

Устойчивость вычислительных решений в обратных задачах идентификации коэффициентов линейных разностных уравнений

А. А. Ломов^{1,2}

¹Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН

²Новосибирский государственный университет

II Конференция Математических центров России, 2022
(7–11 ноября 2022 г., МГУ, МИАН, г. Москва)

Общий план

- 1 Постановка задачи
 - Классический метод Прони
 - Модифицированный (вариационный) метод Прони
- 2 Как сравнивать методы идентификации?
 - Состоятельность
 - Локальные разложения
- 3 Вычислительное решение вариационной задачи Прони
 - Удивительная сходимость алгоритмов – отчего?
- 4 Сравнение теории с экспериментом
 - Пример К. Ланцоша
- 5 Проблемы: примеры областей глобальной неустойчивости
- 6 Заключение

- 1 Постановка задачи
 - Классический метод Прони
 - Модифицированный (вариационный) метод Прони
- 2 Как сравнивать методы идентификации?
 - Состоятельность
 - Локальные разложения
- 3 Вычислительное решение вариационной задачи Прони
 - Удивительная сходимость алгоритмов – отчего?
- 4 Сравнение теории с экспериментом
 - Пример К. Ланцоша
- 5 Проблемы: примеры областей глобальной неустойчивости
- 6 Заключение

Задача де Прони (1795)

Аппроксимация наблюдений $x[k] \in \mathbb{R}$, $k \in \overline{1, N}$, линейной комбинацией синусоид и экспонент:

$$x[k] \simeq \sum_{i=1}^l \left(c_i e^{\beta_i k} + \bar{c}_i e^{\bar{\beta}_i k} \right) \doteq z[k]. \quad (1)$$

Классический метод Прони:

- ❶ Определение показателей $\beta_i \in \mathbb{C}$ аппроксимирующих функций $e^{\beta_i k}$, $e^{\bar{\beta}_i k}$, $i \in \overline{1, l}$, в разложении (1)
- ❷ Определение коэффициентов c_i и функции $z[k]$

— составление систем уравнений в предположении малости ошибок в наблюдениях.

Переопределенные системы уравнений

Определение показателей экспонент β_i

$$e^{\beta_i} \doteq s_i : \quad \gamma(s_i) = \gamma_0 + \gamma_1 s_i + \dots + \gamma_n s_i^n = 0.$$

Корни характ. многочл. разностного уравнения:

$$\gamma_0 z[k] + \gamma_1 z[k+1] + \dots + \gamma_n z[k+n] = 0, \quad k \in \overline{1, N-n}.$$

Определение к-тов γ_i (А. Хаусхолдер (1950) и др.):

$$\begin{cases} \gamma_0 x[k] + \dots + \gamma_{n-1} x[k+n-1] + x[k+n] = e[1], \\ \dots \\ \gamma_0 x[k+M-1] + \dots + x[k+n+M-1] = e[M], \end{cases}$$

$$J = e[1]^2 + \dots + e[M]^2 \rightarrow \min_{\gamma_0, \dots, \gamma_{n-1}}.$$

Оценка $z[k]$

$$G^T z = 0, \quad z = [z[1], \dots, z[N]]^T,$$

$$G^T \doteq \begin{bmatrix} \gamma_0 & \gamma_1 & \dots & 1 & & 0 \\ & \gamma_0 & \gamma_1 & \dots & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & & \ddots \\ 0 & & & \gamma_0 & \gamma_1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(N-n) \times N}.$$

$$z = \left[I - G(G^T G)^{-1} G^T \right] x$$

- 1 Постановка задачи
 - Классический метод Прони
 - Модифицированный (вариационный) метод Прони
- 2 Как сравнивать методы идентификации?
 - Состоятельность
 - Локальные разложения
- 3 Вычислительное решение вариационной задачи Прони
 - Удивительная сходимость алгоритмов – отчего?
- 4 Сравнение теории с экспериментом
 - Пример К. Ланцоша
- 5 Проблемы: примеры областей глобальной неустойчивости
- 6 Заключение

Модификация целевой функции («вариационный метод Прони»)

А. Хаусхолдер (1950), М. Осборн (1970), А. О. Егоршин (1973)

$$J = \|x - z\|^2 = (x - z)^T (x - z) \rightarrow \min_{z[1], \dots, z[n], \gamma_0, \dots, \gamma_{n-1}}$$

