Міністерство освіти та науки України
Криворізький державний педагогічний університет

Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в природничих науках

Збірник наукових праць

Кривий Ріг
Видавничий відділ КДПУ
2000

ББК 32.973.3
К 63
УДК 681.3.001.57+37.01:007

Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в природничих науках: Збірник наукових праць. – Кривий Ріг: Видавничий відділ КДПУ, 2000. – 464 с.

Збірник містить статті з різних аспектів застосування моделювання у природничих науках та освітній діяльності, нових технологій навчання фізики, математики та інформатики. Значну увагу приділено інформаційним технологіям в управлінській діяльності.

Для студентів вищих навчальних закладів, аспірантів, наукових та педагогічних працівників.

Затверджено Вченою Радою Криворізького державного педагогічного університету (протокол №8 від 18.04.2000 р.)

ISBN 966-7048-05-7

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЙ СИМПЛЕКС–ПОИСК В ЗАДАЧАХ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ

А.П. Полищук, С.А. Семериков
г. Кривой Рог, Криворожский государственный педагогический университет

Идентификация модели динамического объекта – неотъемлемая часть решения общей задачи управления процессом, реализуемым в объекте под действием внешних управляющих или возмущающих воздействий.

Рассматривается следующая *типовая задача оценивания параметров математической модели динамических объектов*:

– структура модели определена по априорным сведениям об объекте (чаще всего на основе результатов анализа балансов – сил или моментов в механических системах, токов и напряжений в электрических цепях, денежных потоков в финансовых системах и пр.) в виде линейных или нелинейных дифференциальных уравнений с известным порядком и неизвестными коэффициентами;
– заданы дискретные числовые последовательности, представляющие собой результаты измерения входного и выходного сигналов объекта в равноотстоящие моменты времени;
– результаты измерения значений процесса на выходе могут быть искажены погрешностями различного происхождения;
– требуется определить такие численные оценки параметров модели, при которых модель при том же входном воздействии, которое было приложено к реальному объекту, генерирует процесс, максимально совпадающий с выходом реального объекта.

Первая трудность, которую необходимо преодолеть еще на постановочной стадии, состоит в определении понятия наилучшего совпадения процессов на выходах модели и реального объекта.

Для процессов, у которых оператор преобразования входной функции времени в выходную представлен линейными дифференциальными уравнениями и результаты измерения выхода слабо искажены, эта трудность отпадает – выходная функция представляет собой линейную комбинацию экспонент с комплексными показателями и задача может быть сведена к процедуре *экспоненциальной аппроксимации* и определению показателей степеней экспонент и соответствующих им коэффициентов. Идея метода кратко изложена в [1] и состоит для равноотстоящих данных в следующем. Выходная функция объекта представляется в виде

$$f(t) = \sum_{i=0}^{k} A_i e^{p_i t}$$

для множества равноотстоящих значений t=1, 2, 3, …, n. Здесь k – заданный порядок дифуравнения. Если все члены $e^{p_i t}$ (i=1, 2, …, k–1) удовлетворяют некоторому разностному уравнению k-го порядка с постоянными коэффициентами, то его характеристические корни равны $\rho = e^{p_i}$ и $f(t)$ также удовлетворяет такому уравнению вида

$$f(j) + \sum_{i=1}^{k} c_i f(j+i) = 0 \ \ (j=0,\ 1,\ 2,\ \ldots)$$

Если уравнений столько же, сколько неизвестных c_m и определитель $|f(j+n)|$ не равен нулю, то уравнения решаются для c_j и из корней характеристического уравнения

$$\rho^k + c_1\rho^{k-1} + \ldots + c_k = 0$$

находят p_i. При наличии более $2k$ узлов используют метод наименьших квадратов, получая нормальные уравнения и находя по очереди p_i и A_i. Собственно задача идентификации практически решена после нахождения p_i, определяющих как коэффициенты характеристического полинома, так и коэффициенты дифуравнения.

