Міністерство освіти і науки України

Львівський національний університет імені Івана Франка

Факультет прикладної математики та інформатики

Кафедра прикладної математики

**Застосування методу Крігінга для побудови сурогатних моделей**

Курсова робота студента 3 курсу групи ПМп-32

Лабенського Данила

Науковий керівник: доц. Щербатий М. В.

Національна шкала\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Кількість балів:\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Оцінка ECTS:\_\_\_\_\_\_\_

Члени комісії \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище та ініціали)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище та ініціали)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище та ініціали)

Львів 2019

**Зміст**

**Вступ**

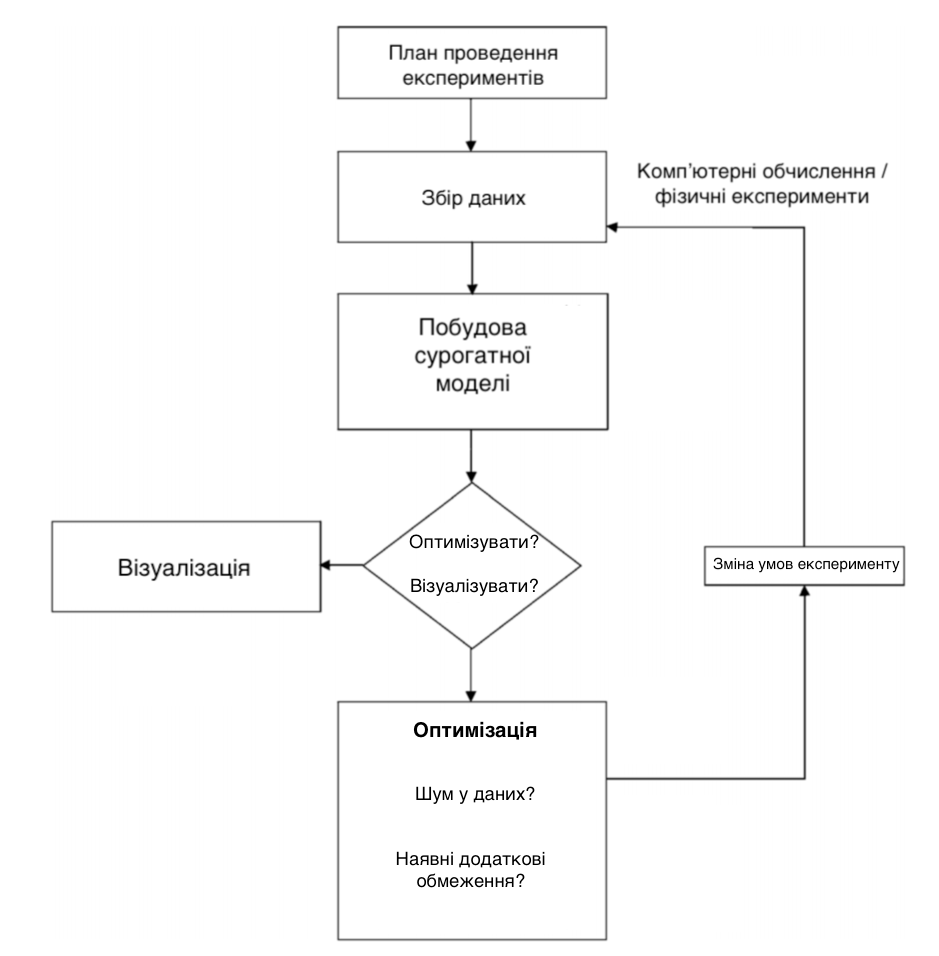
Одним із найпоширеніших застосувань математики у прикладних сферах – наприклад, інженерії – є використання математичних моделей для симуляції комплексних процесів. Водночас, основною проблемою залишається обчислювальна складність. Деякі обчислювальні експерименти можуть займати дуже великі об’єми часу (в рангах годин), і лінійний прогрес у сфері збільшення потужностей обчислювальних машин не в змозі задовільнити потребу у швидкому виконанні обчислень вищих порядків складності.

Проблема полягає також у тому, що під час процесу пошуку певних оптимальних значень для комплексної системи, характер дослідження змушує нас повторювати затратні обчислення багато разів на всій множині визначення вхідних параметрів, постійно шукаючи оптимальніше співвідношення між ними.

На таких міркуваннях базується ідея використання «сурогатної моделі» - знаходження швидкої для обчислення апроксимації для заданої складної математичної моделі. В цій роботі я розгляну основні етапи при роботі із сурогатними моделями, та опишу використання методу Крігінгу для побудови таких моделей.

1. **Процес роботи з сурогатними моделями**

Інженери використовують сурогатні моделі у багатьох сценаріях: прогноз поведінки складної для обчислень функції в області визначення; калібрація математичних моделей фізичних процесів з метою покращення точності без збільшення затрат на їх обчислення; очищення даних, отриманих внаслідок фізичних експериментів, від шуму; передбачення результатів для вхідних даних, для яких неможливо провести експеримент.

