ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.2:534

ОПТИМАЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ В ТЕОРИИ ВОЗМОЖНОСТЕЙ

Ю. П. Пытьев

(*кафедра компьютерных методов физики*)

Рассмотрены теоретико-возможностные методы принятия решений, основанные на минимизации возможности и (или) необходимости потерь, обусловленных решением.

Введение

Задачи оптимального оценивания, рассмотренные в работе [1], образуют частный случай проблемы оптимального решения, в которой требуется найти наилучшую оценку нечеткого элемента или параметра его распределения при тех или иных условиях. В этой работе рассмотрены другие аспекты проблемы принятия оптимального решения (см. также [2]).

Типичный сценарий, на фоне которого далее рассматривается проблема принятия решения, характеризуется параметром $x \in X$, определяющим ситуацию, состояние среды или какие-либо другие условия, при которых надлежит принять решение $y \in Y$, где Y — множество возможных решений. В задаче принятия решения зададим нечеткое отношение потерь $(X \times Y, l(\cdot,\cdot))$, в котором $l(x,y)$ — возможность потерь, сопутствующих принятию решения $y \in Y$ в ситуации, определенной значением $x \in X$. Можно сказать, что каждому решению $y \in Y$ сопоставлено нечеткое множество $(X, l(\cdot, y))$, возможность $l(x,y)$ включения элемента x в которое отождествляется с возможностью потерь, ассоциированных с решением y.

1. Решение в известной ситуации

Если ситуация $x \in X$ известна, то решение $y_* = y_*(x) \in Y$ принимается согласно условию

$$l(x, y_*) = \min_{y \in Y} l(x,y), \quad x \in X,$$

при котором ему отвечает минимальная возможность потерь. Выбрав для каждого $x \in X$ какое-либо одно решение $y_*(x)$, получим функцию $y_*(\cdot)\colon X \to Y$, отображающую множество ситуаций в множество решений и тем самым определяющую стратегию решения. В общем случае $y_*(\cdot)$ можно рассматривать и как многозначную функцию:

$$y_*(x) = \{y \in Y,\ l(x,y) = \min_{z \in Y} l(x,z)\}, \quad x \in X.$$

2. Решение в неизвестной ситуации. Рандомизация

Если ситуация $x \in X$ неизвестна и нет информации о возможности тех или иных значений $x \in X$, то решение можно определить как любой элемент $y_* \in Y$, для которого

$$\sup_{x \in X} l(x, y_*) = \min_{y \in Y} \sup_{x \in X} l(x,y).$$

Такое решение минимизирует максимальную возможность потерь и называется минимаксным. Соответственно минимаксная стратегия предписывает использовать любое решение y_* из множества $Y_* = \{y \in Y,\ l(y) = \min_{\tilde{y} \in Y} l(\tilde{y})\}$ минимаксных решений, где $l(y) = \sup_{x \in X} l(x,y),\ y \in Y$.

В тех случаях, когда решение предстоит принимать многократно, причем каждый раз при неизвестных условиях*) $x \in X$, возможность потерь иногда можно уменьшить в среднем, применяя так называемую рандомизированную стратегию.

Пусть $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$, $Y = \{y_1, \ldots, y_m\}$ и $l_i(y) = l(x_i, y)$, $y \in Y$, $i = 1, \ldots, n$. Назовем рандомизированной стратегию, при которой решение y_j принимается с вероятностью p_j, $j = 1, \ldots, m$, $p_1 + \ldots + p_m = 1$, и введем среднюю возможность потерь

$$l_{ip} = \sum_{j=1}^{m} l_i(y_j) p_j, \quad i = 1, \ldots, n, \quad p = (p_1, \ldots, p_m).$$

Минимаксной рандомизированной назовем стратегию, при которой распределение p вероятностей решений удовлетворяет условию

$$\max_{1 \leqslant i \leqslant n} l_{ip} = \min_{\tilde{p}} \max_{1 \leqslant i \leqslant n} l_{i\tilde{p}}.$$

На рис. 1 представлены минимаксные рандомизированная и нерандомизированная стратегии для случая $n = 2$, $m = 4$; $l(y_i)$ — точка с координатами $l_1(y_i), l_2(y_i)$, $i = 1, \ldots, 4$. Средняя возможность потерь $c = l_{1p} = l_1(y_1)p_1 + l_1(p_3)p_3 = l_{2p} = l_2(y_1)p_1 + {}+l_2(y_3)p_3$, $p = (p_1, 0, p_3, 0)$, отвечающая минимаксной рандомизированной стратегии, меньше возможности $\tilde{c}$ потерь, отвечающей минимаксной нерандомизированной стратегии. Рандомизированная стратегия предписывает решения y_1 и y_3 с вероятностями

*) Неизвестных, априори равновозможных условиях, см. следующий пункт.

