

SECTION 2. Applied mathematics.
 Mathematical modeling.

THE OPTIMIZATION PROBLEM WITH LINEARIZED EQUATIONS f -PARAMETERS ($f_1, f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$)-SPECTRUM

Abstract: The optimization problems No.2, No.3 of the simulation are formulated and solved in the article and algorithms for modeling the missing non-dominant elements of the spectrum (Problem No. 2), modeling all elements of the spectrum of an unknown correlation matrix with given values of 6 f-parameters are implemented. The result of the simulation is in the first case (f_1, f_2, f_4, f_6)-spectrum, in the second - ($f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$)-spectrum calculated for the linearized equations functional parameters from the mathematical model of the spectrum of an unknown correlation matrix []. The program-table (for the Solver procedure) of modeling all elements of the spectrum of an unknown correlation matrix (Problem No. 2) was realized and tested on real data.

Key words: hyperparallelepiped, the ($f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$)-spectrum, the standard Microsoft Excel Solver.

Language: Russian

Citation: Zhanatauov SU (2017) THE OPTIMIZATION PROBLEM WITH LINEARIZED EQUATIONS f -PARAMETERS ($f_1, f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$)-SPECTRUM. ISJ Theoretical & Applied Science, 11 (55): 251-267.

Soi: <http://s-o-i.org/1.1/TAS-11-55-33> **Doi:**  <https://dx.doi.org/10.15863/TAS.2017.11.55.33>

ОПТИМИЗАЦИОННАЯ ЗАДАЧА С ЛИНЕАРИЗОВАННЫМИ УРАВНЕНИЯМИ f-ПАРАМЕТРОВ ($f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$)-СПЕКТРА

Аннотация: В статье сформулированы и решены оптимизационные задачи №2, №3 моделирования и реализованы алгоритмы моделирования отсутствующих недоминирующих элементов спектра (задача №2), моделирования всех элементов спектра неизвестной корреляционной матрицы с заданными значениями 6 f-параметров. Результатом моделирования является в первом случае (f_1, f_2, f_4, f_6)-спектр, во втором - ($f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$)-спектр, вычисленный при линейаризованных уравнениях функциональных параметров из математической модели спектра неизвестной корреляционной матрицы []. Реализована и апробирована на реальных данных [7] программа-таблица (для процедуры Solver) моделирования всех элементов спектра неизвестной корреляционной матрицы (задача №2): ($f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$) => $\{(b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)\}$ => $\{\omega_1, \dots, \omega_6\}$.

Ключевые слова: гиперпараллелепипед, ($f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$)-спектр, стандартный Microsoft Excel Solver.

Введение.

В условиях наноизмерений в материаловедении актуально моделирование бесконечного множества «жестких» (по периметру и объему) фигур (гиперэллипсоидов и гиперпараллелепипедов), вращающихся вокруг неподвижного центра в n-мерном пространстве. В качестве параметров и переменных математических моделей этих фигур можно рассматривать параметры и переменные спектра корреляционной матрицы. Математическая модель спектра неизвестной корреляционной матрицы пригодна для достижения нашей цели. Ее f-параметры ($f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$), модели (f_1, f_2, f_5)-спектров, (f_3, f_4, f_6)-спектров, λ -, ω -, a- и b-

переменные и оптимизационная задача [1] обеспечивают достижение нашей цели.

Гиперпараллелепипеды (их существует бесконечное количество и при $n=3$ вполне визуализируемы) с парами значений параметров (f_6, f_3)- и (f_1, f_5)-измерителей наноразмеров в постановке задачи №3 должны иметь постоянные периметры, объемы. Значение функции $f_6(\Lambda_{nn}) = \lambda_1/\lambda_2 + \dots + \lambda_{n-1}/\lambda_n = a_2 + \dots + a_n$ равно периметру параллелепипеда, а значение функции $f_3(\Lambda_{nn}) = \lambda_1/\lambda_n = a_2 \times \dots \times a_n$ - объему параллелепипеда со сторонами, равными a_2, \dots, a_n . Периметр и объем другого гиперпараллелепипеда со сторонами, равными $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, в который вписан гиперэллипсоид, с длинами полуосей $\lambda_1, \dots, \lambda_n$,

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344
ISI (Dubai, UAE) = 0.829
GIF (Australia) = 0.564
JIF = 1.500

SIS (USA) = 0.912
ПИИЦ (Russia) = 0.207
ESJI (KZ) = 3.860
SJIF (Morocco) = 2.031

ICV (Poland) = 6.630
PIF (India) = 1.940
IBI (India) = 4.260

равны значениям функций $f_1(\Lambda_{nn})=\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3+\dots+\lambda_n = n$, $f_5(\Lambda_{nn})=\lambda_1 \times \dots \times \lambda_n$. Внутри каждого гиперэллипсоида в соответствии с значениями указанных выше f-параметров располагаются модельные и «реальные» облака точек, внутри которых рассеяны множество из m n-мерных точек с координатами $\{(z^{(t,\ell)}_{k1}, \dots, z^{(t,\ell)}_{kn}), k=1, \dots, m, t=1, \dots, \infty, \ell=1, \dots, \infty\}$, со своей случайной «геометрией». Модельные облака n-мерных точек образуются при моделировании m точек с координатами $\{(z^{(t,\ell)}_{k1}, \dots, z^{(t,\ell)}_{kn}), k=1, \dots, m, t=1, \dots, \infty, \ell=1, \dots, \infty\}$ с применением Обратной модели главных компонент (ОМ ГК) [2-5], «реальное» облако содержит m n-мерных точек с координатами $(z_{k1}, \dots, z_{kn}), k=1, \dots, m$, образующих реальную стандартизованную выборку. Обычно рассматривается одна реальная стандартизованная выборка.

Модели (f_1, f_2, f_5) -спектров, (f_3, f_4, f_6) -спектров, λ -, ω -, a - и b -переменные f-параметры $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$

Спектр $\Lambda_{nn}=\text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ является решением прямой спектральной задачи (ПЗ) диагонализации симметрической корреляционной матрицы $R_{nn} \Rightarrow (C_{nn}, \Lambda_{nn})$. ПЗ (однородная спектральная задача) решается методом Холецкого для симметрической матрицы $R_{nn}=R_{nn}^T$ и имеет единственное решение Λ_{nn} . Здесь присутствуют 2 матрицы корреляций: одна - $R_{nn}=R_{nn}^T$, она содержит коэффициенты корреляции между z-переменными, другая - C_{nn} , содержит коэффициенты корреляции между парами (z, y) z- и y-переменных [3-6]. Так реализуется Прямая модель главных компонент (ПМ ГК) [6]: $Z_{mn} \Rightarrow (R_{nn}, C_{nn}, \Lambda_{nn}, Y_{mn})$.

Формулы f-параметров диагональной матрицы $\Lambda_{nn}=\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ имеют вид: $f_1(\Lambda_{nn})=\lambda_1+\lambda_2+\dots+\lambda_n = n$, $\text{tr}(R_{nn})=n, f_2(\Lambda_{nn})=(\lambda_1^2+\dots+\lambda_n^2)=\text{tr}(R_{nn}^T R_{nn}), f_3(\Lambda_{nn})=\lambda_1/\lambda_n$ - число обусловленности симметричной матрицы R_{nn} , равное числу обусловленности матрицы $C_{nn} \Lambda_{nn} C_{nn}^T$ - разложения симметричной матрицы R_{nn} , $f_4(\Lambda_{nn})=(\lambda_1+\dots+\lambda_n)/n$ - доля первых ℓ доминирующих элементов спектра $\Lambda_{nn}=\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, $f_5(\Lambda_{nn})=\lambda_1 \times \lambda_2 \times \dots \times \lambda_n$ - определитель матрицы R_{nn} , $f_6(\Lambda_{nn})=\lambda_1/\lambda_2 + \dots + \lambda_{n-1}/\lambda_n$. Все функции содержательно интерпретируются, в разных предметных областях экономики, финансов, физики и др., имеют свои интерпретации. В данной работе будем рассматривать их геометрический смысл. Функция $f_6(\Lambda_{nn})=\lambda_1/\lambda_2 + \dots + \lambda_{n-1}/\lambda_n = a_2 + \dots + a_n$ введена в работе [7] для учета зависимостей значения i-ого собственного числа $\lambda_i, i=1, \dots, n$, относительно остальных элементов (с номерами $j \neq i$) спектра $\Lambda_{nn}=\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$. Ее значение равно периметру гиперпараллелепипеда, а функция [7]

$f_3(\Lambda_{nn})=\lambda_1/\lambda_n = a_2 \times \dots \times a_n$ - объему параллелепипеда со сторонами, равными a_2, \dots, a_n .

Периметр и объем другого гиперпараллелепипеда со сторонами, равными $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, в который вписан гиперэллипсоид, с длинами полуосей $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, соответственно равны значениям функций $f_1(\Lambda_{nn})=\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3+\dots+\lambda_n$, $f_5(\Lambda_{nn})=\lambda_1 \times \lambda_2 \times \lambda_3 \times \dots \times \lambda_n$.

Пары параметров $(f_3, f_6), (f_1, f_5)$ описаны в [1,2,7] как «геометрия» в решаемых алгебраических задачах, «визуализированы с применением геометрических объектов из 2- и n-мерного евклидова пространства (гиперэллипсоид, конус и его образующие, орграф).

Значения вычисленных f-параметров попадают всегда внутрь своих интервалов [1]: $f_1(\Lambda_{nn})/n \leq f_2(\Lambda_{nn}) \leq f_1^2(\Lambda_{nn}), f_1^2(\Lambda_{nn}) \geq n \times f^{(2/n)}_2(\Lambda_{nn}), f_3(\Lambda_{nn}) \times f_5(\Lambda_{nn}) \leq f^{(n/2)}_2(\Lambda_{nn}), f_6(\Lambda_{nn}) \geq (n-1) \times f_3(\Lambda_{nn})^{1/(k-1)}, 0 \leq f_4(\Lambda_{nn}) \leq 1$.

Эти функциональные связи [1,2,3,7,8] между значениями f-параметров отражают, как убавятся ниже, «жесткость» не ориентации в n-мерном пространстве, а постоянство двух характеристик гиперэллипсоида, задаваемых парами значений только следующих f-параметров: (f_3, f_6) и (f_1, f_5) у двух разных параллелепедов. Формулы параметров f_3 и f_1 выражают периметры, формулы параметров f_6 и f_5 - объемы параллелепедов. Эти пары принадлежат двум наборам f-параметров $(f_3, f_6) \in (f_3, f_4, f_6), (f_1, f_5) \in (f_1, f_2, f_5)$.

Базовой фигурой в наших геометрических интерпретациях назовем гиперпараллелепипед. Три поворота (из бесконечного числа) четырехугольника, например на 30° , при $n=2$ образует по периметру фигуру шестигольника: $(30^\circ + 30^\circ + 30^\circ) \times 4 = (60^\circ) \times 6$. Это позволит (по нашему мнению) делать расчеты по наноструктурам, например, в процессах по цепи атомов, образующих трёхцентровые четырёхэлектронные связи. Пример визуализации, анализа разных сложных финансовых связей между финансовыми свойствами объектов, между функциями с параметрами разного уровня управления дан в [9-11]. Ниже при решении задачи №3 рассматриваются гиперпараллелепипеды с 2 парами высокоточных значений параметров (f_6, f_3) - и (f_1, f_5) -измерителей наноразмеров.

