

АЛГОРИТМ УПРАВЛЯЕМОГО ИМИТАЦИОННОГО ПРОЦЕССА В СИСТЕМАХ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ

Тимофеев Павел Анатольевич, кандидат технических наук, советник ЗАО «Центр анализа проектов», 127287, Россия, г. Москва, пр-д Старый Петровско-Разумовский, 1/23, 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.

Горячкин Борис Сергеевич, кандидат технических наук, Московский государственный технический университет (МГТУ) им. Н.Э. Баумана, 105005, Россия, г. Москва, ул. 2-я Баумская, 5, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

Строганов Дмитрий Викторович, кандидат технических наук, Московский государственный технический университет (МГТУ) им. Н.Э. Баумана, 105005, Россия, г. Москва, ул. 2-я Баумская, 5, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

В статье исследуются методы использования имитационных моделей для решения задач параметрического синтеза, которые сводятся к выбору значений варьируемых параметров, доставляющих экстремум целевой функции. Область значений варьируемых параметров определяется в соответствии с возможностями параметризации исследуемой модели. Предполагается, что для вычисления значений целевой функции используется имитационная модель объекта, которая позволяет вычислить целевую функцию для всех значений варьируемых параметров в заданной области параметров. Для каждого значения параметра модель однозначно определяет значение целевой функции. Поскольку как процедура имитационного моделирования, так и алгоритмы оптимизации требуют существенных вычислительных затрат, в статье предлагается совместить процессы поисковой оптимизации и имитации в единой управляемой модели. Выполнено формализованное описание управляемой имитационной модели и выделены основной процесс в пространстве результирующих характеристик и процесс управления в пространстве управляемых параметров. Предложен алгоритм управления градиентного типа, относящийся к классу алгоритмов стохастической аппроксимации, определены схемы его реализации и основные параметры. Проведен анализ сходимости алгоритма для различных планов: центрального, симметрично и плана с центральной точкой. Показано, что план с центральной точкой обладает лучшими характеристиками. Близки к нему по дисперсии оценки симметричный и центральный планы, которые незначительно отличаются друг от друга. Однако центральный план требует в два раза меньшего числа замеров для определения оценки экстремума, что важно при имитационном моделировании. Результаты анализа показали устойчивую к начальному состоянию и дисперсии сходимость алгоритмов с симметричным и центральным планом.

Ключевые слова: имитация, гауссовские процессы, среднеинтегральные оценки, дисперсия, тренд, моделирование, нестационарные процессы, автокорреляция, сходимость, переходный режим, системы массового обслуживания, рекуррентный анализ.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

ALGORITHM OF IMITATION CONTROLLED PROCESS IN A QUEUING SYSTEM

Timofeev Paul A., Ph.D., Advisor, Company "Centre for Analysis of Projects", 1/23 Staryi Petrovsko-Razumovsky pr-d, Moscow, 127287, Russia, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

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

Goryachkin Boris S., Ph.D., Moscow State Technical University (MSTU), NE Bauman, 5 2-nd Baumanskaya str., Moscow, 105005, Russia, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

Stroganov Dmitry V., Ph.D., Moscow State Technical University (MSTU), NE Bauman, 5 2-nd Baumanskaya str., Moscow, 105005, Russia, e-mail: kafedra@asu.madi.ru.

The article investigates the methods of using simulation models to solve the problems of parametric synthesis, which leads to the choice of values of variable parameters, delivering extreme objective function. The range of values of variable parameters is determined in accordance with the possibilities of parameterization of the model. It is assumed that computes the objective function using a simulation model of the object, which allows us to calculate the objective function for all values of variable parameters in a given range of parameters. For each value model unambiguously defines the value of the objective function. Since the procedure of simulation and optimization algorithms require substantial computational resources, the article suggests to combine the processes of search engine optimization and simulation models in a single manageable. Completed formal description of a controlled simulation model and highlights the main process in the space of the resulting performance and process management in the space of control parameters. We propose a control algorithm of gradient type, belonging to the class of stochastic approximation algorithms are defined scheme of its implementation and the basic parameters. The analysis of the convergence of the algorithm for different plans: a central, symmetric, and the plan with a central point. It is shown that the plan with the central point has the best characteristics. Variance of estimate are close to it by the symmetric and central plans, and differ slightly from each other. However, the central plan requires half the number of measurements to determine the assessment of the extremum, which is important for simulation. The results showed robust to the initial state and the variance of the convergence of the algorithm with the symmetric and the central plan.

