Управляемые системы, ИМ СО АН СССР, 1984 г., вып. 24

УДК 519.615

О ТОЧКАХ ЭКСТРЕМУМА ОДНОЙ ФУНКЦИИ

В.И.Костин

Хорошо известна важность так называемой "задачи параметрического оценивания", т.е. задачи восстановления коэффициентов дифференциального (или, например, разностного) уравнения по решениям этого уравнения. Работа [1] посвящена применению градиентных методов к решению такой задачи в различных ситуациях.

Ниже рассматривается вопрос о применимости градиентных методов в случае сравнительно простой задачи восстановления коэффициентов 4-точечного разностного уравнения по "слабо возмущенному" решению этого уравнения. Постановка задачи несколько отличается от постановки в [1] тем, что мы рассматриваем одну реализацию возмущения. Накладывается ограничение на входные данные задачи типа малости L_2 -нормы возмущения относительно L_2 -нормы невозмущенного решения. Исследуются некоторые затруднительные ситуации для сходимости градиентных методов при решении такой задачи. В конце приводятся результаты численных расчетов одной модельной задачи описанного типа, демонстрирующие "овражность" исследуемого функционала. Расчеты проводились по "безавостным" программам на ЕС-1050, составленным по материалам [2].

Как будет видно из дальнейшего, аналогичные результаты имеют место и для случая p -точечных разностных уравнений. Не имея цели гнаться за излишней общностью, мы остановимся на случае $p = 4$.

Пусть последовательность точек y_K, $K = 1, 2, 3, \ldots, N+3$, "мало" отличается от последовательности точек u_K, $K = 1, 2, \ldots, N+3$, которая в свою очередь является решением системы разностных уравнений

$$u_{K+3} - \beta_1 u_{K+2} - \beta_2 u_{K+1} - \beta_3 u_K = 0, \quad K = 1, 2, \ldots, N.$$

Таким образом, наши предположения относительно y формулируются так:

$$y_K = u_K + \xi_K, \quad \sum_{K=1}^{N+3} \xi_K^2 \le \varepsilon.$$

По вектору y требуется восстановить коэффициенты разностного уравнения β_1, β_2, β_3 так, чтобы возмущение ξ было минимально. Ниже будет предложена вариационная формулировка этой задачи, состоящая в нахождении минимума некоторой гладкой функции $\Phi(\beta_1, \beta_2, \beta_3)$, и осуществлена попытка исследования качественных свойств этой функции. Будут приведены также результаты численных экспериментов, демонстрирующих качественное поведение функции Φ в некоторых частных случаях.

Введем удобные для дальнейшего обозначения. Пусть $A = A(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3)$ – прямоугольная матрица размера $N \times (N+3)$, т.е. имеющая N строк и $N+3$ столбца вида:

$$A = \begin{bmatrix} -\beta_3 & -\beta_2 & -\beta_1 & -\beta_0 & 0 & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ 0 & -\beta_3 & -\beta_2 & -\beta_1 & -\beta_0 & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & & & & & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & \ldots & -\beta_3 & -\beta_2 & -\beta_1 & -\beta_0 & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & \ldots & 0 & -\beta_3 & -\beta_2 & -\beta_1 & -\beta_0 \end{bmatrix}$$

Таким образом, $A(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3)$ – ленточная матрица, причем ширина ленты равна четырем, а по "диагоналям" стоят одинаковые числа. В дальнейшем всегда будем считать, что $\beta_0 = -1$, а числа β_1, β_2, β_3 – вещественные параметры. Для краткости будем пользоваться обозначением $A(\beta) = A(-1, \beta_1, \beta_2, \beta_3)$. Очевидно, что ранг матрицы $A(\beta) = A(-1, \beta_1, \beta_2, \beta_3)$ всегда равен N, а уравнение $Az = 0$, где z – столбец с $N+3$ -мя компонентами, задает разностное уравнение

$$z_{K+3} - \beta_1 z_{K+2} - \beta_2 z_{K+1} - \beta_3 z_K = 0 \quad (K = 1, 2, \ldots, N). \tag{1}$$

Хорошо известно, что размерность пространства решений такой системы разностных уравнений равна трем, т.е. размерность пространства решений системы уравнений $Az = 0$ равна трем. С другой стороны, так как ранг матрицы A^T равен N, единственным решением системы уравнений $A^T w = 0$ будет тождественно нулевое решение $w = 0$. Этими фактами будет удобно пользоваться в дальнейшем.

