УДК 681.513

О.В. Бабак, И.В. Суровцев, А.Э. Татаринов

О целенаправленности перебора вариантов моделей при моделировании физических процессов

Рассмотрен круг вопросов, связанных с улучшением показателя целенаправленности перебора вариантов моделей при моделировании физических процессов. Показано, что при этом варианты математических моделей следует описывать мультипликативными функциями. Приведен оригинальный алгоритм целенаправленного перебора вариантов моделей.

A specific range of the questions closely connected to the improvement of an indicator of the purposefulness of a search of variants of models at modelling the physical processes is considered. It is shown that the variants of mathematical models should be described by multiplicative functions. An original algorithm of a purposeful search of variants of the models at the modelling of physical processes is presented.

Розглянуто коло питань, пов'язаних з поліпшенням показника цілеспрямованості перебору варіантів моделей при моделюванні фізичних процесів. Показано, що при цьому варіанти математичних моделей слід описувати мультиплікативними функціями. Наведено оригінальний алгоритм цілеспрямованого перебору варіантів моделей.

Введение. Развитие науки и техники тесно связано с повышением требований к точности моделирования физических процессов, лежащих в основе функционирования многих создаваемых новых технических систем и технологических процессов. Это неизбежно приводит к необходимости построения нелинейных моделей, поскольку, практически, все фундаментальные физические законы нелинейны и имеют описание в виде различного рода мультипликативных функций [1]. При решении прикладных задач фактически используют следствия фундаментальных физических законов. Поэтому естественно предположение, что решение задач моделирования физических процессов следует также искать в виде некоторых соотношений, содержащих мультипликативные функции. Вид мультипликативных функций, входящих в решение, целесообразно устанавливать с помощью эвристически направляемого метода перебора, успех которого зависит от специфических черт, характерных для решаемой задачи. При этом существуют некоторые критерии качества работы перебора, которые могут быть оценены и оказываются полезными при сравнении различных методов. Один из таких критериев называется целенаправленностью [2]. В общем случае его сущность заключается в том, что он позволяет узнать в какой мере перебор идет в направлении цели, а не ведется в нежелательном направлении. В частном случае показатель целенаправленности можно оценить, например, отношением числа вариантов полного перебора членов наиболее часто используемого полинома Колмогорова–Габора второго порядка к числу вариантов эвристически направляемого метода сокращенного перебора. Чем больше это отношение, тем более целенаправленным является используемый метод сокращенного перебора. В этой связи в основу его эвристической силы должны быть положены минимизация исходного n-числа независимых переменных x и указание структуры модели, обеспечивающей одинаковый знак приращения значения зависимой переменной y от того или иного приращения значения любой независимой переменной у реального объекта и модели. Причем желательно, чтобы выполнение каждого из этих требований было бы до известной степени формализовано. По существу, речь идет о том, что в трудно обозримом множестве моделей, удовлетворяющем небольшое число данных, требуется указать некоторое подмножество, содержащее мультипликативные функции, гарантирующее на основе опыта об особенностях структуры реальных физических моделей целенаправленность и, соответственно, эффективность моделирования. В данном случае под эффективностью будем подразумевать ошибку модели на заданных точках, быстродействие алгоритма моделирования и экономию машинной памяти. В качестве вполне естественного допущения полагаем, что ошибка модели будет ненамного отличаться и на точках, отсутствующих в выборке, но которые появятся в ближайшем будущем при изменении значений независимых переменных в тех же пределах.

Постановка задачи

Пусть задана выборка данных, характеризующих поведение некоторого нелинейного физического процесса

$$\{x_{ij}, y_j\}, i=\overline{1,n},\ j=\overline{1,l}, \forall x_{ij}>0\,, \qquad (1)$$

где $l>(n+1)$ – длина выборки. Требуется минимизировать исходное число переменных n, выделяя наиболее важные из них, и затем построить алгоритм целенаправленного перебора вариантов моделей, содержащих мультипликативные функции.

