

# Оптимизация параметров численного метода для модели экологических сообществ

**Куркин М. Л., Чуканов И.В.**  
научный руководитель — **Никитин А. А.**

Москва, НИУ ВШЭ, 24 июня 2021 г.

## Общие положения

- В пространстве  $\mathbb{R}^N$  ( $N = 1, 2, 3$ ) некоторым образом распределено одновидовое сообщество, каждая особь которого является материальной точкой.
- Особи умирают от конкуренции и неблагоприятных условий среды, а также порождают новых представителей своего вида.
- $d \geq 0$  — естественная смертность вида,  $b > 0$  — плодовитость вида,  $d' \geq 0$  — агрессивность вида.

## Ядра

$m(x), w(x) : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  — ядра разброса и конкуренции, определяющие пространственную структуру. Данные функции при всех  $i, j = \overline{1, n}$  принадлежат классу

$$K(\mathbb{R}^N) = \left\{ f \in L_1(\mathbb{R}^N) \mid \|f\|_{L_1} = 1; f(x) = F(\|x\|_{\mathbb{R}^N}) : F \geq 0, \lim_{r \rightarrow +\infty} F(r) = 0 \right\}$$

## Точечные процессы

Модель может быть реализована в виде совокупности  $n$  точечных стационарных процессов. Имеет смысл ввести усреднённые характеристики таких процессов.

## Определение

Пусть  $N_t(D)$  — количество особей в области  $D$  в момент времени  $t$ . Пространственным моментом порядка  $k$  будем называть величину

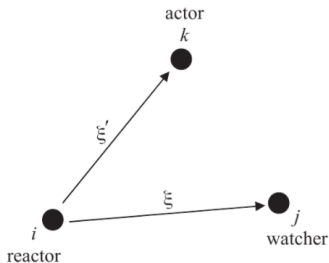
$$\tilde{M}(x_1, x_2, \dots, x_k, t) = \lim_{\substack{D_1 \rightarrow x_1 \\ D_2 \rightarrow x_2 \\ \dots \\ D_k \rightarrow x_k}} \frac{\mathbb{E} \left( N_t(D_1) N_t(D_2) \cdot \dots \cdot N_t(D_k) \right)}{\mu(D_1) \mu(D_2) \cdot \dots \cdot \mu(D_k)},$$

где  $\mu(\cdot)$  — стандартная мера в  $\mathbb{R}^N$ , а сходимость понимается в смысле стягивания областей в точки. При этом считается, что все точки  $x_i$  различны, в противном случае момент по определению считается равным нулю.

# Моменты модели

Для описания численных характеристик модели в каждый момент времени мы используем три основных функции — пространственных момента (spatial moments):

- **N** - первый момент, ожидаемая плотность популяции (population density).
- **C**( $\xi$ ) - второй момент, ожидаемая плотность пар на расстоянии  $\xi$  (pairwise density).
- **T**( $\xi, \xi'$ ) - третий момент, ожидаемая плотность троек, первый член которых отстоит от второго и третьего на расстояниях  $\xi, \xi'$  соответственно (triplet density).



## Динамика моментов

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = (b - d)N - d' \int_{\mathbb{R}^n} C(\xi)w(\xi) d\xi, \\ 0 = bm(\xi)N + \int_{\mathbb{R}^n} bm(\xi')C(\xi + \xi') d\xi' - (d + d'w(\xi))C(\xi) - \\ - \int_{\mathbb{R}^n} d'w(\xi')T(\xi, \xi') d\xi'. \end{array} \right. \quad (1)$$

