|  |  |
| --- | --- |
|  | **Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  **высшего образования**  **«Московский государственный технический университет**  **имени Н.Э. Баумана**  **(национальный исследовательский университет)»**  **(МГТУ им. Н.Э. Баумана)** |

ФАКУЛЬТЕТ «Фундаментальные науки»

КАФЕДРА «Вычислительная математика и математическая физика»

**РАСЧЕТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА**

***К НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ***

***НА ТЕМУ:***

***Применение стохастического метода Галёркина к анализу регрессионных моделей***

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Студент ФН11-72Б |  | М.Х. Хаписов |
|  | (Подпись, дата) | (И.О.Фамилия) |
| Руководитель |  | Т.В. Облакова |
|  | (Подпись, дата) | (И.О.Фамилия) |

Оценка:

*2023 г.*

# СОДЕРЖАНИЕ

[ОБОЗНАЧЕНИЯ](#_ОБОЗНАЧЕНИЯ) 3

[ВВЕДЕНИЕ](#_ВВЕДЕНИЕ) 4

[1 Теоретическая часть](#_1_Теоретическая_часть) 6

[1.1 Методы Монте-Карло](#_1.1_Методы_Монте-Карло) 6

[1.2 Полиномиальный хаос](#_Полиномиальный_хаос) 7

[1.3 Семейства ортогональных полиномов](#_1.3_Семейства_ортогональных) 11

[1.4 Полиномы Эрмита](#_1.4_Полиномы_Эрмита) 15

[1.5 Общая линейная регрессионная модель 1](#_1.5_Общая_линейная)6

[1.6 Линейная регрессионная модель полиномиального хаоса 1](#_1.6_Линейная_регрессионная)9

[1.7 Метод Галёркина](#_1.7_Метод_Галёркина) 20

[СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ) 22

ПРИЛОЖЕНИЕ А 23

# ОБОЗНАЧЕНИЯ

– вектор входных факторов

– модель

– выходные данные

– отклик модели

– ортонормированный полиномиальный базис

– коэффициенты разложения отклика модели по ортонормированному базису

– компоненты случайного вектора

– маргинальная плотность распределения компоненты

– семейство ортонормированных полиномов степени , определённое для каждой компоненты

– семейство ортонормированных многомерных полиномов, определённое для всего входного вектора

– усечение ряда

– разложение полиномиального хаоса

– базисные функции регрессионной модели

– базисные коэффициенты

– вектор откликов

– вектор базисных коэффициентов

– матрица базисных функций

– вектор ошибок

– вектор базисных функций разложения полиномиального хаоса

– оценка коэффициентов разложения полиномиального хаоса

– многочлен Эрмита степени

# ВВЕДЕНИЕ

Практика студентов МГТУ им. Н.Э. Баумана является обязательной частью основной образовательной программы высшего образования, одной из форм организации учебного процесса.

Практика – вид учебной работы, направленный на развитие практических навыков и умений, а также формирование компетенций обучающихся в процессе выполнения определенных видов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью.

Основными видами практики студентов Университета, обучающихся по основным образовательным программам высшего профессионального образования, являются:

- учебная;

- производственная;

- научно-исследовательская работа (НИР).

НИР состоит в освоении студентами средств и приемов выполнения научно-исследовательских работ, а также проведении собственно учебно-исследовательской работы.

Целями НИР являются:

- овладение фундаментальной научной базой своего направления подготовки, методологией научного творчества, современными информационными технологиями, подготовка к научно-исследовательской деятельности;

- подготовка материалов для выпускной квалификационной работы.

Задачами НИР являются:

- участие в научно-исследовательском процессе;

- исследование научной темы, выданной студенту;

- обзор источников для выпускной квалификационной работы;

- выполнение теоретической части выпускной квалификационной работы;

- и другое.

Расчётно-пояснительная записка к НИР в электронном виде (формат Word) после получения зачёта направляется студентом в электронный архив кафедры, адрес: archive-fn@mail.ru

# Теоретическая часть

## 1.1 Методы Монте-Карло

У методов Монте-Карло нет конкретного, общепринятого определения. В данной работе будем считать, что методы Монте-Карло – это группа численных методов решения математических задач при помощи моделирования случайных величин. Суть метода заключается в описании исследуемого процесса математической моделью с использованием генератора случайных чисел. Таким образом, для реализации метода необходимо сгенерировать случайную выборку, соответствующую закону распределения случайной величины, служащей нам входными данными, и оценить вероятность успеха

где – число успешных испытаний, а – общее число испытаний. [1]