при условии

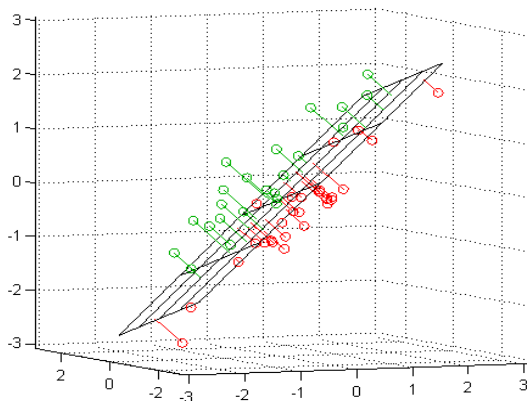
$$G^T z = 0.$$

$$J = J(\gamma) = x^T G C G^T x = \gamma^T V^T C V \gamma, \quad C = (G^T G)^{-1},$$

$$V = \begin{bmatrix} x[1] & x[2] & \dots & x[n+1] \\ x[2] & x[3] & \dots & x[n+2] \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x[N-n] & x[N-n+1] & \dots & x[N] \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(N-n) \times (n+1)}.$$

Орторегрессионные целевые функции

Ортогональная регрессия на плоскость (www.mathworks.com)



$$J(\theta|X) = x_{(1)}^T \Pi_{\theta} x_{(1)} + \dots + x_{(L)}^T \Pi_{\theta} x_{(L)}, \quad \Pi_{\theta} \doteq G_{\theta}^T (G_{\theta} G_{\theta}^T)^{-1} G_{\theta}.$$

Теорема 1

Класс орторегрессионных оценок включает классы TLS (Golub, 1980), CTLS (Abatzoglu, Mendel, 1987), GTLS (Heij, Roorda, 1995) и равносильен классу оценок Structured Total Least Squares (STLS) (Moor, 1993):

$$J_{\text{STLS}}(\theta|X) \doteq \min_{\substack{z_{(i)} \in \mathbb{R}^m \\ V(z_{(i)})A(\theta)=0}} L^{-1} \sum_{i=1}^L \|R^{-1}(x_{(i)} - z_{(i)})\|^2,$$

$$V(z) = V_0 + V_1 z_1 + \dots + V_m z_m,$$

$$A(\theta) = A_0 + A_1 \theta_1 + \dots + A_v \theta_v,$$

где матрицы R , V_k , A_j заданы.

- 1 Постановка задачи
 - Классический метод Прони
 - Модифицированный (вариационный) метод Прони
- 2 Как сравнивать методы идентификации?
 - Состоятельность
 - Локальные разложения
- 3 Вычислительное решение вариационной задачи Прони
 - Удивительная сходимость алгоритмов – отчего?
- 4 Сравнение теории с экспериментом
 - Пример К. Ланцоша
- 5 Проблемы: примеры областей глобальной неустойчивости
- 6 Заключение

Свойства оценок

Множество наблюдений

$$X = \{x_{(1)}, \dots, x_{(L)}\} \subset \mathbb{R}^{Nl},$$

$$\eta_{(i)} \doteq x_{(i)} - z_{(i)}, \quad G_{\theta_*} z_{(i)} = 0, \quad \eta = \Sigma e, \quad e \in \mathcal{N}(0, I).$$

Оценка параметра

$$X \mapsto \hat{\theta}(X), \quad \hat{\theta}(X) = \arg \min_{\theta} J(\theta|X).$$

Единственность, непрерывность.

Состоятельность

- $\hat{\theta}(X) = \hat{\theta}(x_{(1)}, \dots, x_{(L)}) \rightarrow \theta_*, \quad L \rightarrow \infty,$
- $\hat{\theta}(X) \rightarrow \theta_*, \quad N \rightarrow \infty.$

Теоремы о состоятельности

Пусть $z_{(i)}$, $i \in \overline{1, L}$ — н.о.р. Определим множество

$$E(\theta_*) \doteq \{\theta \in \mathbb{R}^v : \text{nul } G_\theta = \text{nul } G_{\theta_*}\}.$$

Наложим условия:

- (I) $E(\theta_*) = \{\theta_*\}$;
- (II) Целевая функция $J(\theta|Z)$ имеет точки глобального минимума только в $E(\theta_*)$.

Теорема 2

Выполнение условий (I) и (II) необходимо и достаточно для состоятельности по $L \rightarrow \infty$ орторегрессионных оценок: $\theta_L \rightarrow \theta_*$.

