

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Dominik Šutalo

AKTIVNI POTPROSTORI - ALGORITMI
I PRIMJENE

Diplomski rad

Voditelj rada:
prof. dr. sc. Zlatko Drmač

Zagreb, rujan, 2019. godina

Ovaj diplomski rad obranjen je dana _____ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. _____, predsjednik
2. _____, član
3. _____, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _____.

Potpisi članova povjerenstva:

1. _____
2. _____
3. _____

Sadržaj

Sadržaj	iii
Uvod	2
1 Teorijska pozadina	3
1.1 Svojstvene vrijednosti i vektori	3
1.2 Osnovni pojmovi vjerojatnosti	4
1.3 Definicija aktivnih potprostora	5
1.4 Određivanje aktivnih potprostora	8
1.5 Iskustvo iz prakse	15
2 Primjene aktivnih potprostora	19
2.1 Redukcija dimenzije i preslikavanja	19
2.2 Aproksimacija grafa funkcije (<i>response surfaces</i>)	21
2.3 Integracija	30
2.4 Optimizacija	31
2.5 Statistički inverz	33
3 Primjeri u praksi	37
3.1 Dioda u solarnoj ćeliji	37
3.2 Hidrološki ciklus	42
Bibliografija	46

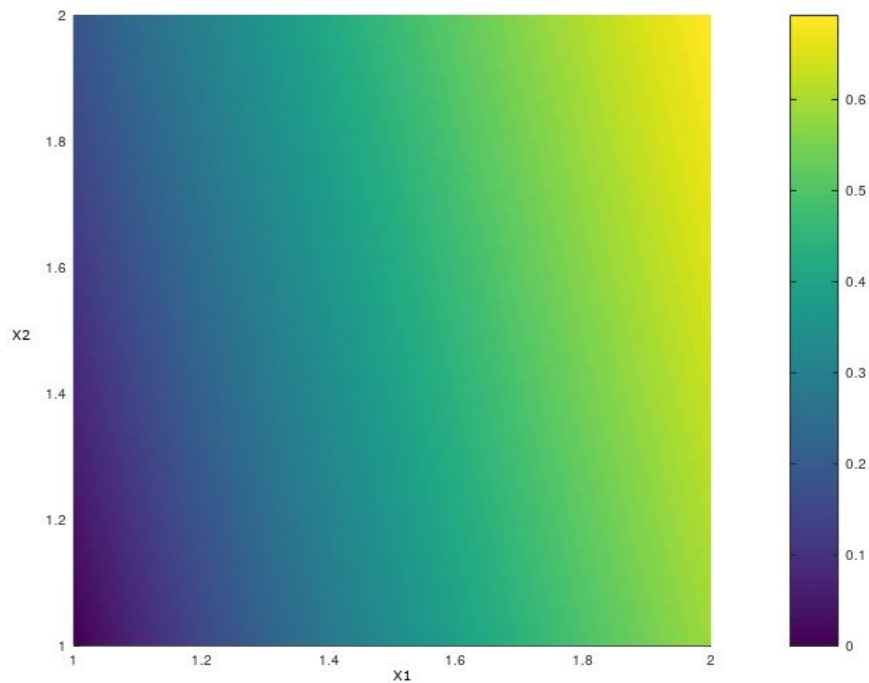
Uvod

Pretpostavimo da imamo funkciju koja ovisi o nekoliko parametara. Želja nam je proučiti kako se vrijednosti funkcije mijenjaju u odnosu na promjenu parametara. Ako nam je potrebno samo 10 testiranja po parametru kod funkcije s 10 parametara, dolazimo do brojke od 10^{10} testiranja. Ako nam je potrebna 1 sekunda po testiranju, cijela analiza će biti gotova tek za 317 godina. Zbog velikog broja parametara i ograničenih mogućnosti računala želimo reducirati dimenziju, odnosno smanjiti broj parametara.

Jedna od ideja je uzeti podskup parametara. Ako znamo koji parametri utječu na rješenje manje od ostalih, jednostavno ih kod analize zanemarimo. Time smo reducirali dimenziju domene. Međutim, kod modela s puno parametara određivanje željenog podskupa može biti dugotrajno i zahtjevno. Ako taj proces još malo produžimo, možemo dobiti puno bolji model. Uzmimo za primjer funkciju $f(x_1, x_2) = \log(0.8x_1 + 0.2x_2)$ definiranu na $[1, 2]^2$ prikazanu na slici 0.1. Uzmimo za korak $\Delta x = 0.1$ i računamo $f(1 + \Delta x, 1) = 0.0334$ te $f(1, 1 + \Delta x) = 0.0086$ zaokruženo na 4 decimale. Zbog $f(1, 1) = 0$, veću promjenu vrijednosti funkcije dobivamo kod povećanja x_1 nego kod x_2 . Ako tražimo podskup domene, zaključujemo da treba promatrati samo promjene varijable x_1 .

Umjesto traženja podskupa parametara, želja nam je pronaći potprostor parametara. Glavni cilj nam je pronaći linearne kombinacije parametara na kojima se vrijednost funkcije najviše mijenja. Ako su u linearnoj kombinaciji sve težine jednake nuli osim jedne, slijedi da se funkcija mijenja samo po jednom parametru. Time smo dobili generalizaciju traženja podskupa parametara. Drugi ekstremni slučaj je da dobijemo linearnu kombinaciju u kojoj su težine svih parametara približno jednake. Tada nismo uspjeli smanjiti broj parametara, ali smo dobili smjer po kojem se funkcija mijenja, odnosno reducirali smo dimenziju na jedan. Na primjeru funkcije prikazane na slici 0.1 vidimo da nema promjene u vrijednosti funkcije po smjeru $[-0.2, 0.8]$. Funkcija se najviše mijenja po smjeru $[0.8, 0.2]$, što je nama najzanimljiviji smjer za promatranje. Na danom jednostavnom primjeru jasna je razlika, odnosno prednost, traženja potprostora u odnosu na podskup parametara.

Traženje potprostora parametara je bolja i općenitija verzija reduciranja broja parametara od traženja podskupova istih, ali je i zahtjevnija. Jedan od problema je sama interpretacija linearne kombinacije parametara. Drugi je analiza promjene vrijednosti funkcije po dobivenim linearnim kombinacijama. Njih ćemo zvati aktivnim varijablama, dok dobiveni



Slika 0.1: Prikaz funkcije $f(x_1, x_2) = \log(0.8x_1 + 0.2x_2)$ definirane na $[1, 2]^2$

potprostor nazivamo aktivni potprostor.

U prvom poglavlju bavit ćemo se teorijskom pozadinom aktivnih potprostora. Precizno ćemo definirati aktivni potprostor i aktivne varijable te dati ocjene grešaka pri njihovom određivanju. Drugo poglavlje sadržava pregled nekoliko zanimljivih primjena redukcije dimenzije aktivnim potprostorima. Konačno, u trećem poglavlju, opisujemo nekoliko primjera iz prakse na kojima prikazujemo korisnost aktivnih potprostora.

Poglavlje 1

Teorijska pozadina

Za početak navodim osnovne pojmove radi lakšeg razumijevanja teksta. Neka je $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^m$ domena, tada funkciju zadajemo kao $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$. Neka x predstavlja parametre modela, odnosno varijable u domeni dane funkcije f . Vektor stupac $x = [x_1, \dots, x_m]^T$ poprima vrijednosti iz $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^m$. Dimenzija domene, odnosno broj parametara, je tada m . Pozitivnu težinsku funkciju parametara označimo s $\rho : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$. Pretpostavljamo da je integral funkcije ρ na \mathbb{R}^m jedan, kako bi imali funkciju gustoće. Ako je \mathcal{X} ograničen, tada je $\rho(x) \geq 0, \forall x \in \mathcal{X}$ te $\rho(x) = 0$ za $x \notin \mathcal{X}$. Pretpostavljamo da je funkcija f diferencijabilna i Lipschitz-neprekidna, gdje Lipschitz-neprekidnost implicira ograničenost gradijenta u Euklidskoj normi. Gradijent funkcije f označavamo s

$$\nabla_x f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_m}(x) \end{bmatrix}, \quad \|\nabla_x f(x)\| \leq L, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (1.1)$$

1.1 Svojstvene vrijednosti i vektori

Definicija 1.1.1. *Kažemo da je λ svojstvena vrijednost kvadratne matrice A ako postoji vektor $v, v \neq 0$, takav da vrijedi*

$$Av = \lambda v. \quad (1.2)$$

Vektor v nazivamo svojstveni vektor matrice A pridružen svojstvenoj vrijednosti λ .

Važno je naglasiti da vektor v mora biti netrivialan jer za svaki skalar λ vrijedi $A0 = \lambda 0$. Također, svojstveni vektor nije jedinstven. Ako je v svojstveni vektor, tada je i αv također svojstveni vektor pridružen istoj svojstvenoj vrijednosti kao i v , i to za svaki $\alpha \in \mathbb{R}$. Isto tako, svojstvena vrijednost može posjedovati i više linearno nezavisnih svojstvenih vektora. Za više informacija o svojstvenim vrijednostima i vektorima pogledajte [3].