Для использования метода Монте-Карло необходимо построить цифровую модель системы и смоделировать большую выборку реализаций, по которой и будет определяться эффективность работы системы. В случае же, когда многократное моделирование реализаций невозможно (например, в силу того, что моделирование системы требует большого количества ресурсов вычислительной машины, а также большого количества времени), прибегают ко всевозможным альтернативам, например, к аппроксимации стохастических динамических систем функциональными рядами. [2]

## Полиномиальный хаос

Часто решение задачи прогнозирования какой-либо системы сводится к работе с моделью, принимающей большое количество входных данных, таких как граничные и начальные условия, свойства исследуемого объекта и т.д. При этом точные значения этих данных, как правило, неизвестны, так как вычисляются эти данные с помощью зашумлённых измерений. Существуют, тем не менее, вероятностные подходы, в которых данные параметры модели рассматриваются как случайные величины, функцию распределения и моменты которых можно было бы вычислить. [3]

Одним из таких методов является метод полиномиального хаоса. Он заключается в представлении некоторой случайной величины как полиномиальной функции от других случайных величин. Этот метод очень удобен тем, что позволяет использовать случайные величины, распределённые по разным законам, и вычислять их моменты.

Рассмотрим, в качестве примера, численную модель , в которой входной вектор состоит из независимых случайных величин , а – случайный отклик модели (выходные данные). В предположении, что отклик имеет конечную дисперсию, он может быть записан, как

где образуют базис в вероятностном пространстве, а – коэффициенты разложения случайного отклика по этому базису.

Если функции являются полиномами от случайных величин, то ряд (1.2) называется разложением полиномиального хаоса. [3]

Для расчёта коэффициентов применяются разные методы, которые можно разделить на интрузивные и, соответственно, неинтрузивные. Разница состоит в том, что в неинтрузивных методах при расчёте коэффициентов используют только фундаментальную детерминированную модель, не изменяя её (в интрузивных, соответственно, наоборот). Самым распространённым представителем неинтрузивных методов служит метод Монте-Карло. Методы интрузивного типа обычно обладают высокой скоростью сходимости в среднем квадратичном, в то же время неинтрузивные методы обычно более наглядны. Рассматриваемый в этой работе метод Галёркина как раз и является интрузивным методом. [4]

Рассмотрим разложение полиномиального хаоса для случая, когда компоненты случайного вектора независимы и имеют конечные моменты любого порядка. Обозначим маргинальную плотность распределения этих компонент как . Тогда, поскольку компоненты случайного вектора независимы, получаем представление совместной плотности распределения в виде

Теперь для каждой компоненты определим соответствующее ей семейство ортонормированных полиномов , где – степень многочлена (примем ). При этом, по свойству ортонормированности

где – символ Кронекера

Теперь многомерные полиномы можно построить с помощью тензоризации одномерных полиномов

где – мульти-индекс.

Докажем ортонормированность полиномов

Таким образом, – ортонормированный базис. Теперь любой стохастический процесс можно разложить по базису , записав равенство Парсеваля для этого процесса [5]

Решая практические задачи, вычислять сумму бесконечного ряда, естественно, невозможно, поэтому приходится прибегать к усечению ряда. [6]

Зададим стандартную схему усечения ряда как

где

Множество состоит из многочленов, порядок которых не превосходит , поэтому мощность этого множества .

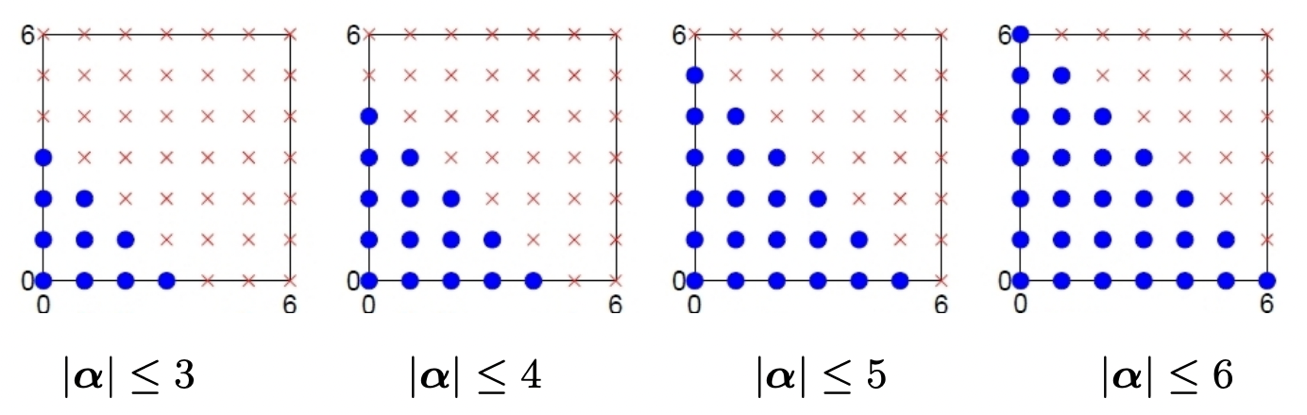


Рисунок 1.1 – Графическое представление степеней многочленов, которые (степени) принадлежат множеству при

