

VILNIAUS UNIVERSITETAS

NATALIJA POZNIAK

EUKLIDO MATRICŲ TYRIMAS IR TAIKYMAS SUROGATINIAM
MODELIAVIMUI

Daktaro disertacija

Fiziniai mokslai, informatika (09 P)

Vilnius, 2019

Disertacija rengta 2014–2019 metais Vilniaus universiteto Duomenų mokslo ir skaitmeninių technologijų institute.

Mokslinis vadovas:

prof. habil. dr. Leonidas Sakalauskas (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, informatika – 09 P).

PADÉKA

TURINYS

ŽYMĖJIMAI IR SANTRUMPOS	6
PAVEIKSLĖLIŲ SAŖAŠAS	8
LENTELIŲ SAŖAŠAS	9
ĮVADAS.....	10
Tyrimų sritis	10
Problemos aktualumas	10
Tyrimų objektas	12
Tyrimų tikslas ir uždaviniai	12
Tyrimų metodai.....	12
Mokslinis naujumas	12
Praktinė darbo reikšmė.....	13
Ginamieji teiginiai.....	13
Darbo rezultatų aprobavimas	14
Darbo rezultatų publikavimas	15
Disertacijos struktūra	15
1 skyrius. Atstumų matricų su trupmeniniais laipsnių rodikliais geometrinių savybių tyrimas	16
1.1. Daugiamačiai duomenys	16
1.2. Euklido atstumų matrica.....	16
1.3. Blokinės matricos savybės	17
1.4. Trupmeninių Euklido atstumų matricos neneigiamas apibrėžtumas.....	18
1.5. Trupmeninių Euklido atstumų matricos geometrinės savybės.....	21
1.6. Eksperimentų blokai su trupmeninių Euklido atstumų matricomis.....	23
1.6. Skyriaus išvados	25
2 skyrius. Krigingo surogatinis modelis	27
2.1. Surogatinio modeliavimo prielaidos	27

2.2.	Gauso lauko modelis, aprašytas atstumų matricomis su trupmeniniais laipsnių rodikliais.....	28
2.3.	Tikėtinumo funkcijos taikymas	32
2.4.	Sąlyginis vidurkis ir sąlyginė dispersija	33
2.5.	Krigingo metodas	37
2.6.	Išsibarsčiusiųjų daugiamačių duomenų ekstrapoliavimas.....	39
2.7.	Kompiuterinio modeliavimo rezultatai	40
2.8.	Paviršinių nuotekų filtrų surogatinis modeliavimas	45
2.9.	Skyriaus išvados	51
3 skyrius.	Daugiaekstremalinių uždavinių sprendimas.....	52
3.1.	Optimizavimo uždavinio formuluotė	52
3.2.	Rekursyvinė lygčių sistema.....	54
3.3.	Vienažingsniai Bajeso optimizavimo metodai	56
3.4.	Bajeso optimizavimo algoritmas	59
3.5.	Kompiuterinio modeliavimo rezultatai	60
3.6.	Skyriaus išvados	62
4 skyrius.	Ekstremalinių eksperimentų serijų planavimo metodas.....	64
4.1.	Atsitiktinių Gauso laukų taikymas eksperimentams planuoti	65
4.2.	Atsako paviršiaus prognozavimas	68
4.3.	Ekstremalinių eksperimentų planavimo algoritmas	70
4.4.	Kompiuterinio modeliavimo rezultatai	74
4.5.	Nuotekų valymo filtrų eksperimentų planavimas	79
4.6.	Skyriaus išvados	80
	IŠVADOS.....	81
	LITERATŪRA	82

ŽYMĖJIMAI IR SANTRUMPOS

TEAM – trupmeninių Euklido atstumų matrica (angl. *Fractional Euclidean Distance Matrices*);

AGL – atsitiktinis Gauso laukas (angl. *Random Gaussian Field*);

DTM– didžiausio tikėtimumo metodas (angl. *Maximum Likelihood Method*);

MKM – Monte Karlo metodas (angl. *Monte Carlo Method*)

BM – Bajeso metodas (angl. *Bayes Method*)

MAM – modeliujamo atkaitinimo metodas (angl. *Simulated Annealing Method*)

TF – testinė funkcija;

TIF – tikėtimumo funkcija;

X – duomenų rinkinys;

A – Euklido atstumų su trupmeniniais laipsnių rodikliais matrica;

δ – Euklido atstumų matricos trupmeninis laipsnio rodiklis;

d – dimensija;

K – vektorių imties dydis;

I – vienetinė matrica;

E – vektorius, sudarytas iš vienetų;

F – branduolio matrica (angl. *Kernel Matrix*);

Z – įterptinė aibė;

$tr(F)$ – branduolio matricos pėdsakas;

r – simplekso briaunos ilgis;

$y(x)$ – kringo ekstrapoliatorius;

$p(y, \mu, d^2, \delta)$ – tikimybinio paskirstymo tankio funkcija;

$L(Y, \mu, d^2, \delta)$ – logaritminė tikėtimumo funkcija;

μ – vidurkio parametras;

β^2 – dispersijos parametras;

$\hat{\mu}$ – didžiausio tikėtino parametras (įvertis);

$\hat{\delta}$ – mažiausių kvadratų įvertis;

$u(x)$ – kringo ekstrapoliatoriaus svorių funkcija;

$w(x)$ – Šepardo ekstrapoliatoriaus svorių funkcija;

k – iteracijų skaičius;

$p_{X^k}(Y^k)$ – tankio funkcija;

$\Psi(f, b)$ – naudingumo funkcija.

PAVEIKSLĖLIŲ SĄRAŠAS

2.1 pav. Testinės funkcijos	41
2.2 pav. Dispersijos ir optimalaus laipsnio parametro skaičiavimo rezultataų atspindinčios histogramos (<i>Frequency</i> – dažnis, <i>Interval values</i> – intervalų reikšmės).....	44
2.3 pav. <i>Cu, Pb, Zn, Cd, TN, TC, SS, BOD5</i> išvalymo efektyvumas (%), kai duotos tokios užpildų proporcijos (<i>BC=1-QS-SHAAC-SW</i>)	50
3.1 pav. Sąlyginis vidurkis (ekstrapoliatorius)	58
3.2 pav. Dispersija	58
3.3 pav. Tikėtinos naudingumo funkcijos reikšmės	59
3.4 pav. Testinės funkcijos (3.31) optimizavimo BM, MK, MAM suvidurkintos konvergavimo kreivės.....	61
3.5 pav. Rastrigino testinės funkcijos (2.30) optimizavimo BM, MK, MAM suvidurkintos konvergavimo kreivės	62
3.6 pav. Branino testinės funkcijos (2.28) optimizavimo BM, MK, MAM suvidurkintos konvergavimo kreivės	62
4.1 pav. Tikėtinumo funkcijos (4.21) reikšmių skirtumas iki ir po vieno optimizavimo žingsnio.....	78
4.2 pav. Tikėtinus naudingumo funkcijos (4.21) prieaugis po kiekvieno optimizavimo žingsnio.....	79
4.3 pav. Naudingumo funkcijos (4.21) pokyčio tikimybė.....	79
4.4 pav. Tikėtinumo funkcijos (4.21) reikšmių skirtumas iki ir po optimizavimo.....	81
4.5 pav. Naudingumo funkcijos pokyčio tikimybė.....	82
4.6 pav. Tikėtinus naudingumo funkcijos pokytis.....	82

LENTELIŲ SĄRAŠAS

2.1 lentelė. Testinės funkcijos ir jų apibrėžimo sritis	40
2.2 lentelė. Dispersijos parametras $\hat{\beta}^2$ ir laipsnis δ	42
2.3 lentelė. Skaičiavimo paklaidų rezultatai	44
2.4 lentelė. Medžiagų išvalymo efektyvumas.....	46
2.5 lentelė. Maksimizavimo rezultatai.....	50
4.1 lentelė. Tikslų funkcijos reikšmės po tam tikro skaičiaus žingsnių	76
4.2 lentelė. Testinės funkcijos reikšmės palyginimas su pradine reikšme su atlikus suplanuotą eksperimentų seriją	76
4.3 lentelė. Tikslų funkcijos reikšmės po tam tikro skaičiaus žingsnių	78
4.4 lentelė. Testinės funkcijos reikšmės palyginimas su pradine reikšme su atlikus suplanuotą eksperimentų seriją	79

IVADAS

Tyrimų sritis

Duomenų mokslas tiria metodus, procesus ir algoritmus, skirtus aptikti žinioms ir daryti išvalgoms iš struktūrizuotų ir nestruktūrizuotų duomenų. Jis apima įvairias matematikos, statistikos, kompiuterių mokslo sritis. Duomenų mokslas siekia surasti veiksmingą, logiškai pagrįstą modelį, skirtą prognozavimo, ekstrapoliavimo arba interpoliavimo tikslams. Tuo duomenų mokslas skiriasi nuo tradicinės analitikos ir yra artimas duomenų gavybai. Todėl duomenų mokslas leidžia generuoti veiksmingus analizės metodus, tokiose srityse, kaip medicina, socialiniai mokslai, kuriose nėra specifinių tų sričių duomenų modelių.

Surogatinis modeliavimas yra inžinerinis metodas, skirtas nagrinėti procesams, kurie gali būti stebimi tiesiogiai tik iš dalies. Tad nestebima proceso dalis yra modeliuojama surogatiniu modeliu, sukurtu pagal proceso stebėjimo rezultatus. Gana dažnai realių sistemų kompiuterinis imitavimas gali ilgai užtrukti arba reikalauti naudoti brangią ir sudėtingą įrangą. Todėl pasikartojančių uždavinių, kaip projekto optimizavimas, projekto erdvės tyrimas, jautrumo analizė ir scenarijų KAS..., JEIGU, analizė gali būti neįmanoma – jiems gali prireikti tūkstančių ar net milijono imitavimo ciklų. Vienas iš šios problemos sprendimo būdų yra aproksimuojančių modelių, žinomų kaip surogatiniai modeliai, atsako paviršiaus modeliai, metamodeliai arba emuliatoriai, imituojantys modeliuojamą objektą supaprastintu būdu, kūrimas ir taikymas.

Problemos aktualumas

Kringingo duomenų ekstrapoliavimo metodas buvo aprašytas Krige'o (1951) ir Mattherono (1963). Kringingo surogatiniai modeliai dažnai taikomi ekstrapoliavimo ir optimizavimo uždaviniams spręsti (Jones (2001), Forrester (2009), Manyu Xiao (2018) ir kt.). Kringingas yra vienas iš žinomų duomenų ekstrapoliavimo metodų, naudojamų inžinerijos ir kitose srityse (Bhosekar (2017), Carpio (2017)).

Surogatinų modelių poreikis atsiranda rekonstruojant praleistus duomenis, duomenų ekstrapoliacijoje ar planuojant optimalius eksperimentus su atsako funkcija, kuriai vertinti reikia įvairių resursų, arba kai atliktų eksperimentų ar skaičiavimų rezultatai prieinami tik iš dalies, arba prognozuojant stebėtų procesų duomenis.

Dauguma inžinerinių planavimo uždavinių reikalaujama atlikti eksperimentus, kad būtų sukonstruotos tikslo funkcijos, kaip kintamųjų funkcijos. Pavyzdžiui, tiriant lazerinės spinduliuotės poveikį optinėms medžiagoms yra atliekami kompiuteriniai to poveikio skaičiavimų rezultatai. Taip pat nuotekų valymo įrenginių efektyvumo tyrime, priklausomai nuo filtro užpildų proporcijų ar kokybės, kuri analizuojamas remiantis keliais per eksperimentus sukurtais ir realizuotais filtrais. Abiem atvejais, t. y. kompiuterinio skaičiuojamojo eksperimento arba realaus eksperimento gauti duomenys, gali būti naudojami realaus objekto surogatiniam modeliui kurti.

Matavimų taškai, priklausantys nuo daugelio parametru, gali turėti atsitiktinį arba deterministinį pobūdį. Rezultatai priklauso nuo daugelio parametru, tačiau šių parametru parinkimas ir poveikis dažnai yra nežinomas. Be to, surinktų duomenų apimtys būna mažos, kadangi kiekvienas papildomas eksperimentas reikalauja laiko ir sąnaudų. Kartais eksperimentas gali būti pavojingas arba tinkamų sąlygų, reikalingų tam eksperimentui atlikti, gali pasitaikyti labai retai. O realūs uždaviniai, susiję su šiomis problemomis, gali pasitaikyti labai dažnai. Pavyzdžiui, branduolinio reaktoriaus kritinių būsenų saugumo požiūriu tyrimas esti susijęs su saugios būsenos reaktoriaus darbo tyrimu (Levenson (1981)).

Raketų arba kosminių aparatų judėjimo trajektorijų tyrimai, kuriais reikalaujama prognozuoti trajektorijas pagal stebėtus duomenis, yra gana pavojingi ir brangūs. Chemijos inžinerijos tikslas – sukurti naujas medžiagas, dažnai yra susijęs su eksperimentų planavimu pagal duomenis, kurie gauti laboratorijose po daugybės bandymų ir t. t. Tokių duomenų struktūros tiriamos tradiciniais deterministiniais arba statistiniais metodais. Tačiau deterministinė duomenų analizė tradiciniais interpoliacijos arba ekstrapoliacijos metodais reikalauja įvairių papildomų prielaidų ir neatsižvelgia į neapibrėžtį, susijusią su duomenų rekonstravimu (Shepard (1968), Shumaker (1976)). Todėl yra aktualu išnagrinėti atsitiktinių Gauso laukų (AGL) modelių taikymą eksperimentinių duomenų analizei. AGL savybės priklauso nuo kovariacijų, aprašančių priklausomybes tarp taškų, kuriuose atlikti kompiuteriniai ar fizikiniai eksperimentai. Statistiniai AGL modeliai, kai kovariacijos yra aprašomos Euklido atstumų tarp objektų trupmeniniais laipsnių rodikliais, dar nebuvo pakankamai gerai išnagrinėti, todėl jų tyrimas bei taikymas eksperimentinių duomenų analizei, sprendžiant ekstrapoliavimo, optimizavimo ar eksperimentų planavimo uždavinius, yra aktuali problema.

Tyrimų objektas

Disertacijos tyrimų objektas yra duomenų mokslo modeliai ir metodai, skirti struktūrizuoti daugiamačių duomenų analizei. Pagrindinis dėmesys skiriamas daugiamačių duomenų surogatiniam modeliavimui pagal atstumų tarp matavimo duomenų matricių savybes.

Tyrimų tikslas ir uždaviniai

Darbo tikslas – ištirti Euklido atstumų su trupmeniniais laipsnių rodikliais savybes ir remiantis jomis sukurti surogatinį krigingo modelį bei pritaikyti jį daugiamačiams duomenims ekstrapoliuoti, eksperimentų serijoms planuoti bei daugiaekstremaliniams uždaviniams spręsti.

Siekiant šio tikslo yra sprendžiami tokie uždaviniai:

- 1) Trupmeninių Euklido atstumų matricių savybių tyrimas įvedus branduolio matricas.
- 2) Daugiamačių duomenų modelio homogeniniais ir izotropiniais Gauso laukais sudarymas.
- 3) Surogatinio krigingo algoritmo, paremto trupmeninių Euklido atstumų matricių savybėmis, sudarymas ir pritaikymas ekstrapoliavimui.
- 4) Sudaryto daugiamačio duomenų modelio pritaikymas eksperimentų serijoms planuoti.
- 5) Sudaryto daugiamačio duomenų modelio pritaikymas daugiaekstremalinėms funkcijoms optimizuoti.

Tyrimų metodai

Disertacijoje suformuluoti uždaviniai sprendžiami taikant daugiamatės statistikos ir kompiuterinio modeliavimo metodus. Geometrinėms trupmeninių Euklido atstumų matricių savybėms tirti yra pritaikyta veiksmų su blokinėmis matricomis teorija. Sudaryto daugiamačio duomenų modelio atsitiktiniais Gauso laukais parametrąs vertinti pritaikytas didžiausio tikėtimumo metodas. Skaitmeniniam sukurto eksperimentų planavimo metodui realizuoti pritaikytas Monte Karlo metodas.

Mokslinis naujumas

Disertacijoje gauti šie rezultatai:

- 1) Trupmeninių Euklido atstumų matricių savybės išnagrinėtos per branduolio matricos savybes ir parodyta, kad dažniausiai trupmeninių Euklido atstumų matrica yra neišsigimusi.
- 2) Pasinaudojus TEAM savybėmis sukurtas daugiamačių duomenų modelis atsitiktiniais Gauso laukais.
- 3) Sudarytas daugiamačių duomenų krigingo algoritmas, pritaikytas ekstrapoliavimui.
- 4) Sudarytas algoritmas ekstremaliniams eksperimentams planuoti, skaitmeniškai realizuojamas Monte Karlo metodu.
- 5) Sudarytas daugiaekstremalinių uždavinių sprendimo Bajeso algoritmas pagal trupmeninių Euklido atstumų matricos savybes.

Praktinė darbo reikšmė

Disertacijoje sudarytas krigingo metodas gali būti pritaikytas išbarstytiesiems daugiamačiams duomenims (angl. *Scattered Data*) ekstrapoliuoti. Sukurtas eksperimentų planavimo metodas gali būti efektyviai panaudotas ekstremalinių eksperimentų serijoms planuoti. Disertacijoje sudarytas Bajeso optimizavimo algoritmas gali būti pritaikytas daugiaekstremaliniams uždaviniams spręsti, kai tikslo funkcijos apskaičiavimas reikalauja didelių sąnaudų.

Disertacijoje gauti šie praktiniai rezultatai:

1. Sudarytas efektyvus daugiamačių duomenų ekstrapoliavimo algoritmas.
2. Sukurtas efektyvus daugiaekstremalinių uždavinių sprendimo algoritmas, kai tikslo apskaičiavimas susijęs su didelėmis sąnaudomis.
3. Sudarytas ekstremalinių eksperimentų serijų planavimo algoritmas, kuris pritaikytas nuotekų filtrų optimaliam planavimui.

Ginamieji teiginiai

1. Trupmeninių Euklido atstumų matricių pagrindines savybes galima išreikšti per branduolio matricos savybes.
2. Sudarytas algoritmas leidžia efektyviai spręsti išbarstyųjų duomenų ekstrapoliavimo ir krigingo uždavinius.

3. Sudarytas Bajeso optimizavimo algoritmas leidžia efektyviai spręsti daugiaekstremalinius uždavinius, kai tikslo funkcijos apskaičiavimas susijęs su didelėmis sąnaudomis.
4. Sudaryti eksperimentų planavimo metodai leidžia efektyviai planuoti ekstremalinių eksperimentų serijas.

Darbo rezultatų aprobavimas

Skaityti pranešimai respublikinėse konferencijose:

1. Krigingo taikymas optimizavimui ir eksperimentų planavimui. *Lietuvos operacijų tyrimo jaunųjų mokslininkų konferencija OT-2015*, Panevėžys, 2015-09-18.
2. Atstumų matricių su trupmeniniais laipsnių rodikliais taikymas duomenų ekstrapoliavimui. *Informacinių technologijų iššūkiai kūrybos ekonomikoje*, Šiauliai, 2017-03-17.

Skaityti pranešimai tarptautinėse konferencijose:

1. Application of Fractional Euclidean Distance Matrices to Extrapolation of Scattered Data, *Data Analysis Methods for Software Systems (8th DAMSS)*, Druskininkai, Lietuva, 2016-12-01–2016-12-03.
2. Atstumų matricių su trupmeniniais laipsnių rodikliais taikymas duomenų ekstrapoliavimui, *Kompiuterininkų dienos – 2017, XVIII tarptautinė mokslinė kompiuterininkų konferencija*, Kaunas, Lietuva, 2017-09-21–2017-09-22.
3. Optimization of Surface Wastewater Treatment Filter Filler Effectiveness Using Mathematical Modelling. *Data Analysis Methods for Software Systems (9th DAMSS)*, Druskininkai, Lithuania, 2017-11-30–2017-12-02.
4. Fractional Euclidean distance matrices for Kriging surrogate model, *29th European Conference on Operational Research (EURO 2018)*, Valensija, Ispanija, 2018-07-08–2019-07-11.
5. The method for the optimal experiment design, *Contemporary Issues in Business, Management and Economics Engineering*, VGTU, Vilnius, Lietuva, 2019-05-09–2019-05-10.

Darbo rezultatų publikavimas

Straipsniai recenzuojamuose Lietuvos ir užsienio leidiniuose:

1. Pozniak N., Sakalauskas L., 2017, Fractional Euclidean Distance Matrices Extrapolator for Scattered Data. *Jaunųjų mokslininkų darbai. (Index Copernicus, CEEOL)*, nr. 2 (47), p. 56–61, (ISSN 1648-8776), <https://doi.org/10.21277/jmd.v47i2.156>.
2. Pozniak N., Sakalauskas L., Saltyte L., 2019, Kriging Model with Fractional Euclidean Distance Matrices, *Informatica (Clarivate Analytics, Scopus)*, vol. 30, nr. 2, p. 367-390, <http://dx.doi.org/10.15388/Informatica.2019.210>.

Straipsniai recenzuojamoje tarptautinių konferencijų medžiagoje:

1. Pozniak, N., Sakalauskas, L. (2019). The method for the optimal experiment design. *Proceedings of International Scientific Conference Contemporary Issues in Business, Management and Economics Engineering*, VGTU, ISBN 978-609-476-161-4, <https://doi.org/10.3846/cibmee.2019.012>.

Disertacijos struktūra

Darbą sudaro įvadas, keturi skyriai, išvados, literatūros apžvalga ir priedai. Įvade pateikiamas disertacijos tikslas, uždaviniai, metodai, darbo rezultatų aprobavimo ir publikavimo sąrašas. Pirmame skyriuje aptariamas pasirinktos temos aktualumas ir pristatomi TEAM savybių tyrimai. Antrame skyriuje pagal įrodytas TEAM savybes sudaromas daugiamačių duomenų modelis homogeniniais izotropiniais Gauso laukais, kuris yra pritaikytas krigingo ir ekstrapoliavimo algoritmams sudaryti. Trečiame skyriuje yra aprašomas ekstremalinių eksperimentų serijų planavimo metodas, kuris yra ištirtas kompiuterinio modeliavimo būdu bei taikytas praktiniam nuotekų filtrų projektavimo uždaviniui spręsti. Ketvirtame skyriuje yra sukurtas daugiaekstremalinių funkcijų optimizavimo Bajeso metodas, taikant optimizuojamos funkcijos modeliavimui atsitiktinius Gauso laukus, aprašomus trupmeninių Euklido atstumų matricomis. Sudaryto optimizavimo algoritmo ypatybės yra ištirtos kompiuterinio modeliavimo būdu.

1 skyrius. Atstumų matricų su trupmeniniais laipsnių rodikliais geometrinų savybių tyrimas

Šiame skyriuje aprašomos disertacijoje nagrinėjamos duomenų struktūros, jų pateikimas Euklido atstumų matricomis su trupmeniniais laipsnių rodikliais bei daugiamatės geometrijos savybės, aprašomos tokiomis matricomis.

1.1. Daugiamačiai duomenys

Įvairiose mokslo srityse nuolat kaupiami ir tiriami daugiamačiai duomenys. Pastaruoju metu daugiamačių duomenų analizė tapo svarbiu taikomosios matematikos uždaviniu, aktyviai sprendžiamu beveik visose mokslinių tyrimų srityse. Drauge atsiradęs duomenų mokslas nagrinėja daugiamačių duomenų tyrimo metodus ir jų taikymą, pavyzdžiui, ekonometrijoje, analizuojant finansinius ir ekonominius rodiklius, biologijoje ir medicinoje, apdorojant stebimus rezultatus. Surinkti duomenys pateikiami matricomis arba masyvais. Parametrai gali būti skirtingo pobūdžio: dalis parametrų gali būti parenkami vartotojo, o kita dalis parametrų gali būti aktuali techniniu, socialiniu, ekonominiu ar kitokiais požiūriais. Pastarieji parametrai dažnai vadinami charakteristikomis, efektyvumo rodikliais, kriterijais ir pan. Taip pat parametrai gali būti stebimi arba neprieinami stebėjimams. Stebimi parametrai dažnai vadinami požymiais, kintamaisiais ir pan.

1.2. Euklido atstumų matrica

Kvadratinų Euklido atstumų matricos nagrinėtos literatūroje (Schoenberg (1935), Gower (1984), Weinberger (2004)), tačiau Euklido atstumas, reiškiantis atstumą tarp dviejų vektorių, yra apskaičiuojamas traukiant kvadratinę šaknį iš atstumų kvadratų, apskaičiuotų kaip skaliarinė vektorių skirtumų sandauga iš jo paties.

Tarkime, turime K d -mačių vektorių duomenų rinkinį:

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_K), \quad (1.1)$$

čia $x_i \in \mathbb{R}^d$, $1 \leq i \leq K$.

Pažymėkime

$$A = \left[(|x_i - x_j|)^\delta \right]_1^K \quad (1.2)$$

Euklido atstumų su trupmeniniais laipsnių rodikliais $K \times K$ matricą. Atstumai apskaičiuojami tarp X rinkinio vektorių porų, čia $0 \leq \delta \leq 1$, t. y. $|x_i - x_j| = (x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j)$.

Vadinkime Euklido atstumų matricas su trupmeniniais laipsnių rodikliais, $0 \leq \delta < 1$, trupmeninių Euklido atstumų matricomis (TEAM). Kvadratinių Euklido atstumų matricos daugiausia nagrinėjamos literatūroje, t. y. kai $\delta = 1$. Tačiau svarbūs yra ir įprastiniai Euklido atstumai, kai $\delta = \frac{1}{2}$.

Pažymėkime $K \times K$ vienetinę matricą I , jų K -matį vektorių $-E = (1, 1, \dots, 1)^T$. TEAM savybės tiriamos pagal branduolio matricą (žr. (Schoenberg (1935), Gower (1984), Weinberger (2004)):

$$F = -(I - E \cdot s^T) \cdot A \cdot (I - s \cdot E^T), \quad (1.3)$$

kur $s \in \mathfrak{R}^K$, $s^T \cdot E = 1$.

Nesunku pastebėti, kad branduolio matricos su skirtingais vektoriais $s_1, s_2 \in \mathfrak{R}^K$, yra susijusios taip:

$$F_1 = -(I - E \cdot s_1^T) \cdot A \cdot (I - s_1 \cdot E^T) = (I - E \cdot s_1^T) \cdot F_2 \cdot (I - s_1 \cdot E^T), \quad (1.4)$$

kur $F_2 = -(I - E \cdot s_2^T) \cdot A \cdot (I - s_2 \cdot E^T)$, $s_1^T \cdot E = 1$, $s_2^T \cdot E = 1$.

Branduolio matricos, kai $s = \frac{E}{K}$ ir $s = (0, 0, \dots, 1)$ yra daugiausia ištirtos.

1.3. Blokinės matricos savybės

Šiame skyriuje aprašomos blokinės matricos savybės. Disertacijoje skaičiavimams atlikti sudarytos blokinės matricos, taip pat skaičiuojami jų determinantai ir atvirkštinės matricos. Šios matricos yra naudojamos sprendžiant prognozavimo, optimizavimo uždavinius.

Blokinė matrica yra sudaroma iš mažesnių matricų ar vektorių, kurie atitinka blokinės matricos blokus. Mažesnės matricos yra vadinamos blokais.

Savybės:

Blokinių matricų daugyba atliekama pagal paprastųjų matricų daugybos taisykles.