Нами разработан комплекс C++ – программ, включающий определение параметризованных классов векторов, матриц, полиномов и параметризованных функций работы с объектами этих классов (включая вычисление комплексных корней полиномов), а также программы для решения линейных дифуравнений операторным методом, основанным на интегральном преобразовании Лапласа, и программы для реализации метода экспоненциальной аппроксимации для определения параметров обыкновенных линейных дифуравнений [2, 3]. Программный комплекс включает также функции графического представления функций, позволяющий сравнивать объектный и модельные процессы на разных фазах идентификации различными методами. Исследования показали удовлетворительную работоспособность метода при уровнях равномерно распределенных шумов до 1-го процента от модуля вектора незашумленного выхода объекта, вычисленного по всем измерениям (в опытах использовалось 100 измерений). При дальнейшем увеличении уровня шумов погрешности аппроксимации быстро растут и результаты идентификации становятся неприемлемыми для практического использования.

Широко используется на практике для линейных систем также *метод моментов* i-го порядка (площадей) [4] функции $f(t)$ – реакции объекта на некоторое стандартное возмущение (например, импульс или ступенька):

$$M_i = \frac{(-1)^i}{i!}\int_0^{\infty} t^i f(t)dt$$

При использовании метода стремятся получить модель объекта в виде передаточной функции в дробно-рациональной форме вида

$$W(p) = \frac{\sum_{i=1}^{m} b_i p^i + 1}{\sum_{i=1}^{n} a_i p^i + 1},$$

для чего в Лапласовом преобразовании функции $f(t)$ множитель e^{-pt} разлагают в ряд Тейлора и получают выражение изображения функции через моменты вида

$$L(f(t)) = \sum_{i=0}^{\infty} M_i p^i .$$

Далее представляют изображение реакции модели через передаточную функцию и приравнивают коэффициенты при одинаковых степенях переменной p для получения уравнений, связывающих неизвестные коэффициенты a_i, b_i с моментами M_i.

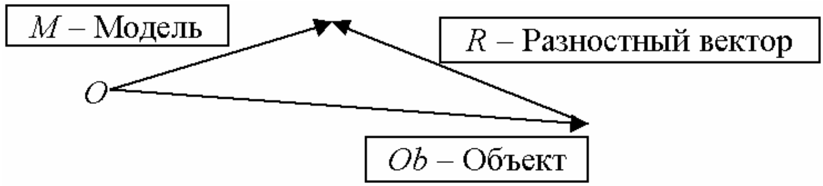
Исследования показали более высокую устойчивость метода моментов к уровню зашумленности экспериментальных данных – для объектов 2-го порядка удовлетворительные результаты получены при уровнях погрешностей измерения до 4% за счет сглаживающего влияния процедуры интегрирования. Но при этом возникает ряд трудно формализуемых процедур, связанных с выбором оптимальных шага дискретизации измерений и замены бесконечного верхнего предела интегрирования конечным. Оба параметра сильно влияют на получаемый результат, равно как и используемый метод численного интегрирования. Кроме того, при порядке дифуравнения выше 2-го точность вычисления моментов (а их необходимо $m+n$) быстро падает – влияние помех при больших t увеличивается с ростом номера момента, а работа в малых временных интервалах обрезает количество экспериментальной информации для идентификации.

В связи с изложенными недостатками методы, использующие в процедурах оценивания явные математические выражения, в последние годы все чаще заменяются поисковыми методами оценивания с настраиваемой моделью, и здесь уже без четкого определения косвенного критерия качества идентификации не обойтись – приходится решать задачу поиска экстремума некоторого функционала от выходных функций объекта и модели и результаты зависят от принятого критерия. Основное требование к критерию оценки близости выходных функций объекта и модели сводится к тому, что он должен быть унимодальной функцией оцениваемых параметров модели, то есть описываемая им гиперповерхность в пространстве коэффициентов искомого дифуравнения должна иметь единственный минимум или максимум. Это требование связано с тем, что методы поиска глобальных экстремумов функций многих переменных пока слабо разработаны. При соблюдении этого требования алгоритм идентификации сводится к организации движения по гиперповерхности в сторону минимума – чаще всего используется метод градиента или случайного поиска. Оба метода обладают существенными недостатками – слишком большое количество пробных шагов при случайном поиске и трудность получения приемлемой точности вычисления частных производных в методе градиента.

