

Исследование и применение методов оптимизации параметров численного метода решения интегрального уравнения

Куркин М. Л.

научный руководитель — **Никитин А. А.**

Чуканов И. В.

кафедра Общей математики
МГУ имени М.В.Ломоносова

Москва

18 января, 2021 г.

Система уравнений и замыкание

Данная модель распространения неподвижных сообществ была описана U. Dieckman и R. Law. Параметры модели $b, d, d' \in \mathbb{R}$ описывают рождаемость вида, гомогенную смертность (факторы среды) и агрессивность конкуренции вида. Модель описывается следующей системой интегро-дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} 0 = \frac{dN(t)}{dt} = (b - d)N - d' \int_{\mathbb{R}} C(\xi) w(\xi) d\xi \\ 0 = \frac{dC(\xi, t)}{dt} = bm(\xi)N + \int_{\mathbb{R}} bm(\xi') C(\xi + \xi') d\xi' - \\ - (d + d'w(\xi)) C(\xi) - \int_{\mathbb{R}} d'w(\xi') T(\xi, \xi') d\xi' \end{cases} \quad (1)$$

Для решения системы было предложено трёхпараметрическое замыкание третьего пространственного момента этой модели $T(\xi, \xi')$, зависящее от трёх параметров $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}$:

$$T(\xi, \xi') \approx \frac{1}{\alpha + \gamma} \left(\alpha \frac{C(\xi)C(\xi')}{N} + \beta \frac{C(\xi)C(\xi - \xi')}{N} + \gamma \frac{C(\xi')C(\xi' - \xi)}{N} - \beta N^3 \right) \quad (2)$$

Приведённая система уравнений

Оно приводит модель к системе нелинейных интегральных уравнений:

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

Где

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

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

$$m(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_m} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_m^2}}, \quad w(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_w^2}}$$

ID	σ_m	σ_w	b	d	d'	Выживаемость
1	0.96	0.09	0.2	0.02	0.02	да
2	0.45	0.45	0.2	0.02	0.02	да
3	0.09	0.96	0.2	0.02	0.02	да
4	0.96	0.09	0.2	0.02	0.2	да
5	0.45	0.45	0.2	0.02	0.2	нет
6	0.09	0.96	0.2	0.02	0.2	нет
7	0.96	0.09	0.2	0.02	0.4	да
8	0.45	0.45	0.2	0.02	0.4	нет
9	0.09	0.96	0.2	0.02	0.4	нет

Параметры замыкания $T(\xi, \xi')$:

$$\alpha + \beta + \gamma = 1, \quad \alpha, \beta \in [-0.5, 0.5]$$

Для $t = 1, 2, \dots$:

- 1 Найти следующую точку для семплирования целевой функции относительной ошибки $\mathbf{x}_t(\alpha, \beta)$, 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 зашумлённое значение $y_t = f(\mathbf{x}_t) + \varepsilon_t$ функции относительной ошибки $f = \frac{\|\mathbf{c} - \mathbf{c}_{sim}\|}{\|\mathbf{c}_{sim}\|}$
- 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:

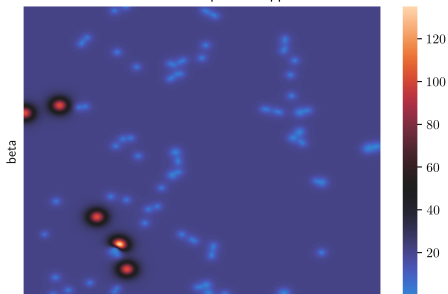
$$EI(\mathbf{x}) = \begin{cases} (\mu(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^+) - \xi) \Phi(Z) + \sigma(\mathbf{x}) \phi(Z) & \text{если } \sigma(\mathbf{x}) > 0 \\ 0 & \text{если } \sigma(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

где

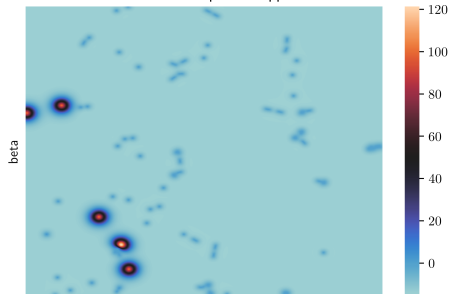
$$Z = \begin{cases} \frac{\mu(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^+) - \xi}{\sigma(\mathbf{x})} & \text{if } \sigma(\mathbf{x}) > 0 \\ 0 & \text{if } \sigma(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

