МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

Семинар 7

Общая постановка задачи оптимизации.

В общем задачу оптимизации можно сформулировать так:

Найти такой вектор параметров $\vec{x}$ (переменных оптимизации), при котором расхождение между модельным представлением некоторого набора выходных переменных (функций отклика, зависимых переменных) наилучшим образом описывает их состояния, наблюдаемые в эксперименте. Функции отклика в общем случае зависят, как от вектора параметров, так и от вектора некоторых независимых переменных (входных переменных/предикторов) $\vec{t}$

$\vec{x}^* = argmin(\Phi(\vec{t}\,;\vec{x}))$

$\vec{x}^*$ - минимизатор

Функция Φ - так или иначе должна быть сведена к скалярной, она характеризует отклонение рассчитанного (предсказанного значения) от измеренного. Иными словами:

Отклик = Модель(параметры, независимые переменные) + ошибка (в том числе случайная)

Φ - мера ошибки, цель оптимизации - минимизировать ошибку

Линейная оптимизация (метод наименьших квадратов)

Линейная оптимизация - это такая, для которой модель отклика зависит от параметров оптимизации линейно.

Если линейно, значит должна работать линейная алгебра!

Решение систем линейных уравнений

$A\vec{x} = \vec{b}$ - основная задача линейной алгебры, решение системы линейных алгебраических уравнений

Посмотрим на входящие в это уравнение вещи как на задачу оптимизации

$\vec{b}$ - вектор наблюдений (отклик, измеренный в эксперименте)

$\vec{x}$ - вектор параметров (переменных оптимизации)

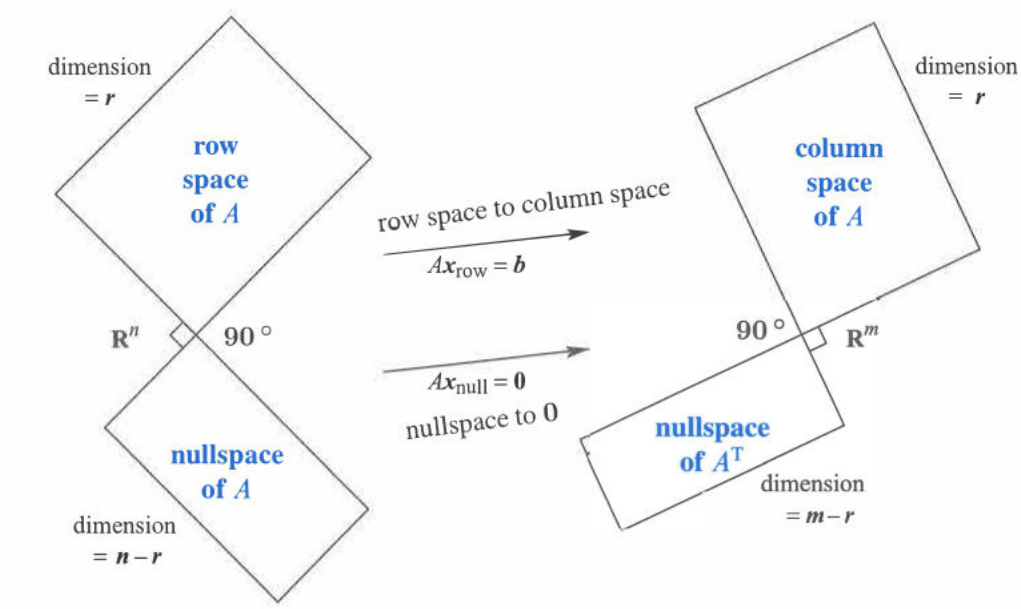
A - постоянная матрица (не зависящая от переменных оптимизации - $\vec{x}$), которая описывает нашу линейную модель

Системы линейных алгебраических уравнений

$A\vec{x} = \vec{b}$

Попробуем взять прямоугольную матрицу, но вначале нарисуем векторные пространства.

Подпространства матрицы (nxm)



Картинка из: [Gilbert Strang - Introduction to Linear Algebra (2016, Wellesley-Cambridge Press)]

Матрица - это четыре подпространства:

(1) Пространство строк (столбцов матрицы A^T) - $C(A^T)$

(2) Пространство столбцов матрицы A - $C(A)$

(3) Нуль-пространство строк (столбцов матрицы A^T) - $N(A^T)$

(4) Нуль- пространство столбцов матрицы (A) - $N(A)$

$N(A) \perp C(A^T)$ а $N(A^T) \perp C(A)$

Пространства (1) и (2) имеют одинаковую размерность (размерность - число линейно независимых компонент). Размерности нуль-пространств не обязаны совпадать!

Если у нас есть вектор $\vec{x}$ из пространства строк $C(A^T)$, то, когда мы на него действуем матрицей A, она переводит его в вектор пространства столбцов $C(A)$. Если же матрица A переводит вектор $\vec{x}$ в нулевой вектор, то говорят, что $\vec{x}$ принадлежит нуль-пространству матрицы A $N(A)$. Нуль-пространство матрицы A дополняет пространство строк до полного пространства размерности n (число строк в матрице).

Аналогичная ситуация с матрицей A^T, когда она действует на вектор $\vec{b}$ из пространства столбцов (2), то она переводит его в вектор пространства строк. , а если $\vec{b}$ из нуль-пространства матрицы A^T, то она переводит его в нуль-вектор. Поэтому пространства

Для квадратной матрицы, у которой все столбцы (а, следовательно, и строки) линейно независимы, существует обратная матрица, которая однозначно переводит любой вектор пространства строк в соответствующий вектор пространства столбцов. Пространства (2) и (3) и (1) и (4) соотвественно попарно ортогональны (по сути это было сказано в двух предложения выше).

Обратная матрица:

```
clearvars
% квадратная матрица  - СЛАУ полностью определена
A = rand(10);
b = rand([10,1]);
x1 = inv(A)*b; %  x = (A^-1)*b, функция inv считает обратную матрицу
x2 = A\b; % это более быстрый вариант решения системы уравнений
norm(x1-x2)
```

```
ans = 1.0232e-15
```

```
% оба варианта дают одинаковый результат
```

Матрица квадратная (mxm), тут все однозначно, у квадратной матрицы есть обратная (если все ее столбцы линейно независимы). Обратная матрица - это такая матрица, которая для любого вектора из пространства R^m возвращает подпрострнаства строк.

Но на практике число параметров оптимизации обычно не равно числу экспериментальных точек,

оно существенно меньше, поэтому матрица должна быть прямоугольной а не квадратной

```
clearvars
A = rand([100,5]);
b = rand([100,1]);
x1 = inv(A)*b
```

```
Error using inv
Matrix must be square.
```

```
x2 = A\b
```

```
x2 = 5×1
    0.2194
    0.1925
    0.0779
    0.1012
    0.3458
```

```
clearvars
```

```
% квадратная матрица  - СЛАУ полностью определена
A = rand(10);
A(:,1) = A(:,2); % делаем матрицу сингулярной (матлаб решает задачу, но ругается)
b = rand([10,1]);
x1 = inv(A)*b ;
```

```
Warning: Matrix is singular to working precision.
```

```
x2 = A\b;
```

```
Warning: Matrix is singular to working precision.
```

```
norm(x1-x2)
```

```
ans = NaN
```

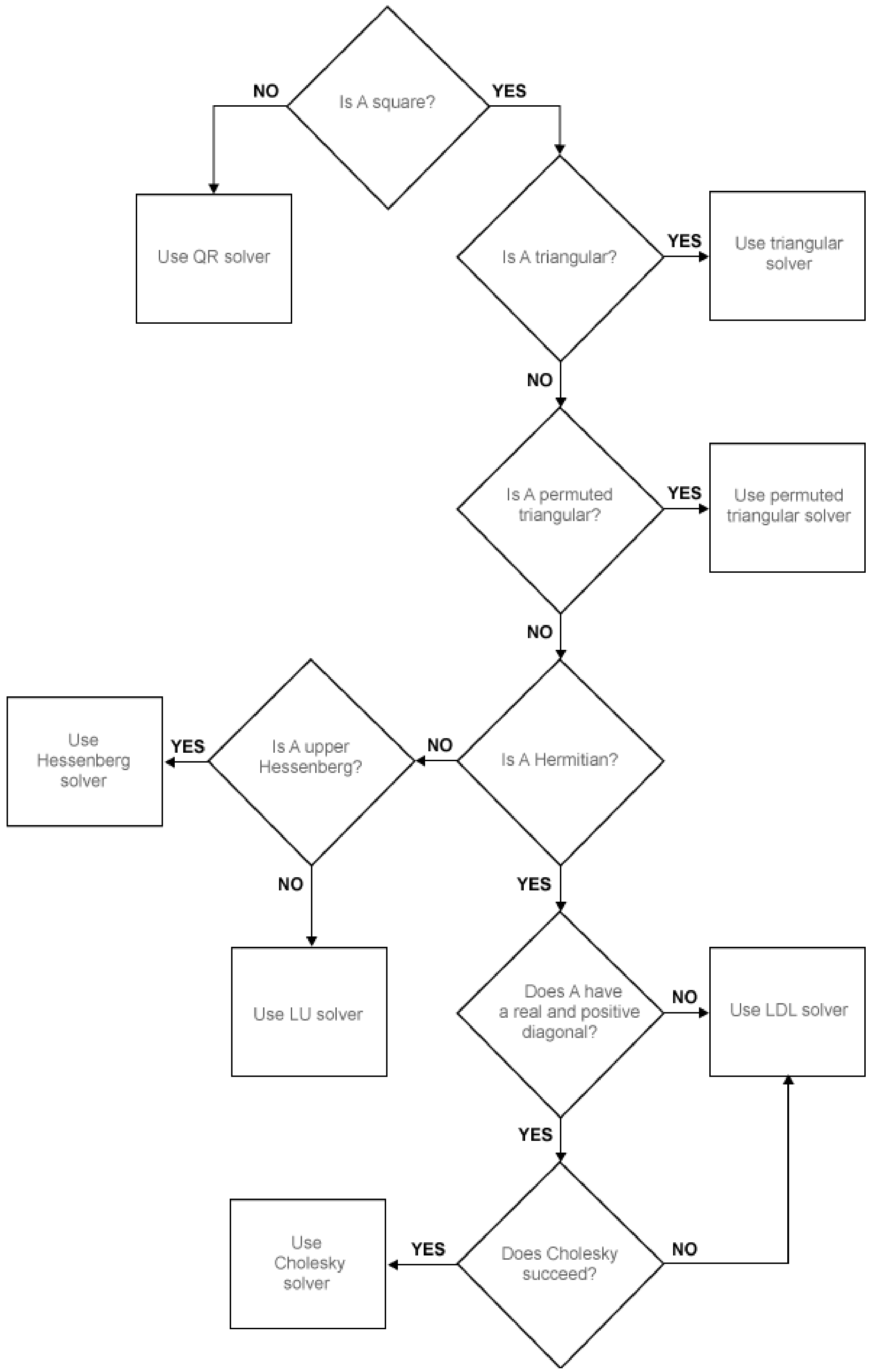
По ячейке выше возникает два вопроса:

1) Почему первое не сработало, а второе сработало, почему нельзя инвертировать прямоугольную матрицу $A^{n \times m}$?

