

Технология сбалансированной идентификации математических моделей (SvF): установка системы, подготовка файла-задания, примеры. (SvF_Linux_UserGuide_Rus_v.29)

Технология сбалансированной идентификации математических моделей (т.н. SvF-технология, от Simplicity vs Fitting) представляет собой перспективное направление прикладной математики, сочетающее методы структурного математического моделирования, оптимизации, адаптивной регуляризации и распределенных вычислений. Приводится описание принципов функционирования и практического применения SvF-технологии.

Введение

Технология сбалансированной идентификации математических моделей (**SvF** - Simplicity vs Fitting) предназначена для идентификации математических моделей на основе техник оптимизационного моделирования.

В основе технологии следующий взгляд на научное исследование:

- проекция объективной реальности в обозримый набор математических моделей,
- сравнение указанных моделей с целью выбрать ту, которая лучше других аппроксимирует (описывает) объективную реальность.

Построение математической модели можно разбить на этапы:

- формулировка целей исследования;
- построение общей (концептуальной) модели;
- анализ экспериментальных данных, включая планирование новых экспериментов;
- выбор (аналитической) математической модели и ее исследование;
- выбор конечномерной численной модели, аппроксимирующей, возможно бесконечномерную математическую;
- идентификация (определение параметров и зависимостей) модели на экспериментальных данных;
- верификация построенной модели, оценка погрешностей;
- анализ построенной модели, определение ее области применимости,
- использование построенной модели, например, для прогноза поведения исследуемого явления или объекта.

Указанный план, вообще говоря, требует много времени, знаний в различных областях математики и навыков программирования. Особенно “технические” этапы, начиная с третьего.

Целью технологии является освободить, по возможности, исследователя от рутины (знания и навыки не отменяются). В идеале, ему достаточно: собрать и сгруппировать имеющиеся данные измерений; сформировать математическое описание (модель); определить значения неизвестных параметров и/или функциональных зависимостей (идентификация); построить графики и оценки погрешностей описания для выбранной модели. После завершения расчета по выбранной модели он анализирует результаты. Если они не устраивают исследователя, то он может привлечь дополнительные данные или модифицировать модель (добавить/сократить параметры, изменить состав уравнений и т.д.). Затем можно провести расчет по измененной модели и количественно сравнить результаты с тем, что было получено для предыдущей модели.

Имеется отдаленное сходство SvF-технологии с методами «глубокого обучения», с одним важным отличием: в SvF-технологии «обучаются» не нейронные сети, достаточно универсального типа, а конкретные, структурные модели (включающие, например, системы интегро-дифференциальных уравнений), учитывающие представления исследователя об «устройстве» и принципах поведения/функционирования изучаемого явления.

1. Требования к ПО

- OS Linux
- Python 3.7.4+ (для экономии места на дисках, рекомендуется использовать реализации интерпретатора языка и менеджера пакетов Python в системе Miniconda, <https://docs.conda.io/en/latest/miniconda.html>)
- numpy 1.6.*
- matplotlib 1.5.*
- Pyomo 5.6.* , <http://www.pyomo.org/>
- Решатель нелинейных задач математического программирования Ipopt 3.12.* , <https://github.com/coin-or/Ipopt>
- Для проведения масштабных расчётов желательно использование платформы Everest, <http://everest.distcomp.org/> в частности, приложения SSOP, <https://optmod.distcomp.org/apps/vladimirv/solve-set-opt-probs>, позволяющего одновременно решать набор оптимизационных задач на вычислительных ресурсах, подключённых к системе <https://optmod.distcomp.org>. Для этого нужно будет зарегистрироваться на сайте <https://everest.distcomp.org/> или <https://optmod.distcomp.org>.

2. Установка системы

Стабильная версия программной реализации SvF-технологии свободно доступна в Git-репозитории <https://github.com/distcomp/SvF>.

Если вас интересует «крайняя» версия, то за установочным файлом SvF.zip или за доступом к нему через Gitlab следует обратиться к Александру Соколову, alexander.v.sokolov@gmail.com.

1. Файл SvF.zip распакуйте в любой удобный для Вас каталог.
2. Файл runSvF29.sh из каталога SvFp скопируйте в /home/ВашеИмяПользователя/bin. Затем откройте его в любом текстовом редакторе, найдите там строку «python /home/sokol/SvF/Lib29/_START.py» и укажите правильное месторасположение файла _START.py в соответствии с каталогом, выбранным в п. 1.
3. Для установки свободно доступных пакета Pyomo и решателя Ipopt либо используйте инструкции на сайтах, указанных в разделе 1, либо обратитесь за консультацией к А. Соколову.
4. Для использования внешних распределенных ресурсов необходимо зарегистрироваться на <https://everest.distcomp.org/> или <https://optmod.distcomp.org>.
5. `conda install openpyxl`
6. `conda install -c conda-forge ezodf`

Рис. 1. Технологический цикл SVF-технологии.

Математическое описание и ссылки на файлы данных нужно формализовать в файле вычислительного задания в текстовом формате с расширением *.mng* или в формате Open/Libre Office *.odt*. Далее для краткости, файл вычислительного задания будем называть *mng-файл*.

Для запуска программы в каталоге, содержащем *mng* –файл, в командной строке наберите `$ bash runSvF29.sh`.

Если таких файлов несколько, система предложит осуществить выбор.

Возможен также запуск с явным указанием файла задания: `$ bash runSvF29.sh ИмяФайла`.

Такой способ предпочтителен, если в каталоге содержится несколько файлов с расширением *.mng* или *.odt*.