Пусть y – некоторый фиксированный вектор размерности $N+3$. Тогда $\|z - y\|^2$ означает квадрат длины разности векторов z и y, т.е. квадрат расстояния от z до y:

$$\|z - y\|^2 = \sum_{i=1}^{N+3} (z_i - y_i)^2.$$

Нетрудно видеть, что

$$\inf_{Az=0} \|z - y\|^2$$

есть не что иное, как квадрат расстояния от вектора y до подпространства, определяемого уравнением $Az = 0$, т.е. до подпространства решений системы разностных уравнений (1).

Предполагая, что параметры β_1, β_2, β_3 могут изменяться произвольно, мы определяем функцию от этих параметров:

$$\Phi(\beta_1, \beta_2, \beta_3) = \inf_{A(\beta)z=0} \|z-y\|^2 .$$

Очевидно, функция $\Phi(\beta_1, \beta_2, \beta_3)$ – гладкая функция переменных β_1, β_2, β_3. Таким образом, все точки экстремума удовлетворяют уравнениям:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \beta_j} = 0 , \quad j = 1, 2, 3 .$$

При этом среди точек β, удовлетворяющих выписанным трем условиям, могут оказаться точки, не доставляющие максимума или минимума Φ, например, седловые точки. Поэтому мы будем их называть просто стационарными точками.

Для функции Φ можно получить явную формулу, удобную для вычислений. Именно, если имеется ортогональное разложение $y = z_0 + \xi$, $A(\beta) z_0 = A z_0 = 0$, а ξ ортогонален подпространству решений $A z_0 = 0$, то по определению, $\Phi = \|\xi\|^2$. Оператор

$$P: y = z_0 + \xi \to \xi$$

есть оператор ортогонального проектирования с ядром, являющимся пространством решений $Az = 0$. Оказывается, $P = A^T(AA^T)^{-1}A$. Докажем это. В самом деле, если $Az = 0$, то $Pz = 0$, т.е. $\ker P$ содержит пространство решений $Az = 0$. С другой стороны, если $Pz = 0$, т.е. $A^T(AA^T)^{-1}Az = 0$, то, так как ранг A^T равен N, получаем $(AA^T)^{-1}Az = 0$, а отсюда $Az = 0$. Таким образом, ядра операторов A и $Q = A^T(AA^T)^{-1}A$ совпадают. Заметим еще, что

$$Q^2 = A^T(AA^T)^{-1}AA^T(AA^T)^{-1}A = A^T(AA^T)^{-1}A = Q ,$$

т.е. $A^T(AA^T)^{-1}A = Q$ – проектор, причем ортогональный проектор, так как очевидно, что $Q^T = Q$. Таким образом, действительно,

$$Q = A^T(AA^T)^{-1}A = P .$$

Очевидно, что ранг матрицы P равен N. Это следует из того, что ядро P совпадает с ядром A. В силу очевидных свойств проекторов имеем

$$\Phi(\beta_1, \beta_2, \beta_3) = (P(\beta_1, \beta_2, \beta_3)y, y), \quad P = A^T(AA^T)^{-1}A . \tag{2}$$

Это и есть явная формула, представляющая Φ. Отсюда

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \beta_j} = \left(\frac{\partial P}{\partial \beta_j} y, y \right) .$$

Чтобы их вычислить, нужно сосчитать производные от матрицы P. Будем считать их в некоторой фиксированной точке β_0.

Матрицу $A(\beta)$ мы можем представить в виде

$$A(\beta) = A_0 + \alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3 , \tag{3}$$

где $A_0 = A(\beta_0)$, $\alpha_1 = \beta_1 - \beta_{01}$, $\alpha_2 = \beta_2 - \beta_{02}$, $\alpha_3 = \beta_3 - \beta_{03}$, а матрицы $A_1 = A(0,1,0,0)$, $A_2 = A(0,0,1,0)$, $A_3 = A(0,0,0,1)$.

Подставляя выражение (3) в формулу для P, получаем:

$$P = (A_0 + \alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3)^T \left[(A_0 + \alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3) \times\right.$$

$$\left.\times (A_0 + \alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3)^T\right]^{-1} (A_0 + \alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3).$$

Для счета производной $\dfrac{\partial P}{\partial \beta_1}$ мы вправе давать приращение только лишь β_1, а параметры β_2 и β_3 считать неподвижными. Это обстоятельство сокращает нам выкладки. С другой стороны, в силу симметрии формулы для P по переменным α_1, α_2, α_3 очевидно, что производные по β_2 и β_3 получаются простой заменой индексов.

Таким образом, будем считать, что

$$P = (A_0 + \alpha_1 A_1)^T \left[(A_0 + \alpha_1 A_1)(A_0 + \alpha_1 A_1)\right]^{-1} (A_0 + \alpha_1 A_1).$$

Разлагая полученное выражение по степеням α_1 с точностью до α_1 в первой степени, получим искомое выражение для производной $\dfrac{\partial P}{\partial \beta_1}$ в точке β_0.