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \cdot a_2 + b_1 \cdot c_2 & a_1 \cdot b_2 + b_1 \cdot d_2 \\ c_1 \cdot a_2 + d_1 \cdot c_2 & c_1 \cdot b_2 + d_1 \cdot d_2 \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Taip pat svarbu, kad blokinės matricos būtų suderintos.

Tarkime, turime neišsigimusią kvadratinę matricą, kuri yra padalyta į blokus:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}.$$

Atvirkštinė matrica taip pat yra padalyta į keturis blokus, apskaičiuojama taip:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} + A^{-1} \cdot B \cdot (D - C \cdot A^{-1} \cdot B)^{-1} \cdot C \cdot A^{-1} & -A^{-1} \cdot B \cdot (D - C \cdot A^{-1} \cdot B)^{-1} \\ -(D - C \cdot A^{-1} \cdot B)^{-1} \cdot C \cdot A^{-1} & (D - C \cdot A^{-1} \cdot B)^{-1} \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

čia A , B , C ir D – vienodo dydžio matricos. Matrica A ir $D - C \cdot A^{-1} \cdot B$ turi būti neišsigimusi. Blokinėms matricoms taikoma Woodbury tapatybė (Golub (1996)):

$$(A + B \cdot C \cdot D)^{-1} = A^{-1} - A^{-1} \cdot B \cdot (C^{-1} + D \cdot A^{-1} \cdot B)^{-1} \cdot D \cdot A^{-1},$$

čia $A, n \times n$, $B, n \times k$, $C, k \times k$ ir $D, k \times n$ yra atitinkamo dydžio matricos.

Matricos determinanto savybė, kai $W, k \times k$ turi atvirkštinę matricą:

$$|A + B \cdot W \cdot D^T| = |W^{-1} + D^T \cdot A^{-1} \cdot B| \cdot |W| \cdot |A|.$$

Determinantui skaičiuoti taikomos žinomos determinanto savybės.

1.4. Trupmeninių Euklido atstumų matricos neneigiamas apibrėžtumas

Pagrindinė trupmeninių Euklido atstumų matricos savybė yra ta, kad branduolio matrica yra neneigiamai apibrėžta, o jos rangas $K - 1$, jei taškai rinkinyje (1.1) yra skirtingi. Dažniausiai kvadratinių Euklido atstumų matricos laipsnis gali būti mažesnis negu $K - 1$, kai $\delta = 1$ (žr. Schoenberg (1935), Gower (2004)). Ši TEAM savybė nagrinėjama toliau.

1.4.1 teorema. Kai $A = \left[\left((x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j) \right)^\delta \right]_1^K$ yra vektorių $x_i \in \mathfrak{R}^d$, $x_i \neq x_j$,

$i \neq j$, $1 \leq i, j \leq K$, $s^T \cdot E = 1$ ir $0 \leq \delta < 1$ TEAM, branduolio matrica F yra neneigiamai apibrėžta, o jos rangas – $K - 1$.

Irodymas. Jei $\delta = 0$, trupmeninių Euklido atstumų matrica atitinka rinkinio X , sutampančio su $K - 1$ -mačio simplekso, turinčio vienetinio ilgio kraštines, viršūnėmis.

Teoremos teiginys šiuo atveju yra akivaizdus, nes $A = E \cdot E^T - I$.

Jei $0 < \delta < 1$, galima išreikšti:

$$r_{ij}^\delta = h_\delta \cdot \int_0^\infty \frac{1 - e^{-\frac{u^2 \cdot r_{ij}}{2}}}{u^{2 \cdot \delta + 1}} du, \quad (1.7)$$

čia $h_\delta = 1 / \int_0^\infty \frac{1 - e^{-\frac{u^2}{2}}}{u^{2 \cdot \delta + 1}} du$, $r_{ij} \geq 0$.

Kita formulė išplaukia iš Gauso integralo:

$$e^{-\frac{u^2 \cdot r_{ij}}{2}} = e^{-\frac{u^2 \cdot (x_i - x_j)^T (x_i - x_j)}{2}} = (2\pi)^{-\frac{K}{2}} \cdot \int_{\mathbb{R}^K} e^{i \cdot v \cdot u \cdot (x_i - x_j)} \cdot e^{-\frac{|v|^2}{2}} \cdot dv. \quad (1.8)$$

Dabar po tam tikrų nesudėtingų pertvarkymų pagal (1.7) ir (1.8) galima įsitikinti, kad:

$$\begin{aligned} \xi^T \cdot F \cdot \xi &= -\xi^T \cdot \frac{1}{2} (I - E \cdot s^T) \cdot A \cdot (I - s \cdot E^T) \cdot \xi = \\ &= -\frac{1}{2} \cdot (\xi^T - (\xi^T \cdot E) \cdot s^T) \cdot A \cdot (\xi - (s \cdot E^T) \cdot \xi) = \\ &= \frac{-h_\delta}{2 \cdot (2\pi)^{\frac{K}{2}}} \cdot \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^K (\xi_i - (\xi^T \cdot E) \cdot s_i) \cdot (\xi_j - (s \cdot E^T) \cdot \xi_j) \cdot \int_0^\infty \left(\int_{\mathbb{R}^K} \frac{1 - e^{i \cdot u \cdot v \cdot (x_i - x_j)}}{u^{2 \cdot \delta + 1}} \cdot e^{-\frac{|v|^2}{2}} dv \right) du = \\ &= \frac{h_\delta}{2 \cdot (2\pi)^{\frac{K}{2}}} \cdot \int_0^\infty \left(\int_{\mathbb{R}^K} \frac{\left| \sum_{i=1}^K (\xi_i - (\xi^T \cdot E) \cdot s_i) \cdot e^{i \cdot u \cdot v \cdot x_i} \right|^2 - \left((\xi^T \cdot E) \cdot (1 - (s \cdot E^T)) \right)^2}{u^{2 \cdot \delta + 1}} \cdot e^{-\frac{|v|^2}{2}} dv \right) du \end{aligned} \quad (1.9)$$

Atkreipkime dėmesį į tai, kad pagal teoremos sąlygą $s^T \cdot E = 1$. Kita vertus, pointegrinė funkcija integrale (1.9) yra lygi 0 tik jeigu $\xi = s$. Esant bet kokiai kitai $\xi \neq s$ vertei, pointegrinė funkcija bus teigiama prie tam tikrų v verčių ir todėl integralas (1.9) bus taip pat teigiamas. Taigi branduolio matrica yra neneigiamai apibrėžta ir rango $K - 1$. ■

1.4.2 teorema. Esant teoremos 1.4.1 prielaidoms, trupmeninių Euklido atstumų matrica yra neišsigimusi: $|A| \neq 0$.

Irodymas. Nagrinėjant TEAM determinantą, galima užrašyti blokines matricas:

$$A = \begin{bmatrix} \tilde{A} & a \\ a^T & 0 \end{bmatrix}, I - E \cdot s^T = \begin{bmatrix} \tilde{S} & c \\ g^T & d \end{bmatrix}, \quad (1.10)$$

čia \tilde{A} ir \tilde{S} yra $(K - 1) \times (K - 1)$ matricos, a , c ir g yra $K - 1$ -mačiai vektoriai, v ir d yra skaliariai.

Apibrėžkime blokines matricas:

$$S = \begin{bmatrix} S_K & 0 \\ 0^T & 1 \end{bmatrix}, Q = -\frac{1}{2} S \cdot A \cdot S^T, W = \begin{bmatrix} F_K & w \\ w^T & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.11)$$

kur $w = -\frac{1}{2} S_K \cdot a$.

Pagal blokinių matricų savybes nesunku įsitikinti, kad:

$$W = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} S_K \cdot A_K \cdot S_K^T - \frac{1}{2} c \cdot a^T \cdot S_K^T - \frac{1}{2} S_K \cdot a \cdot g^T & -\frac{1}{2} S_K \cdot a \\ -\frac{1}{2} a \cdot S_K^T & 0 \end{bmatrix} = \quad (1.12)$$

$$= Q - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} c \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w \\ 0 \end{bmatrix}^T - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} w \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} g \\ 0 \end{bmatrix}^T.$$

Reikia atkreipti dėmesį, kad matricų W ir Q determinantai yra susiję. Iš tikrųjų vektorius c susideda iš vienodų elementų, lygių vektoriaus s K -ajai komponentei s_K . Be to, matricos W determinantas lieka toks pat, kai K -asis stulpelis, padaugintas iš s_K , pridedamas prie visų kitų matricos stulpelių. Šis determinantas nesikeičia, kai K -oji eilutė, padauginta iš s_K , pridedama prie kitų eilučių. Taip

$$|W| = (-1)^{K-1} \cdot |Q|. \quad (1.13)$$

Pagal blokinės matricos determinanto formulę (1.12) nesunku įsitikinti, kad

$$|W| = |F_K| \cdot w^T \cdot F_K^{-1} \cdot w. \quad (1.14)$$

Kita vertus,

$$|Q| = -\frac{1}{2} |\tilde{S}|^2 \cdot |A|. \quad (1.15)$$

Kaip matyti iš 1.4.1 teoremos, $F_K > 0$ ir $w^T \cdot F_K^{-1} \cdot w > 0$. Kadangi $|S_K| \neq 0$, o $|A| \neq 0$, A matrica taip pat yra neišsigimusi.

1.5. Trupmeninių Euklido atstumų matricos geometrinės savybės

1.5.1 teiginys. Iš 1.4.1 teoremos išplaukia, kad egzistuoja įterptinė aibė $Z = (z_1, z_2, \dots, z_K)^T$, $z_K \in \mathfrak{R}^{K-1}$, rango $K - 1$, tokia, kad

$$A = \frac{1}{2} \cdot \left[(z_i - z_j)^T \cdot (z_i - z_j) \right]_1^K.$$

Įterptinę aibę galima gauti taikant 1.2.1 teoremą ir faktorizuojant branduolio matricą: $F = Z \cdot Z^T$. Įterptinė aibė, kai $0 \leq \delta < 1$, o aibės X visi elementai yra skirtingi, visada yra rango $K - 1$.

Iš formulės (1.3) seka:

$$\text{diag}(F) = 2 \cdot A \cdot s - s^T \cdot A \cdot s \cdot E.$$

Pagal pastarąją formulę ir atlikus veiksmus, galima įsitikinti, kad šis teiginys yra teisingas, kadangi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \cdot \left[(z_i - z_j)^T \cdot (z_i - z_j) \right]_{i,j=1}^K &= \frac{[z_i^T \cdot z_i]_{i,j=1}^K + [z_j^T \cdot z_j]_{i,j=1}^K}{2} - [z_i^T \cdot z_j]_{i,j=1}^K \\ &= \frac{\text{diag}(F) \cdot E^T + E \cdot \text{diag}(F)^T}{2} - F = \\ &= E \cdot s^T \cdot A + A \cdot s \cdot E^T - s^T \cdot A \cdot s \cdot E \cdot E^T + (I - E \cdot s^T) \cdot A \cdot (I - s \cdot E^T) = A. \end{aligned}$$

Taigi įterptinė aibė yra neišsigimęs $K - 1$ -matis simpleksas.

1.5.2 teiginys. Tarkime, A yra trupmeninių Euklido atstumų matrica ir $s_1, s_2 \in \mathfrak{R}^K$ yra atitinkamų matavimų vektoriai, čia $s_1^T \cdot E = 1$, $s_2^T \cdot E = 1$. Tada:

$$F_1 = -(I - E \cdot s_1^T) \cdot A \cdot (I - s_1 \cdot E^T) = (I - E \cdot s_1^T) \cdot F_2 \cdot (I - s_1 \cdot E^T), \quad (1.16)$$

kur $F_2 = -(I - E \cdot s_2^T) \cdot A \cdot (I - s_2 \cdot E^T)$.

Įrodymas seka iš lygybės $(I - E \cdot s_1^T) \cdot (I - E \cdot s_2^T) = (I - E \cdot s_1^T)$. Taigi 1.5.1 ir 1.5.2 teiginiai leidžia daryti tokią išvadą.

1.5.3 išvada. Tarkime, F yra branduolio matrica, sudaryta pagal 1.5.1 teiginį. Pažymėkime $s_c \cdot E = 1$, $s_c \in \mathfrak{R}^K$ ir pažymėkime koordinačių pradžią kaip $z_c = Z^T \cdot s_c$, čia $F = Z \cdot Z^T$. Tada

$$F = -(I - E \cdot s_c^T) \cdot A \cdot (I - s_c \cdot E^T) = (I - E \cdot s_c^T) \cdot F \cdot (I - s_c \cdot E^T) =$$

$$= (I - E \cdot s_c^T) \cdot Z \cdot Z^T \cdot (I - s_c \cdot E^T) = (Z - E \cdot z_c^T) \cdot (Z^T - z_c \cdot E^T). \blacksquare$$

Taigi 1.5.3 išvada paaiškina vektoriaus s geometrinę prasmę.

1.5.4 išvada. Remiantis 1.5.1 teiginiu, įterptinės aibės koordinačių pradžia yra taške z_1 , tiksliau tariant, $s = (1, 0, 0, \dots, 0)$. Todėl branduolio matricos elementai yra:

$$F_{i,j} = A_{i,i} + A_{j,j} - A_{i,j}, \quad 1 < i, j \leq K,$$

$$F_{0,0} = 0, F_{1,j} = 0, F_{i,1} = 0, \quad 1 < i, j \leq K. \blacksquare$$

Pavyzdžiui, branduolio matrica su $s = (0, 0, \dots, 1)$ reiškia, kad įterptinėje erdvėje koordinačių pradžia yra taške z_K .

1.5.4 teiginys. Iš 1.2.1 teoremos išplaukia, kad vektorius $s = \frac{E}{K}$ minimizuoja branduolio matricos pėdsaką.

Irodymas. Atlikę nesudėtingus veiksmus, gauname:

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(F) &= \operatorname{tr}((Z - E \cdot z_c^T) \cdot (Z^T - z_c \cdot E^T)) = & (1.17) \\ &= \operatorname{tr}((I - E \cdot s^T) \cdot Z \cdot Z^T \cdot (I - s \cdot E^T)) = \\ &= -\operatorname{tr}((I - E \cdot s^T) \cdot A \cdot (I - s \cdot E^T)) = -2 \cdot s^T \cdot A \cdot E + K \cdot s^T \cdot A \cdot s. \end{aligned}$$

Diferencijuojant pastarąją išraišką s atžvilgiu ir artinant išvestinę prie nulio, galima įsitikinti, kad išvada teisinga. \blacksquare

1.5.5 teiginys. Iš 1.2.1 teoremos išplaukia, kad vektorius $s = \frac{A^{-1} \cdot E}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}$ įveda koordinačių centrą į įterptinės aibės apibrėžtinės sferos centrą.

Irodymas. Iš 1.2.2 teoremos išplaukia, kad egzistuoja matricos A atvirkštinė matrica ir $E^T \cdot A^{-1} \cdot E \neq 0$. Taigi $s = \frac{A^{-1} \cdot E}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}$ yra baigtinis vektorius. Atlikus skaičiavimus galima gauti:

$$\begin{aligned} F &= (Z - E \cdot z_c^T) \cdot (Z^T - z_c \cdot E^T) = (I - E \cdot s^T) \cdot Z \cdot Z^T \cdot & (1.18) \\ (I - s \cdot E^T) &= -\left(I - E \cdot \frac{E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}\right) \cdot A \cdot \left(I - \frac{A^{-1} \cdot E}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \cdot E^T\right) = \\ &= -A + \frac{E \cdot E^T}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}. \end{aligned}$$

Taigi įterptinės aibės apibrėžtinės sferos spindulys yra $\frac{1}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}$, nes F įstrižainė susideda iš kvadratų atstumų nuo simplekso viršūnių iki koordinačių pradžios, o matricos A įstrižainė yra sudaryta iš nulių. ■

1.6. Eksperimentų blokai su trupmeninių Euklido atstumų matricomis

Pažymėkime tam tikrą tašką $x \in \mathfrak{R}^d$. Apibrėžkime Euklido kvadratų atstumų trupmeninių laipsnių tarp X ir x vektorių $a = (|x_1 - x|^\delta, |x_{2l} - x|^\delta, \dots, |x_{K1} - x|^\delta)^T$. Įveskime papildytą branduolio matricą atitinkantį rinkinį $X \cup x$ ir vektorių (s^T, s') :

$$\tilde{F} = \begin{bmatrix} F & f \\ f^T & v \end{bmatrix} \equiv - \begin{bmatrix} S & -s' \cdot E \\ -s^T & 1 - s' \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A & a \\ a^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} S^T & -s \\ -s' \cdot E^T & 1 - s' \end{bmatrix}, \quad (1.19)$$

kur

$$S = I - E \cdot s^T, \quad (1.20)$$

$$F = s' \cdot E \cdot a^T \cdot S^T + s' \cdot S \cdot a \cdot E^T - S \cdot A \cdot S^T, \quad (1.21)$$

$$f = S \cdot A \cdot s - s' \cdot E \cdot a^T \cdot s - S \cdot a \cdot (1 - s'), \quad (1.22)$$

$$v = 2 \cdot (1 - s') \cdot s^T \cdot a - s^T \cdot A \cdot s. \quad (1.23)$$

Ši teorema susieja TEAM ir jos branduolio atvirkštines matricas.

1.6.1 teorema. Pažymėkime $A = \left[\left((x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j) \right)^\delta \right]_1^K$,

$a = (|x_1 - x|^\delta, |x_{2l} - x|^\delta, \dots, |x_{K1} - x|^\delta)^T$, kur $x_i, x_j, x \in \mathfrak{R}^d, x_i \neq x_j, i \neq j, x_i \neq x, 1 \leq i, j \leq K, 0 \leq \delta < 1, d \geq 1, E^T \cdot s \neq 1$.

Tada branduolio matricos (1.19) atvirkštinė matrica F^{-1} yra:

$$F^{-1} = M = -A^{-1} + \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - \frac{q \cdot q^T}{D}, \quad (1.24)$$

$$\text{kur } q = s + s' \cdot A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \quad (1.25)$$

$$D = s'^2 \cdot \left(a^T \cdot A^{-1} \cdot a - \frac{(1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \quad (1.26)$$

$$s' = 1 - E^T \cdot s. \quad (1.27)$$

Įrodymas. 1.2.2 teoremoje įrodyta, kad trupmeninių Euklido atstumų matrica yra neišsigimusi, t. y. $|A| \neq 0$. Pagal (1.25) ir (1.27) galima išvesti

$$E^T \cdot q = 1. \quad (1.28)$$

Pagal pastarąją formulę:

$$S^T \cdot q = (I - s \cdot E^T) \cdot q = q - s = s' \cdot A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right). \quad (1.29)$$

Todėl pagal (1.20), (1.21), (1.24)–(1.29) po nesudėtingų pertvarkymų gaunamos tokios išraiškos:

$$\begin{aligned} \frac{F \cdot q \cdot q^T}{D} &= \quad (1.30) \\ &= \frac{(s' \cdot E \cdot a^T \cdot S^T + s' \cdot S \cdot a \cdot E^T - S \cdot A \cdot S^T) \cdot q \cdot q^T}{D} = \\ &= \frac{\left(s'^2 \cdot E \cdot a^T \cdot A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) - s' \cdot S \cdot E \cdot \frac{1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot q^T}{D} = \\ &= E \cdot q^T = E \cdot s^T + s' \cdot E \cdot a^T \cdot A^{-1} + s' \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1} \cdot \frac{1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}. \end{aligned}$$

Kita vertus, iš lygybės

$$E^T \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) = 0, \quad (1.31)$$

(1.21) ir (1.29) darome išvadą:

$$\begin{aligned} F \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) &= \quad (1.32) \\ &= (s' \cdot E \cdot a^T - (I - E \cdot s^T) \cdot A) \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) = \\ &= \left(s' \cdot E \cdot \left(\frac{a^T \cdot A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - a^T \cdot A^{-1} \right) - (I - E \cdot s^T) \cdot \left(\frac{E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - I \right) \right) = \\ &= I - E \cdot s^T + \frac{s' \cdot (a^T \cdot A^{-1} \cdot E - 1) \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - s' \cdot E \cdot a^T \cdot A^{-1}. \end{aligned}$$

Todėl suderinus (1.30) ir (1.31) galima užrašyti $F \cdot M = I$.

Pagal (1.20), (1.21) ir (1.27) galima parodyti, kad $S^{-1} \cdot E = \frac{E}{s'}$. Tokiu atveju taikant Silvesterio determinanto tapatybę (Lay (2005)) galima išvesti:

$$\begin{aligned}
 |F| &= |s' \cdot E \cdot a^T \cdot S^T + s' \cdot S \cdot a \cdot E^T - S \cdot A \cdot S^T| = \\
 &= |S \cdot A \cdot S^T| \cdot |(E \cdot (a^T \cdot A^{-1} \cdot S^{-1}) + (S \cdot a) \cdot (E^T \cdot (S^T)^{-1} \cdot A^{-1} \cdot S^{-1})) \cdot s' - I| = \\
 &= s'^2 \cdot |-A| \cdot |(E \cdot (a^T \cdot A^{-1} \cdot S) + (S \cdot a) \cdot (E^T \cdot (S^T)^{-1} \cdot A^{-1} \cdot S^{-1})) \cdot s' - I| = \\
 &= s'^2 \cdot |-A| \cdot \begin{vmatrix} a^T \cdot A^{-1} \cdot E - 1 & -a^T \cdot A^{-1} \cdot a \cdot s' \\ -\frac{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}{s'} & a^T \cdot A^{-1} \cdot E - 1 \end{vmatrix} = \\
 &= -s'^2 \cdot |-A| \cdot ((a^T \cdot A^{-1} \cdot a) \cdot (E^T \cdot A^{-1} \cdot E) - (1 - a^T \cdot A^{-1} \cdot E)^2).
 \end{aligned}$$

Taigi teorema įrodyta. ■

1.6.1 išvada. Tarkime, kad teoremos 1.4.1 sąlygos yra tenkinamos. Tada:

$$F^{-1} - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} = -A^{-1} + \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}. \quad (1.33)$$

Taigi pagal (1.27) ir (1.31) galima pastebėti, kad:

$$F^{-1} \cdot E = \frac{q}{D} \quad (1.34)$$

ir todėl:

$$E^T \cdot F^{-1} \cdot E = \frac{1}{D}. \quad (1.35)$$

Taigi išvada seka iš pastarųjų dviejų formulių ir (1.24).

1.6. Skyriaus išvados

1. Nors duomenų struktūros, aprašomos trupmeninių Euklido atstumų matricomis, gana dažnos, kol kas daugiausia išnagrinėtos yra Euklido atstumų kvadratų matricos.
2. Trupmeninių Euklido atstumų matricos savybės yra aprašomos per branduolio matricą (1.19), kurioje vektorius s žymi koordinačių pradžią.

3. Jeigu daugiamačių duomenų aibę X sudaro skirtingi vektoriai, šios duomenų aibės trupmeninių Euklido atstumų matricos branduolio matrica yra neneigiamai apibrėžta ir rango $K - 1$.
4. Jeigu daugiamačių duomenų aibę X sudaro skirtingi vektoriai, šios aibės trupmeninių Euklido atstumų matrica yra neišsigimusi.

2 skyrius. Krigingo surogatinis modelis

Šiame skyriuje pristatytas ir ištirtas daugiamačių duomenų modelis homogeniniais Gauso laukais, kurių kovariacijų matrica aprašoma trupmeninių Euklido atstumų matricos branduolio matrica. Remiantis šiuo modeliu sukurtas krigingo algoritmas, pritaikytas išbarstytiesiems daugiamačiams duomenims ekstrapoliuoti. Sukurto krigingo algoritmo savybės yra ištirtos kompiuterinio modeliavimo būdu, o paskui jis pritaikytas nuotekų filtrų eksperimentinių tyrimų rezultatų analizei.

2.1. Surogatinio modeliavimo prielaidos

Dažniausiai taikomi šie surogatinio modelio tipai: daugianario atsako paviršiai, kringingas, radialinės bazinės funkcijos, atraminių vektorių mašinos ir dirbtiniai neuroniniai tinklai. Dažniausiai nagrinėjamos sistemos prigimtis nėra žinoma, todėl nėra aišku, kuris surogatinis modelis yra tinkamiausias. Be to, nėra matematikų sutarta, kaip pasirinkti duoto surogato tikslumo matą.

Pastaruoju metu atlikti surogatinių modelių tyrimai leidžia iškelti tokias invariantiškumo prielaidas:

1. Invariantiškumas tikslo funkcijos monotoninių transformacijų atžvilgiu;
2. Invariantiškumas tyrimų erdvės ortogonalinių transformacijų atžvilgiu.

Bet kuriam fizikiniui ar kompiuteriniui eksperimentui paprastai reikia atlikti daug matavimų, susijusių su įvairiais duomenimis. Tačiau analizės požiūriu kontekstas, kuriame gauti duomenys, dažnai nėra svarbus.

Surogatiniai modeliai yra konstruojami taikant į duomenis orientuotus metodus. Kadangi tikslus vidinis sistemos modelis nėra žinomas, remiamasi įėjimo-išėjimo (angl. *input-output*) elgesio tyrimu. Modelis yra konstruojamas remiantis imitatoriaus atsaku ribotoje specialiu būdu pasirinktoje taškų aibėje. Šis metodas taip pat žinomas kaip juodosios dėžės modeliavimas. Nors surogatinis modeliavimas atsirado sprendžiant inžinerinius projektavimo uždavinius, jis gali būti taikomas ir kitose srityse, susijusiose su didelių sąnaudų eksperimentais ar tikslo funkcijų skaičiavimais. Surogatinio modeliavimo tikslas – surogato, kuris yra kiek įmanoma tikslus, modeliavimas pagal nedaugelio eksperimentų rezultatus. Šis procesas apima tris etapus, kurie gali veikti vienas kitą:

1. surogatinio modelio konstravimas ir jo parametrų optimizavimas;
2. optimalių eksperimentų planavimas;
3. surogatinio modelio tikslumo tyrimas.

Pažymėtina, kad eksperimentinių matavimų arba kompiuterinių skaičiavimų duomenų interpretavimas turi tikimybinį pobūdį, kadangi, visų pirma, rekonstruojami duomenys yra visada daugiau ar mažiau tiksli aproksimacija ir yra iki rekonstrukcijos neapibrėžti, o antra, tenka atsižvelgti į matavimo ir skaičiavimo paklaidas. Be to, deterministiniai metodai yra gana neefektyvūs sprendžiant problemas su dideliu kintamųjų skaičiumi, o šios realiose situacijose pasitaiko dažniausiai. Savo ruožtu statistiniai metodai, tokie kaip regresijos ar koreliacijos analizės, dažnai aprašo tik lokaliąsias duomenų struktūros savybes, pavyzdžiui, tiesinius arba netiesinius trendus.

Atsižvelgiant į šiuos aspektus, sukurta kriginio koncepcija, skirta geotechniniuose tyrimuose reikšmėms interpoliuoti dar nestebėtose vietose pagal stebėjimų gretimose vietose rezultatus (Krige (1951), Mattheron (1963)). Krigingas leidžia apskaičiuoti geriausią nepaslinktą įvertį pagal stebėjimų rezultatų modeliavimą homogeniniais atsitiktiniais laukais, aprašomais tikėtimumo ir kovariacijų funkcijomis (Stein (1999)). Taikomas metodas leidžia nusakyti su tam tikra tikimybe rezultatą, susijusį su parametrais, kurie dar nebuvo aptikti arba buvo prarasti, taip pat leidžia „saugoti“ sukauptą informaciją ir panaudoti ją netirtose situacijose, kuriose matavimai ar stebėjimai nebuvo atlikti. Todėl pagrindinis modelio rezultatas yra tikimybinis tankis kiekviename konfigūracijų erdvės taške (Beuzamy (2004)).

