повноті, недоступній чисто теоретичним підходам. Недивно, що методологія математичного моделювання бурхливо розвивається, охоплюючи все нові сфери — від розробки технічних систем і управління ними до аналізу складних економічних і соціальних процесів [1].

Як правило, кожна математична модель не може бути розроблена без застосування чисельних методів, що будуть реалізовані на певній обчислювальній системі. Тож реалізації і використання полігаусових моделей також пов'язана з певними проблемами вибору оптимального, відносно машинних ресурсів, обчислювального алгоритму.

В роботах [2, 3] було розроблено полігаусові моделі другого порядку, які застосовувались як для апроксимації щільності імовірності випадкових послідовностей так і для генерації псевдовипадкових величин. Головною частиною моделі є система нелінійних рівнянь, яка складена на основі відповідності певної кількості вибірових моментів теоретичним моментам гаусової суміші. Така система в найпростішому випадку містить три нелінійні рівняння. Тож актуальною проблемою постає задача вирішення даної системи, що в свою чергу тягне за собою вибір та обґрунтування певних чисельних методів.

Метою даної роботи є розробка другого етапу реалізації математичної моделі полігаусових випадкових величин, а саме визначення оптимальних чисельних методів для синтезу алгоритмів функціонування моделей на ЕОМ.

Проведені дослідження [3] показують, що в процесі роботи моделі вирішується система нелінійних рівнянь високих порядків. В даній роботі пропонується визначити оптимальний метод, який би забезпечив необхідну швидкодію моделей та знаходження правильного розв'язку системи.

Постановка задачі

Як показує практика, системи нелінійних рівнянь порядку вище другого вирішуються виключно чисельними методами і від того, який метод буде використовуватись на пряму залежить адекватність моделі поставленій задачі. Ще одним критерієм при виборі методу повинна виступати можливість якомога простішої реалізації на ЕОМ та відносно мале споживання обчислювальних ресурсів.

Проаналізувавши чисельні методи рішення систем нелінійних рівнянь, наведені в [4, 5] було запропоновано зупинитись на трьох методах обчислювальної математики стосовно вирішення систем нелінійних рівнянь. Це метод Ньютона, метод простих ітерацій та метод найшвидшого спуску. Ці методи доволі поширені у використанні та мають просту реалізацію на ЕОМ. Постає питання вибору найліпшого, згідно поставлених критеріїв, методу серед трьох названих.

Аналіз чисельних алгоритмів

Система нелінійних рівнянь в загальному випадку має вигляд:

$$f(x) = \begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Тут x_1, \dots, x_n - невідомі змінні, а система (1) називається нормальною системою порядку n якщо хоч би одна з функцій $f_i(x_1, \dots, x_n)$ нелінійна.

Рішення систем нелінійних рівнянь – одне з важких завдань обчислювальної математики. Трудність полягає в тому, щоб визначити: чи має система рішення, і, якщо – так, то скільки. Уточнення рішень в заданій області – простіше завдання.

Метод простих ітерацій.

З початкової системи (1) шляхом еквівалентних перетворень переходять до системи вигляду:

$$\begin{cases} x_1 = \Phi_1(x_1, \dots, x_n) \\ \dots \\ x_n = \Phi_n(x_1, \dots, x_n) \end{cases} \quad (2)$$

Ітераційний процес, який визначається формулами

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \Phi_1(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \\ \dots \\ x_n^{k+1} = \Phi_n(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \end{cases}, \quad k = 0, 1, \dots$$

можна почати, задавши початкове наближення $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \in \bar{\Omega} \subset \Omega$. Достатньою умовою збіжності ітераційного процесу є одна з двох умов:

$$\sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j} \right| < 1, \forall i = \overline{1, n} \quad \text{або} \quad \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j} \right| < 1, \forall j = \overline{1, n}.$$

Розписавши першу умову, маємо:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_2} \right| + \dots + \left| \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_n} \right| < 1 \quad \text{при } i = 1, \\ \left| \frac{\partial \Phi_n}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \Phi_n}{\partial x_2} \right| + \dots + \left| \frac{\partial \Phi_n}{\partial x_n} \right| < 1 \quad \text{при } i = n. \end{aligned}$$