Решение задачи

В его основе лежит получение из выборки данных (1) с помощью метода наименьших квадратов (МНК) информации о значении и направлении составляющих градиента линейной модели функции отклика y

$$y=a_0+\sum_{i=1}^{n}a_i x_i\,, \qquad (2)$$

т.е. ее частных производных по x, оценками которых служат коэффициенты $a_i, i=\overline{1,n}$. Для минимизации числа x_i с учетом определения наиболее существенных из них используется информация о найденных значениях a_i в уравнении (2), указывающих на степень влияния той или иной x_i на функцию отклика y. При этом на эвристическом уровне решается вопрос об удалении тех x_i, у которых величины a_i в уравнении (2) имеют наименьшие значения. Если это оказалось возможным, то по скорректированным данным (1) восстанавливается новая линейная модель (2) с числом независимых переменных $n'<n$.

При построении алгоритма целенаправленного сокращенного перебора используется метод генеральной обобщенной переменной (МГОП) [3]. В его основу положена идея о том, что информацию о нелинейности зависимости, скрытой в данных, можно получить из линейного полинома (2), поскольку он содержит оценки направления составляющих градиента функции отклика y. Практическое выражение данной идеи состоит в синтезе генеральной обобщенной переменной (ГОП), которая может быть представлена мультипликативной функцией

$$\nu=\prod_{i=1}^{n}x_i^{p_i}\,, \qquad (3)$$

где p_i – величина, принимающая значение ±1 в зависимости от знака при соответствующей оценке направления составляющей градиента a_i функции отклика (2), восстановленной по эмпирическим данным.

В [4] приведено утверждение, смысл которого сводится к тому, что если известно направление составляющих градиента функции отклика, то по скорректированным данным (1) может быть восстановлена зависимость

$$y=a'_{0\nu}+\sum_{i=1}^{m}a'_{i\nu}\nu_i, m\le n'\,, \qquad (4)$$

где ν_i – функции, синтезированные по аналогии с (3) и $a'_{i\nu}>0$.

Для получения вариантов моделей целенаправленного сокращенного перебора для n' числа существенных независимых переменных в соответствии с соотношением (4) необходимо построение комбинаций ν_i. В табл. 1 в качестве примера приведены комбинации ν_i для $x_i, i=\overline{1,2}$ и $x_i, i=\overline{1,3}$. Очевидно, что аналогичным образом комбинации ν_i вариантов моделей целенаправленного сокращенного перебора могут быть построены и для большего числа x_i.

Следует заметить, что при использовании полинома Колмогорова–Габора второго порядка для полного перебора, например, в случае $n'=2$ с учетом наличия в каждой комбинации двух существенных x необходим анализ 60 вариантов моделей. В то время как предлагаемый алгоритм повышения целенаправленности перебора моделей требует анализа только двух вариантов моделей в случае, если один или два показателя степени p_1, p_2 принимают значение –1 (в противном случае анализа требует только один вариант). Таким образом, для данного случая показатель целенаправленности равен 30, причем с увеличением числа n' его значение во всех случаях будет намного больше единицы, т.е. перебор будет всегда целенаправленным.

Таблица 1. Элементы v_i N-числа вариантов моделей при $n' = 2$ и $n' = 3$

№ \ n'	$x_1^{p_1}$, $x_2^{p_2}$	$x_1^{p_1}$, $x_2^{p_2}$, $x_3^{p_3}$
1	$v_1 = x_1^{p_1}$, $v_2 = x_2^{p_2}$	$v_1 = x_1^{p_1}$, $v_2 = x_2^{p_2}$, $v_3 = x_3^{p_3}$
2	$v_{1,2} = (x_1^{p_1} \cdot x_2^{p_2})$	$v_1 = x_1^{p_1}$, $v_{2,3} = (x_2^{p_2} \cdot x_3^{p_3})$
3		$v_2 = x_2^{p_2}$, $v_{1,3} = (x_1^{p_1} \cdot x_3^{p_3})$
4		$v_3 = x_3^{p_3}$, $v_{1,2} = (x_1^{p_1} \cdot x_2^{p_2})$
5		$v_{1,2,3} = (x_1^{p_1} \cdot x_2^{p_2} \cdot x_3^{p_3})$

Итак, алгоритм целенаправленного перебора вариантов моделей при моделировании физических процессов включает в себя следующие этапы.