В процессе обработки файла-задания система преобразует его содержание в программу на языке Python (StartModel.py+ Model.py). При этом для описания задач математического программирования будут использоваться средства пакета Pyomo (Python Optimization Modeling Objects), <http://www.pyomo.org/>. Исходные данные задач оптимизации в итоге преобразуются в т.н. NL-файлы (*.nl) в формате, принятом в одном из самых распространенных стандартов оптимизационного моделирования AMPL, <https://ampl.com/>. Именно эти файлы отправляются AMPL-совместимым решателям, например, COIN-Or Ipopt. Результаты решения возвращаются в виде т.н. SOL-файлов (*.sol), данные из которых извлекаются также с помощью Pyomo.

Программа выполняется с использованием вычислительных ресурсов, которые указываются средствами Everest API, <https://gitlab.com/everest/python-api/>, см. пример <https://github.com/distcomp/pyomo-everest/blob/master/ssop/demoUseSsop.py> (ищите ssop_config.SSOPP_RESOURCES).

Начальные значения параметров регуляризации считываются из файла (возможно их задание командой Penalty), имя которого формируется из имени *mng*-файла заменой расширения на *.res* (далее – *res*-файл).

Если в каталоге имеются файлы решений (*.sol), то они используются в качестве начального приближения.

Результаты расчетов (найденные решения) сохраняются в виде графических (*.png) и текстовых (*.sol) файлов, значения найденных параметров регуляризации и найденные оценки погрешностей сохраняются в *res*-файле. Если имя *res*-файла не задано явно, оно формируется из *mng*-файла, заменой расширения имени на *res*.

4. Файл вычислительного задания

Текстовый *mng*-файл содержит полное формальное описание задачи идентификации неизвестных параметров и функциональных зависимостей математической модели. Этой информации достаточно для численного решения на основе технологии сбалансированной идентификации (SvF-технологии). Для этого используются специальные ключевые слова, определения (декларации) системы SvF, математические выражения в достаточно естественной нотации и (если это необходимо) операторы на языке Python.

С целью повышения наглядности математической задачи, в описания допускается использование некоторых специальных символов (см. Табл1)

Табл. 1. Специальные символы и их имена в программе на языке Python.

'Σ'	'\\sum'
'∫'	'\\int'
'∈'	'\\in '
'√'	'sqrt'
'•'	'*'
'\"'	'apst'
'τ'	'tau'
'μ'	'muu'
'π'	'pi'
'α'	'alpha'
'σ'	'sigma'
'ξ'	'xi'
'Ω'	'Omega'

Порядок следования операторов - произвольный, однако определение объекта должно предшествовать ссылке на него. Нотация является позиционной (как в языке Python). Однако, ключевые слова, заканчивающиеся двоеточием (*Var*:, *Set*:, *EQ*: и др.) начинают блок описаний.

Идущие далее описания наследуют ключевое слово, если они не начинаются с первой позиции. Блок заканчивается на любом операторе (кроме '#'), записанном с первой позиции файла. Кроме того необходимо помнить, что описание целевой функции (или функций) запускает расчеты и следующий за ним код предназначен только для обработки результатов.

При написании параметров системы (параметров, управляющих расчетами) и ключевых слов не имеет значения регистр символов (можно использовать прописные и строчные буквы). Символ '\' означает продолжение текста на следующей строке.

Рекомендуется следующая структура mng-файла:

- Управляющие параметры (например, `ExitStep = 1e-6`);
- Источники данных (измерений) (например, `Select * from ABC.txt where ...`);
- Множества (сетки) дискретизации (например, `SET: t = [t_min, t_max, t_step]`);
- Функции-параметры (например, `PARAM: Q(t)`);
- Функции-неизвестные (например, `VAR: E(t); >=0`);
- Уравнения (например, `EQ: E = Cond (Q,T) •VPD`)
- Целевая функция (функции) (например, `OBJ: x.Complexity (Penal[0]) + x.MSD())`
- Обработка результатов (например, `Draw Q`)

Ниже в примерах мы будем постепенно вводить различные конструкции и примеры нотации.

5. Примеры постановки, формализации и решения различных задач.

5.1. Модель движения «Маятник с трением».

Подробно математическая постановка ряда задач выбор модели, описывающей данные, искусственно подготовленные при помощи формулы осциллятора и датчика псевдослучайных чисел, и последовательный анализ моделей приведены в работах (Sokolov, Voloshinov, 2020), (Соколов, Волошинов, 2018), указанных выше. Здесь мы ограничимся краткими постановками

и подробным обсуждением их формализации – описанием файла задания. Соответствующие «цифровые» постановки и результаты расчетов находятся в каталогах *SvF/Examples/1-Oscillator* (дистрибутива SvF).

Форматы исходных данных

Исходные данные для идентификации задач находятся в файлах *Spring5.dat* и *Spring5.xlsx*.
Фрагмент текстового файла *Spring5.dat*:

```
t      x_f      x      #SvFver_62_tbl
-1.0      0.0691932442765      -0.0113286164626
-0.825      0.223051530384      0.191218514986
-0.65      0.407965450633      0.379565282838
. . .
```

Первая строка содержит названия столбцов (t x_f x) и символическую кодировку формата (#SvFver_62_tbl). Остальные строки содержат значения соответствующих переменных.

Аналогичные данные в формате MS Excell приведены в фрагменте файла *Spring5.xlsx*:

```
time      position      #END#
-1.0      -0.0113286164626
-0.825      0.191218514986
-0.65      0.379565282838
.
2.5      1.28494258671
#END#
```

Первая строка содержит названия столбцов, далее идут соответствующие значения.
Комбинация #END# (необязательная) ограничивает размеры таблицы

0- $x(t)$ – функция одного переменного (сплайн-аппроксимация, непараметрическая регрессия): ($x(t)$ -full.mng, $x(t)$ -short.mng, $x(t)$ -very_short.mng,).

Задача состоит в поиске функции $x(t)$, аппроксимирующей экспериментальные данные из файла *Spring5.dat*.