В качестве критерия оценки близости выходных процессов объекта и модели обычно используют квадратичный критерий вида

$$Q=\sqrt{\sum_{i=0}^{n}\left(f_{ob}(i)-f_{\mathrm{mod}}(i)\right)^{2}}\ \rightarrow extremum$$

Он приводит к известному Гауссовому методу наименьших квадратов. При геометрической интерпретации этого критерия можно рассмотреть два вектора размерности *n* (количество измерений), составляющими которых являются значения выходных функций объекта и модели в соответствующие моменты времени:



Из рисунка видно, что по квадратичному критерию минимизируется квадрат модуля разностного вектора *R* – третья сторона треугольника, построенного на модулях векторов объекта и модели.

$$M_{ob}^2 + M_{\mathrm{mod}}^2 - 2M_{ob}M_{\mathrm{mod}} = M_R^2$$

Этот минимум равен нулю и достигается при равенстве модулей исходных векторов и совпадении их направлений.

В поисковых процедурах требование совпадения модулей векторов является уже избыточным – достаточно добиться совпадения направлений векторов модели и объекта, а необходимое масштабирование всех найденных параметров модели легко выполняется делением на один из них. При этом в качестве критерия близости функций выхода для модели и объекта можно использовать либо достижение минимума угла между векторами (он равен нулю в идеальном случае), либо максимум косинуса этого угла (не более 1). Для вычисления последнего достаточно отнормировать объектный и модельный векторы каждый по своему модулю и вычислить их скалярной произведение как сумму произведений составляющих. Этот критерий близости и используется в настоящей работе.

О методе поиска.

В 1962 году Спиндлеем, Херстом и Химсуорсом был предложен *метод последовательного симплексного поиска* (метод ПСМ) в многомерном пространстве [5]. Оригинальность метода состоит в том, что движение к оптимуму в многомерном пространстве независимых переменных осуществляется последовательным отражением вершин симплекса. В k-мерном евклидовом пространстве *симплексом* называют фигуру, образованную k+1 точками (вершинами), не принадлежащими одновременно ни одному пространству меньшей размерности. В одномерном пространстве симплекс есть отрезок прямой, в двумерном – треугольник, в трехмерном – тетраэдр и т. д. Симплекс называется регулярным, если расстояния между его вершинами равны. В ПСМ используются регулярные симплексы.

Из любого симплекса, отбросив одну его вершину, можно получить новый симплекс, если к оставшимся вершинам добавить всего одну точку. Это замечательное свойство и было использовано авторами метода при построении алгоритма движения симплекса в сторону искомой цели.

Для оценки направления движения во всех вершинах симплекса необходимо определить значения целевой функции Q_j. При поиске максимума наиболее целесообразным будет движение от вершины v_s с наименьшим значением Q_s к противоположной грани симплекса. Шаг поиска выполняется переходом из некоторого симплекса S_{n-1} в новый симплекс S_n путем исключения вершины v_s и построения ее зеркального отображения $v_{нs}$ относительно грани, общей обоим симплексам. Многократное отражение худших вершин приводит к шаговому движению центра симплекса к цели по траектории некоторой ломаной линии. Если не учитывать эксперименты в вершинах исходного симплекса, то на каждый шаг поиска требуется всего одно определение целевой функции.

Исходные данные для построения алгоритма:

– количество независимых переменных k;
– предельные значения каждой i-й независимой переменной $x_{i\min}$, $x_{i\max}$. Для реальных объектов исследования эти предельные значения определяются априорными сведениями, условиями безопасности при проведении экспериментов и т.д.;
– допустимая ошибка в определении координат оптимума ε;
– предполагается также возможность определения значения целевой функции $Q(x_{1j}, x_{2j}, \ldots, x_{ij}, \ldots, x_{kj})$ для каждой j-й вершины симплекса.

<u>*Подготовительные операции*</u>:

1. Прежде всего необходимо определить стартовую точку для начала поисковых процедур; при отсутствии дополнительных априорных данных естественно расположить ее в центре области, ограниченной предельными значениями независимых переменных:

$x_{1c}=(x_{1\max}–x_{1\min})/2$, $x_{2c}=(x_{2\max}–x_{2\min})/2$, …, $x_{kc}=(x_{k\max}–x_{k\min})/2$.