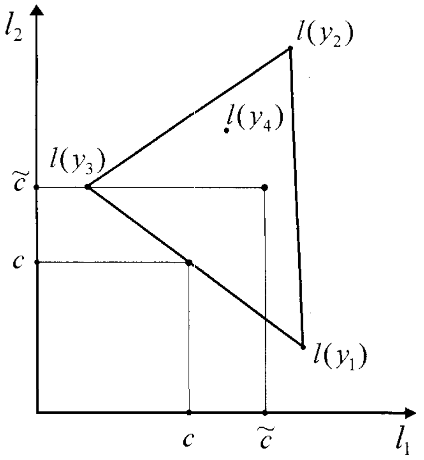

Рис. 1. Минимаксные рандомизированная и нерандомизированная стратегии решения

p_1 и p_3, $p_1+p_3=1$, соответственно, в то время как нерандомизированная предписывает решение y_3.

Аналогом минимаксной рандомизированной стратегии является минимаксная нечеткая (фазифицированная) стратегия, согласно которой каждое решение считается нечетким элементом $\eta \in Y$, распределение $\varphi^\eta(y)$, $y \in Y$, возможностей его значений определяется из условия

$$\sup_{y\in Y} \min\Big(\varphi^\eta(y), l(y)\Big) \sim \min, \tag{1}$$

в котором $l(y) = \sup\limits_{x\in X} l(x,y)$, $y \in Y$, и минимум справа вычисляется по всем распределениям $\varphi^\eta(\cdot)$ при условии $\sup\limits_{y\in Y} \varphi^\eta(y) = 1$.

Пусть $\min\limits_{y\in Y} l(y) = l(y_0)$. Тогда, очевидно, минимум в (1) достигается на

$$\varphi^\eta(y) = \begin{cases} 1, & y = y_0, \\ 0, & y \neq y_0, \end{cases} \quad y \in Y,$$

и соответствующая минимаксная стратегия оказывается четкой (не фазифицированной).

3. Решение в ситуации, заданной распределением возможностей ее значений

Если ситуация неизвестна, но задано распределение возможностей $\varphi^\xi(x)$ тех или иных ее значений $x \in X$, возможность потерь $\Lambda(y)$, обусловленных решением $y \in Y$, определим равенством

$$\Lambda(y) = \sup_{x\in X} \min\Big(l(x,y),\, \varphi^\xi(x)\Big).$$

В этом случае ситуация определена как заданный распределением $\varphi^\xi(\cdot)$ нечеткий элемент ξ, принимающий значения в X, а возможность потерь $\Lambda(y)$ — как возможность включения ξ в нечеткое множество $(X, l(\cdot,y))$ [1].

Определение 1. Всякое P-оптимальное решение $y_* \in Y$ определяется условием

$$\Lambda(y_*) = \min_{y\in Y} \Lambda(y),$$

при котором возможность потерь минимальна.

В том случае, когда распределение возможностей $\varphi^\xi(\cdot)$ неизвестно, можно исходить из априори равных возможностей всех ситуаций ($\varphi^\xi(x) = 1$, $x \in X$), или, что то же самое, — из наиболее неблагоприятного распределения ситуаций, при котором

$$\Lambda(y) = \sup\nolimits_{\varphi^\xi(\cdot)} \sup\nolimits_{x\in X} \min\Big(l(x,y),\, \varphi^\xi(x)\Big) = \\ = \sup\nolimits_{x\in X} l(x,y), \qquad y \in Y.$$

Этот случай рассмотрен в предыдущем пункте.

Для отыскания N-оптимального решения рассмотрим необходимость потерь

$$M(y) = \inf_{x\in X} \max\Big(\neg\varphi^\xi(x),\, l(x,y)\Big),$$

сопутствующих решению $y \in Y$, равную необходимости включения ξ в нечеткое множество $(X, l(\cdot,y))$, $y \in Y$. N-оптимальное решение $y^* \in Y$ определим из условия

$$M(y^*) = \min_{y\in Y} M(y),$$

согласно которому необходимость потерь, сопутствующих решению y^*, минимальна.