2.2. Gauso lauko modelis, aprašytas atstumų matricomis su trupmeniniais laipsnių rodikliais

Tikslo arba atsako funkcijos tikimybinio modeliavimo paradigma pristatyta ir plėtota įvairiuose darbuose (Mockus (1968, 1989), Jones (2001)). Ši paradigma pasirodė gana naudinga – ją galima pritaikyti kuriant globalaus optimizavimo Bajeso metodus kelių kintamųjų funkcijoms ekstrapoliuoti, stochastiniams algoritmams stabdyti, optimaliems eksperimentams planuoti ir t. t. (Mockus (1997), Zilinskas (1985), Bartkute (2009)).

Atsitiktiniai Gauso laukai plačiai taikomi tikimybiniam modeliavimui. Pavyzdžiui, modeliavimą homogeniniais Gauso laukais (daugiamačiais stacionariais procesais) galima daug kur pritaikyti inžinerijoje ir fizikoje, kai duomenys yra gaunami

eksperimentu arba tam tikrais kompiuterio kodais (Adler (1981), Bogush (1986), Goff (1994), Chamon (1996), Lopez-Caballero (2010), Zaichik (2011)). Gauso laukų modelių savybės labiausiai priklauso nuo kovariacijų funkcijos, aprašančios priklausomybę tarp taškų, kuriuose atlikti kompiuteriniai ar fizikiniai eksperimentai. Pavyzdžiui, atsitiktinių laukų realizacijų tolydumas arba diferencijuotumas priklauso nuo kovariacijų funkcijos tolydumo arba diferencijuotumo. Kadangi kovariacijų funkcija priklauso nuo atstumų tarp matavimų ir stebėjimų taškų, daugiamačių duomenų sąryšiai, modeliuojami Gauso laukais, yra aprašomi atstumų tarp taškų porų matrica. Nagrinėjami modeliai pasižymi įprasta geometrine interpretacija.

Statistinis metodas atsako funkcijos modeliavimui atsitiktiniu lauku aprašytas Kushnerio (1964), Zilinsko (1985), Mockaus (1989) ir Sakalausko (2013) darbuose.

Šiame skyriuje kuriamas skaliarinės funkcijos (arba atsakomojo paviršiaus) tikimybinis modelis, kurio įverčiai gaunami iš fizikinių matavimų ar modeliuojami kompiuteriniu būdu. Nenaudojami jokie papildomi duomenys, išskyrus matavimo rezultatus. Paviršius, kuris atitinka atsako funkciją, gali būti suprojektuotas kaip vientisas atsitiktinis Gauso laukas (AGL) $Z(x, \omega)$, kuriame kiekvienam kintamajam erdvėje $x \in \mathfrak{R}^d$ užrašoma atsitiktinių įvykių funkcija tam tikroje tikimybinėje erdvėje (Mockus (1989), Jones (2001), Sakalauskas (2013)).

Kadangi yra nežinoma, kuris iš visų funkcijų kintamųjų dominuoja, eksperimentų pradžioje laikykime juos lygiaverčiais. Pirma, apskaičiuokime atstumą tarp matavimo taškų, kurie yra simetriški atsižvelgiant į įvairius kintamuosius. Paprastai AGL yra apibrėžiamas naudojant koreliacinę funkciją pagal Bochnerio teoremą (Abrahamsen (1997)).

Šis modelis yra atsako paviršiaus įverčių $Z(x, \omega) = (Z(x_1, \omega), Z(x_2, \omega), \dots, Z(x_K, \omega))$ taškuose $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ pasiskirstymo tikimybė.

Tačiau trupmeninių Euklido atstumų matricos geometrinės savybės, iširtos ankstesniame skyriuje, leidžia mums apibrėžti homogeninį AGL, kurio vidurkio vektorius lygus

$$EZ(x, \omega) = \mu \cdot E, \quad (2.1)$$

o kovariacijų matrica yra tiesiogiai proporcinga atitinkamai branduolio matricai

$$E(Z(x, \omega) - \mu \cdot E) \cdot (Z(x, \omega) - \mu \cdot E)^T = \beta^2 \cdot F, \quad (2.2)$$

čia μ ir β yra parametrai, $\beta > 0$, ir F yra neneigiamai apibrėžta matrica.

Tarkime, turime K d-dimensijų vektorių duomenų rinkinį:

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_K), \quad (2.3)$$

$x_i \in \mathfrak{R}^d$, $1 \leq i \leq K$.

Pažymėkime

$$A = \left[(|x_i - x_j|)^\delta \right] \quad (2.4)$$

Euklido atstumų kvadratų $K \times K$ matricą. Atstumai apskaičiuoti tarp X rinkinio vektorių porų, kur $0 \leq \delta \leq 1$, $|x_i - x_j| = (x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j)$.

Sakykime, atlikus matavimus arba kompiuterinį modeliavimą gautos tam tikros tikslo funkcijos reikšmės:

$$Y = (y_1, y_2, \dots, y_K)^T. \quad (2.5)$$

Užrašykime AGL reikšmių tikimybinio paskirstymo tankio funkciją:

$$p_{x_0, X}(Y) = \frac{e^{-\frac{(Y - \mu \cdot E)^T \cdot F^{-1} \cdot (Y - \mu \cdot E)}{2 \cdot \beta^2}}}{(2\pi)^{\frac{d}{2}} \cdot \beta^d \cdot |F|^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.6)$$

Tačiau, kaip matyti, šis tankis ankstesniais žymėjimais gali būti užrašomas taip:

$$p_{x_0, X}(Y) = \frac{e^{-\frac{1}{2 \cdot \beta^2} Y^T \left(A^{-1} - \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot Y - \frac{(Y^T \cdot q - \mu)^2}{2 \cdot \beta^2 \cdot D}}}{(2\pi)^{\frac{K}{2}} \cdot \beta^K \cdot ((-1)^{K+1} \cdot |A| \cdot D \cdot E^T \cdot A^{-1} \cdot E)^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.7)$$

Atsitiktinį lauką aprašančios daugiamatės pasiskirstymo funkcijos turi tenkinti simetrijos ir suderinamumo sąlygas (Abrahamsen (1997)). Šitokios pasiskirstymo funkcijos yra sukonstruojamos remiantis kita teorema, kai tinkamai pasirenkamas centravimo vektorius.

2.2.1 teorema. Atsitiktinis Gauso laukas $Z(x, \omega)$ egzistuoja tikimybinėje erdvėje (Ω, Σ, P) su pasiskirstymo funkcijomis

$$p_{x_0, X_K}(Y_K) = \quad (2.8)$$

$$= \frac{e^{-\frac{1}{2\beta^2} Y_K^T \left(A_K^{-1} - \frac{A_K^{-1} \cdot E_K \cdot E_K^T \cdot A_K^{-1}}{E_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot E_K} \right) \cdot Y_K - \frac{\left(Y_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot \left(a_K + E_K \cdot \frac{1 - E_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot a_K}{E_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot E_K} \right) - \mu \right)^2}{2\beta^2 \cdot \left(a_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot a_K - \frac{(1 - E_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot a_K)^2}{E_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot E_K} \right)}}{(2\pi)^{\frac{K}{2}} \cdot \beta^K \cdot \left((-1)^{K+1} \cdot |A_K| \cdot (a_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot a_K \cdot E_K^T \cdot A^{-1} \cdot E_K - (1 - E_K^T \cdot A_K^{-1} \cdot a_K)^2) \right)^{\frac{1}{2}}}$$

čia daugiamatis $Y_K = (y_1, y_2, \dots, y_K)^T$, $y_i = Z(x_i, \omega)$, yra pasiskirstymo tankis, $X_K = (x_1, x_2, \dots, x_K)$, $x_i \in \mathfrak{R}^d$, yra skirtingų ir nesutampančių su $x_0 \in \mathfrak{R}^d$, $1 \leq i \leq K$, taškų seka, $A_K = \left[(\|x_i - x_j\|) \right]_{i,j=1}^K$, $a_K = (\|x_1 - x_0\|^\delta, \|x_2 - x_0\|^\delta, \dots, \|x_K - x_0\|^\delta)^T$, $E_K = (1, 1, \dots, 1)^T$, $E_K \in \mathfrak{R}^K$, $K = 2, 3, \dots$, μ ir β yra parametrai, $\beta > 0$.

Irodymas. Galima pastebėti, kad tankio (2.8) apibrėžimas seka iš (2.6) ir (2.7), atsižvelgiant į branduolio matricos (1.3) apatinės dešinės pusės submatricą, apskaičiuotą su centriniu vektoriumi $\tilde{s} = (1, 0, 0, \dots, 0)$. Kaip minėta anksčiau, tankio funkcijos (2.6), (2.7) ir (2.8) yra tinkamai apibrėžtos pagal teoremą 1.4.1. Iš tikrųjų, nesunku matyti, kad $\int_{Y \in \mathfrak{R}^K} p_{x_0, X}(Y) dY = 1$.

Paskirstymo (2.6), taigi ir (2.7) ir (2.8) pasiskirstymų simetrija, yra įrodoma standartiniu būdu, kuris taikomas daugiamatiams pasiskirstymams, – pagal branduolio matricos simetriją (žr. 1.4.1 skyrių, Abrahamsen (1997)).

Įrodant suderinamumą, apibrėžkime kovariacijos matricas atsižvelgdami į X_K ir X_{K+1} kovariacijos matricas F_K ir F_{K+1} , kurios yra apatinės dešinėsios submatricos atitinkamose branduolio matricose. Dabar galima lengvai pastebėti, kad dėl 1.5.4, F_K yra dekompozicijos $F_{K+1} = \begin{pmatrix} F_K & f_K \\ f_K^T & \nu_K \end{pmatrix}$ apatinė kairioji submatrica. Taigi naudojant blokinės matricos operacijas, galima įsitikinti, kad:

$$p_{x_0, X_{K+1}}(Y_{K+1}) = p_{x_0, X_K}(Y_K) \cdot \frac{e^{-\frac{(y_{K+1} - E_{x_0, X_K}(Z(x_{K+1}, \omega)|Y_K))^2}{2 \cdot D_{x_0, X_K}^2(Z(x_{K+1}, \omega)|Y_K)}}}{\sqrt{2\pi \cdot D_{x_0, X_K}^2(Z(x_{K+1}, \omega)|Y_K)}}, \quad (2.9)$$

čia $E_{x_0, X_K}(Z(x_{K+1}, \omega)|Y_K) = \mu + (Y_K - \mu \cdot E_K)^T \cdot F_K^{-1} \cdot f_K$

ir $D_{x_0, X_K}^2(Z(x_{K+1}, \omega)|Y_K) = \beta^2 \cdot (\nu_K - f_K^T \cdot F_K^{-1} \cdot f_K)$ yra atitinkamai sąlyginiai AGL vidurkis ir dispersija taške x_{K+1} , kai žinomas Y_K (žr. Casella (2002)). Tuomet

suderinamumas seka iš: $p_{x_0, X_K}(Y_K) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_{x_0, X_{K+1}}(Y_K, y) dy$. Tačiau pagal Kolmogorovo suderinamumo teoremą egzistuoja AGL, kurio daugiamačio pasiskirstymo tankio funkcijos yra (2.8) (Khoshnevisan (2002)). ■

Pavyzdys. Tarkime, kad stebėjimo duomenų aibė vaizduojama tiese: $x_k = a + t_k \cdot (b - a)$, $a, b \in \mathfrak{R}^d$, $t_0 < t_1 < \dots < t_K$. Jeigu $\delta = \frac{1}{2}$, AGL yra pasiskirstęs ant tiesių kaip Vynerio procesas.

Iš tikrųjų aibės, esančios ant tiesės, TEAM yra: $A = |b - a| \cdot \prod_{i,j=1}^K [t_i - t_j]$. Remiantis 1.5.4, apatinė dešinėje pusėje esanti branduolio matricos submatrica yra minėtos aibės kovariacijų matrica ir atitinka gerai žinomą Vynerio proceso kovariacijų matricą:

$$\begin{aligned} F &= \beta^2 \cdot |b - a| \cdot [t_i + t_j - 2t_0 - |t_i - t_j|]_{i,j=1}^K = \\ &= 2\beta^2 \cdot |b - a| \cdot [\min(t_i - t_0, t_j - t_0)]_{i,j=1}^K. \end{aligned} \tag{2.10}$$

2.3. Tikėtinumo funkcijos taikymas

Didžiausio tikėtinumo metodas (angl. *Maximum Likelihood Method – MLM*), skirtas statistinio modelio parametrams įvertinti. DTM leidžia apskaičiuoti modelio parametrų rinkinių reikšmes, maksimizuojančias tikėtinumo funkciją. Taikant DTM randamos tokios parametrų reikšmės, su kuriomis gaunami rezultatai yra labiausiai tikėtini duotajam modeliui (Li (2003)).

Užrašykime logaritminę tikėtinumo funkciją (LTF):

$$L(Y, \mu, d^2, \delta) = \frac{1}{2} \ln(|F|^{\frac{1}{2}}) + d \cdot \ln(\beta) + \frac{(Y - \mu \cdot E)^T \cdot F^{-1} \cdot (Y - \mu \cdot E)}{2 \cdot \beta^2}. \tag{2.11}$$

Akivaizdu, kad gautos išraiškos priklauso nuo vidurkio μ ir dispersijos β^2 reikšmių, kurios apskaičiuojamos taikant didžiausio tikėtinumo metodą. Užrašykime teoremą.

2.3.1 teorema. DTM parametrai μ ir β^2 apskaičiuojami taip:

$$\hat{\mu} = \frac{Y^T \cdot F^{-1} \cdot E}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} = \tag{2.12}$$

$$= \frac{Y^T \cdot A^{-1} \cdot E}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} + Y^T \cdot \left(s - A^{-1} \cdot \left(\frac{E \cdot (E^T \cdot A^{-1} \cdot a \cdot \sigma^T + 1 - s)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - a \cdot s' \right) \right),$$

$$\hat{\beta}^2 = \frac{1}{K} \cdot \left(Y^T \cdot F^{-1} \cdot Y - \frac{(Y^T \cdot F^{-1} \cdot E)^2}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) = \frac{1}{K} \cdot \left(\frac{(Y^T \cdot A^{-1} \cdot E)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - Y^T \cdot A^{-1} \cdot Y \right). \quad (2.13)$$

Irodymas. Ši išraiška gaunama diferencijuojant LLF pagal μ ir artinant rezultatai prie nulio. Tada (2.12) formulė gaunama iš (1.28), (1.37) ir (1.38) išraiškų.

Panašiai, diferencijuodami LLF ir artindami gautą rezultatai iki nulio, gauname DTM:

$$\hat{\mu} = \frac{Y^T \cdot F^{-1} \cdot E}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E}.$$

Panašiai diferencijuodami LLF pagal β^2 ir artindami gautą rezultatai iki nulio, gauname DTM:

$$\hat{\beta}^2 = \frac{(Y - \hat{\mu} \cdot E)^T \cdot F^{-1} \cdot (Y - \hat{\mu} \cdot E)}{K} = \frac{1}{K} \cdot \left(Y^T \cdot F^{-1} \cdot Y - \frac{(Y^T \cdot F^{-1} \cdot E)^2}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right). \quad (2.14)$$

2.3.2 pastaba. Pagal Sakalauskas (2013) gautas AGL modelis, įskaitant homogeninio izotropinio Gauso lauko paviršiaus $\alpha \cdot \beta^2 \cdot \left(1 - \frac{\gamma}{\alpha} \cdot r^\delta + o(r^\delta) \right)$ kovariacijų funkciją ir parametrai α , artėjanti prie nulio. DTM parametras $\hat{\beta}^2$, apskaičiuotas pateiktame modelyje, yra toks pats, kaip ir (2.13), tačiau vidurkio didžiausio tikėtumo įvertis yra $\hat{\mu} = \frac{Y^T \cdot A^{-1} \cdot E}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}$ (Sakalauskas (2013)). Taigi DTM išraiška (2.12) sutampa su šiuo įverčiu:

$$s = \frac{A^{-1} \cdot E \cdot (1 - s' \cdot (1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a))}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \cdot a.$$

2.3.3 pastaba. Atkreipkime dėmesį, kad laipsnis yra taip pat AGL parametras, kuris gali būti įvertintas pagal stebėjimo duomenis. Mažiausių kvadratų įvertis $\hat{\delta}$ yra apskaičiuojamas sprendžiant vieno kintamojo minimizavimo uždavinį:

$$\hat{\delta} = \arg \min_{0 \leq \delta \leq 1} \frac{1}{K} \cdot \left(\frac{(Y^T \cdot A^{-1} \cdot E)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - Y^T \cdot A^{-1} \cdot Y \right). \quad (2.15)$$

Įverčių savybės yra tiriamos atlikus kompiuterines simuliacijas 2.7 skyrelyje.

2.4. Sąlyginis vidurkis ir sąlyginė dispersija

Geriausiam AGL įverčiui tam tikruose taškų poaibiuose \hat{X} gauti pritaikykime sąlyginį AGL vidurkį su sąlyga, kad buvo stebėtos reikšmės $Y = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$, kadangi toks modelis užtikrina mažiausių kvadratų įverčius.

2.4.1 teorema. Tegul $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ yra skirtingų taškų poaibis, $x_i, x_j \in \mathfrak{R}^d$, $x_i \neq x_j$, $i \neq j$, $1 \leq i, j \leq K$, kuriame išmatuotos tikslo funkcijos reikšmės $Y = (y_1, y_2, \dots, y_K)^T$ yra atsitiktinio Gauso lauko realizacija, tiksliau tariant, $y_i = Z(y_i, \omega)$.

Pažymėkime $A = \left[\left((x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j) \right)^\delta \right]_1^K$ atstumų vektorių $x_i \in X$ matrica su trupmeniniais laipsnių rodikliais, kur $0 \leq \delta < 1$, ir F branduolio matrica (1.1), kur $E^T \cdot s \neq 1$. Tada AGL sąlyginio vidurkio ir sąlyginės dispersijos reikšmės, kai $x \in \mathfrak{R}^d$, apskaičiuojamos taip:

$$y(x) = Y^T \cdot F^{-1} \cdot \left(f + E \cdot \frac{(1 - E^T \cdot F^{-1} \cdot f)}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) = Y^T \cdot A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{(1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} \beta^2(x) &= \hat{\beta}^2 \cdot \left(v - f^T \cdot F^{-1} \cdot f + \frac{(1 - E^T \cdot F^{-1} \cdot f)^2}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) = \\ &= \hat{\beta}^2 \cdot \left(a^T \cdot A^{-1} \cdot a - \frac{(1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \end{aligned} \quad (2.17)$$

čia f , a ir v yra TEAM ir branduolio matricos blokai (1.22), $\hat{\beta}^2$ yra didžiausio tikėtimumo įvertis (2.9).

Irodymas. Gauta sąlyginio tikėtimumo išraiška (2.12), apibrėžta per kovariacijų matricą (2.7), remiantis Jones (2001).

Perrašykime (2.12) išraišką taip:

$$y(x) = Y^T \cdot \left(\left(F^{-1} - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) \cdot f + \frac{F^{-1} \cdot E}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right). \quad (2.18)$$

Pagal (1.25) ir (1.25) išraiškas ir atlikę veiksmus, gauname lygybę:

$$f = A \cdot s - a \cdot (1 - s') + E \cdot \left((1 - 2 \cdot s') \cdot a^T \cdot s - s^T \cdot A \cdot s \right). \quad (2.19)$$

Taip pat pagal (1.28), (1.34), (1.36), (1.37) ir (2.19) išraiškas, nesunkiai galime įrodyti, kad:

$$\begin{aligned}
& \left(F^{-1} - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) \cdot f + \frac{E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} = \tag{2.20} \\
& = \left(\left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) \cdot (A \cdot s - a \cdot (1 - s')) \right) + q = \\
& = \left(\left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot (1 - s')}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - s \right) + \left(A^{-1} \cdot a - \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1} \cdot a}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot (1 - s') \right) + q = \\
& = \frac{A^{-1} \cdot E}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} + \left(A^{-1} - \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot a.
\end{aligned}$$

Taigi matome, kad (2.20) išraiškoje gautas rezultatas yra lygus (2.16) formulės dešinei pusei.

Sąlyginės dispersijos išraiška (2.17), apibrėžta per kovariacijų matricą (2.10), taip pat taikyta pagal Jones (2001).

Perrašykime (2.13) tokiu būdu:

$$\beta^2(x) = \hat{\beta}^2 \cdot \left(v - f^T \cdot \left(F^1 - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) \cdot f + \frac{1 - 2E^T \cdot F^{-1} \cdot f}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right). \tag{2.21}$$

Taigi pagal (2.16) gauname:

$$\begin{aligned}
& f^T \cdot \left(F^1 - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) \cdot f + \frac{E^T \cdot F^{-1} \cdot f}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} = \\
& = \left(\frac{E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} + a^T \cdot \left(A^{-1} - \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \right) \cdot f = B1 - B2,
\end{aligned}$$

$$\text{kur } B1 = \frac{E^T \cdot A^{-1} \cdot f}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}, \quad B2 = a^T \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) \cdot f.$$

Toliau pagal (1.25) ir (1.30) išraiškas užrašome:

$$\begin{aligned}
B1 & = \frac{E^T \cdot A^{-1} \cdot \left(A \cdot s - a \cdot (1 - s') + E \cdot \left((1 - 2 \cdot s') \cdot a^T \cdot s - s^T \cdot A \cdot s \right) \right)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} = \\
& = \frac{(1-s') \cdot (1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} + (1 - 2 \cdot s') \cdot a^T \cdot s - s^T \cdot A.
\end{aligned}$$

Pagal pastarąją ir (1.26) formules užrašome:

$$v - B1 = s^T \cdot a - \frac{(1-s') \cdot (1-E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}. \quad (2.22)$$

Tada pagal (1.25), (1.28), (1.30) ir (1.34) užrašome:

$$\begin{aligned} B2 &= \quad (2.23) \\ &= a^T \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) \cdot (A \cdot s - a \cdot (1-s') - E \cdot (s^T \cdot A \cdot s + s' \cdot a^T \cdot s)) = \\ &= a^T \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) \cdot (A \cdot s - a \cdot (1-s')) = \\ &= a^T \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot (1-s')}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - s - \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) \cdot a \cdot (1-s') \right) = \\ &= \left(\frac{a^T \cdot A^{-1} \cdot E - (a^T \cdot A^{-1} \cdot E)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} + a^T \cdot A^{-1} \cdot a \right) \cdot (1-s') - a^T \cdot s. \end{aligned}$$

Pagal (1.25), (1.28), (1.31) ir (1.32) gauname:

$$\begin{aligned} q^T \cdot f &= q^T \cdot (S \cdot A \cdot s - s' \cdot E \cdot a^T \cdot s - S \cdot a \cdot (1-s')) = \quad (2.24) \\ &= ((q-s)^T \cdot A \cdot s - s' \cdot a^T \cdot s - (q-s)^T \cdot a \cdot (1-s')) = \\ &= \left(\left(a^T + E^T \cdot \frac{1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot s \cdot s' - s' \cdot a^T \cdot s - \right. \\ &\quad \left. - \left(a^T + E^T \cdot \frac{1 - E^T \cdot A^{-1} \cdot a}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot A^{-1} \cdot a \cdot s' \cdot (1-s') \right) = \\ &= (1-s') \cdot s' \cdot \left(\frac{(1-E^T \cdot A^{-1} \cdot a)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - a^T A^{-1} \cdot a \right). \end{aligned}$$

Taigi pagal (1.29), (2.22), (2.23) ir (2.24) gauname lygybę:

$$v - f^T \cdot \left(F^1 - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) \cdot f + \frac{1 - 2E^T \cdot F^{-1} \cdot f}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} =$$

$$= v - B1 + B2 + D - q^T \cdot f = a^T \cdot A^{-1} \cdot a - \frac{(1-E^T \cdot A^{-1} \cdot a)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E},$$

kuri ir turėjo būti įrodyta. ■

2.5. Krigingo metodas

Sakykime, kad turime numatyti atsako paviršiaus y reikšmę taške $x \in \mathfrak{R}^d$, jeigu aibė $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ stebėjimų, tarpusavyje nesikertančių vektorių $x_i \in \mathfrak{R}^d$, $1 \leq i \leq K$, $K > 1$, $d \geq 1$, yra užfiksuota ir atsako paviršiaus matavimo duomenys $Y = (y_1, y_2, \dots, y_K)^T$ taškuose X yra žinomi. Tarkime, kad duomenys modeliuojami AGL su sąlyginiu vidurkiu (2.12) ir kovariacijų matrica (2.10). Taigi užrašykime kovariacijų matricą $\hat{\beta}^2 \cdot \bar{F}$ vektorių $\bar{Y} = (Y, y)$ kovariacijų matricoje $\hat{\beta}^2 \cdot F$ iš vektorių Y , iki vektorių $\hat{\beta}^2 \cdot f$ kovariacijų tarp Y ir y , ir y dispersijos, apibrėžiamas v :

$$\beta^2 \cdot \bar{F} = \beta^2 \cdot \begin{pmatrix} F & f \\ f & v \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Pagal bendrąjį krigingo modelį (žr. Jones (2001)) krigingo ekstrapoliatorius yra apibrėžiamas tokiu būdu:

$$y(x) = Y^T \cdot F^{-1} \cdot \left(f + E \cdot \frac{(1-E^T \cdot F^{-1} \cdot f)}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right), \quad (2.26)$$

o jo sąlyginė dispersija yra:

$$\beta^2(x) = \hat{\beta}^2 \cdot \left(v - f^T \cdot F^{-1} \cdot f + \frac{(1-E^T \cdot F^{-1} \cdot f)^2}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right). \quad (2.27)$$

Čia dispersijos parametro didžiausio tikėtimumo įvertis yra:

$$\hat{\beta}^2 = \frac{1}{K} \cdot \left(Y^T \cdot F^{-1} \cdot Y - \frac{(Y^T \cdot F^{-1} \cdot E)^2}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right). \quad (2.28)$$

Nagrinėkime krigingo metodą, pagrįstą tikimybinio duomenų modeliu, gautu ankstesniame skyriuje.

2.5.1 teorema. Tarkime, duota aibė $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ skirtingų taškų x_i , $x_j \in \mathfrak{R}^d$, $x_i \neq x_j$, $i \neq j$, $1 \leq i, j \leq K$. AGL reikšmių tuose taškuose $y_i = Z(x_i, \omega)$ vektorių pažymėkime $Y = (y_1, y_2, \dots, y_K)^T$.

Tarkime, $A = \left[\left((x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j) \right)^\delta \right]_1^K$ yra taškų $x_i \in X$, $0 \leq \delta < 1$ TEAM. Tada kringingo ekstrapoliatorius dėl $x \in \mathfrak{R}^d$ yra

$$y(x) = Y^T \cdot A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{(1-E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \quad (2.29)$$

dispersija

$$\beta^2(x) = \hat{\beta}^2 \cdot \left(a^T \cdot A^{-1} \cdot a - \frac{(1-E^T \cdot A^{-1} \cdot a)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \quad (2.30)$$

čia dispersijos parametras

$$\hat{\beta}^2 = \frac{(Y^T \cdot A^{-1} \cdot E)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - Y^T \cdot A^{-1} \cdot Y. \quad (2.31)$$

Kringingo ekstrapoliatorius (2.16) atitinka tiesinio ekstrapoliatoriaus savybes ir gali būti užrašomas kaip $y(x) = Y^T \cdot u(x)$, čia ekstrapoliatoriaus svorių funkcija yra tokia:

$$u(x) = A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{(1-E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right). \quad (2.32)$$

Pagal sąlyginės dispersijos (2.13) formulę galime apskaičiuoti ekstrapoliacijos tikslumą.

