
СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

6. Elkin M. D. Model'nie ocenki anгармонического smesheniia polos v kolebatel'nix spektrax dimerov karbonovix kislot / M. D. Elkin, T. A. Shal'nova, O. V. Kolesnikova // Vestnik SGTU. – 2009. – № 1 (37), Вып. 1.
7. Elkin P. M. Strukturno-dinamicheskie modeli konformerov monoklorobenzoynoioy kisloti / P. M. Elkin, O. N. Grechukhina, I. I. Gordeev // Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i visokie tekhnologii. – 2010. – № 2 (10). – P. 70.
8. Erman E. A. Model'nie ocenki anгармонического smesheniia polos v kolebatel'nix spektrax dimerov karbonovix kislot / E. A. Erman, M. D. Elkin, E. A. Dzhalmuxambetova // Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i visokie tekhnologii. – 2010. – № 4 (12). – P. 53–58.
9. Iacimirskiy K. B. Ximicheskaya svyaz' / K. B. Iacimirskiy, V. K. Iacimirskiy. – Kiev : Visha shkola, 1975. – 304 p.
10. Antony J. 014305 Anharmonic midinfrared vibrational spectra of benzoic acid monomer and dimer / J. Antony, G. Heiden, G. Meijer, B. Schmidt // Journal of Chemical Physics. – 2005. – Vol. 123, № 1. – P. 11.
11. Brandána S. A. Theoretical and experimental vibrational spectrum study of 4-hydroxybenzoic acid as monomer and dimer / S. A. Brandána, López F. Márquez, M. Montejob, J. Gonzalez, J. López, Ben A. Altabefa // Spectrochimica Acta. – 2010. – Vol. 75A, № 5. – P. 1422–1434.
12. Hoy A. R. Anharmonic force constants calculation / A. R. Hoy, I. M. Mills, G. Strey // Molecular Physics. – 1972. – Vol. 24, № 6. – P. 1265–1290.
13. Frisch M. J. Gaussian 03. Revision B.03 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel. – Pittsburgh, PA : Gaussian Inc., 2003.
14. Nielsen H. H. The Vibration-rotation Energies of Molecules and their Spectra in the Infra-red / H. H. Nielsen // Handbuch der Physik. – Berlin : Springer-Verlag, 1959. – Vol. 37 (1). – P. 173–313.
15. Zierkiewicz W. Molecular Structures and Infrared Spectra of p-Chlorophenol and p-Bromophenol. Theoretical and Experimental Studies / W. Zierkiewicz, D. Michalska, T. Zeegers-Huyskens // Journal of Physical Chemistry A. – 2000. – Vol. 104, № 50. – P. 11685–11692.

УДК 519.872.7:658.51

АНАЛИЗ ХАРАКТЕРИСТИК ГАУССОВСКИХ УСЛОВНО НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ В ЗАДАЧАХ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМ

Якунин Павел Сергеевич, кандидат экономических наук, начальник отдела Московского областного банка (Мособлбанка), 109028, Россия, г. Москва, ул. Солянка, 3, e-mail: kafedra@asu.madi.ru

Ягудаев Геннадий Георгиевич, кандидат технических наук, Северо-Кавказский филиал Московского автомобильно-дорожного государственного технического университета (МАДИ), 125319, Россия, г. Москва, Ленинградский проспект, 64, e-mail: kafedra@asu.madi.ru

Ситышев Сергей Николаевич, кандидат технических наук, Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет (МАДИ), 125319, Россия, г. Москва, Ленинградский проспект, 64, e-mail: kafedra@asu.madi.ru

Котов Андрей Александрович, кандидат технических наук, Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет (МАДИ), 125319, Россия, г. Москва, Ленинградский проспект, 64, e-mail: kafedra@asu.madi.ru

Жигарев Руслан Геннадьевич, аспирант, Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет (МАДИ), 125319, Россия, г. Москва, Ленинградский проспект, 64, e-mail: ruslan.zhigarev@mail.ru