В усіх цих випадках алгоритм роботи з сурогатними моделями аналогічний. Його можна описати такою схемою: ****

1. **1 Вибір плану проведення експериментів**

Розглядатимемо певну неперервну функцію , де , для якої ми намагаємось побудувати сурогатну модель . Окрім припущення неперервності, все що ми можемо дізнатись про набір дискретних спостережень

.

Оскільки ці значення складні для обчислень, наше завдання – підібрати оптимальний для побудови хорошої моделі план проведення експериментів . Погано спроектований набір даних може привести до моделі, яка акуратна в своїх передбаченнях лише на певних ділянках .

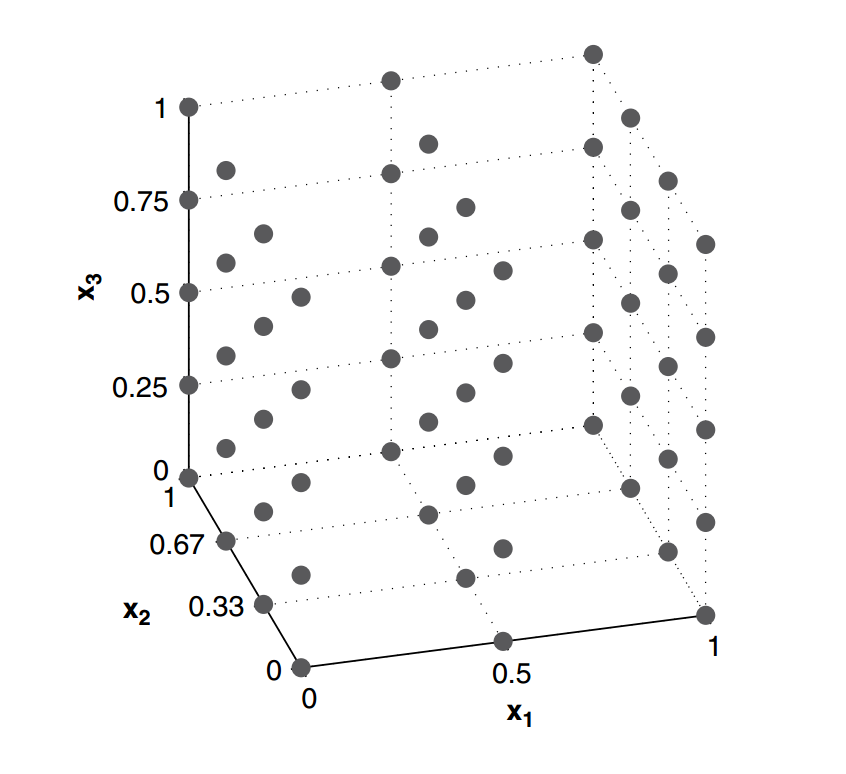
Загальною характеристикою всіх методів побудови сурогатних моделей є те, що вони значно точніші у своїх передбаченнях в околах Тому, основною метою при створенні плану проведення експериментів є рівномірний розподіл точок по всьому . План, що задовільняє такій вимозі, називатимемо таким, що заповнює простір (space-filling). (*Forrester A.I.J., Keane A.J. Engineering Design via Surrogate Modelling. 2008 – 1.4.1*)

1. **1. 1 Рівномірне розбиття простору**

Найпростіший спосіб задати подібне розбиття простору – заповнити його -вимірною сіткою рівновіддалених точок. Такий план, очевидно, заповнить простір, однак він містить ряд недоліків.

По-перше, якщо для досягнення певної точності необхідно точок у одному вимірі, для простору кількість обчислень функції зростає до . Такий план називається повним факторним експериментом. Оскільки ми прагнемо мінімізувати затрати на обчислення при підготовці даних, така тенденція є великим мінусом.

По-друге, план, створений описаним методом, негнучкий у своєму заповненні простору. На діаграмі 1.1 зображено рівномірне розбиття трьохвимірного простору. При проекції на осі, точки з цього розбиття накладатимуться, тому можна стверджувати, що для кожної із трьох змінних план може бути покращений певним зсувом точок вдовж відповідної осі.

****

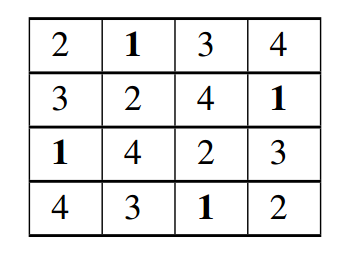
**Діаграма 1.1**

Цього можна досягти, розбивши відрізок допустимих значень цієї змінної на велику кількість рівних інтервалів, та заповнивши їх точками експерименту випадковим чином. Отриманий таким чином план називають *випадковою стратифікованою пробою*. Узагальнюючи цю ідею для всіх змінних, отримаємо техніку побудови плану експерименту, що називається *Латинський гіперкуб*.