2) Почему сработало второе?

Ответ на первый вопрос дает картинка пространств прямоугольной матрицы выше. Тут, кажется, проблема в том, что такая матрица (обратная к прямоугольной) не будет универсально работать для любого вектора $\overrightarrow{b}$. Если вектор $\overrightarrow{b}$ принадлежит нуль-пространству матрицы A^T, то каков должен быть вектор $\overrightarrow{x}$, чтобы матрицей A мы перевели его в нуль-пространство матрицы A^T? Как мы могли вообще оказаться в этом нуль-пространстве? Если матрица A действует на $\overrightarrow{x}$ из пространства строк - получаем вектор пространства столбцов, а если $\overrightarrow{x}$ из нуль-пространства матрицы A, получаем ноль-вектор.

А чтобы ответить на второй вопрос можно посмотреть на алгоритм функции **mldivide** aka \ :



Картинка алгоритма работы функции mldivide из help MATLAB

Видно, что матлаб использует нескоторый таинственный QR солвер.

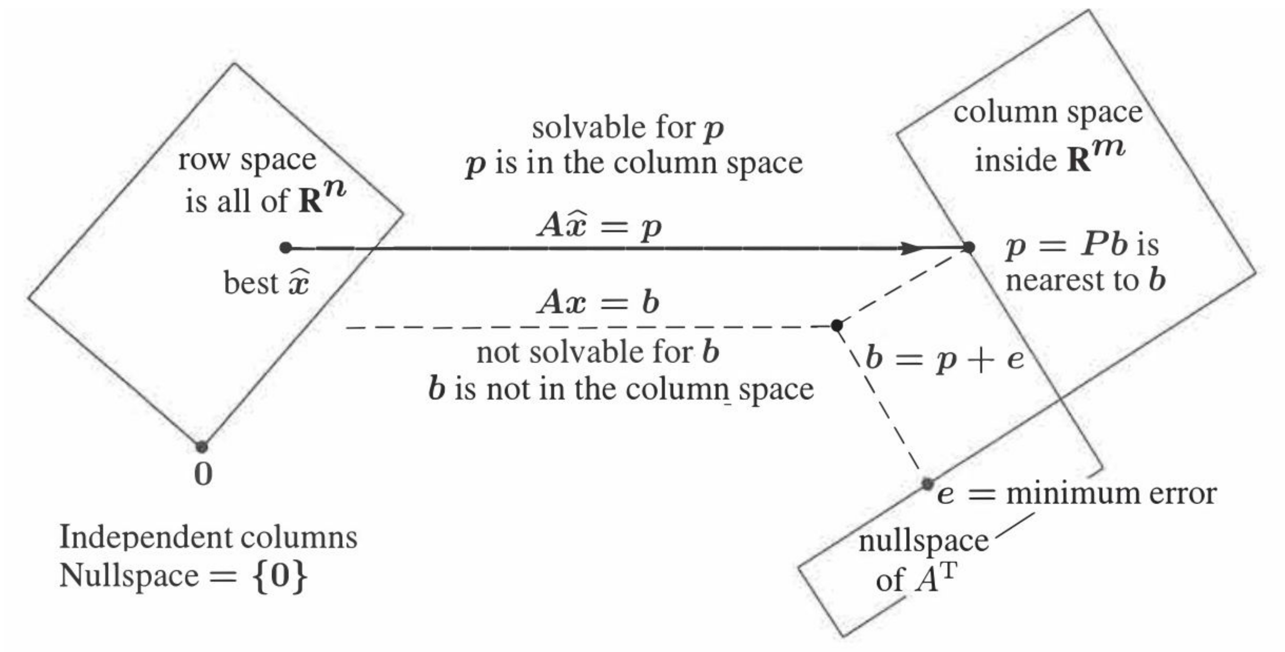
Если представить вектор $\vec{b}$ в виде суммы составляющих в пространстсве столбцов и в нуль пространстве матрицы A^T (которое дополняет пространство столбцов до пространства R^m)

$A\vec{x} = \vec{b} = \vec{p} + \vec{e}$

Картина с точки зрения линейной алгебры, если вектор $\vec{b}$ не лежит в пространстве столбцов матрицы A, то его можно разделить на две составляющие:

- нормальную пространству столбцов (то есть принадлежащая нульпространству A^T)

- и лежащую в пространстве столбцов матрицы A



[Gilbert Strang - Linear Algebra for Everyone (2020, Wellesley - Cambridge Press)]

Идея в том, чтобы найти такой вектор $\vec{\hat{x}}$, который при действии на него матрицей A переходит в вектор $\vec{p}$ такой, что составляющая вектора $\vec{b}$, лежащая в нуль-пространстве A^T минимальна, то есть $\vec{e} = \vec{b} - \vec{p}$ минимальна

В принципе, в качестве скалярной меры "минимальности" можно взять модуль вектора, можно сумму модулей его координат, можно максимальное значение координаты и т.д.

Мы далее будем минимизировать квадрат модуля ошибки (то есть, решать задачу метода наименьших квадратов), у подобного выбора есть статистическое обоснование в виде принципа максимального правдоподобия, который мы рассмотрим в следующий раз.

Итак, минимизируемая функция (функция невязки в общих терминах задач оптимизации):

$$\Phi(x) = \vec{e}^{\,T}\vec{e} = ||A\vec{x} - \vec{b}||^2 = (A\vec{x} - \vec{b})^T(A\vec{x} - \vec{b}) = \vec{x}^{\,T}A^TA\vec{x} - 2(\vec{x}^{\,T}A^T)\vec{b} + \vec{b}^{\,T}\vec{b}$$

Видно, что функция невязки для задачи линейной оптимизации - квадратична относительно переменных отимизации, почему она названа линейной?!

Условие минимума модуля ошибки $\vec{e}$ - равенство нулю градиента $\nabla_x(\vec{e}^T\vec{e}) = 0$, немного векторного анализа, и это дает:

$$\nabla_x(\vec{e}^T\vec{e}) = 2[\nabla(\vec{x}^T A^T)]^T A\vec{x} - 2A^T\vec{b} = A^T A\vec{x} - A^T\vec{b} = 0$$

||| Правило дифференцирования скалярного произведения:

||| $\nabla(\vec{a}^T\vec{b}) = (\nabla\vec{a})^T\vec{b} + (\vec{a})^T(\nabla\vec{b})$ => $\nabla(\vec{a}^T\vec{a}) = 2(\nabla\vec{a})^T\vec{a}$

||| Правило дифференцирования матриц:

|||$\nabla(A\vec{x}) = A\nabla\vec{x}$, а $\nabla(\vec{x}^T A) = A^T\nabla\vec{x}$, $\nabla_x\vec{x} = I$

В итоге имеет уравнение:

$$A^T A\vec{x} = A^T\vec{b} \qquad (1)$$

Отсюда, минимизатор :

$$\vec{x}^* = (A^T A)^{-1}A^T\vec{b} \qquad (2)$$

$A^\dagger = (A^T A)^{-1}A^T$ - псевдо обратная матрица - оператор, который переводит произвольный вектор $\vec{b}$ в вектор пространства строк матрицы A, если вектор $\vec{b}$ принадлежал пространству столбцов матрицы A; и в ноль, если $\vec{b}$ принадлежал нуль-пространству матрицы A^T

Геометрический смысл псевдообратной матрицы:

Псевдообратная матрица, действуя на вектор $\vec{b}$, переводит его в вектор пространства строк $\vec{x}^*$, такой, что действие на этот вектор матрицы A переводит его в проекцию вектора $\vec{b}$ на пространство столбцов матрицы A.