Neka je A kvadratna dijagonalizabilna $n \times n$ matrica sa svojstvenim vektorima q_1, \dots, q_n . Tada se A može faktorizirati kao:

$$A = Q\Lambda Q^{-1}, \quad (1.3)$$

gdje je Q kvadratna $n \times n$ matrica čiji je i -ti stupac svojstveni vektor q_i od A , a Λ dijagonalna $n \times n$ matrica čiji su dijagonalni elementi pripadajuće svojstvene vrijednosti, $\Lambda_{ii} = \lambda_i$. Takav rastav zovemo svojstvena dekompozicija matrice A .

Teorem 1.1.2. *Za realnu simetričnu matricu A svojstvene vrijednosti su realne i svojstveni vektori se mogu izabrati tako da budu međusobno ortogonalni. Svojstvena dekompozicija je tada:*

$$A = Q\Lambda Q^T. \quad (1.4)$$

Neka je M $m \times n$ matrica. Tada je njena dekompozicija singularnih vrijednosti

$$M = U\Sigma V^*, \quad (1.5)$$

gdje je U $m \times m$ unitarna matrica, Σ $m \times n$ pravokutna dijagonalna matrica s nenegativnim realnim vrijednostima na dijagonali te V $n \times n$ unitarna matrica. Vrijednosti na dijagonali matrice Σ su singularne vrijednosti matrice M , dok su stupci matrice U i V lijevi, odnosno desni singularni vektori matrice M .

1.2 Osnovni pojmovi vjerojatnosti

Definicija 1.2.1. *Neka je $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ vjerojatnosni prostor. Slučajna varijabla na $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ je svaka funkcija $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ takva da vrijedi*

$$\{X \leq x\} = \{\omega \in \Omega : X(\omega) \leq x\} \in \mathcal{F}, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (1.6)$$

Definicija 1.2.2. *Funkcija distribucije slučajne varijable X je funkcija $F : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ definirana formulom*

$$F(x) = \mathbb{P}(X \leq x), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (1.7)$$

Definicija 1.2.3. *Slučajna varijabla $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ je apsolutno neprekidna ako postoji $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$ takva da za sve $x \in \mathbb{R}$ vrijedi*

$$F(x) = \mathbb{P}(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt. \quad (1.8)$$

Funkcija f se zove funkcija gustoće od X .

Definicija 1.2.4. Neka je X apsolutno neprekidna slučajna varijabla s funkcijom gustoće f . Ako je $\int_{-\infty}^{+\infty} |x|f(x) dx < \infty$, onda postoji matematičko očekivanje od X koje definiramo s

$$\mathbb{E}(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x) dx. \quad (1.9)$$

Za više informacija pogledati [8].

1.3 Definicija aktivnih potprostora

Neka je funkcija f zadana kao $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$, gdje je $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^m$. Pozitivnu težinsku funkciju parametara označimo s $\rho : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$. Pretpostavljamo da je integral funkcije ρ na \mathbb{R}^m jedan, kako bi imali funkciju gustoće. Tada je definicija matrice C

$$C = \int (\nabla_x f(x))(\nabla_x f(x))^T \rho dx. \quad (1.10)$$

Matricu C možemo shvatiti i kao očekivanje produkta gradijenata, odnosno

$$C = \mathbb{E}[(\nabla_x f)(\nabla_x f)^T]. \quad (1.11)$$

Svaki element matrice C , C_{ij} , je prosjek produkta parcijalnih derivacija

$$C_{ij} = \int \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \rho dx, \quad i, j = 1, \dots, m. \quad (1.12)$$

C je simetrična matrica veličine $m \times m$. Također, C je pozitivno semidefinitna matrica

$$v^T C v = \int (v^T (\nabla_x f))^2 \rho dx \geq 0, \quad \forall v \in \mathbb{R}^m. \quad (1.13)$$

Budući da je C simetrična, ima svojstvenu dekompoziciju s realnim svojstvenim vrijednostima i međusobno ortogonalnim svojstvenim vektorima

$$C = W \Lambda W^T, \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m), \quad \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_m \geq 0, \quad (1.14)$$

gdje je W $m \times m$ ortogonalna matrica čiji su stupci $\{w_1, \dots, w_m\}$ svojstveni vektori matrice C . Sljedeća lema povezuje gradijent funkcije f i svojstvenu dekompoziciju matrice C .

Lema 1.3.1.

$$\int ((\nabla_x f)^T w_i)^2 \rho dx = \lambda_i, \quad i = 1, \dots, m. \quad (1.15)$$

Dokaz. Po definiciji matrice C i (1.13) slijedi

$$\lambda_i = w_i^T C w_i = w_i^T \left(\int (\nabla_x f(x)) (\nabla_x f(x))^T \rho dx \right) w_i = \int ((\nabla_x f)^T w_i)^2 \rho dx. \quad (1.16)$$

□

Napomena 1.3.2. *Prethodnu lemu možemo iskazati i pomoću očekivanja:*

$$\mathbb{E} [((\nabla_x f)^T w_i)^2] = \lambda_i. \quad (1.17)$$

Lema 1.3.1 otkriva zanimljivu poveznicu svojstvenih vrijednosti matrice C i vrijednosti funkcije f . Na primjer, ako je neka od svojstvenih vrijednosti λ_i jednaka nula, tada je i kvadrat srednje promjene od f duž svojstvenog vektora w_i nula. Jer je f neprekidna, $(\nabla_x f)^T w_i$ je nula na cijeloj domeni \mathcal{X} , odnosno funkcija je konstantna duž smjera w_i .

Svojstvene vrijednosti smo s razlogom poredali u padajućem poretku. Time smo automatski poredali i pripadne svojstvene vektore. Iz leme 1.3.1 vidimo da se funkcija f više mijenja duž smjerova određenih svojstvenim vektorima većih svojstvenih vrijednosti. Odnosno, odvojimo li svojstvene vrijednosti na dva skupa, svojstveni vektori prvog skupa će mijenjati funkciju u prosjeku više nego oni iz drugog skupa. Odvojimo svojstvene vrijednosti i svojstvene vektore

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \Lambda_1 & \\ & \Lambda_2 \end{bmatrix}, \quad W = [W_1 \quad W_2], \quad (1.18)$$

gdje je $\Lambda_1 = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, $n < m$, i W_1 sadrži prvih n svojstvenih vektora. Definirajmo nove varijable y i z kao

$$y = W_1^T x \in \mathbb{R}^n, \quad z = W_2^T x \in \mathbb{R}^{m-n}. \quad (1.19)$$

Svaki $x \in \mathbb{R}^m$ se može zapisati kao linearna kombinacija y i z

$$x = W W^T x = W_1 W_1^T x + W_2 W_2^T x = W_1 y + W_2 z. \quad (1.20)$$

Rastav (1.20) u obliku $f(x) = f(W_1 y + W_2 z)$ možemo koristiti kod računanja gradijenta po y ili z

$$\nabla_y f(x) = \nabla_y f(W_1 y + W_2 z) = W_1^T \nabla_x f(W_1 y + W_2 z) = W_1^T \nabla_x f(x). \quad (1.21)$$

Također, analogno dobivamo $\nabla_z f(x) = W_2^T \nabla_x f(x)$. Sljedeća lema povezuje svojstvene vrijednosti matrice C s prosjekom skalarnog produkta gradijenta sa samim sobom.

Lema 1.3.3.

$$\int (\nabla_y f)^T (\nabla_y f) \rho dx = \lambda_1 + \dots + \lambda_n, \quad (1.22)$$

$$\int (\nabla_z f)^T (\nabla_z f) \rho dx = \lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m. \quad (1.23)$$

Dokaz.

$$\begin{aligned}
\int (\nabla_y f)^T (\nabla_y f) \rho \, dx &= \int \operatorname{tr}((\nabla_y f)(\nabla_y f)^T) \rho \, dx \\
&= \operatorname{tr} \left(\int (\nabla_y f)(\nabla_y f)^T \rho \, dx \right) \\
&= \operatorname{tr} \left(W_1^T \left(\int (\nabla_x f)(\nabla_x f)^T \rho \, dx \right) W_1 \right) \quad (1.24) \\
&= \operatorname{tr}(W_1^T C W_1) \\
&= \operatorname{tr}(\Lambda_1) \\
&= \lambda_1 + \cdots + \lambda_n.
\end{aligned}$$

U dokazu smo sa $\operatorname{tr}(\cdot)$ označili trag kvadratne matrice, odnosno zbroj elemenata na glavnoj dijagonali. Druga jednakost slijedi iz linearnosti traga, treća iz (1.21) te četvrta iz definicije matrice C . Ostale su trivijalne. Dokaz druge tvrdnje leme dobiva se analogno. \square

Napomena 1.3.4. *Prethodnu lemu možemo iskazati i pomoću očekivanja:*

$$\mathbb{E}[(\nabla_y f)^T (\nabla_y f)] = \lambda_1 + \cdots + \lambda_n, \quad (1.25)$$

$$\mathbb{E}[(\nabla_z f)^T (\nabla_z f)] = \lambda_{n+1} + \cdots + \lambda_m. \quad (1.26)$$

Zaključak nakon leme 1.3.1 vrijedi i ovdje. Pretpostavimo da vrijedi $\lambda_{n+1} = \cdots = \lambda_m = 0$. Tada je gradijent po z nula na cijeloj domeni. Takve funkcije zovemo z -invarijantne, odnosno promjena varijable z ne mijenja njihovu vrijednost.