Все значения f-параметров в задаче №3 практически важны, в отличие от задачи №1 [1], где главными назначались f-параметры f_1, f_2, f_4 . Например, значение параметра f_4 , умноженное на $n=6$, пропорционально сумме доминирующих длин сторон параллелепипеда, а значение параметра f_2 пропорционально сумме квадратов доминирующих длин полуосей эллипсоида.



Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

Кроме того оценки значений f -параметров f_3, f_5 показали наличие заметных погрешностей при различных расчетах (с разными начальными данными), проведенных при решении оптимизационных задач №1[1], №2. В то же время имели место высокие машинные точности оценок значений параметров f_1, f_2, f_4 [1].

Значение размерности n задачи влияет на значения a - и b -переменных, λ -переменных, но не влияют на значения z - и u -переменных в ОМ ГК. Абсолютные величины z - и u -переменных зависят от значений λ -переменных. Для всех числовых данных стандартизованные значения z -переменных теоретически, а в нашем случае-практически, всегда реализована последовательность вычислений матриц значений наших переменных[1,2]: $Z_{nn} \rightarrow R_{nn} \rightarrow C_{nn}, \Lambda_{nn} \rightarrow Y_{nn}$. Независимо от того-будем использовать их все или часть из них. В данной статье мы используем 6 функций от Λ_{nn} , при этом 6 фиксированным формульным значениям $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ непрерывных функций $f_1(\Lambda_{nn}), f_2(\Lambda_{nn}), f_3(\Lambda_{nn}), f_4(\Lambda_{nn}), f_5(\Lambda_{nn}), f_6(\Lambda_{nn})$ в линеаризованной оптимизационной задаче №3 алгоритмически вычисляются дискретный набор значений $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$, для которого моделируются бесконечное множество спектров

$\{\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)\}$, состоящих из значений ω -переменных. Существование других спектров вида $\Omega_{nn} = \text{diag}(c\lambda_1, \dots, c\lambda_n)$, либо (f_1, f_5) -эквивалентных, либо (f_3, f_6) -эквивалентных спектру $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)$ показано в [стр. 43]. Обзор и примеры применения подмножеств из 6 f -параметров приведены в работах [2,3].

В технологиях управляемого структурообразовании рассматриваются гиперпараллелоипеды (при $n=3$) с парами значений параметров (f_6, f_3) - и (f_1, f_5) -измерителей наноразмеров. Значение функции $f_6(\Lambda_{nn}) = \lambda_1/\lambda_2 + \dots + \lambda_{n-1}/\lambda_n = a_2 + \dots + a_n$ равно периметру параллелепипеда, а функции $f_3(\Lambda_{nn}) = \lambda_1/\lambda_n = a_2 \times \dots \times a_n$ -объему параллелепипеда со сторонами, равными a_2, \dots, a_n . Периметр и объем другого гиперпараллелепипеда со сторонами, равными $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, в который вписан гиперэллипсоид, с длинами полуосей $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, равны значениям функций $f_1(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \dots + \lambda_n, f_5(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 \times \dots \times \lambda_n$. При любых случайных ориентациях в пространстве.

В ранее решенных задачах[1,7-12], предшествовавших рассматриваемой ниже оптимизационной задаче с линеаризованными уравнениями использовались a - и b -переменные. λ - переменные, f -параметры $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$. Ниже, в результате использования процедуры Solver, будут введены в нашу модель ω -переменные. Использование чисел $a_i = \lambda_{i1}/\lambda_i, i=2, \dots, n$, являющихся a -переменными зависимости между собой малых по значениям элементов $\lambda_{\ell+1}, \dots, \lambda_n$ спектра между собой, позволило вычислить значение каждого элемента $\lambda_{\ell+1}, \dots, \lambda_n$ как произведение положительных вещественных чисел, больших 1. Это повысило точность при вычислении на ПК малых элементов спектра $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ при реализации модели[1]: $(f_1, f_2, f_4) \Rightarrow (a_2, \dots, a_n) \Rightarrow (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, где начальными значениями a -переменных могут служить любые положительные числа, большие 1. Но в других задачах оценки значений элементов $\lambda_{\ell+1}, \dots, \lambda_n$ нам понадобились формулы, содержащие значения наиболее устойчивых элементов $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Для этого применили b -переменные [1,2]: $b_i = \lambda_i/\lambda_{i-1}$. Замена a -переменной $a_i = \lambda_{i-1}/\lambda_i, i=2, \dots, n$, на b -переменную $b_i = \lambda_i/\lambda_{i-1}, i=2, \dots, n$, позволяет получить формулы вычисления значений $\lambda_i, i=2, \dots, n$, зависящих от 1-го доминирующего элемента спектра λ_1 , значение которого всегда известно: $\lambda_j = (b_2 \times \dots \times b_j) \times \lambda_1, i=2, \dots, n$. Если в качестве начальных значений b_i, a_i положим $b_i = a_i = 1, i=2, \dots, n$, то имеем для них одинаковые значения BDE-[] и f -параметров спектра: $f_1 = n, f_2 = n, f_3 = 1, f_4 = \ell/n, f_5 = 1, f_6 = n-1, B(\ell, n) = \ell, V(n, n) = n, D(n, n) = n, E(n) = 1$, и следующие значения элементов спектра $\lambda_1 = 1, \dots, \lambda_n = 1$.

В случае наличия случайных, а не вычисленных значений b -переменных не вычисляется частное от деления двух очень малых чисел λ_j и λ_j . Это не создает погрешностей вычислений. Использование b -переменных позволило нам разработать уравнения, переменные, параметры оптимизационной задачи и решить ее.

«Арифметика» прямой задачи и Алгоритмы обратной задачи

Для наноразмеров f_5, f_6 гиперпараллелоипедов в нанометровом масштабе необходимы бесконечные множества значений $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ с полным набором его 6 f -параметров. Удобно рассматривать эту совокупность значений как спектр симметрической матрицы. Непрерывные линейные уравнения, параметры, переменные в ячейках ПЭВМ преобразовываются в дискретные значения в арифметических и алгоритмических вычислениях. Значение f -параметра, вычисленное арифметически по формулам не

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

равно значению значению f -параметра, вычисленного алгоритмически в шагах итераций, достигаемого с приемлемой точностью. Несколько (n) таких вычислительных рядов чисел могут не сходиться к n -мерной точке. Желательно иметь 2,3,4 теоретических непрерывных рядов чисел. Можем воспользоваться свойствами, например, (f_1, f_3, f_4, f_6) -эквивалентных спектров [2,3].

Рассмотрим спектр симметрической корреляционной матрицы. В этом случае ниже разработанный алгоритм (задача №3) будет являться, в частности, новым алгоритмом моделирования элементов спектра корреляционной матрицы, $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ -эквивалентного заданному спектру с известными значениями его f -параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ – наших входных объектов.

В силу совпадения алгебраических свойств корреляционной матрицы со свойствами её спектра достаточно иметь алгоритмы вычисления только *модельного* спектра с заданными свойствами. При этом соответствующая модельному спектру единственная корреляционная матрица неизвестна, если мы рассматриваем ПМ ГК. В задачах анализа данных, где применяется ОМ ГК, для модельного спектра Λ_{nn} существует бесконечное множество корреляционных матриц $R^{(\ell)}_{nn}, \ell=1, \dots, k, k < \infty$ (лемма С.Р.Chalmers [13]). Удобно моделировать модельный спектр Λ_{nn} , обладая в качестве входных объектов применяемой модели – ОМ ГК, весь набор из 6 дискретных значений f -параметров. Для набора только значений 3 *существенных f-параметров моделируемого спектра* такая задача решена в работах [1]. Применения решений этих задач в прикладных исследованиях приведены в работах [2,3,12]. Набор из 6 значений f -параметров должен содержать значения *f-параметров «реального» спектра*, т.е. должен существовать спектр, вычисленный ранее по «реальной» корреляционной матрице R_{nn} . Иначе не будет вычислен спектр, так как не существует «формульного» спектра со значениями f -параметров, ибо они неправильно заданы, не вычислены по своим формулам. Наличие $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ -спектра является обязательным условием для алгоритма чешского решения нашей задачи №3. С учетом погрешностей машинного представления значений a, b, λ - переменных, значений f – параметров. Равенство алгебраического выражения из левой части формулы алгебраическому выражению из правой части той же формулы при дискретном кодировании в ячейках ПЭВМ не выполняется без погрешностей. Здесь одна часть (число ε) вычислена арифметически (с применением операций сложения, вычитания, умножения, деления), а другая часть вычислена итеративно,

числовой ряд значений которой последовательно приближался к числу (приблизительно равного с машинной точностью, этой «другой части»), являющейся «точкой сгущения» - число ε . Эти замечания справедливы и при вычислении элементов спектра $\Lambda_{66} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$.

В 20 вычислительных экспериментах постоянство значений параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ (при $n=6$) изменчивость значений первого элемента λ_1 спектра принадлежит интервалу $\lambda_1 \in (3.165829242, 3.1777123 \dots 11)$. Для второго элемента: $\lambda_2 \in (1.120837524, 1.21770 \dots 3182)$, для третьего элемента: $\lambda_3 \in (0.941346416, 1.055 \dots 857941)$. Представляет интерес вариабельности (f_3, f_4, f_6) - спектров и (f_1, f_2, f_5) -спектров. Для каждого (f_3, f_4, f_6) - спектра $\Lambda_{66} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_i, \dots, \lambda_6)$, существует бесконечное множество (f_3, f_4, f_6) -спектров $\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)$, $\omega_i = c\lambda_i$, $i=1, \dots, n$, где коэффициент $c \sim P[0,1]$ имеет равномерное распределение на отрезке $(0,1)$ (Таблица 6).

Если известны значения $a_i, i=2, \dots, n$, то нетрудно найти отношение между любыми i -ым и k -ым элементами λ_j/λ_k спектра, например, при $i < j$ имеем возможность замены операции деления на операции умножения чисел a_i, a_k , (со значениями большими 1: $\lambda_j/\lambda_k = a_{j+1} \times \dots \times a_k$. Задача моделирования (f_1, f_2, f_4) -спектров по-разному решены в [1,2,3]. Все модельные (f_1, f_2, f_4) -спектры из их бесконечного множества, имеют заданные значения f -параметров f_2, f_4 , с заданной погрешностью $[1,2] \|f_2 - f_2(\Lambda_{nn})\| \leq \varepsilon, \|f_4 - f_4(\Lambda_{nn})\| = 0$.

Использование чисел $a_i = \lambda_{i-1}/\lambda_i, i=2, \dots, n$, являющихся a -переменными зависимости между собой малых по значениям элементов $\lambda_{\ell+1}, \dots, \lambda_n$ спектра между собой, позволяет вычислить значение каждого элемента $\lambda_{\ell+1}, \dots, \lambda_n$ как произведение положительных вещественных чисел, больших 1. Это повышает точность при вычислении на ПК малых элементов спектра $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ при реализации модели [1] $(f_1, f_2, f_4) \Rightarrow (a_2, \dots, a_n) \Rightarrow (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, где начальными значениями a -переменных служат любые положительные числа, большие 1.