Этап 1. После выделения n'-числа наиболее важных независимых переменных x_i, $i = \overline{1, n'}$, $n' < n$ по скорректированным данным (1) восстанавливается линейная зависимость в соответствии с соотношением (2).

Этап 2. Учитывая направления составляющих градиента полученной линейной зависимости, осуществляется синтез комбинаций v_i, аналогичный представленному в табл. 1, для построения вариантов моделей целенаправленного перебора (4).

Этап 3. Принимая во внимание скорректированную выборку данных (1), для каждого из полученных вариантов определяется среднее арифметическое остаточной суммы квадратов $\overline{\delta}$. Затем по $\min \overline{\delta}$ выделяется нелинейная зависимость, скрытая в данных.

Следует заметить, что рассмотренный выше алгоритм позволяет обнаружить в данных не только мультипликативные функции, но и другие нелинейные зависимости, что показано в приложении.

В [5] приведен пример использования предлагаемого алгоритма для построения математической модели реального технического объекта, которым послужила трасса вдувания пылеугольного топлива установки его пневмотранспорта в доменную печь Донецкого металлургического завода. Показано, что полученная нелинейная модель, включающая мультипликативную функцию, позволила увеличить точность косвенного измерения расхода пылеугольного топлива в сравнении с линейной моделью примерно в 20 раз.

В приложении приведены три примера обнаружения нелинейной зависимости, скрытой в искусственно синтезированной для каждого случая выборке. В примерах 1 и 2 в данных скрыты мультипликативные функции. В примере 3 показано, что в данных может быть скрыта и, например, нелинейная квадратичная зависимость.

Приложение. Искусственный синтез случайной независимой выборки $\{x_{ij}, y_j\}$, $i = \overline{1, n}$, $j = \overline{1, l}$, $\forall x_{ij} > 0$, в которой скрыта некоторая наперед заданная нелинейная зависимость, заключается в следующем.

Сначала осуществляется генерация векторов независимых переменных x_i, $i = \overline{1, n}$ в заданных для них пределах $[x_{\min i}, x_{\max i}]$ по формуле:

$$x_{ij} = x_{\min i} + (x_{\max i} - x_{\min i}) \cdot \varepsilon_{ij}, \quad i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, l},$$

где ε_{ij} – случайная величина, равномерно распределенная на интервале [0, 1].

После чего по заданной нелинейной зависимости $y = f(x)$ вычисляется истинное значение вектора y, т.е. y_u, на которое накладывается равномерный шум, и «зашумленное» значение $y_ш$ находится по формуле:

$$y_{ш j} = y_{u j} \cdot (1 + 0{,}01 \cdot \alpha(\%) \cdot (2 \cdot \varepsilon_{y j} - 1)), \; j = \overline{1, l},$$

где $\alpha(\%)$ – значение величины равномерного шума, заданное в процентах, а $\varepsilon_{y j}$ – случайная величина, равномерно распределенная на интервале [0,1].

Описанный способ получения искусственно синтезируемой случайной независимой выборки использован в представленных ниже примерах 1–3.

Пример 1. Скрытая в искусственно синтезированной выборке мультипликативная функция имеет вид $y_u = 10 \cdot \dfrac{x_1 \cdot x_2}{x_3}$.

Примечание. Заметим, что ее структура похожа на уравнение теплопроводности (закон Фурье)

$$|\Delta Q| = \lambda \cdot S \cdot \frac{\Delta t \cdot \Delta T}{\Delta l},$$

где ΔQ – количество теплоты, $\lambda = \text{const}$ – теплопроводность, $S = \text{const}$ – площадь поверхности, ΔT – разность температур между двумя точками, находящимися на расстоянии Δl, Δt – время.