Файл-задание ($x(t)$ -full.mng) на поиск функции $x(t)$:

```
CVNumOfIter = 21      # максимальное кол-во итераций поиска весов регуляризации
CVstep      = 21      # кол-во подмножеств для процедуры кросс-валидации
Select x, t from ../Spring5.dat      # считывание столбцов x, t из файла ../Spring5.dat
t_min = -1.0      # левая граница интервала
t_max = 2.5      # правая граница интервала
SET: T = [t_min, t_max, 0.025]      # множество T от t_min до t_max с шагом 0.025
VAR: x ( t ); t ∈ T      # неизвестная функция, заданная на множестве T
OBJ: x.MSD() + x.Complexity(Penal[0])      # целевая функция – смешанный критерий выбора x(t)
Draw x      # отображение найденной функции x(t)
EOF      # конец файла, все что дальше опускается
```

Смысл операторов кратко поясняется в комментариях (после #).

При выполнении оператора Select данные из файла попадают в программу с именами x, t. При описании сеточной функции (декларации SET) первый параметр определяет минимальное значение равное t_min, второй – максимальное значение t_max, третий параметр определяет шаг сетки 0.025. Затем при описании неизвестной функции $x(t)$ (оператор VAR:) они связываются с такими же именами x, t. Такая связь позволяет рассчитать среднеквадратичное отклонение неизвестной от данных в целевой функции - $x.MSD()$ (оператор OBJ:). Другое

слагаемое $x.Complexity(Penal[0])$ определяет взвешенный ($Penal[0]$) штраф за кривизну искомой кривой.

Возможна более короткая запись задания в файле $x(t)$ -shot.mng (красным цветом выделены изменения относительно предыдущей версии):

```
CVNumOfIter = 21          # максимальное кол-во итераций поиска весов регуляризации
CVstep       = 21          # кол-во подмножеств для процедуры кросс-валидации
Select * from ../Spring5.dat # считывание всех столбцов из файла ../Spring5.dat
SET:  t = [  , , 0.025]    # множество t от min до max значений t из файла с шагом 0.025
VAR:  x ( t )              # неизвестная функция, заданная на множестве t
OBJ:  x.MSD() + x.Complexity(Penal[0]) # целевая функция – смешанный критерий выбора x(t)
Draw  x                    # отображение найденной функции x(t)
EOF                                     # конец файла, все что дальше опускается
```

Знак * в операторе *Select* означает считывание всех данных, в том числе и столбцов t и x . Множество, определяющее область определения обозначается t . Через это имя осуществляется связь со столбцом данных t , что позволяет опустить первые два аргумента (в операторе *SET*), заменив их на минимальное и максимальное значения их всех значений одноименного столбца.

Еще более короткая запись вычислительного задания приведена в файле $x(t)$ -very_shot.mng:

```
Select * from ../Spring5.dat # считывание всех столбцов из файла ../Spring5.dat
VAR:  x ( t )              # неизвестная функция, заданная на множестве t
OBJ:                                     # целевая функция по умолчанию: x.MSD() + x.Complexity(Penal[0])
Draw                                     # отображение всех функций
```

Если значения некоторых управляющих параметров не заданы, при выполнении задания они получают значения по умолчанию. Например, для параметра *CVstep*, определяющего число частей (подмножеств), на которые разбивается набор экспериментальных данных при перекрестной проверке (cross validation) это значение 7 частей. Другой опущенный параметр *CVNumOfIter* (максимальное кол-во итераций поиска весов регуляризации) примет значение по умолчанию 20. Заметим, что такое изменение может привести к некоторому изменению результата. Описание множества t происходит автоматически. Если целевая функция не задана (но ключевое слово *OBJ*: присутствует), то автоматически добавляется простейшая функция. Оператор *Draw* отображает все функции задачи. Наконец, *EOF* необязателен в конце файла.

Приведем еще один вариант записи файла задания с использованием записи формул в формате .odt (файл $x(t)$ _InternalInternalOrganization.odt).

Задание на проведение расчетов

```
BoF-SvF # Файл-задание обрабатывается с этой команды
CVNumOfIter = 7 # максимальное кол-во итераций поиска весов регуляризации
CVstep = 21 # кол-во подмножеств для процедуры кросс-валидации

Select x, t from ../Spring5.dat # считывание столбцов x, t из файла ../Spring5.dat

tmin = -1.0 # левая граница интервала
tmax = 2.5 # правая граница интервала
step = 0.025 # шаг

SET: T = [tmin, tmax, step] # множество T от t_min до t_max с шагом 0.025

VAR: x ( t ); t ∈ T # t \in T # неизвестная функция, заданная на множестве T

co.testSet, co.teachSet = MakeSets_byParts ( x.NoR, co.CVstep ) # обучающие и тестирующие множ
CODE: x.mu = Gr.mu; x.testSet = co.testSet; x.teachSet = co.teachSet # обеспечение CV для x

# целевая функция - смешанный критерий выбора x(t):
# первое слагаемое - мера близости решения к исходным данным
# второе слагаемое - мера сложности (кривизны) решения
OBJ: 
$$\sum_{i=0}^{20} Gr.mu[i] * (x.V.dat[i] - x.A[0].dat[i] + tmin))^2 / x.V.sigma2 / \sum_{i=0}^{20} Gr.mu[i]$$

      + Penal[0] *  $\int_{tmin+step}^{tmax-step} dT (d2/dT^2(x(T)))^2 / 14.5$ 

Draw x # отображение наценной функции x(t)
EOF # конец обработки задания, все что дальше опускается
*****
```

Здесь явно описаны:

- создание обучающих и тестирующих множеств (если этот оператор отсутствует, множества создаются автоматически),
- “подключение” функции x(t) к процессу перекрестной проверки (если эти операторы отсутствуют, они создаются автоматически. Ключевое слово CODE: означает, что операторы должны попасть в оптимизирующую (Ruoto) часть программы),
- задание целевой функции с использованием редактора формул (первое слагаемое соответствует x.MSD(), второе - x.Complexity(Penal[0]))

1-differential_equation_1 - дифференциальное уравнение 1-ого порядка: правая часть полином.