# Приведённая система уравнений

Техника замыкания (Murrell D. J., Dieckmann U. On moment closures for population dynamics in continuous space, **2004.**):

$$T_{\alpha, \beta, \gamma}(\xi, \xi') = \frac{1}{\alpha + \gamma} \left( \alpha \frac{C(\xi)C(\xi')}{N} + \beta \frac{C(\xi)C(\xi - \xi')}{N} + \gamma \frac{C(\xi')C(\xi' - \xi)}{N} - \beta N^3 \right) \quad (2)$$

$$\begin{cases} 0 = (b - d)\mathbf{N} - \langle \mathbf{C}, \bar{w} \rangle \\ 0 = \bar{m}\mathbf{N} + [\mathbf{C} * \bar{m}] - d\mathbf{C} - \bar{w}\mathbf{C} - \\ \frac{1}{\alpha + \gamma} \left( \alpha \frac{\mathbf{C} \langle \mathbf{C}, \bar{w} \rangle}{N} + \beta \frac{\mathbf{C}[\mathbf{C} * \bar{w}]}{N} + \gamma \frac{[\mathbf{C} * \mathbf{C}\bar{w}]}{N} - \beta N^3 \right) \end{cases} \quad (3)$$

Где

$$\bar{w} = d'w(\xi), \quad \bar{m} = bm(\xi),$$

$$[\mathbf{A} * \mathbf{B}] = \int_{\mathbb{R}} A(\xi') B(\xi + \xi') d\xi', \quad \langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \int_{\mathbb{R}} A(\xi) B(\xi) d\xi.$$

	<b>Симуляции (точечный процесс Пуассона)</b>	<b>Численный метод (ряд Неймана)</b>
+	Точное описание популяции и её пространственных характеристик	Быстрая сходимость метода, скорость вычислений
-	Отсутствие критерия остановки, вычислительная трудоёмкость	Погрешность решения (замыкание + параметры)

$$A_{\alpha,\beta,\gamma}Q = \frac{\frac{\gamma\bar{m}}{b-d} - \bar{w} + [\bar{m} * Q] - \frac{b-d}{(\alpha+\gamma)Y} \left( \beta(d' - 1) + (\beta(Q + 1) + \gamma)[\bar{w} * Q] + \gamma[\bar{w}Q * Q] \right)}{\bar{w} + d - \frac{b-d}{(\alpha+\gamma)Y} (\alpha Y - \beta d')}$$

Численный метод Неймана решения системы записывается в виде:

$$\begin{aligned} (N_{i+1}, C_{i+1}) &= \sum_{k=1}^i A_{\alpha,\beta,\gamma}(N_k, C_k) \\ N_0 &= 0, C_0(x) = d'w(x) \end{aligned} \quad (4)$$

где  $A_{\alpha,\beta,\gamma}$  - оператор, действующий на  $N_i \in \mathbb{R}, C_i \in \mathbb{R}^n$ .



Задача оптимизации по  $\alpha, \beta, \gamma$  - параметрам метода (3):

$$\min_{\alpha, \beta, \gamma} L = \left\| \sum_{k=1}^i A_{\alpha, \beta, \gamma}(N_k, C_k) - C_{sim} \right\|_2^2$$

s. t.  $\alpha + \beta + \gamma = 1$

Используем Байесовскую оптимизацию для выбора начального приближения. Для  $t = 1, 2, \dots$ :

- 1 Найти следующую точку для семплирования целевой функции относительной ошибки  $\mathbf{x}_t = (\alpha, \beta, \gamma)_t$ , оптимизируя функцию выигрыша с помощью Гауссовского процесса:  $\mathbf{x}_t = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x} \mid \mathcal{D}_{1:t-1})$
- 2 Получить значение целевой функции  $y_t = L(\mathbf{x}_t)$
- 3 Добавить новое значение в статистику  $\mathcal{D}_{1:t} = \mathcal{D}_{1:t-1}, (\mathbf{x}_t, y_t)$  и обновить Гауссовский процесс.