Имеем

$$(A_0 + \alpha_1 A_1)(A_0 + \alpha_1 A_1)^T = A_0 A_0^T + \alpha_1 (A_0 A_1^T + A_1 A_0^T) + \ \dots ,$$

где точками обозначены члены, имеющие степень по α_1 выше первой.

Тогда

$$\left[(A_0 + \alpha_1 A_1)(A_0 + \alpha_1 A_1)^T\right]^{-1} =$$

$$= (A_0 A_0^T)^{-1} - \alpha_1 (A_0 A_0^T)^{-1} \left[A_1 A_0^T + A_0 A_1^T\right] (A_0 A_0^T)^{-1} + \dots .$$

Перемножаем

$$P = (A_0 + \alpha_1 A_1)^T \left\{(A_0 A_0^T)^{-1} - \right.$$

$$\left. - \alpha_1 (A_0 A_0^T)^{-1} \left[A_1 A_0^T + A_0 A_1^T\right] (A_0 A_0^T)^{-1} \right\} (A_0 + \alpha_1 A_1) + \dots =$$

$$= A_0^T (A_0 A_0^T)^{-1} A_0 + \alpha_1 \left\{ A_1^T (A_0 A_0^T)^{-1} A_0 + A_0^T (A_0 A_0^T)^{-1} A_1 - \right.$$

$$- A_0^T(A_0A_0^T)^{-1}[A_1A_0^T + A_0A_1^T](A_0A_0^T)^{-1}A_0\} + \ldots .$$

Так как по условию $P(\beta_0) = A_0^T(A_0A_0^T)^{-1}A_0$, то

$$\frac{\partial P}{\partial \beta_1}(\beta_0) = A_1^T(A_0A_0^T)^{-1}A_0 + A_0^T(A_0A_0^T)^{-1}A_1 -$$
$$- A_0^T(A_0A_0^T)^{-1}(A_1A_0^T + A_0A_1^T)(A_0A_0^T)^{-1}A_0 .$$

Удобно ввести краткие обозначения:

$$A_0^T(A_0A_0^T)^{-1} = A_0^+ , \quad (A_0A_0^T)^{-1}A_0 = A_0^{+T} .$$

Тогда имеем

$$\frac{\partial P}{\partial \beta_1}(\beta_0) = A_1^T A_0^{+T} + A_0^+ A_1 - A_0^+[A_1A_0^T + A_0A_1^T]A_0^{+T} =$$
$$= (A_1^T - A_0^+A_0A_1^T)A_0^{+T} + A_0^+(A_1 - A_1A_0^TA_0^{+T}) .$$

Очевидно, что

$$A_0^+ A_0 = P_0 , \quad A_0^T A_0^{+T} = P_0 .$$

Таким образом:

$$\frac{\partial P}{\partial \beta_1}(\beta_0) = (I - P_0)A_1^T A_0^{+T} + A_0^+ A_1(I - P_0),$$

где I – единичная матрица.

Итак, искомые выражения для производных получены:

$$\frac{\partial P}{\partial \beta_1}(\beta_0) = (I - P_0)A_1^T A_0^{+T} + A_0^+ A_1(I - P_0),$$
$$\frac{\partial P}{\partial \beta_2}(\beta_0) = (I - P_0)A_2^T A_0^{+T} + A_0^+ A_2(I - P) , \tag{4}$$
$$\frac{\partial P}{\partial \beta_3}(\beta_0) = (I - P_0)A_3^T A_0^{+T} + A_0^+ A_3(I - P_0) .$$

Приведем сводку формул для матриц, участвующих в (4):

$$A_0^+ = A_0^T(A_0A_0^T)^{-1}, \quad A_0^{+T} = (A_0A_0^T)^{-1}A_0 , \quad P_0 = A_0^+A_0 = A_0^TA_0^{+T},$$

$$A_0 = A(1, \beta_{10}, \beta_{20}, \beta_{30}), \quad A_1 = A(0, 1, 0, 0),$$

$$A_2 = A(0, 0, 1, 0), \quad A_3 = A(0, 0, 0, 1) .$$

Стационарные точки функции Φ при заданном векторе y удовлетворяют системе уравнений:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \beta_1} y, y\right) = 0, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \beta_2} y, y\right) = 0, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \beta_3} y, y\right) = 0 .$$

Если обозначить через C_j матрицу $(I - P_0) A_j^T A_0^{+T}$, то правые части формул в (4) имеют вид $C_j + C_j^T$. Матрица $I - P_0$ – проектор, причем дополнительный к P_0. Следовательно, ее ранг равен 3. Отсюда ранг матрицы C_j не выше трех, а ранг $\frac{\partial P}{\partial \beta_j}$ не выше 6. Таким образом, если вектор y содержит не менее 19-ти компонент $(N + 3 \geqslant 19)$, то система линейных уравнений относительно y

$$\frac{\partial P}{\partial \beta_1} y = 0 , \qquad \frac{\partial P}{\partial \beta_2} y = 0, \qquad \frac{\partial P}{\partial \beta_3} y = 0 \tag{5}$$

имеет нетривиальные решения y, образующие подпространства размерности, не меньшей $N - 15$.