Розписавши другу умову:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \Phi_2}{\partial x_1} \right| + \dots + \left| \frac{\partial \Phi_n}{\partial x_1} \right| < 1 \quad \text{при } j = 1, \\ \left| \frac{\partial \Phi_1}{\partial x_n} \right| + \left| \frac{\partial \Phi_2}{\partial x_n} \right| + \dots + \left| \frac{\partial \Phi_n}{\partial x_n} \right| < 1 \quad \text{при } j = n. \end{aligned}$$

Метод простих ітерацій є таким, що самовиправляється, універсальним і простим для реалізації на ЕОМ. Якщо система має великий порядок, то застосування даного методу, що має повільну швидкість збіжності, не рекомендується [5].

Метод Ньютона.

Нехай потрібно вирішити систему нелінійних рівнянь вигляду (1). Припустимо, що рішення існує в деякій області $\bar{\Omega}$, у якій всі функції $f_i(x_1, \dots, x_n), i = \overline{1, n}$ безперервні і мають, принаймні, першу похідну. Метод Ньютона є ітераційний процес, який здійснюється по певній формулі наступного вигляду:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - W^{-1}(x^{(k)})f(x^{(k)}) \quad (3)$$

де

$$W(x^{(k)}) = \begin{pmatrix} (f_1)'_{x_1}, \dots, (f_1)'_{x_n} \\ \dots \\ (f_n)'_{x_1}, \dots, (f_n)'_{x_n} \end{pmatrix}_{(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}$$

– матриця Якобі.

Труднощі при використанні методу Ньютона полягають у відшуканні зворотної матриці та визначенні, чи не виходить $x^{(k+1)}$ за межі області $\bar{\Omega}$.

Ітераційний процес по формулі (3) закінчується, якщо виконується наступна умова

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon.$$

Перевагою методу Ньютона є його швидка збіжність в порівнянні з методом простих ітерацій [6].

Метод найшвидшого спуску.

Даний метод є одним з градієнтних методів вирішення систем нелінійних рівнянь. Система рівнянь (1) еквівалентна одному рівнянню

$$\Psi(x) = 0 \tag{4}$$

де $\Psi(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + \dots + f_n^2(x)$.

Очевидно, рішеннями рівняння (4) є точки нульових мінімумів функції $\Psi(x) = \Psi(x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Допустимо, що $\Psi(x)$ двічі неперервно диференційована в області, яка включає в себе ізольоване рішення x^* . Задавшись початковим наближенням x^0 , шукають мінімум функції $\Psi(x^0 - \lambda \text{grad } \Psi(x^0))$ однієї змінної λ . Фактично знаходиться мінімальний невід'ємний корінь $\lambda = \lambda_0$ рівняння

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi(x^0 - \lambda \text{grad } \Psi(x^0)) = 0.$$

Тоді взагалі ітерації приймуть вигляд:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \lambda_k \text{grad } \Psi(x^{(k)}),$$

де λ_k — мінімальний ненегативний корінь рівняння

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi(x^{(k)} - \lambda \text{grad } \Psi(x^{(k)})) = 0.$$

Градієнт функції $\Psi(x)$ визначається як $W'(x^{(k)}) f(x^{(k)})$, де $W'(x^{(k)})$ – транспонована матриця Якобі, а мінімальний корінь рівняння в матричній формі запису:

$$\lambda_k = \frac{(f(x^{(k)}) W(x^{(k)}) W'(x^{(k)}) f(x^{(k)}))}{(W(x^{(k)}) W'(x^{(k)}) f(x^{(k)}), W(x^{(k)}) W'(x^{(k)}) f(x^{(k)}))}$$

Ітераційний процес по формулі даного методу можна закінчувати по умові, яка наведена для методу Ньютона [7].

Результати дослідження

Вище перераховані чисельні методи були застосовані для розрахунку систем нелінійних рівнянь, що входять до бігаусових моделей різних типів, що дає можливість правильно трактувати ефективність кожного із них.