Файл-задание (MNG-dif-1.mng) на поиск функций x(t) и f(t):

```
CVNumOfIter = 21 # максимальное кол-во итераций поиска весов регуляризации
CVstep = 21 # кол-во подмножеств для процедуры кросс-валидации
Select time AS t, position AS x from ../Spring5.xlsx # считывание данных из таблицы ../Spring5.xlsx
# столбец time переименовывается в t,
position - в x

SET: t = [ , , 0.025] # область определения функции x(t)
      X = [ 0, 2.2, 0.1 ] # область значений (с запасом) функции x(t)
VAR: x ( t ) # искомая функция
      f ( X ); PolyPow = 5 # искомая правая часть - полином 5-ой степени
EQ: d/dt(x) = f(x) # дифференциальное ур-ие
OBJ: x.MSD() + f.Complexity ( Penal[0] ) # целевая функция - смешанный критерий выбора x(t)
Draw # отображение всех функции: x(t) и f(x)
```


Две новые конструкции: неизвестная функция $f(x)$, представляемая полиномом 5-ой степени ($PolyPow = 5$) и конструкция EQ:, определяющая дифференциальное уравнение. Выражение d/d означает оператор дифференцирования, в данном случае дифференцирование функции x по t .

1G-differential_equation_1 – дифференциальное уравнение 1-ого порядка: правая часть сглаженная ломаная.

Файл-задание (MNG-dif-1G.mng) на поиск функций $x(t)$ и $f(t)$ отличается от рассмотренного выше одной строкой:

вместо записи $f(X); PolyPow = 5$ # искомая правая часть - полином 5-ой степени
стоит запись $f(X); VarType = G$ # искомая правая часть - сглаженная ломаная.

Сглаженная ломаная – специальная непрерывно-дифференцируемая конструкция, аппроксимирующая ломаную.

2-differential_equation_2 – дифференциальное уравнение 2-ого порядка.

подробным описание модели можно ознакомиться здесь:

<http://injoit.org/index.php/j1/article/view/612>

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = f\left(x, \frac{dx}{dt}\right), x \in C^2(t_{\min}, t_{\max}), f \in C^2(G), G \subset R^2$$

Файл-задание (MNG-dif-2.mng) на поиск функций $x(t)$ и $f(t)$:

```
CVNumOfIter = 21          # максимальное кол-во итераций поиска весов регуляризации
CVstep       = 21          # кол-во подмножеств для процедуры кросс-валидации
Select t, x from ../Spring5.dat # считывание данных
SET:  t = [ , , 0.025]      # область определения функции x(t)
      X = [ -0.1, 2.2, 0.1 ] # область значений (с запасом) функции x(t)
      V = [ -1, 1.5, 0.1 ]   # область значений (с запасом) функции v(t)
VAR:  x(t)                  # искомая функция
      v(t)                  # искомая функция
      f(X, V); PolyPow = 6  # искомая правая часть - полином 5-ой степени от x и t
EQ:   d2/dt2(x) == f(x,v)   # дифференциальное ур-е 2-ого порядка
      v == d/dt(x)          # дифференциальное ур-е 1-ого порядка
OBJ:  f.Complexity(Penal[0], Penal[1])/x.V.sigma2 + x.MSD() # критерий выбора x(t),v(t) и f(x,t)
Draw  x                     # отображение функции x(t)
PI = Polyline (x, v, None, 'Trajectory') # ломаная, состоящая из точек {xi,vi}
PI.Y[0] = PI.Y[1]           # прячем 0-ую точку
PI.Y[-1] = PI.Y[-2]         # прячем последнюю точку
Draw f Trajectory;LC:red    # отображение функции f(x,v) и траектории решения
```

Конструкция VAR: $f(X, V); PolyPow = 6$ описывает неизвестную от двух переменных, заданную на множестве $X \times V$ полиномом 6-ой степени. *Polyline* (полилиния) – ломаная линия, задаваемая набором пар точек (x, v) . Последний оператор – отображение функции двух переменных (линиями уровня) и траектории системы в координатах x и v (линия красного цвета).

3-Oscillator_K_Mu_xr – Осциллятор с вязким трением (дифференциальное уравнение 2-ого порядка с неизвестными коэффициентами).

Использование формата .odt (и соответствующего редактора LibreOffice Writer) позволяет существенно улучшить наглядность представления задания:

- различные фонты, цвета, типы и жирности текста,
- возможность использования математических символов, греческого алфавита и т.д.,
- возможность набирать формулы в редакторе форм,
- возможность добавлять в файл дополнительные (не влияющие на расчеты) элементы.

Например, словесная или схематическая постановка задачи, результаты в виде графиков, найденные погрешности и т.д.

Ниже приведен фрагмент файла-задания (Oscillator_K_Mu_x.odt или Oscillator_K_Mu_xr_ChDir.odt) на поиск функции $x(t)$ и коэффициентов K , μ , xr (уже описанные конструкции отмечены серыми комментариями):

```
*****
BoF-SvF                                     # Файл-задание обрабатывается с этой команды
# ChDir = ./3-Oscillator_K_Mu_xr           # Рабочий каталог перемещается в ./3-Oscillator_K_Mu_xr
CVNumOfIter = 50                           # максимальное кол-во итераций поиска весов
регуляризации
CVstep = 21                               # кол-во подмножеств для процедуры кросс-
валидации
DIF1 = Central                             # использование центральной схемы аппроксимации
производной
Select x, t from ../Spring5.dat            # считывание данных
GRID: t ∈ [ -1., 2.5, 0.025 ]             # область определения функции x(t) и v(t)

Var:      x ( t )                          # искомая функция
          v ( t )                          # искомая функция
          K                                # неизвестный параметр – жесткость пружины
          Δx                               # неизвестный параметр - смещение точки
крепления (Deltax)
          μ                                # неизвестный параметр - вязкость среды (в формуле
Стокса),
          # (в программе заменяется на muu)
# EQ: d2/dt2(x) == - K * (x - Δx) - μ*v    # обычная запись ур-ия – без редактора формул

EQ:      
$$\frac{d^2}{dt^2}(x) == -K * (x - \Delta x) - \mu * v$$
      # формулы набираются в редакторе формул
          
$$v == \frac{d}{dt}(x)$$

          # дифференциальное ур-ие 1-ого порядка
OBJ: x.Complexity ( Penal[0])/x.V.sigma2 + x.MSD() # критерий выбора
Draw                                           # отображение функций
EOF                                           # конец обработки задания
*****
```