Kitas ekstrapoliatoriaus savybės nesunku išvesti iš (2.32).

2.5.1 išvada. Svorių funkcija (2.32) tenkina sąlygą:

$$E^T \cdot u(x) = 1.$$

Pavyzdys. Tegul aibė (1.1) yra simpleksas su K viršūnių, kurių briaunų ilgiai lygūs r , o atsako funkcijos reikšmės simplekso viršūnėse yra y_1, y_2, y_K . Tarkime, $\delta = 1$. Tada atstumų matrica įgauna pavidalą: $A = r \cdot H$, $H = [H_{ij}]_1^K$, $H_{ij} = 1$, $i \neq j$, $H_{ii} = 0$, $1 \leq i, j \leq K$.

Nesunku pastebėti, kad atvirkštinė atstumų matrica yra:

$$A^{-1} = [A_{ij}^{-1}]_1^K \quad A_{ij}^{-1} = \frac{1}{r \cdot (K-1)}, \quad i \neq j, \quad A_{ii}^{-1} = \frac{1}{r \cdot (K-1)} - \frac{1}{r}, \quad 1 \leq i, j \leq K.$$

Pagal (2.26) ir (2.27) gauname DTM parametrų įverčius:

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^K y_i}{K}, \hat{\beta}^2 = \frac{\sum_{i=1}^K (y_i - \hat{\mu})^2}{K}.$$

Taigi krigingo ekstrapoliatoriaus išraišką galime užrašyti:

$$y(x) = \hat{\mu} - \sum_{i=1}^K (y_i - \hat{\mu}) \cdot \frac{\tau_i(x)}{r}.$$

O dispersijos (2.27) išraiška:

$$\beta^2(x) = \hat{\beta}^2 \cdot \left(\sum_{i=1}^K \tau_i^2(x) - \frac{(\sum_{i=1}^K \tau_i^2(x))^2}{K} - \frac{2 \cdot r \cdot \sum_{i=1}^K \tau_i^2(x)}{K} + \frac{(K-1) \cdot r^2}{K} \right),$$

čia $\tau(x) = (\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_K)^T$, $\tau_i = |x_i - x|$, $1 \leq i \leq K$, yra atstumai tarp taškų $x \in \mathfrak{R}^K$ ir simplekso viršūnių.

2.6. Išsibarsčiusių daugiamatį duomenų ekstrapoliavimas

Tarkime, duota aibė $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ skirtingų taškų x_i , $x_j \in \mathfrak{R}^d$, $x_i \neq x_j$, $i \neq j$, $1 \leq i, j \leq K$. Pažymėkime žinomų atsako funkcijos reikšmių tuose taškuose vektorių $Y = (y_1, y_2, \dots, y_K)^T$. Apibrėžkime tiesinį ekstrapoliatorių $y: \mathfrak{R}^d \rightarrow \mathfrak{R}$ taip:

$$y(x) = Y^T \cdot u(x), \quad (2.33)$$

kur svorio funkcijos $u: \mathfrak{R}^d \rightarrow \mathfrak{R}^K$ atitinka šias savybes:

$$E^T \cdot u(x) = 1, u_i(x) = 1, \text{ jeigu } x = x_i, 1 \leq i \leq K.$$

Sukurto krigingo ekstrapoliatoriaus tikslumui įvertinti bei ekstrapoliacijos efektyvumui pagrįsti pasirinktas Šepardo ekstrapoliatorius. Šių ekstrapoliatorių skaičiavimų rezultatai lyginti tarpusavyje (2.1 lentelė).

Gerai žinomas Šepardo metodas aprašytas (Shepard (1968)). Ekstrapoliatoriaus išraiška užrašyta taip:

$$z(x) = \begin{cases} \frac{Y^T \cdot w(x)}{E^T \cdot w(x)}, & \text{if } |x_i - x| \neq 0 \quad \forall i \\ y_i, & \text{if } |x_i - x| = 0, \end{cases} \quad (2.33)$$

kur svoriai pasirinkti taip:

$$w(x) = \left(\frac{1}{|x_1 - x|^\delta}, \frac{1}{|x_2 - x|^\delta}, \dots, \frac{1}{|x_K - x|^\delta} \right). \quad (2.34)$$

Nesunku pastebėti, kad Šepardo ekstrapoliatorius atitinka tiesinio ekstrapoliatoriaus apibrėžimą.

2.7. Kompiuterinio modeliavimo rezultatai

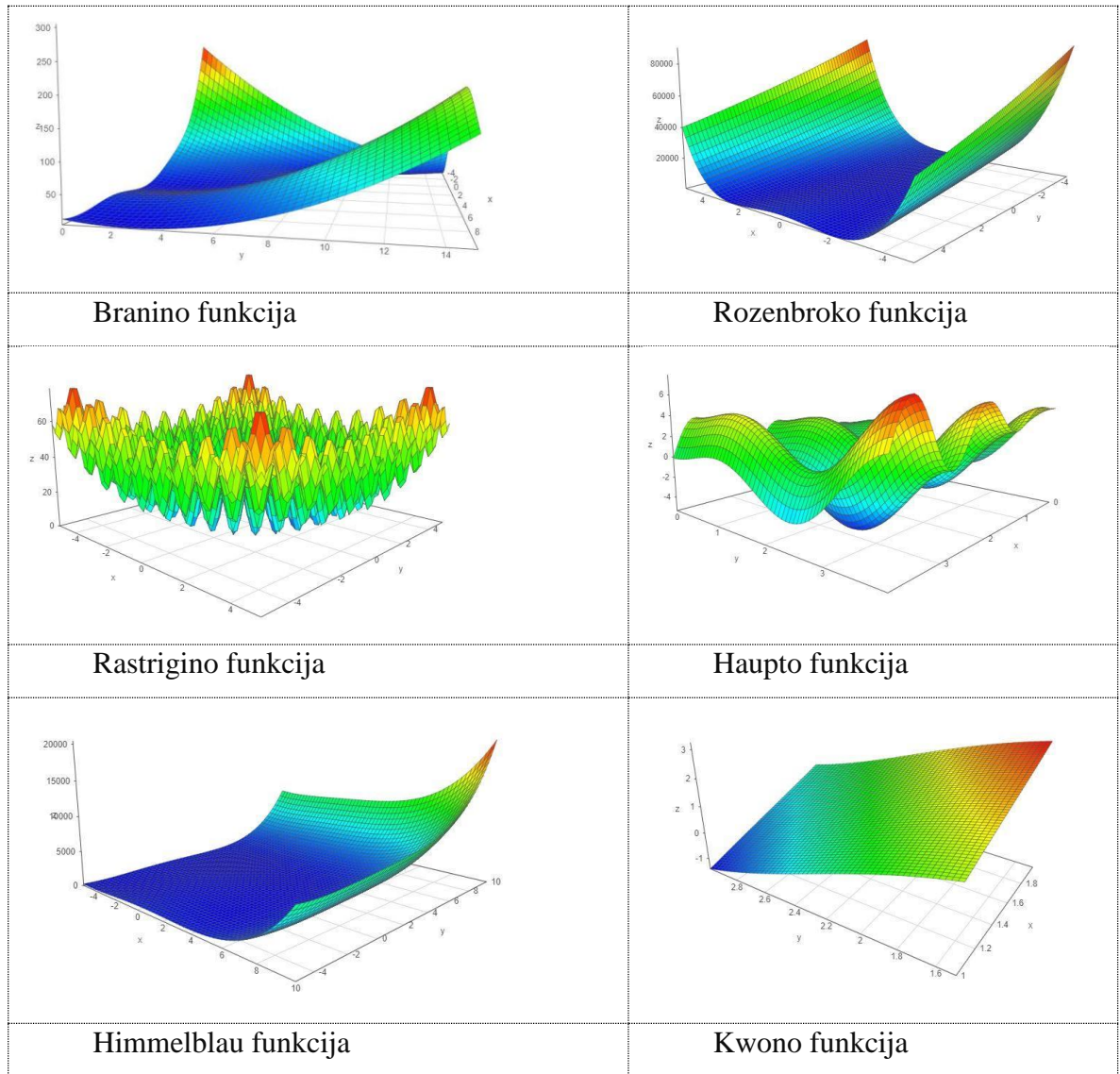
Eksperimento pradžioje tikslo funkcijos elgesys ir rezultatai yra nežinomi. Todėl ekstrapoliatorių skaičiavimo tikslumui lyginti pasirinkome literatūroje gerai žinomą testinių funkcijų rinkinį. Iš viso naudojome 6 skirtingų tipų funkcijas (Kwon (2015)). Pirmoji, vadinamoji Branino funkcija (ketvirtos eilės daugianaris), parodo vyraujančią antros eilės tendą. Ši funkcija pasižymi ypač sudėtingu ir netiesiniu pavidalu. Antroji testinė funkcija vadinama Kwono (Kwon (2015)), savo sudėtyje turinti daugianares ir trigonometrines funkcijas, parodanti pirmos eilės tendą. Rozenbroko funkcija parodo tiek pirmos, tiek antros eilės trendus. Netiesinė Haupto funkcija yra sudaryta iš trigonometrinių funkcijų. Visų funkcijų matematinės išraiškos ir apibrėžimo sritys yra pateikiamos 2.1 lentelėje.

2.1 lentelė. Testinės funkcijos ir jų apibrėžimo sritys

Testinė funkcija / Matematinė išraiška	Apibrėžimo sritis	
Branino $z_{TF}(x, y) = \left(y - \frac{5x^2}{4\pi^2} + \frac{5x}{\pi} - 6 \right)^2 + 10 \left(1 - \frac{1}{8\pi} \right) \cos x + 10$	$x \in [-5; 10]$ $y \in [0; 15]$	(2.35)
Rozenbroko $z_{TF}(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2$	$x \in [-5; 5]$ $y \in [-5; 5]$	(2.36)
Rastrigino $z_{TF}(x, y) = 20 + x^2 + y^2 - 10(\cos(2\pi x) + \cos(2\pi y))$	$x \in [-5.12; 5.12]$ $y \in [-5.12; 5.12]$	(2.37)
Haupto $z_{TF}(x, y) = x \sin(4x) + 1.1y \sin(2y)$	$x \in [0; 4]$ $y \in [0; 4]$	(2.38)

Himmelblau $z_{TF}(x, y) = (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2 + 0.1((x - 3)^2 + (y - 2)^2)$	$x \in [-5; 10]$ $y \in [-5; 10]$	(2.39)
Kwono $z_{TF}(x, y) = x^2 + x^2 \cos(x) + y \cos(y)$	$x \in [1; 2]$ $y \in [1.5; 3]$	(2.40)

Visos funkcijos yra pavaizduotos 2.1 pav.



2.1 pav. Testinės funkcijos

Modelio parametrai $\hat{\beta}^2$ ir δ yra įvertinti taikant didžiausio tikėtimumo metodą (2.13) ir (2.15). Kompiuteriniu būdu atlikti bandymai ir kiekvienai testinei funkcijai savo apibrėžimo srityje sugeneruota $N=200$ rinkinių po $K=20$ atsitiktinai gautų taškų.

Histogramos, vaizduojančios dispersijos vidurkį, pateiktos 2.2 pav.

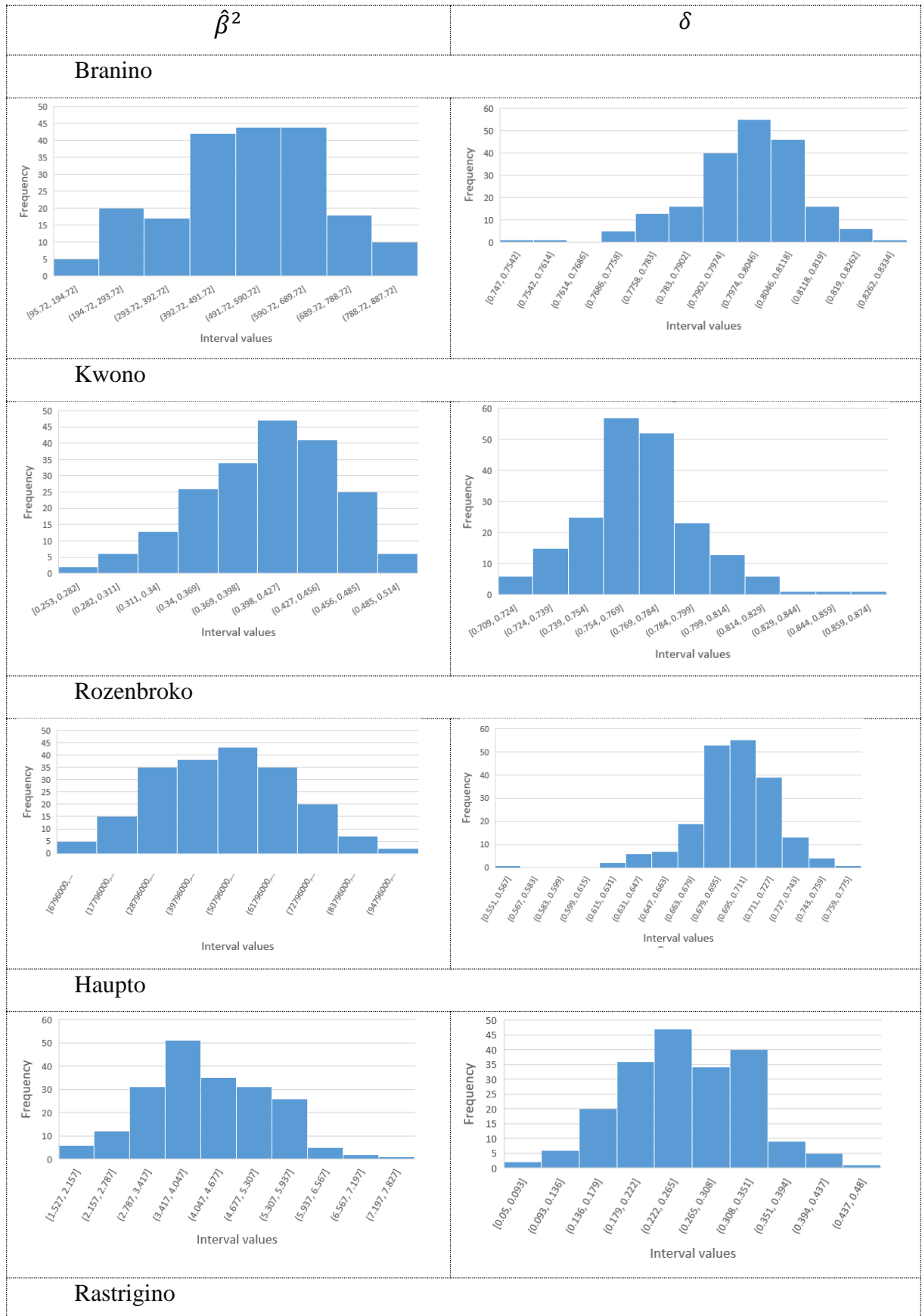
Prognozavimo problema – parinkti tokį laipsnį δ , kad gautume tiksliausią modelio reikšmę. Todėl apskaičiuota optimali δ reikšmė, atsižvelgiant į (2.15).

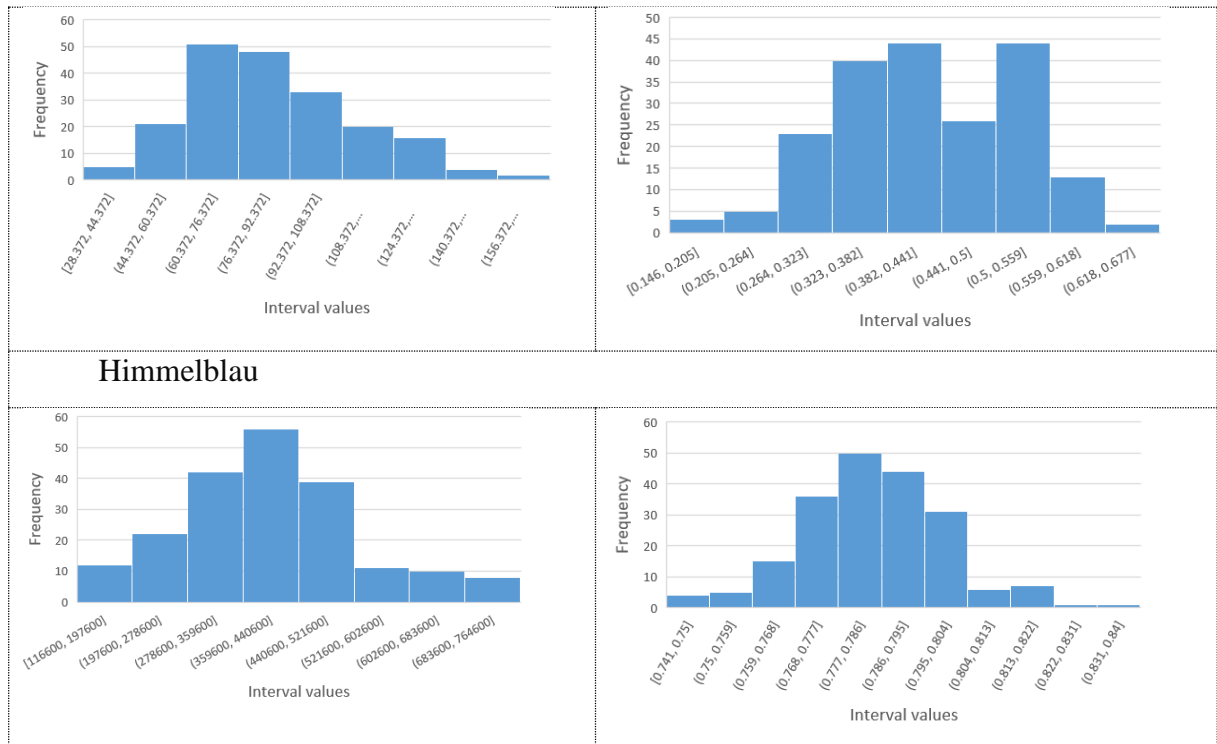
Histogramos, vaizduojančios parametro δ vidurkį, pateiktos 2.2 pav. ($K=20$, $N=200$).

Dispersijos parametro $\hat{\beta}^2$ ir laipsnio parametro δ skaičiavimo rezultatai.

2.2 lentelė. Dispersijos parametro $\hat{\beta}^2$ ir laipsnio parametro δ skaičiavimo rezultatai

Testinė funkcija	Parametro $\hat{\beta}^2$ Vidurkis	Parametro $\hat{\beta}^2$ standartinis nuokrypis	Parametro δ vidurkis	Parametro δ standartinis nuokrypis
Branino	518,398	165,63	0,800	0,012
Kwono	0,406	0,049	0,769	0,025
Rozenbroko	$5,249 \cdot 10^7$	$1,859 \cdot 10^7$	0,697	0,026
Haupto	4,254	1,113	0,24	0,074
Rastrigino	87,856	26,691	0,427	0,098
Himmelblau	$4,003 \cdot 10^5$	$1,357 \cdot 10^5$	0,785	0,015





2.2 pav. Dispersijos ir optimalaus laipsnio parametro skaičiavimo rezultatą atspindinčios histogramos (*Frequency* – dažnis, *Interval values* – intervalų reikšmės)

Ekstrapoliacijos tikslumui lyginti buvo naudojamas paklaidos kriterijus (Kwon (2015)), apibrėžtas taip:

$$TE(z(x, y)) = \sum \sum \sqrt{(z(x, y) - Z_{TEST FUNCTION}(x, y))^2}, \quad (2.41)$$

$$TE(z_{Shepard}(x, y)) = \sum \sum \sqrt{(z_{Shepard}(x, y) - Z_{TEST FUNCTION}(x, y))^2}. \quad (2.42)$$

Skaičiavimo rezultatai pateikti 2.3 lentelėje, kai $K=20$, $N=200$.

2.3 lentelė. Skaičiavimo paklaidų rezultatai.

Testinė funkcija	$TE(z(x, y))$	$TE(z_{Shepard}(x, y))$
Branino	21,919	59,479
Kwono	0,123	0,877
Rozenbroko	8850	13310
Haupto	2,026	2,47
Rastrigino	12,432	13,425
Himmelblau	1061	2149

Gauso atsitiktinių laukų sąlyginis vidurkis naudojamas kaip efektyvus ekstrapoliatorius, o sąlyginė dispersija tinka išmatuoti ekstrapoliacijos paklaidą.

2.8. Paviršinių nuotekų filtrų surogatinis modeliavimas

Paviršinių nuotekų filtrai yra viena iš priemonių sumažinti išmetamų į aplinką teršalų kiekį. Disertacijoje nagrinėjamas filtravimo efektyvumas. Taikant kriginio metodą su atstumų matricomis su trupmeniniais laipsnių rodikliais, sukurtas metodas leidžia modeliuoti filtrų užpildų charakteristikas, kai parenkami skirtingi filtro užpildai per bandymus laboratorijoje.

Tarkime, $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)^T$ yra filtrų užpildų vektorius, kur x_1 – kvarcinis smėlis (QS), x_2 – akytasis betonas (SHAAC), x_3 – akmens vata (SW), x_4 – bioanglis (BC). Pradinius filtro charakteristikų matavimo rezultatus žymėsime: Y_i^j , $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq K$, kur $K = 4$ – bandymų skaičius, m – filtrų charakteristikų skaičius.

Tarkime, kad šios filtro charakteristikos apibūdina medžiagų išvalymo efektyvumą. Paviršinių nuotekų pagrindiniams teršalams – suspenduotosioms medžiagoms (angl. *Suspended Solids* – SS), sunkiesiems metalams (cinkui (Zn), kadmiui (Cd), variui (Cu), švinui (Pb), biocheminio deguonies suvartojimui – BDS5 (angl. *Biochemical Oxygen Demand* – BOD5), bendrajai angliai (TC) ir azotui (TN) valyti suprojektuoti skirtingų užpildų filtrai.

Filtrų užpildai:

- 1 – Kvarcinis smėlis (100 %);
- 2 – Akytasis betonas (66,7 %) ir akmens vata (33,3 %);
- 3 – Akytasis betonas (33,3 %) ir bioanglis (66,7 %);
- 4 – Akytasis betonas (33,3 %), bioanglis (33,3 %) ir akmens vata (33,3 %).

Sudaryta bandymų matrica, kur filtrų užpildų proporcijos (%) yra:

$$X = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,667 & 0 & 0,333 \\ 0 & 0 & 0,333 & 0,667 \\ 0 & 0,333 & 0,333 & 0,333 \end{vmatrix}.$$

Filtravimo charakteristikų matavimo matrica, kur $Y = (Y^1, Y^2, Y^3, Y^4)^T$.

2.4 lentelė. Medžiagų išvalymo efektyvumas, naudojant filtrus su skirtingais užpildais

Išvalymo efektyvumas, %								
Filtras	<i>PB</i>	<i>CD</i>	<i>ZN</i>	<i>CU</i>	<i>TC</i>	<i>TN</i>	<i>SS</i>	<i>BOD5</i>
	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	Y^5	Y^6	Y^7	Y^8
1	78,0	55,1	94,7	58,5	27,3	41,1	97,2	42,1
2	73,7	22,2	57,2	15,2	38,3	15,6	94,1	43,4
3	75,0	43,9	77,1	20,5	50,7	17,3	94,1	58,9
4	77,3	47,3	81,1	28,8	43,2	19,9	93,4	60,4

Taikome kriginio metodą, kur atstumų matrica tarp matavimo taškų užrašoma:

$$A = \left[\sqrt{(x_{i,1} - x_{j,1})^2 + (x_{i,2} - x_{j,2})^2 + (x_{i,3} - x_{j,3})^2 + (x_{i,4} - x_{j,4})^2} \right]_{i,j=1}^K,$$

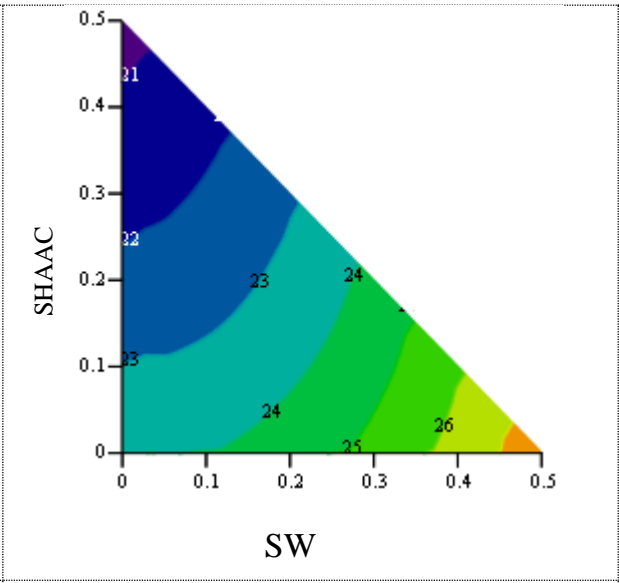
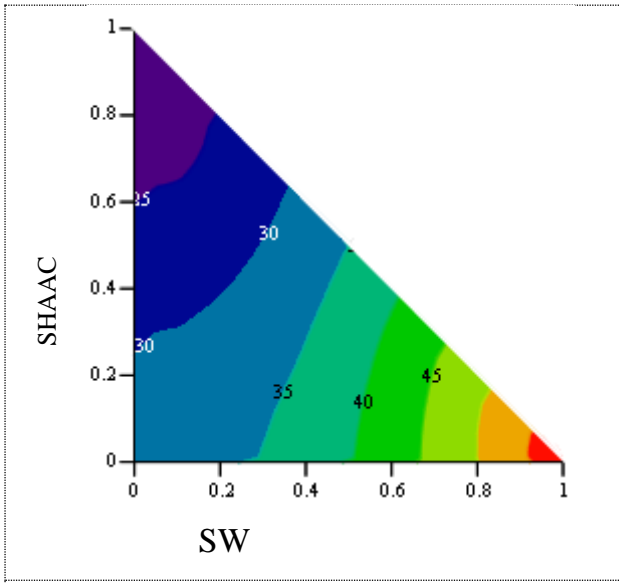
Taip pat pasirinkto ekstrapoliavimo taško vektorius $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ iki bandymo taškų užrašomas taip:

$$\tau_i(x) = \sqrt{(X_{i,1} - x_1)^2 + (X_{i,2} - x_2)^2 + (X_{i,3} - x_3)^2 + (X_{i,4} - x_4)^2}.$$

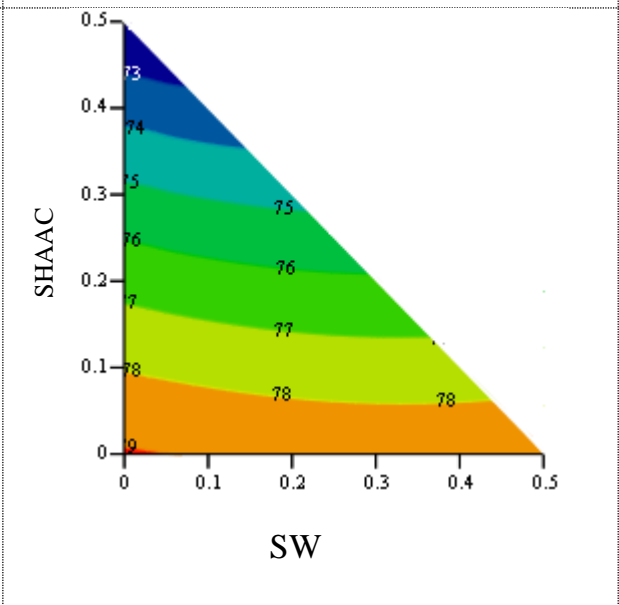
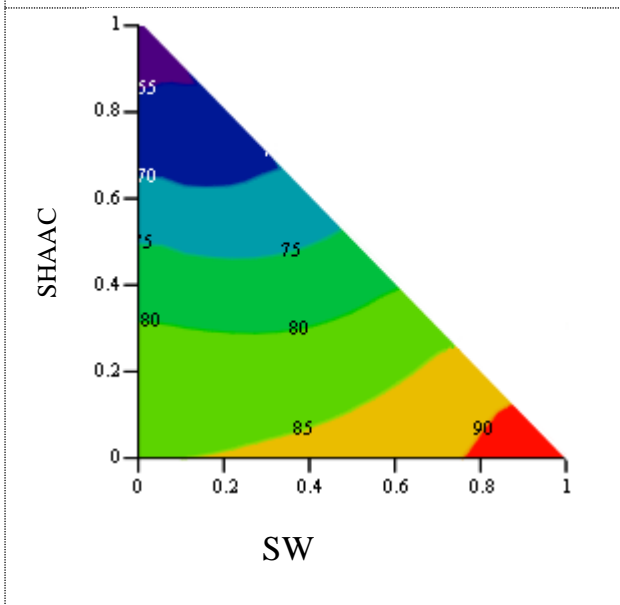
Pagal nagrinėjamą modelį (Pozniak (2017)) ekstrapoliuojama vertė paskirstoma paprastai su vidurkiu, apskaičiuojamu pagal formulę (2.26) ir dispersija (2.27) ir (2.28).