В статье предлагается использование условно нестационарного гауссовского процесса для аналитического исследования сходимости процессов имитационного моделирования и, особенно, сходимости алгоритмов поисковой оптимизации на имитационных моделях. Данный процесс построен на основе теоремы о нормальной корреляции и рассматривается как экстраполяция стационарного гауссовского процесса с заданной предысторией. Автокорреляционная функция стационарного процесса представляет смесь двух экспонент. Основной задачей исследования является поиск зависимостей характеристик среднеинтегральных оценок полученного нестационарного процесса от начальных условий моделирования и параметров автокорреляционной функции исходного стационарного процесса. Показано, что в данном классе случайных процессов возможно моделирование различного вида монотонных трендов, а при сильной автокорреляции и далеких начальных условиях также и немонотонного тренда. Для дисперсии условно нестационарного процесса характерно немонотонное поведение. На начальном этапе дисперсия мала, что объясняется небольшими изменениями значений процесса на коротком периоде времени. Затем дисперсия растет, но наступает момент времени, когда эргодические свойства процесса начинают преобладать и дисперсия стремится к нулю; также показано, что тренд среднеинтегральной оценки имеет затянутый характер, содержит существенную систематическую погрешность на начальном этапе, зависит от коррелированности процесса, начальных значений и длительности моделирования.

Ключевые слова: имитация, моделирование, гауссовские процессы, среднеинтегральные оценки, дисперсия, тренд, нестационарные процессы, автокорреляция, сходимость, оптимизация.

ANALYSIS OF CHARACTERISTICS OF CONDITIONAL GAUSSIAN STATIONARY PROCESSES IN TASK SIMULATION SYSTEMS

Yakunin Paul S., Ph.D., Chief Moscow Regional Bank (MOSOBLBANK), 3 Salsola st., Moscow, 109028, Russia, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

Yagudaev Gennady G., Ph.D., Associate Professor, North Caucasus branch of the Moscow Automobile and Road Technical University (MADI), 64 Leningradsky av., Moscow, 125319, Russia, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

Satyshev Sergey N., Ph.D., Moscow Automobile and Road Technical University (MADI), 64 Leningradsky av., Moscow, 125319, Russia, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

Kotov Andrei A., Ph.D., Moscow Automobile and Road State Technical University (MADI), 64 Leningradsky av., Moscow, 125319, Russia, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

Zhigarev Ruslan G., graduate student, Moscow Automobile and Road Technical University (MADI), 64 Leningradsky av., Moscow, 125319, Russia, e-mail: ruslan.zhigarev@mail.ru.

The article proposes the use of conventional non-stationary Gaussian process for the analytical study of the convergence process simulation, and, in particular, the convergence of algorithms in search optimization of simulation models. This process is based on the theorem on normal correlation and extrapolation is regarded as a stationary Gaussian process with a given history. The autocorrelation function of a stationary process is a mixture of two exponentials. The main objective of the study is to find dependency characteristics *sredneintegralnyh* estimates obtained by non-stationary process from the initial conditions and simulation parameters of the autocorrelation function of the original stationary process. It is shown that in this class of random processes is modeling various types of monotonic trends possible, but with strong autocorrelation and distant initial conditions, and also non-monotonic trend. Dispersion of conditionally non-stationary process is characterized by a nonmonotonic behavior. At the initial stage, the variance is small because of low values of the process changes over a short period of time. Then, the variance increases, but there comes a time when the ergodic properties of the process and begin to dominate the dispersion tends to zero. It also shows that the trend has a tight estimate mean inte-

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

gral character, contains a significant systematic error at the initial stage and depends on the correlation of the process, the initial values and the duration of the simulation.

Key words: imitation, modeling, Gaussian processes, the mean integral evaluation, variance, trend, nonstationary processes, autocorrelation, convergence, optimization.