Key words: *simulation, Gaussian processes, mean integral evaluation, variance, trend, modeling, non-stationary processes, autocorrelation, convergence, transition regime, queuing system, recursive analysis.*

Задача параметрического синтеза заключается в выборе значений варьируемых параметров, доставляющих экстремум целевой функции. Область значений варьируемых параметров определяется в соответствии с возможностями изменения исследуемой системы. Для вычисления значений целевой функции используется имитационная модель системы. Предполагается, что имитационная модель позволяет вычислять целевую функцию для всех значений варьируемых параметров в заданной параметрической области. Для каждого значения параметра модель однозначно определяет значение целевой функции:

$$Y = Y(X), \quad (1)$$

$X \in XX$ – область значений варьируемых параметров; $Y \in YY$ – область значений целевой функции.

В задачах максимизации целью эксперимента с моделью является поиск оптимальных значений параметров.

$$X^* = \arg \max_{X \in XX} Y(X). \quad (2)$$

При каждом фиксированном значении X модель позволяет вычислять оценку целевой функции с любой, наперед заданной степенью точности.

Однако в задачах параметрического синтеза требуемое количество оценок, как правило, велико. С учетом больших затрат времени на получение каждой оценки в имитационной модели решение задачи синтеза может оказаться невозможным. Поэтому необходимо получать оценки целевой функции на основе анализа коротких интервалов выходных имитационных процессов, которые в этом случае оказываются нестационарными.

Поскольку процедура поиска экстремума существенно усложняется, предлагается совместить процессы поисковой оптимизации и имитации в единой модели, которую будем называть управляемой имитационной моделью, а процесс, порожденный ею, назовем управляемым имитационным процессом.

Принципы построения управляемой имитационной модели. В ходе функционирования управляемой имитационной модели значения варьируемых параметров целенаправленно изменяются в сторону увеличения целевой функции на основании грубых оценок, полученных в локальной окрестности исследуемой точки. Однако при этом достаточно велика вероятность выбора ошибочного направления. Таким образом, управляемая имитационная модель, помимо случайного процесса поведения исследуемой характеристики, определяет и процесс случайного блуждания в пространстве управляемых параметров.

Пусть для получения конкретного значения целевой функции Y необходимо обработать выходной имитационный процесс $\xi(t)$, генерируемый оператором $H(A, t, \omega)$ и определенный на пространстве S . Пусть во множестве аргументов A задано подмножество управляемых параметров $U \subset A$, формирующее координатное пространство S_U . При этом полагаем, что изменяются значения параметров, входящих в подмножество U , в то время как значения параметров из подмножества $A \setminus U$ остаются неизменными. Обозначим точку пространства S_U как $X (X \in S_U)$, а соответствующий процесс как $\xi_X(t)$.

В дальнейшем будем предполагать, что:

a) процессы $\xi_X(t)$ стационарны. Нестационарность возникает лишь на первом этапе за счет фиксированного начального состояния процесса;

b) $\xi_X(t|s_j)$ – случайный процесс $\xi_X(t)$, начальное состояние которого равно $s_j (s_j \in S)$;

c) независимо от начального состояния существует единственное предельное распределение процесса $\forall s_j \lim_{T \rightarrow \infty} \xi_X(t|s_j) = \xi_X$. Значение предела зависит лишь от значения управляемого параметра X ;

d) целевая функция управляемой модели является математическим ожиданием предельного случайного процесса ξ_X

$$Y(X) = M \xi_X; \quad (3)$$

e) процессы $\xi_X(t)$ эргодичны и $\forall X \in S_U M \xi_X = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \hat{\xi}_X(t) dt$,