Все, что находится до **BoF-SvF** и после **EOF**, опускается.

Иногда удобно хранить файл задания в каталоге отличном от каталога со всеми файлами задачи. Что бы изменить рабочий каталог используется команда ChDir.

Первую производную можно аппроксимировать по-разному, в том числи **DIF1 = Central**.

В тексте используются символы ϵ , Δ и μ . Естественно, в тексте программы они заменяются на буквенные выражения.

Формулы набираются в редакторе формул (хранение в формате LaTeX).

5.2. Covid

To be done

5.3. ThermalConductivity

To be done

5.2. Мультипликативное представление функций.

Пример 5.2а. Модель транспирации $E = Ust(Q, VPD) \cdot VPD$

С подробным описанием можно ознакомиться в статье

https://www.matbio.org/2019/Sokolov_14_665.pdf

RunSolver L&S # Параллельные расчеты ведутся на удаленном сервере

py_max_iter = 15000 # Опция максимальное кол-во итераций для solver

CVNumOfIter = 21 # Максимальное кол-во итераций CV

ExitStep = 1e-6 # Контроль сходимости. Завершение по малости смещения

useNaN # useNaN – строки с отсутствующими данными считываются

Select ROWNUM AS t, I As Q, Ta As T, WPD As VPD, Enan As E, Pnan As P, Dat, NN, PRel, ERel \\
from ../DATA/Phot-5short.xlsx

MakeSets_byParam Dat 11 # CV procedure parameters – 11 subsets by Dat

Set: t = [0, , 1] # Time - number of point (first=0)

Param: VPD(t)

Q (t)

T (t)

Var: E (t)

EoD # Закрывает открытую таблицу. Здесь можно не закрывать.

Var: Cqv (Q , VPD); Q \in [, , -50]; VPD \in [, , -50]

EQ: E = Cqv (Q , VPD) • VPD • 0.0101495726495726

E(t) = Cqv (Q (t), VPD (t)) • VPD(t) • 0.0101495726495726

E(t) = Cqv (Q (t), VPD (t)) • VPD(t) • 0.0101495726495726; t \in t

Obj: Cqv.Complexity (Penal[0],Penal[1]) + E.MSDnan()

DrawTransp # транспонирует двумерные рисунки.

DrawVar # готовит графики только для функций-переменных

EOF

Здесь появляется новое ключевое слово *Param*:, которое открывает блок описания функций-параметров. Они участвуют в расчетах как заранее заданные функции и поэтому должны быть определены до начала расчетов. В данном примере VPD(t), Q(t) и T(t) считываются (на основе совпадения имен переменных и аргументов с именами столбцов) из таблицы *Phot-5short.xlsx*.

Ключевое слово EQ: (equation) задает связь $E = Cqv (Q , VPD) \cdot VPD \cdot 0.0101495726495726$ между функциями E, Cqv, Q и VPD. Это сокращенная запись – более подробная нотация находится в закомментированных строках ниже.

DrawVar – готовит графики только для функций-переменных.

5.4. Интегральные уравнения

Пример 5.4а. Математическая модель: fast nonlocal heat transport in magnetic fusion plasmas.

С подробным описанием модели можно ознакомиться здесь: <http://arxiv.org/abs/1901.03789>

Здесь приводится формальная математическая постановка. Однако некоторые элементы описания содержат дополнительную информацию, необходимые для дальнейших преобразований, например, при описании множеств, шаг дискретизации.

Константы:

$$Frac_{min} = 0.5 Frac_{max} = 10$$

$$r_step = 0.01$$

$$t_step = 0.005$$

$$t_{inj} = 6.994$$

$$t_{min} = t_{inj}$$

$$t_{max} = 7.1$$

$$r_{max} = 0.44$$

$$r_{pp} = 0.9$$

$$q_{max} = 3 \quad \# \text{ Только для 7 разряда}$$

Множества:

$$\text{Set: } t = [t_{min}, t_{max}, t_step]$$

$$r_m = [0, r_{max}, r_step]$$

$$r_p = [0, r_{pp}, r_step]$$

неизвестные

$$\text{Var: } P(r_m, t);$$

$$\# A_{bs}(r_p); \geq 0$$

$$A_{bs}(r_m); \geq 0$$

$$Ame_{bs}; \geq 0$$

$$qme; \geq 0 \quad \#(9)$$

$$\# I(t); \geq 0$$

$$Isr(t); \geq 0$$

$$F_{out}(t); \geq 0.01; \leq 0.2 * \pi \quad \#(7)$$

$$\# I0; \geq 0$$

$$Isr0; \geq 0$$

$$F_{out}0; \geq 0.01; \leq 0.2 * \pi \quad \#(7o)$$

$$AbsGTr_m; \geq 0$$

известные

$$\# \text{Парам: } P(r_m, t)$$

уравнения

$$\text{EQ: } A_{bs}(r_m) * (Isr(t) - Isr0) = P(r_m, t) \quad \#(1)$$

$$Isr(t) = 2 * qme / (\sqrt{4 * qme * F_{out}(t) + Ame_{bs} * 2 + Ame_{bs}}) \quad \#(4)$$