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

mean + std of Gaussian process approximation



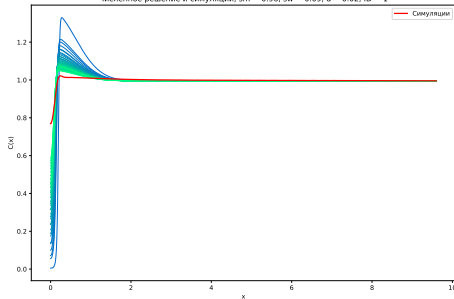
mean - std of Gaussian process approximation



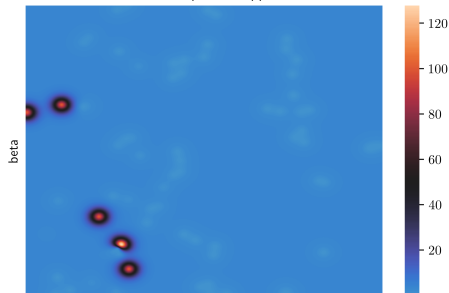
alpha

alpha

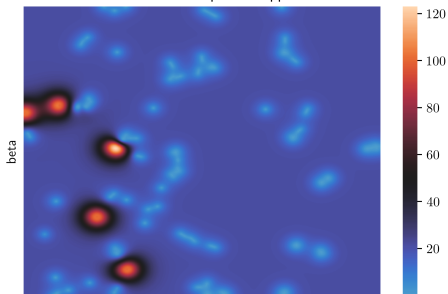
Численное решение и симуляции, $sm = 0.96$, $sw = 0.09$, $d^* = 0.02$, $ID = 1$



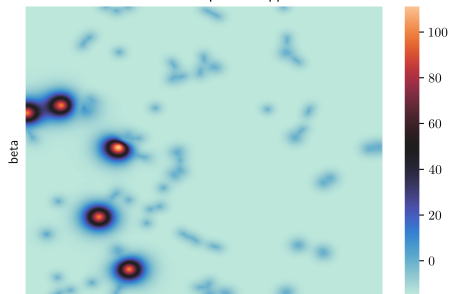
mean of Gaussian process approximation



mean + std of Gaussian process approximation



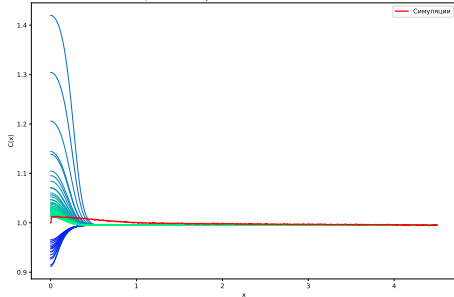
mean - std of Gaussian process approximation



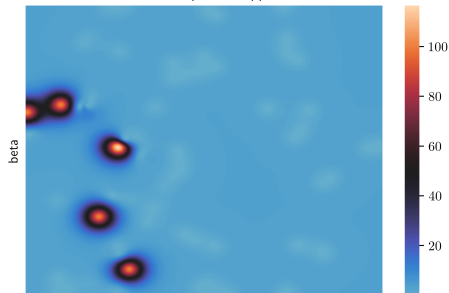
alpha

alpha

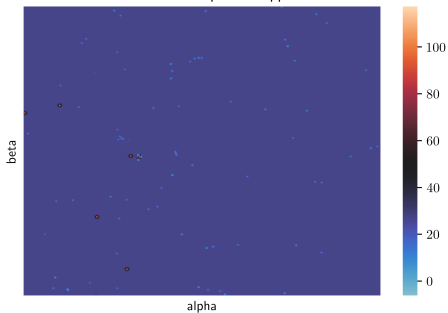
Численное решение и симуляция, $sm = 0.45$, $sw = 0.45$, $d' = 0.02$, $ID = 2$



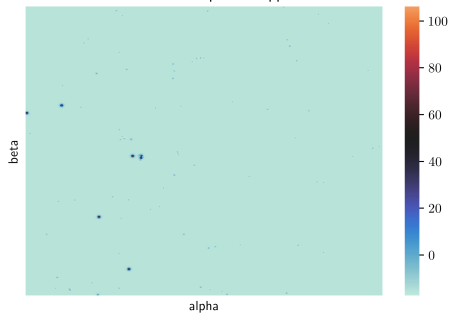
mean of Gaussian process approximation



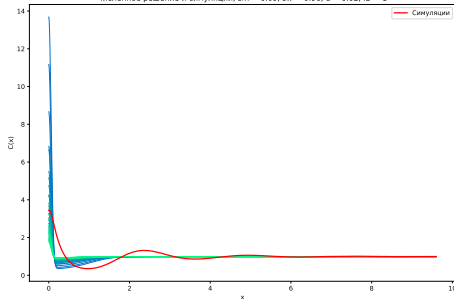
mean + std of Gaussian process approximation