где $\hat{\xi}_X(t)$ выборочная траектория случайного процесса $\xi_X(t)$;

f) для оценки целевой функции используется среднеинтегральная характеристика процесса:

$$\hat{Y}(X) = \frac{1}{T} \int_0^T \hat{\xi}_X(t|s) dt. \quad (4)$$

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Из вышеуказанных предположений следует:

$$\forall s \in S \quad Y(X) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \widehat{\xi}_X(t|s) dt. \quad (5)$$

Однако, поскольку значения T ограничены, то оценки $\widehat{Y}(X)$ являются смещенными. Назовем T *интервалом управления*. Будем полагать, что в ходе моделирования значение X остается неизменным в течение интервала управления и изменяется в моменты окончания интервала управления в соответствии с полученными интегральными оценками $\widehat{Y}(X)$ на интервале управления T .

Будем называть процесс $\xi_X(t)$, определенный на пространстве S , *основным процессом*. Введем понятие *процесса управления* $\eta(t)$. Процесс $\eta(t)$ задан на пространстве S_U и определяет значения X , изменяемые в моменты времени t_i , соответствующие моментам окончания интервалов управления. В предположении, что на интервале управления значение X остается неизменным, возможно получение характеристик процесса управления. Будем предполагать, что значение T постоянно на всем интервале исследования.

Алгоритм управления. В качестве алгоритмов управления целесообразно выбрать алгоритмы стохастической аппроксимации.

Пусть X векторная переменная в R^N , для которой выполняются условия:

1. Каждому значению X соответствует случайная величина Y с математическим ожиданием $MY(X)$.
2. Будем полагать, что $MY(X)$ имеет единственный максимум в точке X^* (в основном без ограничения общности будем полагать $X^* = 0$).
3. $MY(X)$ является непрерывной функцией с непрерывными первыми и вторыми производными. Обозначим их $B(X)$ и $A(X)$ соответственно.
4. Вторые частные производные $\partial^2 MY / \partial x_i \partial x_j$ ограничены на всей области.
5. Пусть $\{a_k\}$ и $\{c_k\}$ – две последовательности положительных чисел, удовлетворяющие условиям:

$$\text{а) } \lim_{k \rightarrow \infty} c_k = 0, \text{ б) } \sum_1^{\infty} a_k = \infty, \text{ в) } \sum_1^{\infty} a_k \cdot c_k < \infty, \text{ г) } \sum_1^{\infty} \left(\frac{a_k}{c_k} \right)^2 < \infty. \quad (6)$$

6. Строится рекуррентная последовательность случайных векторов X :

$$\text{Переход по градиенту: } X_{k+1} = X_k + a_k \frac{\Delta Y_k(c_k)}{c_k}. \quad (7)$$

$$\text{Переход по знаку приращения: } X_{k+1} = X_k + a_k \cdot \text{sign}(\Delta Y_k).$$

7. Вектор ΔY_k определяется на основании реализации случайных величин в локальной окрестности точки X_k в соответствии с одним из планов Π_1 , Π_2 или Π_3 :

Π_1 – центральный план:

$$\Pi_1 = [X_K, X_K + c_K E_1, \dots, X_K + c_K E_I, \dots, X_K + c_K E_N]^T; \quad (8)$$

Π_2 – симметричный план:

$$\Pi_2 = [X_K + c_K E_1, \dots, X_K + c_K E_I, \dots, X_K + c_K E_N]^T; \quad (9)$$

Π_3 – план с центральной точкой:

$$\Pi_3 = [X_K, X_K + c_K E_1, X_K - c_K E_1, \dots, X_K + c_K E_N, X_K - c_K E_N]^T, \quad (10)$$

где

$$E_i = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}^T.$$

8. Дисперсия оценки σ_k^2 в каждой точке плана X_k :

$$\sigma_k^2 \leq \sigma^2 < \infty. \quad (11)$$

При выполнении перечисленных условий последовательность X_k с вероятностью 1 сходится к нулю.