Для анализа влияния начальных условий на выходной имитационный процесс и разработки стратегии моделирования необходима аналитически разрешимая модель выходного имитационного процесса. В качестве основы такой модели в статье предлагается использовать гауссовские процессы. Пусть $\xi(t)$ – гауссовский стационарный процесс (процесс называется гауссовским, если все его конечномерные распределения гауссовские). Если зафиксировать начальные значения процесса, то получим условно нестационарный процесс. Автоковариационную функцию будем аппроксимировать зависимостью

$$r(t) = \sigma^2(\alpha_1 e^{-c_1 t} + \alpha_2 e^{-c_2 t}), \quad (1)$$

где $c_1 > 0$ и $c_2 > 0$ – параметры автоковариации, а α_1 и α_2 – некоторые функции параметров c_1 и c_2 . Для параметров автоковариации будем использовать обозначение $Cv = (c_1, c_2)$. При этом процесс будет сильнокоррелированным, если $\min(c_1, c_2)$ – мал ($< 0,2$), и слабокоррелированным, если $\min(c_1, c_2)$ – велик ($> 0,5$).

Характеристики условно нестационарного процесса. Пусть вектор-столбец $S = (S_0, S_{-1}, \dots, S_{-m})^T$ определяет значения основного процесса $\xi(t)$ в моменты $S_t = \langle t_0, t_{-1}, \dots, t_{-m} \rangle$, ($t_0 > t_{-1} > \dots > t_{-m}$). Обозначим фрагмент случайного процесса, определенный на векторе S , как θ . Этот вектор является числовой выборкой из пространства состояний и при анализе основного процесса представляет выборку из $(m+1)$ -мерной случайной величины, определяющей глубину предыстории. Будем считать, что процесс начинается с момента времени t_1 .

На основании теоремы о нормальной корреляции получим выражение для математического ожидания условно нестационарного процесса с заданной предысторией:

$$M\{\xi | S\}(t) = M\xi + D_{\xi\theta}(t) \cdot D_{\theta\theta}^{-1} \cdot (S - MS) = y + D_{\xi\theta}(t) D_{\theta\theta}^{-1} \cdot (S - yE), \quad (2)$$

где y – математическое ожидание стационарного процесса; E – вектор-столбец единиц размерностью $(m+1)$.

Ковариационная функция процесса определяется следующим выражением:

$$R(t, u) = r(|t - u|) - D_{\xi\theta}(t) \cdot D_{\theta\theta}^{-1} \cdot D_{\xi\theta}^T(u), \quad (t \geq t_1, u \geq t_1), \quad (3)$$

где $D_{\xi\theta}(t) = (r(t-t_0), r(t-t_{-1}), \dots, r(t-t_{-m}))$, вектор-строка ковариаций; $D_{\theta\theta} = \| \text{cov}(\xi(t_i), \xi(t_j)) \| = \| r(t_i - t_j) \|_{i,j=0..m}$, матрица ковариаций предыстории процесса в моменты t_i, t_j ; $r(t)$ – автокорреляционная функция стационарного процесса.

На рисунках 1 и 2 приведены графики дисперсии и математического ожидания для введенной автокорреляционной функции $r(t)$ в зависимости от начальных условий моделирования S , S ; от коррелированности стационарного процесса Cv .

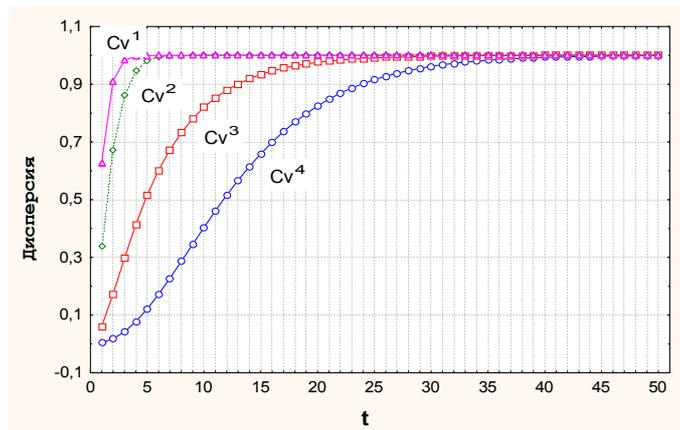


Рис. 1. Дисперсия условно нестационарного процесса

Здесь $Cv^1 = (1, 2)$, $Cv^2 = (0,3; 1)$, $Cv^3 = (0,2; 0,3)$, $Cv^4 = (0,1; 0,2)$; $\sigma = 1$.