Išvalymo efektyvumo vizualizavimas (%), naudojant pasiūlytą kriginio metodą, pateiktas skaičiais 2.3 pav. Buvo tiriami du atvejai: kai filtras iki pusės užpildytas kvarciniu smėliu ($QS = 0,5$) ir be kvarcinio smėlio užpildo ($QS = 0$).

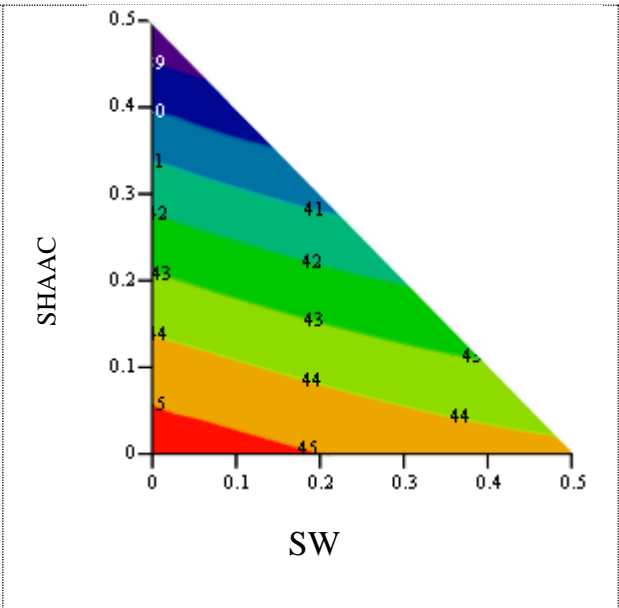
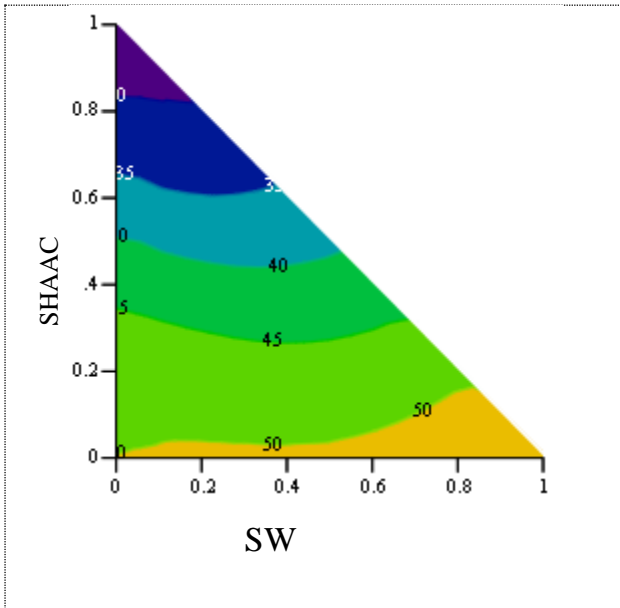
	<u>$QS = 0$</u>	<u>$QS = 0,5$</u>
<i>Varis (Cu)</i>		



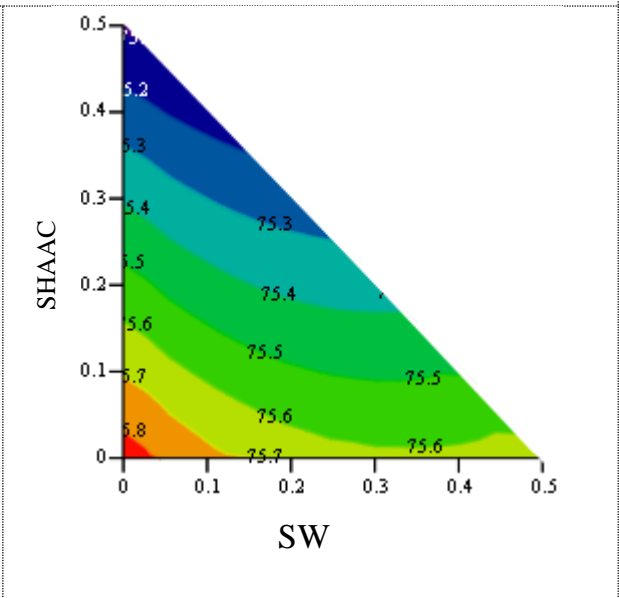
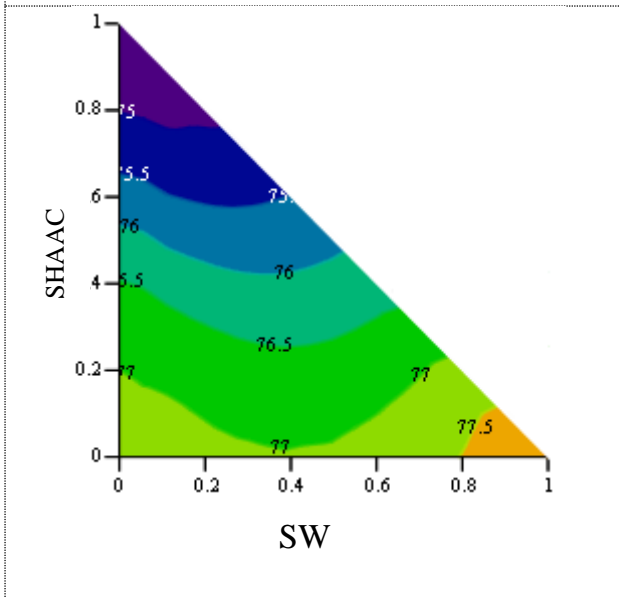
Cinkas (Zn)



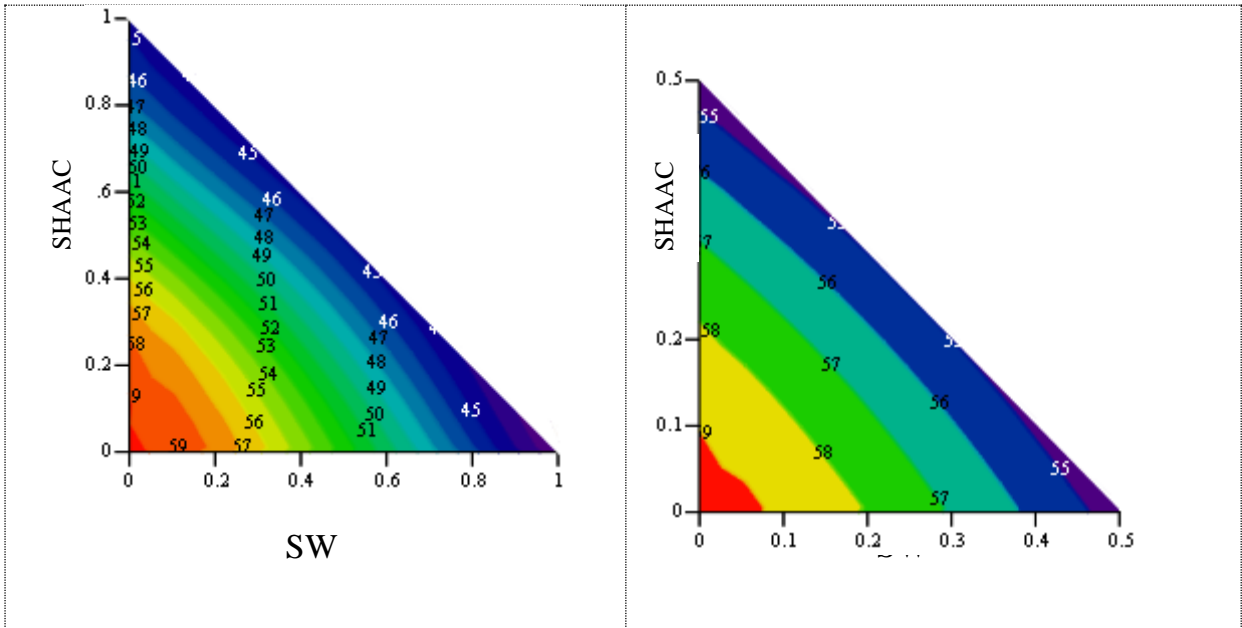
Kadmis (Cd)



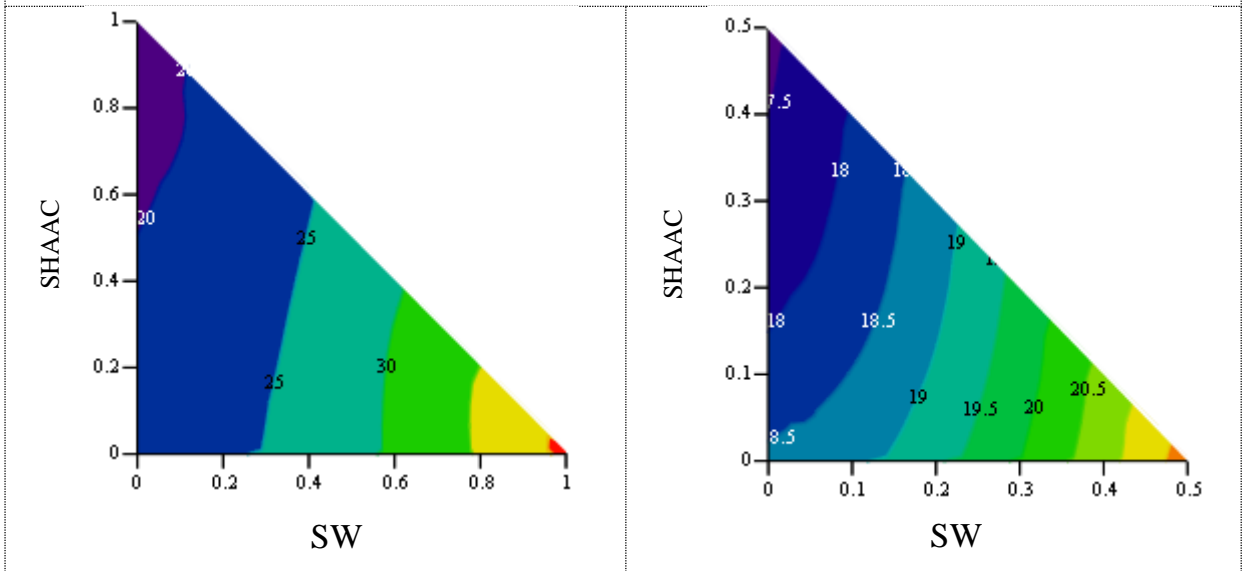
Švinas (Pb)



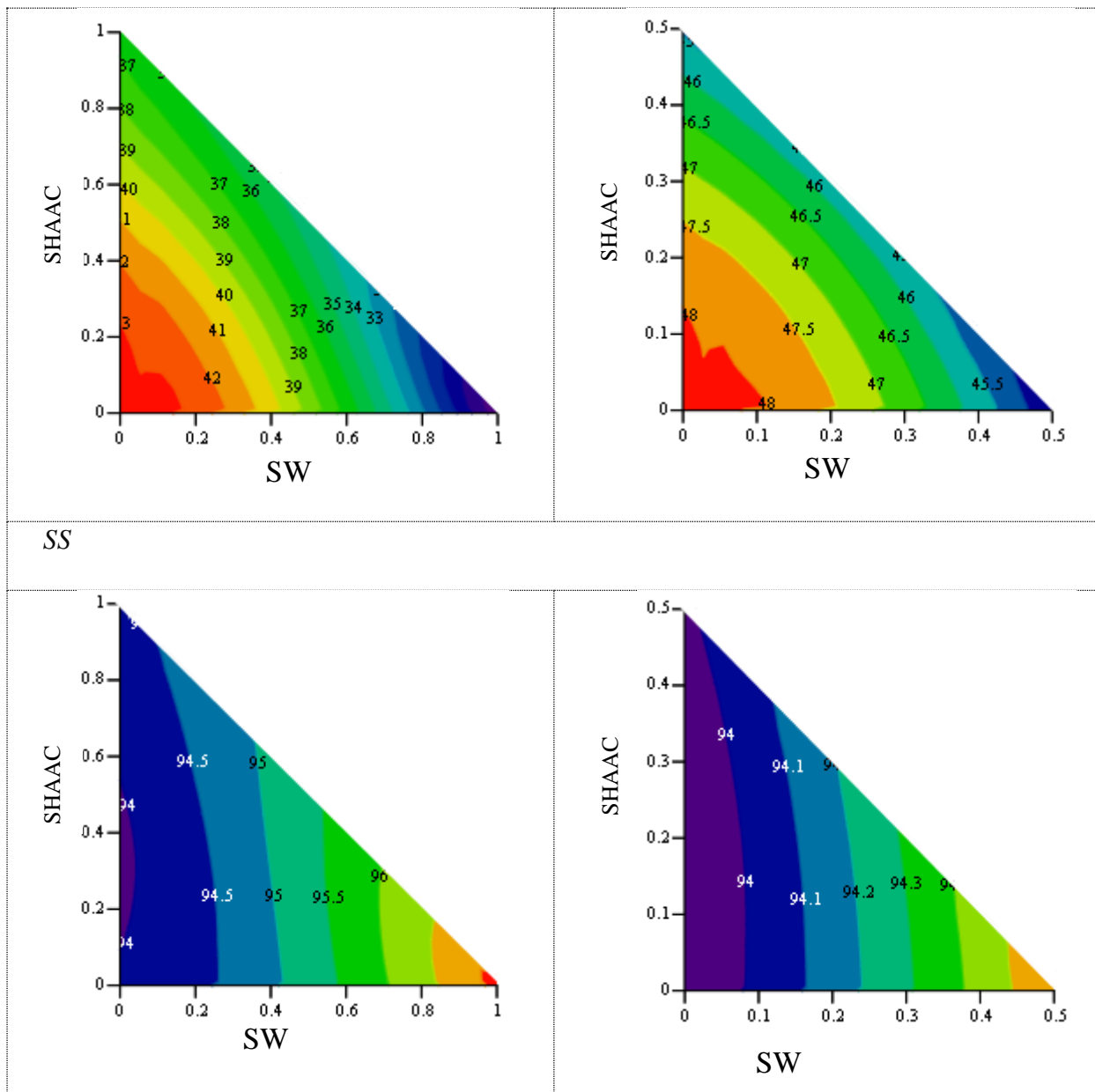
BOD₅



TN



TC



2.3 pav. *Cu, Pb, Zn, Cd, TN, TC, SS, BOD5* išvalymo efektyvumas (%), kai duotos tokios užpildų proporcijos ($BC=1-QS-SHAAC-SW$)

Sukurtas ekstrapoliatorius pritaikytas maksimizuoti charakteristikas, taikant Monte Karlo metodą (1000 bandymų).

2.5 lentelė. Maksimizavimo rezultatai

Filtrų užpildai	Krit.	<i>CU</i>	<i>ZN</i>	<i>CD</i>	<i>PB</i>	<i>TC</i>	<i>TN</i>	<i>SS</i>
		γ^1	γ^2	γ^3	γ^4	γ^5	γ^6	γ^7
Kvarcinis smėlis	x_1	0	0,03	0,06	0,03	0,45	0,03	0
Akytasis betonas	x_2	0	0,02	0,09	0,04	0,5	0,02	0,03

Akmens vata	x_3	0,05	0,03	0,03	0,02	0,04	0,02	0,03
Bioanglis	x_4	0,95	0,92	0,82	0,91	0,01	0,93	0,94
Ekstrapoliavimo rezultatas	%	55,95	92,48	51,88	77,73	48,01	39,18	96,93

2.9. Skyriaus išvados

1. Sukurtas ir ištirtas daugiamačių duomenų modelis atsitiktiniais Gauso laukais, kurių kovariacijų matrica aprašoma TEAM branduolio matrica.
2. Remiantis šiuo modeliu, sukurtas krigingo algoritmas, pritaikytas išsibarsčiusiems daugiamačiams duomenims ekstrapoliuoti.
3. Sukurtas modelis priklauso nuo kelių parametru, kurių įverčiai paprastai nustatomi didžiausio tikėtimumo metodu.
4. Kompiuterinio modeliavimo rezultatai parodė, kad sukurtas ekstrapoliavimo metodas yra pranašesnis už Šepardo ekstrapoliatorių.

3 skyrius. Daugiaekstremalinių uždavinių sprendimas

Šiame skyriuje nagrinėjamas daugiaekstremalinių funkcijų Bajeso optimizavimo metodas, kuriame kaip optimizuojamos funkcijos modelis yra pasirinktas atsitiktinis Gauso laukas su kovariacijų matrica, išreiškiamą per TEAM branduolio matricą.

3.1. Optimizavimo uždavinio formuluotė

Bajeso optimizavimo metodas realizuoja globalaus optimizavimo „juodosios dėžės“ strategiją, nereikalaujančią skaičiuoti išvestinių (Mockus (2013)). Kadangi tikslo funkcijos reikšmės optimizavimo taškuose iš anksto yra nežinomos, Bajeso strategija modeliuoja tų reikšmių seką kaip Gauso lauko realizaciją ir planuoja paiešką pagal sąlyginę informaciją apie funkcijos reikšmes ankstesniuose žingsniuose. Apskaičiavus naujas funkcijos reikšmes, ši informacija yra naudojama kito žingsnio taškui apskaičiuoti. Procesas stabdomas, jeigu išpildoma iš anksto nustatyta stabdymo sąlyga. Paprasčiausiu atveju optimizavimo žingsnių skaičius yra parenkamas iš anksto. Optimizavimo žingsnio efekt yvumui vertinti naudojami įvairūs kriterijai. Realizuojant Bajeso metodą reikia atsižvelgti į kompiuterio laiko ir atminties sąnaudas. Bajeso metodą tikslinga taikyti, jeigu tikslo funkcijos apskaičiavimas susijęs su didelėmis sąnaudomis.

Tegul optimizuojama funkcija $f(x)$, čia $x \in D \subset \mathbb{R}^d$. Daroma prielaida, kad $f(x)$ yra tolydi, o D – kompaktas. Konstruojant Bajeso optimizavimo metodą daroma prielaida, kad optimizuojama funkcija yra atsitiktinio lauko realizacija. Taigi sakykime, kad tikslo funkcija $f(x) = f(x, \omega)$ priklauso nuo atsitiktinio scenarijaus iš tam tikros tikimybinės erdvės: $\omega \in (\Omega, \Sigma, P)$.

Tegul sprendžiamas minimizavimo uždavinys:

$$f(x, \omega) \rightarrow \min_{x \in D},$$

čia $D \in \mathbb{R}^N$ yra leistinoji aibė.

Nagrinėkime iteracinį optimizavimo metodą, kur kiekvienoje iteracijoje yra parenkamas optimizavimo taškas ir apskaičiuojama jo tikslo funkcijos reikšmė. Tegul po k iteracijų yra žinoma optimizavimo taškų seka

$$X^k = (x^1, x^2, x^3, \dots, x^k), \quad (3.1)$$

kuriuose yra apskaičiuotos funkcijos reikšmės

$$Y^k = (y^1, y^2, y^3, \dots, y^k), \quad (3.2)$$

čia $y^k = f(x^k) = f(x^k, \omega)$, $x^k \in D$, yra atsitiktinio lauko realizacija taške x^k .

Pažymėkime:

$$X^k = (X^{k-1}, x^k), \quad (3.3)$$

$$Y^k = (Y^{k-1}, y^k). \quad (3.4)$$

Taigi kiekvienas optimizavimo taškas yra jau atliktų žingsnių rezultatų funkcija:

$$x^{k+1} = b_{k+1}(X^k, Y^k), \quad (3.5)$$

o optimizuojamos funkcijos reikšmė yra atsitiktinio lauko realizacija:

$$y^{k+1} = f(x^{k+1}, \omega). \quad (3.6)$$

Tegul atsitiktinio lauko realizacijų seka, kai žinomi k taškų, yra aprašoma tankio funkcija

$$p_{X^k}(Y^k). \quad (3.7)$$

Kartais tai gali būti daugiamatis Gauso tankis su parametrais (2.1) ir (2.2).

Tegul reikia atlikti K optimizavimo žingsnių. Funkcijų seka $b = (b_1, b_2(X^1, Y^1), \dots, b_K(X^{K-1}, Y^{K-1}))$, nustatanti kiekvieno žingsnio priklausomybę (3.3) nuo jau atliktų žingsnių rezultatų, yra vadinama optimizavimo metodu.

Optimizavimo proceso kokybei vertinti reikia pasirinkti naudingumo funkciją $\Psi(f, b)$. Dažniausiai ši funkcija priklauso nuo optimizavimo žingsnių rezultatų:

$$\Psi(f, b) = \Psi(Y^K; X^K) = \Psi(Y^{k-1}, y^k; X^{k-1}, x^k). \quad (3.8)$$

Tegul naudingumo funkcija tenkina šias sąlygas:

A. Egzistuoja tikėtina reikšmė: $|E\Psi(f, b)| < \infty$.

B. Funkcija $\Psi(Y^{k-1}, y^k; X^{k-1}, x^k)$ pagal kintamuosius y^k yra iškila:

$$\Psi(Y^{K-1}, y_1^k \cdot \alpha + y_2^k \cdot (1 - \alpha); X^{k-1}, x^k) \geq \alpha \cdot \Psi(Y^{K-1}, y_1^k; X^{k-1}, x^k) + (1 - \alpha) \cdot \Psi(Y^{K-1}, y_2^k; X^{k-1}, x^k), \forall \alpha, 0 \leq \alpha \leq 1.$$

C. Funkcija $\Psi(f, b)$ tenkina Lipšico sąlygą:

$$|\Psi(Y^{K-1}, y_1^k; X^{k-1}, x^k) - \Psi(Y^{K-1}, y_2^k; X^{k-1}, x^k)| \leq L \cdot \|y_1^k - y_2^k\|.$$

D. Funkcija $\Psi(f, b)$ yra monotoniškai didėjanti:

$$\Psi(Y^{K-1}, y_1^k; X^{k-1}, x^k) \leq \Psi(Y^{K-1}, y_2^k; X^{k-1}, x^k), y_1^k \leq y_2^k.$$

Minėtas sąlygas tenkina minimizavimo proceso naudingumo funkcijos, dažnai taikomos optimizavimo teorijoje:

$$\Psi(f, b) = \min(y^1, y^2, \dots, y^K), \quad (3.9)$$

$$\Psi(f, b) = \min(0, \min(y^1, y^2, \dots, y^{K-1}) - y^K), \quad (3.10)$$

$$\Psi(f, b) = -(-\min(0, \min(y^1, y^2, \dots, y^{K-1}) - y^K))^p, p > 0. \quad (3.11)$$

Bajeso optimizavimo metodas turi būti sudarytas taip, kad būtų minimizuojama tikėtina naudingumo funkcijos reikšmė paskutiniosios iteracijos taške x^K , priklausomai nuo ankstesnių žingsnių rezultatų:

$$E\Psi(f, b) \rightarrow \min_{x^K}. \quad (3.12)$$

3.2. Rekursyvinė lygčių sistema

Irodysime, kad Bajeso metodas tenkina rekursyvinių lygčių sistemą.

Pažymėkime sąlyginio tikimybinio tankio funkcijas:

$$p_{X^k}(y^k | Y^{k-1}) = \frac{p_{X^k}(Y^k)}{p_{X^{k-1}}(Y^{k-1})} = \frac{p_{X^k}(Y^{k-1}, y^k)}{p_{X^{k-1}}(Y^{k-1})}, k = 2, 3, \dots, K. \quad (3.13)$$

Pažymėkime

$$U_K(Y^K; X^K) = \Psi(Y^{K-1}, y^K; X^{K-1}, x^K), \quad (3.14)$$

$$U_k(Y^k; X^k, x^{k+1}) = E(U_{k+1}(Y^k, y^{k+1}; X^k, x^{k+1}) | Y^k) = \quad (3.15)$$

$$= \int_{y^{k+1}} U_{k+1}(Y^k, y^{k+1}; X^k, x^{k+1}) \cdot p_{X^{k-1}, x^k}(y^{k+1} | Y^k) dy^{k+1},$$

čia $U_k(Y^k; X^k, x^{k+1})$ yra tikėtina funkcijos $U_{k+1}(Y^k, y^{k+1}; X^k, x^{k+1})$ reikšmė taške x^{k+1} su sąlyga, kad ankstesnių k žingsnių rezultatai buvo Y^k , $k = 1, 2, \dots, K - 1$.

3.2.1 teorema. Tegul naudingumo funkcija tenkina sąlygas A–D. Bajeso optimizavimo metodas tenkina rekursyviųjų lygčių sistemą:

$$U_{K-1}(Y^{K-1}) = \min_{x^K \in D} E_{x^K}(\Psi(Y^{K-1}, y^K) | Y^{K-1}), \quad (3.16)$$

$$U_k(Y^k) = \min_{x^{k+1} \in D} E_{x^{k+1}}(U_{k+1}(Y^k, y^{k+1}) | Y^k), k = 1, 2, \dots, K - 1. \quad (3.17)$$

Irodymas. Pagal kartotinių sąlyginių skirstinių savybės galima gauti, kad

$$\begin{aligned} E\Psi(f, b) &= E\Psi(Y^K) = & (3.18) \\ &= \int_{Y^K \in \mathfrak{R}^K} \Psi(Y^K) \cdot p_{X^K}(Y^K) dY^K = \\ &= \int_{Y^{K-1} \in \mathfrak{R}^{K-1}} \left(\int_{y^K \in \mathfrak{R}} \Psi(Y^{K-1}, y^K) \cdot p_{X^K}(y^K | Y^{K-1}) dy^K \right) \\ &\quad \cdot p_{X^{K-1}}(Y^{K-1}) dY^{K-1} = \\ &= \int_{Y^{K-1} \in \mathfrak{R}^{K-1}} E_{x^K}(\Psi(Y^{K-1}, y^K) | Y^{K-1}) \cdot p_{X^{K-1}}(Y^{K-1}) dY^{K-1} = \\ &\quad \dots \\ &= E_{x^1}(E_{x^2}(\dots E_{x^K}(\Psi(Y^{K-1}, y^K) | Y^{K-1}) | \dots | Y^2) | y^1). \end{aligned}$$

Gauname, kad optimalus metodas paskutiniame žingsnyje turi minimizuoti šitokią integralą:

$$x_{opt}^K = \arg \min_{x^K \in D} \int_{y^K \in \mathfrak{R}} \Psi(Y^{K-1}, y^K) \cdot p_{X^K}(y^K | Y^{K-1}) dy^K. \quad (3.19)$$

Panašiai gauname, kad $k + 1$ -ojo žingsnio taškas turi tenkinti sąlygą:

$$x_{opt}^{k+1} = \arg \min_{x^{k+1} \in D} \int_{y^{k+1}} U_{k+1}(Y^k, y^{k+1}) \cdot p_{X^k, x^{k+1}}(y^{k+1} | Y^k) dy^{k+1}. \quad (3.20)$$

čia $k = 0, 1, \dots, K - 2$. Teoremos teiginys seka pagal indukciją. ■

3.2.1 išvada. Funkcijos $U_k(Y^k)$, $k = 1, \dots, K$ tenkina sąlygas A ir D.