Propozicija 1.3.5. *Neka je f z -invarijantna, odnosno, neka je $\lambda_{n+1} = \cdots = \lambda_m = 0$. Tada je za svake dvije točke x_1, x_2 iz interiora od \mathcal{X} takve da je $W_1^T x_1 = W_1^T x_2$, $f(x_1) = f(x_2)$ i $\nabla_x f(x_1) = \nabla_x f(x_2)$.*

Dokaz. Gradijent $\nabla_z f = 0$ na cijelom \mathcal{X} implicira $f(x_1) = f(x_2)$. Da bi pokazali da su gradijenti jednaki, uzmimo proizvoljan $c \in \mathbb{R}^n$ te definirajmo:

$$x'_1 = x_1 + \epsilon c, \quad x'_2 = x_2 + \epsilon c, \quad (1.27)$$

gdje je $\epsilon > 0$ odabran takav da su $x'_1, x'_2 \in \mathcal{X}$. Pošto je $W_1^T x'_1 = W_1^T x'_2$ tada vrijedi $f(x'_1) = f(x'_2)$. Tada

$$c^T (\nabla_x f(x_1) - \nabla_x f(x_2)) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [(f(x'_1) - f(x_1)) - (f(x'_2) - f(x_2))] = 0, \quad (1.28)$$

odnosno, $\nabla_x f(x_1) = \nabla_x f(x_2)$. \square

Prethodna propozicija pokazuje da kod dvije, općenito različite, točke iz domene \mathcal{X} te z -invarijantne funkcije nije jednaka samo njihova funkcijska vrijednost, već su jednaki i gradijenti po varijabli x .

Lema 1.3.3 nam kaže da u prosjeku, promjena aktivnih varijabli y mijenja vrijednost funkcije f više nego promjena neaktivnih varijabli z . Sada možemo definirati aktivni potprostor i aktivne varijable.

Definicija 1.3.6. *Neka je C kvadratna matrica definirana kao u (1.10) te $C = W\Lambda W^T$ njena svojstvena dekompozicija. Neka je $W = [W_1 \ W_2]$ kao u (1.18). Aktivni potprostor je slika svojstvenih vektora u W_1 . Neaktivni potprostor je slika preostalih svojstvenih vektora iz W_2 . Sukladno (1.19) varijable y nazivamo aktivne varijable, dok z nazivamo neaktivne varijable.*

Napomena 1.3.7. *Aktivni potprostor nije nužno podskup domene, odnosno vektori iz slike od W_1 nisu nužno paralelni s koordinatnim osima.*

1.4 Određivanje aktivnih potprostora

Za primjenu aktivnih potprostora nužne su nam svojstvene vrijednosti i svojstveni vektori koje dobivamo iz matrice C . Elementi matrice C su m -dimenzionalni integrali, stoga je određivanje svojstvene dekompozicije matrice složen i netrivialan postupak koji sadrži složenu integraciju. Numeričke metode su uglavnom nepraktične kod većeg broja varijabli te stoga koristimo metodu slučajnih uzoraka da bi aproksimirali svojstvene vrijednosti i svojstvene vektore matrice C .

Ako je uzimanje neovisnih uzoraka pomoću funkcije gustoće ρ jednostavno, tada al-

Algoritam 1 Metoda slučajnih uzoraka za određivanje aktivnog potprostora

1. Odaberi M neovisnih uzoraka x_j ovisno o funkciji gustoće ρ .
2. Za svaki x_j , izračunaj $\nabla_x f_j = \nabla_x f(x_j)$.
3. Aproksimiraj

$$C \approx \hat{C} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M (\nabla_x f_j)(\nabla_x f_j)^T. \quad (1.29)$$

4. Izračunaj svojstvenu dekompoziciju $\hat{C} = \hat{W}\hat{\Lambda}\hat{W}^T$.
-

goritam 1 predstavlja dobru metodu uzimanja slučajnih uzoraka za određivanje svojstvenih

vrijednosti i svojstvenih vektora.

Zadnji korak algoritma ekvivalentan je računanju dekompozicije singularnih vrijednosti matrice

$$\frac{1}{\sqrt{M}} \begin{bmatrix} \nabla_x f_1 & \dots & \nabla_x f_M \end{bmatrix} = \hat{W} \sqrt{\hat{\Lambda}} \hat{V}, \quad (1.30)$$

gdje su singularne vrijednosti matrice korijeni svojstvenih vrijednosti, a lijevi singularni vektori svojstveni vektori.

Kod mnogih primjera, broj parametara m je dovoljno malen da bi računanje dekompozicije singularnih vrijednosti bilo brže od računanje gradijenta M puta (vrijednost broja M objašnjena je u poglavlju 1.5). Zbog toga, želimo znati koliko velik mora biti M , da bi dobivene aproksimacije $\hat{\Lambda}$ i \hat{W} bile dovoljno blizu pravim vrijednostima Λ i W . Za dobivanje tih rezultata koristimo sljedeću notaciju. Notacije $\lambda_k(\cdot)$ i $\lambda_{\max}(\cdot)$ označavaju k -tu i maksimalnu svojstvenu vrijednost matrice C . Sve vektorske norme su euklidske, dok su matrične norme spektralne. Također, $a = \Omega(b)$ znači da je a ograničen odozdo s konstantom pomnoženom s b . Neke teoreme navodim bez dokaza. Za više informacija o teoremima te za detaljne dokaze pogledati [4].

Teorem 1.4.1. *Pretpostavimo da je $\|\nabla_x f\| \leq L$, $x \in \mathcal{X}$ te M broj izračunatih gradijenata. Tada za $\epsilon \in (0, 1]$ vrijedi*

$$\mathbb{P}[\hat{\lambda}_k \geq (1 + \epsilon)\lambda_k] \leq (m - k + 1) \exp\left(\frac{-M\lambda_k\epsilon^2}{4L^2}\right), \quad (1.31)$$

$$\mathbb{P}[\hat{\lambda}_k \leq (1 - \epsilon)\lambda_k] \leq k \exp\left(\frac{-M\lambda_k^2\epsilon^2}{4\lambda_1 L^2}\right). \quad (1.32)$$

Koristimo ovaj teorem kako bi dobili donju granicu za broj uzoraka gradijenata M potrebnih za relativnu točnost svojstvenih vrijednosti ϵ . Tu granicu dobivamo iz sljedećeg korolar dobivenog iz prethodnog teorema.

Korolar 1.4.2. *Neka je $\chi_k = \lambda_1/\lambda_k$. Tada za $\epsilon \in (0, 1]$, ako je*

$$M = \Omega\left(\frac{L^2\chi_k^2}{\lambda_1\epsilon^2} \log(m)\right) \quad (1.33)$$

tada vrijedi $|\hat{\lambda}_k - \lambda_k| \leq \epsilon\lambda_k$ s velikom vjerojatnošću.

Dokaz. Koristeći (1.31), ako vrijedi

$$M \geq \frac{4L^2}{\lambda_k\epsilon^2} (\beta + 1) \log(m) \geq \frac{4L^2}{\lambda_k\epsilon^2} (\beta \log(m) + \log(m - k + 1)), \quad (1.34)$$

tada

$$\mathbb{P}[\hat{\lambda}_k \geq (1 + \epsilon)\lambda_k] \leq m^{-\beta}. \quad (1.35)$$

Slično i za (1.32), ako vrijedi

$$M \geq \frac{4L^2\lambda_1}{\lambda_k^2\epsilon^2} (\beta + 1) \log(m) \geq \frac{4L^2\lambda_1}{\lambda_k^2\epsilon^2} (\beta \log(m) + \log(k)), \quad (1.36)$$

tada

$$\mathbb{P}[\hat{\lambda}_k \leq (1 - \epsilon)\lambda_k] \leq m^{-\beta}. \quad (1.37)$$

Uzimanjem $\chi_k = \lambda_1/\lambda_k$ te

$$M \geq (\beta + 1) \frac{4L^2\chi_k^2}{\lambda_1\epsilon^2} \log(m) \quad (1.38)$$

zadovoljavamo oba uvjeta, pa tako i tvrdnju korolar. \square

Vrijednosti L , χ , λ_1 i λ_k su vrijednosti funkcije f , no njih nužno ne znamo unaprijed. Logaritamski rast broja M u odnosu na rast dimenzije m je za nas povoljan.