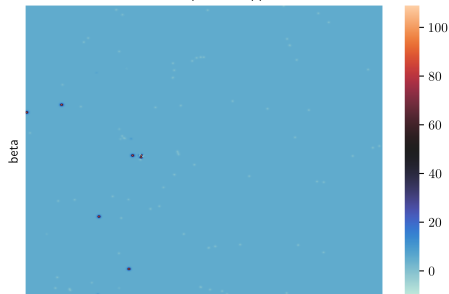
mean - std of Gaussian process approximation



Численное решение и симуляции, $sm = 0.09$, $sw = 0.96$, $d' = 0.02$, $ID = 3$



mean of Gaussian process approximation



Для описания состояния модели мы используем три основных функции-момента (spatial moments):

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

Динамика первого момента

$$\dot{\mathbf{N}} = (b - d)\mathbf{N} - d' \int_{\mathbb{R}^n} w(\xi) \mathbf{C}(\xi) d\xi$$

Динамика второго момента

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{C}}(\xi) = & +bm(\xi)\mathbf{N} + b \int_{\mathbb{R}^n} m(\xi') \mathbf{C}(\xi + \xi') d\xi' \\ & - d\mathbf{C}(\xi) - d'w(\xi)\mathbf{C}(\xi) - d' \int_{\mathbb{R}^n} w(\xi') \mathbf{T}(\xi, \xi') d\xi' \end{aligned}$$

Замыкания (moment closures)

$$T(\xi, \xi') \approx F(N, C(\xi))$$

Свойства замыканий

1. $\lim_{|\xi'| \rightarrow \infty} T(\xi, \xi') = C(\xi)N.$
2. $\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} T(\xi, \xi') = C(\xi')N.$
3. Если $C(\xi) = N^2$, то $T(\xi, \xi') = N^3.$

Примеры замыканий

1. $T_1(\xi, \xi') \approx C(\xi)C(\xi')/N;$
2. $T_2(\xi, \xi') \approx \frac{1}{2N} (C(\xi)C(\xi') + C(\xi)C(\xi' - \xi) + C(\xi')C(\xi' - \xi) - N^2);$
3. $T_3(\xi, \xi') \approx \alpha T_1 + (1 - \alpha)T_2;$
4. $T_4(\xi, \xi') \approx \frac{1}{\alpha + \gamma} \left(\alpha \frac{C(\xi)C(\xi')}{N} + \beta \frac{C(\xi)C(\xi - \xi')}{N} + \gamma \frac{C(\xi')C(\xi' - \xi)}{N} - \beta N^3 \right).$

$$T_1(\xi, \xi') \approx C(\xi)C(\xi')/N$$

$$\begin{aligned}(b + d' w(x))C(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} b m(y) C(x + y) dy + \\ &+ \frac{b}{(b - d)} m(x) \int_{-\infty}^{\infty} d' w(y) C(y) dy.\end{aligned}$$

Ulf Dieckmann, *"IIASA's Spring Workshop on Methodology"*, 2005

Параметрическое замыкание второй степени

$$\mathbf{T}_3(\xi, \xi') \approx \alpha \mathbf{T}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{T}_2$$

$$d'w(\xi) = \overline{w}(\xi); \quad bm(\xi) = \overline{m}(\xi);$$

$$\overline{\mathbf{Q}} = \frac{\mathbf{C}}{\mathbf{N}^2} - 1; \quad \langle \overline{w}, \overline{\mathbf{Q}} + 1 \rangle = \mathbf{Y}.$$

$$\begin{aligned} \left(\overline{w} + b - \frac{\alpha}{2} \left(b - d - \frac{d'(b-d)}{\mathbf{Y}} \right) \right) \overline{\mathbf{Q}} &= \frac{\mathbf{Y} \overline{m}}{b-d} - \overline{w} + [\overline{m} * \overline{\mathbf{Q}}] - \\ &- \alpha \frac{(b-d)}{2\mathbf{Y}} \left((\overline{\mathbf{Q}} + 2) [\overline{w} * \overline{\mathbf{Q}}] + [\overline{w} \overline{\mathbf{Q}} * \overline{\mathbf{Q}}] \right) \end{aligned}$$