# Expected Improvement

Функция выигрыша типа ожидаемого улучшения (Expected Improvement):

$$EI(\mathbf{x}) = \mathbb{E} \max (f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^+), 0)$$

где  $f(\mathbf{x}^+)$  наилучшее значение целевой функции,  $\mathbf{x}^+$  - точка достижения значения, т. е.  $\mathbf{x}^+ = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x}_i \in \mathbf{x}_{1:t}} f(\mathbf{x}_i)$ . EI можно оценить с помощью Гауссовского процесса:

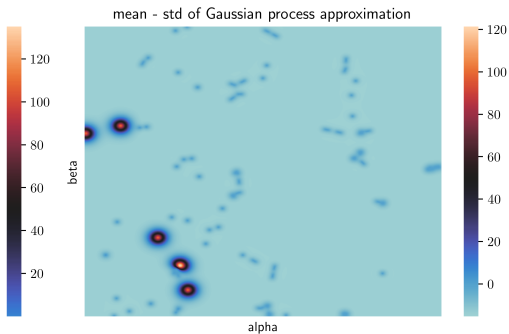
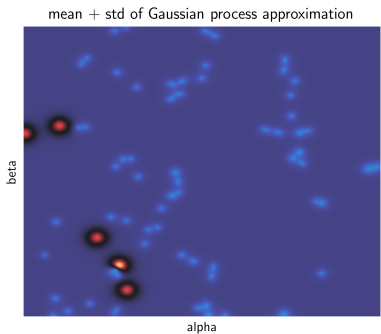
$$EI(\mathbf{x}) = \begin{cases} (\mu(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^+) - \xi) \Phi(Z) + \sigma(\mathbf{x})\phi(Z) & , \text{ если } \sigma(\mathbf{x}) > 0 \\ 0 & , \text{ если } \sigma(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

где

$$Z = \begin{cases} \frac{\mu(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^+) - \xi}{\sigma(\mathbf{x})} & , \text{ если } \sigma(\mathbf{x}) > 0 \\ 0 & , \text{ если } \sigma(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

где  $\mu(\mathbf{x})$  и  $\sigma(\mathbf{x})$  математическое ожидание и дисперсия постериорного распределения  $\mathbf{x}$ .  $\Phi$  и  $\phi$  - ф.р. и плотность стандартного нормального распределения.

# Пример оценки функции ошибки Гауссовским процессом



# Метод проекции градиента

Шаг градиентного спуска:  $(x = \alpha, \beta, \gamma)$ ,  $X = \{x \in \mathbb{R}^3 : \langle x, \mathbf{1} \rangle = 1\}$ :

$$x_{i+1} = P_X(x_i - \lambda_i \nabla L(x_i))$$

Длина шага:

- Постоянный шаг  $\lambda_i = \lambda$
- Убывающий шаг  $\lambda_i = \frac{\lambda}{i+1}$
- Линейный поиск, обеспечивающий правило Вольфа:

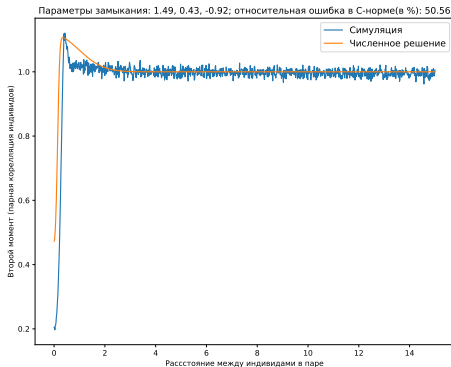
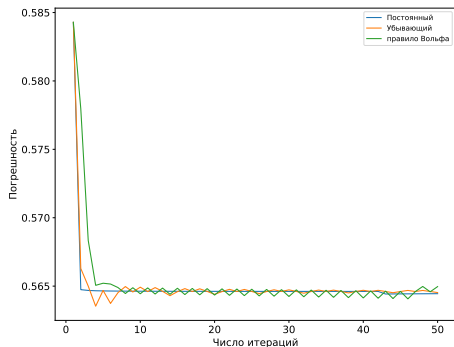
$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \beta_1 \alpha_k \langle f'(x_k), h_k \rangle,$$