Teorem 1.4.3. *Pretpostavimo da je $\|\nabla_x f\| \leq L$, $x \in \mathcal{X}$ te M broj izračunatih gradijenata. Tada za $\epsilon \in (0, 1]$ vrijedi*

$$\mathbb{P}[\|\hat{C} - C\| \geq \epsilon\|C\|] \leq 2m \exp\left(\frac{-3M\lambda_1\epsilon^2}{8L^2}\right). \quad (1.39)$$

Koristimo ovaj teorem kako bi dobili donju granicu za broj uzoraka potrebnih za relativnu točnost ϵ između matrice C i njene aproksimacije \hat{C} . Tu granicu dobivamo iz sljedećeg korolar dobivenog iz prethodnog teorema.

Korolar 1.4.4. *Za $\epsilon \in (0, 1]$, ako je*

$$M = \Omega\left(\frac{L^2}{\lambda_1\epsilon^2} \log(m)\right) \quad (1.40)$$

tada vrijedi $\|\hat{C} - C\| \leq \epsilon\|C\|$ s velikom vjerojatnošću.

Ova granica ponovno ovisi o vrijednostima L i λ_1 , određenima funkcijom f , koje unaprijed općenito ne znamo. Kako bi kontrolirali grešku u dobivenom potprostoru, kombiniramo korolar 1.4.4 sa standardnim procjenama greške potprostora. Opisujemo tu grešku kao udaljenost potprostora određenog slikom W_1 i potprostora određenog slikom \hat{W}_1 . Definicija je

$$\text{dist}(\text{ran}(W_1), \text{ran}(\hat{W}_1)) = \|W_1 W_1^T - \hat{W}_1 \hat{W}_1^T\| = \|W_1^T \hat{W}_2\|, \quad (1.41)$$

gdje $\text{ran}(\cdot)$ označava sliku matrice.

Sljedeća lema daje nam gornju granicu na udaljenost pravog aktivnog potprostora i njegove aproksimacije. Koristimo ju u korolaru 1.4.6 koji nam daje željeni oblik ocjene udaljenosti potprostora.

Lema 1.4.5. *Neka su C i $\hat{C} = C + E$ simetrične $m \times m$ matrice sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ i $\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_m$, te pripadnim svojstvenim vektorima sadržanim u matricama*

$$W = [W_1 \ W_2], \quad \hat{W} = [\hat{W}_1 \ \hat{W}_2], \quad (1.42)$$

gdje W_1 i \hat{W}_1 sadrže prvih $n < m$ stupaca. Ako je $\lambda_n > \lambda_{n+1}$ i

$$\|E\| \leq \frac{\lambda_n - \lambda_{n+1}}{5}, \quad (1.43)$$

tada je

$$\text{dist}(\text{ran}(W_1), \text{ran}(\hat{W}_1)) \leq \frac{4\|W_2^T E W_1\|}{\lambda_n - \lambda_{n+1}}. \quad (1.44)$$

Korolar 1.4.6. *Neka je $\epsilon > 0$ takav da*

$$\epsilon \leq \frac{\lambda_n - \lambda_{n+1}}{5\lambda_1}, \quad (1.45)$$

i M odabran kao u 1.4.4. Tada je s velikom vjerojatnošću

$$\text{dist}(\text{ran}(W_1), \text{ran}(\hat{W}_1)) \leq \frac{4\lambda_1\epsilon}{\lambda_n - \lambda_{n+1}}. \quad (1.46)$$

Gornji korolar nam govori da kontrola svojstvenih vrijednosti implicira kontrolu potprostora generiranog svojstvenim vektorima. Greška dobivenog potprostora je inverzno proporcionalna pripadajućoj udaljenosti između svojstvenih vrijednosti. To znači da ako je udaljenost između druge i treće svojstvene vrijednosti veća nego udaljenost između prve i druge svojstvene vrijednosti, tada je procjena dvodimenzionalnog aktivnog potprostora bolja nego procjena jednodimenzionalnog aktivnog potprostora.

Aproksimacija gradijenata

Gradijent je često teško odrediti kod funkcija s puno parametara. Aproksimacija konačnim diferencijama je uglavnom najbolji alat za određivanje gradijenata, za ne tako veliki broj ulaznih parametara m . Cilj nam je odrediti grešku procijenjenih svojstvenih vrijednosti u slučaju kada je gradijent određen sa svojom greškom. Neka je $g(x)$ aproksimacija gradijenta funkcije f u točki $x \in \mathcal{X}$. Pretpostavljamo da vrijedi

$$\|g(x) - \nabla_x f(x)\| \leq \sqrt{m} \gamma_h, \quad x \in \mathcal{X}, \quad (1.47)$$

gdje je

$$\lim_{h \rightarrow 0} \gamma_h = 0. \quad (1.48)$$

Parametar h može biti parametar konačnih diferencija ili korak mreže u diskretizaciji.

Definirajmo simetričnu, pozitivno semidefinitnu matricu G i njenu svojstvenu dekompoziciju kao

$$G = \int g g^T \rho dx = U \Theta U^T, \quad \Theta = \text{diag}(\theta_1, \dots, \theta_m), \quad (1.49)$$

i označimo njenu aproksimaciju slučajnim uzorcima kao

$$\hat{G} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M g_j g_j^T = \hat{U} \hat{\Theta} \hat{U}^T, \quad \hat{\Theta} = \text{diag}(\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_m), \quad (1.50)$$

gdje je $g_j = g(x_j)$ za x_j izabranog slučajno po funkciji gustoće ρ . S navedenim definicijama možemo iskazati sljedeću lemu.

Lema 1.4.7.

$$\|\hat{C} - \hat{G}\| \leq (\sqrt{m} \gamma_h + 2L) \sqrt{m} \gamma_h \quad (1.51)$$

Dokaz. Neka je $g = g(x)$ i $\nabla_x f = \nabla_x f(x)$. Tada vrijedi

$$\|g + \nabla_x f\| = \|g - \nabla_x f + 2\nabla_x f\| \leq \|g - \nabla_x f\| + 2\|\nabla_x f\| \leq \sqrt{m} \gamma_h + 2L. \quad (1.52)$$

Osim toga,

$$\begin{aligned} \|g g^T - \nabla_x f \nabla_x f^T\| &= \frac{1}{2} \|(g + \nabla_x f)(g - \nabla_x f)^T + (g - \nabla_x f)(g + \nabla_x f)^T\| \\ &\leq \|(g + \nabla_x f)(g - \nabla_x f)^T\| \\ &\leq (\sqrt{m} \gamma_h + 2L) \sqrt{m} \gamma_h. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Tada

$$\begin{aligned} \|\hat{G} - \hat{C}\| &= \left\| \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M g_j g_j^T - \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \nabla_x f_j \nabla_x f_j^T \right\| \\ &\leq \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \|g_j g_j^T - \nabla_x f_j \nabla_x f_j^T\| \\ &\leq \sqrt{m} \gamma_h (\sqrt{m} \gamma_h + 2L). \end{aligned} \quad (1.54)$$

□

Prijašnja lema daje nam gornju granicu norme između matrica \hat{C} i \hat{G} . Kombiniramo lemu 1.4.7 i korolar 1.4.4 za proučavanje granice na greške svojstvenih vrijednosti dobivenih metodom slučajnih uzoraka s aproksimiranim gradijentima.

Teorem 1.4.8. *Za $\epsilon \in (0, 1]$, ako je M odabran kao u korolaru 1.4.4, je razlika između prave svojstvene vrijednosti λ_k i svojstvene vrijednosti dobivene metodom slučajnih uzoraka za aproksimaciju gradijenata $\hat{\theta}_k$ ograničena kao*

$$|\lambda_k - \hat{\theta}_k| \leq \epsilon \lambda_k + \sqrt{m} \gamma_h (\sqrt{m} \gamma_h + 2L) \quad (1.55)$$

s velikom vjerojatnošću.

Dokaz. Primjetimo da

$$|\lambda_k - \hat{\theta}_k| \leq |\lambda_k - \hat{\lambda}_k| + |\hat{\lambda}_k - \hat{\theta}_k|. \quad (1.56)$$

Primjenimo korolar 1.4.4 na prvi član te lemu 1.4.7 na drugi član i dobivamo

$$|\lambda_k - \hat{\lambda}_k| = \|\lambda_k(C) - \lambda_k(\hat{C})\| \leq \|C - \hat{C}\| \leq \epsilon \lambda_k, \quad (1.57)$$

$$|\hat{\theta}_k - \hat{\lambda}_k| = \|\lambda_k(\hat{G}) - \lambda_k(\hat{C})\| \leq \|\hat{G} - \hat{C}\| \leq \sqrt{m} \gamma_h (\sqrt{m} \gamma_h + 2L), \quad (1.58)$$

iz čega slijedi tvrdnja teorema. \square

Postoje dva uzroka greške u gornjem teoremu: greška metode slučajnih uzoraka i greška aproksimacije gradijenta. Greška aproksimacije gradijenta u procjeni svojstvene vrijednosti ide u nulu istom brzinom kao i greška u metodi slučajnih uzoraka. Proučimo grešku aktivnih potprostora dobivenih metodom slučajnih uzoraka i aproksimacijom gradijenata.