Початкові умови для розрахунків були обрані однаковими, що звичайно інформативно відображає кількість ітерацій, які необхідні для досягнення заданої точності обчислень.

В процесі роботи бігаусової моделі першого типу (при $\sigma_1^2 = 1, \delta = 0.5$) вирішується наступна система з трьох нелінійних рівнянь:

$$\begin{aligned}
 f_1 &= 0.5(m_1^2 + m_2^2) + 0.5\sigma_2^2 + 0.5 - 1 \\
 f_2 &= 1.5m_1 + 0.5m_1^3 + 1.5\sigma_2^2 m_2 + 0.5m_2^3 + 4/5 \\
 f_3 &= 0.5(3 + 6m_1^2 + m_1^4) + 0.5(3\sigma_2^4 + 6\sigma_2^2 m_2^2 + m_2^4) - 15/5
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

де σ_1 , σ_2 – дисперсії гаусових компонент, m_1 , m_2 – математичні сподівання гаусових компонент, δ – коефіцієнт пропорційності складових.

За початкові умови було взято наближення $m_1 = -0.1$, $m_2 = -0.8$ та $\sigma_2^2 = 0.2$ при точності обчислень $2\varepsilon = 10^{-8}$.

Результати роботи методів, що застосовувались для вирішення системи (5) наведено в таблиці 1.

Таблиця 1

Значення параметрів бігаусової моделі.

Назва чисельного методу	Параметри бігаусової моделі			Кількість ітерацій	Час виконання
	m_1	m_2	σ_2^2		
Метод простих ітерацій	0.1090839	-0.8802155	0.2133212	15	0.268
Метод Ньютона	0.1090839	-0.8802155	0.2133212	4	0.322
Метод найшвидшого спуску	0.1090825	-0.8802139	0.2133230	1663	2.875

Як можна побачити з результатів обчислень (табл.1), для бігаусової моделі з використанням трьох нелінійних рівнянь найбільш ефективним є метод простих ітерацій. Причому результати методу найшвидшого спуску дещо відрізняються від двох інших.

Наступним кроком дослідження було використання бігаусової моделі другого типу (при $\delta = 0.5$) з чотирма нелійними рівняннями:

$$\begin{aligned}
 f_1 &= 0.5(m_1 + m_2) \\
 f_2 &= 0.5(\sigma_1^2 + m_1^2) + 0.5(\sigma_2^2 + m_2^2) - 1 \\
 f_3 &= 0.5(3\sigma_1^2 m_1 + m_1^3) + 0.5(3\sigma_2^2 m_2 + m_2^3) \\
 f_4 &= 0.5(3\sigma_1^4 + 6\sigma_1^2 m_1^2 + m_1^4) + 0.5(3\sigma_2^4 + 6\sigma_2^2 m_2^2 + m_2^4) - 12/5
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

За початкові умови було взято наближення $m_1 = 0.8$, $m_2 = -0.8$ та $\sigma_1^2 = 0.5$, $\sigma_2^2 = 0.2$ при точності обчислень $2\varepsilon = 10^{-8}$.

Результати роботи методів, що застосовувались для вирішення системи (5) наведено в таблиці 2.

Таблиця 2

Значення параметрів бігаусової моделі.

Назва чисельного методу	Параметри бігаусової моделі				Кількість ітерацій	Час виконання
	m_1	m_2	σ_1^2	σ_2^2		
Метод простих ітерацій	0.7400828	-0.7400828	0.4522774	0.4522774	9	0.528
Метод Ньютона	0.7400828	-0.7400828	0.4522774	0.4522774	4	0.476
Метод найшвидшого спуску	0.7400853	-0.7400853	0.4522749	0.4522749	1194	5.25

Як і в попередньому випадку, маємо найбільшу кількість ітерацій в методі найшвидшого спуску. Причому час їх проходження набагато більше в порівнянні з першими двома.