Дисперсия условно нестационарного процесса не зависит от начального состояния и определяется только коррелированностью. Из графиков видно, что для коррелированных процессов дисперсия существенно медленнее сходится к стационарному значению.

На рисунке 2 приведены тренды математического ожидания условно нестационарных процессов.

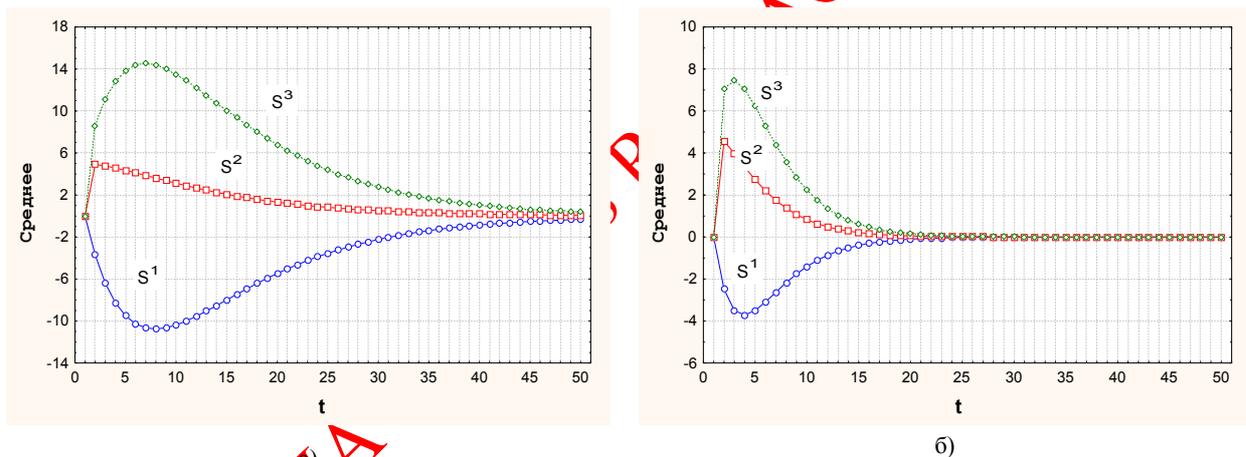


Рис. 2. Тренды МО условно нестационарных процессов: а) Cv1; б) Cv2

Здесь $Cv^1 = (0,2; 0,1)$, $Cv^2 = (0,4; 0,3)$; начальные условия $S_t = (0; -1)$, $S^1 = (5; 0)$, $S^2 = (5; 5)$, $S^3 = (0; 5)$.

Как видно из графиков, начальное состояние существенно сказывается на поведении тренда. Чем дальше начальное состояние от стационарного, тем более длительно восстановление.

В результате вид трендов МО определяют следующие факторы:

- коррелированность;
- задержка автоковариации;
- близость начальных условий.

Их влияние схематично отражено на графиках рисунка 3.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