Teorem 1.4.9. *Odaberimo ϵ kao u korolaru 1.4.6, i odaberimo M tako da zadovoljava korolare 1.4.6 i 1.4.2 za $(n + 1)$ -vu svojstvenu vrijednost. Odaberimo h dovoljno malen tako da vrijedi*

$$\sqrt{m} \gamma_h (\sqrt{m} \gamma_h + 2L) \leq \frac{\hat{\lambda}_n - \hat{\lambda}_{n+1}}{5}. \quad (1.59)$$

Tada je udaljenost aktivnog potprostora i procijenjenog aktivnog potprostora ograničena kao

$$\text{dist}(\text{ran}(\hat{U}_1), \text{ran}(W_1)) \leq \frac{4 \sqrt{m} \gamma_h (\sqrt{m} \gamma_h + 2L)}{(1 - \epsilon)\lambda_n - (1 + \epsilon)\lambda_{n+1}} + \frac{4\lambda_1 \epsilon}{\lambda_n - \lambda_{n+1}} \quad (1.60)$$

s velikom vjerojatnošću.

Dokaz. Prvo,

$$\text{dist}(\text{ran}(\hat{U}_1), \text{ran}(W_1)) \leq \text{dist}(\text{ran}(\hat{U}_1), \text{ran}(\hat{W}_1)) + \text{dist}(\text{ran}(\hat{W}_1), \text{ran}(W_1)). \quad (1.61)$$

Drugi član je ograničen u korolaru 1.4.6 pod pretpostavkom o M i ϵ . Po pretpostavci (1.59) na h , lema 1.4.5 implicira ograničenost prvog člana kao

$$\text{dist}(\text{ran}(\hat{U}_1), \text{ran}(\hat{W}_1)) \leq \frac{4\|\hat{G} - \hat{C}\|}{\hat{\lambda}_n - \hat{\lambda}_{n+1}}. \quad (1.62)$$

Za M dovoljno velik da zadovolji korolar 1.4.2, $|\hat{\lambda}_n - \lambda_n| \leq \epsilon\lambda_n$ i $|\hat{\lambda}_{n+1} - \lambda_{n+1}| \leq \epsilon\lambda_{n+1}$ s velikom vjerojatnošću. Tada

$$\begin{aligned} \lambda_n - \lambda_{n+1} &= |\lambda_n - \lambda_{n+1}| \\ &\leq |\lambda_n - \hat{\lambda}_n| + |\hat{\lambda}_{n+1} - \lambda_{n+1}| + (\hat{\lambda}_n - \hat{\lambda}_{n+1}) \\ &\leq \epsilon\lambda_n + \epsilon\lambda_{n+1} + (\hat{\lambda}_n - \hat{\lambda}_{n+1}). \end{aligned} \quad (1.63)$$

Iz čega slijedi

$$\hat{\lambda}_n - \hat{\lambda}_{n+1} \geq (1 - \epsilon)\lambda_n - (1 + \epsilon)\lambda_{n+1}. \quad (1.64)$$

Kombiniranjem s granicom iz leme 1.4.7 dobivamo traženi rezultat. \square

Svojtvene vrijednosti i svojstveni vektori aproksimirani metodom slučajnih uzoraka i aproksimiranih gradijenata se dobro ponašaju i zanimljivi su nam za proučavanje.

Monte Carlo metoda

Monte Carlo metoda je naziv za širok spektar metoda u matematici koje koriste slučajne brojeve pri rješavanju različitih problema. Najčešće ih u matematici koristimo kod problema čije se rješenje ne može odrediti analitički ili numerički algoritam nije dovoljno učinkovit.

Kao početni primjer prikazimo korištenje *Monte Carlo* metode za računanje broja π . Zamislimo da se u kvadratu stranice $2r$ nalazi krug polumjera r . Vjerojatnost da se slučajno odabrana točka unutar kvadrata nalazi i unutar kruga jednaka je površini kruga podijeljenoj s površinom kvadrata, odnosno $\pi/4$. Odredimo taj broj *Monte Carlo* metodom. Uzmimo unaprijed zadani broj k slučajno odabranih točaka unutar kvadrata te odredimo broj tih točaka unutar kruga. Povećanjem broja k , omjer broja točaka unutar kruga i ukupnog broja točaka teži prema $\pi/4$.

Pokažimo to i na primjeru. Korištenjem jednostavnog koda u MATLAB-u za uzorak od 100 točaka dobivamo rezultat $\pi = 3.28$. Na uzorku od 1000 točaka dobivamo $\pi = 3.108$. Za 10000 točaka je $\pi = 3.1216$. Na kraju, za 100000 točaka dobiveni rezultat je $\pi = 3.14268$. Vidimo kako metoda povećanjem uzorka konvergira prema broju π .

U ostatku ovog poglavlja bavimo se *Monte Carlo* integracijom. Tom metodom rješavamo integrale više varijabli nad domenom Ω . Neka je

$$V = \int_{\Omega} dx \quad (1.65)$$

volumen domene Ω . Odaberemo n točaka x_1, \dots, x_n iz domene Ω . Integral

$$I = \int_{\Omega} f(x) dx \quad (1.66)$$

možemo aproksimirati kao

$$I \approx \hat{I} = \frac{V}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i). \quad (1.67)$$

Zbog zakona velikih brojeva vrijedi

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{I} = I. \quad (1.68)$$

Za više informacija o *Monte Carlo* integraciji te ocjeni na grešku pogledati [2].

1.5 Iskustvo iz prakse

U prošlom poglavlju odredili smo ocjene grešaka kod određivanja aktivnih potprostora. Te ocjene su dobra polazna točka za daljnja proučavanja, ali je uvijek dobro vidjeti i kako se ponašaju na primjerima u praksi. Mnoge vrijednosti koje smo koristili za određivanje ocjena ne znamo unaprijed, na primjer najveću normu gradijenta L ili prave svojstvene vrijednosti matrice C . U ovom poglavlju bavit ćemo se zaključcima dobivenim iz praktičnih primjera kombiniranim s dobivenim teoretskim rezultatima.

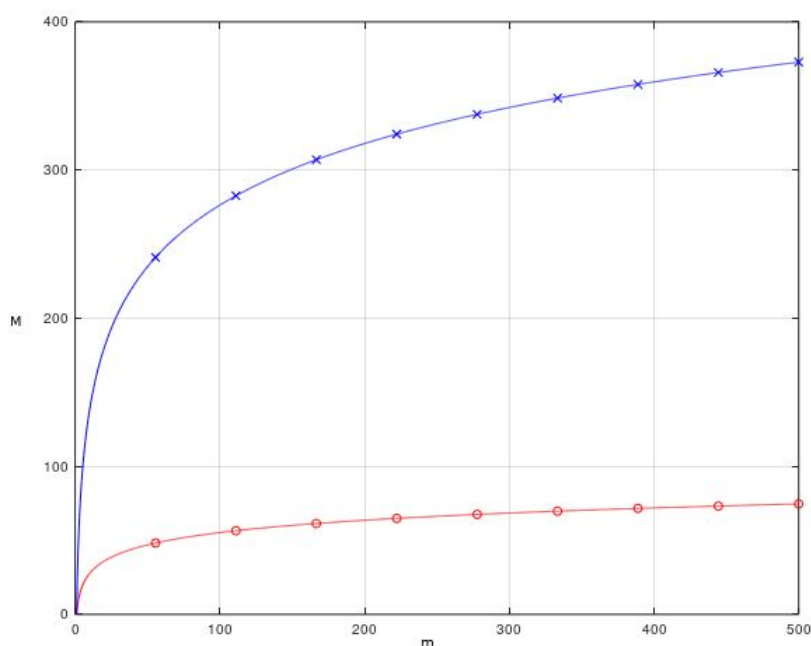
Svojstvene vrijednosti procijenimo algoritmom 1. Za aproksimaciju prvih k svojstvenih vrijednosti matrice C dimenzija $m \times m$ koristimo M neovisnih slučajnih uzoraka gradijenata po formuli

$$M = \alpha k \log(m). \quad (1.69)$$

Konstantu α biramo između 2 i 10. Ona je faktor koji ograničava unaprijed nepoznate vrijednosti koje smo dobili pri teoretskom proučavanju. Moguće je da taj faktor bude i veći od 10. Ali isto tako, i same dobivene granice mogu biti i strože, stoga je tako odabrani α dovoljno dobar kod primjera iz prakse. Broj k predstavlja prvih k svojstvenih vrijednosti između kojih tražimo što veće razlike radi boljeg određivanja aktivnog potprostora. Član $\log(m)$ dolazi iz teorema 1.4.1. Na slici 1.1 je prikazana vrijednost M kao funkcija od m za $k = 6$ u odnosu na $\alpha = 2$ i $\alpha = 10$.