$$A\vec{x}^* = A(A^T A)^{-1}A^T\vec{b} = P_A\vec{b} \qquad (3)$$

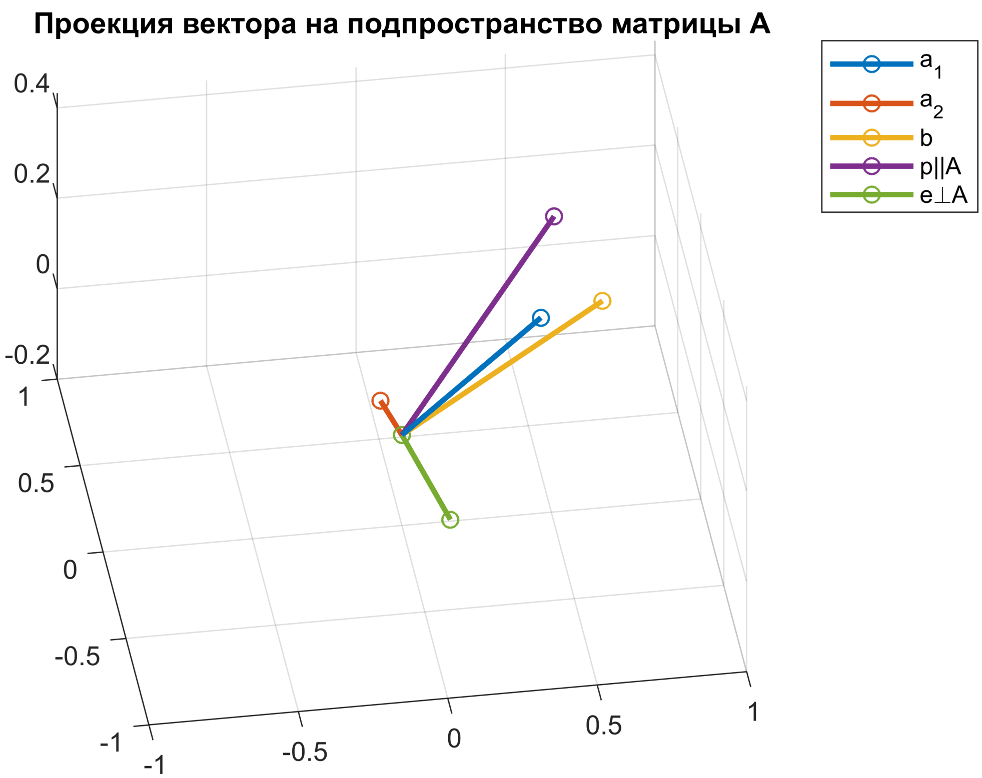
$P_A = A(A^T A)^{-1}A^T = AA^\dagger$ - оператор проецирования произвольного вектора на векторное пространство столбцов матрицы A:

$$P_A\vec{b} = \vec{p}$$

```
% Проекция вектора на пространство столбцов матрицы из двух столбцов
```

```
clearvars
% генерим случаные вектора в трехмерном пространстве
a1 = (0.5 - rand(3,1));
a2 = (0.5 - rand(3,1));
```

```
R = [0.72, 19.8,87.1 ];% модуль-тетта-фи - сферическая система координат дял
трехмерного вектора
r = R(1);thetta = R(2);phi = R(3);
b = [r*cosd(thetta)*sind(phi);r*cosd(thetta)*cosd(phi);r*sind(thetta)] ;% некоторый
вектор
A = [a1,a2];
PA = A*inv(A'*A)*A'; % матрица проецирования
p = PA*b ;% составляющая вектора в пространстве столбцов
e = b - p;  % составляющая вектора перпендикулярная пространству столбцов
draw_vector([],'Проекция вектора на подпространство матрицы A',...
["a_1" "a_2" "b" "p||A" "e\perpA"],"vector",a1,a2, b,p,e);
```



Как считать псевдообратную матрицу?

<u>Напрямую:</u>

$A^{\dagger} = inv(A^T A)A^T$ - используется метод разложения Гаусса (LU - факторизация)

При помощи QR факторизации:

$A = QR$ (R - квадратная матрица, Q - ортогональная матрица)

QR-факторизация дает: $A^{\dagger} = (R^T Q^T QR)^{-1} R^T Q^T = (R^T R)^{-1} R^T Q^T = R^{-1} Q^T$

При помощи SVD разложения:

$A = U\Sigma V^T$ (A - матрица размером nxm, U, V - ортонормированные матрицы размером (nxn) и (mxm) соотвественно ($U^T U = I, V^T V = I$), Σ - матрица сингулярных значений размером (nxm))

SVD - разложение дает: $A^{\dagger} = (A^T A)^{-1} A^T = (V\Sigma^T \Sigma V^T)^{-1} V \Sigma^T U = V(\Sigma^T \Sigma)^{-1} \Sigma^T U^T = V\Sigma^{\dagger} U^T$, $\Sigma^{\dagger} = \begin{matrix} 1/\sigma_1 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 1/\sigma_r \end{matrix}$

В формуле выше, r обозначает ранг матрицыA, если матрица имеет m линейно независимых столбцов, то $r = m$

SVD можно использовать и для матриц, у которых столбцы являются линейно зависимыми, то есть ранг матрицы $r < m$, тогда:

$$\Sigma^{\dagger} = \begin{matrix} 1/\sigma_1 & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 1/\sigma_r & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & & \ddots & \\ 0 & \dots & \dots & & \dots & 0 \end{matrix}$$

То есть, матрица дополняется нулями до размера mxm

```
clearvars
A = rand(100,2);
b = rand(100,1);
[Q,R] = qr(A,"econ"); %econ значит, что возращается не полная матрица R и Q, а 
только размером с ранг данных
%[Q,R] = qr(A)
[u,S,v] = svd(A,"econ","vector");
```

Псевдообратная матрица $A^{\dagger}$:

```
ApseudoDir = inv(A'*A)*A' % напрямую (самый медленный способ)
```

```
ApseudoDir = 2×100
   -0.0084    0.0349    0.0477    0.0457    0.0464    0.0071    0.0158   -0.0202 ···
    0.0123   -0.0140   -0.0284   -0.0224   -0.0201    0.0135   -0.0099    0.0335
```

```
ApseudoQR = R\Q' % через QR - факторизацию
```

```
ApseudoQR = 2×100
   -0.0084    0.0349    0.0477    0.0457    0.0464    0.0071    0.0158   -0.0202 ⋯
    0.0123   -0.0140   -0.0284   -0.0224   -0.0201    0.0135   -0.0099    0.0335
```

```
ApseudoSVD = v*diag(1./S)*u' % через SVD - разложение
```

```
ApseudoSVD = 2×100
   -0.0084    0.0349    0.0477    0.0457    0.0464    0.0071    0.0158   -0.0202 ⋯
    0.0123   -0.0140   -0.0284   -0.0224   -0.0201    0.0135   -0.0099    0.0335
```

```
bmldivide = A\b % по сути тоже через QR факторизацию
```

```
bmldivide = 2×1
    0.4858
    0.4466
```

```
normApseudoDir = norm( A*ApseudoDir*b - b) % модуль ошибки (составляющей ортогональной пространству столбцов матрицы A)
```

```
normApseudoDir = 3.5676
```

```
normApseudoQR = norm( A*ApseudoQR*b - b)
```

```
normApseudoQR = 3.5676
```

```
normApseudoSVD = norm( A*ApseudoSVD*b - b)
```

```
normApseudoSVD = 3.5676
```

```
normmlDivide = norm(b - A*bmldivide)
```

```
normmlDivide = 3.5676
```

А что если матрица имеет зависимые столбцы?

```
clearvars
a = rand(5);
e = 1e-32;
A = [a,2*a+e];
b = rand(5,1);
[Q,R] = qr(A,"econ");
[u,S,v] = svd(A,"econ","vector");
ApseudoDir = inv(A'*A)*A'; % напрямую (самый медленный способ)
```

```
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =  2.389004e-19.
```

```
ApseudoQR = R\Q'; % через QR - факторизацию
ApseudoSVD = v*diag(1./S)*u'; % через SVD - разложение
bmldivide = A\b; % по сути тоже через QR факторизацию
normApseudoDir = norm( A*ApseudoDir*b - b)
```

```
normApseudoDir = 13.6368
```

```
normApseudoQR = norm( A*ApseudoQR*b - b)
```

```
normApseudoQR = 3.2192e-15
```

```
normApseudoSVD = norm( A*ApseudoSVD*b - b)
```

```
normApseudoSVD = 6.8270e-16
```

```
normmlDivide = norm(b - A*bmldivide)
```

```
normmlDivide = 2.8305e-15
```

Примеры линейной оптимизации когда столбцы матрицы A линейно независимы

Полиномиальная аппркосимация и линейная оптимизация и линейная оптимизация линейно независимыми функциями произвольного базиса

Полиномиальный фиттинг - частный случай линейной оптимизации, для базиса полиномиальных функций столбцы матрица A линейно независимы (насоклько это возможно).

Пусть $\vec{t} = \begin{matrix} t_1 \\ \vdots \\ t_N \end{matrix}$ - вектор независиммых переменных, полиномиальная функция имеет вид:

$$\vec{y}(\vec{t}) = a_1 \vec{t}^{\,0} + \vec{t}^{\,1} + ... + \vec{t}^{\,P-1} = [\begin{matrix} 1 & \dots & t_1^{i-1} & \dots & t_1^{P-1} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & t_j^{i-1} & \dots & t_j^{P-1} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ t_j^{i-1} & \dots & t_j^{P-1} & \dots & t_N^{P-1} \end{matrix}][\begin{matrix} a_1 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \\ a_P \end{matrix}] = V\vec{a}$$

V - матрица Вандермонда - матрица размером [NxP] (вместо A ранее), $\vec{a}$ - вектор параметров линейной оптимизации (вместо $\vec{x}$ ранее).

Если число измеренных точек (N) больше числа коэффициентов полинома, то, данная переопределенная система имеет решение в форме псевдообратной матрицы $\vec{a}$.

