УДК 691:517.9

ПРАКТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АППРОКСИМАЦИИ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Данилов А.М.

д.т.н., профессор

Пензенский государственный университет архитектуры и строительства

Пенза, Россия

Гарькина И.А.

д.т.н., профессор

Пензенский государственный университет архитектуры и строительства

Пенза, Россия

Аннотация

Предлагаются подходы к параметрической идентификации кинетических процессов. В качестве параметров процессов используются их характерные точки (точки экстремума и перегиба, эксплуатационное значение рассматриваемого свойства). Указываются практические методы аппроксимации таблично-заданных функций многих переменных в приложении к аналитическому описанию кинетических процессов.

Ключевые слова: композиты, кинетические процессы, параметры процессов, параметрическая идентификация, аппроксимация, таблично-заданные функции

PRACTICAL APPROXIMATION METHODS OF KINETIC PROCESSES

Danilov A.M.

doctor of technical sciences, professor

Penza State University of Architecture and Construction

Penza, Russia

Garkina I.A.

doctor of technical sciences, professor

Penza State University of Architecture and Construction

Penza, Russia
Annotation
Approaches to the parametric identification of kinetic processes are proposed. As the process parameters, their characteristic points (extremum and inflection points, required value of the property are used). Practical methods of approximation of table-given functions of many variables in the application to the analytical description of kinetic processes are indicated.
Keywords: composites, kinetic processes, process parameters, parametric identification, approximation, table-defined functions

Одной из важнейших задач строительного материаловедения является разработка методов многокритериального синтеза композиционных материалов. Естественным является, когда в качестве частных критериев качества принимаются параметры каждого из кинетических процессов формирования физико-механических характеристик материала [1…3]. Задача сводится к аппроксимации таблично заданных функций многих переменных и определению значений принятых параметров для идентификации кинетических процессов. Выбор вида аппроксимирующей функции во многом определяется интуицией экспериментатора.

В общем случае задача аппроксимации (приближения функций) формулируется для функции

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \ldots x_n)$$

векторного аргумента, заданного на некоторой области. Самой простой и грубой является ступенчатая аппроксимация. Она применяется или при мелкой сетке в пространстве аргумента $\mathbf{x}$ (по существу, при табличном способе задания функции), или при специальном виде самой функции. Задачу приближения функции нескольких переменных можно решать и на основе метода наименьших квадратов, представляя её суммой функций одной переменной. Для функции двух переменных $f(x_1, x_2)$ с прямоугольной областью изменения аргументов

$$d_{11} \le x_1 \le d_{12}, \quad d_{21} \le x_2 \le d_{22}$$

соответствующее выражение имеет вид

$$\min_{f_1 f_2} \int_{d_{21}}^{d_{22}} \int_{d_{11}}^{d_{12}} \left[f(x_1, x_2) - f_1(x_1) - f_2(x_2) \right]^2 dx_1 dx_2 .$$

Решение задачи получается в виде

$$f_1(x_1) + f_2(x_2) = \overline{f}^{x_1} + \overline{f}^{x_2} - \overline{\overline{f}}^{x_1 x_2},$$

где

$$\overline{f}^{x_1} = \frac{1}{d_{12} - d_{11}} \int_{d_{11}}^{d_{12}} f(x_1, x_2) dx_1, \quad \overline{f}^{x_2} = \frac{1}{d_{22} - d_{21}} \int_{d_{21}}^{d_{22}} f(x_1, x_2) dx_2,$$

$$\overline{\overline{f}}^{x_1 x_2} = \frac{1}{(d_{12} - d_{11})(d_{22} - d_{21})} \int_{d_{21}}^{d_{22}} \int_{d_{11}}^{d_{12}} f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 .$$

Задача приближения функции двух аргументов посредством произведения двух одномерных аргументов может быть сведена к только что рассмотренной. Действительно, если вместо исходной функции $f(x_1, x_2)$ взять функцию $\varphi(x_1, x_2) = \ln f(x_1, x_2)$, выполнить приближение этой функции суммой $\varphi_1(x_1) + \varphi_2(x_2)$, а затем образовать функции

$$f_1(x_1) = \exp \varphi_1(x_1), \quad f_2(x_2) = \exp \varphi_2(x_2),$$

то

$$\ln f(x_1, x_2) \approx \ln f_1(x_1) + \ln f_2(x_2),$$

$$f(x_1, x_2) \approx f_1(x_1) f_2(x_2) .$$

При переходе к многомерным процессам задача аппроксимации существенно усложняется. Известные в настоящее время методы многомерной аппроксимации менее эффективны, чем методы приближения одномерных функций. При этом трудоёмкость вычислений с ростом размерности решаемых задач резко возрастает.