Теорема 3

В условиях теоремы 2 оценка МНК несостоятельна: $\theta_{\text{МНК}, L} \not\rightarrow \theta_*$.

- 1 Постановка задачи
 - Классический метод Прони
 - Модифицированный (вариационный) метод Прони
- 2 Как сравнивать методы идентификации?
 - Состоятельность
 - Локальные разложения
- 3 Вычислительное решение вариационной задачи Прони
 - Удивительная сходимость алгоритмов – отчего?
- 4 Сравнение теории с экспериментом
 - Пример К. Ланцоша
- 5 Проблемы: примеры областей глобальной неустойчивости
- 6 Заключение

Локальные разложения

Линеаризация градиента целевой функции:

$$\underbrace{J'_\theta(\theta + \Delta\theta, z + \Delta z)}_{=0} = \underbrace{J'_\theta(\theta, z)}_{=0} + J''_{\theta\theta}\Delta\theta + J''_{\theta z}\Delta z + o(\|\xi\|),$$
$$\Delta\theta \simeq - (J''_{\theta\theta})^{-1} J''_{\theta z}\Delta z.$$

Теорема 4

При выполнении условий единственности верна оценка:

$$\|\Delta\theta\| \leq \frac{1}{\sqrt{\lambda_{\min}(R_0)}} \varepsilon + c_{22} \varepsilon^2,$$

$$\varepsilon \doteq \|\Delta x\|, R_0 \doteq D^T \widehat{V}^T C \widehat{V} D, r_* \doteq \|D\|^2 \cdot (n+1) \text{Sp} C \cdot \|z\|^2, b_0 \doteq \frac{2\sqrt{n}}{\lambda_{\min}(R_0)}$$

$$c_{22} \doteq \frac{\sqrt{2n} b_0 \sqrt{r_*}}{\|z\|} \{36 b_0 r_* (\sqrt{n} [31 b_0 r_* + 1] + 1) + 1\}$$

Вычислительное решение

- SVD-разложение ядра целевой функции (ОР);
- Квазиньютоновские алгоритмы;
- Нелинейные SVD-алгоритмы (итерации с обновляемой обратной матрицей) (А.О. Егоршин, М. Osborne, 1970; В. De Moor 1993):

$$\vartheta \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ \theta \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \tau \doteq A_{(k)}^{-1} B \vartheta_{(k)}, \\ \vartheta_{(k+1)} = \frac{1}{(10 \dots 0) \tau} \tau, \end{cases}$$
$$A_{(k)} = A_{(k)}(\vartheta_{(k)}, x), \quad J(\theta|x) = \vartheta^T A(\vartheta, x) \vartheta.$$

Игрушечный пример

$$z_*[k+2] - 1,823 z_*[k+1] + 0,941 z_*[k] = 0, \quad k \in \overline{1, 98}.$$

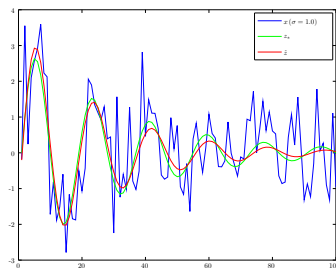
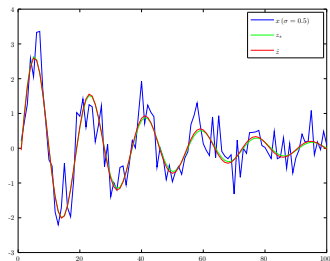
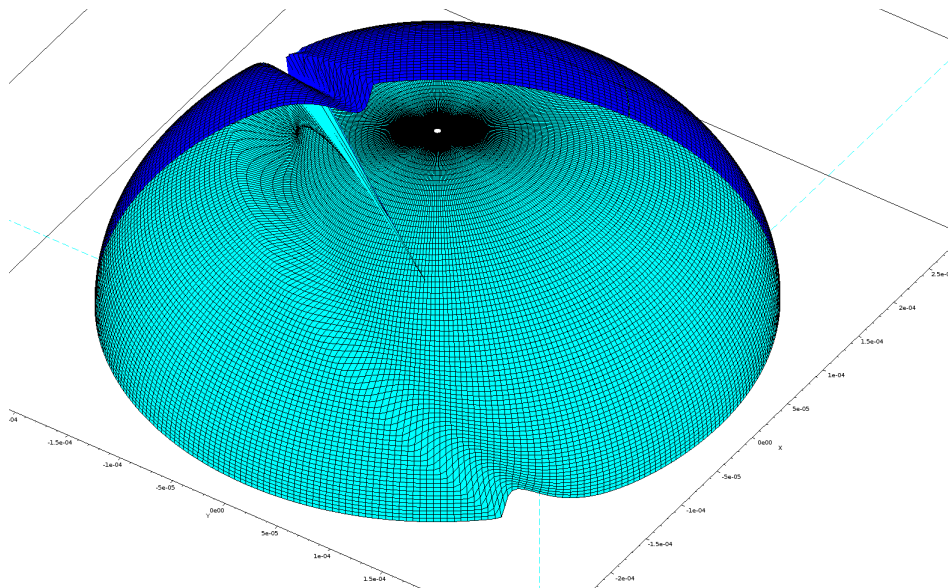