Трёхпараметрическое замыкание второй степени

$$\mathbf{T}_4(\xi, \xi') \approx \frac{1}{\alpha + \gamma} \left(\alpha \frac{\mathbf{C}(\xi)\mathbf{C}(\xi')}{\mathbf{N}} + \beta \frac{\mathbf{C}(\xi)\mathbf{C}(\xi - \xi')}{\mathbf{N}} + \gamma \frac{\mathbf{C}(\xi')\mathbf{C}(\xi' - \xi)}{\mathbf{N}} - \beta \mathbf{N}^3 \right)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{N} = \frac{b - d}{\langle \mathbf{Q}, \widehat{\mathbf{w}} \rangle + d'} \\ \mathbf{Q} \left(\widehat{\mathbf{w}} + d + \frac{\mathbf{N}}{\alpha + \gamma} \left(\alpha \frac{b - d}{\mathbf{N}} + \beta d' \right) \right) = \\ = \widehat{\mathbf{m}} - \widehat{\mathbf{w}} + b - d - \frac{\mathbf{N}}{\alpha + \gamma} \left(\alpha \frac{b - d}{\mathbf{N}} + \beta ([\mathbf{Q} * \mathbf{w}] + [\mathbf{Q} * \mathbf{w}\mathbf{Q}]) + \right. \\ \left. + \gamma \frac{b - d}{\mathbf{N}} + [\mathbf{Q} * \mathbf{w}] + [\mathbf{Q} * \mathbf{w}\mathbf{Q}] \right) \end{array} \right.$$

Симуляции, основанные на процессах Пуассона

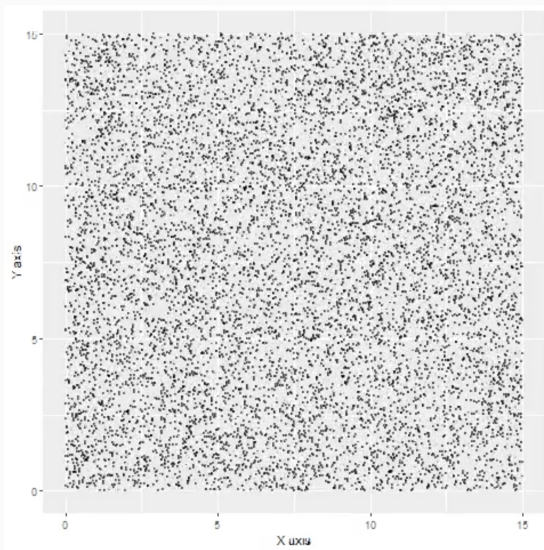


Рис. 1: Одновидовая симуляция на плоскости

Параметры системы

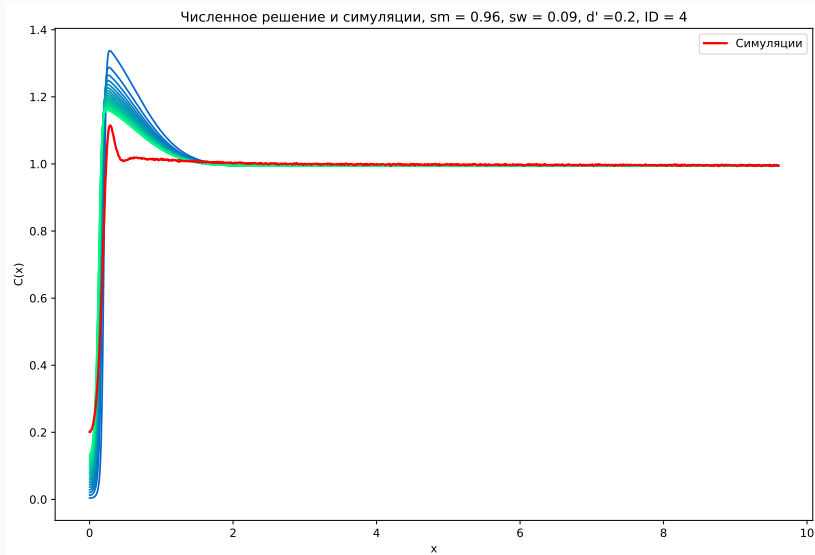
$$m(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_m} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_m^2}}, \quad w(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_w^2}}$$