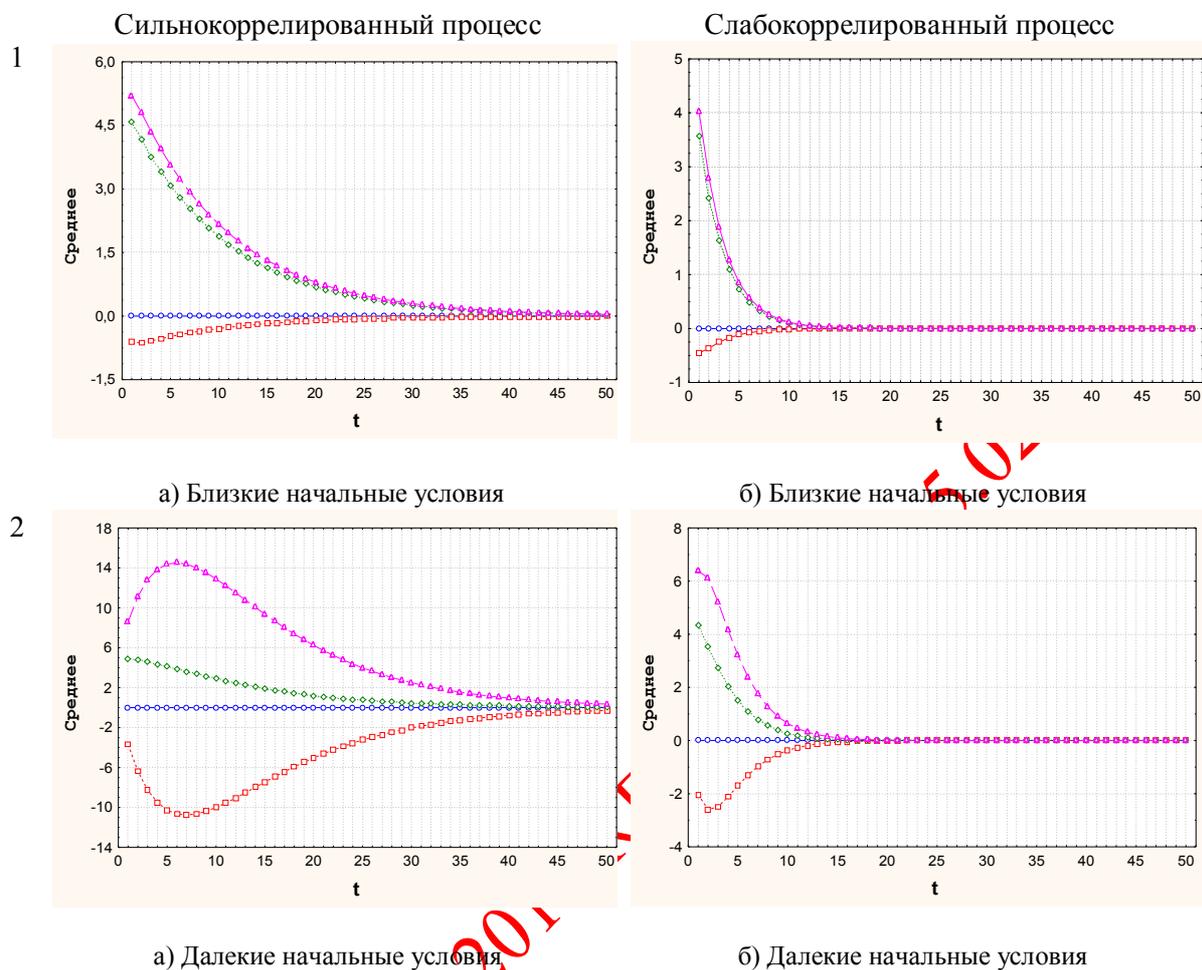


Рис. 3. Тренды условно нестационарных гауссовских процессов

На рисунке верхние графики соответствуют трендам без задержки, а нижние – с задержкой. В таблице 1 приведена классификация видов трендов в зависимости от исследуемых факторов.