Funkcijų $U_k(Y^k)$ aprėžtumas seka iš sąlygos A dėl funkcijos Ψ ir išraiškų (3.18). Funkcijų monotoninis mažėjimas ir iškilumas seka iš funkcijos Ψ monotoniškumo ir iškilumo.

Dažniausiai šios lygčių sistemos sprendimas yra labai sudėtingas uždavinys, todėl panagrinėsime supaprastintą apytikrį šios sistemos sprendimą. Tegul nagrinėjama naudingumo funkcija (3.9).

Todėl pritaikysime aproksimaciją:

$$\tilde{U}_k(X^k, Y^k) = \min(y^k, c_k). \quad (3.21)$$

Reikia atkreipti dėmesį, kad ši aproksimacija tenkina sąlygas A–D.

Tokiu atveju Bajeso metodo sudarymas atskiriamas į K nepriklausomų optimizavimo uždavinių:

$$x_{opt}^{k+1} = \arg_{x^{k+1}} \int_{y^{k+1} \in \mathfrak{R}} \min(Y^k, y^{k+1}, c_{k+1}) p(y^{k+1} | Y^k, X^k) dy^{k+1}. \quad (3.22)$$

3.3. Vienažingsniai Bajeso optimizavimo metodai

Panagrinėsime du vienažingsnio Bajeso optimizavimo metodo variantus. Šio metodo pirmo varianto kiekviename žingsnyje optimizavimo taškas yra parenkamas, sprendžiant uždavinį:

$$x^{k+1} = \arg \min_{x^{k+1} \in D} E_{x^{k+1}}(\min(y^{k+1} - \min(Y^k), 0) | Y^k), k = 1, 2, \dots, K - \quad (3.23)$$

1.

Pritaikykime optimizuojamos funkcijos reikšmėms modeliuoti atsitiktinį Gauso lauką, kurio parametrai aprašomi TEAM. Gauso lauko sąlyginio tikimybinio tankio taške x^{k+1} , funkcija yra:

$$p_{X^{k+1}}(y^{k+1} | Y^k) = \frac{e^{-\frac{(y^{k+1} - y_k(x^{k+1}))^2}{2 \cdot \hat{\beta}_k^2 \cdot \beta_k^2(x^{k+1})}}}{\sqrt{2\pi \cdot \hat{\beta}_k \cdot \beta_k(x^{k+1})}}, \quad (3.24)$$

čia sąlyginis vidurkis ir sąlyginė dispersija apskaičiuojami su sąlyga, kad taškuose

(3.1) yra apskaičiuotas funkcijos reikšmių vektorius (3.2):

$$y_k(x^{k+1}) = Y_k^T \cdot A_k^{-1} \cdot \left(a^{k+1} + E_k \cdot \frac{(1 - E_k^T \cdot A_k^{-1} \cdot a^{k+1})}{E_k^T \cdot A_k^{-1} \cdot E_k} \right) \quad (3.25)$$

$$\beta_k^2(x^{k+1}) = a_{k+1}^T \cdot A_k^{-1} \cdot a^{k+1} - \frac{(1 - E_k^T \cdot A_k^{-1} \cdot a^{k+1})^2}{E_k^T \cdot A_k^{-1} \cdot E_k} \quad (3.26)$$

čia $a^{k+1} = (|x^1 - x^{k+1}|^\delta, |x^2 - x^{k+1}|^\delta, \dots, |x^k - x^{k+1}|^\delta)^T$, A_k yra vektorių X^k TEAM.

Pažymėkime

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int_{-\infty}^x e^{-\frac{z^2}{2}} dz. \quad (3.27)$$

Po tam tikrų pertvarkymų galima įsitikinti, kad

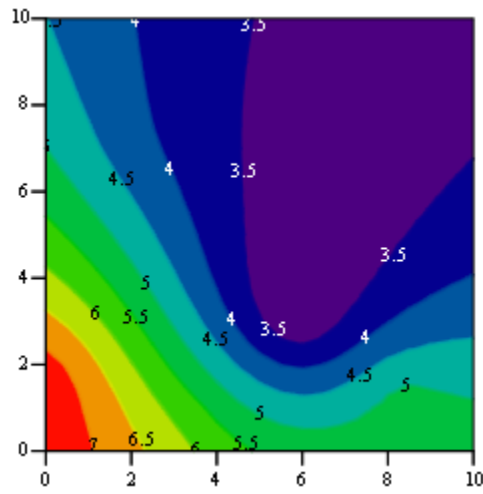
$$\begin{aligned} E_{x^{k+1}}(\min(y^{k+1} - \min(Y^k), 0) | Y^k) & \quad (3.28) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \min(z - Y^k, 0) \cdot \frac{e^{-\frac{(z-y(x^{k+1}))^2}{2 \cdot \hat{\beta}^2 \cdot \beta^2(x^{k+1})}}}{\sqrt{2\pi} \cdot \hat{\beta} \cdot \beta(x^{k+1})} dz = \\ &= \int_{-\infty}^{Y^k} (z - Y^k) \cdot \frac{e^{-\frac{(z-y(x^{k+1}))^2}{2 \cdot \hat{\beta}^2 \cdot \beta^2(x^{k+1})}}}{\sqrt{2\pi} \cdot \hat{\beta} \cdot \beta(x^{k+1})} dz = R(x^{k+1}). \end{aligned}$$

Pastarąją išraišką galima pertvarkyti į šį pavidalą:

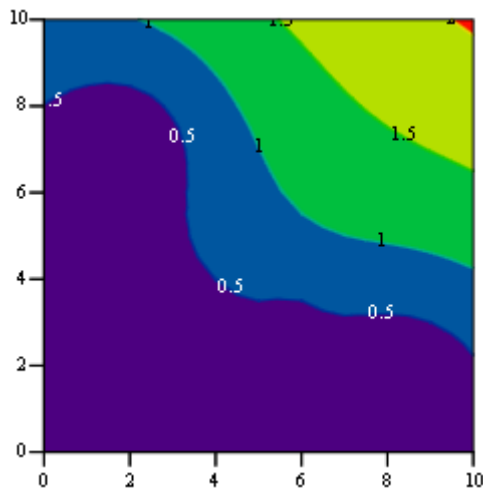
$$\begin{aligned} R(x) &= \left(y(x) - \frac{Y^K}{\min}\right) \cdot \int_{-\infty}^{\frac{Y^K - y(x)}{\hat{\beta} \cdot \beta(x)}} \frac{e^{-\frac{z^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dz - \hat{\beta} \cdot \beta(x) \cdot \frac{e^{-\frac{\left(\frac{Y^K - y(x)}{\min}\right)^2}{2 \cdot \hat{\beta}^2 \cdot \beta^2(x)}}}{\sqrt{2\pi}} = \quad (3.29) \\ &= \left(y(x) - \frac{Y^K}{\min}\right) \cdot \Phi\left(\frac{Y^K - y(x)}{\hat{\beta} \cdot \beta(x)}\right) - \hat{\beta} \cdot \beta(x) \cdot \frac{e^{-\frac{\left(\frac{Y^K - y(x)}{\min}\right)^2}{2 \cdot \hat{\beta}^2 \cdot \beta^2(x)}}}{\sqrt{2\pi}} = \\ &= - \int_{-\infty}^{\frac{Y^K - y(x)}{\hat{\beta} \cdot \beta(x)}} \frac{e^{-\frac{z^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dz dt = - \int_{-\infty}^{\frac{Y^K - y(x)}{\hat{\beta} \cdot \beta(x)}} \Phi(z) dt. \quad (3.30) \end{aligned}$$

3.1–3.3 pav. yra pavaizduoti: sąlyginio vidurkio, sąlyginės dispersijos ir tikėtinės naudingumo funkcijos paviršiai, kai $K = 5$, testinė funkcija

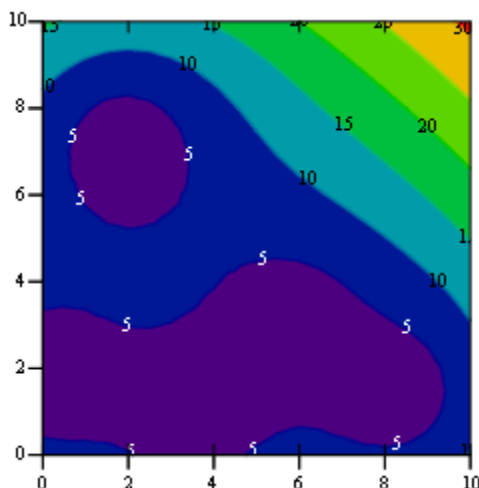
$$G(x, y) = \sqrt{(x - 6)^2 + (y - 6)^2}, 0 \leq x, y \leq 10. \quad (3.31)$$



3.1 pav. Sąlyginis vidurkis (ekstrapoliatorius)



3.2 pav. Dispersija



3.3 pav. Tikėtinos naudingumo funkcijos reikšmės

Pagal lygčių (3.18) aproksimaciją (3.21) galima sukonstruoti dar vieną vienažingsnį Bajeso optimizavimo metodą.

Teiginys. Konstantos c_k aproksimacijoje (3.21) tenkina sąlygas (Mockus (2013)):

$$c_1 = 0, c_{k+1} = c_k \cdot (1 - \Phi(c_k)) - \frac{e^{-\frac{c_k^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}, k = 0, 1, \dots \quad (3.32)$$

Pastebėsime, kad $\lim_{k \rightarrow \infty} c_k \rightarrow -\infty$, $\lim_{k \rightarrow \infty} c_{k+1} - c_k \rightarrow 0$.

Tad galima sukonstruoti tokį vienažingsnį Bajeso optimizavimo metodą:

$$x^{k+1} = \arg \min_{x^{k+1} \in D} E_{x^{k+1}}(\min(y^{k+1} - \min(Y^k), c_k) | Y^k), k = 1, 2, \dots, K - 1. \quad (3.33)$$

Atitinkamai gausime:

$$R(x) = -\hat{\beta} \cdot \beta(x) \cdot \left(\max\left(\frac{y(x) - Y_{\min}^K}{\hat{\beta} \cdot \beta(x)}, -c_k\right) \cdot \int_{-\infty}^{\min\left(\frac{Y^K - y(x)}{\hat{\beta} \cdot \beta(x)}, c_k\right)} \frac{e^{-\frac{z^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dz + \frac{e^{-\frac{\left(\frac{Y^K - y(x)}{\hat{\beta} \cdot \beta(x)}\right)^2}}{\sqrt{2\pi}} \right). \quad (3.34)$$

3.4. Bajeso optimizavimo algoritmas

Taikant Bajeso optimizavimo algoritmą daugiausia skaičiavimo laiko yra sueikvojama TEAM atvirkštinei matricai rasti. Dažniausiai šios matricos

apskaičiavimas reikalauja kubinės eilės operacijų skaičiaus priklausomai nuo matricos dydžio.

Apskaičiuojant atsitiktinio lauko sąlyginius vidurkį ir dispersiją galima pritaikyti rekurentines TEAM apvertimo formules:

$$\begin{bmatrix} A & a \\ a^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} - \frac{A^{-1} \cdot a \cdot a^T \cdot A^{-1}}{a^T \cdot A^{-1} \cdot a} & \frac{A^{-1} \cdot a}{a^T \cdot A^{-1} \cdot a} \\ \frac{a^T \cdot A^{-1}}{a^T \cdot A^{-1} \cdot a} & -\frac{1}{a^T \cdot A^{-1} \cdot a} \end{bmatrix}. \quad (3.35)$$

Šio algoritmo sudėtingumas yra kvadratinis ir todėl jo taikymas leidžia efektyviau realizuoti Bajeso algoritmą. Nuostolių funkcijoms (3.29), (3.30) ir (3.34) optimizuoti galima pritaikyti gradientinius daugkartinio nusileidimo metodus (Pardalos (1987) pagal pateikiamas žemiau šių funkcijų diferencijavimo išraiškas. Pertvarkę gauname, kad:

$$\Lambda(x) \equiv \frac{\partial R(x)}{\partial x} = \frac{\partial y(x)}{\partial x} - \frac{\partial \beta^2(x)}{\partial x} \cdot \frac{\hat{\beta}}{\beta(x)} \cdot \frac{e^{-\frac{(y^k - y(x))^2}{2 \cdot \hat{\beta}^2 \cdot \beta^2(x)}}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (3.36)$$

$$\text{čia } \frac{\partial \beta^2(x)}{\partial x} = \frac{\partial a}{\partial x} \cdot A^{-1} \cdot \left(a^{k+1} + E_k \cdot \frac{(1 - E_k^T \cdot A_k^{-1} \cdot a^{k+1})}{E_k^T \cdot A_k^{-1} \cdot E_k} \right),$$

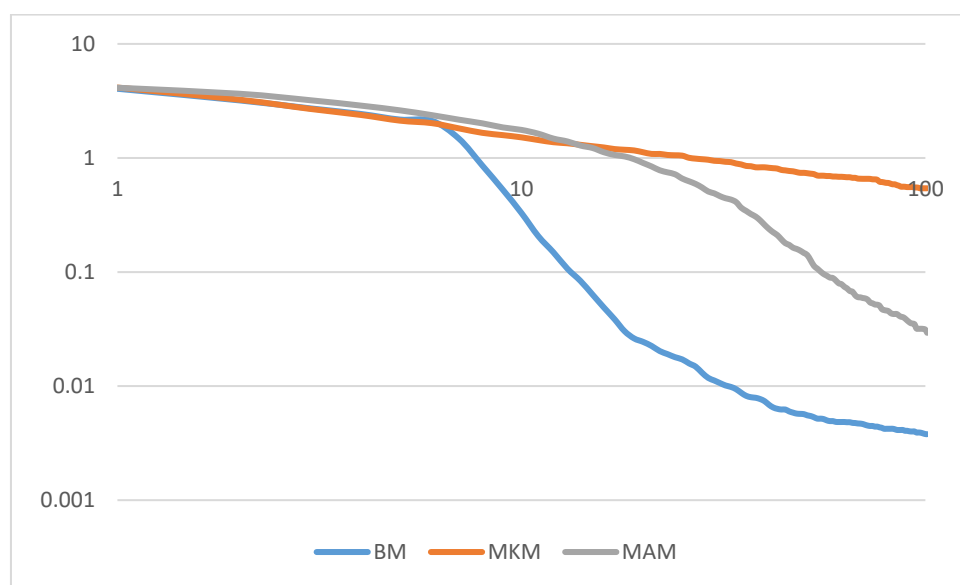
$$\frac{\partial a}{\partial x_{i,s}} = \frac{2\delta \cdot (x_s^i - x_s^{k+1})}{|x^i - x^{k+1}|^{\delta-1}}, \quad 1 \leq i \leq k, \quad 1 \leq s \leq d.$$

Taigi galima sudaryti tokį Bajeso optimizavimo algoritmą:

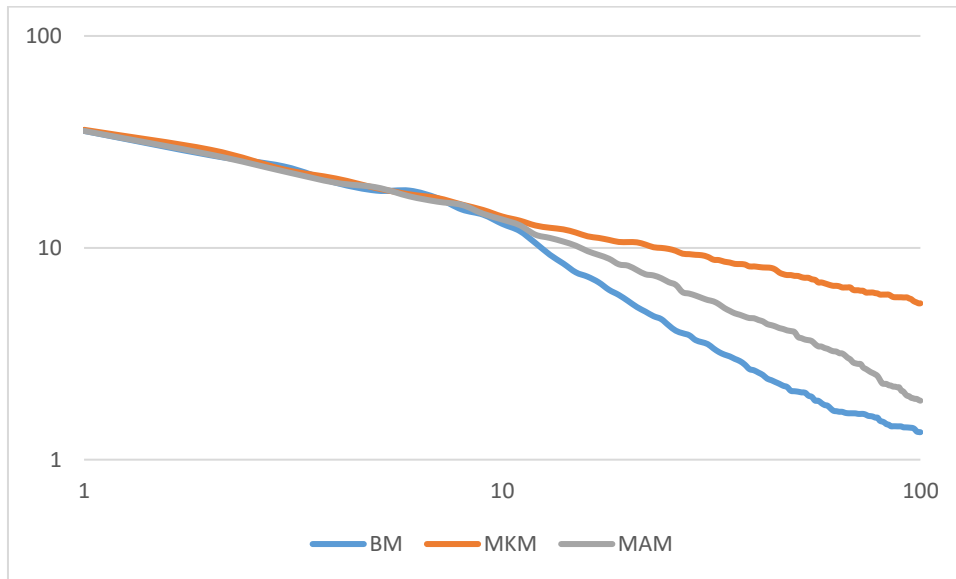
1. Pradinių taškų parinkimas.
2. Pradinių taškų atvirkštinės TEAM apskaičiavimas.
3. AGL dispersijos apskaičiavimas.
4. Tikėtino naudingumo funkcijos artinio radimas Monte Karlo metodu.
5. Tikėtino naudingumo funkcijos optimizavimas lokalaus nusileidimo metodu pagal 4 žingsnyje rastą artinį.
6. TEAM atvirkštinis perskaičiavimas taikant formules (1.7).
7. Jei tenkinama stabdymo sąlyga, optimizavimas Bajeso metodu yra stabdomas, priešingu atveju kartojami žingsniai 4–7.

3.5. Kompiuterinio modeliavimo rezultatai

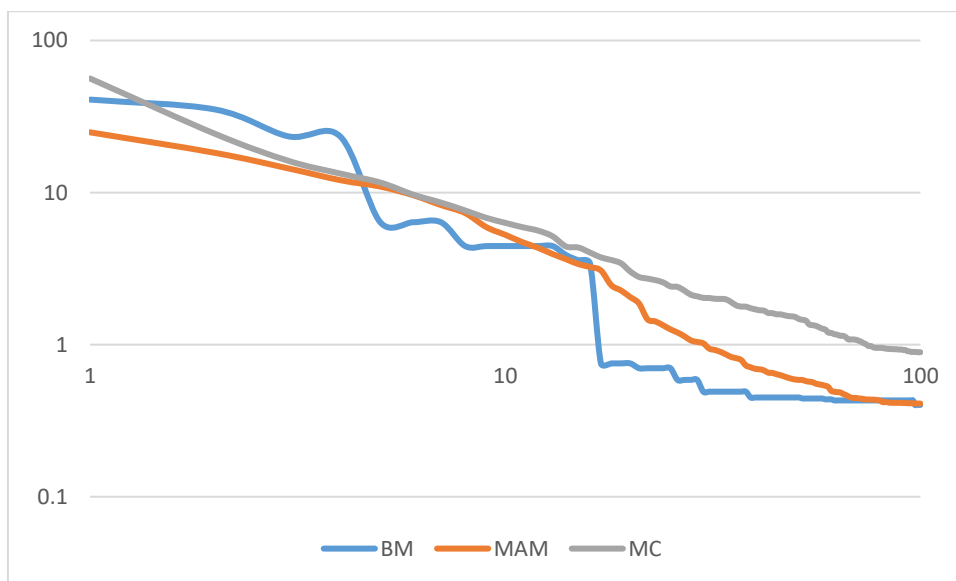
Sukurtų Bajeso algoritmų efektyvumas buvo tiriamas kompiuterinio modeliavimo būdu Monte Karlo metodu. Buvo iširtos testinė funkcija 1, Branino ir Rastrigino funkcijos. 3.4–3.6 pav. pateiktos testinių funkcijų optimizavimo Bajeso metodu (BM) suvidurkintos konvergavimo kreivės. Palyginti pateiktos konvergavimo kreivės, gautos paprastuoju Monte Karlo metodu (MKM) ir Modeliuojamo atkaitinimo (angl. *Simulated Annealing*) metodu (MAM). Buvo atlikti kompiuteriniai eksperimentai, taikant sudarytą Bajeso optimizavimo metodą kelioms testinėms funkcijoms. Paveiksluose pateikti sukurto metodo efektyvumo lyginimai su paprasta Monte Karlo paieškos ir Modeliuojamojo atkaitinimo metodo efektyvumu.



3.4 pav. Testinės funkcijos (3.31) optimizavimo BM, MK ir MAM suvidurkintos konvergavimo kreivės



3.5 pav. Rastrigino testinės funkcijos (2.30) optimizavimo BM, MK ir MAM suvidurkintos konvergavimo kreivės



3.6 pav. Branino testinės funkcijos (2.28) optimizavimo BM, MK ir MAM suvidurkintos konvergavimo kreivės

Kompiuterinio modeliavimo rezultatai rodo, kad Bajeso metodas yra efektyvesnis už žinomus daugiaekstremalinių uždavinių sprendimo metodus.

3.6. Skyriaus išvados

- 1) Šiame skyriuje sudarytas Bajeso daugiaekstremalinių uždavinių sprendimo metodas, taikantis AGL modelį.
- 2) Parodyta, kad šis metodas tenkina rekursyviųjų lygčių sistemą.

- 3) Pasiūlytas supaprastintas rekursyviųjų lygčių sprendimo metodas, pritaikytas Bajeso optimizavimo metodui sudaryti.
- 4) Sudarytas vienažingsnis Bajeso optimizavimo metodas.
- 5) Sukurti metodai palyginti su kitais žinomais globalaus optimizavimo metodais kompiuterinio modeliavimo būdu.

4 skyrius. Ekstremalinių eksperimentų serijų planavimo metodas

Daugelis inžinerinių planavimo uždavinių yra susiję su eksperimentais, kuriuose konstruojamos tikslo funkcijos, priklausančios nuo įvairių kintamųjų. Panagrinėsime Bajeso eksperimentų planavimo metodą, kurio teorinį tikimybinį pagrindą galima pritaikyti eksperimentų planavimo strategijoms sudaryti. Metodas pagrįstas eksperimento metu gautų stebėjimų / duomenų naudojimu. Tai leidžia įtraukti į modelį iš anksto žinomą informaciją apie parametrus, kuriuos reikia nustatyti ir įvertinti stebėjimų neapibrėžtumus.

Bajeso eksperimentų planavimo metodas leidžia optimaliai priimti sprendimus, esant neapibrėžtumui. Eksperimentų planavimo tikslo funkcija yra tikėtinas eksperimento naudingumas, kurį siekiama padidinti kiek įmanoma (Forrester (2009), Kwon (2015)). Naudingumas dažniausiai apibrėžiamas per eksperimento naudingumo funkciją (žr. 4.3 skyrelį), analogišką taikomai daugiaekstremalinių uždavinių sprendimo Bajeso metoduose (3 skyrius). Ši funkcija taip pat gali būti parenkama, atsižvelgiant ir į eksperimento vykdymo finansines išlaidas.

Bajeso eksperimentų planavimo metodai gali būti interpretuojami surogatinio modeliavimo, leidžiančio nagrinėti procesus, kurie gali būti stebimi tik iš dalies, požiūriu. Tad nestebima proceso dalis yra modeliuojama surogatiniu modeliu, sukurtu pagal proceso stebėjimo rezultatus. Surogatinio modeliavimo pagrindu optimizavimu pradinis surogatas yra sukonstruotas naudojant tam tikrą turimą fizikinių arba kompiuterinių eksperimentų kieki. Paskesni eksperimentai atliekami pritaikant surogatinius modelius jiems prognozuoti. Krigingas yra dažnai taikomas surogatinio modeliavimo metodas.

Paprastai eksperimento planavimo procesas vyksta taip:

1. atrenkami pradiniai duomenys (atliekant eksperimentus ir / ar simuliacijas);
2. sukuriamas surogatinis modelis;
3. parengiamas eksperimento planas, taikant surogatinį modelį tikėtinau eksperimento naudingumo funkcijai optimizuoti;
4. atliekama suplanuota serija ir pradiniai duomenys papildomi atliktos serijos rezultatais;
5. kartojami 2–4 žingsniai, kol baigiasi ištekliai, skirti eksperimentams, arba pasiekiami rezultatai, kuriuos galima laikyti optimaliais.

Atsižvelgiant į naudojamo surogato tipą ir problemos sudėtingumą, procesas gali apimti ir lokalųjį arba globalųjį optimizavimą arba galbūt apsieiti visai be jo.

4.1. Atsitiktinių Gauso laukų taikymas eksperimentams planuoti

Atsitiktiniai Gauso laukai plačiai pritaikomi eksperimentų duomenų tikimybiniam modeliavimui. Daroma prielaida, kad eksperimento, aprašomo parametrų rinkiniu x , rezultatas yra lygus $f(x, \omega)$, čia $f(x, \omega)$ yra AGL realizacija, aprašyta antrame skyriuje.

Sakykime, duota atsitiktinė imtis $\tilde{X} = (X, \hat{X})$, kurios poaibį X sudaro N vektorių, kuriuose yra atlikti fizikiniai eksperimentai, kompiuterinis modeliavimas ir pan. bei gautos atsako paviršiaus reikšmės, o poaibį $\hat{X} = (x_{N+1}, x_{N+2}, \dots, x_K)$ sudaro vektoriai, kuriuose turi būti prognozuojamos atsako, modeliuojamo atsitiktiniu lauku, reikšmės, čia $x_i \in \mathbb{R}^d$, $1 \leq i \leq K$, $d \geq 1$. Pažymėkime atsako funkcijos reikšmių aibę $Y = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$, $0 < N < K$, apskaičiuota aibės X taškams.

Pažymėkime Euklido atstumų laipsnių δ tarp aibės \tilde{X} vektorių $K \times K$ matrica

$$\tilde{A} = \left[(|x_i - x_j|)^\delta \right]_1^K,$$

$$\text{čia } 0 \leq \delta \leq 1, |x_i - x_j| = (x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j).$$

Kadangi veiksmai su TEAM daugiamačiu ir vienamačiu atveju turi tam tikrų skirtumų, toliau pateikiamos išraiškos veiksams su TEAM atlikti, kai AGL prognozuojamas keliuose taškuose, taip pat išraiškoms, gautoms antrame skyriuje ir skirtoms prognozuoti AGL reikšmes tik viename taške.