С помощью такого усечения можно приближать разложение полиномиального хаоса, являющееся, вообще говоря, бесконечным рядом, конечными суммами, причём с любой точностью. Более того, при усечённое разложение сходится к полному в среднем квадратичном

где – полное разложение полиномиального хаоса

Одно из главных преимуществ метода полиномиального хаоса состоит в относительной простоте вычисления моментов

так как в силу ортонормированности полиномов

Теперь запишем выражение для второго момента

Раскроем квадрат и занесём математическое ожидание в сумму

В силу ортонормированности полиномов и . Подставим это в выражение (1.12)

Таким образом, получаем выражения для моментов

## 1.3 Семейства ортогональных полиномов

Для наиболее распространённых распределений уже известны их ортогональные многочлены.

Таблица 1 – Соответствие между распределениями непрерывных случайных  
 величин и семействами ортогональных полиномов

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Распре-деление** | **Плотность распределения** | **Ортог. полиномы** | **Ортонормированный базис** |
| Равно-мерное |  | Лежандра |  |
| Нор-мальное |  | Эрмита |  |
| Гамма |  | Лагерра |  |
| Бета |  | Якоби |  |

Если же случайная величина распределена по другому закону, можно представить её как функцию от некоторой другой случайной величины, ортогональные полиномы которой известны.

Представим, например, логнормальную случайную величину как функцию от нормально распределённой случайной величины с параметрами .

Поскольку – логнормальная случайная величина, её можно представить в виде , где .

Запишем полное разложение полиномиального хаоса для

Заметим теперь, что

И для получаем

Запишем выражение для в интегральном виде

где – ортонормированный многочлен Эрмита

Таким образом, мы получили интегральное выражение для

Докажем последнее равенство в (1.19) индуктивно. Заметим, что для , то есть утверждение (1.19) верно для этого случая.

Пусть теперь утверждение выполнено для некоторого , и проверим его истинность для . Для начала, выпишем определение многочлена Эрмита

Тогда запишется как

Проинтегрируем это выражение по частям

где – многочлен степени , и , так как – стремится к нулю гораздо быстрее, чем растёт

Подставив (1.22) в (1.21), получаем рекуррентное уравнение для

Так как утверждение (1.19) выполнено для , получаем выражение для

Подставив его в (1.23), получаем выражение для , которое мы и стремились доказать

Таким образом, утверждение (1.19) доказано.

Теперь, наконец, выпишем полное разложение полиномиального хаоса для

## 1.4 Полиномы Эрмита

Полиномы Эрмита – это семейство ортогональных многочленов вида (1.20), соответствующих нормальному распределению. Их удобно вычислять с помощью следующего рекуррентного соотношения

Так как  ортонормированное семейство полиномов Эрмита имеет вид . Зададим стандартную схему усечения и запишем для неё соответствующие ортонормированные многочлены Эрмита

Таблица 2 – Двумерные многочлены Эрмита порядка не выше 3

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | **Мульти-индекс** | **Элемент базиса** |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |

## 1.5 Общая линейная регрессионная модель

Рассмотрим двумерную выборку случайных переменных : , где – векторы неслучайных факторов (входных данных), – отклики модели, то есть выходные данные, измеренные с ошибкой .

Определим функцию регрессии на как условное математическое ожидание .

Приведём некоторые свойства функции регрессии.

1. – свойство несмещённости ошибок
2. , то есть регрессия – лучшее приближение в среднем квадратичном

Получаем модель , где выполнены следующие условия на ошибки

В общем случае найти функцию невозможно, но, если известен вид этой функции, её коэффициенты можно найти методом наименьших квадратов.

Рассмотрим линейную регрессионную модель с откликом

где – размерность пространства, – базисные функции, – параметры регрессии, – ошибка.

Запишем (1.28) в матричном виде.

где – вектор откликов, – вектор параметров регрессии, – вектор ошибок, – матрица базисных функций.

При этом, в силу неслучайности факторов, . Теперь докажем следующую теорему

Теорема 1. Если выполнены условия (1.28) и при этом , то – оценка наименьших квадратов параметра , причём и оптимальна в классе линейных несмещённых оценок параметра .

Доказательство.

Для нахождения оценки наименьших квадратов параметра необходимо минимизировать сумму квадратов ошибок

Продифференцируем это выражение по каждому

Запишем это равенство в матричном виде

Выразив отсюда , получаем оценку

где – неслучайная матрица, поэтому

то есть оценка – несмещённая.