Рис. 1. Наблюдения x и оценки $\hat{z}$ траектории z_*
при $\sigma = 0.5$ и $\sigma = 1.0$

$$\hat{z} = \left[I - G(G^T G)^{-1} G^T \right] x$$

$J(\gamma)$, $n = 2$: поверхность значений целевой функции

В. И. Костин (1984), Дж. Петерсон, К. Холмстром (2002)



Алгоритмы O70, E73

$$Q \doteq V^T C V = P \operatorname{diag} (\lambda_{n+1}, \dots, \lambda_1) P^T \geq 0.$$

Пусть $\lambda_1(Q)$ и $p_1(Q)$ — минимальное собственное число и соответствующий собственный вектор Q .

Алгоритм O70 (М. Осборн, 1970)

$$\gamma_{[k+1]} = p_1(Q(\gamma_{[k]})), \quad k \geq 0.$$

Алгоритм E73 (А. О. Егоршин, 1973)

$$\gamma_{[k+1]} = \tau / \|\tau\|, \quad \tau = (Q(\gamma_{[k]}))^{-1} \gamma_{[k]}, \quad k \geq 0.$$

Эксперименты: итерации O70, E73 не находят точного минимума (Осборн, Смит, 1995; Егоршин, 1973).

Алгоритм ОЕ75 («модифицированный метод Прони»)

$$J' = B(\gamma)\gamma = (Q - L^T L)\gamma,$$

$$L^T = \begin{bmatrix} l_1 & \dots & l_{N-n} & & 0 \\ & \ddots & & \ddots & \\ 0 & & l_1 & \dots & l_{N-n} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1) \times N}.$$

Здесь $l \doteq [l_1; \dots; l_{N-n}] = CG^T x = CV\gamma$ — вектор множителей Лагранжа. Пусть $p_0(B)$ — собственный вектор м-цы $B(\gamma) = (Q - L^T L)$ при собственном числе с наименьшим модулем.

Алгоритм ОЕ75 (М. Осборн, 1975; А. О. Егоршин, 1977)

$$\gamma_{[k+1]} = p_0(B(\gamma_{[k]})), \quad k \geq 0.$$

- 1 Постановка задачи
 - Классический метод Прони
 - Модифицированный (вариационный) метод Прони
- 2 Как сравнивать методы идентификации?
 - Состоятельность
 - Локальные разложения
- 3 Вычислительное решение вариационной задачи Прони
 - Удивительная сходимость алгоритмов – отчего?
- 4 Сравнение теории с экспериментом
 - Пример К. Ланцоша
- 5 Проблемы: примеры областей глобальной неустойчивости
- 6 Заключение

Сходимость алгоритмов

Частота сходимости $\frac{\|x-z\|}{\|z\|} < 0.4$

(начальное приближение ОР, $M = 100$)

σ	OE75	O70	O70-OE75	E73	E73-HP
0.5	57%	69%	69%	100%	100%
1.0	19%	33%	36%	77%	79%

Число итераций 8-16 (при $\sigma = 0.5$)

Исследования O70, OE75, E73

М. Осборн, Дж. Смит (1991)

Алгоритм OE75 локально устойчив в точке локального минимума.

Дж. Петерсон, К. Холмстром (2002), обзорная статья

Алгоритмы O70, OE75 малоизучены. То же для E73.

Работы В. Г. Демиденко (2007-2010)

Локальная сходимость E73 в предположении о независимости λ_1, p_1 от γ в малой окрестности γ_* .