Перенос в эту точку начала координат облегчит последующие вычислительные процедуры (достигается вычитанием).

2. Определяются координаты вершин начального симплекса. Из множества возможных ориентаций начального симплекса на практике используют два варианта:

а) Когда центр симплекса располагается в начале координатной системы, а одна из вершин – (n+1)-я – на оси x_n. Остальные вершины при этом расположатся симметрично относительно координатных осей.

Координаты вершин вычисляются в этом варианте с помощью матрицы:

Номер вершины	Координаты вершин					
	x_1	x_2	x_3	...	x_{n-1}	x_n
1	$–r_1$	$–r_2$	$–r_3$	...	$–r_{n–1}$	$–r_n$
2	R_1	$–r_2$	$–r_3$	...	$–r_{n–1}$	$–r_n$
3	0	R_2	$–r_3$	...	$–r_{n–1}$	$–r_n$
...	...	...	...	...	...	…
n	0	0	0	...	$R_{n–1}$	$–r_n$
n+1	0	0	0	...	0	R_n

где при единичной длине ребра симплекса $r_i=\dfrac{1}{\sqrt{2i(i+1)}}$,

$R_i=\dfrac{1}{\sqrt{2(i+1)}}$, i=1, 2, ..., n.

б) Во втором варианте одна из вершин симплекса размещается в начале координат, а исходящие из нее ребра образуют одинаковые углы с соответствующими осями. Вспомогательная расчетная матрица для координат вершин начального симплекса имеет вид:

Номер вершины	Координаты вершин					
	x_1	x_2	x_3	...	x_{n-1}	x_n
1	0	0	0	...	0	0
2	p	q	q	...	q	q
3	q	p	q	...	q	q
4	q	q	p	...	q	q
...	...	...	...	...	...	…
n+1	q	q	q	...	q	p

где при единичной длине ребра $p=n-1+\frac{\sqrt{n+1}}{n\sqrt{2}}$, $q=\frac{\sqrt{n+1}-1}{n\sqrt{2}}$.

3. Получаем значения функции отклика в вершинах исходного симплекса и на этом завершаем подготовительные операции.

Алгоритм поиска.

В цикле с выходом по условию выполняем:

1. Отбрасываем вершину с наихудшим значением критерия оптимальности (наименьшим при поиске максимума или наибольшим при поиске минимума).

2. Вычисляем координаты вершины, зеркально отображаемой отброшенной относительно противоположной ей грани симплекса:

$$x_i=x_i(2(x_{1i}+x_{2i}+...+x_{j-1,\,i}+x_{j+1,\,i}+...+x_{n+1,\,i})/n-x_{ji},$$

где j – номер отбрасываемой вершины, i – номер координаты.

3. Проводим эксперимент в новой точке для получения значения целевой функции.

Условием выхода из цикла может быть малое приращение целевой функции на протяжении заданного числа опытов или при сохранении одной из вершин своего присутствия в симплексе заданное число раз и т.п.

При приближении к области оптимума точность может быть повышена уменьшением размера симплекса, но при наличии погрешностей в определении значений целевой функции необходимо ограничить размер симплекса снизу, чтобы избежать блужданий под действием случайных шумов измерений.

Преимущества метода:

– число необходимых опытов для определения направления движения мало по сравнению с другими методами;

– легко учитываются ограничения на область изменения варьируемых при поиске факторов;
– эффективность метода растет с увеличением мерности пространства поиска и увеличение порядка моделируемого объекта не влечет за собой отрицательных последствий;
– малый объем вычислений на каждом шаге;
– отсутствие высоких требований к точности оценки значения целевой функции – достаточно возможности надежно проранжировать значения качественно по принципу «больше–меньше»;
– метод пригоден для преследования дрейфующей цели (максимума или минимума), что делает его применимым в адаптивных алгоритмах для объектов со сравнительно медленно меняющимися характеристиками;
– возможность изменять мерность пространства на ходу изменением количества вершин симплекса.

Недостатки метода:

– отсутствие данных о влиянии каждого фактора на целевую функцию;
– трудность интерпретации характера поверхности отклика по данным реализуемых в методе опытов.