***Bootstrap* metoda**

Bootstrap metoda je naziv za metodu u statistici kojom se određuju svojstva ukupne populacije kao srednja vrijednost ili standardna devijacija. Metoda se zasniva na uzimanju



Slika 1.1: Prikaz vrijednosti M kao funkcije od m za $k = 6$ u odnosu na $\alpha = 2$ (donja krivulja) i $\alpha = 10$ (gornja krivulja).

uzorka iz ukupne populacije te njegovog proučavanja. Naravno, isti član populacije može biti izabran u više uzoraka. Na svakom se uzorku izračuna tražena vrijednost te se na kraju uzima prosjek dobivenih vrijednosti. Točnost dobivenih podataka se povećava uzimanjem više uzoraka te uzimanjem većih uzoraka. Naravno, veličina i broj uzoraka ovisi kako o danoj populaciji tako i o dostupnim resursima za obradu podataka. *Bootstrap* metoda koristi se kod uzoraka kod kojih ne znamo distribuciju ili je egzaktne vrijednosti teško odrediti.

Pri određivanju točnosti izračunatih i stvarnih svojstvenih vrijednosti te aktivnih potprostora koristimo *bootstrap* metodu. Njome dobivamo standardnu grešku te intervale pouzdanosti koje nazivamo *bootstrap* intervalima. Za *bootstrap* metodu koristimo algoritam 2.

Bootstrap metoda računa M_{boot} svojstvenih dekompozicija. Vrijednosti $\hat{\Lambda}_i^*$ i e_i^* pomažu kod određivanja točnosti procjena svojstvenih vrijednosti i aktivnih potprostora.

Kao u korolaru 1.4.6, greška u procijenjenom aktivnom potprostoru inverzno ovisi o razlici svojstvenih vrijednosti. Zato je za točno određivanje aktivnih potprostora nužno naći što veću razliku između svojstvenih vrijednosti. Na primjer, ako je razlika između četvrte i pete svojstvene vrijednosti veća nego razlika između treće i četvrte, tada će četverodimenzionalan aktivan potprostor biti bolji od trodimenzionalnog. Jedan od načina

Algoritam 2 *Bootstrap* metoda za određivanje varijabilnosti svojstvenih vrijednosti i aktivnih potprostora

1. Izračunaj i spremi gradijente $\nabla_x f_1, \dots, \nabla_x f_m$ te svojstvene vrijednosti $\hat{\Lambda}$ i svojstvene vektore \hat{W} iz algoritma 1.
2. Odaberi M_{boot} kao broj *bootstrap* uzoraka između 100 i 10000. Za $i = 1$ do $i = M_{boot}$ radi sljedeće:

a) Odaberi cijeli broj j_k između 1 i M za $k = 1, \dots, M$.

b) Izračunaj *bootstrap* kopije \hat{C}_i^* kao

$$\hat{C}_i^* = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M (\nabla_x f_{j_k})(\nabla_x f_{j_k})^T. \quad (1.70)$$

c) Izračunaj svojstvenu dekompoziciju $\hat{C}_i^* = \hat{W}_i^* \hat{\Lambda}_i^* (\hat{W}_i^*)^T$.

d) Za poseban izbor aktivnog potprostora dimenzije n odredi

$$e_i^* = \text{dist}(\text{ran}(\hat{W}_i), \text{ran}(\hat{W}_{i,1}^*)), \quad (1.71)$$

gdje $\hat{W}_{i,1}^*$ sadrži prvih n stupaca od \hat{W}_i^* .

izbora dimenzije n aktivnog potprostora je traženje unaprijed određene granice između kvocijenta zbroja prvih n svojstvenih vrijednosti i ukupnog zbroja svojstvenih vrijednosti.

Bootstrap metoda također pomaže kod proučavanja varijabilnosti aktivnog potprostora. Za svaku kopiju svojstvenih vektora \hat{W}_i^* računamo $\text{dist}(\text{ran}(\hat{W}_i), \text{ran}(\hat{W}_{i,1}^*))$ definiranu u (1.41), gdje $\hat{W}_{i,1}^*$ sadrži prvih n stupaca od \hat{W}_i^* . *Bootstrap* interval nam pomaže kod određivanja stabilnosti aktivnog potprostora. Udaljenost između potprostora je ograničena odozgo s 1, stoga ako dobijemo vrijednosti veće od 1 znamo da je dobiveni aktivni potprostor loše aproksimiran.

Za kraj slijedi algoritam 3, modifikacija algoritma 1. Pretpostavljamo da se korisnik već opredijelio za broj svojstvenih vrijednosti k koje promatra. Ako u koraku 5. nije vidljiva značajna razlika između svojstvenih vrijednosti, tada je vjerojatno broj k premal. Ponavljanjem algoritma za veći k vjerojatno dolazimo do boljeg rješenja. Također, ako je *bootstrap* interval udaljenosti potprostora veći od 1, tada je aktivni potprostor loše aproksimiran. Koristimo *bootstrap* metodu za proučavanje varijabilnosti jer pretpostavljamo da je uzimanje više gradijenata zahtjevnije. Ako to nije slučaj, odnosno ako možemo bez

Algoritam 3 Monte Carlo procjena aktivnog potprostora s *bootstrap* intervalima

1. Odaberi $M = \alpha k \log(m)$, za α između 2 i 10.
2. Odaberi M slučajnih uzoraka x_j sukladno funkciji gustoće ρ , te za svaki x_j izračunaj $\nabla_x f_j = \nabla_x f(x_j)$.

3. Odredi

$$\hat{C} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M (\nabla_x f_j)(\nabla_x f_j)^T = \hat{W} \hat{\Lambda} \hat{W}^T. \quad (1.72)$$

4. Koristeći *bootstrap* metodu, odnosno algoritam 2, odredi kopije

$$\hat{C}_i^* = \hat{W}_i^* \hat{\Lambda}_i^* (\hat{W}_i^*)^T. \quad (1.73)$$

5. Prikaži *bootstrap* intervale svojstvenih vrijednosti i pronađi što veću razliku između njih.
 6. Odaberi dimenziju n aktivnog potprostora sukladno najvećoj razlici između svojstvenih vrijednosti.
 7. Koristeći *bootstrap* kopije svojstvenih vektora izračunaj $\text{dist}(\text{ran}(\hat{W}_i), \text{ran}(\hat{W}_{i,1}^*))$ te odredi *bootstrap* interval tog izraza.
-

značajnog povećanja složenosti uzeti više gradijenata, možemo iskoristiti *Monte Carlo* metodu umjesto *bootstrap* metode. Također pretpostavljamo da je dimenzija m matrice C dovoljno mala da bi računanje svojstvene dekompozicije matrice \hat{C} i njene *bootstrap* kopije bilo jednostavnije nego uzimanje više gradijenata. Elementi matrice C su integrali više varijabli. Za m dovoljno malen i određivanje $\nabla_x f$ dovoljno jednostavno, bolje je koristiti točnije numeričke metode nego uzimanje slučajnih uzoraka. U tom slučaju je teže procijeniti greške pri računanju.

Poglavlje 2

Primjene aktivnih potprostora

U ovom poglavlju obraditi ćemo neke od primjena aktivnih potprostora. Ako smo odredili aktivni potprostor za funkciju f , tada ga želimo iskoristiti kako bi imali efikasniji račun. Glavni cilj nam je obratiti pozornost na aktivne varijable.

2.1 Redukcija dimenzije i preslikavanja

Cilj nam je konstruirati funkciju $g = g(y)$ koja ovisi samo o prvih $n < m$ aktivnih varijabli te proučiti njenu ovisnost o $f(x)$. Ako uspijemo konstruirati takvu funkciju g , tada na njoj možemo proučavati ovisnost o njenih n parametara umjesto na m parametara funkcije f . Zbog $n < m$ taj će račun biti manje složenosti i brže će se izvršiti. Nakon toga, cilj nam je prebaciti ovisnost o parametrima s funkcije g na funkciju f .

Ideja nam je postaviti neaktivne varijable z na nulu. Tada je

$$f(x) = f(W_1y + W_2z) = f(W_1y) = g(y). \quad (2.1)$$

Ovakva konstrukcija za dani y računa $x = W_1y$ te određuje $f(x)$. Ako želimo koristiti ovakvu funkciju g kao zamjenu za f , možemo definirati

$$f(x) \approx g(W_1^T x) = f(W_1 W_1^T x). \quad (2.2)$$

U ovom slučaju ovakva zamjena određuje f na projekciji varijabli x na potprostor razapet stupcima od W_1 , što je upravo aktivni potprostor. Ako su svojstvene vrijednosti $\lambda_{n+1} = \dots = \lambda_m = 0$ i domena funkcije f je $\mathcal{X} = \mathbb{R}^m$, tada je ovo najbolji odabir funkcije g . Svu ovisnost o parametrima možemo odrediti promatrajući samo prvih n varijabli. Slijedi objašnjenje problema kada neki od ova dva uvjeta nije ispunjen.