Условия сходимости О70 и Е73 I

Теорема 5

Пусть в области $\Gamma \supset \gamma_*$ выполнено условие на малость $\lambda_1(Q)$:

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_2 |\alpha_1|} c_6 + \frac{2n \cdot \sqrt{\lambda_1} \cdot \|C\| \cdot \|V\|}{\lambda_2 - \lambda_1} < 1, \quad \alpha_1 \doteq p_1^T \gamma, \quad (2)$$

$$c_6 \doteq 4n \|C\|^{1/2} + \left(2 + \frac{1}{|\alpha_1|}\right) \sqrt{n+1} c_{\max} + \left(1 + \frac{1}{|\alpha_1|}\right),$$
$$c_{\max} = 2n \cdot \|C\|^{1/2} \cdot \sqrt{\lambda_{n+1}} \cdot \max_{i=2, n+1} \left(\frac{\sqrt{\lambda_i}}{\lambda_i - \lambda_{i-1}} \right).$$

Тогда отображение $\gamma_{[k]} \rightarrow \gamma_{[k+1]}$ в итерации О70, Е73 является сжимающим, следовательно, имеет единственную неподвижную точку в Γ .

Условия сходимости О70 и Е73 II

Теорема 6

Все элементы $\gamma_{[k]}$ в итерациях О70, Е73 при $k \geq 1$ остаются в окрестности истинной точки γ_* :

$$\begin{aligned} \frac{\|\gamma_{[k]} - \gamma_*\|}{\|\gamma_*\|} &\leq \frac{\alpha' \cdot \|C_*\| \cdot \|V_*\|}{\lambda_{2*}} \varepsilon + O(\varepsilon^2) \leq \\ &\leq \frac{\alpha \cdot \|C_*\| \cdot \|V_*\|}{\lambda_{2*}} \varepsilon, \quad \varepsilon \doteq \|V(\eta)\| = \|V - V_*\|. \end{aligned}$$

Константа α' определена условием $\|C_{[k]}\| \leq \alpha' \|C_*\|$, $k \geq 0$, которое можно рассматривать как ограничение на начальное значение $\gamma_{[0]}$, а константа $\alpha > \alpha'$ определяется условием мажорирования слагаемых $O(\varepsilon^2)$.

Условия сходимости O70 и E73 III

Теорема 7

$$\text{Пусть } \varepsilon < \frac{1}{5n\|C_*\|^{1/2}} \cdot \frac{\lambda_2}{\alpha\|C_*\| \cdot \|V_*\| \cdot \|\gamma_*\|}, \quad \varepsilon < \|V_*\|.$$

Тогда следующее неравенство является достаточным для выполнения условия теоремы 1 в области из теоремы 2:

$$\varepsilon < \frac{\varepsilon_*}{\sqrt{(\alpha_0 + \alpha_1\|V_*\| + \alpha_2\|V_*\|^2)}}, \quad \text{где}$$

$$\varepsilon_* \doteq \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{c_6}{|\alpha_1|}}} \frac{\sqrt{\omega^2 + \lambda_2} - \omega}{\sqrt{2\|C_*\|}}, \quad \omega \doteq \frac{4n\|C_*\| \cdot \|V_*\|}{\sqrt{1 + \frac{c_6}{|\alpha_1|}}},$$

$\alpha_i = \alpha_i(\lambda_2, n, \|C_*\|, \|V_*\|)$, $i = 0, 1, 2$ (формулы опущены).

- 1 Постановка задачи
 - Классический метод Прони
 - Модифицированный (вариационный) метод Прони
- 2 Как сравнивать методы идентификации?
 - Состоятельность
 - Локальные разложения
- 3 Вычислительное решение вариационной задачи Прони
 - Удивительная сходимость алгоритмов – отчего?
- 4 Сравнение теории с экспериментом
 - Пример К. Ланцоша
- 5 Проблемы: примеры областей глобальной неустойчивости
- 6 Заключение

Пример К. Ланцоша (1956)