В упомянутой скрытой нелинейной зависимости независимые переменные генерируются в пределах $x_1 = [0{,}3\ ,\ 0{,}5]$, $x_2 = [0{,}1\ ,\ 0{,}3]$, $x_3 = [0{,}2\ ,\ 0{,}6]$. Затем в 30 точках находится y_u и, соответственно, $y_ш$.

Т а б л и ц а 1.П. Фрагмент полученной выборки данных при длине выборки $l = 30$

№	x_1	X_2	x_3	$y_ш$
1	**0,489**	**0,104**	**0,423**	**1,219**
2	**0,441**	**0,238**	**0,495**	**2,083**
3	**0,319**	**0,144**	**0,364**	**1,235**
…	…	…	…	…
28	**0,349**	**0,139**	**0,399**	**1,210**
29	**0,322**	**0,227**	**0,262**	**2,874**
30	**0,393**	**0,261**	**0,459**	**2,278**
min:	0,302	0,104	0,214	0,962
max:	0,489	0,290	0,588	4,140

Для того чтобы «подсмотреть» направление составляющих ее градиента (т.е. знаки при оценках коэффициентов регрессии), нормируя x_i ($x_{iн} = \dfrac{x_i}{x_{i\max}}$), восстанавливаем с помощью МНК линейную зависимость $y = a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_i x_{iн}$.

Имеем

$$y = 0{,}175 + 2{,}984 \cdot x_{1н} + 3{,}173 \cdot x_{2н} - 3{,}949 \cdot x_{3н}. \quad (1П)$$

Для анализа полученных результатов используем среднее арифметическое остаточной суммы квадратов $\bar{\delta} = \frac{1}{l}\sum_{j=1}^{l}(y_j - y_{шj})^2$.

Итак, $\bar{\delta}_л = 0{,}0529$.

Рассмотрим пять единственно возможных вариантов восстановления зависимости по выборке $\{x_{ij},\ y_{шj}\}$, $i = \overline{1,3}$, $j = \overline{1,30}$ на основе МГОП (см. табл. 1). Поскольку известно направление составляющих градиента функции отклика (1П), осуществляем синтез ГОП и, восстанавливая с помощью МНК зависимости $y = a'_0 + \sum_{i=1}^{n'} a'_i v_i$, $n' < n$, находим для них оценки $\bar{\delta}_v$. Полученные результаты сведены в табл. 2.П.

Т а б л и ц а 2.П. Сводная таблица результатов

№ п/п	Варианты синтеза ГОП	Восстановленная зависимость	Оценки
1	$v_1 = x_1,\ v_2 = x_2,$ $v_3 = 1/x_3$	$y = -4{,}425 + 2{,}742 \cdot v_{1н} +$ $+ 2{,}992 \cdot v_{2н} + 3{,}914 \cdot v_{3н}$	$\bar{\delta}_v = 0{,}0224$
2	$v_1 = x_1,\ v_{23} = \dfrac{x_2}{x_3}$	$y = -2{,}265 + 2{,}881 \cdot v_{1н} +$ $+ 4{,}512 \cdot v_{23н}$	$\bar{\delta}_v = 0{,}0204$
3	$v_{13} = \dfrac{x_1}{x_3},\ v_2 = x_2$	$y = -0{,}430 + 1{,}867 \cdot v_{13н} +$ $+ 3{,}446 \cdot v_{2н}$	$\bar{\delta}_v = 0{,}0670$
4	$v_{12} = x_1 \cdot x_2,$ $v_3 = 1/x_3$	$y = -2{,}308 + 3{,}081 \cdot v_{12н} +$ $+ 3{,}960 \cdot v_{3н}$	$\bar{\delta}_v = 0{,}0235$
5	$v_{123} = \dfrac{x_1 \cdot x_2}{x_3}$	$y = -0{,}059 + 4{,}125 \cdot v_{123н}$	$\bar{\delta}_v = 0{,}0044$

Из нее следует, что в 1,2 и 4 вариантах $\bar{\delta}_v$ меньше $\bar{\delta}_л$ примерно в два раза, а в 5 варианте в 12 раз. Таким образом, восстановленная зависимость в 5 варианте с достаточно большой точностью отвечает скрытой в выборке мультипликативной функции.