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

Для оценки значений элементов $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ нам нужны формулы, содержащие значения наиболее устойчивых элементов $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Для этого преобразуем а-переменные в b-переменные $b_i = \lambda_i / \lambda_{i-1}$. Если в качестве начальных значений a_i положим $a_i = 1, i = 2, \dots, n$, то имеем следующие значения BDE-, f-параметров спектра и следующие значения элементов спектра: $f_1 = n, f_2 = n, f_3 = 1, f_4 = \ell/n, f_5 = 1, f_6 = n-1, B(\ell, n) = \ell, B(n, n) = n, D(n, n) = n, E(n) = 1, \lambda_1 = 1, \dots, \lambda_n = 1$. Здесь не вычисляется частное от деления двух очень малых чисел λ_j и λ_j , что не создает погрешностей вычислений. Использование b-переменных позволяет нам разработать оптимизационную задачу для вычисления значений элементов $(f_1, f_2, f_3, f_5, f_6)$ -спектра. Замена а-переменной $a_i = \lambda_{i-1} / \lambda_i, i = 2, \dots, n$, на b-переменную $b_i = \lambda_i / \lambda_{i-1}, i = 2, \dots, n$, позволили в [11] получить формулы вычисления значений $\lambda_i, i = 2, \dots, n$, зависящих от 1-го доминирующего элемента спектра λ_1 , значение которого всегда известно: в публикациях с применением модели главных компонент выделяется ℓ первых главных компонент u_1, \dots, u_ℓ , только после того, как вычислены доминирующие элементы $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell: \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_\ell \geq 0$. Целое число ℓ равно числу доминирующих элементов спектра, суммарная доля которых равна $f_4(\Lambda_{nn}) = (\lambda_1 + \dots + \lambda_\ell) / n < 1$. Теперь формула для остальных элементов спектра принимает вид:

$\lambda_i = b_i \lambda_{i-1}, \lambda_j = (b_2 \times \dots \times b_j) \times \lambda_1, i = 2, \dots, n$, причем сохраняются свойства элементов спектра корреляционной матрицы: $\lambda_1 + \dots + \lambda_n = n, \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$. Для численных алгоритмов вычисления элементов спектра удобны формулы в иной форме b-переменной $b_i = \lambda_i / \lambda_{i-1} \leq 1$: $\lambda_1 = n / (1 + b_2 \times b_3 + b_2 \times b_3 \times b_4 + \dots + b_2 \times \dots \times b_n), \lambda_2 = \lambda_1 b_2, \lambda_3 = \lambda_2 b_3 = \lambda_1 b_2 b_3, \dots, \lambda_\ell = \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times \dots \times b_\ell), \dots, \lambda_n = \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times \dots \times b_n)$.

При $n=6$ формулы для f-параметров выступают в роли функций ограничений и целевой функции оптимизационных задач №1, №2, №3.

Оптимизационная задача №1

Она является задачей моделирования бесконечного множества эквивалентных друг другу (f_1, f_2, f_4) - спектров $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n), n > 2$, имеет 3 нелинейных уравнения:

$$(\lambda_1 + \lambda_1 b_2 + \lambda_2 b_3 = \lambda_1 b_2 b_3 + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5) + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)) = 6 \quad (1)$$

$$\lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4) + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5) + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6) = 1 - f_4 \quad (2)$$

$$f_2 = \lambda_1^2 + \lambda_1^2 b_2 + \lambda_1^2 (b_2 b_3)^2 + \lambda_1^2 (b_2 b_3 b_4) + \lambda_1^2 (b_2 b_3 b_4 b_5) + \lambda_1^2 (b_2 b_3 b_4 b_5 b_6)^2 \quad (3)$$

Ее уравнения не линеаризуются, программа-таблица кодируется на листе ЭТ Excel-2003,

эффективно решается методом Ньютона с применением процедуры «Поиск решения».

Красным цветом выделены b-переменные оптимизационной задачи (1) при ограничениях вида (2), (3). В формулах f-параметров [2,3] присутствуют известные (доминирующие) и неизвестные (не доминирующие) элементы спектра. После разделения λ -переменных на известные и неизвестные взаимосвязи между ними отражаются в следующих 3 уравнениях:

$$f_2(\Lambda_{66}) = (\lambda_1^2 + \dots + \lambda_6^2),$$

$$f_3(\Lambda_{66}) = \lambda_1 / \lambda_6,$$

$$\lambda_4 + \lambda_5 + \lambda_6 = (1 - f_4) \times 6.$$

На первый взгляд простая задача достижения целевой функции заданного значения при линейных и нелинейных функциональных ограничениях на переменные задачи кажется легко решаемой. Их (переменных) области определения (при постоянной области значений) в данном случае в 3-мерном пространстве весьма мала. Наименьшие собственные числа интерпретируются как пренебрежимо малые погрешности. Но они восстанавливаются так, что их малые значения «подходят» как к значениям главных f-параметров $f_1(\Lambda_{nn}) = n, f_2(\Lambda_{nn}), f_4(\Lambda_{nn})$, так и к основным свойствам спектра $\lambda_1 + \dots + \lambda_n = n, \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$. Алгоритм моделирования недостающих недоминирующих элементов спектра корреляционной матрицы отличается от алгоритма [1] тем, что он оптимизирует «геометрию» облака точек, внутри которого рассеяны множество из m n-мерных точек с координатами $\{(z^{(t,0)}_{k1}, \dots, z^{(t,0)}_{kn}), k = 1, \dots, m\}$. В отличие от алгоритма из работы [1] не использует собственные векторы $c_j = (c_{1j}, c_{2j}, \dots, c_{nj})^T, j = 1, \dots, \ell$, расположенные в первых ℓ столбцах известной ортогональной матрицы $C_{nn}: C_{nt} = [c_1 | c_2 | \dots | c_\ell]$. Решаемые ниже задачи №2 и №3 ориентированы «геометрию» указанного выше облака точек.

В оптимизационной задаче №2 (оптимизационная задача №1 решена в [1]) будем использовать 2 пары функций: первая- $f_1(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \dots + \lambda_n, f_5(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 \times \lambda_2 \times \lambda_3 \times \dots \times \lambda_n$, вторая - $f_6(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 / \lambda_2 + \dots + \lambda_{n-1} / \lambda_n = a_2 + \dots + a_n, f_3(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 / \lambda_n = a_2 \times \dots \times a_n$.

Рассмотрим конкретное значение $n=6$. Параметр n является определяющим и требует индивидуального подхода.

Оптимизационная задача №2.

Для известных значений f-параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ числа $\ell=3$ известных элементов спектра $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, значений их соседних элементов $b_2 = \lambda_2 / \lambda_1, b_3 = \lambda_3 / \lambda_2$

найти неизвестные значения b-переменных $x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6$, доставляющие заданное значение целевой функции $f_1(x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6) = (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5) + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)) = 6$, равно 6,



Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344
ISI (Dubai, UAE) = 0.829
GIF (Australia) = 0.564
JIF = 1.500

SIS (USA) = 0.912
ПИИЦ (Russia) = 0.207
ESJI (KZ) = 3.860
SJIF (Morocco) = 2.031

ICV (Poland) = 6.630
PIF (India) = 1.940
IBI (India) = 4.260

при ограничениях на значения функций f_2, f_3, f_4, f_5, f_6 видов:

a) $f_2(x_1=b_4, x_2=b_5, x_3=b_6)$:

$$\lambda_1^2 \times [1 + b_2^2 + (b_2 b_3)^2 + (b_2 b_3 b_4)^2 + (b_2 b_3 b_4 b_5)^2 + (b_2 b_3 b_4 b_5 b_6)^2],$$

b) $f_3(x_1=b_4, x_2=b_5, x_3=b_6)$: $b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6 = 1 \setminus f_3$,

c) $f_4(x_1=b_4, x_2=b_5, x_3=b_6)$:

$$\lambda_1 \times [(b_2 \times b_3 \times b_4) + (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5) + (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)] = (1 - f_4) \times 6.$$

d) $f_5(x_1=b_4, x_2=b_5, x_3=b_6)$:

$$\lambda_1 / \lambda_6 = \lambda_1 \times 1 / [\lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)] = 1 / (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)$$

e) $f_6(x_1=b_4, x_2=b_5, x_3=b_6)$: $1/b_2 + 1/b_3 + b_4 + 1/b_5 + 1/b_6$

Была разработана программа-таблица решения этой задачи. Она кодировалась на листе ЭТ Excel-2003, эффективно решает методом Ньютона с применением процедуры «Поиск решения». Как показали расчеты зависимость значений $f_5(\Lambda_{66})$, $f_6(\Lambda_{66})$ от произведений и частных очень малых чисел $\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6$: $b_4 = \lambda_4 / \lambda_3$, $b_5 = \lambda_5 / \lambda_4$, $b_6 = \lambda_6 / \lambda_5$, $b_4 \times b_5 \times b_6$, - ведет к большим погрешностям вычисления значений λ -переменных $\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6$. Решение задачи №2 (Таблицы №1, №2) $\Lambda_{66} = \text{diag}(2,5117, 1,592, 1,18, 0,4044945, 0,2938483, 0,0179572)$ является (f_1, f_2, f_4, f_6) -спектром с заданными значениями параметров f_1, f_2, f_4, f_6 . Точности параметров f_3, f_5 нас не удовлетворяют, что отмечено выше. Номера входящих параметров похожи на известные номера теоретических непрерывных функций $(f_1, f_5) \in (f_1, f_2, f_5)$, $(f_3, f_6) \in (f_3, f_4, f_6)$ [2,3,7]. Элементы набора номеров (1,2,4,6) этого (f_1, f_2, f_4, f_6) -спектра принадлежат 2 наборам номеров (2,4,6) и (1,2,5). Это означает, что (f_1, f_2, f_4, f_6) -спектр не является ни (f_1, f_3, f_4, f_6) -спектром из [2,3], ни (f_1, f_2, f_5) -спектром. Возможно процедура Solver преобразовала (f_3, f_4, f_6) -спектр в (f_1, f_3, f_4, f_6) -спектр. Так как спектры $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)$, $\Omega_{66} = \text{diag}(c\lambda_1, \dots, c\lambda_6)$, (f_3, f_4, f_6) -эквивалентны, то процедура Solver преобразовала (f_3, f_4, f_6) -спектр в (f_1, f_3, f_4, f_6) -спектр путем вычисления разных значений коэффи циентов c_i , $i=1, \dots, 6$, при элементах $\omega_i = c_i \lambda_i$, $i=1, \dots, 6$, спектра $\gamma_{66} = \text{diag}(c_1 \lambda_1, \dots, c_6 \lambda_6)$. Решение Ω_{66} нас не удовлетворяет.

Оптимизационная задача №3 с линеаризованными уравнениями.