Определение 1*. Всякий элемент $y^* \in \{y \in Y,\, M(y) = \min_{z\in Y} M(z)\}$ называется N-оптимальным решением.

4. Байесовская стратегия

Рассмотрим случай, когда решение предстоит принимать многократно, причем при неизвестных случайных условиях. Пусть $X = \{x_1,\ldots,x_n\}$, $Y = \{y_1,\ldots,y_m\}$. Пусть также $q = (q_1,\ldots,q_n)$ — распределение вероятностей условий, $p = (p_1,\ldots,p_m)$ — распределение вероятностей решений, определяющее рандомизированную стратегию, и $l_{pq} = \sum\limits_{i=1}^{n}\sum\limits_{j=1}^{m} l(x_i,y_j)p_j q_i$ — средняя возможность потерь, отвечающая распределениям p, q. Если распределение q известно, то так называемая байесовская стратегия определяется распределением вероятностей $p = p_*$ согласно условию (см. [3])

$$l_{p_* q} = \min_p l_{pq}.$$

Решение этой задачи проиллюстрировано на рис. 2, где $\bar{l}$ — точка с координатами $\bar{l}_i = \sum\limits_{j=1}^{4} l(x_i,y_j)p_j$, $i = 1, 2$, $l_1q_1 + l_2q_2 = \bar{c} = \bar{l}_1 q_1 + \bar{l}_2 q_2$ — уравнение прямой, проходящей через $\bar{l}$, $\bar{c}$ — средняя возможность потерь, отвечающая рандомизированной стратегии, при которой решение y_j принимается с вероятностью p_j, $j = 1,\ldots,4$. Для данных q_1, q_2 байесовская стратегия нерандомизирована и предписывает каждый раз решение y_3 ($p_* = (0,0,1,0)$), при котором возможность потерь минимальна и равна $c_3 < \bar{c}$.

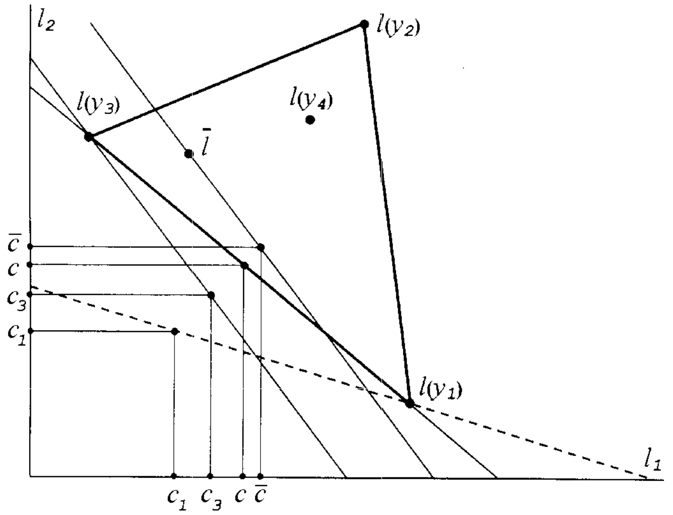

Рис. 2. Иллюстрация байесовских стратегий, отвечающих различным распределениям вероятностей ситуаций

Байесовская стратегия соответствует первой точке пересечения прямой $l_1 q_1 + l_2 q_2 = c = \mathrm{const}$ с выпуклой оболочкой точек $l(y_1), \ldots, l(y_4)$ при увеличении c, начиная с $c = 0$. В данном случае это точка $l(y_3)$ при $c = c_3$. Если таких точек пересечения несколько, как, например, в случае вероятностей q_1, q_2, при которых прямые $l_1 q_1 + l_2 q_2 = \mathrm{const}$ параллельны прямой, проходящей через точки $l(y_1), l(y_3)$, то байесовская стратегия рандомизирована и определяется точкой с координатами c, c. В этом случае решения y_1 и y_3 применяются с вероятностями p_1 и p_3, удовлетворяющими условиям $l_1(y_1)p_1 + l_1(y_3)p_3 = l_2(y_1)p_1 + l_2(y_3)p_3 = c$, $p_1 + p_3 = 1$. Пунктирная прямая отвечает еще одному распределению q_1, q_2 условий. Соответствующая ему байесовская стратегия предписывает решение $y_1(p_* = (1,0,0,0))$ при возможности потерь c_1.