Приведём относительно простой способ приближения многомерных таблично заданных функций обобщёнными многочленами частного вида. Ограничимся пока случаем двумерной аппроксимации. Пусть значения $W(x, y)$ заданы таблицей:

	y_1	y_2	…	y_j	…	y_m
x_1	W_{11}	W_{12}	…	$W_{1\,j}$	…	$W_{1\,m}$
x_2	W_{21}	W_{22}	…	$W_{2\,j}$	…	$W_{i\,m}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
x_i	W_{i1}	W_{i2}	…	$W_{i\,j}$	…	$W_{i\,m}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
x_n	W_{n1}	W_{n2}	…	$W_{n\,j}$	…	$W_{n\,m}$

Определим аппроксимирующий многочлен в виде

$$Q_q = a_1 f_1(x)\varphi_1(y) + a_2 f_2(x)\varphi_2(y) + \ldots + a_q f_q(x)\varphi_q(y),$$

где $f_o(x)$, $\varphi_p(y)$, $p = \overline{1, q}$ – некоторые выбранные функции; a_p – неизвестные коэффициенты. Для определения коэффициентов a_p воспользуемся методом наименьших квадратов, т.е. из условий минимума

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\left[\sum_{p=1}^{q} a_p f_p(x_i)\varphi_p(y_i) - W_{ij}\right]^2 .$$

Приравнивая частные производные по a_p нулю, получаем для определения неизвестных $a_1, a_2, \ldots, a_q$ систему уравнений

$$\begin{cases} c_{1,1} a_1 + c_{1,2} a_2 + \ldots + c_{1,q}\ a_q = b_1 \\ c_{2,1} a_1 + c_{2,2} a_2 + \ldots + c_{2,q}\ a_q = b_2 \\ \ldots \\ c_{q,1} a_1 + c_{q,2} a_2 + \ldots + c_{q,q}\ a_q = b_q\ , \end{cases}$$

где $$c_{\alpha,\beta} = f_{\alpha,\beta}\varphi_{\alpha,\beta},\ \ \alpha = 1,2,\ldots q, \quad \beta = 1,2,\ldots q;$$

$$f_{\alpha,\beta} = \sum_{i=1}^{n} f_\alpha(x_i)\, f_\beta(x_i), \varphi_{\alpha,\beta} = \sum_{j=1}^{n}\varphi_\alpha(y_j)\varphi_\beta(y_j),$$

$$b_p = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} W_{ij}\, f_p(x_i)\varphi_p(y_j),\ p = 1, 2,\ldots, q.$$

В случае трёхмерной аппроксимации для каждого $z = z_k, k = 1,2,\ldots l$ значения функции $W(x, y, z)$ задаются в виде прямоугольной таблицы $n \times m$:

$z = z_k$						
	y_1	y_2	…	y_j	…	y_m
x_1	$W_{11\,k}$	$W_{12\,k}$	…	$W_{1\,j\,k}$	…	$W_{1\,m\,k}$
x_2	$W_{21\,k}$	$W_{22\,k}$	…	$W_{2\,j\,k}$	…	$W_{2\,m\,k}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_i	$W_{i1\,k}$	$W_{i2\,k}$	…	$W_{i\,j\,k}$	…	$W_{i\,m\,k}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_n	$W_{n1\,k}$	$W_{n2\,k}$	…	$W_{n\,j\,k}$	…	$W_{n\,m\,k}$

Аппроксимирующий многочлен представляется в виде

$$Q_q = a_1 f_1(x)\varphi_1(y)\psi_1(z) + a_2 f_2(x)\varphi_2(y)\psi_2(z) + \ldots + a_q f_q\varphi_q(y)\psi_q(z),$$