В вычислительных экспериментах с программой-таблицей, реализующей оптимизационную задачу №2, получают решения b_4, b_5, b_6 , которые определяют значения λ -переменных $\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6$. В итоге образуется «восстановленный» спектр $\Lambda_{66} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_6)$, у которого f -параметры f_1, f_2, f_4, f_6 с высокой степенью точности равны заданным значениям. Заметим, что мы рассматриваем

«восста новленный» спектр из работы [7] $\Lambda_{66} = \text{diag}(2,5117, 1,592, 1,18, 0,307010656, 0,018512809, 0,08035575)$. Тестируем нашу программу-таблицу для $\ell=3$. Следовательно известными величинами являются $\lambda_1=2,5117$, $\lambda_2=1,592$, $\lambda_3=1,18$, $b_2=0,633833658$, $b_3=0,74120603$, $f_1=6$, $f_2=10,485786$, $f_3=31,257253$, $f_4=0,8806167$, $f_5=3,44225144216485$, $f_6=23,58444237$. Неизвестными переменными задачи являются b -переменные b_4, b_5, b_6 . При различных расчетах (с разными начальными данными) по задачам №1, №2 получали высокие машинные точности оценок значений f_1, f_2, f_4 , а оценки значений f -параметров f_3, f_5 показали наличие заметных погрешностей.

Такая точность оценок нас не устраивает. Например, в спектральных задачах расчетов в материаловедении (технологиях управляемого структурообразования) рассматриваются гиперпараллелепипеды (при $n=3$) с парами значений параметров (f_6, f_3) - и (f_1, f_5) -измерителей наноразмеров. Значение функции $f_6(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 / \lambda_2 + \dots + \lambda_{n-1} / \lambda_n = a_2 + \dots + a_n$ равно периметру параллелепипеда, а функции $f_3(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 / \lambda_n = a_2 \times \dots \times a_n$ - объему параллелепипеда со сторонами, равными a_2, \dots, a_n . Периметр и объем другого гиперпараллелепипеда со сторонами, равными $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, в который вписан гиперэллипсоид, с длинами полуосей $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, равны значениям функций $f_1(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \dots + \lambda_n$, $f_5(\Lambda_{nn}) = \lambda_1 \times \dots \times \lambda_n$. Пары параметров $(f_6, f_3), (f_1, f_5)$ описаны в [2,3] как «геометрия» в решаемых алгебраических задачах, «визуализированы с применением геометрических объектов 2- и n -мерного евклидова пространства (гиперэллипсоид, конус, орграф), позволяющие визуализировать, анализировать разные сложные связи между объектами, функциями с параметрами разного уровня управления» [8,9].

Выше мы рассматривали гиперпараллелепипеды (при $n=6$ провели расчеты) с парами значений параметров $(f_6, f_3), (f_1, f_5)$ -измерителей наноразмеров. Эти 2 пары измерителей принадлежат двум наборам f -параметров $(f_3, f_6) \in (f_3, f_4, f_6)$, $(f_1, f_5) \in (f_1, f_2, f_5)$. Соответствующие спектры $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)$, $\Omega_{nn} = \text{diag}(c\lambda_1, \dots, c\lambda_n)$, где $c > 0$, являются (f_3, f_4, f_6) -эквивалентными: $f_3(\Lambda_{nn}) = f_3(\Omega_{nn})$, $f_4(\Lambda_{nn}) = f_4(\Omega_{nn})$, $f_6(\Lambda_{nn}) = f_6(\Omega_{nn})$. Для любого положительного числа $c > 0$ спектры Ω_{nn} являются (f_3, f_4, f_6) -эквивалентными между собой и (f_3, f_4, f_6) -эквивалентными одному и тому же заданному спектру $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)$. Они - Ω_{nn} и Λ_{nn} , является (f_3, f_4, f_6) -спектрами. Но указанный (f_3, f_4, f_6) -спектр Λ_{nn} является и (f_1, f_2, f_5) -спектром, ибо все значения 6 членов набора функций $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ вычисляются по значениям

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

элементов $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n$ спектра $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)$. Набору (f_1, f_5) , принадлежащему набору f-параметров (f_1, f_2, f_5) : $(f_1, f_5) \in (f_1, f_2, f_5)$, наш (f_1, f_5) -спектр $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)$ соответствует набор $(c \times f_1, c^2 \times f_2, c^6 \times f_5)$. Это следует из равенств $c \times f_1(\Lambda_{nn}) = f_1(\Omega_{nn})$, $c^6 \times f_5(\Lambda_{nn}) = f_5(\Omega_{nn})$, $f_5(\Lambda_{nn}) = f_5(\Omega_{nn})$, где элементы спектра Ω_{nn} отличаются множителем c : $\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)$, $\omega_i = c\lambda_i$, $i=1, \dots, n$. Это происходит при преобразовании (f_1, f_2, f_5) -спектра $\Lambda_{nn} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)$ в $(c \times f_1, c^6 \times f_5)$ -спектры вида $\Omega_{nn} = \text{diag}(c\lambda_1, \dots, c\lambda_n)$, где c -любое положительное число. При этом $(c \times f_1, c^6 \times f_5)$ -спектр не является спектром корреляционной матрицы, ибо нарушено условие равенства n значения функции $f_1(\Omega_{nn})$: $c\lambda_1 + \dots + c\lambda_n \neq n$. Спектры Λ_{nn} и Ω_{nn} являются (f_3, f_4, f_6) -эквивалентными. Для того, чтобы здесь один спектр корреляционной матрицы породил другой спектр корреляционной матрицы того же ранга, того же числа ℓ доминирующих элементов, но, другой размерности, необходимо назначить значение c равным $c = N/n > 1$, где матрица Ω_{NN} будет иметь размерность $N > n$. При $n < N$ матрица Ω_{NN} вырождена (содержит элементы $\omega_i = 0$, $i = n+1, \dots, N$), матрица Λ_{nn} - нет. Причем след матрицы Ω_{NN} $\text{tr}(\Omega_{NN}) = N$, если $c = N/n > 1$. Образуются 2 $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ - эквивалентные спектры Λ_{nn} и Ω_{NN} . В примере, приводимом ниже, моделируются при $n=6-20$ (Рисунок 5, Таблица №4) из бесконечного множества $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ - эквивалентные спектры Λ_{nn} и Ω_{nn} .

Для (f_3, f_4, f_6) -спектра Λ_{nn} и заданных значений f_j j -х f-параметров, $j \in \{1, 2, 5\}$, существует единственный $(c f_1, c^2 f_2, f_3, f_4, c^6 f_5, f_6)$ - спектр Ω_{nn} вида $\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)$, $\omega_i = c\lambda_i$, $i=1, \dots, n$. Заметим, что Λ_{nn} - спектр корреляционной матрицы, а Ω_{nn} - спектр некоторой симметрической матрицы, элементы которой отличаются одним множителем c : $\omega_i = c\lambda_i$, $i=1, \dots, n$. Поэтому в задаче №3 в последовательности приближений итерационного значения f_1 целевой функции $f_1(\Lambda_{nn})$ к числу n происходит последовательное приближение значений λ_i элементов спектра Λ_{nn} к значениям элементов $\omega_i = c\lambda_i$, $i=1, \dots, n$ спектра Ω_{nn} . Заметим, что в итерациях будут образовываться разные значения c_i в числах $\omega_i = c_i \lambda_i$, $i=1, \dots, n$, для достижения требуемых значений $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ с заданной точностью в окне «Параметры» (Рисунок 1). Единая для всех целевых значений $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ точность способствует варибельности значений $\{c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6\}$, $\{\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6\}$ (Таблицы 4,5). Проведенные численные эксперименты не дали желаемых точностей для

значений f_3, f_5 . Причина - в разнице (f_3, f_4, f_6) -спектров и (f_1, f_2, f_5) -спектров. параметра f_1 , так и f-параметров $(f_4, f_2, f_3, f_5, f_6)$ - главное требуемое условие рассматриваемого нами класса задач, где будет применяться линейаризованная оптимизационная задача №3 (ЛОЗ №3), формулируемая ниже. В теоретическом виде ЛОЗ №3 имеет решение b_4, b_5, b_6 и ассоциированное решение $(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$, если имеется в наличии $(f_1, f_2, f_3, f_5, f_6)$ -спектр $\Lambda_{66} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$. Если нет такого спектра $\Lambda_{66} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$, у которого известны значения f-параметров $(f_1, f_2, f_3, f_5, f_6)$, то «машинная» оптимизационная задача №3 не будет иметь решения (b_4, b_5, b_6) для несуществующего ассоциированного решения $(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$. Но возможно существование расчетных спектров с набором значений f-параметров, далеких от требуемого набора. Вопрос единственности такого решения мы не рассматриваем. Это означает переход от машинной реализации модели $(f_4, f_2, f_3, f_5, f_6) \Rightarrow (b_2, \dots, b_n) \Rightarrow (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ к машинной реализации модели $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6) \Rightarrow (b_2, \dots, b_n) \Rightarrow (\omega_1, \dots, \omega_n)$, где $f_i(\Omega_{nn}) = f_i$, $i=1, \dots, 6$, $\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)$. Здесь мы должны отличать арифметический спектр $\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)$ от алгоритмического $\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)$. Теперь неизменность значений как f-параметров f_3, f_5 так и f-параметров $(f_4, f_2, f_3, f_5, f_6)$ - главное требуемое условие рассматриваемого нами класса задач, где будет применяться линейаризованная оптимизационная задача №3 (ЛОЗ №3). В теоретическом виде ЛОЗ №3 имеет решение b_4, b_5, b_6 и ассоциированное решение $(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, если имеется в наличии $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ -спектр $\Lambda_{66} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_6)$. В прикладном варианте решение ЛОЗ №3 (включая также ЛОЗ №2:(a)-(g)) означает переход от машинной реализации модели вида $(f_1, f_2, f_4, f_6) \Rightarrow (b_2, \dots, b_n) \Rightarrow (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ к машинной реализации модели вида $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6) \Rightarrow (b_2, \dots, b_n) \Rightarrow (\omega_1, \dots, \omega_n)$. Причем с высокими точностями. Здесь мы должны отличать арифметический спектр $\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)$ от алгоритмического $\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n)$.

Повысим точность квадратичных оценок прямых разностей значений целевой функции из оптимизационной задачи №3 с помощью использования линейаризованных уравнений в решающей метод Ньютона процедуре «Поиск решения».

Применим линейаризацию к уравнениям ограниченных (b) и (d). Линейаризация - один из наиболее распространенных подходов к решению задач на основе эффективных и хорошо изученных методов решения линейных уравнений. Нарушению гипотезы о малости возмущений (флуктуаций) значений b_4, b_5, b_6 . Чем больше номер j недоминирующих элементов

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

λ_j, λ_{j-1} тем выше вариабельность (изменчивость) $b_i = \lambda_j / \lambda_{j-1}$. Так как λ_3 считаем доминирующим элементом (мало вариабельным), то полагание b -переменных b_4, b_5, b_6 подверженных большим возмущениям, обоснованно. Тогда имеем право линеаризовать уравнения вида (b) и (d).