В общем случае линейная оптимизация по некоторому базису может быть записана как:

$$\vec{y}(\vec{t}) = V\vec{a} = [\vec{\phi}(\vec{t}, 1), \quad \dots \quad \vec{\phi}(\vec{t}, i), \quad \dots \quad \vec{\phi}(\vec{t}, m)]\vec{a}$$

$\vec{\phi}(\vec{t}, i)$ - базисная функция, производит вектор-столбец из вектора независимых переменных $\vec{t}$ и номера столбца

Например для стандартного полиномиального базиса:

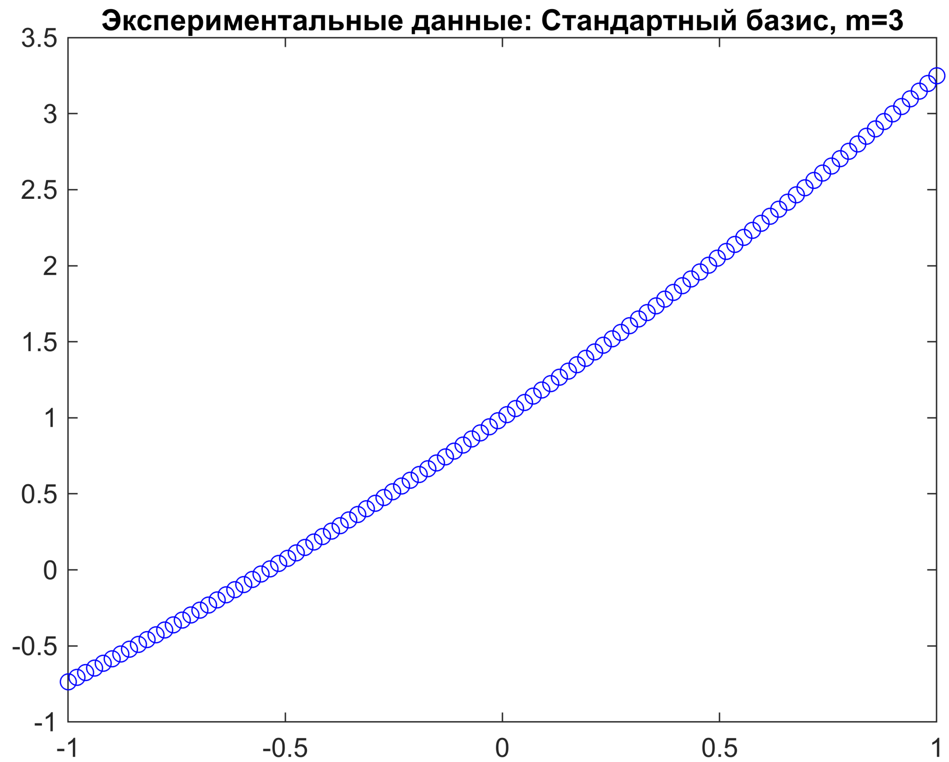
$$\vec{\phi}_{standard}(\vec{t}, i) = \vec{t}^{\,i-1}$$

А, например, для тригонометрического базиса:

$$\vec{\phi}_{trig}(\vec{t}, i) = \begin{cases} cos(i\pi \vec{t}) & для \quad четных \quad i \\ sin(i\pi \vec{t}) & для \quad нечетных \quad i \end{cases}$$

Модель экспериментальных данных

```
clearvars
% параметры экспериментальных данных
N=100; % число точек измерения
t = transpose(linspace(-1,1,N)); % независисмые переменные
type_experiment = "stand"; % тип реальнйо функции
P = 3; % степень полинома
a1=1;
a2=1.992;
a3=0.256;
a4=0.0218;
a5=-0.55829;
e = 0; % амплитуда шумов
a_real = [a1;a2;a3;a4;a5];
% заполняем массив "экспериментальных" данных
y = 0;
Pfun = producing_function(type_experiment,t);
for ii = 1:P
    y = y + a_real(ii)*Pfun(ii);
end
y = y + e*mean(y)*randn(size(y))/100;
ax = get_next_ax();
plot(ax,t,y,"ob");
title(ax,"Экспериментальные данные: "+ rus(type_experiment) + ", m=" + P)
```



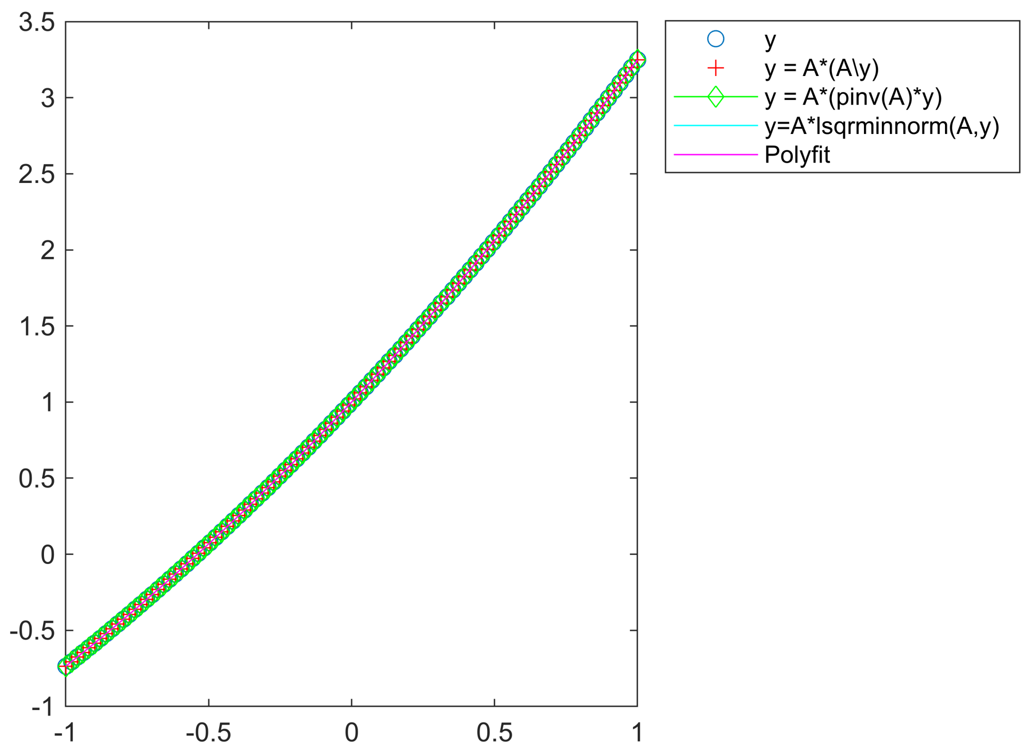
Модель для фиттинга:

```
% параметры полинома которым фитим
type_fit = "stand"; % тип базиса для фитинга
Pfit = 3 ;% степень полинома для фитинга
V = vandermatrix(t,Pfit,type_fit); % формируем матрицу Вандермонда
tb = table();
tb.a_real = a_real(1:Pfit);
tb.a_fitted_qr = V\y; % решается методом qr факторизации

tb.a_fitted_pinv= pinv(V)*y;% решает путем SVD разложения матрицы
tb.a_lsqr = lsqminnorm(V,y) ; % минимизирует норму x (поэтому подходит для матриц A
близких к сингулярным

a_polyfit = transpose(polyfit(t,y,Pfit-1)); % про polyfit дальше подробнее, но она
решает задачу методом QR факторизации
tb.a_polyfit = a_polyfit(end:-1:1);
tb
```

tb = 3×5 table

	a_real	a_fitted_qr	a_fitted_pinv	a_lsqr	a_polyfit
1	1	1.0000	1.0000	1.0000	1
2	1.9920	1.9920	1.9920	1.9920	1.9920
3	0.2560	0.2560	0.2560	0.2560	0.2560

```
ax = get_named_ax("Сравнение различных способов решения задачи линейной
оптимизации");
plot(ax,t,y,"o")
hold(ax,"on");
    plot(t,V*tb.a_fitted_qr,'+r')
    plot(t,V*tb.a_fitted_pinv,'g',"Marker","diamond")
    plot(t,V*tb.a_lsqr,'c')
    plot(t,polyval(a_polyfit,t),'m')
hold(ax,"off")
legend(ax,["y" "y = A*(A\\y)" "y = A*(pinv(A)*y)" "y=A*lsqrminnorm(A,y)"
"Polyfit"],Location="bestoutside")
```



Сравнение скорости решения:

```
tm = table();
tm.t_fitted_qr = timeit(@()V\y,1); % решается методом qr факторизации
tm.t_fitted_pinv= timeit(@()pinv(V)*y,1); % решается через СВД разложение
tm.t_lsqr = timeit(@()lsqminnorm(V,y),1) ; % решается минимизацийе нормы
стадартного отклонения итерационным способом
tm.t_polyfit = timeit(@()polyfit(t,y,Pfit-1),1);
tm
```

tm = 1×4 table

	t_fitted_qr	t_fitted_pinv	t_lsqr	t_polyfit
1	9.1544e-05	1.2326e-04	9.4656e-05	1.5246e-04

Отличие полиномов Лежандра от стандартного базиса

Полиномы Лежандра - ортогональны (в терминах функционального анализа)

$$\int_{-1}^{+1} P_n(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 1 & для \quad m = n \\ 0 & для \quad m \neq n \end{cases}$$

Первые несколько полиномов: [Abramowitz and Stegun, "Handbook of Mathematical functions", Table 22.9.]

P0(x) = 1

P1(x) = x

P2(x) = 3/2*x.^2 - 1/2

P3(x) = 5/2*x.^3 - 3/2*x

P4(x) = 4.375*x.^4 - 3.75*x.^2 + 3/8

P5(x) = 7.875*x.^5 - 8.75*x.^3 + 1.875*x

```
clearvars
% Проверим ортогоняльность полиномов Лежандра
P0 = @(x) ones(size(x))*sqrt(1/2);
P1 = @(x) x*sqrt(3/2);
P2 = @(x) (3/2*x.^2 - 1/2)*sqrt(5/2);
P3 = @(x) (5/2*x.^3 - 3/2*x)*sqrt(7/2);
P4 = @(x) (3/8 - 3.75*x.^2 + 4.375*x.^4)*sqrt(9/2);
P5 = @(x) (1.875*x - 8.75*x.^3 + 7.875*x.^5)*sqrt(11/2);
% численное интегрирование:
integral(@(x) P1(x).*P4(x),-1,1)
```