Suskaidykime vektorius $\tilde{s}^T = (s^T, \sigma^T)$, $\tilde{E}^T = (E^T, \varepsilon^T)$, užrašykime atinkamų matmenų blokines matricas:

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} A & a \\ a^T & \eta \end{bmatrix}, \tilde{F} = \begin{bmatrix} F & f \\ f^T & v \end{bmatrix}, \tilde{I} - \tilde{E} \cdot \tilde{s}^T = \begin{bmatrix} S & c \\ g^T & d \end{bmatrix}. \quad (4.1)$$

Pažymėkime I ir \hat{I} kaip $N \times N$ ir $K \times K$ matmenų vienetines matricas. Tada galima išreikšti:

$$S = I - E \cdot s^T, d = \hat{I} - \varepsilon \cdot \sigma^T, c = -E \cdot \sigma^T, g = -s \cdot \varepsilon^T. \quad (4.2)$$

Tegul vektorius \tilde{s} tenkina sąlygą:

$$E^T \cdot s + \varepsilon^T \cdot \sigma = 1. \quad (4.3)$$

Pritaikius blokinių matricių (4.1) daugybos taisyklės galima gauti išraiškas, analogiškas:

$$F = E \cdot \sigma^T \cdot a^T \cdot S^T + S \cdot a \cdot \sigma \cdot E^T - S \cdot A \cdot S^T - E \cdot \sigma^T \cdot \eta \cdot \sigma \cdot E^T, \quad (4.4)$$

$$f = E \cdot \sigma \cdot a^T \cdot g + S \cdot A \cdot g - S \cdot a \cdot d^T - E \cdot \sigma \cdot \eta \cdot d^T, \quad (4.5)$$

$$v = \varepsilon \cdot s^T \cdot a \cdot d^T + d \cdot a^T \cdot s \cdot \varepsilon^T - d \cdot \eta \cdot d^T - \varepsilon \cdot s^T \cdot A \cdot s \cdot \varepsilon^T. \quad (4.6)$$

Pažymėkime $b = a \cdot \sigma$. Atkreipkime dėmesį, kad kai kurios matricos operacijos su TEAM priklauso nuo vektoriaus s pasirinkimo. Kita teorema yra skirta atvirkštinei (4.4) matriciai rasti, analogiška teoremai (2.2.3)

4.1.1 teorema. Tegul $\tilde{A} = \left[\left((x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j) \right)^\delta \right]_1^K$ yra vektorių $x_i \in \mathfrak{R}^d$ TEAM,

$x_i \neq x_j, i \neq j, 1 \leq i, j \leq K, 0 \leq \delta < 1, d \geq 1$, čia $\tilde{E}^T \cdot \tilde{s} = 1$ ir $\sigma \neq 0$. Tada branduolio matricos pagrindinio minoro blokinėje dekompozijoje (4.1) atvirkštinė matrica yra:

$$F^{-1} = M = -A^{-1} + \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - \frac{q \cdot q^T}{D}, \quad (4.7)$$

čia:

$$q = s + A^{-1} \cdot \left(b + E \cdot \frac{\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \quad (4.8)$$

$$D = \frac{(\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - b^T \cdot A^{-1} \cdot b + \sigma^T \cdot \eta \cdot \sigma. \quad (4.9)$$

Irodymas. Iš teoremos 1.1 išplaukia, kad vektorių rinkinio \tilde{X} TEAM yra neišsigimusi, t. y. $|\tilde{A}| \neq 0$. Vadinasi, jos pagrindinio minoro atvirkštinė matrica taip pat neišsigimusi.

Pagal (4.3) galima užrašyti:

$$E^T \cdot q = 1. \quad (4.10)$$

Remiantis pastarą formulę:

$$\begin{aligned} S^T \cdot q &= (I - s \cdot E^T) \cdot \left(s + A^{-1} \cdot \left(b + E \cdot \frac{\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \right) = \\ &= A^{-1} \cdot \left(b + E \cdot \frac{\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Taigi pagal (4.7), (4.10) ir (4.11) bei atlikus veiksmus galima gauti:

$$\begin{aligned} \frac{F \cdot q \cdot q^T}{D} &= \\ &= \frac{(E \cdot \sigma^T \cdot a^T \cdot S^T + S \cdot a \cdot \sigma \cdot E^T - S \cdot A \cdot S^T - E \cdot \sigma^T \cdot \eta \cdot \sigma \cdot E^T) \cdot q \cdot q^T}{D} = \\ &= \frac{\left(E \cdot b^T \cdot A^{-1} \cdot \left(b + E \cdot \frac{\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) - S \cdot \left(E \cdot \frac{\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) - E \cdot \sigma^T \cdot \eta \cdot \sigma \right) \cdot q^T}{D} = \\ &= \frac{\left(E \cdot \left(b^T \cdot A^{-1} \cdot b + \frac{b^T \cdot A^{-1} \cdot E \cdot (\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) - E \cdot \sigma^T \cdot \varepsilon \cdot \frac{\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - E \cdot \sigma^T \cdot \eta \cdot \sigma \right) \cdot q^T}{D} = \\ &= E \cdot q^T = E \cdot s^T + E \cdot b^T \cdot A^{-1} + E \cdot E^T \cdot A^{-1} \frac{\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Kita vertus,

$$E^T \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) = 0 \quad (4.13)$$

ir todėl pagal (4.2) galima parodyti, kad

$$\begin{aligned} F \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) &= \\ &= (E \cdot \sigma^T \cdot a^T - (I - E \cdot s^T) \cdot A) \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) = \\ &= \left(E \cdot \left(\frac{b^T \cdot A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - b^T \cdot A^{-1} \right) - (I - E \cdot s^T) \cdot \left(\frac{E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - I \right) \right) = \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$= I - E \cdot S^T + \frac{(b^T \cdot A^{-1} \cdot E - \sigma^T \cdot \varepsilon) \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - E \cdot b^T \cdot A^{-1}.$$

Tad sujungus (4.12) ir (4.14) galima įsitikinti, kad:

$$F \cdot M = I.$$

Taigi teorema yra įrodyta. ■

4.1.1 išvada. Tarkime, kad \tilde{A} yra TEAM, \tilde{F} yra jos branduolio matrica, apibrėžta pagal (1.3). Tada yra tenkinama tokia lygybė blokinėms išraiškoms (4.1):

$$F^{-1} - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} = -A^{-1} + \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}.$$

Remiantis (4.10) galima pastebėti, kad

$$F^{-1} \cdot E = \frac{q}{D} \tag{4.15}$$

ir todėl:

$$E^T \cdot F^{-1} \cdot E = \frac{1}{D}. \tag{4.16}$$

Taigi 4.1.1 išvada išplaukia iš dviejų pastarųjų išraiškų.

4.2. Atsako paviršiaus prognozavimas

AGL prognozę tam tikro poaibio \hat{X} taškuose galima gauti pritaikius AGL sąlyginius skirstinius, gautus su sąlyga, kad yra žinomas reikšmių, gautų iš eksperimentų poaibyje X , vektorius $Y = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$.

4.2.1 teorema. Tegul poaibį $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ sudaro N vektorių, kuriuose žinomos AGL realizacijos reikšmės $Y = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$, o poaibį $\hat{X} = (x_{N+1}, x_{N+2}, \dots, x_K)$ sudaro vektoriai, kuriuose turi būti prognozuojamos AGL reikšmės, čia $x_i \in \mathfrak{R}^d$, $N < K$, $1 \leq i \leq K$, $d \geq 1$.

Pažymėkime $\tilde{A} = \left[\left((x_i - x_j)^T \cdot (x_i - x_j) \right)^\delta \right]$ TEAM vektorių $x_i \in \mathfrak{R}^d$, $x_i \neq x_j$, $i \neq j$, $1 \leq i, j \leq K$, $0 \leq \delta < 1$, čia $\tilde{E}^T \cdot \tilde{s} = 1$ ir $\sigma \neq 0$. Tada sąlyginio vidurkio vektorius ir sąlyginė AGL reikšmių poaibyje \hat{X} kovariacijų matrica yra užrašomi taip:

$$y(\hat{X}) = Y^T \cdot F^{-1} \cdot \left(f + E \cdot \frac{(\varepsilon^T - E^T \cdot F^{-1} \cdot f)}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) = \quad (4.17)$$

$$= Y^T \cdot A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{(\varepsilon^T - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right),$$

$$\beta(\hat{X}) = \hat{\beta}^2 \cdot \left(v - f^T \cdot F^{-1} \cdot f + \frac{(\varepsilon - f^T \cdot F^{-1} \cdot E) \cdot (\varepsilon^T - E^T \cdot F^{-1} \cdot f)}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) = \quad (4.18)$$

$$= \hat{\beta}^2 \cdot \left(a^T \cdot A^{-1} \cdot a - \eta - \frac{(\varepsilon - a^T \cdot A^{-1} \cdot E) \cdot (\varepsilon^T - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right).$$

čia ε , f , a , v ir η yra atitinkami TEAM ir branduolio matricos suskaidymo (4.1) blokai, o $\hat{\beta}^2$ yra DTM įvertis.

Irodymas. Perrašykime (4.17) pagal 4.1.1 išvadą ir (4.8), (4.12), (4.13) bei (4.14):

$$\begin{aligned} & Y^T \cdot \left(\left(F^{-1} - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) \cdot f + \frac{F^{-1} \cdot E \cdot \varepsilon^T}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) = \\ & = Y^T \cdot \left(\left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) \cdot (S \cdot A \cdot g - E \cdot \varepsilon \cdot a^T \cdot g - S \cdot a \cdot d^T + E \cdot \varepsilon \cdot \eta \cdot d^T) + q \cdot \varepsilon^T \right) = \\ & = Y^T \cdot \left(\left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) \cdot (A \cdot g - a \cdot d^T) + q \cdot \varepsilon^T \right) = \\ & = Y^T \cdot \left(\left(\left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot (1 - \sigma^T \cdot \varepsilon)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - s \right) \cdot \varepsilon^T + \left(A^{-1} - \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot (a - a \cdot \sigma \cdot \varepsilon^T) \right) + q \cdot \varepsilon^T \right) = \\ & = Y^T \cdot A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{(\varepsilon^T - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \end{aligned}$$

čia

$$q = s + A^{-1} \cdot \left(b + E \cdot \frac{\sigma^T \cdot \varepsilon - E^T \cdot A^{-1} \cdot b}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right),$$

$$g = -s \cdot \varepsilon^T.$$

Dabar perrašykime (4.18) taip:

$$\begin{aligned} \beta^2(\hat{X}) &= \hat{\beta}^2 \cdot \left(v - f^T \cdot \left(F^1 - \frac{F^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot F^{-1}}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) \cdot f + \frac{\varepsilon \cdot \varepsilon^T - \varepsilon \cdot f^T \cdot F^{-1} \cdot E - f^T \cdot F^{-1} \cdot E \cdot \varepsilon^T}{E^T \cdot F^{-1} \cdot E} \right) = \\ &= \hat{\beta}^2 \cdot \left(\eta - f^T \cdot \left(\frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - A^{-1} \right) \cdot f + \frac{\varepsilon \cdot \varepsilon^T}{D} - \varepsilon \cdot f^T \cdot q - q^T \cdot f \cdot \varepsilon^T \right), \end{aligned}$$

čia $v = -(d \cdot \eta \cdot d^T - \varepsilon \cdot s^T \cdot a \cdot d^T - d \cdot a^T \cdot s \cdot \varepsilon^T + \varepsilon \cdot s^T \cdot A \cdot s \cdot \varepsilon^T)$. ■

4.3. Ekstremalinių eksperimentų planavimo algoritmas

Pritaikysime skyrelių 4.1–4.2 eksperimentų serijoms planuoti. Tegul yra atlikta N eksperimentų X , kuriuose yra žinomos atsako funkcijos reikšmės Y . Eksperimentų serijos efektyvumas įvertinamas, kai įvedama naudingumo funkcija. Tegul eksperimentais yra siekiama maksimizuoti rodiklį, kurio matavimo pradinėje serijoje X rezultatai yra Y . Laikysime, kad atliktų eksperimentų naudingumas yra proporcingas didžiausiai pasiektai reikšmei, t. y. $y_{max} = \max(Y)$ (Mockus (2013), Carpio (2017)). Atliktos suplanuotos eksperimentų serijos naudingumas bus $\max(y_{max}, y_{N+1}, \dots, y_K)$, čia y_{N+1}, \dots, y_K yra suplanuotos serijos realizavimo rezultatai, kurie planuojant eksperimentą dar nėra žinomi ir modeliuojami AGL.

Tegul $\hat{X} = (x_{N+1}, x_{N+2}, \dots, x_K)$ yra suplanuota eksperimentų serija. Pagal sąlyginio vidurkio vektoriaus ir sąlyginės kovariacijos matricos išraiškas galima gauti:

$$y(\hat{X}) = Y^T \cdot A^{-1} \cdot \left(a + E \cdot \frac{(\varepsilon^T - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \quad (4.19)$$

$$\beta(\hat{X}) = \hat{\beta}^2 \cdot \left(a^T \cdot A^{-1} \cdot a - \eta - \frac{(\varepsilon - a^T \cdot A^{-1} \cdot E) \cdot (\varepsilon^T - E^T \cdot A^{-1} \cdot a)}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right), \quad (4.20)$$

čia $\hat{\beta}^2 = \frac{1}{K} \cdot \left(\frac{(Y^T \cdot A^{-1} \cdot E)^2}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} - Y^T \cdot A^{-1} \cdot Y \right)$, A yra atliktos serijos X TEAM, o a yra atstumų su trupmeniniais laipsnių rodikliais tarp X ir \hat{X} matrica.

Pagal šias išraiškas galime užrašyti tikėtino naudingumo funkcijos reikšmę:

$$U(\hat{X}) = \int_{\mathfrak{R}^L} \max(y_{max}, y_{N+1}, \dots, y_K) p(Y, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) dY = \quad (4.21)$$

$$= y_{max} + \int_{\max(y_{N+1}, \dots, y_K) \geq y_{max}} (\max(\hat{y}_{N+1}, \dots, \hat{y}_K) - y_{max}) p(\hat{Y}, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) d\hat{Y}.$$

Kita teorema nustato būdą eksperimentų serijai planuoti maksimizuojantį tikėtiną serijos naudingumą.

4.3.1 teorema. Eksperimentų planavimo metodas, maksimizuojantis tikėtiną eksperimento naudingumą, tenkina sąlygą:

$$E \left(\max(\max(y_{N+1}, \dots, y_K) - y_{max}, 0) \cdot \frac{\partial \ln(p(y, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})))}{\partial \hat{X}} \right) = 0.$$

Irodymas. Pagal (4.21) galima gauti:

$$\hat{X}_{opt} = \arg \max_X \int_{\max(\hat{y}_{N+1}, \dots, \hat{y}_K) \geq y_{max}} (\max(\hat{y}_{N+1}, \dots, \hat{y}_K) - y_{max}) \cdot \ln \left(p(\hat{Y}, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) \right) p(\hat{Y}, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) d\hat{Y}. \quad (4.22)$$

Pastarojo uždavinio optimalumo sąlygą galima perrašyti tokiu būdu:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U(\hat{X})}{\partial \hat{X}} &= \int_{\max(y_{N+1}, \dots, y_K) \geq y_{max}} (\max(y_{N+1}, \dots, y_K) - y_{max}) \cdot \frac{\partial \ln(p(Y, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})))}{\partial \hat{X}} p(Y, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) \cdot dY = \\ &= E \left(\max(\max(y_{N+1}, \dots, y_K) - y_{max}, 0) \cdot \frac{\partial \ln(p(Y, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})))}{\partial \hat{X}} \right). \end{aligned}$$

Teorema seka prilyginus pastarąją išraišką nuliui. ■

Panagrinėkime atsitiktinį Gauso lauką, kurio sąlyginio tankio funkcija:

$$p(\hat{Y}, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) = (2\pi)^{-\frac{L}{2}} \cdot \sqrt{|\beta(\hat{X})|} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot (\hat{Y} - y(\hat{X}))^T \cdot \beta^{-1}(\hat{X}) \cdot (\hat{Y} - y(\hat{X})) \right).$$

Po tam tikrų pertvarkymų galima užrašyti tikėtinio naudingumo funkcijos išraišką:

$$\begin{aligned} F(\hat{X}) &= \frac{1}{2} \left(\ln(|\beta(\hat{X})|) \cdot E(H(Y, y_{max})) + \text{tr} \left(E(H(Y, y_{max}) \cdot Y \cdot Y^T) \cdot \beta^{-1}(\hat{X}) \right) + \right. \\ &\left. + y(\hat{X})^T \cdot \beta^{-1}(\hat{X}) \cdot y(\hat{X}) \cdot E(H(Y, y_{max})) \right) - E(H(Y, y_{max}) \cdot Y)^T \cdot \beta^{-1}(\hat{X}) \cdot y(\hat{X}), \end{aligned} \quad (4.23)$$

čia $H(Y, y_{max}) = \max(\max(y_{N+1}, \dots, y_K) - y_{max}, 0)$.

Užrašykime tikėtinio naudingumo funkcijos gradientą:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F(\hat{X})}{\partial \hat{X}} &= \left(\beta^2(\hat{X})\right)^{-1} \cdot \left(\left(E(H(\hat{Y}, y_{max}) \cdot Y) - E(H(\hat{Y}, y_{max})) \cdot y(\hat{X}) \right) \cdot Y^T \cdot A1 \cdot \frac{\partial a}{\partial \hat{X}} + \right. \\
&+ \hat{\beta}^2 \cdot \left(E(H(\hat{Y}, y_{max}) \cdot Y \cdot Y^T) + E(H(\hat{Y}, y_{max})) \cdot y(\hat{X}) \cdot y(\hat{X})^T - E(H(\hat{Y}, y_{max}) \cdot Y) \cdot y(\hat{X})^T - \right. \\
&\left. \left. - y(\hat{X}) \cdot E(H(\hat{Y}, y_{max}) \cdot Y)^T - \beta^2(\hat{X}) \cdot E(H(\hat{Y}, y_{max})) \right) \right) \cdot \beta^2(\hat{X})^{-1} \cdot \left(\left(a^T \cdot A1 + \frac{\hat{E} \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot \frac{\partial a}{\partial \hat{X}} - \frac{\partial \eta}{\partial \hat{X}} \right),
\end{aligned} \tag{4.24}$$

čia

$$\begin{aligned}
A1 &= A^{-1} - \frac{A^{-1} \cdot E \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E}, \\
\frac{\partial a_i}{\partial \hat{x}_j^k} &= \frac{2 \cdot \delta \cdot (x_j^i - \hat{x}_j^k)}{\left(\sum_{m=1}^p (x_m^i - \hat{x}_m^k)^2\right)^{1-\delta}}, \quad 1 \leq i \leq N, N+1 \leq k \leq K, 1 \leq j \leq p, \\
\frac{\partial \eta_i}{\partial \hat{x}_j^k} &= \frac{2 \cdot \delta \cdot (\hat{x}_j^i - \hat{x}_j^k)}{\left(\sum_{m=1}^p (\hat{x}_m^i - \hat{x}_m^k)^2\right)^{1-\delta}}, \quad N+1 \leq i \leq K, N+1 \leq k \leq K, 1 \leq j \leq p.
\end{aligned}$$

Taigi pagal teoremą 4.3.1 Bajeso eksperimentų planavimo metodas turi tenkinti lygtį:

$$\frac{\partial F(\hat{X})}{\partial \hat{X}} = 0. \tag{4.25}$$

Tikėtinas reikšmes galima pakeisti daugialypiu integralu:

$$\frac{\partial F(\hat{X})}{\partial \hat{X}} = \left(\beta^2(\hat{X})\right)^{-1} \cdot \int_{\mathcal{Y}} W(\hat{Y}, y_{max}, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) \cdot p(\hat{Y}, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) d\hat{Y},$$

čia

$$\begin{aligned}
W(\hat{Y}, y_{max}, y(\hat{X}), \beta(\hat{X})) &= \\
&= H(\hat{Y}, y_{max}) \cdot (\hat{Y} - y(\hat{X})) \cdot Y^T \cdot A1 \cdot \frac{\partial a}{\partial \hat{X}} + H(\hat{Y}, y_{max}) \cdot (\hat{\beta}^2 \cdot (\hat{Y} \cdot \hat{Y}^T + y(\hat{X}) \cdot y(\hat{X})^T) - \\
&\quad - \hat{Y} \cdot y(\hat{X})^T - y(\hat{X})^T \cdot \hat{Y} - \beta^2(\hat{X})) \cdot \beta^2(\hat{X})^{-1} \cdot \left(\left(a^T \cdot A1 + \frac{\hat{E} \cdot E^T \cdot A^{-1}}{E^T \cdot A^{-1} \cdot E} \right) \cdot \frac{\partial a}{\partial \hat{X}} - \frac{\partial \eta}{\partial \hat{X}} \right).
\end{aligned}$$

Eksperimentų serijos planavimo uždavinį galima spręsti dviem būdais. Pirmasis būdas remiasi formule (4.22), o taikant antrąjį būdą turi būti išspręsta lygčių sistema (4.23).

Šiems būdams realizuoti skaitmeniškai galima pritaikyti Monte Karlo metodą ir Imties Vidurkio Aproximacijos (angl. *Sampling Average Approximation*, Shapir (2013)) metodą.

Panagrinėsime eksperimentų serijos planavimo algoritmą remiantis formule (4.22). Tegul sugeneruota M dydžio daugiamacio Gauso skirstinio $N(y(X_1), \beta(X_1))$ imtis (Y_1, Y_2, \dots, Y_M) . Tada galima užrašyti Monte Karlo įverčius:

$$E(H(Y, y_{max})) = \frac{1}{M} \cdot \sum_{j=1}^M H(Y_j, y_{max}),$$

$$E(H(Y, y_{max}) \cdot Y) = \frac{1}{M} \cdot \sum_{j=1}^M H(Y_j, y_{max}) \cdot Y_j, \quad (4.26)$$

$$E(H(Y, y_{max}) \cdot Y \cdot Y^T) = \frac{1}{M} \cdot \sum_{j=1}^M H(Y_j, y_{max}) \cdot Y_j \cdot Y_j^T.$$

Gautos Monte Karlo aproksimacijos (4.26) įstatomos į išraišką (4.23), kuri yra minimizuojama pagal \hat{X} užfiksavus imtį (Y_1, Y_2, \dots, Y_M) . Gautas minimizavimo rezultatas pažymimas \hat{X}_2 ir perskaičiuojami Monte Karlo įverčiai vėl minimizuojant tikėtiną naudingumo funkcijos reikšmę. Procesas stabdomas, kai dviejų iš eilės einančių žingsnių minimizavimo rezultatai skiriasi pakankamai mažai.

4.4. Kompiuterinio modeliavimo rezultatai

Sukurtas eksperimentų planavimo metodas buvo tiriamas statistinio modeliavimo būdu, sprendžiant testinius uždavinius. Pasirinktos dvi testinės funkcijos.

Pirmoji pasirinkta testinė funkcija:

$$G(x, y) = \sqrt{(x - 5)^2 + (y - 5)^2}, 0 \leq x, y \leq 10. \quad (4.27)$$

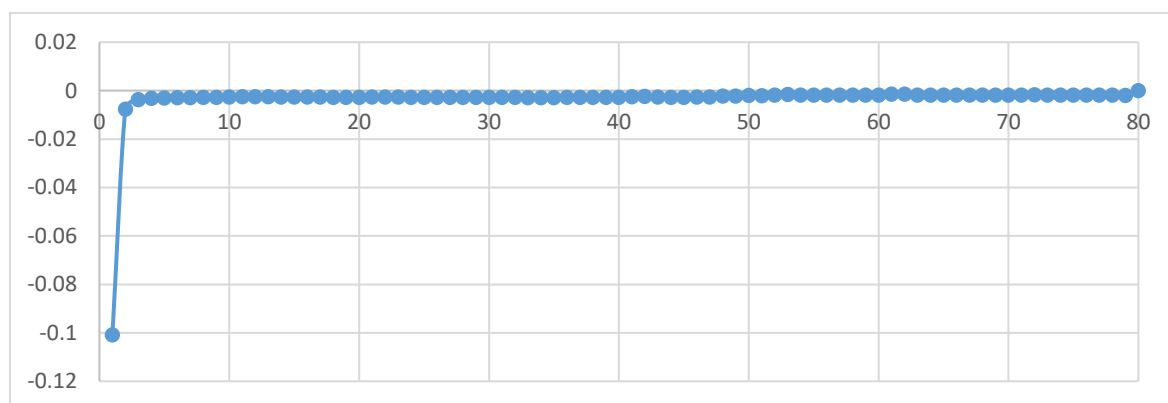
Stebėjimų skaičius buvo lygus $N=10$. Skaičiavimų tikslumas buvo 10^{-3} .

Sugeneruotų pradinių taškų ir funkcijos reikšmių matrica:

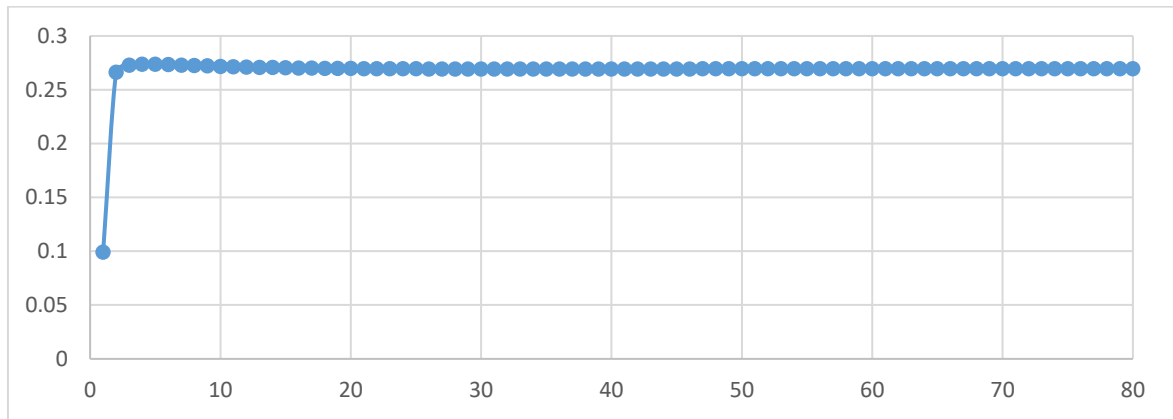
$$X = \begin{pmatrix} 0,0126842 & 9,8850847 \\ 1,9332302 & 1,1907973 \\ 5,850061 & 0,0892266 \\ 3,503081 & 5,3166416 \\ 8,2283773 & 6,0176413 \\ 1,74129 & 1,6624948 \\ 7,1049541 & 4,5078589 \\ 3,0398605 & 0,570559 \\ 0,9141127 & 7,8331917 \\ 1,4731341 & 5,1987616 \end{pmatrix}.$$

Taip pat sugeneruota pradinė serija: $\hat{X} = \begin{pmatrix} 1,545929 & 3,6984743 \\ 6,0756318 & 7,616284 \\ 0,6163341 & 7,7764243 \\ 1,3140974 & 4,8630338 \\ 4,8852246 & 7,4508873 \end{pmatrix}.$

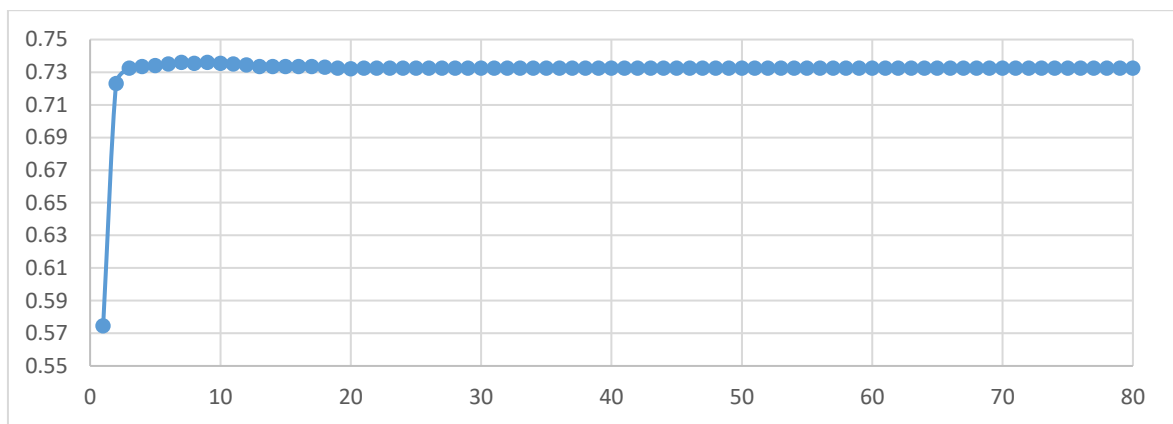
Po atliktų 80 iteracijų gauti rezultatai, kurie pavaizduoti 4.1–4.3 paveikslėliuose.