Логарифмирование правой и левой частей нелинейных уравнений вида (b) и (d) дает нам линеаризованные уравнения:

$$b) \text{Ln}(b_2) + \text{Ln}(b_3) + \text{Ln}(b_4) + \text{Ln}(b_5) + \text{Ln}(b_6) = -\text{Ln}(f_3)$$

$$d) \text{Ln}(f_5) = 6 \times \text{Ln}(\lambda_1) + 5 \times \text{Ln}(b_2) + 4 \times \text{Ln}(b_3) + 3 \times \text{Ln}(b_4) + 2 \times \text{Ln}(b_5) + 1 \times \text{Ln}(b_6)$$

Здесь уравнение (d) получено из равенства

$$f_5 = \lambda_1 \times \lambda_1 \times b_2 \times \lambda_1 \times b_2 \times b_3 \times \lambda_1 \times b_2 \times b_3 \times b_4 \times \lambda_1 \times b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times \lambda_1 \times b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6 = \lambda_1^6 \times b_2^5 \times b_3^4 \times b_4^3 \times b_5^2 \times b_6$$

Теперь формулировка Оптимизационной задачи №3 с линеаризованными уравнениями при $n=6$ принимает другой вид.

Для заданных значений f -параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$, числа $l=3$ известных элементов спектра $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, значений их соседних элементов $b_2 = \lambda_2 / \lambda_1, b_3 = \lambda_3 / \lambda_2$ найти неизвестные значения b -переменных $x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6$, доставляющие заданное значение целевой функции

$$f_1(x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6) = (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5) + \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6) = 6,$$

при ограничениях на значения f_2, f_3, f_4, f_5, f_6 функций видов:

$$a) f_2(x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6): f_2 = \lambda_1^2 \times [1 + b_2^2 + (b_2 b_3)^2 + (b_2 b_3 b_4)^2 + (b_2 b_3 b_4 b_5)^2 + (b_2 b_3 b_4 b_5 b_6)^2];$$

$$b) f_3(x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6): -\text{Ln}(f_3) = \text{Ln}(b_2) + \text{Ln}(b_3) + \text{Ln}(b_4) + \text{Ln}(b_5) + \text{Ln}(b_6);$$

$$c) f_4(x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6): (1 - f_4) \times 6 = \lambda_1 \times [(b_2 \times b_3 \times b_4) + (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5) + (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)];$$

$$d) f_5(x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6): \text{Ln}(f_5) = 6 \times \text{Ln}(\lambda_1) + 5 \times \text{Ln}(b_2) + 4 \times \text{Ln}(b_3) + 3 \times \text{Ln}(b_4) + 2 \times \text{Ln}(b_5) + 1 \times \text{Ln}(b_6);$$

$$e) f_6(x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6): f_6 = 1/b_2 + 1/b_3 + b_4 + 1/b_5 + 1/b_6;$$

при ограничениях на значения b -переменных, λ -переменной λ_1 :

$$f) \lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 > \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5) > \lambda_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)$$

g) при отсутствии достижения процедурой Solver (the standard Microsoft Excel Solver) заданных значений f -параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ с заданной высокой точностью 0.000000001 предусмотреть в задаче назначение новых изменяемых переменных b_2, b_3, b_4, b_5, b_6 ,

$$\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4 = \omega_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4, \omega_5 = \omega_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5), \omega_6 = \omega_1 \times (b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6,$$

удовлетворяющих функциям ограничений (a)-(f) и целевой функции.

Пример расчетов для «реального» спектра

Решение оптимизационной задачи найдем методом Ньютона в процедуре «Поиск решения». Вызов интегрированной с ЭТ Excel-2003 компьютерной программы метода Ньютона проведем из окна стандартной надстройки «Поиск решения» (Standard Microsoft Excel Solver) на листе ЭТ Excel-2003.

Решение $x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6$ этой оптимизационной задачи определяет значения неизвестных (не доминирующих) элементов спектра: $\lambda_4 = b_4 \times \lambda_3, \lambda_5 = b_5 \times \lambda_4, \lambda_6 = b_6 \times \lambda_5$, удовлетворяющие условию $\lambda_1 + \dots + \lambda_6 = 6, \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_6 > 0$.

Программа-таблица задачи 2 реализована на листе ЭТ Excel. Входные значения f -параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ приведены в Таблице 1 слева (их значения являются элементами «реального» спектра и взяты из [12]). Математические «портреты» спектров одни те же для разных предметных областей. Имеет значение в них размерность гиперэллипсоидов. Начальные значения b -переменных $b_2 = 0.633833658, b_3 = 0.74120603$ вычислены по приведенным выше формулам. Неизвестным переменным оптимизационной задачи $x_1 = b_4, x_2 = b_5, x_3 = b_6$ присвоены начальные ненулевые, меньшие 1, значения $b_4 = 0.3, b_5 = 0.09, b_6 = 0.078$. На рисунке 1, в тексте программы решения оптимизационной задачи №3 в ячейках внизу справа находятся 6 формул функций $f_1, (1 - f_4 \times 6), -\text{Ln}(f_3), f_2, f_6, \text{Ln}(f_5)$ для 6 функций ограничений в оптимизационной задаче №3, соответствующих 6 f -параметрам $f_1, f_4, f_3, f_2, f_6, f_5$ (смотрите левый столбец Таблицы 1) и в соседнем столбце введены их требуемые значения: 6, 0.7163, -6.44238 0918, 10.48578599, 23.58444237, -6, 13999151682266. Эти числа вычислены по 6 формулам для $f_1, (1 - f_4 \times 6), 1/f_3, f_2, f_6, f_5$ при известных значениях элементов спектра $\Lambda_{66} = \text{diag}(25117, 1592, 118, 0307010656, 0018512809, 008035575)$ из статьи [12, стр.164] и вычисленных значений 6 f -параметров этого восстановленного спектра из «реального» спектра В тексте программы (Таблица 1, внизу слева) введены 3 значения 3-х известных доминирующих элементов «реального» спектра $\lambda_1 = 2.5117, \lambda_2 = 1.592, \lambda_3 = 1.18$, и 3 формулы 3-х неизвестных модельных недоминирующих элементов спектра, их начальные значения- $\lambda_4 = 0.354, \lambda_5 = 0.03186, \lambda_6 = 0.00248508$ соответствуют случайным начальным значениям $b_4 = 0.3, b_5 = 0.09, b_6 = 0.078$.

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344
ISI (Dubai, UAE) = 0.829
GIF (Australia) = 0.564
JIF = 1.500

SIS (USA) = 0.912
РИИЦ (Russia) = 0.207
ESJI (KZ) = 3.860
SJIF (Morocco) = 2.031

ICV (Poland) = 6.630
PIF (India) = 1.940
IBI (India) = 4.260

В окне процедуры «Поиск решения» нажав на кнопку «Выполнить» получаем решение оптимизационной задачи №2 - $b_4=0.526826021$, $b_5=0.091357999$, $b_6=0.067086493$. Этому решению соответствует ассоциированное решение $\lambda_1=2,5117$, $\lambda_2=1,592$, $\lambda_3=1,18$, $\lambda_4=0.652672946$, $\lambda_5=0.059626895$, $\lambda_6=0.004000159$. Но f -параметры полученного спектра нас не удовлетворяют: $f_6=30.63944698$ (вместо 23.58444237), $\ln(f_5)=-7.235458783$ (вместо -6.13999151682266).

Для нас важно достижение высоких точностей (они введены в окне «Параметры», Рисунок 1) для наноразмеров f_5, f_6 гиперпараллелепипеда в нанометровом масштабе. Выше мы отмечали актуальность достижения высоких точностей измерений пар значений параметров (f_6, f_3) , (f_1, f_5) , являющихся измерителями наноразмеров гиперпараллелепипеда. В окне «Параметры» надстройки «Поиск решения» (Рисунок 1) зафиксирована одна и та же относительная погрешность 0.0000000001 при 0% допустимого отклонения значения целевой функции от заданного значения b . Но из-за дискретности значений машинного представления чисел в ячейках памяти ПЭВМ и из-за слишком большого диапазонов изменения значений параметров и переменных в уравнениях нашей задачи процедура Solver не смогла в данном случае с помощью итераций достичь заданной единой точности для всех изменяемых переменных. Для добавления новых изменяемых переменных, которые «помогут» достичь всех погрешностей заданного значения 0.0000000001 . В процедуре «Поиск решения» это изменение статуса переменных проводится нажатием кнопки «Предположить» («Assume»). Какие параметры перевести в переменные указывает сама процедура «Поиск решения». Нажмем кнопку «Предположить» в окне процедуры «Поиск решения». Тогда в текстовом поле (в поле ввода) «Изменяемые ячейки» к адресам ячеек b -переменных b_4, b_5, b_6 $\$C\$28; \$C\30 добавились адреса ячеек λ -переменных $\lambda_1, \dots, \lambda_6$: $\$C\$28; \$C\$30; \$F\$24; \$F\28 (Рисунки 3,4). Эта подсказка процедуры «Поиск решения» после нажатия кнопки «Выполнить» дала решение нашей задачи: $b_4=0.215760085$, $b_5=0.15446904$, $b_6=0.63810702$. Это решение дает весьма низкие погрешности: $\varepsilon_1=|6-6|=0$, $\varepsilon_4=|0,7163-0,7163|=0$, $\varepsilon_3=|0,031992575-0,031992575|=0,0000000000000000$, $\varepsilon_2=|10,48578599-10,48578599|=0,0000000000000000$, $\varepsilon_6=|23,58444237-23,58444237|=0,000000000000$, $\varepsilon_5=|-6,139991517+6,13999151682266|=0,0000000000000000$. Здесь приведены машинные погрешности $\varepsilon_1, \varepsilon_4, \varepsilon_3, \varepsilon_2, \varepsilon_6, \varepsilon_5$ 6 значений формул $f_1, (1-f_4 \times 6), 1/f_3, f_2, f_6, f_5$ для 6 функций

ограничений в линеаризованной оптимизационной задаче №3.

Соответствующее ассоциированное решение $\lambda_1=1.761233333$, $\lambda_2=1.761233333$, $\lambda_3=1.761233333$, $\lambda_4=0.571651199$, $\lambda_5=0.088302412$, $\lambda_6=0.056346389$ отличается от ранее полученного (с неприемлемыми погрешностями) ассоциированного решения ($\lambda_1=2,5117$, $\lambda_2=1,592$, $\lambda_3=1,18$, $\lambda_4=0.652672946$, $\lambda_5=0.059626895$, $\lambda_6=0.004000159$). Равенство соседних элементов друг другу означает равенство 6 длин 6 ребер вычисленных наноразмеров гиперпараллелепипеда. Геометрическое решение в 3-мерном евклидовом пространстве оптимизационной задачи №3—параллелепипед, куб (гиперкуб или гиперпараллелепипед при $n>3$). Для одного из бесконечного множества $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ -спектров мы приводим один: $\Omega_{66}=\text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_6)=\text{diag}(3.177264408, 1.164400023, 0.942035569, 0.322733128, 0.291918003, 0.101648869)$.

Ранее в [1] мы получили решение оптимизационной задачи №1: $\lambda_4=0,354$, $\lambda_5=0.1062$, $\lambda_6=0.03186$. эти значения соответствуют начальным значениям b -переменных $b_4=b_5=b_6=0.3$. Приведенные в Таблице 1 входные, начальные значения, формулы параметров, их значений, начальных значений b -переменных восстанавливаемого спектра после ввода в поля (ячейки) надстройки «Поиск решения» в ЭТ Excel и после настройки в окне «Параметры поиска решений» параметров метода Ньютона (Рисунок 2).