Точный процесс

$$z(t) = 0.0951e^{-t} + 0.8607e^{-3t} + 1.5576e^{-5t}$$

описывается дифференциальным уравнением

$$z''' + a_2z'' + a_1z' + a_0z = 0$$

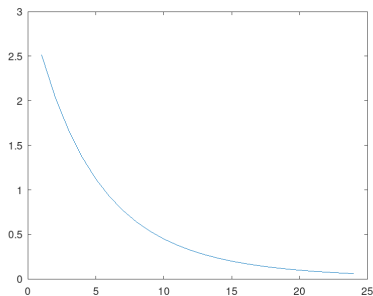
с «истинными» значениями коэффициентов

$$a_2 = 9, \quad a_1 = 23, \quad a_0 = 15,$$

$$\lambda_1 = -1, \quad \lambda_2 = -3, \quad \lambda_3 = -5.$$

Данные наблюдений ($\sigma = 3 \cdot 10^{-3}$)

k	x_k	k	x_k	k	x_k	k	z_k	k	x_k	k	x_k
1	2.51	5	1.12	9	0.53	13	0.27	17	0.15	21	0.09
2	2.04	6	0.93	10	0.45	14	0.23	18	0.13	22	0.08
3	1.67	7	0.77	11	0.38	15	0.20	19	0.11	23	0.07
4	1.37	8	0.64	12	0.32	16	0.17	20	0.10	24	0.06



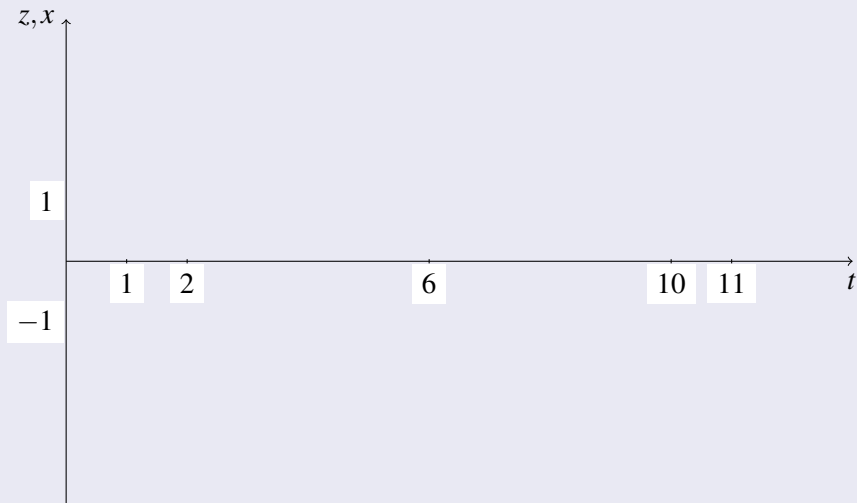
Результаты расчетов (среднее по 100 эксп.)

Результаты для целевых функций ВМ (в числителе) и МНК (в знаменателе); *** — относительное смещение > 1

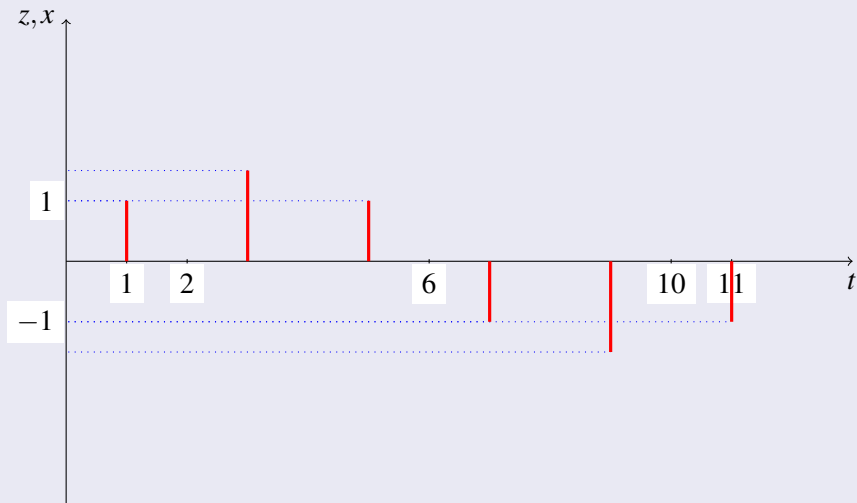
σ	$\frac{ \Delta_{\text{отн}} \hat{a} _{\text{ВМ}}}{\text{МНК}}$	$\frac{ \Delta_{\text{отн}} \hat{\lambda}_3 _{\text{ВМ}}}{\text{МНК}}$	$\frac{ \Delta_{\text{отн}} \hat{\lambda}_2 _{\text{ВМ}}}{\text{МНК}}$	$\frac{ \Delta_{\text{отн}} \hat{\lambda}_1 _{\text{ВМ}}}{\text{МНК}}$
$3 \cdot 10^{-6}$	$\frac{4,6 \cdot 10^{-3}}{3,6 \cdot 10^{-2}}$	$\frac{7,2 \cdot 10^{-5}}{4,9 \cdot 10^{-4}}$	$\frac{1,5 \cdot 10^{-3}}{1,1 \cdot 10^{-2}}$	$\frac{5,9 \cdot 10^{-3}}{4,7 \cdot 10^{-2}}$
$3 \cdot 10^{-5}$	$\frac{0,043}{0,47}$	$\frac{5,8 \cdot 10^{-4}}{1,5 \cdot 10^{-2}}$	$\frac{0,013}{0,20}$	$\frac{0,055}{0,45}$
$3 \cdot 10^{-4}$	$\frac{0,37}{***}$	$\frac{0,0091}{***}$	$\frac{0,12}{0,71}$	$\frac{0,44}{***}$
$3 \cdot 10^{-3}$	$\frac{***}{***}$	$\frac{***}{***}$	$\frac{0,47}{***}$	$\frac{***}{***}$