Примечание. В примерах 2 и 3 все действия, включая пределы изменения *x*, аналогичны описанным в примере 1.

Пример 2. Скрытая в искусственно синтезированной выборке нелинейная зависимость, содержащая мультипликативную функцию, имеет вид $y_u = 4 - 2 \cdot x_1 + 7 \cdot x_2 \cdot x_3$.

Т а б л и ц а 3.П. Фрагмент полученной выборки данных

№	x_1	x_2	x_3	$y_ш$
1	**0,427**	**0,280**	**0,492**	**5,969**
2	**0,408**	**0,106**	**0,368**	**4,933**
3	**0,389**	**0,212**	**0,327**	**5,437**
…	…	…	…	…
28	**0,409**	**0,140**	**0,206**	**4,813**
29	**0,309**	**0,245**	**0,391**	**5,297**
30	**0,425**	**0,152**	**0,398**	**5,296**
min:	0,300	0,106	0,204	4,713
max:	0,491	0,291	0,594	6,000

Находим:

$$y = 3{,}159 - 0{,}789 \cdot x_{1н} + 0{,}913 \cdot x_{2н} + 0{,}896 \cdot x_{3н}, \quad \bar{\delta}_л = 0{,}0113. \quad (2П)$$

Полученные результаты синтеза и восстановления зависимости $y = f(v)$ сведены в табл. 4.П.

Из нее следует, что в вариантах 2 и 5 $\bar{\delta}_v < \bar{\delta}_л$ соответственно, примерно в два и 1,7 раза. Таким образом, восстановленная зависимость в варианте 2 более всего отвечает скрытой в выборке нелинейной зависимости, содержащей мультипликативную функцию.

Пример 3. Скрытая в искусственно синтезированной выборке квадратичная зависимость имеет вид $y_u = 20 - 3 \cdot x_1^2 - 1 \cdot x_2 + 7 \cdot x_3^2$.

Т а б л и ц а 4.П. Сводная таблица результатов

№ п/п	Варианты синтеза ГОП	Восстановленная зависимость	Оценки
1	$\nu_1 = \frac{1}{x_1}$, $\nu_2 = x_2$, $\nu_3 = x_3$	$y = 1{,}914 + 0{,}768 \cdot \nu_{1н} + 0{,}935 \cdot \nu_{2н} + 0{,}895 \cdot \nu_{3н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}0114$
2	$\nu_1 = \frac{1}{x_1}$, $\nu_{23} = x_2 \cdot x_3$	$y = 2{,}433 + 0{,}828 \cdot \nu_{1н} + 1{,}219 \cdot \nu_{23н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}0053$
3	$\nu_{13} = \frac{x_3}{x_1}$, $\nu_2 = x_2$	$y = 3{,}005 + 0{,}283 \cdot \nu_{13н} + 1{,}071 \cdot \nu_{2н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}0127$
4	$\nu_{12} = \frac{x_2}{x_1}$, $\nu_3 = x_3$	$y = 2{,}500 + 1{,}001 \cdot \nu_{12н} + 0{,}912 \cdot \nu_{3н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}0128$
5	$\nu_{123} = \frac{x_2 \cdot x_3}{x_1}$	$y = 3{,}057 + 1{,}276 \cdot \nu_{123н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}0064$

Т а б л и ц а 5.П. Фрагмент полученной выборки данных

№	x_1	x_2	x_3	$y_ш$
1	**0,431**	**0,118**	**0,545**	**22,062**
2	**0,353**	**0,278**	**0,519**	**20,317**
3	**0,335**	**0,236**	**0,299**	**20,574**
…	…	…	…	…
28	**0,376**	**0,233**	**0,543**	**20,758**
29	**0,329**	**0,202**	**0,507**	**20,791**
30	**0,357**	**0,194**	**0,351**	**19,749**
min:	0,311	0,100	0,220	19,489
max:	0,489	0,290	0,590	22,150

Находим:

$$y = 20{,}546 - 0{,}890 \cdot x_{1н} - 1{,}480 \cdot x_{2н} + 2{,}482 \cdot x_{3н}, \quad \overline{\delta}_л = 0{,}1404. \qquad (3П)$$

Полученные результаты синтеза и восстановления зависимости $y = f(\nu)$ сведены в табл. 6.П.

