Секция 1. Популяционная динамика

К расчету переноса погрешности параметров модели динамики популяции с помощью сопряженных уравнений и полиномиального хаоса

Алексеев А.К.

РКК Энергия, ул. Ленина, 4а, Королев, 141070, Россия
e-mail: Aleksey.k.Alekseev@gmail.com

Рассмотрим модель динамики популяции диффузионного типа [1]

$$\frac{\partial U}{\partial t} - D\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - D\frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - rU(1-U) + h(x)U = 0, U_{t=0} = U_0(x) \tag{1}$$

Здесь $U(x,y)$- плотность популяции, r-темп прироста, $h(x,y)$- вылов. Считаем, что коэффициенты модели являются случайными величинами с известным распределением.

Целью работы является определение плотности распределения целевого функционала при известных плотностях распределения коэффициентов модели или начальных данных. Для простоты выберем функционал

$$\varepsilon = \int_0^T \int_\Omega U\delta(x - x_{tar})d\Omega dt \tag{2}$$

Основным инструментом в данном рассмотрении будут являться сопряженные уравнения, получаемые стандартным способом [2].

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - <D> \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - <D> \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - \delta(x - x_{tar}) = 0, \Psi_{t=t_f} = 0 \tag{3}$$

При выведении мы представляем случайные величины в виде их детерминированного среднего и случайного отклонения, $D = <D> + \delta D$, $r = <r> + \delta r$, $h = <h> + \delta h$, $U_0 = <U_0> + \delta U_0$.

Плотность распределения функционала можно рассчитать, используя

$$\delta\varepsilon = \varepsilon - <\varepsilon> = \int_0^T \int_\Omega \Psi \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\delta D d\Omega dt - \int_0^T \int_\Omega \Psi \delta r(1+2U)d\Omega dt - \int_0^T \int_\Omega \Psi \delta h d\Omega dt \tag{4}$$

и метод Монте-Карло в соответствии с [3,4]. Этот подход обеспечивает высокую вычислительную эффективность, но ограничен предположением о малости отклонения случайной величины от среднего значения. Для больших отклонений представляется целесообразным раскладывать случайную функцию в ряд по Эрмитовым полиномам (аппроксимация полиномиальным хаосом). В рамках этого подхода для случайного вектора $(\xi_{i,...,}\xi_{i_n})$, принадлежащего пространству R^n размерности n, и мультииндекса $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2 ... \alpha_n)$ со степенью $p = |\alpha| = (\alpha_1 + \alpha_2 + ... \alpha_n)$ (порядком полинома) многомерные Эрмитовы полиномы определяются выражением

$$H_p(\xi_{i,...,}\xi_{i_p}) = e^{\xi^* \xi/2}(-1)^p \frac{\partial^p}{\partial \xi_{i_1} ... \partial \xi_{i_p}} e^{-\xi^* \xi/2} \tag{5}$$

Они задают ортонормированный базис в $L_2(R^n, \mu^n)$, где μ^n Гауссова мера на R^n: $\mu = (2\pi)^{-n/2} e^{-\xi^* \xi/2}$.

Соответствующее разложение имеет вид $f(\xi) = \sum\limits_0^P f_n H_n(\xi)$, где $f_n = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(\xi) H_n(\xi) \rho(\xi) d^n \xi$, и $\rho(\xi) = (2\pi)^{-n/2} e^{-\xi^* \xi/2}$.

Непосредственная реализации спектрального метода приводит к достаточно громоздким выражениям и необходимости изменять существующие программы. В связи с этим появился “неинтрузивный” метод [5], следующего вида:

$$\alpha^*(x, y, \vec{\xi}) = \sum_{i=0}^{P} \alpha_i(x, y) H_i(\vec{\xi}) \tag{6}$$

Здесь $\alpha_i(x, y)$- детерминированные коэффициенты, $H_i(\vec{\xi})$-случайные ортогональные функции, $\vec{\xi} = (\xi_1 ..., \xi_n)$ -n-мерный случайный вектор с известной плотностью распределения, $\alpha^*(x, y, \vec{\xi})$-наблюдаемые величины, которые можно рассчитать детерминировано, с использованием существующих и отлаженных кодов. Детерминированные коэффициенты определяются из решения системы уравнений (6). Данный подход существенно эффективнее полного Монте-Карло, однако, число обращений к основной программе все равно достаточно велико. Использование информации о градиентах (например, в [6] получаемой с помощью системы автоматического дифференцирования) позволяет увеличить эффективность расчета. Запишем разложение функционала в несколько иной форме

$$\varepsilon = b_0 + \sum_{i_1=1}^{n} b_{i_1} H_1(\xi_{i_1}) + \sum_{i_1=1}^{n} \sum_{i_2=1}^{i_1} b_{i_1 i_2} H_2(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}) + \sum_{i_1=1}^{n} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} b_{i_1 i_2 i_3} H_3(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}, \xi_{i_3}) + ... \tag{7}$$

Коэффициенты $b_{i_1 i_2 i_3}$ неизвестны и определяются по некоторому ансамблю решений. Использование данных по градиенту сокращает этот ансамбль в $n+1$ раз.

Пусть мы имеем с помощью решения сопряженных уравнений величину градиента, это стоит решения еще одной задачи, близкой по затратам ресурсов к основной. В результате получаем сразу n величин Недостающую информацию добираем за счет дополнительных $\xi^{(m)}$. В итоге система уравнений для b_j (сначала развертываем по α, затем сдвигаем m)

$$\sum_1^P b_j \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} H_j(\xi^{(m)}) = \Psi(x_\alpha, \xi^{(m)}) a_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} H_i(\xi_\alpha^{(m)}) (\alpha = 1...n, m = 1...M) \qquad (8)$$

Таким образом, число обращений к решению основной задачи (и близкой к ней по ресурсам сопряженной) сокращается с $(np+1)n$ до $2(np+1)n/(n+1) \sim 2np$.

В работе на численных примерах оценена обусловленность системы уравнений и представлены результаты ее численного решения, рассмотрены возникающие при этом сложности и варианты их устранения.

Заключение. Использование сопряженных уравнений и полиномиального хаоса перспективно с точки зрения построения вычислительно эффективного алгоритма без предположений о достаточной малости отклонения случайной величины от среднего значения.

Литература

1. Ding W. *Optimal Harvesting of a Spatially Explicit Fishery Model*, 2007 World Conf. on Natural Resource Modeling June 19 – 22, Cape Cod.
2. Марчук Г.И. *Сопряженные уравнения и анализ сложных систем*, М., Наука, 1992.
3. Estep D., Neckels D. *Fast and reliable methods for determining the evolution of uncertain parameters in differential equations*, JCP **213**, 530–556.
4. Ghate D. Giles M. B. *Inexpensive Monte Carlo Uncertainty*, SAROD-2005, Tata McGraw-Hill.
5. Hosder S., Walters R. W. and Perez R. *A Non-Intrusive Polynomial Chaos Method For Uncertainty Propagation in CFD Simulations*, AIAA 2006-891, 1–19.
6. Isukapalli S.S., Roy A., and Georgopoulos P.G. *Efficient Sensitivity/Uncertainty Analysis using the combined Stochastic Response Surface Method (SRSM) and Automatic for Fortran Code (ADIFOR) Differentiation*, Risk Analysis **20**, 591–602.