$$\frac{\|\Delta a\|_{\max}}{\|a\|} = 0,1 \quad , \quad \|\Delta z\|_{\max}^{\text{ВМ}} \simeq 3,2 \cdot 10^{-5} \quad , \quad \|\Delta z\|_{\max}^{\text{МНК}} \simeq 3,6 \cdot 10^{-6}$$

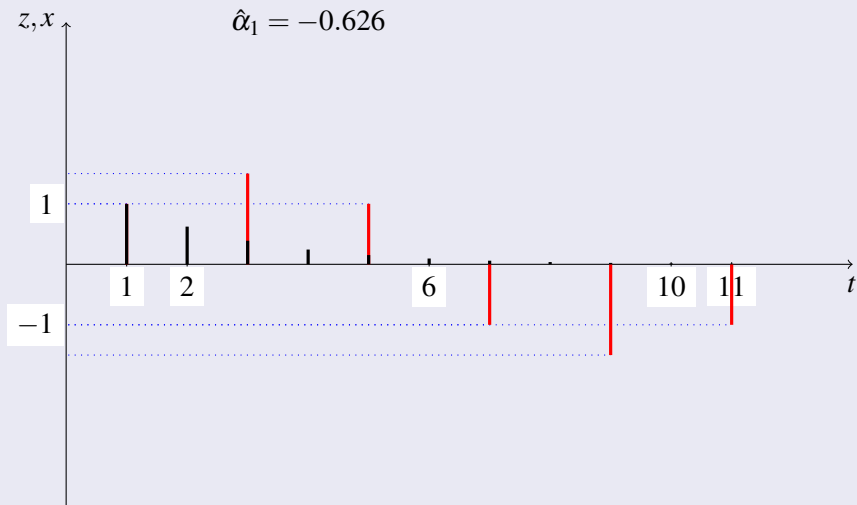
Области неустойчивости в $\mathbb{R}^{11}$ [А. Дастай-Оол, 2013]



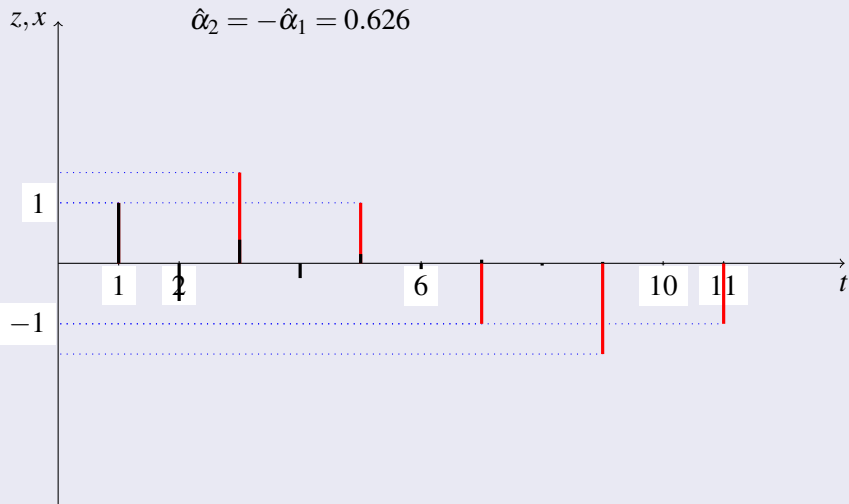
Области неустойчивости в $\mathbb{R}^{11}$ [А. Дастай-Оол, 2013]