$$Isr0 = 2 * qme / (\sqrt{4 * qme * F_{out}0 + Ame_{bs} * 2 + Ame_{bs}}) \quad \#(4o)$$

$$\int \square \frac{2}{r_{pp} * 2} * \int_0^{r_{max}} A_{bs}(r) * r * dr \quad \#(5)$$

$$Ame_{bs} \geq \int \square * (Frac_{min} + 1) \quad \#(5a)$$

```


$$Ame_{bs} \leq \int \square * (Frac_{max} + 1$$

# (5b)
Amebs**2 * (1+Fout(t)) <= qme # (6)
Amebs**2 * (1+Fout0) <= qme # (6o)
AbsGTrm = i # (11)
# Isr(t) =  $\sqrt{I(t)}$  # (S1)
# Isr0 =  $\sqrt{I0}$  # (S1o)

1/WF < Fout(t)/Fout0 < WF, # (12)
#Пробные значения
WF = 10, 2

```

Файл-задание

```

# ПАРАМЕТРЫ РАСЧЕТОВ:
CVstep      = 13
CVNumOfiter = 0
ExitStep     = 1e-7

# КОНСТАПТЫ:
##### 7
t_inj7      = 6.994
qmax7       = 5 #3
##### 8
#t_inj      = 7.497
#qmax       = 6
#####
Frac_min    = 0.5
Frac_max    = 10
W_F         = 10.2
r_step      = 0.02
t_step      = 0.005
t_min7      = t_inj7
t_int       = 0.05
r_max       = 0.44
r_pp        = 0.9

# МНОЖЕСТВА (СЕТКИ):
GRID: t = [0, t_int, t_step]
      r_m = [0, r_max, r_step]
      r_p = [0, r_pp, r_step]
Tbl = Select r As r_m, tm As t, Pi As P7, Pi As pP7 from ../27-002Pi_T(r,t)n(r)-21/Pi(r,tm).sol
Tbl.dat('t')[:] := t_min7

# НЕИЗВЕСТНЫЕ И ПАРАМЕТРЫ
Var: P7(r_m,t)
Param: pP7(r_m,t)
EOD

Var: A_bs(r_m); >=0
      Ame_bs; >=0
      qme7; >=0; <= qmax7 # bounds = [0, qmax7] # (9)

```

```

Isr(t);           >=0
F_out(t);         >=0.01; <= 0.2*pi      # bounds = [0.01, .2*pi]      #(7)
Isr0;             >=0
F_out0;           >=0.01; <= 0.2*pi #      bounds = [0.01, .2*pi]      #(7o)
Int_r_m;          >=0
AbsGTr_m;         >=0

# УРАВНЕНИЯ
EQ:  A_bs(r_m) • (Isr(t)- Isr0) = P7(r_m,t)      # (1)
Isr(t) = 2•qme7/(√(4•qme7•F_out(t)+Ame_bs**2)+Ame_bs)      # (4)
Isr0 = 2•qme7/(√(4•qme7•F_out0 +Ame_bs**2)+Ame_bs)      # (4o)
Int_r_m = 2/(r_pp**2)•∫( 0, r_max, dr_m•A_bs(r_m)•r_m )      # (5)
Ame_bs <= (1+Frac_max) • Int_r_m      # (5a)
Ame_bs >= (1+Frac_min) • Int_r_m      # (5b)
AbsGTr_m=(Ame_bs- Int_r_m)•r_pp**2/(r_pp**2-r_max**2)      # 11
Ame_bs**2 • (1+F_out(t)) <= qme7      # (6)
Ame_bs**2 • (1+F_out0 ) <= qme7      # (6o)
F_out0 <= F_out(t) * W_F      # 12
F_out(t) <= F_out0 * W_F      # 12

```

Obj: A_bs.Complexity (Penal[0]) + Isr.Complexity (Penal[1]) \

+ F_out.Complexity (Penal[2]) + P7.MSD()

DrawTransp

Draw

EOF

Новые конструкции:

- 1) Tbl.dat('t')[:] -= t_min7 – оператор (Python): для столбца с именем 't' таблицы Tbl уменьшить все значения на t_min7
- 2) $\sqrt{4 \cdot qme7 \cdot F_out(t) + Ame_bs^{**2}}$ -> sqrt (4•qme7•F_out(t)+Ame_bs**2);
- 3) $\int(0, r_max, d(r_m) \cdot A_bs(r_m) \cdot r_m)$ – интеграл от 0 до r_max для выражения d(r_m)•A_bs(r_m)•r_m. Дифференциал d(r_m) – стоит на первом месте!

Целевая функция (Obj:) состоит из штрафов за кривизны трех функций (A_bs, Isr, F_out) и среднеквадратичного отклонения P7 от данных.

6. Параметры и операторы файла вычислительного задания (.mng)

Переменных с именами d и d2 лучше избегать – они зарезервированы как символы-дифференциалов.

6.1. Функции

x.ComplCycle(Penal[0]) – расчет кривизны циклической функции

x.ComplCycOE(bets) первая точка должна быть равна последней

6.2. Управляющие параметры

RunMode = 'P&L' – строка указывает где и как будет решаться задача.

Первая часть (символ до '&') определяет способ решения задачи на полном количестве данных (одна штука). Вторая часть – решение редуцированных задач для процесса CV (много штук).

Каждая часть может принимать значения:

'L' – задача решается локально на машине её запустившей без создания NL-файлов

'P' – задача решается локально на машине её запустившей с созданием NL-файлов

'S' – задача решается на удаленном сервере (с созданием NL-файлов).

Для ресурсоемких задач предпочтителен вариант 'L&S' – первая задача решается локально (можно проверить все ли правильно), второй набор отправляется на кластер.