Для в певності в отриманих результатах було застосовано чисельні методи до вирішення системи з п'яти рівнянь.

$$\begin{aligned}
 f_1 &= \delta(\sigma_1^2 + m_1^2) + (1 - \delta)(\sigma_2^2 + m_2^2) - 1 \\
 f_2 &= \delta(3\sigma_1^2 m_1 + m_1^3) + (1 - \delta)(3\sigma_2^2 m_2 + m_2^3) \\
 f_3 &= \delta(3\sigma_1^4 + 6\sigma_1^2 m_1^2 + m_1^4) + (1 - \delta)(3\sigma_2^4 + 6\sigma_2^2 m_2^2 + m_2^4) - 3 \\
 f_4 &= \delta(15\sigma_1^4 m_1 + 10\sigma_1^2 m_1^3 + m_1^5) + (1 - \delta)(15\sigma_2^4 m_2 + 10\sigma_2^2 m_2^3 + m_2^5) - 18/5 \\
 f_5 &= \delta(15\sigma_1^3 + 45\sigma_1^4 m_1^2 + 15\sigma_1^2 m_1^4 + m_1^6) + (1 - \delta)(15\sigma_2^3 + 45\sigma_2^4 m_2^2 + 15\sigma_2^2 m_2^4 + m_2^6) - 108/5
 \end{aligned}
 \tag{7}$$

Початкові умови: $m_1 = -0.8$, $m_2 = 0.4$, $\sigma_1^2 = 0.1$, $\sigma_2^2 = 1.6$, $\delta = 0.7$ при точності обчислень $2\varepsilon = 10^{-8}$.

Результати роботи методів, що застосовувались для вирішення системи (5) наведено в таблиці 3.

Таблиця 3

Значення параметрів бігаусової моделі.

Назва чисельного методу	Параметри бігаусової моделі					Кількість ітерацій	Час виконання
	m_1	m_2	σ_1^2	σ_2^2	δ		
Метод простих ітерацій	-0.7970166	0.3888246	0.0895108	1.5719726	0.7243083	8	0.753
Метод Ньютона	-0.7970166	0.3888246	0.0895108	1.5719726	0.7243083	3	0.593
Метод найшвидшого спуску	-0.7969142	0.3888883	0.0896191	1.5719838	0.7243424	6073	276

Висновки

Підсумовуючи всі результати роботи трьох чисельних методів, можна сказати що найоптимальнішим при вирішенні систем нелінійних рівнянь для застосування як в бігаусових так і полігаусових моделях є метод Ньютона. Перш за все необхідно відзначити малу кількість ітерацій даного методу, що говорить про швидку збіжність ітераційного процесу, а також час виконання кожної ітерації методом Ньютона менший ніж в інших. Що до методу простих ітерацій, то він буває ефективним тільки при малих розмірностях нелінійних систем рівнянь.

Як подальший розвиток застосування даного методу в спеціалізованих обчислювальних системах при роботі з полігаусовими моделями можна запропонувати модифікації методу Ньютона, такі як спрощений метод Ньютона чи метод січних, який полягає в заміні похідної її різницевою апроксимацією. Необхідно зауважити, що при застосуванні модифікованих методів Ньютона збіжність методу не змінюється, але за рахунок цього можна скоротити час виконання ітераційного процесу.

Список літературних джерел

1. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – М.: Физматлит, 2005. – 320 с.
2. Заболотній С.В., Чепинога А.В. Апроксимація типових імовірнісних розподілів бігаусовою моделлю // Вісник ЧДТУ. – 2006, - № 3. – С.42-47.
3. Чепинога А.В. Области реалізації бігаусових моделей асиметрично-ексцесних випадкових величин з перфорованим моментно-кумулянтним описом // Вісник ЧДТУ. – 2010, - № 2. – С.91-95.
4. Калиткин Н.Н. Численные методы. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
5. Ракитин В.И., Первушин В.Е. Практическое руководство по методам вычислений с приложением программ для персональных компьютеров. – М.: Высшая школа, 1998. – 383 с.
6. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
7. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. – М.: Наука, 1966. – 664 с.