4.1 pav. Tikėtimumo funkcijos (4.21) reikšmių skirtumas iki ir po vieno optimizavimo žingsnio



4.2 pav. Tikėtinas naudingumo funkcijos (4.21) prieaugis po kiekvieno optimizavimo žingsnio



4.3 pav. Naudingumo funkcijos (4.21) pokyčio tikimybė

Atliekant tam tikrą žingsnių skaičių, stebima, kaip keičiasi serijos \hat{X} reikšmė. Skaičiavimų rezultatai pateikti lentelėje 4.1.

4.1 lentelė. Tikslo funkcijos reikšmės po tam tikro skaičiaus žingsnių

pradinis taškas →		po 9 žingsnių →		po 19 žingsnių →	
1,545929	3,6984743	1,024535	5,0835968	1,2273195	5,2137898
6,0756318	7,616284	4,9273927	5,5816735	4,9260508	5,5196514
0,6163341	7,7764243	0,7499555	7,5559737	1,1617642	7,533961
1,3140974	4,8630338	1,3816706	5,1894181	1,4514296	5,20356
4,8852246	7,4508873	4,3901086	5,0740604	4,3950533	5,0994622
po 29 žingsnių →		po 49 žingsnių →		po 79 žingsnių →	
1,3383761	5,1965779	1,4374187	5,1898026	1,4384344	5,1922934
4,9136612	5,5255159	4,9101319	5,5414241	4,9101341	5,5414433
1,4747722	7,4630175	1,7202134	6,7837714	1,7203127	6,782948
1,4687669	5,2007388	1,4733495	5,1987896	1,4731365	5,1987613
4,4020133	5,0997947	4,4044542	5,1045358	4,4044531	5,1045456

Tikslo funkcija apskaičiuota atlikus 49 žingsnius, gautus rezultatus lyginame su pradinėmis tikslo funkcijos reikšmėmis:

4.2 lentelė. Testinės funkcijos reikšmės palyginimas su pradine reikšme su atlikus suplanuotą eksperimentų seriją

$G(x), x \in \hat{X}$	$G(x), x \in X$
3,565067	6,986573
0,547449	4,892954
3,731863	4,991803
3,535661	1,533754
0,608276	3,387226
	4,667248
	2,156409
	4,844223
	4,97363
	3,535661

Matome, kad testinės funkcijos reikšmė lygi **0,547449** atlikus suplanuotą seriją ir yra mažesnė už pradinę reikšmę, lygią **1,533754**.

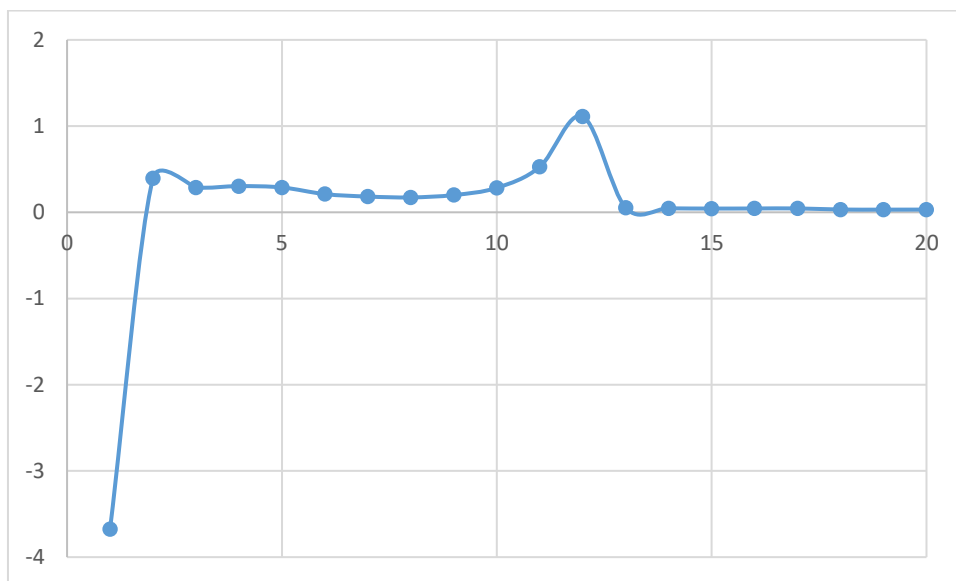
Antroji pasirinkta Branino testinė funkcija (2.28). Stebėjimų skaičius buvo lygus $N=10$. Skaičiavimų tikslumas lygus 10^{-4} .

Sugeneruotų pradinių taškų ir funkcijos reikšmių matrica:

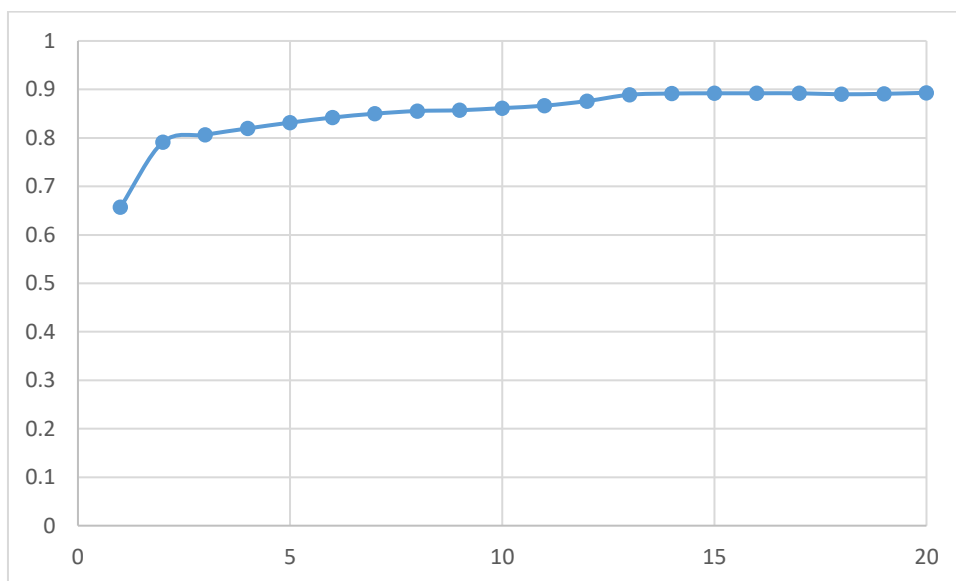
$$X = \begin{pmatrix} -4,9809737 & 14,8276271 \\ -2,1001547 & 1,786196 \\ 3,7750915 & 0,13384 \\ 0,2546216 & 7,9749624 \\ 7,3425659 & 9,026462 \\ -2,3880651 & 2,4937422 \\ 5,6574311 & 6,7617884 \\ -0,4402092 & 0,8558385 \\ -3,628831 & 11,7497876 \\ -2,7902988 & 7,7981424 \end{pmatrix}.$$

Taip pat sugeneruota pradinė serija: $\hat{X} = \begin{pmatrix} -2,3928801 & 2,3030544 \\ 8,9313768 & 8,8327373 \\ -4,7168674 & 9,0996378 \\ -2,9724591 & 4,243987 \\ 5,9553589 & 8,5570762 \end{pmatrix}.$

Atlikus 20 iteracijų gautas tikėtino naudingumo funkcijos reikšmių skirtumas iki ir po optimizavimo (4.4 pav.). Taip pat gautas tikėtinas naudingumo funkcijos pokytis (4.5 pav.).

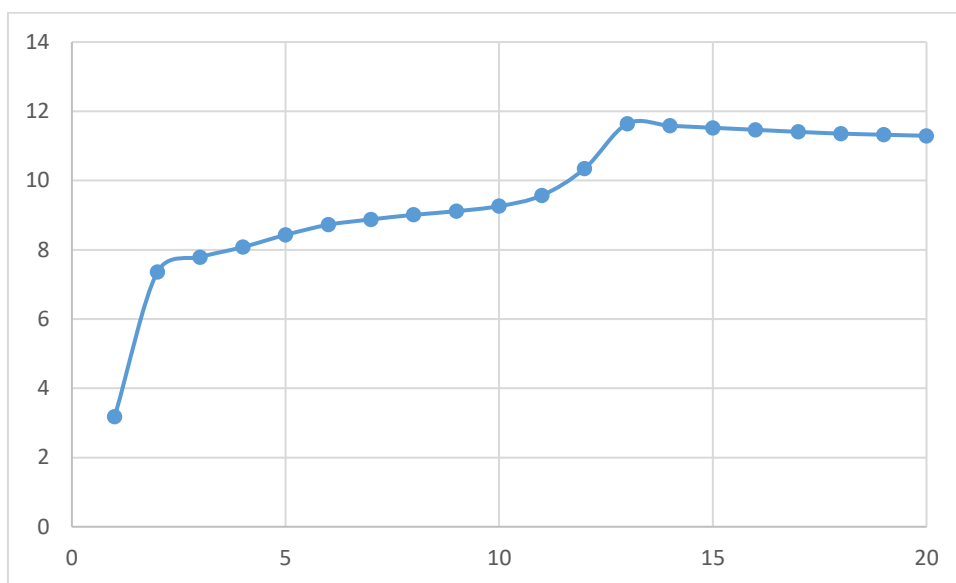


4.4 pav. Tikėtino naudingumo funkcijos (4.21) reikšmių skirtumas iki ir po optimizavimo



4.5 pav. Naudingumo funkcijos pokyčio tikimybė

Pastebimas apskaičiuotos naudingumo funkcijos pokyčio tikimybės gerėjimas (iki 90 proc.) (4.5 pav.).



4.6 pav. Tikėtinas naudingumo funkcijos pokytis

4.3 lentelė. Tikslų funkcijos reikšmės po tam tikro skaičiaus žingsnių

pradinis taškas →		po 20 žingsnių →		po 50 žingsnių →	
-2,3928801	2,3030544	-2,3706771	2,3898698	-2,3852208	2,4740399
8,9313768	8,8327373	10	0	10	0
-4,7168674	9,0996378	-6,628831	10,8819722	-6,628831	11,036896
-2,9724591	4,243987	-4,0958158	11,7121699	-3,6250789	11,7696718
5,9553589	8,5570762	-2,5200974	11,0966479	-3,9538942	10,535246

Testinė atsako funkcija (2.28) apskaičiuota atlikus 50 (4.21) optimizavimo žingsnius, gauti rezultatai lyginami su pradinėmis tikslo funkcijos reikšmėmis:

4.4 lentelė. Testinės funkcijos reikšmės palyginimas su pradine reikšme su atlikus suplanuotą eksperimentų seriją

$G(x), x \in \hat{X}$	$G(x), x \in X$
67,903937	17,542897
9,5037358	70,937274
141,77862	5,0565953
4,3301948	24,873072
17,226785	76,950058
	67,582047
	50,410535
	53,083424
	4,3976428
	14,135277

Matome, kad testinės funkcijos reikšmė lygi **4,3301948** atlikus suplanuotą seriją ir yra mažesnė už pradinę reikšmę, lygią **4,3976428**.

4.5. Nuotekų valymo filtrų eksperimentų planavimas

Sukurtas algoritmas pritaikytas nuotekų valymo filtrų eksperimentams planuoti. Nuotekų valymo filtrų eksperimentams planuoti remtasi pradinė tyrimų rezultatais. Antrame skyriuje aprašyta bandymų matrica, kur filtrų užpildų proporcijos:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,667 & 0 & 0,333 \\ 0 & 0 & 0,333 & 0,667 \\ 0 & 0,333 & 0,333 & 0,333 \end{pmatrix}.$$

Bandymas buvo atliekamas su bendrosios anglies (TC) išvalymo duomenimis:

$$z_{TC} = \begin{pmatrix} 27.26 \\ 38.33 \\ 50.67 \\ 43.18 \end{pmatrix}.$$

Po skaičiavimų gautas naujas eksperimentų serijos planas bendrosios anglies taršalui valyti:

Kvarcinis smėlis	Akytasis betonas	Bioanglis	Akmens vata
0	1	0	0
0	0	0	1
0,334	0	0	0,666
0	0	0,16	0,84

4.6. Skyriaus išvados

- 1) Šiame skyriuje sudarytas vienažingsnis ekstremalinių eksperimentų serijų planavimo metodas, taikant surogatinį AGL modelį.
- 2) Ekstremalinių eksperimentų serijai planuoti pritaikyti Monte Karlo ir Imties Vidurkių Aproximacijos metodai.
- 3) Sudaryto ekstremalinių eksperimentų metodo tyrimas kompiuterinio modeliavimo būdu sprendžiant testinius pavyzdžius patvirtino jo efektyvumą.
- 4) Sukurtas metodas pritaikytas nuotekų valymo filtro eksperimentų serijoms planuoti.

IŠVADOS

Nors duomenų struktūros, aprašomos trupmeninių Euklido atstumų matricomis (TEAM), taikymuose gana dažnos, kol kas literatūroje daugiausia nagrinėtos Euklido atstumų kvadratų matricos. Disertacijoje parodyta, kad TEAM savybes galima aprašyti per branduolio matricą. Jeigu daugiamačių duomenų aibę sudaro skirtingi vektoriai, šios duomenų aibės TEAM branduolio matrica yra neneigiamai apibrėžta, o jos rangas vienetu mažesnis už matricos eilę.

Sukurtas ir ištirtas daugiamačių duomenų modelis atsitiktiniais Gauso laukais, kurių kovariacijų matrica aprašoma TEAM branduolio matrica. Remiantis šiuo modeliu, sukurtas kriginio algoritmas, pritaikytas išbarstytiesiems daugiamačiams duomenims ekstrapoliuoti. Sukurtas modelis priklauso nuo kelių parametrų, kurių įverčiai nesunkiai gaunami didžiausio tikėtimumo metodu. Kompiuterinio modeliavimo rezultatai parodė, kad sukurtas ekstrapoliavimo metodas yra pranašesnis už Šepardo ekstrapoliatorių.

Darbe sudarytas Bajeso daugiaekstremalinių uždavinių sprendimo metodas, taikant surogatinį atsitiktinio lauko modelį. Parodyta, kad šis metodas tenkina rekursyvinių lygčių sistemą, ir pasiūlytas supaprastintas šių lygčių sprendimo metodas, pritaikytas Bajeso optimizavimo metodui sudaryti. Sukurtas vienažingsnis Bajeso optimizavimo metodas ir sudarytas jį realizuojantis algoritmas. Sukurti metodai palyginti su kitais žinomais globalaus optimizavimo metodais kompiuterinio modeliavimo būdu.

Pritaikius surogatinį atsitiktinio lauko modelį, sudarytas vienažingsnis ekstremalinių eksperimentų serijų planavimo metodas. Ekstremalinių eksperimentų serijai planuoti pritaikytas Monte Karlo imties vidurkio aproksimacijos metodas. Sudaryto ekstremalinių eksperimentų metodo tyrimas kompiuterinio modeliavimo būdu sprendžiant testinius pavyzdžius patvirtino jo efektyvumą. Sukurtas metodas pritaikytas nuotekų valymo filtro eksperimentų serijoms planuoti.

LITERATŪRA

- [1] Abrahamsen P., 1997, A Review of Gaussian random fields and correlation functions, *Norsk Regnesentral/Norwegian Computing Center*, p. 64.
- [2] Adler R. J., 1981, *The Geometry of Random Fields*, John-Wiley & Sons, Chichester.
- [3] Alfakih A. Y., Anjos M. F., Piccialli V., Wolkowicz H., 2011, Euclidean Distance Matrices, Semidefinite Programming, and Sensor Network Localization (a survey), *Portugaliae Mathematica*, vol. 68, p. 53–102.
- [4] Balaji R., Bapat R. B., 2006, On Euclidean distance matrices, *Linear Algebra and its Applications*, vol. 424, p. 108–117.
- [5] Bartkute V., Sakalauskas L., 2009, Statistical inferences for termination of Markov type random search algorithms. *Journal of Optimization Theory and Applications*, vol. 141, no. 3, p. 475–493.
- [6] Beauzamy B., 2004, *Methodes probabilistes pour l'etude des phenomenes reels*, Ouvrage edite par la Societe de Calcul Mathematique, http://www.scmsa.eu/RMM/HS_e.pdf
- [7] Ben-Israel A., Greville T.N.E, 2003, *Generalized Inverses: Theory and Applications (2nd edition)*, Springer-Verlag, New York.
- [8] Bhosekar A., Ierapetritou M., 2018, Advances in surrogate based modeling, feasibility analysis, and optimization: A review, *Computers & Chemical Engineering*, vol. 108, p. 250–267.
- [9] Biehl M., Ghio A., Schleif F. M., 2015, Developments in computational intelligence and machine learning, *Neurocomputing*, vol. 169, p. 185–186.
- [10] Bisgaard M. E., Sasvari Z., 2000, *Characteristic functions and moment sequences: Positive definiteness in probability*. Nova Science Publishers.
- [11] Blum A., 2005, Random Projection, Margins, Kernels, and Feature-Selection, Subspace, *Latent Structure and Feature Selection*, p. 52–68.
- [12] Bogomolny E., Bohigas O., Schmit C., 2008, Distance matrices and isometric embeddings, eprint arXiv:0710.2063.
- [13] Bogush, A.J., Elkins, R.E., 1986, Gaussian field expansions for large aperture antennas, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, AP-34(2).

- [14] Bomba A., Safonyk A., 2013, Mathematical modeling of aerobic wastewater treatment in porous medium, *Zeszyty Naukowe Wyższej Szkoły Informatyki*, vol. 12, nr. 1, p. 21–29.
- [15] Carpio R., Giordano R. C., Secchi A., 2017, Enhanced Surrogate Assisted Global Optimization Algorithm Based on Maximizing Probability of Improvement, *Computer Aided Chemical Engineering*, vol. 40, p. 2065–2070.
- [16] Cavoretto R., De Rossi A., 2010, Fast and accurate interpolation of large scattered data sets on the sphere, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 234, p. 1505–1521.
- [17] Casella, G., Berger, R., 2002, *Statistical Inferences*. Wadsworth.
- [18] Chamon C. C., Mudry C., Wen X. G., 1996, Localization in Two Dimensions, Gaussian field theories, and multifractality. *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, p. 4194–4197.
- [19] Forrester A. I. J., Keane A. J., 2009, Recent advances in surrogate-based optimization, *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 45, Issues 1–3, p. 50–79.
- [20] Franke R., 2015, Scattered Data Interpolation: Tests of Some Methods, *Mathematics of computation*, vol. 38, nr. 157, p. 181–200.
- [21] Genton M. G., 2000, The Correlation Structure of Matheron’s Classical Variogram Estimator Under Elliptically Contoured Distributions, *Mathematical Geology*, vol. 32, p. 127–137.
- [22] Gillespie D. T., 1996, Exact numerical simulation of the Ornstein–Uhlenbeck process and its integral, *Physical Review E*, vol. 54, p. 2084–2091.
- [23] Gneiting T., 2002, Compactly Supported Correlation Functions, *Journal of Multivariate Analysis*, No.83, p. 493–508.
- [24] Goff, J. A., Holliger, K., Levander, A., 1994, Model fields: A new method for characterization of random seismic velocity heterogeneity. *Geophys. Res. Letters*, vol. 21, p. 493–496.
- [25] Goff, J. A., Jordan, T. H., 1988, Stochastic modeling of seafloor morphology: Inversion of sea beam data for second-order statistics, *J. Geophys. Res.*, vol. 93, p. 13589–13608.
- [26] Golub G. H., Van Loan C. F., 1996, *Matrix Computations*, 3rd. ed., Baltimore, MD: Johns Hopkins, p. 51.
- [27] Gower J. C., 1982, Euclidean distance geometry, *Math. Scientist.*, 7, 1–14.

- [28] Gower J. C., 1984, Multivariate analysis: Ordination, multidimensional scaling and allied topics, *Handbook of Applicable Mathematics: Vol. 6. Statistics (E. H. Lloyd, Ed.)*, p. 727–781, Wiley, Chichester.
- [29] Gower J. C., 1983, Euclidean matrices and their Euclidean approximation, in *Third International Conference on Data Analysis and Informatics (E. Diday, Ed.)*, INRIA, Versailles, p. 1–19.
- [30] Hartle J. B., Hawking S.W., Hertog T., 2013, Vector Fields in Holographic Cosmology, p. 17, arXiv:1305.7190v1 [hep-th], DOI: 10.1007/JHEP11(2013)201.
- [31] Hinrichs A., Vybiral J., 2011, On positive positive-definite functions and Bochner’s Theorem, *Journal of Complexity*, Vol. 27, P. 264–272.
- [32] Jones D. R., 2001, A Taxonomy of Global Optimization Methods Based on Response Surfaces, *Journal of Global Optimization, Kluwer Academic Publishers, Netherlands*, vol. 21., p. 345–383.
- [33] Hawking S., 2014, Singularities and the geometry of spacetime, *The European Physical Journal H*, vol. 39, p. 413–503.
- [34] Horn R. A., Johnson C. R., 2013, *Matrix Analysis 2nd ed.*, ISBN 978-0-521-54823-6, Cambridge University Press.
- [35] Khoshnevisan D., 2002, *Multiparameter Processes An Introduction to Random Fields*, Springer-Verlag New York.
- [36] Krige, D. G., 1951, A statistical approach to some mine valuations and allied problems at the Witwatersrand, Master's thesis of the University of Witwatersrand, Australia.
- [37] Krislock N., Wolkowicz H., 2012, Euclidean Distance Matrices and Applications, in: Anjos, M. F., Lasserre, J. B., *Handbook on Semidefinite, Conic and Polynomial Optimization*, Vol. 166 of International Series in Operations Research & Management Science, p. 879–914.
- [38] Kushner H., 1964, A new method of locating the maximum point of an arbitrary multipeak curve in the presence of noise, *Journal of Basic Engineering*, vol. 86, p. 97–106.
- [39] Kwon H., Choi S., 2015, A trended Kriging model with R2 indicator and application to design optimization, *Aerospace Science and Technology*, vol. 43, p. 111–125.
- [40] Lay D. C., 2005, *Linear Algebra and Its Applications*, Addison Wesley.

- [41] Levenson M., Rahn F., 1981, Realistic estimates of the consequences of nuclear accidents, *Nuclear Technology*, vol. 53, p. 99–110.
- [42] Li J., Lu B. L., 2009, An adaptive image Euclidean distance, *Pattern Recognition*, vol. 42, p. 349–357.
- [43] Menafoglio A., Petris G., 2015, Kriging for Hilbert-space valued random fields: The operatorial point of view, *Journal of Multivariate Analysis*, vol. 146, p. 84–94.
- [44] Micchelli C. A., 1986, Interpolation of Scattered Data: Distance Matrices and Conditionally Positive Definite Functions, *Constructive Approximation*, vol. 2, p. 11–22.
- [45] Mockus J., 1989, Bayesian approach to global optimization, *Kluwer*.
- [46] Mockus J., Eddy W., Reklaitis G., 1997, Bayesian Heuristic Approach to Discrete and Global Optimization, *Nonconvex Optimization and Its Applications*.
- [47] Morgenroth E., Arvin E., Vanrolleghem P., 2002, The use of mathematical models in teaching wastewater treatment engineering, *Water Science & Technology*, p. 229–233.
- [48] Murphy R. F., 2015, Building cell models and simulations from microscope images, *Methods*, vol. 96, p. 33–39.
- [49] North G. R., Wang J., Genton M. G., 2011, Correlation Models for Temperature Fields, *Journal of Climate*, vol. 24, p. 5850–5862.
- [50] Novak M., Horvat P., 2012, Mathematical modelling and optimisation of a waste water treatment plant by combined oxygen electrode and biological waste water treatment model, *Applied Mathematical Modelling*, vol. 36, p. 3813–3825.
- [51] Niec J., Sychala M., Zawadzki P., 2016, New approach to modelling of sand filter clogging by septic tank effluent, *Journal of Ecological Engineering*, vol. 17 (2), p. 97–107.
- [52] Pardalos P. M., Rosen J. B., 1987, Constrained Global Optimization: Algorithms and Applications, *Springer-Verlag Berlin, Heidelberg*, ISBN: 0-387-18095-8.
- [53] Pozniak N., Sakalauskas L., Saltyte L., 2019, Kriging Model with Fractional Euclidean Distance Matrices, *Informatica*, vol. 30, nr. 2, p. 367–390.
- [54] Pozniak, N., Sakalauskas, L., 2017, Fractional Euclidean distance matrices extrapolator for scattered data. *Journal of Young Scientists*. 47(2), 56–61.

- [55] Schoenberg I. J., 1935, Remarks to Maurice Frechet's article: Sur la definition axiomatique d'une classe d'espaces vectoriels distances applicables vectoriellement sur l'espace de Hilbert, *Ann. Math.*, vol. 36, p. 724–732.
- [56] Sakalauskas L., 2013, Locally Homogeneous and Isotropic Gaussian Fields in Kriging, *Informatica*, vol. 24, No. 2, p. 253–274.
- [57] Saric M., Ek C. H., Kragic D., 2011, Dimensionality Reduction via Euclidean Distance Embeddings, School of Computer Science and Communication, TRITA-CSC-CV 2011:2 CVAP320.
- [58] Secchi A. R., Cardozo N. S. M., Neto E. A., Finkler T. F., 2006, An Algorithm for Automatic Selection and Estimation of Model Parametres, *International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes Gramado, Brazil, IFAC Proceedings*, vol. 2 (2), p. 789–794.
- [59] Shapiro A., 2013, Sample Average Approximation, p. 1350–1355. 10.1007/978-1-4419-1153-7_1154.
- [60] Shepard D., 1968, A Two Dimensional Interpolation Function for Irregularly Spaced Data, *Proc. ACM 23rd Nat'l Conf.*, p. 517–524.
- [61] Sherman J., Morrison W. J., 1949, Adjustment of an Inverse Matrix Corresponding to Changes in the Elements of a Given Column or a Given Row of the Original Matrix (abstract), *Annals of Mathematical Statistics*, 20: 621. doi:10.1214/aoms/1177729959.
- [62] Schoenberg I. J., 1935, Remarks to Maurice Frechet's article: Sur la definition axiomatique d'une classe d'espaces vectoriels distances applicables vectoriellement sur l'espace de Hilbert," *Ann. Math.*, vol. 36, p. 724–732.
- [63] Weinberger K. Q, Sha F., Saul L. K., 2004, Learning a Kernel Matrix for Nonlinear Dimensionality Reduction, *Proceedings of the Twenty-first International Conference on Machine Learning (ICML, 04)*, p. 106–113.
- [64] Xia Q., Shi T., 2018, A cascadic multilevel optimization algorithm for the design of composite structures with curvilinear fiber based on Shepard interpolation, *Composite Structures*, vol. 188, p. 209–219.
- [65] Xiao M., Zhang G., Breikopf P., Villon P., Zhang W., 2018, Extended Co-Kriging interpolation method based on multi-fidelity data, *Applied Mathematics and Computation*, col. 323, p. 120–131.

- [66] Zaichik L., Alipchenkov V., Avetissian A., 2011, A Statistical Model for Predicting the Heat Transfer of Solid Particles in Turbulent Flows, *Flow Turbulence Combust*, vol.86, p.497–518.
- [59] Zilinskas A., 1985, Axiomatic characterization of a global optimization algorithm and investigation of its search strategy, *Operations Research Letters*, vol. 4, Issue 1, p. 35–39.