ID	σ_m	σ_w	b	d	d'	Выживаемость
1	0.96	0.09	0.2	0.02	0.02	да
2	0.45	0.45	0.2	0.02	0.02	да
3	0.09	0.96	0.2	0.02	0.02	да
4	0.96	0.09	0.2	0.02	0.2	да
5	0.45	0.45	0.2	0.02	0.2	нет
6	0.09	0.96	0.2	0.02	0.2	нет
7	0.96	0.09	0.2	0.02	0.4	да
8	0.45	0.45	0.2	0.02	0.4	нет
9	0.09	0.96	0.2	0.02	0.4	нет

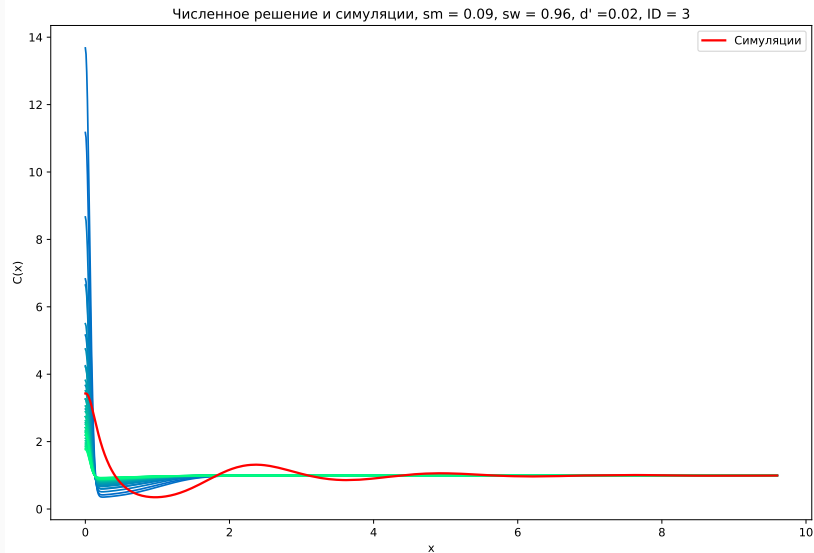
Параметры замыкания $T(\xi, \xi')$: $\alpha + \beta + \gamma = 1$, $\alpha, \beta \in [-0.5, 0.5]$

1. Численный метод аппроксимирует симуляции достаточно хорошо, и оптимальные параметры α, β, γ можно подобрать явно.
2. В графике второго момента $C(x)$ симуляции есть осцилляции и численный метод их плохо аппроксимирует, поэтому при любых α, β, γ из сетки ошибка очень велика.
3. Симуляции вырождаются (второй момент всюду равен 0), но численный метод не сходится к тривиальному решению, так как это не единственное решение интегрального уравнения.

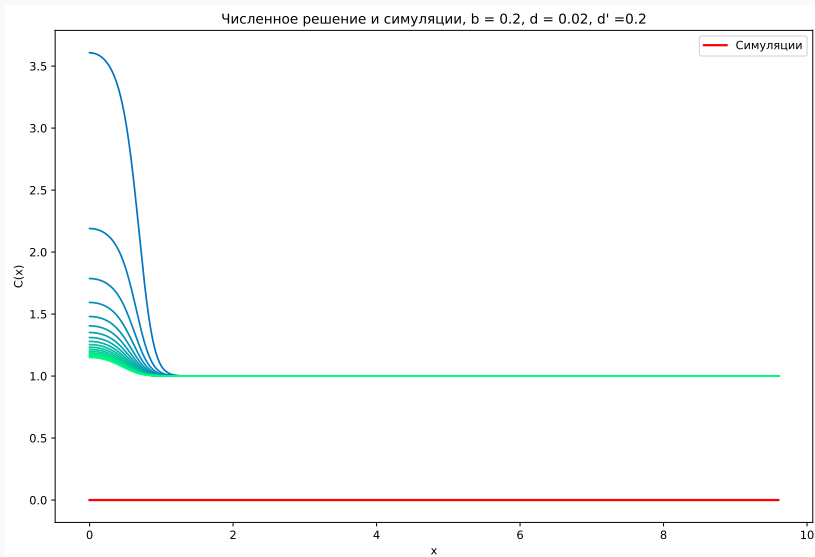
Демонстрация результатов



Демонстрация результатов



Демонстрация результатов



Спасибо за внимание!