где $f_q(x), \varphi_q(y), \psi_q(z)$ – выбранные функции; $a_1, a_2, \ldots, a_p$ – неизвестные коэффициенты. Будем иметь

$$c_{\alpha,\beta} = f_{\alpha,\beta}\varphi_{\alpha,\beta}\psi_{\alpha,\beta},$$

$$f_{\alpha,\beta} = \sum_{i=1}^{n} f_\alpha(x_i)\, f_\beta(x_i),$$

$$\varphi_{\alpha,\beta} = \sum_{j=1}^{m} \varphi_\alpha(y_j)\varphi_\beta(y_j),$$

$$\psi_{\alpha,\beta} = \sum_{k=1}^{\ell} \psi_\alpha(z_k)\psi_\beta(z_k),$$

$$b_p = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{\ell} W_{ijk}\, f_p(x_i)\varphi_p(y_j)\psi_p(z_k),$$

$$\alpha = 1,2,\ldots q, \quad \beta = 1,2,\ldots q;\ p = 1,2,\ldots,q.$$

Описанный способ аппроксимации легко распространяется и на функции с большим числом переменных.

Аппроксимирующему многочлену можно придать более общий вид, например,

$$Q_q = \sum_{p=1}^{q} a_p f_p(x, y, z).$$

Величины $c_{\alpha,\beta}$ и b_α вычисляются по формулам:

$$c_{\alpha,\beta} = \sum_{i=1}^{n} f_\alpha(x_i, y_i, z_i)\, f_\beta(x_i, y_i, z_i),$$

$$b_\alpha = \sum_{i=1}^{n} W_i f_\alpha(x_i, y_i, z_i),$$

где n – общее число точек, пронумерованных произвольным образом, причём $n \geq q$. Здесь отпадает необходимость иметь прямоугольную таблицу значений аппроксимируемой функции.

Более общее выражение для аппроксимирующего многочлена может быть взято в виде

$$Q_q = \sum_{p=1}^{q} f_p(x, y, z, a_1, a_2, \ldots, a_m),$$

где m – число подлежащих определению параметров аппроксимации.

Определение параметров $a_1, a_2, \ldots, a_m$ в общем случае можно осуществить поиском минимума

$$\sum_{i=1}^{n} \left[\sum_{p=1}^{q} f_p(x_i, y_i, z_i, a_1, a_2, \ldots, a_m) - W_i \right]^2$$

известными методами оптимизации.

Оказалось, что кинетические процессы для исследуемых композитов, как правило, содержат точки экстремума и перегиба; формирование эксплуатационного значения для каждого из характеристик носит асимптотический характер. Это позволило считать указанные параметры основными при разработке методов параметрической идентификации кинетических процессов.

Эффективность рассматриваемого подхода подтверждена в [4…6].

Библиографический список:

1. Данилов А.М., Гарькина И.А. Сложные системы: идентификация, синтез, управление / Пенза: ПГУАС. – 2011. - 308 с.
2. Королев Е.В., Смирнов В.А., Альбакасов А.И., Иноземцев А.С. Некоторые аспекты проектирования составов многокомпонентных композиционных материалов / Нанотехнологии в строительстве: научный интернет-журнал. -2011. -№ 6. -С. 32-43.
3. Бормотов А.Н., Прошин И.А. Многокритериальный синтез сверхтяжелого композита / Вестник Брянского государственного технического университета. - 2009. - № 4. - С. 29-36.
4. Бормотов А.Н., Прошин И.А., Тюрденева С.В. Математическое моделирование структуры композитов в виде рациональных функций по краевым точкам области планирования / XXI век: Итоги прошлого и проблемы настоящего плюс. -2013. -№ 12 (16). -С. 272-280.
5. Budylina E., Danilov A., Garkina I. Control of multiobjective complex systems / Contemporary Engineering Sciences. -2015.-T. 8. -№ 9. -P. 441-445.
6. Gladkikh V.A., Korolev E.V., Smirnov V.A. Modeling of the sulfur-bituminous concrete mix compaction / Advanced Materials Research. - 2014. -T. 1040. -C. 525-528.