Таким образом, если имеется точка β_0, а вектор y таков, что выполнена система уравнений (5), то градиент функции Φ в этой точке равен нулю. Отсюда следует, что градиентные численные методы в точке β_0 будут останавливаться, причем ниоткуда не следует, что полученная точка β_0 является точкой минимума функции $\Phi(\beta)$.

Заметим также, что если записать две системы уравнений вида (5) в двух различных наперед заданных точках β_0 и β_{00}, то ранг полученной системы не будет больше 36-ти и, таким образом, если $N + 3 \geqslant 37$, то можно найти вектор y, удовлетворяющий условиям типа (5) в двух наперед заданных точках β_0 и β_{00}. Следовательно, функция Φ, определенная по такому y, будет иметь по крайней мере две стационарные точки β_0 и β_{00}. Ясно, что при достаточно большом числе компонент вектора y существуют примеры функций Φ с любым числом стационарных точек.

Заметим также, что примеры функций Φ с большим числом стационарных точек можно построить еще следующим образом. Если $y_K = q^K$, то очевидно, что $\Phi(q - s, qs - t, qt) = 0$ при всех s и t. А так как $\Phi(\beta) \geqslant 0$, то каждая из таких точек при любых s и t является точкой минимума функции Φ.

Приведем также таблицу значений функции Φ для некоторых значений β в окрестности стационарной точки с целью демонстрации того, что она в этой окрестности довольно "остра". В нашем примере $N = 30$. Вектор $\bar{y}$ определяется следующим образом:

$$\bar{y}_1 = 0, \quad \bar{y}_2 = 1, \quad \bar{y}_3 = 1{,}8,$$

$$\bar{y}_{K+3} = 3\bar{y}_{K+2} - 3\bar{y}_{K+1} + \bar{y}_K, \quad K = 1, 2, \dots, 30 .$$

А компоненты y_K отличаются от $\bar{y}_K$ следующим образом:

$$y_K = \bar{y}_K + 0.3\cos(3.14K/2+1).$$

Приведем значение функции $\Phi(\beta_1, \beta_2, \beta_3)$ в точках квадрата

$$\beta_1 = 3, \ \beta_2 = -3+(i-3)\times h, \ \beta_3 = 1+(j-3)\times h,$$

$$i, j = 1,2,3,4,5,$$

где $h = 0,1$. Значения Φ приводим с четырьмя значащими цифрами.

$j \backslash i$	1	2	3	4	5
1	5213	4663	3774	2026	2355
2	5115	4412	2996	1461	3926
3	5039	4092	0.7437	4452	5476
4	5157	5338	3869	5168	5823
5	5196	3173	4812	5590	6074

Значение Φ = 0.7437 соответствует, очевидно, $\beta_1 = 3$, $\beta_2 = -3$, $\beta_3 = 1$, т.е. коэффициентам разностного уравнения, определяющего невозмущенные $\bar{y}_K$.

Приведем также матрицу $\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\beta_i\partial\beta_j}\right)^3_{i,j=1}$ в точке (3, -3, 1):

$$H = \begin{bmatrix} 3329 & 2785 & 2289 \\ 2785 & 2333 & 1920 \\ 2289 & 1920 & 1583 \end{bmatrix}.$$

Число обусловленности этой матрицы

$$\mu(H) = 1.302 \cdot 10^7,$$

что говорит о том, что поверхности уровня функции Φ в окрестности точки (3, -3, 1) сильно вытянуты в одном направлении, т.е. матрица H плохо обусловлена.

Приведенные выше выкладки и результаты численных расчетов демонстрируют значительные трудности в применении методов типа наискорейшего спуска, Ньютона и других для отыскания минимума описанной функции. Таким образом, применение этих методов в задаче параметрического оценивания требует дальнейшего исследования сходимости решения.

Поступила в ред.-изд. отдел
27 марта 1984 г.

Литература

I. Maine R.E., Iliff K.W. Formulation and Implementation of practical algorithm for parameter estimation with process and measurement noise. - SIAM,J. Appl. Math, 41, N 3, pp. 558-579.

2. Годунов С.К. Решение систем линейных уравнений. - Новосибирск: Наука, 1980. - 177 с.