$$\langle f'(x_{k+1}), h_k \rangle \geq \beta_2 \langle f'(x_k), h_k \rangle$$

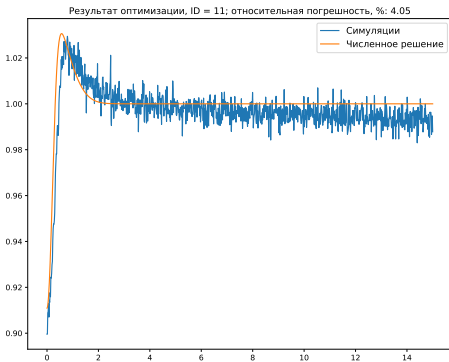
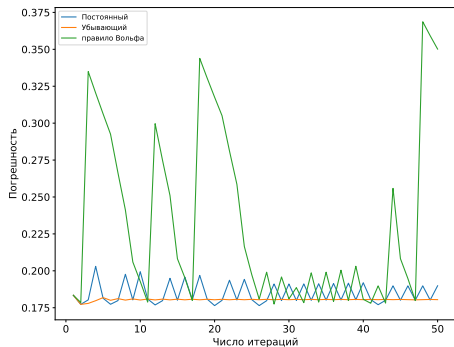
Правило Вольфа обеспечивает не менее, чем линейную сходимость метода, т.е.

$$|f(x^*) - f(x_k)| \leq \varepsilon \Rightarrow k = O\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$$

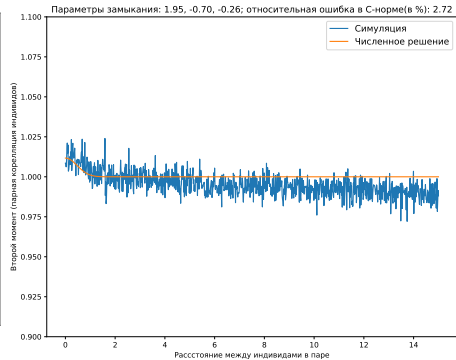
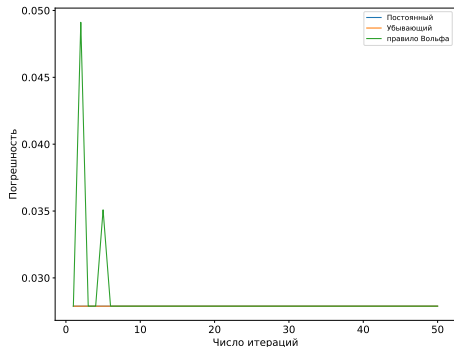
# Результаты экспериментов



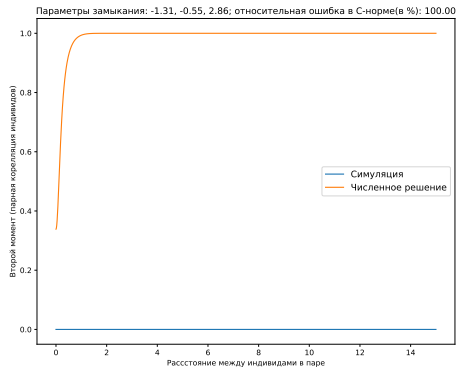
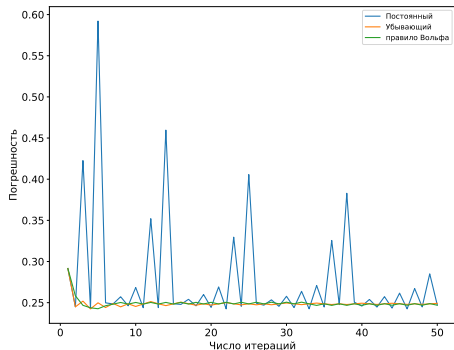
# Результаты экспериментов



# Результаты экспериментов



# Результаты экспериментов





# Результаты экспериментов