Докажем теперь оптимальность этой оценки. Пусть – некоторая несмещённая оценка параметра , где – неслучайная матрица. Тогда – единичная матрица.

Запишем дисперсионную матрицу

В частности, если , то

Пусть , тогда для произвольного

причём

Из (1.38) следует, что , то есть для минимизации следа матрицы необходимо, чтобы матрица являлась оценкой наименьших квадратов параметра , а значит эта оценка оптимальна.

## 1.6 Линейная регрессионная модель полиномиального хаоса

Запишем усечённое разложение полиномиального хаоса в векторной форме

При этом вектор коэффициентов можно найти, используя неинтрузивные подходы, например, метод наименьших квадратов. Для этого необходимо найти оценку наименьших квадратов

Запишем необходимое условие минимума для этой оценки

Из (1.41) получаем следующее уравнение

Так как базис ортонормирован, – единичная матрица. Таким образом, получаем следующее выражение для

Запишем аналогичное уравнение для двумерной выборки

где – отклик модели. [7]

Причём оценка (1.45) будет являться несмещённой и оптимальной в классе линейных несмещённых оценок согласно теореме 1.

## 1.7 Метод Галёркина

Метод Галёркина – это интрузивный метод приближенного решения краевой задачи , где – некоторый непрерывный дифференциальный оператор, который может содержать как полные, так и частные производные любого порядка.

Будем искать приближенное решение данной краевой задачи в виде

где функции – это некоторые линейно-независимые функции, удовлетворяющие граничным условиям, наложенным на систему, а – некоторые неопределённые коэффициенты. При этом можно считать, что представляют собой первые функций некоторой полной системы функций.

Пусть теперь является точным решением дифференциального уравнения , то есть пусть . Это требование равносильно ортогональности невязки полученного решения ко всем функциям , так как система функций является полной. Однако, так как мы можем оперировать только первыми функциями , мы можем удовлетворить лишь условий ортогональности, в связи с чем точного решения, в общем случае, мы получить не можем, так как решить систему из бесконечного числа уравнений в общем случае невозможно. Запишем условия ортогональности для уравнений

Из системы уравнений (1.47) можно получить все коэффициенты и, подставив их в выражение (1.46), получить приближенное решение данной краевой задачи. [8]

Помимо решения дифференциальных уравнений, метод Галёркина также может быть использован для нахождения параметров регрессионной модели полиномиального хаоса при помощи детерминированных уравнений, определяющих поведение системы. При этом коэффициенты регрессии считаются неизвестными, они находятся путём их выражения из разложения полиномиального хаоса. Затем полученная система уравнений решается относительно оценки . Будем называть данную спецификацию метода Галёркина *стохастическим методом Галёркина*. [9]

Запишем ал горитм стохастического метода Галёркина

1. Записать разложение полиномиального хаоса для входных факторов, учитывая их совместное распределение
2. Записать отклик модели в виде линейной комбинации базисных полиномов, которые бы удовлетворяли наложенным на систему граничным условиям
3. Подставить разложение ПХ и отклик модели в детерминированные уравнения
4. Вычислить скалярное произведение левой и правой части уравнения, полученного в пункте 3, с каждым базисным полиномом и получить систему из уравнений
5. Решить систему, полученную в пункте 4
6. Рассчитать статистические характеристики решения, используя свойства коэффициентов ПХ

# СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Соболь И. М. Численные методы Монте-Карло. – М., Наука, 1967 г.
2. Пупков К. А. Вероятностная неопределённость в стохастических технических системах управления. – Инженерный журнал: наука и инновации, 2013 г., №10 (22).
3. Sudret B., Mai C. Computing derivative-based global sensitivity measures using polynomial chaos expansions. – 2015.
4. Parekh J., Verstappen R. Intrusive polynomial chaos for CFD using OpenFOAM. – Computational Science, vol 12143. Springer, 2020.
5. Kaintura A., Dhaene T., Spina D. Review of polynomial chaos-based methods for uncertainty quantification in modern integrated circuits. – Electronics, 2018.
6. Alekseev A. K., Navon I. M., Zelentsov M. E. The estimation of functional uncertainty using polynomial chaos and adjoint equations. – Int. J. Numer. Meth. Fluids, 67, 2011.
7. Berveiller M., Sudret B., Lemaire M. Stochastic finite element: A non-intrusive approach by regression. – European Journal of Computational Mechanics, 2006.
8. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближённые методы высшего анализа. — 5-е изд. — Л.-М., 1962.
9. Neckel T. Lecture 7, Polynomial Chaos Approximation 2: The stochastic Galerkin approach. – Algorithms for Uncertainty Quantification, Technische Universität München, 2018.