Для этого $(f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ - спектра решаем ОСЗ $\Omega_{66}=\Rightarrow(C^{(\ell)}_{66}, R^{(\ell)}_{66})$, $\ell=1, \dots, \infty$, для одного (из бесконечного множества) решения Ω_{66} из ЛОП №3 вычисляются бесконечное число ортогональных матриц $C^{(\ell)}_{nn}$ собственных векторов таких, что $R^{(\ell)}_{66}C^{(\ell)}_{66}=\Omega_{66}$, $C^{(\ell)r}_{66}C^{(\ell)}_{66}=C^{(\ell)}_{66}C^{(\ell)r}_{66}=I_{66}$, $\text{diag}(R^{(\ell)}_{66})=(1, \dots, 1)$, $\text{tr}(R^{(\ell)}_{66})=1+1+\dots+1=\text{tr}(\Omega_{66}=\omega_1+\dots+\omega_6=6)$, $\omega_1 \geq \dots \geq \omega_6$ [1-5]. Одна из матриц $C^{(\ell)}_{66}$ приведена в Таблице 6.

Мы изложили расчетные трудности применимых в наноизмерениях. Нанодиапазон задаёт так называемые «структурно-чувствительные» свойства материала (например, для керамики-зависящие от размера зёрен), и на атомарном уровне, который определяет фундаментальные характеристики вещества. Суммарное воздействие эффектов, наблюдаемых на каждом из этих уровней, характеризует объект в целом, на макроуровне. Анализ и интерпретацию конкретной предметной области отложим для последующих публикаций.

Если вычислены элементы $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ спектра $\Lambda_{nn}=\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ корреляционной матрицы R_{nn} n -мерной выборки значений наноизмерений, то они вычислены с машинной точностью по известной

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

матрице R_{nn} . Далее по этим значениям вычисляются с машинной точностью значения функций $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$: $\Lambda_{nn} \Rightarrow (f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ по математическим формулам, а не по алгоритмам. В нашей задаче №3 решается обратная задача вида

$(f_2, f_3, f_4, f_5, f_6) \Rightarrow \{(b_2, \dots, b_n)\} \Rightarrow \{(\lambda_1, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)\} = \{\Lambda_{nn}\}$, но решается алгоритмически. Фигурные скобки $\{\dots\}$ означают бесконечность наборов значений внутри скобок. И в этой обратной задаче (если сравнить с обратными задачами из [2,3]) имеем бесконечность ее решений. 20 решений этой задачи приведены на Рисунках 5,6, Таблица 5.

Иными словами в прямой и обратной задачах не проводится взаимно обратных арифметических операций типа сложение\вычитание, умножение\деление. Машинные точности также разные в них. Поэтому если мы с имеющейся в компьютере точностью одинаково точно вычислили значения $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$: $\Lambda_{nn} \Rightarrow (f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$, то алгоритмически решенная задача №3: $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6) \Rightarrow (b_2, \dots, \{b_{\ell+1}, \dots, b_n\}) \Rightarrow \{(\lambda_1, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)\} = \Lambda_{nn} \Rightarrow (f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ реализуется с разными точностями для b -переменных, для λ -переменных $\lambda_1, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n$, для вновь вычисляемых f -параметров f_2, f_3, f_4, f_5, f_6 . Бесконечность значений чисел в наборах $\{b_{\ell+1}, \dots, b_n\}$ и $\{(\lambda_1, \dots, \lambda_\ell, \dots, \lambda_n)\}$ обусловлена бесконечностью значений $b_{\ell+1}, \dots, b_n$ из набора $\{b_1, \dots, b_n\}$ равномерно распределенной случайной величины $\xi \sim P[0,1]$. Это приводит к ситуации когда для заданного $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ -спектра Λ_{nn} в среде операционной системы в регистрах ПК не существует $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ - спектра Λ_{nn} , «не может найти подходящего решения» (Рисунок 1).

Вернемся к окну процедуры «Поиск решения». Все поля окна заполнены правильно (Рисунки 3 и 4) и в соответствии с линеаризованной оптимизационной задачей №3. При нажатии кнопки «Выполнить» открывается окно (Рисунок 1) с диагностикой «Поиск не может найти подходящего решения». В этой

постановке Solver не может решить, «не может найти подходящего решения». Почему?.

Подходящее решение не получено из-за того факта, что значения f_2, f_3, f_4, f_5, f_6 не вычислялись по тем же формулам, что и значения $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$. А вычислялись *алгоритмически* методом Ньютона при разных начальных значениях входных. Они вычислялись по разному, но в одной операционной системе одного и того же 64-битового компьютера. Но известно, что машинное представление дискретных чисел отличается от идеального вполне допустимой погрешностью. Но в нашем случае реализации в ПЭВМ линеаризованной оптимизационной задачи №3 с применением надстройки «Поиск решения» в ЭТ Excel присутствуют «заботы о разных далеких друг от друга интервалах» изменения как разных видов параметров, так и разных видов переменных. Это-объективная ситуация, обусловленная рамками наших задач с интенсивным использованием ПЭВМ. Теоретические задачи мы не рассматриваем.

Выход из этой ситуации есть. Во-первых, нам важно добиться высокой степени точности оценок для значений f -параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$. Во-вторых, нам нужна высокая точность оценок недоминирующих элементов $\omega_{\ell+1}, \dots, \omega_n$, сильно влияющих на значения f -параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$. Так как мы всегда сохраняем высокую точность оценки значения f_4 , то мы можем позволить процедуре «Поиск решения» изменить (относящиеся к другому гиперпараллелепипеду) значения $\omega_1, \dots, \omega_\ell$, но так, что значение их суммарной доли в сумме значений $(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n)$ остается прежним и равным $f_4(\Omega_{nn}) = (\omega_1, \dots, \omega_\ell) / n - 1$

$(\Omega_{nn} = \text{diag}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n))$, где алгоритмически вычисленные в обратной задаче: $(f_2, f_3, f_4, f_5, f_6) \Rightarrow (b_2, \dots, b_n) \Rightarrow (\omega_1, \dots, \omega_\ell, \dots, \omega_n) =$

$\Omega_{nn} \Rightarrow (f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ значения f -параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ не равны в точности арифметически вычисленным ранее значениям $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$

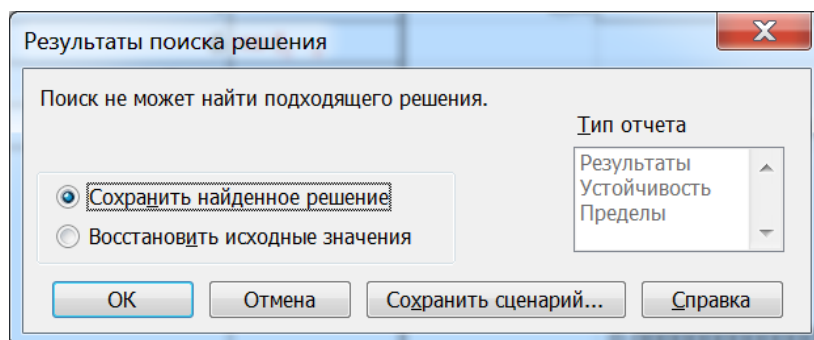


Рисунок 1 - Окно «Результаты поиска решения» в ЭТ Excel при решении.

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

Выводы.

В результате наших исследований произошло *качественное изменение* [14] в моделировании отсутствующих элементов спектра. Из-за *качественного внесения* изменений в формулы уравнений задачи №2-линеаризации. Данное нововведение (новшество) привело систему (совокупность элементов спектра $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_l$) «Изменяемые ячейки» окна надстройки «Поиск решения» к изменению ее (системы) структуры путем перевода l параметров модели в переменные. При этом присущее l параметрам модели свойство $f_4(\Lambda_{nn})=(\lambda_1, \dots, \lambda_l)/n$ сохранилось $f_4(\Lambda_{nn})=(\lambda_1, \dots, \lambda_l)/n= (\omega_1, \dots, \omega_l)/n$. В процедуре «Поиск решения» это изменение статуса переменных проводится нажатием кнопки «Предположить» («Assume»). И в окне процедуры в «Изменяемые ячейки» к адресам ячеек b-переменных b_4, b_5, b_6 добавляются адреса ячеек добавленных λ -переменных $\lambda_1, \dots, \lambda_6$ (Рисунок 2).

Наше новшество-линеаризация, повысило эффективность нашего алгоритма и уменьшило значения весьма малых отклонений значений f-параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ до требуемых (заданных равными 0.0000000001 в окне «Параметры поиска решений» (Рисунок 1) процедуры «Поиск решения») значений. Так

погрешности для значения параметра f_1 равна $|6,00000000-6|=0, f_2-|10,48578599-10,48578599|=0,0000000000000000, 1/f_3-|0,031992575-0,031992575|=0,0000000000, -f_4, =|0,7163-0,7163|=0,0000000000, \text{Ln}(f_5)-\varepsilon_5=| -6,13999151682266+6,13999151682266|=0, f_6=\varepsilon_6=|23,58444237-23,58444237|=0$. Этими точными значениями f-параметров $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6$ обладает полученное решение

$$\Omega_{66}=\text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_6)=\text{diag}(3,177264408, 1,164400023, 0,942035569, 0,322733128, 0,291918003, 0,101648869).$$

Линеаризация как нововведение обеспечило технологию порождения (добавления) в новых «машинных» условиях порождения переменных оптимизационной задачи-конкретного объекта-ассоциированного решения $(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, зависящего от конкретного решения (b_4, b_5, b_6) оптимизационной задачи №3. Изменение ассоциированного решения в новых условиях машинного представления чисел $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6), (b_2, \dots, b_n), (\omega_1, \dots, \omega_l, \dots, \omega_n), (f_2, f_1, f_3, f_4, f_5, f_6)$ в ячейках ПЭВМ составляет причину введения в линеаризованную оптимизационную задачу №3 дополнительных *изменяемых переменных* $\lambda_1, \dots, \lambda_l$, суммарная доля которых не меняет требуемого значения $f_1(\Lambda_{66})=(\lambda_1+\dots+\lambda_6)=6$ - одного из 6 существенных f-параметров нашей задачи. Это-предмет инновации [12] в оптимизационной задаче №3.