Pretpostavimo da λ_{n+1} nije jednaka nuli. Fiksirajmo y . Prema lemi 1.3.1 slijedi da je

$$\frac{1}{\delta^2} \left(f(W_1y + \delta w_{n+1}) - f(W_1y) \right)^2 \quad (2.3)$$

u prosjeku blizu λ_{n+1} za dovoljno mali δ . Za veći δ , svojstvena vrijednost λ_{n+1} ne daje nam mnogo informacija. Udaljenost između x i projekcije na aktivni potprostor $W_1 W_1^T x$ može uzrokovati lošu točnost aproksimacije $g(y)$.

Uzmimo za primjer funkciju definiranu kao u uvodu, $f(x) = \log(a^T x)$ za $a = [0.8 \ 0.2]^T$ definiranu na $[1, 2]^2$. Aktivni potprostor je tada definiran kao $W_1 = a / \|a\| = [0.97 \ 0.25]^T$. Projekcija točke $[1.9 \ 1.9]^T$ na aktivni potprostor je

$$(W_1 W_1^T) \begin{bmatrix} 1.9 \\ 1.9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.25 \\ 0.58 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

Prva komponenta projekcije je veća od 2 i izlazi izvan domene funkcije f .

Želimo konstruirati g tako da izbjegnemo ovakve slučajeve. Za početak definirajmo domenu funkcije g . Neka je $\mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}^n$ skup

$$\mathcal{Y} = \{y \in \mathbb{R}^n, y = W_1^T x, x \in \mathcal{X}\}. \quad (2.5)$$

Za svaku točku $y \in \mathcal{Y}$ postoji barem jedan $x \in \mathcal{X}$ takav da je $y = W_1^T x$. Tada imamo barem jedan izbor za $g(y)$. Za dani $y \in \mathcal{Y}$ uzmimo $x \in \mathcal{X}$ takav da je $y = W_1^T x$ i postavimo $g(y) = f(x)$. Problem je što možemo imati puno $x \in \mathcal{X}$ za koje vrijedi $y = W_1^T x$, odnosno preslikavanje s y u x nije funkcija. Svaki x slika se u općenito različiti $f(x)$. Ovaj problem rješavamo regularizacijom.

Za $\lambda_{n+1} = \dots = \lambda_m = 0$, $f(x)$ je isti za svaki x takav da vrijedi $y = W_1^T x$. U ovom slučaju odabir regularizacije je nebitan. Inače, biramo između dva oblika regularizacije:

- Za *response surfaces*, integraciju, i statistički inverz definiramo $g(y)$ kao prosjek svih $f(x)$ takvih da vrijedi $y = W_1^T x$. Pogledati 2.2, 2.3 i 2.5.
- Za optimizaciju, definiramo $g(y)$ optimiziranjem po svim $f(x)$ za koje vrijedi $y = W_1^T x$. Pogledati 2.4.

Prvi izbor nam omogućava da grešku funkcije g povežemo sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_{n+1}, \dots, \lambda_m$. Ako promjena neaktivnih varijabli mijenja f malo, tada možemo uzeti prosjek po neaktivnim varijablama s malo truda. Drugi izbor razdvaja aktivne od neaktivnih varijabli za optimizaciju. Optimiziranje po y trebalo bi rezultirati većom promjenom nego optimiziranje po z .

Za početak definirajmo zajedničku funkciju gustoće aktivnih varijabli y i neaktivnih varijabli z kao

$$\pi(y, z) = \rho(W_1 y + W_2 z). \quad (2.6)$$

Tada su funkcije gustoće

$$\pi_Y(y) = \int \rho(W_1 y + W_2 z) dz, \quad \pi_Z(z) = \int \rho(W_1 y + W_2 z) dy, \quad (2.7)$$

te uvjetne funkcije gustoće

$$\pi_{Y|Z}(y|z) = \frac{\pi(y, z)}{\pi_Z(z)}, \quad \pi_{Z|Y}(z|y) = \frac{\pi(y, z)}{\pi_Y(y)}. \quad (2.8)$$

Promatramo dva slučaja. U prvome je domena $\mathcal{X} = \mathbb{R}^m$ neograničena i $\rho(x)$ funkcija gustoće normalne razdiobe. Domena \mathcal{Y} funkcije g je onda također neograničena i $\mathcal{Y} = \mathbb{R}^n$. Stupci matrice W su ortogonalni pa su funkcija gustoće i uvjetna funkcija gustoće od y funkcija gustoće normalne razdiobe na \mathbb{R}^n , a funkcija gustoće i uvjetna funkcija gustoće od z su funkcije gustoće normalne razdiobe na \mathbb{R}^{m-n} .

U drugom slučaju je domena $\mathcal{X} = [-1, 1]^m$, a funkcije gustoće je uniformna

$$\rho(x) = \begin{cases} 2^{-m}, & x \in [-1, 1]^m, \\ 0 & \text{inače.} \end{cases} \quad (2.9)$$

Domena \mathcal{Y} je slika ortogonalne projekcije hiperkocke $[-1, 1]^m$. Funkcija gustoće i uvjetna funkcija gustoće nisu nužno uniformne te mogu biti komplicirane za veliki m . Pokažimo da funkcije gustoće nisu nužno uniformne. Neka je $m = 2$ i neka je matrica W dana kao

$$W = \begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix}, \quad a, b > 0, \quad \sqrt{a^2 + b^2} = 1. \quad (2.10)$$

Uzmimo $y = ax_1 + bx_2$ i $z = -bx_1 + ax_2$. Slika od y je interval $[-(a+b), a+b]$, a funkcija gustoće od y je

$$\pi_Y(y) = \frac{z_u(y) - z_l(y)}{4}, \quad (2.11)$$

gdje je

$$z_l(y) = \max\left(\frac{1-ay}{-b}, \frac{-1-by}{a}\right), \quad (2.12)$$

$$z_u(y) = \min\left(\frac{-1-ay}{-b}, \frac{1-by}{a}\right). \quad (2.13)$$

Za $m > 2$ i $n > 1$ ove funkcije postaju puno kompliciranije.

2.2 Aproksimacija grafa funkcije (*response surfaces*)

Izraz *response surfaces* koristimo za postupak opisan u nastavku. Odaberemo skup točaka $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, n$, gdje je $x_i \in \mathcal{X}$, $\forall i = 1, \dots, n$, te odredimo $q_i = f(x_i)$. Tada koristimo uređene parove (x_i, q_i) za aproksimaciju $f(x)$ za neki $x \notin \{x_i\}$. Ako je aproksimacija jednaka točnoj vrijednosti funkcije f u točki x , tada *response surfaces* interpolira točke q_i .

Algoritam 4 Regresija pomoću aktivnih varijabli.

1. Pretpostavimo da su dani uređeni parovi (x_i, q_i) .
2. Za svaki x_i , odredi $y_i = W_1^T x_i$.
3. Napravi regresiju funkcije $g(y)$ s uređenim parovima (y_i, q_i) , gdje je $q_i \approx g(y_i)$.
4. Aproksimiraj $f(x) \approx g(W_1^T x)$.

Response surfaces koje ne interpoliraju su regresije, odnosno određuju $f(x)$ s greškom. Aktivne potprostore koristimo tako da koristimo regresiju samo s aktivnim varijablama umjesto sa svima. Taj postupak nam prikazuje algoritam 4. Ovakva konstrukcija ima nekoliko problema. Kao prvo, točke x_i su odabrane tako da zadovoljavaju određeni kriterij. Ništa nam ne garantira da će i točke y_i zadovoljavati isti kriterij, odnosno da će biti dobro odabrane. Kao drugo, kod regresije pretpostavljamo slučajne greške kod q_i . No u ovom slučaju greške neće biti slučajne, već će ovisiti o neaktivnim varijablama z .

U nastavku konstruiramo *response surface* koji koristi aktivne varijable te je podložan greškama koje analiziramo. Za više informacija o *response surfaces* pogledati [5].

Uvjetno očekivanje i Monte Carlo aproksimacija

Za fiksirani y , najbolja aproksimacija vrijednosti funkcije f je prosjek svih vrijednosti x koje se slikaju u y . To je upravo uvjetno očekivanje od f uz dano y . Definiramo g kao

$$g(y) = \mathbb{E}[f | y] = \int f(W_1 y + W_2 z) \pi_{Z|Y}(z) dz. \quad (2.14)$$

Domena ove funkcije je \mathcal{Y} definiran u (2.5). Možemo koristiti g za aproksimaciju funkcije f za dani x kao

$$f(x) \approx F(x) \equiv g(W_1^T x). \quad (2.15)$$

Za analizu greške potrebne su nam varijacije Poincaréove nejednakosti. Navodimo ih kao leme u slučaju normalne i uniformne razdiobe.