Т а б л и ц а 6.П. Сводная таблица результатов

№ п/п	Варианты синтеза ГОП	Восстановленная зависимость	Оценки
1	$\nu_1 = \frac{1}{x_1}$, $\nu_2 = \frac{1}{x_2}$, $\nu_3 = x_3$	$y = 17{,}097 + 1{,}056 \cdot \nu_{1н} + 1{,}641 \cdot \nu_{2н} + 2{,}392 \cdot \nu_{3н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}1290$
2	$\nu_1 = \frac{1}{x_1}$, $\nu_{23} = \frac{x_3}{x_2}$	$y = 17{,}915 + 1{,}817 \cdot \nu_{1н} + 2{,}895 \cdot \nu_{23н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}1348$
3	$\nu_{13} = \frac{x_3}{x_1}$, $\nu_2 = \frac{1}{x_2}$	$y = 18{,}912 + 1{,}322 \cdot \nu_{13н} + 2{,}167 \cdot \nu_{2н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}1155$
4	$\nu_{12} = \frac{1}{x_1 \cdot x_2}$, $\nu_3 = x_3$	$y = 17{,}981 + 1{,}784 \cdot \nu_{12н} + 2{,}450 \cdot \nu_{3н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}1350$
5	$\nu_{123} = \frac{x_3}{x_1 \cdot x_2}$	$y = 19{,}383 + 2{,}885 \cdot \nu_{123н}$	$\overline{\delta}_\nu = 0{,}1500$

Из табл. 6.П. следует, что только в варианте 3 $\overline{\delta}_\nu < \overline{\delta}_л$ примерно в 1,2 раза. Таким образом, восстановленная зависимость в варианте 3 наиболее отвечает скрытой в выборке квадратичной зависимости.

Заключение. Построение эвристически целенаправленных стратегий поиска скрытых в данных нелинейных моделях физических процессов – не до конца решенная проблема. Применение для этих целей алгоритмов самоорганизации не всегда оправдано, поскольку оптимальная модель обычно не является следствием целенаправленного перебора и поэтому иногда оказывается противоречивой [6]. В этой связи в статье предпринята попытка показать, что при моделировании физических процессов, лежащих в основе построения новых технических систем и технологических процессов, следует иметь в виду важную особенность описания фундаментальных физических законов в виде мультипликативных функций. Это обстоятельство способствует выбору соответствующей математической модели, подчиняющейся реально существующей зависимости изменения функции отклика от приращения аргументов, что обеспечивает целенаправленность поиска.

1. *Кошкин Н.И.*, *Ширкевич М.Г.* Справочник по элементарной физике. – М.: Наука, 1988. – 254 с.
2. *Нильсон Н.* Искусственный интеллект. – М.: Мир, 1973. – 270 с.
3. *Бабак О.В.* Решение некоторых задач обработки данных на основе метода генеральной обобщенной переменной // Проблемы управления и информатики. – 2002. – № 6. – С. 78–91.
4. *Бабак О.В.*, *Татаринов А.Э.* Об одном подходе к решению некорректных задач идентификации физических объектов при разведочном анализе данных // УСиМ. – 2011. – № 1. – С. 19–24.
5. *Бабак О.В.*, *Татаринов А.Э.* О повышении точности решения полиномиальных задач идентификации объектов // Кибернетика и вычислительная техника. – 2004. – **143**. – С. 45–54.
6. *Ивахненко А.Г.* Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем. – Киев: Наук. думка, 1981. – 286 с.

Поступила 04.03.2011

Тел. для справок: (044) 526-4187, 502-6337 (Киев)
E-mail: *dep*175@*irtc.org.ua*