Таблица 1

Входные и начальные значения параметров и переменных спектра

f_2	10,48579		$B_2=$	0,592244677	
f_3	31,25725		$B_3=$	0,832835948	
f_4	0,880617		$B_4=$	0,3	
f_5	0,002154942		$B_5=$	0,09	
λ_1	2,5117		$B_6=$	0,078	
λ_2	1,592		5,691422045	6	$\leq f_1 +$
λ_3	1,18	$b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6 \Rightarrow$	0,407722045	0,7163	$\leq (1-f_4) \times 6 +$
λ_4	0,371663	$b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6 \Rightarrow$	0,001038769	0,031992575	$\leq 1 \setminus f_3$
λ_5	0,03345	$(1+F24 \times F24 + F24 \times F24 \times F25 \times F25 + F24 \times F24 \times F25 \times F25 \times F26 \times F26 + F24 \times F24 \times F25 \times F25 \times F26 \times F26 \times F27 \times F27 + F24 \times F24 \times F25 \times F25 \times F26 \times F26 \times F27 \times F27 \times F28 \times F28) \times C28 \times C28 \Rightarrow$	10,19549192	10,48578599	$\leq f_2 +$
λ_6	0,002609		30,15416525	23,58444237	$\leq f_6 +$
	5,6914		-8,803948705	6,1399915168226	$\leq \text{Ln } f_5$

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

Таблица 2

Вычисленные значения параметров и переменных (f₁,f₂,f₄,f₆)-спектра (ЛОЗ №2)

f2	10,485786		B2=	0,633833658	
f3	31,257253		B3=	0,74120603	
f4	0,8806167		B4=	0,342791963	
			B5=	0,726458043	
Л1	2,5117		B6=	0,061110404	
Л2	1,592		6	6	<= f ₁
Л3	1,18	b2×b3×b4 ×b5×b6 =>	0,7163	0,7163	<=(1-f4*6
Л4	0,4044945	b2×b3×b4 ×b5×b6 =>	0,007149416	0,031992575	<=1\ f3
Л5	0,2938483	(1+F24*F24+F24*F24*F25*F25+F24*F24*F25*F25*F26*F26+F24*F24*F25*F25*F26*F26*F27*F27+F24*F24*F25*F25*F26*F26*F27*F27*F27*F28*F28)*C28*C28=>	10,48578599	10,48578599	<=f2
Л6	0,0179572		23,58444237	23,58444237	<=f ₆
	6		4,940724604	3,4422514421648	<=f ₅
				5	

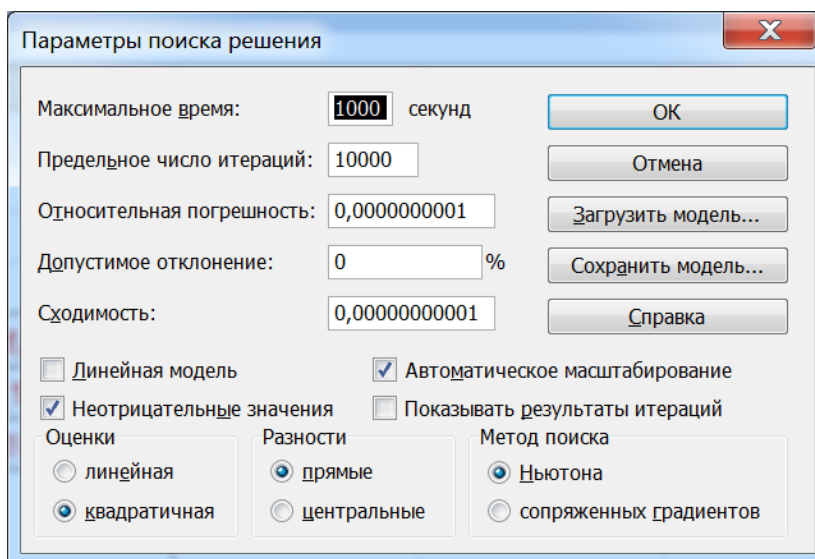


Рисунок 2 - Окно «Параметры поиска решений» в ЭТ Excel при решении оптимизационной задачи №2 и №3 с применением надстройки «Поиск решения» в ЭТ Excel

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	РИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

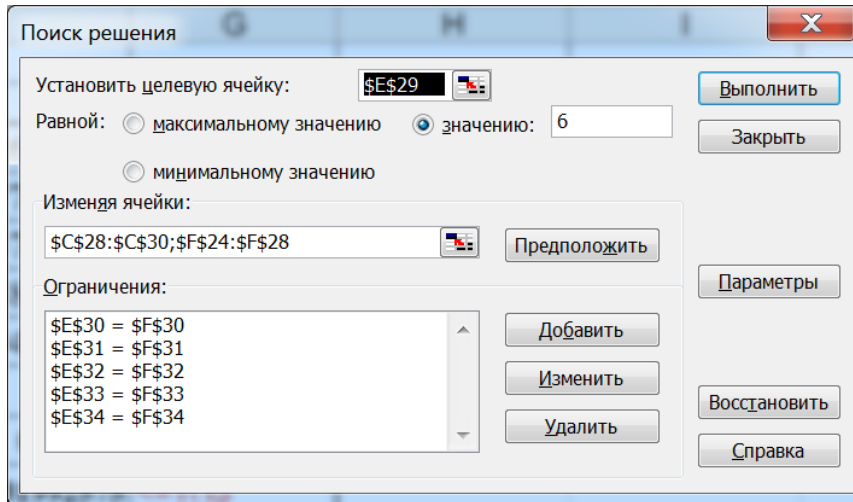


Рисунок 3 - Окно процедуры «Поиск решений» в ЭТ Excel с введенными в ячейки формулами ограничений, b-переменных, их значений, для поиска решения оптимизационной задачи №3 (начало)

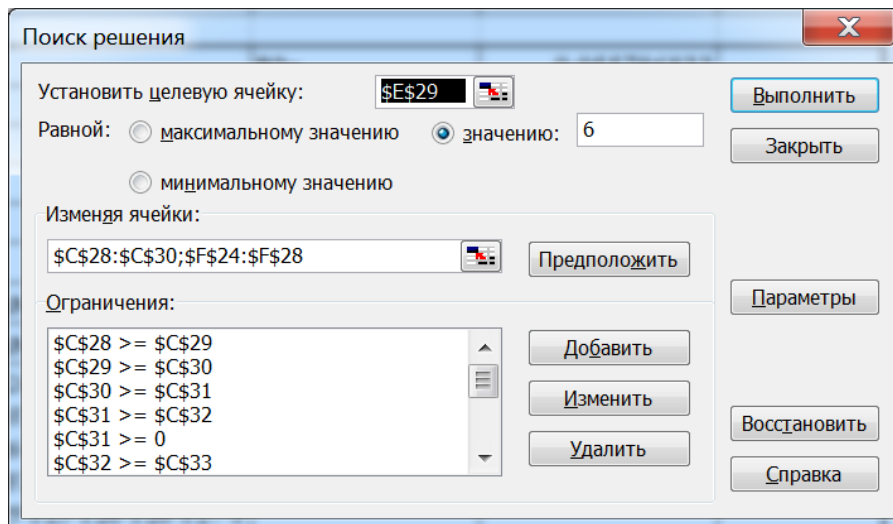


Рисунок 4 - Окно процедуры «Поиск решений» в ЭТ Excel с введенными в ячейки формулами ограничений, b-переменных, их значений, для поиска решения оптимизационной задачи №3 (конец)

Таблица 3

Вычисленные значения параметров и переменных $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ -спектра (ЛЮЗ №3)

f_2	10,48579		$B_2=$	0,055786833	
f_3	2,5117		$B_3=$	2,254265654	
f_4	1,592		$B_4=$	0,807706142	
f_5	1,18		$B_5=$	0,904518245	
λ_1	3,177264		$B_6=$	0,348210347	
λ_2	1,1644			6	$\leq f_1 +$
λ_3	0,942036	$b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6 \Rightarrow$		0,7163	$\leq (1-f_4) \times 6 +$
λ_4	0,322733	$b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6 \Rightarrow$		0,031992575	$\leq 1 \setminus f_3$

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

λ_5	0,291918	(1+F24*F24+F24*F24*F25*F25+F24*F24*F25*F25*F26*F26+F24*F24*F25*F25*F26*F26*F27*F27+F24*F24*F25*F25*F26*F26*F27*F27*F28*F28)*C28*C28=>	10,48578599	10,48578599	$\leq f_2 +$
λ_6	0,101649		23,58444237	23,58444237	$\leq f_6 +$
	6,0000		-6,139991517	-6,13999151682266	$\leq \text{Ln } f_5$

Таблица 4

Модельные значения 6 элементов $(f_6, f_3), (f_1, f_5)$ -спектра $\Omega_{66} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_6)$ при 20 реализациях задачи $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6) \Rightarrow \{(b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)\} \Rightarrow \{(\omega_1, \dots, \omega_6)\} \Rightarrow \{(\omega_1 = c_1 \lambda_1, \dots, \omega_6 = c_6 \lambda_6)\}$

	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4	ω_5	ω_6
1	3,177712311	1,164641273	0,941346416	0,307318401	0,307318401	0,101663199
	3,165829242	1,1719756	0,945895158	0,412968552	0,202048419	0,101283029
	3,113146397	1,217703182	0,952850421	0,517104862	0,099597569	0,099597569
	3,177712311	1,164087264	0,941900425	0,307318401	0,307318401	0,101663199
	3,176608157	1,053545921	1,053545921	0,335411880	0,279260246	0,101627874
	3,177264408	1,164400023	0,942035569	0,322733128	0,291918003	0,101648869
	3,170724171	1,166654726	0,946321103	0,388254257	0,226606113	0,101439630
	3,177712311	1,099883104	1,006104585	0,307318401	0,307318401	0,101663199
	3,177712311	1,164093347	0,941894342	0,307318401	0,307318401	0,101663199
0	1,761233333	1,761233333	1,761233333	0,601360983	0,059071933	0,055867084
1	1,761233333	1,761233333	1,761233333	0,571651199	0,088302412	0,056346389
2	3,174333738	1,054683131	1,054683131	0,361960306	0,252784585	0,101555109
3	3,171984118	1,055857941	1,055857941	0,380229605	0,234590456	0,101479939
4	1,761233333	1,761233333	1,761233333	0,571651199	0,088302412	0,056346389
5	1,761233333	1,761233333	1,761233333	0,571651199	0,088302412	0,056346389
6	3,176571984	1,053564008	1,053564008	0,33598796	0,278685323	0,101626717
7	3,177712311	1,158580154	0,947407535	0,307318401	0,307318401	0,101663199
8	3,177712311	1,161378671	0,944609018	0,307318401	0,307318401	0,101663199
9	3,177712311	1,120837524	0,985150165	0,307318401	0,307318401	0,101663199
0	1,761233333	1,761233333	1,761233333	0,571651199	0,088302412	0,056346389