Понятно, что наименее благоприятное распределение ($q^0 = (q_1^0, q_2^0)$) ситуаций, при котором байесовская возможность потерь максимальна, отвечает прямой $l_1 q_1^0 + l_2 q_2^0 = \mathrm{const}$, проходящей через точки $l(y_1)$ и $l(y_3)$. Соответствующая байесовская стратегия оказывается рандомизированной и обеспечивает среднюю возможность потерь, равную c. Эта стратегия совпадает с рассмотренной в предыдущем пункте минимаксной рандомизированной, что позволяет дать ей следующую естественную интерпретацию. Минимаксная рандомизированная стратегия обеспечивает минимальную среднюю возможность потерь при наихудшем распределении вероятностей ситуаций, при котором она является байесовской.

Байесовская стратегия, отвечающая наихудшему распределению вероятностей q^0 условий, определяется распределением вероятностей p^0 решений, удовлетворяющих условию $l_{p^0 q^0} = \min\limits_p \max\limits_q l_{pq}$.

5. Решение, учитывающее результат наблюдения за ситуацией

Если ситуация, в которой принимается решение, неизвестна, но допускаются наблюдения, позволяющие ее уточнять, то может быть известно совместное распределение $\varphi^{\xi,\tau}(x,t)$, $x \in X$, $t \in T$, возможностей ситуаций $\xi = x$ и результатов наблюдений $\tau = t$. В этом случае P-оптимальное решение $y = y_*(t) \in Y$, отвечающее результату наблюдения $\tau = t \in T$ и минимизирующее возможность потерь:

$$\Lambda(y(\cdot)) = \sup_{x,t} \min\left(l(x, y(t)), \varphi^{\xi,\tau}(x,t)\right) \sim \min_{y(\cdot):T\to Y},$$

определяется из условия

$$\Lambda(t, y_*(t)) = \min_{y\in Y} \Lambda(t|y), \quad t \in T, \tag{2}$$

где

$$\Lambda(t, y) = \sup_{x\in X} \min\left(l(x,y), \varphi^{\xi,\tau}(x,t)\right)$$

— возможность потерь, сопутствующих решению $y \in Y$ при наблюдении $t \in T$. Соответственно P-оптимальная стратегия решения задается любой функцией $y_*(\cdot)\colon T \to Y$, удовлетворяющей уравнению (2). Доказательство этого утверждения не отличается от доказательства теоремы 1 в [1].

П р и м е р. Пусть в задаче классификации $X = Y = \{1, \cdots N\}$, N — число классов, $l(x,y)$ — возможность потерь, сопутствующих ошибочному выбору класса с номером $y \in Y$ вместо класса с номером $x \in X$, $\varphi^{\xi\tau}(x,t)$ — возможность класса $x \in X$ и наблюдения $t \in T$.

Пусть, в частности, $l(x,y) = 1$ при $x \neq y$ и $l(x,y) = 0$ при $x = y$, $x, y \in \{1, ..., N\}$, тогда

$$\Lambda(t,y) = \max_{\substack{1\leqslant x\leqslant N,\\ x\neq y}} \varphi^{\xi,\tau}(x,t),$$

и P-оптимальная стратегия $y_*(\cdot)$ определяется условием

$$\varphi^{\xi,\tau}(y_*(t),t) = \max_{1\leqslant y\leqslant N} \varphi^{\xi,\tau}(y,t), \quad t \in T,$$

эквивалентным условию (2).

Пусть $l(x,y) > 0$ при $x \neq y$, $l(x,y) = 0$ при $x = y$, $x, y \in X = Y$. Тогда необходимость потерь, отвечающих стратегии решения $y(\cdot)\colon T \to Y$

$$\mathcal{M}(y(\cdot)) = \inf_{\substack{x\in X\\ t\in T}} \max\left(l(x,y(t)), \neg\varphi^{\xi,\tau}(x,t)\right).$$

$\mathcal{N}$-оптимальная стратегия $y^*(t)$ может быть найдена из условия

$$\inf_{x\in X} \max\left(l(x,y), \neg\varphi^{\xi,\tau}(x,t)\right) \sim \min_{y\in X}. \tag{3}$$

Так как

$$\max(l(x,y), \neg\varphi^{\xi,\tau}(x,t)) = \begin{cases} \neg\varphi^{\xi,\tau}(x,t), & x = y,\\ \geqslant \neg\varphi^{\xi,\tau}(x,t), & x \neq y,\end{cases}$$

то минимум левой части (3) по $y \in X$ может быть найден из условия

$$\neg\varphi^{\xi,\tau}(y,t) \sim \min_{y\in X}.$$

Следовательно, любая N-оптимальная стратегия $y^*(\cdot)\colon T \to Y$ удовлетворяет условию

$$\varphi^{\xi,\tau}(y^*(t),t) = \max_{y\in Y} \varphi^{\xi,\tau}(y,t)$$

и совпадает с P-оптимальной.