Класс последовательностей $\{a_k\}$ и $\{c_k\}$ может быть весьма разнообразный, но в практике имитации достаточно рассмотреть степенные зависимости.

$$a_k = \frac{a_0}{k^{ap}}; c_k = \frac{c_0}{k^{cp}}. \quad (12)$$

Для определенных последовательностей a_k и c_k условия 5 дают следующие ограничения на показатели степеней:

$$\text{а) } ap > 0, \text{ б) } ap < 1, \text{ в) } cp + ap > 1, \text{ г) } ap - cp > 0,5. \quad (13)$$

После преобразований получим:

$$1 \geq ap > 0,75 \text{ и } ap - 0,5 > cp > 1 - ap. \quad (14)$$

Алгоритм построения управляемого имитационного процесса. Как следует из (8)–(10), для определения координат вектора ΔY_k необходимо произвести L замеров значения Y . Величина L равна: $N+1$ – для плана П1; $2N$ – для плана П2; $2N+1$ – для плана П3.

Значение параметра в окрестности точки X_k , соответствующее l -му замеру, будем обозначать как $X_{k,l}$. Таким образом, для определения координат вектора ΔY_k необходимо построить семейство процессов $(\xi_{X_{k,l}}(t | s_k))_{l=1}^L$.

В результате проведенной выше формализации алгоритм функционирования управляемой имитационной модели представляет собой следующую последовательность действий:

1. Начальная настройка модели и выбор начального значения управляемого параметра $X_0, k = 0$.

2. При заданном значении параметра X_k в его локальной окрестности в соответствии с одним из планов Π_i ($i = 1, 2, 3$) генерируются выборочные траектории $(\xi_{X_{k,l}}(t | s_k))_{l=1}^L$ длительностью T каждая из общего начального состояния s_k .

3. Вычисляются среднеинтегральные оценки основного процесса для всех $l = 1 \dots L$ при общем начальном состоянии s_k .

$$\zeta_{X_{k,l}}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T \xi_{X_{k,l}}(t | s_k) dt. \quad (15)$$

4. Вычисляются оценки координат вектора $\hat{\beta}_k$ – градиента функции $Y(X_k)$.

5. Выбирается очередное значение управляемого параметра:

$$X_{k+1} = X_k + a_k \hat{\beta}_k. \quad (16)$$

6. Задается начальное состояние s_{k+1} следующего интервала управления, равное конечному состоянию одного из процессов предыдущего шага.

7. В соответствии с выбранным критерием останова выполняется переход к пункту 2, либо к окончанию моделирования.

Рисунок 1 иллюстрирует описанный выше алгоритм.

**СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

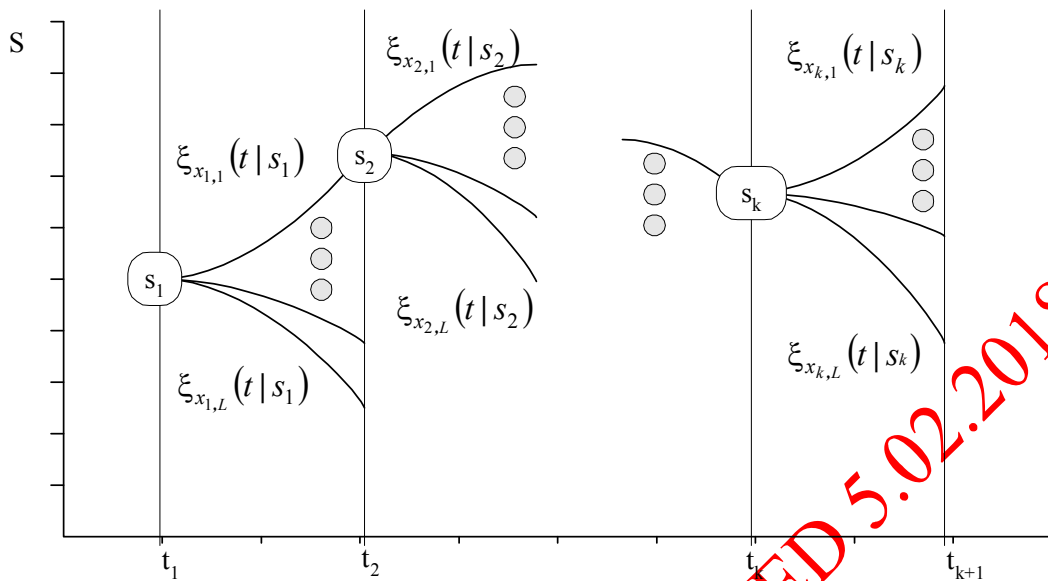


Рис. 1. Управляемый имитационный процесс

Таким образом, для решения поставленной задачи оптимизации необходимо знать поведение:

- основных процессов $\xi(t|s_j)$;
- характеристик $\zeta(T|s_j)$ основного процесса;
- процесса управления $\eta(t)$;
- управляемого имитационного процесса.

Рекуррентный анализ сходимости. Выполним анализ сходимости алгоритма управления на основе исследования второго момента значения управляемого параметра X . Для рекуррентной схемы, приведенной выше, справедливо соотношение:

$$M_{k+1} = w_k M_k + u_k. \quad (17)$$

Асимптотический анализ этого соотношения приводит к выражению:

$$M_{k+1} = \prod_{i=0}^k w_i M_0 + \sum_{i=0}^k u_i \prod_{j=i+1}^k w_j, \quad (18)$$

где w_k и u_k – функциональные коэффициенты, определяемые видом плана;

$M_k = M(X_k^2)$ – математическое ожидание квадрата управляемого параметра.

Первое слагаемое определяет влияние начальных условий на дисперсию, а второе – выбор показателей сходимости a_k , c_k и дисперсии оценки.

Рассмотрим рекуррентные соотношения оценки сходимости в одномерном случае для квадратичной функции $y = -Ax^2$.

П1 (центральный план):

$$X_{k+1} = X_k + a_k \frac{Y(X_k + c_k) - Y(X_k)}{c_k},$$

$$M(X_{k+1}^2) = M(X_k^2)(1 - 2a_k)^2 + \left(4\sigma^2 \frac{a_k^2}{c_k^2} + (Aa_k c_k)^2 \right), \quad (19)$$

$$w_k = (1 - 2a_k)^2,$$

$$u_k = 4\sigma^2 \frac{a_k^2}{c_k^2} + (a_k c_k)^2.$$

П2 (симметричный план):

$$X_{k+1} = X_k + a_k \frac{Y(X_k + c_k) - Y(X_k - c_k)}{2c_k},$$

$$M(X_{k+1}^2) = M(X_k^2) \left((1 - 2Aa_k)^2 + 12A^2a_k^2 \right) + 2 \frac{a_k^2}{c_k^2} \sigma^2, \quad (20)$$

$$w_k = (1 - 2Aa_k)^2 + 12A^2a_k^2,$$

$$u_k = 2 \frac{a_k^2}{c_k^2} \sigma^2.$$

П3 (план с центральной точкой):

$$X_{k+1} = X_k + \frac{a_k}{c_k^2} \left(Y(X_k) - \frac{Y(X_k + c) + Y(X_k - c)}{2} \right),$$

$$M(X_{k+1}^2) = M(X_k^2) (1 - 3A_1a_k)^2 + \frac{3\sigma^2}{2} \frac{a_k^2}{c_k^4}, \quad (21)$$

$$w_k = (1 - 3A_1a_k)^2,$$

$$u_k = \frac{3\sigma^2}{2} \frac{a_k^2}{c_k^4}.$$

Проведем сравнительный анализ вышеуказанных рекуррентных соотношений при некоторых выборочных значениях a_k , c_k , X_0 и σ . Значения дисперсий величины X в зависимости от количества шагов для выбранных планов и при различных значениях параметров алгоритмов приведены на рисунках 2 и 3.