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

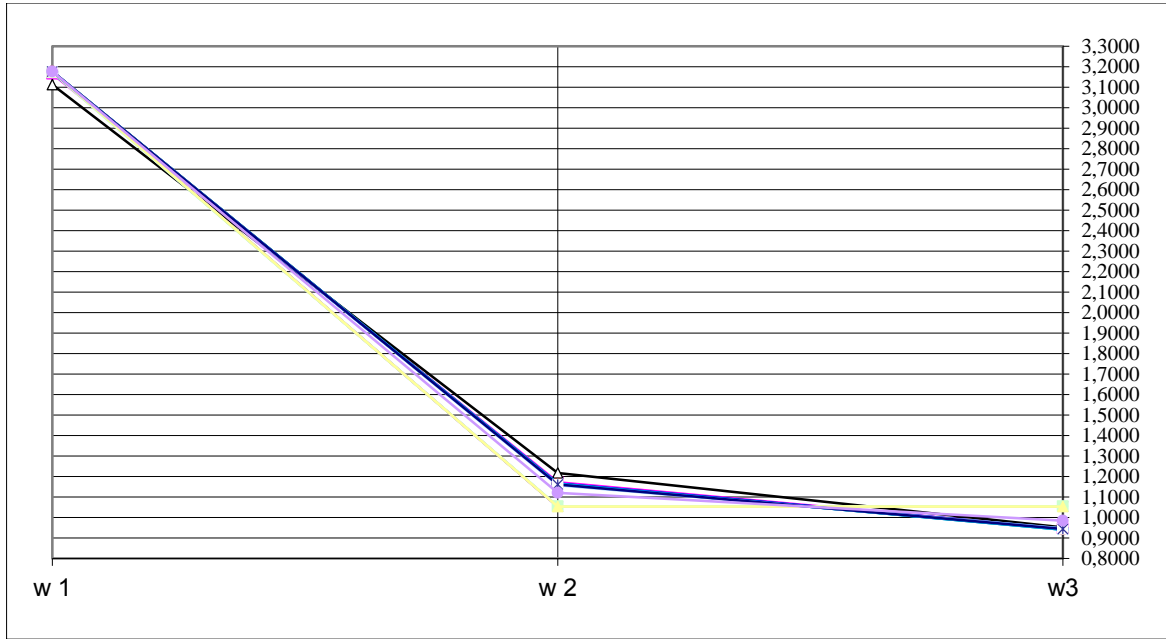


Рисунок 5 - Модельные значения доминирующих элементов 20 спектров ($\Omega_{mn} = \text{diag}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_6)$)

Таблица 5

Модельные значения 6 элементов $\{c_i\}, i=1, \dots, n$, модельного $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6)$ -спектра $\Omega_{66} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_6) = \text{diag}(c_1 \lambda_1, \dots, c_6 \lambda_6)$ при 20 реализациях задачи $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6) \Rightarrow \{(b_2 \times b_3 \times b_4 \times b_5 \times b_6)\} \Rightarrow \{(\omega_1, \dots, \omega_6)\}$

	1	2	3	4	5	6
1	1,265163957	0,731558588	0,7977512	1,001002391	16,60031175	1,265163957
2	1,260432871	0,736165578	0,801606066	1,345127747	10,91397958	1,260432871
3	1,239457896	0,764888933	0,807500357	1,684322196	5,379927424	1,239457896
4	1,265163957	0,731210593	0,798220699	1,001002391	16,60031175	1,265163957
5	1,264724353	0,661775076	0,892835527	1,092508919	15,08470412	1,264724353
6	1,26498563	0,73140705	0,798335228	1,051211487	15,76843378	1,26498563
7	1,262381722	0,73282332	0,801967036	1,26462795	12,24050403	1,262381722
8	1,265163957	0,690881347	0,852631004	1,001002391	16,60031175	1,265163957
9	1,265163957	0,731214414	0,798215544	1,001002391	16,60031175	1,265163957
10	0,701211663	1,106302345	1,492570621	1,958762576	3,190868156	0,695246873
11	0,701211663	1,106302345	1,492570621	1,861991392	4,769800853	0,701211663
12	1,263818823	0,662489404	0,893799264	1,178982874	13,65457749	1,263818823
13	1,262883353	0,66322735	0,894794865	1,238489926	12,67179153	1,262883353
14	0,701211663	1,106302345	1,492570621	1,861991392	4,769800853	0,701211663
15	0,701211663	1,106302345	1,492570621	1,861991392	4,769800853	0,701211663
16	1,264709951	0,661786437	0,892850854	1,094385336	15,05364871	1,264709951

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

17	1,265163957	0,727751353	0,802887741	1,001002391	16,60031175	1,265163957
18	1,265163957	0,729509215	0,800516117	1,001002391	16,60031175	1,265163957
19	1,265163957	0,704043671	0,834873021	1,001002391	16,60031175	1,265163957
20	0,701211663	1,106302345	1,492570621	1,861991392	4,769800853	0,701211663

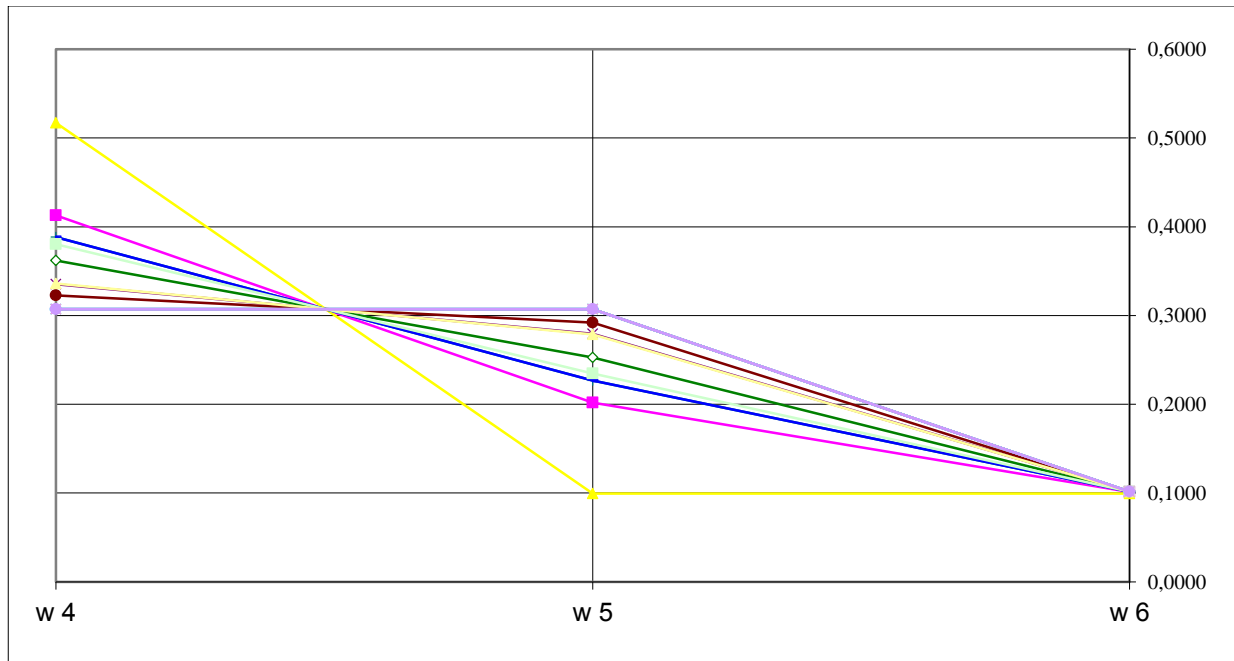


Рисунок 6 - Модельные значения недоминирующих элементов 20 спектров ($\Omega_{mn} = \text{diag}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_6)$)

Таблица 6

Модельная матрица собственных векторов, соответствующая модельному спектру

$$\Omega_{66} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_6) =$$

$$= \text{diag}(3.177264408, 1.164400023, 0.942035569, 0.322733128, 0.291918003, 0.101648869)$$

	1	2	3	4	5	6
1	0.4708	-0.4296	-0.5287	-0.3546	0.0194	-0.4338
2	0.0828	-0.3815	0.0364	0.4302	-0.8124	0.0353
3	0.4291	-0.2530	-0.1581	0.5165	0.4509	0.5068
4	0.1200	-0.4955	0.2162	-0.5943	-0.0594	0.5802
5	0.5204	0.5981	-0.1765	-0.2585	-0.3560	0.3830
6	0.5497	-0.0516	0.7850	-0.0492	0.0778	-0.2654

References:

- Zhanatauov SU (2017) Optimization problem of modeling missing elements of the spectrum of the correlation matrix. International scientific journal Theoretical & Applied Science. 2017, №10, vol.54, p.189-198.

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	PIHII (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

- Zhanatauov S.U. (2013) Obratnaya model' glavnykh komponent.-Almaty:Kazstatinform, 2013.-201 p.
- Zhanatauov S.U. (1987) Obratnaya model' glavnykh komponent i ee primeneniye. Diss. na soiskaniye uchenoy step. kand.fiz.-mat. nauk: 05.13.11:zashchishchena8.12.1987:utv.1.06.1988/Zhanatauov Sapargali Uteповich.-Vychislitel'nyy tsentrSibirskogo otdeleniya AN SSSR,Novosibirsk, 1987g., 302 p.
- Zhanatauov S.U. (1987) The inverse problem of the principal component analysis// Proc.of the 1-st World Congress of Soc.Math. Statist. and Probability Theory of Bernoulli.-Utrecht,1987.-p.116-119.
- Zhanatauov S.U. (1988) Obratnaya zadacha analiza glavnykh komponent. V kn. «Doklady po matematike i ee prilozheniyam, t. 2, vyp. 3, 1-yy Vsemirnyy Kongress obshchestva im. Bernul-li. Matematicheskaya statistika, teoriya veroyatnostey, kombinatorika i ikh primeneniya. Trudy. Sektsiya 4 », M.: Nauka, 1988g. -p. 330-335.
- Hotelling H. (1933) Analysis of a complex of statistical variables into principal components. -J. Educ. Psychol.,1933, vol.24, p. 417-441, p. 498-520.
- Zhanatauov S.U. (1989) Modelirovaniye odnoy zamechatel'noy ekstremal'noy sovokupnosti //Sistem noe modelirovaniye-14, -Novosibirsk. 1989. p.27- 33.
- Zhanatauov S.U. (2017) Theorem on the Λ -samples. International scientific journal Theoretical&Applied Science.2017,№ 9, vol.53, -p.177-192. <http://www.T-Science.org>.
- Zhanatauov S.U. (2017) A model of calculation risk changing of the interest rate "yield to maturity date" for foreign currency bonds of the republic of Kazakhstan. International scientific journal Theoretical&AppliedScience. 2017, №8,vol.52, -p.19-36. <http://www.T-Science.org>.
- Zhanatauov S.U. (2016) Model and histogram to adequacy of variables (C, Λ)- samples and real multidimensional sample. International Scientific Journal Theoretical&Applied Science. 2016, № 11, vol. 4, -p. 53-61. <http://www.T-Science.org>.
- Zhanatauov S.U. (2014) The (C, Λ ,Y) -sample is adequate to real multidimensional sample. Proced. Int. conf. "Leadership in Education, Business and Culture". 25 april 2014, Almaty-Seattle, ICET USA. Leadership International Conference "Leadership on Education, Business and Culture". -p.151-155.
- Zhanatauov S.U. (2017) Modelirovaniye mnogomernykh vyborok znacheniy priznakov zernovoy kul'tury. "II mezhdun. nauchno-prakt.konf. «Evropa i tyurkskiy mir: nauka, tekhnika i tekhnologii".Izmir (Turtsiya), 29-31 maya 2017. -p.159-167. www.regionacadem.org.
- Chalmers C.P. (1975) Generation of correlation matrices with a given eigen-structure.-J. Stat.Comp. Simul., 1975, vol.4, p.133-139.
- Li EV, Tulenova KZ, Izzetova EM, Naumenko OA, Makhkamov UA (2017) to the question of philosophical analysis on categories of "creativity" and "innovation". ISJ Theoretical & Applied Science, 10 (54): 206-209. <http://www.T-Science.org>.