Таблица 1

Классификация трендов

Ковариация	Коррелированность	Начальное состояние	Процесс
Без задержки	Слабая	Близкое	Безинерционный
Без задержки	Слабая	Далекое	Монотонный
С задержкой	Слабая	Близкое	Монотонный
С задержкой	Слабая	Далекое	Монотонный с запаздыванием
Без задержки	Сильная	Близкое	Монотонный с запаздыванием
Без задержки	Сильная	Далекое	Монотонный с запаздыванием
С задержкой	Сильная	Близкое	Монотонный
С задержкой	Сильная	Далекое	Немонотонный

Характеристики среднеинтегральной оценки. Среднеинтегральная оценка является стохастическим интегралом основного процесса

$$\zeta(T) = \frac{1}{T} \int_0^T \xi(t) dt, \quad (4)$$

и имеет математическое ожидание

$$M\zeta(T) = M \frac{1}{T} \int_0^T \xi(t) dt = \frac{1}{T} \int_0^T M\xi(t) dt. \quad (5)$$

Введенные выше обозначения позволяют представить математическое ожидание среднеинтегральной оценки условно нестационарного процесса в виде:

$$M\zeta(T) = y + \left(\frac{1}{T} \int_0^T D_{\xi\theta}(t) \cdot dt \right) \cdot D_{\theta\theta}^{-1} \cdot (S - y \cdot E). \quad (6)$$

Дисперсия оценки вычисляется путем интегрирования ковариационной функции основного процесса по всей области определения:

$$D\zeta(T) = \frac{1}{T^2} \cdot \int_0^T \int_0^T R(t, u) \cdot dt du. \quad (7)$$

Подставляя в этот интеграл выражение для ковариации и используя правила интегрирования векторных функций, получим:

$$D\zeta(T) = \frac{1}{T^2} \cdot \int_0^T \int_0^T (r(|t-u|) - D_{\xi\theta}(t) \cdot D_{\theta\theta}^{-1} \cdot D_{\xi\theta}^T(u)) \cdot dt du. \quad (8)$$

Введем следующие обозначения для составляющих интеграла: стационарная составляющая:

$$D\zeta_s(T) = \frac{1}{T^2} \int_0^T \int_0^T r(|t-u|) dt du. \quad (9)$$

нестационарная составляющая:

$$D\zeta_N(T) = \frac{1}{T^2} \int_0^T \int_0^T D_{\xi\theta}(t) \cdot D_{\theta\theta}^{-1} \cdot D_{\xi\theta}^T(u) dt du. \quad (10)$$

При этих обозначениях общая дисперсия будет равна:

$$D\zeta(T) = D\zeta_s(T) - D\zeta_N(T). \quad (11)$$

Двойной интеграл в последнем выражении допускает разделение переменных, поэтому после соответствующих преобразований и перехода к векторной форме получим:

$$\begin{aligned} D\zeta_N(T) &= \frac{1}{T^2} \int_0^T \int_0^T \sum_{i,j=1}^m [D_{\xi\theta}(t)]_i \cdot [D_{\theta\theta}^{-1}]_{i,j} \cdot [D_{\xi\theta}(u)]_j dt du = \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T D_{\xi\theta}(u) du \cdot D_{\theta\theta}^{-1} \cdot \frac{1}{T} \int_0^T D_{\xi\theta}^T(u) du \end{aligned} \quad (12)$$

Введем обозначение $W(T) = \frac{1}{T} \int_0^T D_{\xi\theta}(t) \cdot dt$, выражение для нестационарной составляющей примет вид:

$$D\zeta_N = W(T) \cdot D_{\theta\theta}^{-1} \cdot W^T(T). \quad (13)$$

В результате выражения для математического ожидания и дисперсии среднеинтегральной оценки можно представить в виде:

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

$$\begin{aligned}
 M\zeta(T) &= y + W(T) \cdot D_{\theta\theta}^{-1} \cdot (S - y \cdot E) \\
 D\zeta(T) &= D\zeta_S(T) - D\zeta_N(T)
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