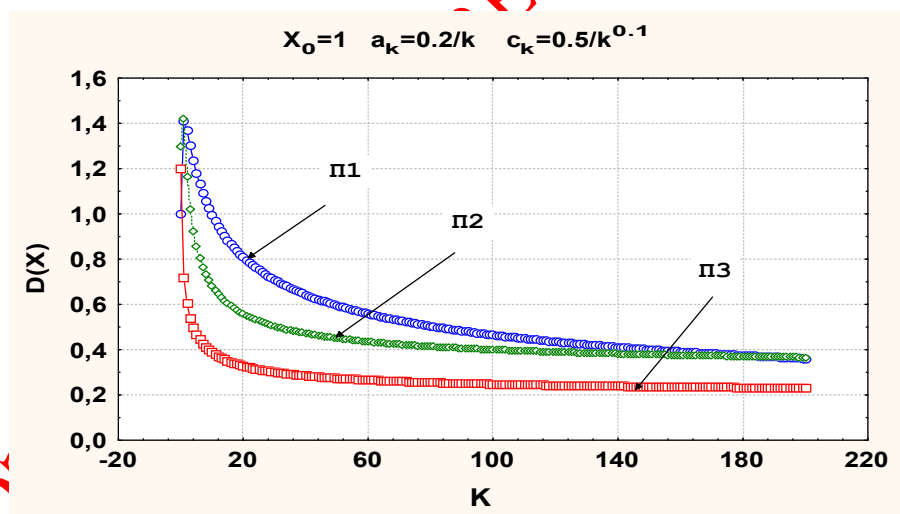


Рис. 2. Дисперсия оценки для различных планов при $\sigma = 1$

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

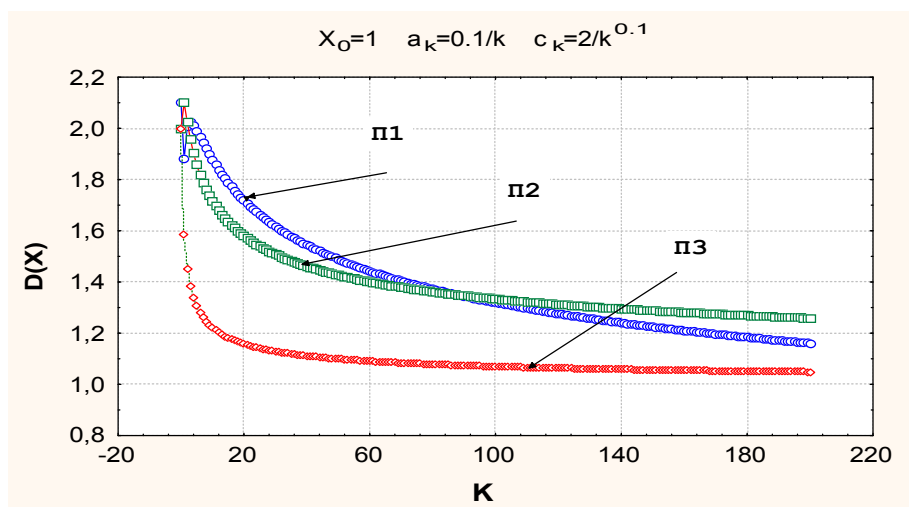


Рис. 3. Дисперсия оценки для различных планов при $\sigma = 10$

Как видно из графиков, план с центральной точкой обладает лучшими характеристиками. Близки к нему по дисперсии оценки симметричный и центральный планы, которые незначительно отличаются друг от друга. Однако центральный план требует в два раза меньшего числа замеров для определения оценки экстремума, что важно при имитационном моделировании. Результаты анализа показали устойчивую к начальному состоянию и дисперсии сходимость симметричного и центрального алгоритмов.

Приведенные рекуррентные соотношения дают лишь верхнюю оценку дисперсии, поэтому был проведен имитационный эксперимент. На основании обработки 100 выборочных траекторий управляемого параметра X построен график математического ожидания $M(X)$ и дисперсии $D(X)_S$ в зависимости от номера шага и $\sigma = 10$. Для сравнения приведен график дисперсии $D(X)_R$, полученной при рекуррентном анализе.

Скорость сходимости алгоритмов существенно зависит от характеристик функционала, задаваемого имитационной моделью, и параметров самого алгоритма стохастической аппроксимации. В связи с этим был проведен ряд экспериментов по оценке влияния параметров алгоритма на скорость сходимости.