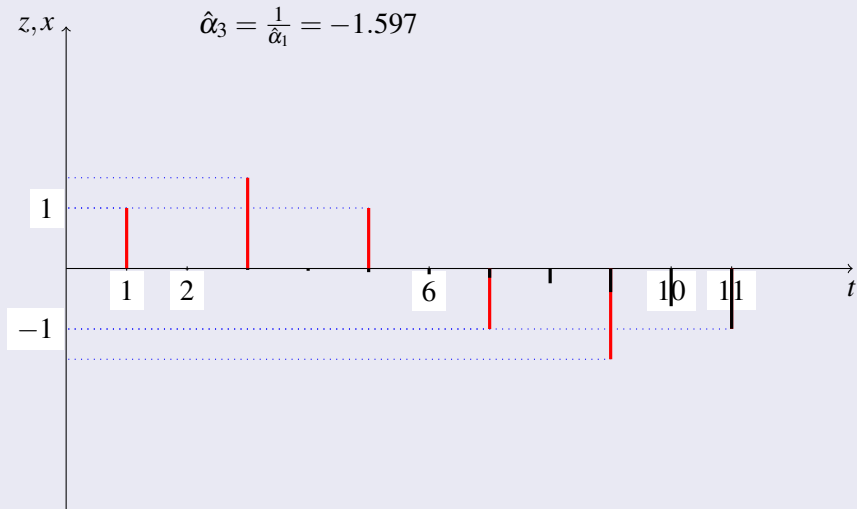
Области неустойчивости в $\mathbb{R}^{11}$ [А. Дастай-Оол, 2013]



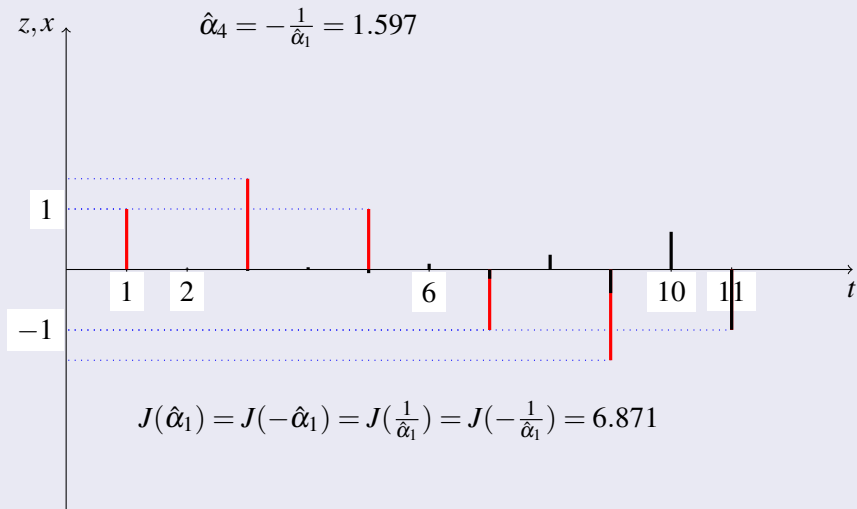
Области неустойчивости в $\mathbb{R}^{11}$ [А. Дастай-Оол, 2013]



Области неустойчивости в $\mathbb{R}^{11}$ [А. Дастай-Оол, 2013]



Области неустойчивости в $\mathbb{R}^{11}$ [А. Дастай-Оол, 2013]



Заключение

- При наличии аддитивных погрешностей целесообразно использовать вариационную постановку задачи Прони:
 - ▶ состоятельность при накоплении наблюдений (н.о.р.);
 - ▶ устойчивость к малым возмущениям.
- Теоретические оценки устойчивости близки к данным экспериментов.
 - ▶ (–) Область применимости теорем ограничена «сверхмалыми» возмущениями.
- (+) Вычислительные решения, основанные на обратных итерациях, гарантированно сходятся из «почти любого» начального приближения.
 - ▶ (–) Сходимость доказана при малых и «сверхмалых» возмущениях.
 - ▶ (+) Сходимость наблюдается экспериментально при «больших» возмущениях.
- Проблема областей глобальной неединственности (не обнаруживаются локальными показателями устойчивости)

Спасибо за внимание