Проведем анализ полученных соотношений для автокорреляционной функции. Компонента функционала W примет вид:

$$\begin{aligned}
 W_i(T) &= \frac{1}{T} \int_0^T \sigma^2 (\alpha_1 e^{c_1 u_i} e^{-c_1 t} + \alpha_2 e^{c_2 u_i} e^{-c_2 t}) dt = \\
 &= \frac{\sigma^2}{T} \left[-\frac{\alpha_1}{c_1} e^{c_1 u_i} e^{-c_1 t} - \frac{\alpha_2}{c_2} e^{c_2 u_i} e^{-c_2 t} \right]_0^T = \\
 &= \frac{\sigma^2}{T} \left[\frac{\alpha_1}{c_1} e^{c_1 u_i} (1 - e^{-c_1 T}) + \frac{\alpha_2}{c_2} e^{c_2 u_i} (1 - e^{-c_2 T}) \right].
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

Используя обозначения r_1 и r_2 ,

$$r_1(t) = \sigma^2 \left(\frac{\alpha_1}{c_1} e^{-c_1 t} - \frac{\alpha_2}{c_2} e^{-c_2 t} \right) \quad r_2(t) = \sigma^2 \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} e^{-c_1 t} - \frac{\alpha_2}{c_2^2} e^{-c_2 t} \right),
 \tag{16}$$

получим:

$$W_i(T) = \frac{1}{T} [r_1(-u_i) - r_1(T - u_i)].
 \tag{17}$$

Исследуемыми зависимостями являются математическое ожидание и дисперсия среднеинтегральной оценки как функции от начальных условий и коррелированности процесса:

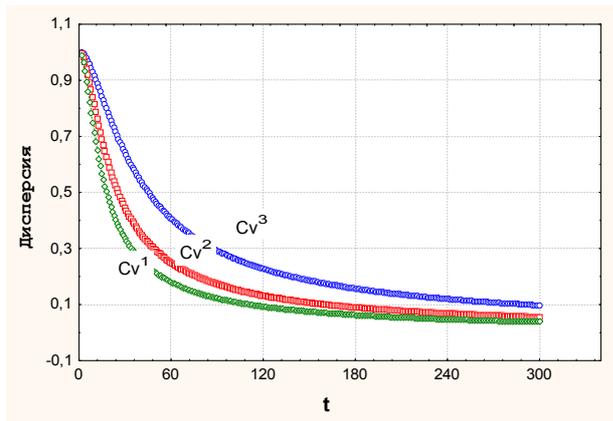
$$\begin{aligned}
 M\xi(T) &= M_\xi(T | S^j, S, C_v) \\
 D\xi(T) &= D_\xi(T | S^j, C_v)
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

На рисунке 4 приведены графики дисперсии среднеинтегральной оценки стационарного (DY_S) и условно нестационарного процесса DY для параметров автокорреляционной функции, равных: $Cv^1 = (0,2; 0,1)$, $Cv^2 = (0,3; 0,2)$, $Cv^3 = (0,4; 0,3)$. Дисперсия среднеинтегральной оценки процесса определяется только коррелированностью и не зависит от начальных условий моделирования.

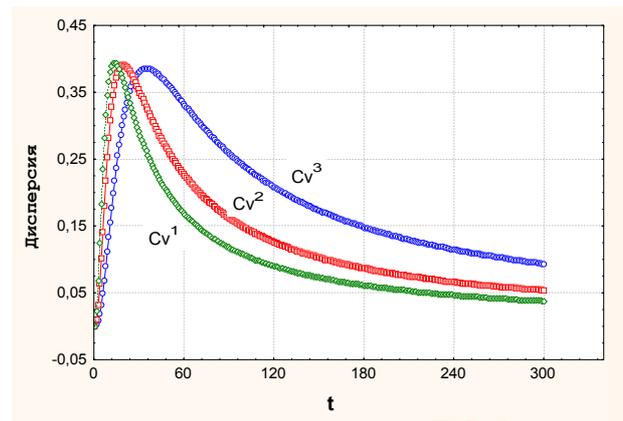
Таким образом, для дисперсии условно нестационарного процесса характерно немонотонное поведение. На начальном этапе дисперсия мала, что объясняется небольшими изменениями значений процесса на коротком периоде времени. Затем дисперсия растет, но наступает момент времени, когда эргодические свойства процесса начинают преобладать и дисперсия стремится к нулю.