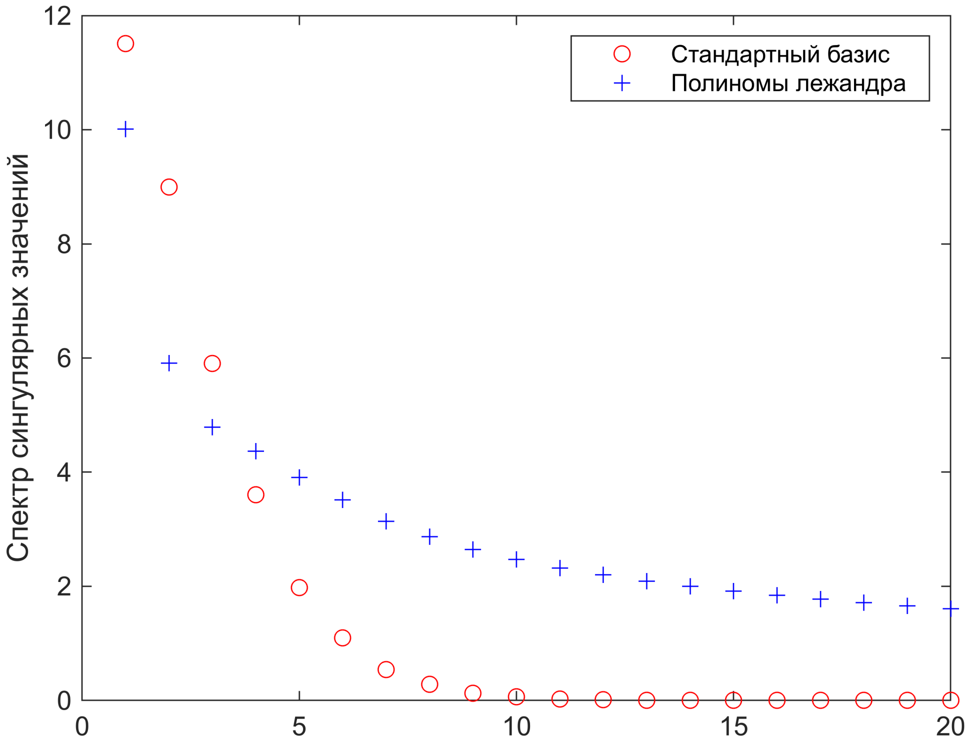
```
ans = 8.3267e-17
```

Отличие различных полиномиальных базисов с точки зрения линейной алгебры можно посмотреть по тому насколько матрица Вандермонда каждого из базисов близка к сингулярной

Для этого у нас есть SVD - разложение

```
clearvars
N=100; % число точек измерения
t = transpose(linspace(-1,1,N)); % независисмые переменные
polynomial_degree = 20;
type1 = "stand" ; % тип реальнйо функции
type2 = "legP" ;% тип реальнйо функции
V_type1 = vandermatrix(t,polynomial_degree,type1); % формируем матрицу Вандермонда
V_type2 = vandermatrix(t,polynomial_degree,type2);
```

```
S_type1 = svds(V_type1,polynomial_degree); % хотим посмотреть SVD спектр матрицы Вандермонда
S_type2 = svds(V_type2,polynomial_degree);
N = 1:polynomial_degree;
ax = get_next_ax();
plot(ax,N,S_type1,"or",N,S_type2,"+b");legend(ax,[rus(type1), rus(type2)])
ylabel("Спектр сингулярных значений")
```



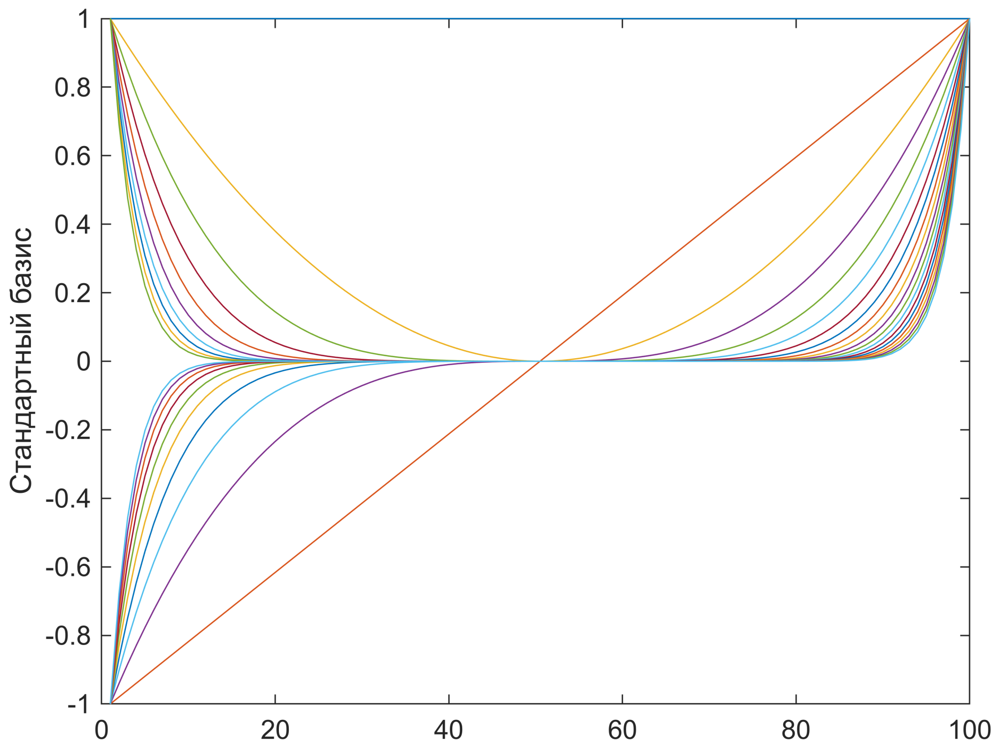

```
type1_rank = rank(V_type1)
```

```
type1_rank = 20
```

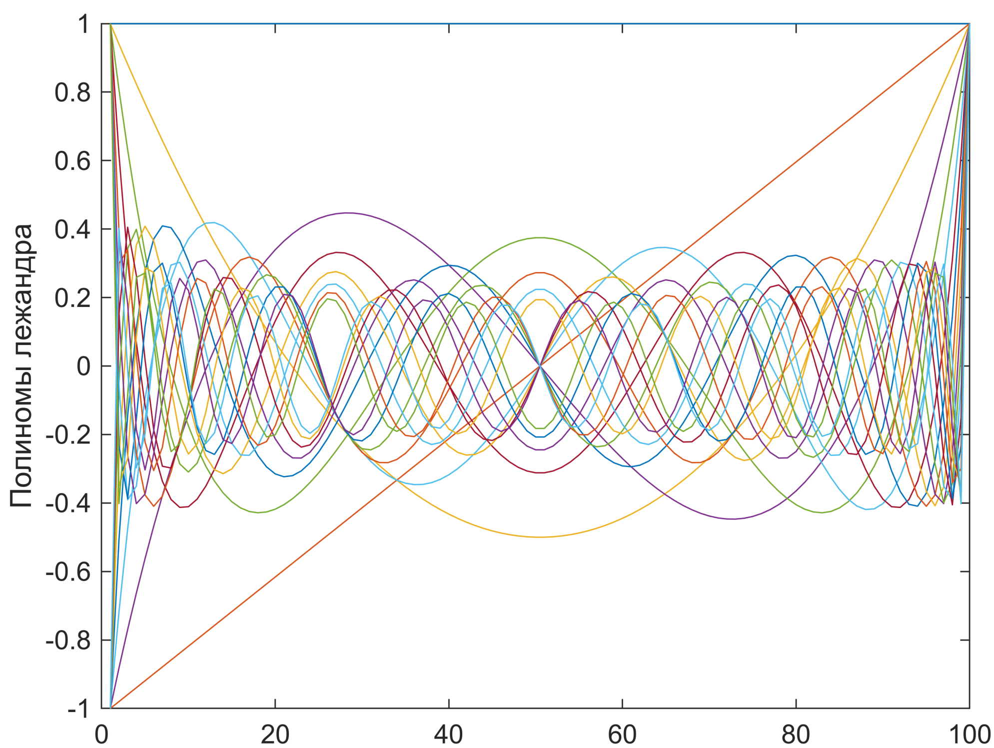
```
type2_rank = rank(V_type2) % значит все колонки независимы!
```

```
type2_rank = 20
```

```
plot(get_named_ax(rus(type1)),V_type1); ylabel(rus(type1))
```




```
plot(get_named_ax(rus(type2)),V_type2);ylabel(rus(type2))
```



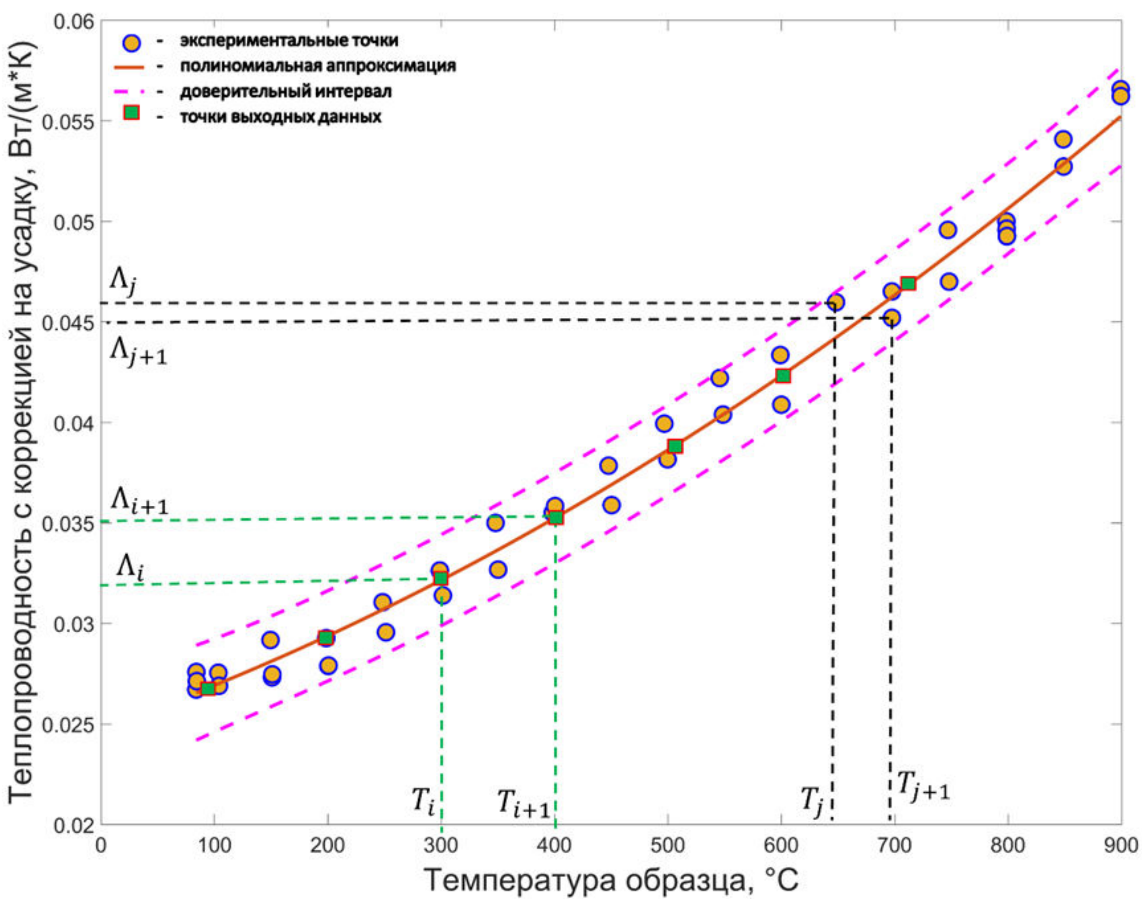
В общем, основной вывод тут, что стандартный базис достаточно быстро становится сингулярным