DIF1 = Central

EOF

printL = 1 По умолчанию 0

SavePoints – сохранять точки в *.txt (кроме решения). По умолчанию False

resFile abc.res – явное задание res-файла

Penalty = [.1, 0.002] - задание параметров регуляризации

6.3. Опции сервера

6.4. SET: (or GRID:)

SET: t = [-1., 2.5, 0.025]

gx = [-0.1, 2.2, 0.1]

gv = [-1, 1.5, 0.1]

6.5. Select - некоторое небольшое подмножество языка SQL

Select r As r_m,tm As t, Pi As P_RTP, Pi As pP_RTP from ../27-Pe_Pi/Pi(r,tm).sol

Select r As r_m,tm As t, Pi As P_RTP, Pi As pP_RTP from ../27-Pe_Pi/Pi(r,tm).sol As Tbl

Tbl = Select r As r_m,tm As t, Pi As P_RTP, Pi As pP_RTP from ../27-Pe_Pi/Pi(r,tm).sol

Если требуется работа с записями таблицы (Tbl), лучше использовать вариант (Tbl=)

Select x, t from *Spring5.dat* where x>=1 and t==100

Select * from *Spring5.dat*

ROWNUM - Поле номера записи по порядку

EoD - Закрывает открытую таблицу. Во избежание путаницы (имен столбцов с другими именами), лучше закрывать.

Select X,Y, num as Z from Les.xyz where Z==2

useNaN # use NaN values in experimental data

6.6. WriteSvFtbl

WriteSvFtbl "tmp.txt" - Сохранение таблицы в текстовый файл

6.7. CV

CVstep = 7 – разбивает множество данных на 7 подмножеств :

[[0,7,14...], [1,8,15...] ... [6,13...]]

MakeSets_byParam ParamName =Data Every =3 Margin =0

MakeSets_by Param Data 13 4

разбивает множество данных на 13 подмножеств на основе столбца Data

В обучающей последовательности убирает поля (по 4 до и после)

Важно при работе с временными рядами.

MakeSets_byParts Every =3 PartSize =96 Margin =4

MakeSets_byParts 3 96 4

По умолчанию Every=7, PartSize = 1; Margin=0

CVstep = 7 – разбивает множество данных на 7 подмножеств :

[[0,7,14...], [1,8,15...] ... [6,13...]]

Оператор 'MakeSets_byParam Dat 11' задает разбиение множества данных (для перекрестной проверки) на 11 подмножеств по значению элементов столбца 'Dat' текущей таблицы.

6.8. VAR: - переменная (искомая) функция

PolyPow - степень полинома

Var: $x(t)$; $t \in [, 2.5, 0.025]$; $x \in [-6., 7]$; # ≤ 7 ; ≥ -6

$v(t)$

$f(gx, gv)$; PolyPow = 6

var: $x(t)$; $t \in t64$; $x \in [-10., 10]$;

$x(t)$; DataFile = ../DATA/Spring5.dat

$x(t)$; Select x, t from ../DATA/Spring5.dat

d/d(t) - полный интервал автоматически уменьшается на шаг

VAR: $T(\rho, t)$; $t \in \text{Time}$; $\rho \in R_p$; $T \in [0, \text{delH2O}]$; PolyPow = 5;

$E(t)$; $t \in [0, t_{\max}, 1]$; ≥ 0

DataFile = T.txt;

initialize = 1

Reg (gWD); PolyPow = 7; ≤ 1 - как EQ:

Var: $S(t) > 0$

Var: $S(t) \in [0, 100]$

6.9. PARAM: - функция заданный параметр (не изменяется в процессе оптимизации)

Param Ust (Q , T) # Если InFile не задан, считывается из файла по умолчанию.

Param: Position(x,y) = -1.2; #initialize = -1.2

Param: $S(t) = SS(t).sol$ #из файла считываем все (И Set), но сохраняем имена S и t

Param: $S(t)$; DataFrom = S(t).sol # берем только данные

6.10. EQ: - уравнение

EQ:

$d^2/dt^2(x(t)) == f(x(t), v(t))$; #t <> 1

$v(t) = d/dt(x(t))$

$v(t17) == d/dt17(x(t17))$; $t17 \in t$; ; $t17 <> 1$

$v(t17) \geq d/dt17(x(t17))$; $t17 \in [-1., 2.5, 0.025]$

Можно использовать условные операторы

if ..cond.. : $d(PHqt(gQ, gT))/d(gQ) \geq 0 \Rightarrow$ if not (..cond..) : return Constraint.Skip

Можно использовать спец. функции

$\int_r (0, 2, f) - \text{rectangle} = f(0) + f(1)$ для шаг = 1

$\Sigma (i=0, 21, \mu(i))$

6.11. OBJ:

OBJ: $f.Complexity ([Penal[0], Penal[1]]) / x.V.sigma^{**2} + x.MSD()$

ObjL: $x.Complexity (Penal[0]) + x.MSD()$

ObjU: $x.MSDverif (formula)$

Obj: $\int (dt * x(t) ** 2)$ - интегрирование по всему множеству t (оно должно быть описано)
Obj: $\int (0, 1, dt * x(t) ** 2)$ # dt on the first place !

6.12. Draw

Draw

DrawTransp - транспонирование картинки.

Transp - Транспонировать при отрисовке Draw A.sol;Transp

Draw fun11 L:1,2,4,8,16,32,64 - задание значений уровней

DrawVar - только переменные

DrawErr - оставшиеся ошибки

MarkerSize = 1

Legend = False - не рисовать легенду

6.13. Операторы Python, использующие разработанные классы.