Результаты испытаний метода.

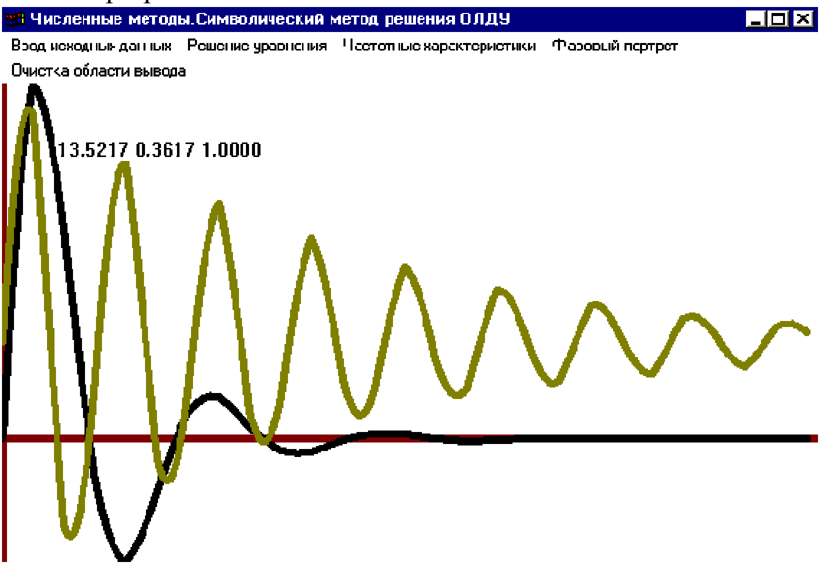
Для испытаний метода была составлена программа реализации ПСМ, объединенная с ранее упомянутым программным комплексом для анализа динамических процессов. По сравнению с методами экспоненциальной аппроксимации и методом моментов использованный метод настройки модели оказался значительно более помехоустойчивым – уровень помех до 10% практически мало влияет на направление объектного вектора и для получения удовлетворительных результатов достаточно от 20 до 30 шагов поиска при удачно выбранном масштабе для ребра исходного симплекса. Выбор этого масштаба – отдельная задача, решение которой облегчается, если известны хотя бы приближенно диапазоны предстоящего поиска для каждого параметра модели. В противном случае на этапе построения исходного симплекса приходится искать компромисс между желаемой высокой скоростью поиска, достижимой точностью и хорошей чувствительностью критерия оценки к изменениям координат вершин симплекса. Ниже приведены результаты испытаний метода при идентификации параметров динамического звена второго порядка

$$40\frac{d^2 f(t)}{dt^2}+4\frac{df(t)}{dt}+1,$$

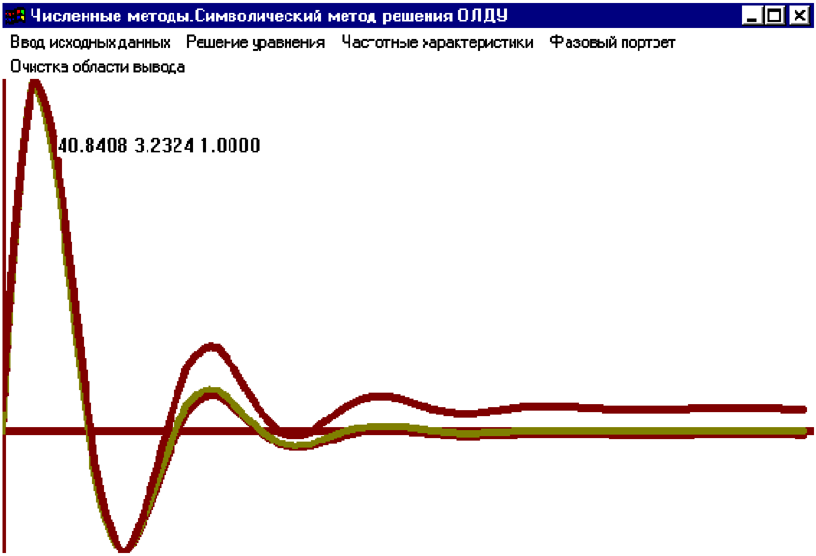
возмущенного импульсным воздействием на входе с наложением равномерно распределенного шума различного уровня, отсчитанного в приведенных данных в % от модуля вектора незашумленного выхода объекта. Количество точек измерения – 100. Масштаб ребра исходного симплекса – 0.55.