1. **1. 2 Латинський гіперкуб**

Для опису побудови Латинського гіперкубу для -вимірного випадку, спершу проілюструємо його побудову для двохвимірного простору.

Якщо для досягнення бажаної точності моделі необхідно точок проведення експерименту, простір розбивається на підпростори рівномірною сіткою, після чого кожен рядок заповняється перестановкою так, щоб кожне число з’являлось у кожному рядку і стовпці лише один раз (Діаграма 1.2).

**

**Діаграма 1.2**

Після цього з кожного підпростору, позначеного, наприклад, **1**, вибирається одна точка у план проведення експерименту довільним чином. Такий квадрат називається *Латинським квадратом*, його відповідний -вимірний аналог – Латинським гіперкубом.

Побудований таким методом план гарантує, що при проекції на жодну з осей точки не будуть накладатись одна на одну. Це, однак, не гарантує того, що кожен такий гіперкуб заповнюватиме простір: наприклад, ми можемо отримати куб, де всі точки експерименту розміщені на головній діагоналі. Щоб характеризувати те, наскільки гіперкуб заповнює простір, скористаємось метрикою *мінімакс* (*Johnson et al. 1990*).

Нехай унікальні значення відстаней між усіма можливими парами точок у , посортовані у порядку зростання; набір значень, де кількість пар точок з , відстань між якими рівна . Ми називатимемо ***мінімаксним*** із всіх можливих планів, якщо в нього максимальне можливе і, серед всіх планів для яких ця умова виконується, мінімальне .

Відстанню між двома точками у вважатимемо *p-норму*:

У літературі немає переконливих демонстрацій переваги норми для певного *p* у контексті оцінки мінімаксом (*Forrester A.I.J., Keane A.J.*). Оскільки обчислення даної норми є найлегші при , надалі використовуватимемо її, якщо не вказано інакше.

Варто зазначити, що таке означення не завжди однозначно визначає мінімаксний план. Тому, скористаємося доповненням до означення, запропонованих *Моррісом і Мітчелом у 1995*:

– ***мінімаксний*** із всіх можливих планів, якщо в нього максимальне можливе , серед всіх планів, для яких ця умова виконується, мінімальне , серед всіх планів, для яких ця умова виконується, максимальне , … , мінімальне

Залишається додати, що задля спрощення обчислень та уникнення проблем із великими числами, перед початком проведення будь-яких обчислень ми нормалізовуємо до одиничного кубу .

1. **2 Побудова сурогатної моделі**

Отримавши з кроку **1.1** набір з пар значень , ми шукаємо функцію з простору функцій . Процес такого пошуку називається *контрольованим навчанням*.

Звісно, переважна більшість функцій з цього простору наближатимуть дуже погано; ми можемо значно звузити коло пошуку певними обмеженнями – наприклад, покласти що повинна бути неперервна – однак нам все одно доведеться обирати із безлічі функцій, що потенційно нам підходять.

Слід зазначити, що з метою тестування слід обрати певний набір тестових точок, незалежний від тренувального набору , та обчислити точне значення у цих точках. Його рекомендований обсяг - . При моделюванні реальних задач, ці додаткові затрати на обчислення потрібно враховувати при оцінці допустимого обсягу . Ці дані не слід використовувати під час тренування моделі, адже вони потрібні, щоб дати оцінку, наскільки добре передбачає значення у точках, на яких не проводилось навчання. Цей набір обиратимемо також за допомогою Латинського гіперкубу.

Для оцінки того, наскільки добре знайдена наближає , існує цілий ряд характеристик. Найчастіше вживаними із них є:

* Максимальне абсолютне відхилення ( розмір тестового набору даних):
* Середньоквадратичне відхилення:
* Коефіцієнт кореляції:

Щодо RMSE, можна вважати, що якщо його значення, поділене на розкид значень серед тестових , менше *0,1* (ця величина матиме значення від 0 до 1), модель дає достатньо хороші передбачення. Метрика не залежить від області значень *f* ; вона набуває значень від 0 до 1 та характеризує топологію функцій, не їх конкретні значення. Чим ближче до 1, тим краще модель передбачує функцію; приблизно відповідає RMSE = 0.1.

**2 Побудова сурогатної моделі**

Міри точності моделі: RMSE, r^2

1. **Крігінг**

Крігінг – хороший метод

**2.1 Опис методу**

Крігінг – особливий вид радіальної базисної функції.

Пояснення математики…

* 1. **Обчислення передбачення значень функції Крігінгом**

**Давати джерела в тексті**

**3. Програмна реалізація**

Опис програмної реалізації (Матлаб, то-то, структура рішення)

Як запустити, що отримається

1. **Результати числових досліджень**

Функція однієї змінної: Чи можна застосувати Крігінг?

Засікати час?

Графіки – в точці з найгіршим результатом

**Висновки**

**Список використаної літератури**