Оценка погрешности полиномиальной аппроксимации

Обычно полиномиальная аппроксимация может использоваться для следующих вещей:

1. Получить вектор параметров (например, может быть нужна полка для линейной аппроксимации, скорость линейного роста чего-то от времени или ускорение). При этом важно знать не только сам вектор параметров, но и вариацию коэффициентов для каждой из координат этого вектора

2. Полиномиальная аппркосимация может быть использована для получения некоторой гладкой кривой, которая затем используется для получения значений в некоторых заданных точках. При этом важны не только сами значения в этих точках, но и погрешность. Это что-то вроде задачи интерполяции, но интерполяция - это точная кусочная апросимация, поэтому из нее невозможно получить оценку погрешности. Для примера рисунок ниже - данные по температурной зависимости теплопроводности, поулчаемые с установки квазистационарного теплового режима:



У нас есть некоторый разброс точек, которые в целом ложаться на одну кривую, но эти точки имеют нерегулярное расположение по обеим осям. Хочется получить результат на регулярное сетке, а также оценить погрешность этих данных.

Математика для оценки погрешности.

Вектор невязки:

$$\vec{e} = \vec{b} - AA^{\dagger}\vec{b} = [I - AA^{\dagger}]\vec{b}$$

($[I - AA^{\dagger}]$ - оператор построения вектора, ортогонального векторному пространству столбцов матрицы A)

Качество аппроксимаци, тут применяется R- параметр:

$$R = 1 - (\frac{||\vec{e}||}{||\vec{b} - <\vec{b}>||})^2$$

Напомню определение :

$Var(\psi) = \mathbb{E}[((\psi - \mathbb{E}(\psi))^2]$ - вариация,

$Cov(\psi, \phi) = \mathbb{E}[(\psi - \mathbb{E}(\psi))(\phi - \mathbb{E}(\phi))]$ - ковариация двух случайных скалярных величин, $\mathbb{E}$ - математическое ожидание

Для векторной величины, матрица ковариации:

Диагональные элементы матрицы C_{nn}- коэффициенты вариации ($n = 1...N$), для n - го свойства :

$$C_{nn} = \frac{\sum_{i=1}^{M}(x_{ni} - \mu_n)^2}{M - 1}$$

Если из диагональных элементов извлечь корень и поделить на количество экспериментов L, то получим стандартное отклонение среднего арифметического.

Элементы матрицы C, стоящие вне диагонали, - коэффициенты ковариации n - го и m - го свойств:

$$C_{nk} = \frac{\sum_{i=1}^{M}[(x_{ni} - \mu_n)(x_{ki} - \mu_k)]}{M - 1} \; (n, k = 1...N, n \neq k)$$

Матрица ковариации вектора параметров $\vec{a}$:

$$Cov(\vec{a}) = (A^T A)^{-1}\sigma$$

$$\sigma = ||\vec{e}||^2 = \vec{e}^T\vec{e}/(n - m) = (\vec{b} - AA^{\dagger}\vec{b})^T(\vec{b} - AA^{\dagger}\vec{b})/(n - m)$$

(интересно, что

$\vec{e}^T\vec{e} = \vec{b}^T(I - AA^{\dagger})^T(I - AA^{\dagger})\vec{b} = \vec{b}^T[I - A^{\dagger^T}A^T - AA^{\dagger} + A^{\dagger^T}A^TAA^{\dagger}]\vec{b} = \vec{b}^T[I - AA^{\dagger}]\vec{b} = \vec{b}^T\vec{e}$ - скалярное произведение вектора $\vec{b}$ на вектор $\vec{e}$, что логично, так как $\vec{b} = \vec{p} + \vec{e}$, но при этом $\vec{p}$ ортогонален вектору $\vec{e}$)

n - число точек, m - число коэффициентов полинома, $n-m$ - число степеней свободы, это размерность нуль-пространства матрицы A^T - пространства ошибки!

Если $A=QR$ - qr - разложение матрицы, то

$$Cov(\overrightarrow{a})=(A^TA)^{-1}\sigma=(R^TQ^TQR)^{-1}\sigma=(R^TR)^{-1}\sigma$$

A_{interp} - новая матрица, построенная на другой сетке, для которой нам надо оценить доверительный интервал

$\overrightarrow{b}_{interp}=A_{interp}A^{\dagger}\overrightarrow{b}=A_{interp}\overrightarrow{a}$ ($\overrightarrow{a}$ - вектор коэффициентов полинома, который определен при решении задачи линейной оптимизации на сетке экспериментальных данных)

$Cov(\overrightarrow{b}_{interp})=A_{interp}Cov(\overrightarrow{a})A^T_{interp}$ - матрица ковариации рассчитанных через нашу аппроксимацию значений на нужной нам сетке координат (эта формула следует из общего правила расчета ковариации случаной величины, являющейся линейной комбинацией)

Диагональные элементы этой матрицы - коэффициенты вариации (квадратичные отклонения для рассчитанных значений).

$$\overrightarrow{b}_{interp}\pm St\cdot\sqrt{diag[Cov(\overrightarrow{b}_{interp})]}$$

St - коэффициент Стьюдента для числа испытаний N

```
% пытаемся тоже самое посчитать вручную
A=rand(10,3);

diag(inv(A'*A))
```

```
ans = 3×1
    1.2633
    0.6669
    1.4895
```

```

[Q,R]=qr(A,0);
sum(inv(R).^2,2)
```

```
ans = 3×1
    1.2633
    0.6669
    1.4895
```

Приведенные выше формулы являюстя универсальными, дальше рассмотрим их применение в матлаб на примере встроенной функции для полиномиальной аппроксимации polyfit - polyval-polyconf

Полиномиальный фиттинг в матлаб:

```
% блок генерации исходных данных скопирован с того, что было раньше
clearvars
% параметры экспериментальных данных
N=100; % число точек измерения
t = transpose(linspace(-1,1,N)); % независисмые переменные
type_experiment = "legP"; % тип реальнйо функции
P = 3; % степень полинома
a1=1;
a2=1.992;
a3=0.256;
a4=0.0218;
a5=-0.55829;
e = 12.91; % амплитуда шумов
a_real = [a1;a2;a3;a4;a5];
% заполняем массив "экспериментальных" данных
y = 0;
Pfun = producing_function(type_experiment,t);
for ii = 1:P
    y = y + a_real(ii)*Pfun(ii);
end
y = y + e*mean(y)*randn(size(y))/100;
ax = get_next_ax();
plot(ax,t,y,"ob");
title(ax,"Экспериментальные данные: "+ rus(type_experiment) + ", m=" + P)
```

Для фитинга полиномами стандартного базиса используется функция polyfit

[p,STD]= polyfit(t,y,P) - функция для решения задачи фитинга полиномами стандартного базиса

Входные ургументы:

x,y - экспериментальные точки

P - степень полинома (начиная с нуля)

Выходные аргументы:

p - вектор коэффициентов в порядке убывания степени полинома (не так как в самодельно версии)

STD - структура, которая хранит в себе данные а качестве аппроксимации и данные для расчета погрешности аппроксимации)

[y_int,delta_y]= polyval(x,p,STD) - функция для решения задачи фитинга полиномами стандартного базиса

входные аргументы

x - точки, в которых нужна интерполяция

p - коэффициенты полинома

STD - структура, возвращаемая polyfit (см. предыдущие обозначения)

выходные аргументы

y_int - рещультаты расчета полинома в точках x

delta_y - стандартное отклонение от среденего (чтобы учесть вероятность надо домножить на коэффцииент стьюдента)

Также есть вариант, который сразу расчитывает доверительный интервал под заданную вероятность

[yfitExtended,deltaExtended] = polyconf(pp,t,STD,'alpha',0.05); % позволяет сразу посчитать доверительный интервал, среди входных аргуметов alpha - 1 - p, где p - доверительная вероятность.

```
[pp,STD] = polyfit(t,y,P) % функция для фиттинга стандартным базисом полиномов
```

```
pp = 1×4
    0.1840    0.3306    1.9045    0.8813
STD = struct with fields:
           R: [4×4 double]
          df: 96
       normr: 1.1510
    rsquared: 0.9906
```

```
V = vandermatrix(t,P+1,"stand") % считаем Вандерматрицу по самодельному способу
```

```
V = 100×4
    1.0000   -1.0000    1.0000   -1.0000
    1.0000   -0.9798    0.9600   -0.9406
    1.0000   -0.9596    0.9208   -0.8836
    1.0000   -0.9394    0.8825   -0.8290
    1.0000   -0.9192    0.8449   -0.7766
```

```
    1.0000   -0.8990    0.8082   -0.7265
    1.0000   -0.8788    0.7723   -0.6787
    1.0000   -0.8586    0.7372   -0.6329
    1.0000   -0.8384    0.7029   -0.5893
    1.0000   -0.8182    0.6694   -0.5477
      ⋮
```

```
[Q,R] = qr(V,0) % делаем ее qr факторизацию
```

```
Q = 100×4
   -0.1000   -0.1715   -0.2170   -0.2492
   -0.1000   -0.1680   -0.2038   -0.2190
   -0.1000   -0.1646   -0.1910   -0.1903
   -0.1000   -0.1611   -0.1783   -0.1632
   -0.1000   -0.1576   -0.1660   -0.1375
   -0.1000   -0.1542   -0.1539   -0.1132
   -0.1000   -0.1507   -0.1421   -0.0904
   -0.1000   -0.1472   -0.1306   -0.0690
   -0.1000   -0.1438   -0.1193   -0.0489
   -0.1000   -0.1403   -0.1083   -0.0302
      ⋮

R = 4×4
  -10.0000   -0.0000   -3.4007         0
         0    5.8315    0.0000    3.5691
         0         0   -3.0412   -0.0000
         0         0         0    1.5570
```

```
STD_R = STD.R % содержит матрицу R для расчета матрицы ковариации
```