Тренды среднего значения, кроме коррелированности, также зависят от начальных условий процесса. На рисунке 5 приведены графики математических ожиданий среднеинтегральной оценки условно нестационарных процессов. При построении трендов варьировались как параметры коррелированности, так и начальные условия S^j . В качестве начальных условий были выбраны $S^0 = (0; -1)$; $S^1 = (5; 0)$, $S^2 = (5; 5)$, $S^3 = (0; 5)$.

Из сравнения графиков среднеинтегральной оценки и основного процесса можно заключить, что тренды среднеинтегральной оценки существенно более затянуты. Так, если для основного процесса характеристики были близки к стационару уже при $t = 20$, то для среднеинтегральной оценки период восстановления математического ожидания достигал значения 200.

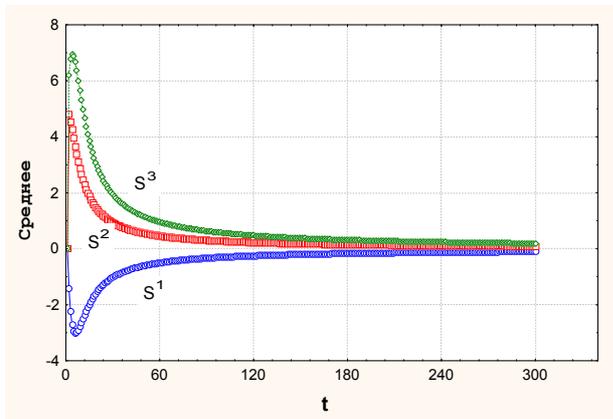


а) DY_s

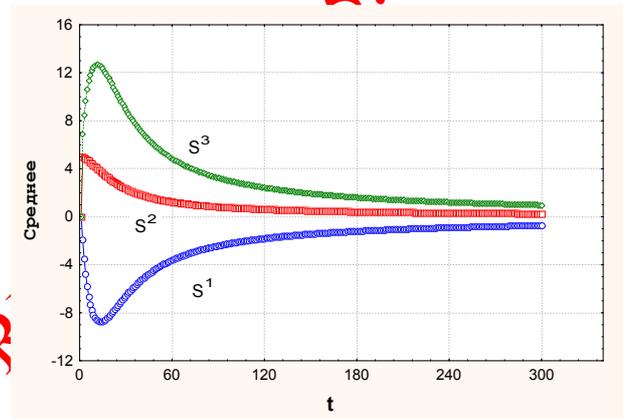


б) DY

Рис. 4. Дисперсия среднеинтегральной оценки: а) DY_s ; б) DY



а)



б)

Рис. 5. Математическое ожидание среднеинтегральной оценки: а) $Cv = (0,3; 0,4)$; б) $Cv = (0,1; 0,2)$

Для целей аналитического исследования сходимости процессов имитационного моделирования предложен условно нестационарный гауссовский процесс, который рассматривается как стационарный гауссовский процесс с заданной предысторией в моменты времени, меньшие нуля, и введенной выше автокорреляционной функцией.

Получены выражения для дисперсии и тренда условно нестационарного процесса в зависимости от параметров автокорреляционной функции, начальных условий. Показано, что возможно описание в этом классе различного вида монотонных трендов, а при сильной автокорреляции и далеких начальных условиях возможно описание и немонотонного тренда. Показано, что характер дисперсии соответствует экспериментальным данным и не зависит от начальных значений.

Получены аналитические выражения тренда и дисперсии среднеинтегральной оценки. Проведено исследование зависимости среднеинтегральной оценки от различных факторов. Показано, что тренд среднеинтегральной оценки имеет затянутый характер, содержит существенную систематическую погрешность на начальном этапе, зависит от коррелированности процесса, начальных значений, длительности моделирования. Показано, что дисперсия среднеинтегральной оценки имеет унимодальный характер с максимумом на начальном этапе моделирования и не зависит от начальных значений процесса.