Литература

1. *Пытьев Ю.П.*. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1998. № 6. С. 3 (Moscow University Phys. Bull. 1998. No. 6. P. 1).
2. *Sugeno M.* // Trans. SICE. 1975. **11**, No. 6. P. 85.
3. *Пытьев Ю.П., Шишмарев И.А.* Курс теории вероятностей и математической статистики для физиков. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983.

Поступила в редакцию
15.07.98

УДК 536.75

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И СТРУКТУРА ТВЕРДОГО КИСЛОРОДА

П. Н. Николаев, А. И. Соколов, О. В. Кузьмина

(*кафедра квантовой статистики и теории поля*)

На основе ячеечно-кластерного разложения построена статистическая термодинамика твердого кислорода. Показано, что структура всех трех его фаз может быть описана с высокой степенью точности при использовании двухцентрового потенциала взаимодействия.

Введение

Для сферически несимметричных, в частности линейных, молекул, представителем которых является молекулярный кислород, существенно сложнее построить теорию их кристаллической фазы, чем для сферически симметричных молекул. В силу асимметрии у таких молекул существует возможность реализации большего числа структурных фаз. При этом кристаллическая решетка определяется, как правило, уже не одним, а несколькими параметрами. В результате в отличие от теории неупорядоченных фаз, состоящих из несимметричных молекул [1], теория упорядоченных фаз таких молекул сталкивается со значительными трудностями. Кроме того, хотя экспериментально структура всех трех фаз твердого кислорода установлена достаточно точно [2–4], публикуются и другие данные о структуре, основанные на более ранних работах [5, 6]. Поэтому построение последовательного теоретического описания термодинамических свойств твердого кислорода и его структуры остается актуальным.

Рассмотрим простейший случай системы из N одинаковых двухатомных молекул, заключенных в некотором макроскопическом объеме V при температуре T. Молекулы будем считать жесткими ротаторами с массой m и моментом инерции I. Положение и ориентация i-й молекулы полностью определяется векторами q_i в пятимерном пространстве. В качестве компонент вектора q_i^α выбираем три декартовы координаты (r_i) радиус-вектора центра масс i-й молекулы и два угла (θ и ϕ), определяющие ориентацию молекулы.

Гамильтониан рассматриваемой системы может быть записан в виде

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{p_i^{\alpha^2}}{2m} + \frac{p_{\theta_i}^2 + p_{\phi_i}^2/\sin^2\theta_i}{2I}\right) + U_N(q_1,\ldots,q_N), \tag{1}$$

где p_i^α — декартовы компоненты вектора импульса центра масс, p_{θ_i} и p_{ϕ_i} — компоненты импульса, соответствующие угловым координатам θ и ϕ. Потенциальная энергия системы при учете бинарных взаимодействий

$$U_N(q_1,\ldots,q_N) = \sum_{1\leqslant i<j\leqslant N} \Phi(q_i,q_j), \tag{2}$$

где $\Phi(q_i,q_j)$ — потенциал взаимодействия i-й и j-й молекул. Учет многочастичных взаимодействий [7] может быть осуществлен по теории возмущений.

Статистический интеграл системы имеет вид

$$Z_N = \int \exp(-H/kT)\, dp_1^1 \ldots dp_{\phi_N} dq_1 \ldots dq_N/(N!h^{5N}), \tag{3}$$

где k — постоянная Больцмана. Интегрирование по импульсам при учете (1) и (2) приводит к выражению

$$Z_N = Z_N^0 Q_N, \tag{4}$$

где

$$Z_N^0 = \frac{(4\pi)^N}{{\lambda_1}^{3N}{\lambda_2}^{2N}}, \quad \lambda_1 = \frac{h^2}{2\pi mkT}, \quad \lambda_2 = \frac{h^2}{2\pi IkT}, \tag{5}$$

$$Q_N = \frac{1}{(4\pi)^N N!} \times \\ \times \int \exp(-U_N/kT)\sin\theta_1\ldots\sin\theta_N\, dq_1\ldots dq_N \tag{6}$$

— конфигурационный интеграл.