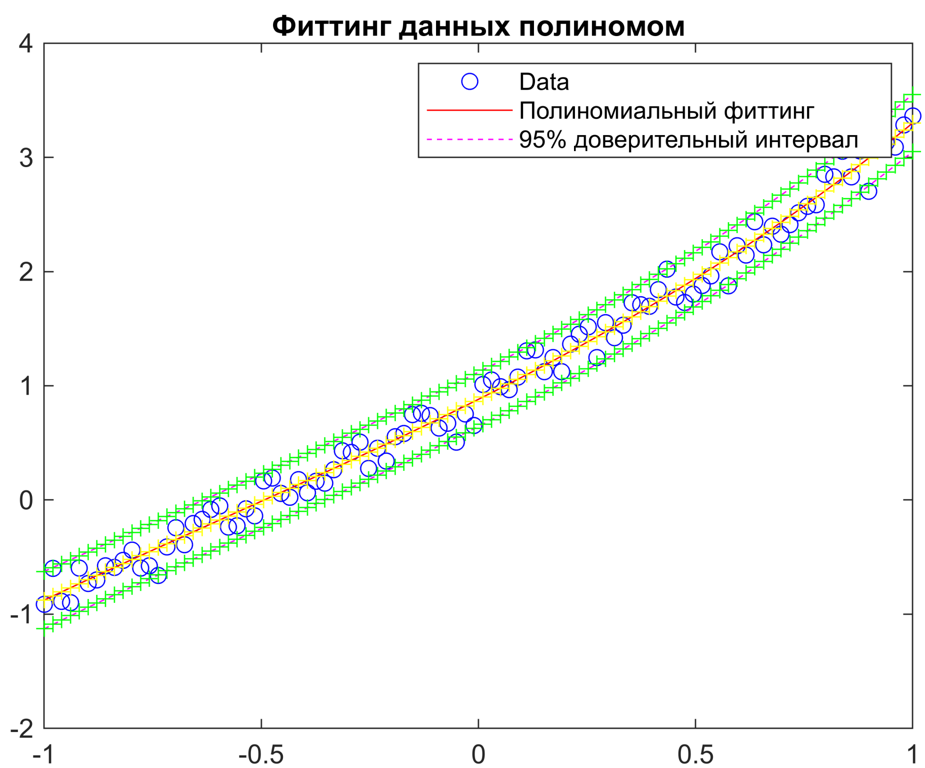
```
STD_R = 4×4
   -0.0000   -3.4007    0.0000  -10.0000
    3.5691    0.0000    5.8315         0
    0.0000   -3.0412         0         0
    1.5570         0         0         0
```

```
[y_fit,delta] = polyval(pp,t,STD) % если в качестве дополнительного аргумента передать в функцию polyval структуру STD, то она вернет коэффициенты вариации дял каждой точки
```

```
y_fit = 100×1
   -0.8766
   -0.8405
   -0.8044
   -0.7686
   -0.7329
   -0.6974
   -0.6619
   -0.6267
   -0.5915
   -0.5564
      ⋮

delta = 100×1
    0.1259
    0.1247
    0.1237
    0.1229
    0.1222
    0.1215
    0.1210
```

```
0.1206
0.1202
0.1199
  ⋮
```

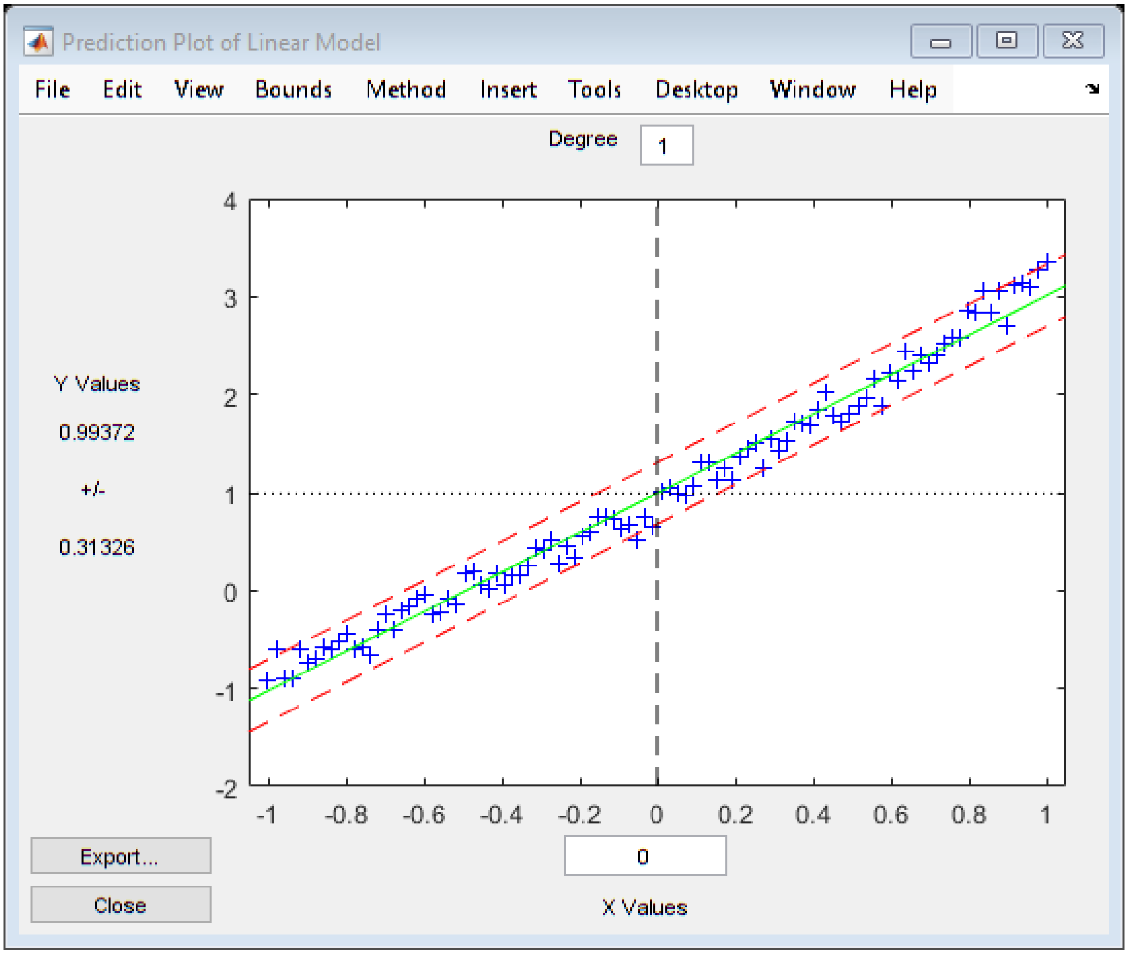
```
[yfitExtended,deltaExtended] = polyconf(pp,t,STD,'alpha',0.05); % позволяет сразу
посчитать доверительный интервал
ax = get_next_ax();
plot(ax,t,y,'bo')
hold(ax, "on")
plot(ax,t,y_fit,'r-')
plot(ax,t,y_fit+2*delta,'m--',t,y_fit-2*delta,'m--')

plot(ax,t,yfitExtended,'+y')
plot(ax,t,yfitExtended+deltaExtended,'g+',t,y_fit-deltaExtended,'g+')
title('Фиттинг данных полиномом')
legend('Data','Полиномиальный фиттинг','95% доверительный интервал')
hold(ax, "off")
```




```
mean(deltaExtended./delta)
```

```
ans = 1.9850
```

```
polytool(t,y) % встроенная графиечская обертка для полиномиального фитинга
```



Выводы по семинару 7

1. Задача оптимизации - найти параметры, при которых модель минимизирует расхождения между ее предсказаниями и результатами измерений. Модель зависит как от переменных оптимизации, так и от независимых переменных (предикторов)
2. Линейная оптимизация (регрессия) - случай, когда модель зависит от параметров линейно, то есть ее можно представит в виде $A\vec{a}$, где $\vec{a}$ - вектор параметров, а A - матрица, зависящая только от независимых переменных.
3. Примеры линейной оптимизации: полиномиальный фитинг, матрица A - матрица Вандермонда, которая, например, для стандартного базиса имеет вид: $V = [\vec{t}^{\,0}, ..., \vec{t}^{\,i}, ..., \vec{t}^{\,P}]$, где $\vec{t}$ - вектор независимых переменных (верхний индекс - возведение в степень каждого элемента вектора).
4. Если минимизируется квадрат модуля отклонения модели от наблюдаемых данных, то это задача наименьших квадратов
5. С точки зрения линейной алгебры, задача наименьших квадратов состоит в том, чтобы найти такой линейный оператор $A^{\dagger}$, который при его действии на некоторый произвольный вектор $\vec{b}$ переводит его в пространство строк матрицы A, если вектор $\vec{b}$ принадлежит пространству

столбцов матрицы A и в нулевой вектор, если он принадлежит пространству ортогональному пространству столбцов матрицы A (нуль-пространство столбцов матрицы A^T).