В итоге можно сделать следующие рекомендации:

- 1) при далеких от экстремума начальных состояниях значение параметра a_0 лучше брать большим, а при близких – малым. При этом величина дисперсии оценки функционала практически не влияет на оптимальное значение a_0 ;
- 2) увеличение нормы квадратичной функции $\|A\|$ приводит к уменьшению оптимальных значений параметров a_0 и c_0 . Увеличение как нормы, так и дисперсии оценки уменьшает влияние начального отклонения от экстремума на выбор значений параметров a_0 и c_0 ;
- 3) при вариациях дисперсии оценки функционала получен следующий результат: увеличение СКО оценки Y в 10 раз привело к увеличению СКО оценки параметра X в 3 раза. Таким образом, дисперсия оценки функционала слабо влияет на сходимость алгоритма.

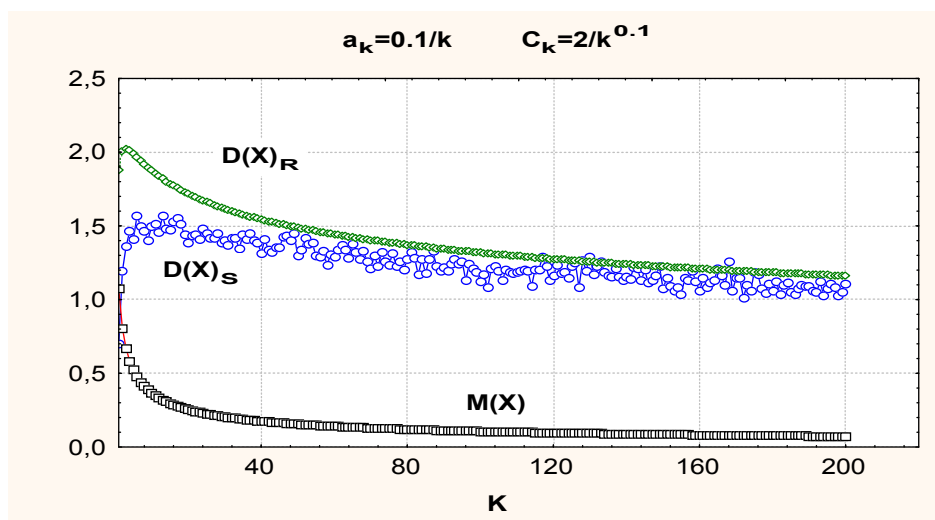


Рис. 4. Имитационные оценки тренда и дисперсии X

В целях использования имитационных моделей в ходе параметрической оптимизации предлагается создавать имитационную модель, совмещающую процесс поисковой оптимизации и имитации. Такая модель в дальнейшем называется *управляемой имитационной моделью*, а ее выходной процесс – *управляемым имитационным процессом*. Выполнено формализованное описание управляемой имитационной модели, выделены *основной процесс* в пространстве выходных состояний и *процесс управления* в пространстве управляемых параметров, а также описан алгоритм их взаимодействия. Предложен алгоритм управления градиентного типа, относящийся к классу алгоритмов стохастической аппроксимации, определены схемы его реализации и основные параметры. Показано, что все предпосылки реализации предложенного алгоритма выполняются.

УДК 539.193/.194; 535/.33/34

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДИАБАТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ПОЛИХЛОРИРОВАННЫХ ДИБЕНЗОЦИКЛОВ. ОКТОХЛОРДИБЕНЗОФУРАН, ОКТОХЛОРДИБЕНЗОТИОФЕН

Элькин Михаил Давыдович, доктор физико-математических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru.

Смирнов Александр Петрович, старший преподаватель, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20 а, e-mail: apsmir@yandex.ru.

Джалмухамбетова Елена Азатуллаевна, кандидат физико-математических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: alenna@list.ru.

Гайсина Альфия Рафаиловна, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: gaisinaalfiya@mail.ru.

Алыкова Ольга Михайловна, кандидат педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru.

Статья посвящена построению структурно-динамических моделей полихлорзамещенных дибензогетероциклических соединений. Для октохлордифензофурана и октохлордифензотиофена определены геометрические параметры молекул, такие как длины валентных связей и величины углов между ними. Описана методика оценки ангармонического смещения полос в колебательных