Количество итераций (шагов поиска)	Уровень шума, %	Коэффициенты модели (расчетные)		
		A_2	A_1	A_0
10	5	41.01	4.36	1.0
25	12	39.83	3.11	1.0
100	13	39.95	4.2	1.0
300	15	40.00	4.076	1.0
600	16	39.95	4.23	1.0

На размещенных ниже рисунках приведены иллюстрации объектного и модельного процессов на разных фазах процесса поиска при различном количестве шагов поиска.

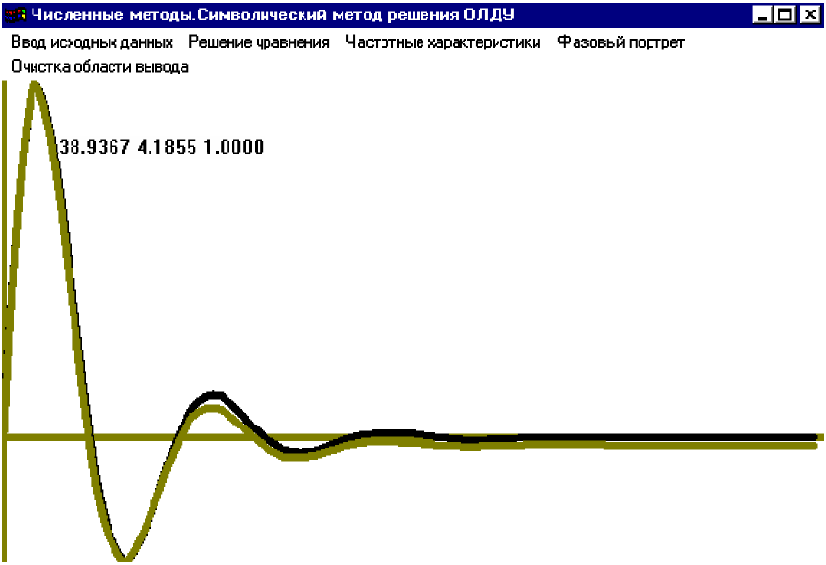


Дальнейшее совершенствование алгоритма в направлении повышения устойчивости к измерительным шумам и скорости сходимости к оптимуму может осуществляться традиционными методами – уменьшением шага дискретности в представлении объектного вектора, усреднения данных на скользящем интервале времени и другими методами повышения отношения сигнал/шум, использованием поиска с переменным (уменьшающимся по мере приближения к оптимуму) размером симплекса с контролем надежной различимости значений критерия в различных вершинах.



Литература:

1. Хемминг Р.В. Численные методы. – М.: Наука, 1972. – с. 342.
2. Полищук А.П., Семериков С.А. Методы вычислений в классах языка C++: Учебное пособие. – Кривой Рог: Издательский отдел КГПИ, 1999. – 350 с.
3. Полищук А.П., Семериков С.А. Автоматика: Учебное пособие. – Кривой Рог: Издательский отдел КГПИ, 1999. – 277 с.
4. Балакирев В.С., Дудников Е.Г., Цирлин А.Н. Экспериментальное определение динамических характеристик промышленных объектов управления. – М.: Энергия, 1967.
5. Дамбраускас А.П. Симплексный поиск. – М.: Энергия, 1979.


Численные методы.Символический метод решения ОЛДУ
Ввод исходных данных
Решение уравнения
Частотные характеристики
Фазовый портрет
Очистка области вывода
38.9367 4.1855 1.0000

Зміст

Наукове видання

Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в природничих науках

Збірник наукових праць

Підп. до друку 03.04.2000	Формат 80x84 1/16.
Бумага офсетна №1	Зам. №4-0302
Ум. друк. арк. 26,10	Наклад 500 прим.

Видавничий відділ Криворізького державного педагогічного університету
КДПУ, 50086, Кривий Ріг-86, пр. Гагаріна, 54

E-mail: vyd@kpi.dp.ua