6. Таким образом, оператор $AA^{\dagger}$ является оператором проецирования произвольного вектора на векторное пространство столбцов матрицы, при его действии вектор $\vec{b}$ он переводит его в вектор $\vec{p}$, принадлежащий пространству столбцов матрицы A, а вектор $\vec{e} = \vec{b} - \vec{p}$ - является ошибкой аппроксимации.
7. Для полиномиальной аппроксимации, при увеличении степени полинома матрица V становится близкой к сингулярной (что видно из спектра ее сингулярных значений), если требуется большой порядок полинома, ортогональные полиномы Лежандра являются предпочтительными
8. Для полиномиально аппроксимации стандартным базисом можно пользоваться функцией

[pp,STD] = polyfit(t,b,P-1) - a - вектор коэффициентов полинома, t - координаты, b - вектор данных для фитинга, P - количество полиномиальных коэффициентов, STD- структура, хранящая данные нужные для оценки погрешности, a - вектор коэффициентов полинома в порядке убывания степени

[y,delta] = polyval(pp,t_new,STD) - функция для расчета полинома, y - результат расчета, delta - ошибка аппроксимации (y ± delta это примерно 68%-ный доверительный интервал, y ± 2delta) - 95% ный.)

[y,delta] = polyconf(pp,t_new,STD,'alpha',ALPHA) - функция для расчета полинома, y - результат расчета, delta - ошибка аппроксимации для заданной доверительной вероятности, ALPHA = 0.05 соотвествует доверительной вероятности 95%.

ЛИТЕРАТУРА

1. N.Draper, H.Smith . Applied regression analysis. Third edition. Wiley Series in Probability and Statistics.

2. Gilbert Strang - Introduction to Linear Algebra (2016, Wellesley-Cambridge Press)

3. John D'Errico (2025). Optimization Tips and Tricks (https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/8553-optimization-tips-and-tricks), MATLAB Central File Exchange. Retrieved January 30, 2025.

Функции

```
function rus_name = rus(type)
    possible_types =  ["stand" "legA" "trig" "legP" "custom"];
    possible_rus_names = ["Стандартный базис" "Присоединенные полиномы Лежандра"
"Тригонометрический базис" "Полиномы лежандра" "Кастомный"];
    flag = possible_types==type;
    if any(flag)
        rus_name = possible_rus_names(flag);
    else
        rus_name = type;
    end
```

```
end
function [V,s] = vandermatrix(t,P,type,polyprod_function)
arguments
    t double
    P (1,1) double {mustBeInteger,mustBePositive} = 2
    type (1,1) string {mustBeMember(type,["stand" "legA" "trig" "legP" "custom"])}
= "stand"
    polyprod_function =[]
end
% создаем матрицу Вандермонда
% type - тип полинома (стандартный базис, полиномы лежандра,
% тригонометрические полиномы)
    t = t(:);
    N = numel(t);
    V = zeros(N,P);
    if ~(type=="custom")
        [Pfun,s] = producing_function(type,t); % возвращаем производящую функцию
для колонки матрицы вандермонда
    else
        assert(~isempty(polyprod_function)||
~isa(polyprod_function,"function_handle"),"Если выбрана кастомная производящая
функция, то нужно ее предоставить")
        s = normalize(t);
        Pfun = @(i)polyprod_function(i,s.x);
    end
    for jj = P:-1:1
        V(:,jj) = Pfun(jj);
    end
end
function dist= make_dist(type,varargin)
    mu=0;sig2=1;
    if numel(varargin)>0
        mu=varargin{1};
        if numel(varargin)>1
            sig2 = varargin{2}.^2;
        end
    end
    switch type
        case "Normal"
            dist = @(N) mu + sig2*randn([N 1]);
        case "Uniform"
            dist  = @(N)   sqrt(sig2)*(rand([N 1])  -0.5)+ mu;
        case "Weibull"
            dist  = @(N) wblrnd(mu,sqrt(sig2),N,1);
    end

end
function norm_struct = normalize2(t)
% функция возвращает стурктуру, в которой хранятся данные для нормировки
    if ~issorted(t)
```

```
        t = sort(t,"ascend");
    end
    tmin = t(1);
    tmax = t(end);
    x = 2.0*((t - tmin) / (tmax - tmin))- 1;
    norm_struct = struct("tmin",tmin,"tmax",tmax,"x",x); %t,(max(t) - min(t))
end
function t = denormalize2(s)
    t = 0.5*(s.x + 1.0)*(s.tmax - s.tmin) + s.tmin;
end
function Pn = leg_polyA(i,t) % производящая функция для присоединенных полиномов
Лежандра
    persistent P
    persistent tleg
    leg_type = 'norm';
    if isempty(tleg)||isempty(P)||(~isequal(t,tleg))
        P = transpose(legendre(i-1,t,leg_type)); % встроенная функция по сути
возвращает уже матрицу Вандермонда
        tleg = t;
    end
    if i<=size(P,2)
        Pn = P(:,i);
        return
    end
    P = transpose(legendre(i,t,leg_type));
    tleg = t;
    Pn = P(:,end);
end
function Pn = trig_poly(i,t) % производящая функция для тригонометрических полиномов
    if i==1
        Pn  = ones(size(t));
        return
    end
    if mod(i,2)==0
        Pn = cos(i*t*pi);
    else
        Pn = sin(i*t*pi);
    end
end
function [P,s] = producing_function(type,t)
% функция возвращает производящую функцию для полинома
    s = normalize2(t);
    switch type
        case "stand" % стандартный базис полинома
          P = @(i) s.x.^(i-1);
        case "legA" % присоединенные полиномы Лежандра
          P = @(i) leg_polyA(i,s.x);
        case "legP" % полиномы Лежандра
          P = @(i) legendreP(i-1,s.x) ; % стандартная фукнция для полиномов лежандра
        case "trig" % тригонометрический базис
```

```
            P = @(i) trig_poly(i,s.x);

    end

end
function [new_ax,fig_handle] = get_next_ax(index, axes_name_value_pairs)
% функция, которая возвращает новые оси на новой фигуре (нужна чтобы
% кратинки в ливскрипте нормально строились)
    arguments
        index = []
        axes_name_value_pairs cell = {}
    end
    persistent N;
    if isempty(index)
        if isempty(N)
            N=1;
        else
            N  = N+1;
        end
        fig_handle = figure(N);
        clf(fig_handle);
        new_ax = axes(fig_handle,axes_name_value_pairs{:});
        %disp("fig"+ N)
    else
        fig_handle = figure(index);
        clf(fig_handle);
        new_ax = axes(fig_handle,axes_name_value_pairs{:});
    end
end
function ax = get_named_ax(title_string)
    ax = get_next_ax();
    title(title_string);
end
function ax = draw_vector(ax,ttl,names,type,varargin)
% функция строит двух- и трех-мерные вектора, а также рассеянные данные из
% матрицы
% ax - оси (если пустые, то создаются новые)
% ttl - заголовок картинки
% names - имена векторов
% type:
%       "vector" - аргументы, которые передаются после интерпретируются
%                       как отдельные вектора
%       "point"  - в этом случае передается матрица в качестве аргумента и
%       столбцы матрицы строятся при помощи функций scatter и scatter3 d
%       в зависимости от размерности массива
    arguments
        ax =[]
        ttl string =strings(0,1)
        names string =strings(0,1)
        type string {mustBeMember(type,["vector" "point"])}="vector"
```

```
    end
    arguments (Repeating)
        varargin double
    end
    was_empty = isempty(ax); % это признак того, что все строится на новых осях
    if was_empty
        ax = get_next_ax();
    else
        hold(ax,"on");
        % if ~isempty(ax.Legend)
        %     leg_before = ax.Legend.String;
        % else
        %     leg_before = strings(0,1);
        % end
    end

    if strcmp(type,"vector")
        is_3D = numel(varargin{1})==3;
            if is_3D
                [x,y,z]  = make_xy(varargin{1});
                plot3(ax,x,y,z,'LineWidth',2,'Marker','o');
                hold on
                for iii = 2:numel(varargin)
                        [x,y,z] = make_xy(varargin{iii});
                        plot3(ax,x,y,z,'LineWidth',2,'Marker','o');
                end
                grid on
                hold off
            else
                [x,y]  = make_xy(varargin{1});
                plot(ax,x,y,'LineWidth',2,'Marker','o');
                hold on
                for iii = 2:numel(varargin)
                        [x,y]  = make_xy(varargin{iii});
                        plot(ax,x,y,'LineWidth',2,'Marker','o');
                end
                grid on
                hold off
            end
            if isempty(names)||(numel(names)~=numel(varargin))
                legend(ax,string(1:numel(varargin)));

            else
                % if ~was_empty
                %      names= [names(:);leg_before(:)];
                % end
                legend(ax,names);
            end
            xlim(ax,[-1 1]);
            ylim(ax,[-1 1]);
```

```
            if ~isempty(ttl)
                title(ax,ttl);
            end
    else
        %data_number = numel(varargin); % число массивов данных
        is_3D = numel(varargin)==3;
        data = varargin{1};
        if size(data,2)>1
            data = transpose(data);
            is_transpose = true;
        else
            is_transpose = false;
        end
        if ~is_transpose
            for iii = 2:numel(varargin)
                data = [data,varargin{iii}];
            end
        else
            for iii = 2:numel(varargin)
                data = [data,transpose(varargin{iii})];
            end
        end

        if is_3D
            scatter3(ax,data(:,1),data(:,2),data(:,3));
        else
            scatter(ax,data(:,1),data(:,2));
        end

    end
    if ~was_empty
            hold(ax,"off");
    end
end
function [x,y,z]  = make_xy(col)
% добавляет к координатам вектора нули так, чтобы при помощи функции plot
% строилась линия
    switch numel(col)
        case 1
            x = [col(1)];
            y = 0;
            z = 0;
        case 2
            x = [0 col(1)];
            y = [0 col(2)];
            z = zeros(1,2);
        case 3
            x = [0 col(1)];
            y = [0 col(2)];
            z = [0 col(3)];
```

```
    end
end
% function [bpar,bper,ang,P] = projection_matrix(A,b)
% % функция считает угол между вектором и пространством столбцов матрицы A
%     for ii =1:size(A,2)
%         A(:,ii) = A(:,ii)/norm(A(:,ii));
%     end
%     beta = A*transpose(A)*b;
%     beta = beta/norm(beta); % нормируем вектор beta
%     Pbeta = beta*transpose(beta); % оператор проектирования вектора на
%     bpar = Pbeta*b;
%     bper = b-bpar;
%     ang = rad2deg(acos(norm(bpar)/norm(b)));
% end
```