Операторы языка Python можно использовать в любом месте - они будут перенесены в создаваемую программу *StartModel.py*. Однако, если операторы должны попасть в оптимизирующую (Pyomo) часть программы, из должен предшествовать ключ CODE:

Работа с таблицами

```
Tbl.dat('t')[:] -= t_min7 - оператор (Python): для столбца с именем 't' таблицы Tbl уменьшить  
все значения на t_min7  
tbl.dat('SPI')[:] = log (tbl.dat('SPI')[:])  
tbl = joinTab (tbH,tbCs,tb)
```

Работа с компонентами GIS

```
Pol = Polyline ([1,2,3],[4,5,6])
```

```
Pol = Polyline ('X','Y','Z')
```

```
Pol.Draw ( mask, 6, 1000 ) - Draw(self, mask, pixSize=1, Val=None):
```

```
mask.FloodFillReal ([6508870, 5875460], 1000,1000)
```

```
FloodFillReal (self, xy, BordVal,FillVal)
```

```
dh = NaN
```

```
ang = 2
```

```
H.Smoothing (dh, ang, mask,1000)
```

```
H.SaveGrid ( 'smooth2grad.asc' ) - эквивалентно H.SaveGrid ( 'smooth2grad.asc', 'N' )
```

```
TA = H.TiltAngle ( ) - sqrt ( **2 + **2 ) производных — модуль градиента
```

```
TA.Draw()
```

```
TA.SaveGrid ( 'after.asc' )
```

```
Xder = H.Make_1_Deriv()
```

```
Yder = H.Make_1_Deriv('y')
```

6.14. Форматы файлов

Фалы данных (таблицы)

.xlsx - первая строка содержит имена столбцов

.txt - первая строка содержит имена столбцов. Разделитель пробел или табуляция.

#END# - первый столбец xlsx - конец

#END# - в строке имен xlsx - конец

Файлы решений.

Сеточные (Гриды)

Файлы .sol содержат решения задачи (они же и начальные приближения) как сеточные функции одной или двух переменных.

Первая строка содержит служебную информацию :

имена переменных, имя функции, служебная информация (после знака `#`)

1D — содержит таблицу со столбцами: аргумент и функция

2D — содержит матрицу решения.

В первой строке сначала имя, соответствующее столбцам, затем — строкам.

Далее строка чисел, определяющая значения столбцов (первого аргумента)

Далее набор строк. В каждой строке: первое число — значение второго аргумента, далее значения функции.

Пример :

r	t	Pdf	#SvFver_62_mtr2
	0.0	5.0	10.0
100	50.3	99.5	140.5
102	49.5	96.5	135.6

определяет сеточную функцию двух переменных, например, Pdf (5.0, 102) = 96.5

Полиномы

Файлы .p.sol специальным способом хранят степень, размерность и коэффициенты полинома .

6.15. Циклы

FOR: CC in [RUS GBR FRA DEU ESP ITA]: - скобки необязательны, «:» - можно опустить

.....

EOFOR

Пишет в программу код, заменяя CC на RUS, затем на GBR и т.д

Литература

Sokolov A. V., Voloshinov V. V. Model Selection by Balanced Identification: the Interplay of Optimization and Distributed Computing // Open Computer Science, 2020, 10 – p. 283–295.

<https://doi.org/10.1515/comp-2020-0116>

Соколов, А.В.; Волошинов, В.В. Выбор математической модели: баланс между сложностью и близостью к измерениям. International Journal of Open Information Technologies, 2018, 6(9) С. 33-41

<http://injoit.org/index.php/j1/article/view/612>

Дополнительные опции: (прописываются в файл COMMON.py или в MNG-файл)

SvF.Resources = ["pool-scip-ipopt"] - список строк ресурсов (по умолчанию)

SvF.LocalSolverName = '/opt/solvers/bin/ipopt' - каталог, откуда запускается Solve, RunMode = 'L&L'

SolverName = '/opt/solvers/bin/ipopt' - каталог, откуда запускается решатель RunMode = 'P&P',
RunMode = 'P&S', nl-файлы в каталоге TMP

SvF.DrawMode = 'File&Screen' (по умолчанию)

SvF.DrawMode = 'Screen'

SvF.DrawMode = 'File'

SvF.DrawMode = '' - не рисовать вообще.

Default_step = -50

SvF.X_axe == 'Date'

SvF.X_axe_month = 6

Substitute = True

UseGreek = False

X_lim = []

Y_lim = []

locator = None

FONT_SIZE = 16

Ylabel_x = 0.03

Xlabel_x = 1

Ylabel_y = 1.02

Xlabel_y = -0.01

xaxis_step = 0

yaxis_step = 0

SvF.Epsilon = 1e-9

ObjToReadSols = True

AddField(self, name, pos = -1) :

Select с where — поля для where должны быть перечислены явно (не *)

Использование \in :

EQ: $Omi(t) = nC3(t) / nC(t) * 100.$; $t \in [fixMax3+1, tMax, st, ti]$

$A_Immun(t1) = \int_{-} \{ \max(0, t1 - A_ImmunF.A[0].Ub) \}^{\{t1\}} \{ dt * dayVac(t) * A_ImmunF(t1-t) \} ; t1 \in [0, tMax, st, tt]$

funPrefix = 'f'
Comment = False
DataSet, Domian

RunMode = 'L&L'

SchemeD1 = 'Central' # 'Backward' #'Central' вместо DIF1 =
SchemeD1 = 'Backward t'

Param: Imun (t365) << Imun(t365).sol
Param: Imun (t365); DataFile = Imun(t365).sol
Param: Imun (t365); Select * from Imun(t365).sol

<https://coin-or.github.io/lpopt/> - сайт есть по заданию точностей.

Draw H;Flow

AddStrToRes =

chr(int("U+03C6".lstrip("U+").zfill(8), 16)) — кодировка фи

Xstep в отрисовку

SetStartDir
ComplMean2([])

Xsize
Ysize

Domain
EoTask
nC.ComplSig2
Legend
DPI = 100
graphic_file_type =
TabSize = 4
FOR: _src in [Nik Zap]:
Var ...

Include: имя файла