Lema 2.2.1. *Neka je $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^m$ konveksan skup te funkcija gustoće ρ ograničena, $\rho(x) \leq R$, $\forall x \in \mathcal{X}$. Neka je h Lipschitz neprekidna, diferencijabilna, očekivanja nula, realna funkcija od x . Tada je*

$$\int (h(x))^2 \rho dx \leq RC \int (\nabla_x h(x))^T (\nabla_x h(x)) \rho dx, \quad (2.16)$$

gdje je C Poincaréova konstanta za \mathcal{X} .

Lema 2.2.2. *Neka je $\mathcal{X} = \mathbb{R}^m$ i ρ funkcija gustoće normalne razdiobe. Neka je h Lipschitz neprekidna, diferencijabilna, očekivanja nula, realna funkcija od x . Tada je*

$$\int (h(x))^2 \rho dx \leq \int (\nabla_x h(x))^T (\nabla_x h(x)) \rho dx. \quad (2.17)$$

Jedina razlika prošle dvije leme je da je u drugoj konstanta $RC = 1$. Sljedeći teorem govori o grešci u (2.15) u vidu svojstvenih vrijednosti matrice C .

Teorem 2.2.3. *Neka vrijede pretpostavke leme 2.2.1 ili leme 2.2.2. Tada je*

$$\left(\int (f(x) - g(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq C_1 (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.18)$$

gdje je C_1 konstanta koja ovisi o domeni \mathcal{X} i funkciji gustoće ρ .

Dokaz. Iz (2.15) slijedi

$$\int (f(W_1 y + W_2 z) - g(y)) \pi_{Z|Y}(z) dz = 0. \quad (2.19)$$

Tada

$$\begin{aligned} \int (f(x) - g(W_1^T x))^2 \rho dx &= \int \left(\int (f(W_1 y + W_2 z) - g(y))^2 \pi_{Z|Y}(z) dz \right) \pi_Y dy \\ &\leq C_1^2 \int \left(\int (\nabla_z f(W_1 y + W_2 z))^T (\nabla_z f(W_1 y + W_2 z)) \pi_{Z|Y}(z) dz \right) \pi_Y dy \\ &= C_1^2 \int (\nabla_z f(x))^T (\nabla_z f(x)) \rho dx \\ &= C_1^2 (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Konstanta C_1 ovisi samo o domeni \mathcal{X} i funkciji gustoće ρ . Uzimanjem korijena slijedi tvrdnja. \square

Napomena 2.2.4. *Prethodni teorem možemo iskazati i pomoću očekivanja:*

$$\mathbb{E}[(f - F)^2]^{\frac{1}{2}} \leq C_1 (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.21)$$

Problem s aproksimacijom (2.15) je u tome što nam je za svako računanje vrijednosti funkcije g potrebna integracija i po neaktivnim varijablama z . Ako su svojstvene vrijednosti $\lambda_{n+1}, \dots, \lambda_m$ male, tada mala promjena varijabli z rezultira malom promjenom funkcije f . Promjena funkcije f po z je mala pa će *Monte Carlo* integracija dobro aproksimirati uvjetno

očekivanje g .

Definirajmo *Monte Carlo* aproksimaciju $\hat{g} = \hat{g}(y)$ kao

$$g(y) \approx \hat{g}(y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(W_1 y + W_2 z_i), \quad (2.22)$$

gdje je z_i slučajno izabran uz uvjetnu funkciju gustoće $\pi_{Z|Y}$. Aproksimiramo f kao

$$f(x) \approx \hat{F}(x) \equiv \hat{g}(W_1^T x). \quad (2.23)$$

Sada izvodimo ocjenu greške za ovu aproksimaciju.

Teorem 2.2.5.

$$\left(\int (f(x) - \hat{g}(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq C_1 (1 + N^{-\frac{1}{2}}) (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.24)$$

gdje je C_1 konstanta iz teorema 2.2.3.

Dokaz. Uvjetna varijanca funkcije f uz dani y je

$$\sigma_y^2 = \int (f(W_1 y + W_2 z) - g(y))^2 \pi_{Z|Y} dz. \quad (2.25)$$

Prema teoremu 2.2.3 vrijedi

$$\int \sigma_y^2 \pi_Y dy \leq C_1^2 (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m). \quad (2.26)$$

Monte Carlo aproksimacija $\hat{g}(y)$ je slučajna varijabla. Tada greška zadovoljava

$$\int (g(y) - \hat{g}(y))^2 \pi_{Z|Y} dy = \frac{\sigma_Y^2}{N}, \quad (2.27)$$

tako da je

$$\begin{aligned} \int (g(W_1^T x) - \hat{g}(W_1^T x))^2 \rho dx &= \int \left(\int (g(y) - \hat{g}(y))^2 \pi_{Z|Y} dz \right) \pi_Y dy \\ &= \frac{1}{N} \int \sigma_Y^2 \pi_Y dy \\ &\leq \frac{C_1^2}{N} (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Prema teoremu 2.2.3 tada imamo

$$\begin{aligned}
 & \left(\int (f(x) - \hat{g}(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
 & \leq \left(\int (f(x) - g(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\int (g(W_1^T x) - \hat{g}(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
 & \leq C_1 (1 + N^{-\frac{1}{2}}) (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}},
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

čime smo pokazali tvrdnju teorema. \square

Napomena 2.2.6. *Prethodni teorem možemo iskazati i pomoću očekivanja:*

$$\mathbb{E} [(f - \hat{F})^2]^{\frac{1}{2}} \leq C_1 (1 + N^{-\frac{1}{2}}) (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}}. \tag{2.30}$$

Za $\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m = 0$ *Monte Carlo* aproksimacija \hat{g} je egzaktna za svaki $N \geq 1$. Za $\lambda_{n+1}, \dots, \lambda_m$ dovoljno male, *Monte Carlo* aproksimacija \hat{g} s dovoljno malim N daje dobru aproksimaciju funkcije f .

Do sada nismo vidjeli prednosti korištenja uvjetnog očekivanja g ili njegove *Monte Carlo* aproksimacije \hat{g} za aproksimiranje funkcije f . Prednost aktivnog potprostora je u konstruiranju *response surface* samo s aktivnim varijablama y .

Ako svojstvene vrijednosti $\lambda_{n+1}, \dots, \lambda_m$ nisu točno nula, *Monte Carlo* aproksimacija \hat{g} sadrži grešku, odnosno \hat{g} je slučajna varijabla. Isto tako, \hat{g} nije glatka funkcija od y , čak iako $g(y)$ je. Zato preferiramo regresiju za *response surface* ispred interpolacije.

Konstruiramo *response surface* za funkciju definiranu na \mathcal{Y} iz (2.5). Uzmimo skup točaka $y_k \in \mathcal{Y}$ za $k = 1, \dots, P$. Definirajmo $\hat{g}_k = \hat{g}(y_k)$. Tada imamo

$$\hat{g}(y) \approx \mathcal{R}(y; \hat{g}_1, \dots, \hat{g}_P), \tag{2.31}$$

gdje je \mathcal{R} oznaka za *response surface* konstruiranu s $\hat{g}_1, \dots, \hat{g}_P$. Pišemo $\mathcal{R}(y)$. Koristimo takav *response surface* za aproksimaciju funkcije f kao

$$f(x) \approx \tilde{F}(x) \equiv \mathcal{R}(W_1^T x). \tag{2.32}$$

Za analizu greške procjene *response surface* \mathcal{R} , pretpostavljamo da je prosjek greške ograničen za sve $y \in \mathcal{Y}$.

Pretpostavka 2.2.7. *Postoji konstanta C_2 takva da*

$$\left(\int (\hat{g}(y) - \mathcal{R}(y))^2 \pi_{Z|Y} dz \right)^{\frac{1}{2}} \leq C_2 \delta, \quad \forall y \in \mathcal{Y} \tag{2.33}$$

gdje je $\delta = \delta(\mathcal{R}, P)$ ovisi o *response surface* \mathcal{R} i o broju odabranih točaka P . Konstanta C_2 ovisi o domeni \mathcal{X} i funkciji gustoće ρ .

Napomena 2.2.8. *Prethodnu pretpostavku možemo iskazati i pomoću očekivanja:*

$$\mathbb{E}[(\hat{F} - \tilde{F})^2 | z]^{\frac{1}{2}} \leq C_2 \delta. \quad (2.34)$$

Teorem 2.2.9.

$$\left(\int (f(x) - \mathcal{R}(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq C_1 (1 + N^{-\frac{1}{2}}) (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} + C_2 \delta, \quad (2.35)$$

gdje je C_1 iz teorema 2.2.3, N iz teorema 2.2.5 te C_2 i δ iz pretpostavke 2.2.7.

Dokaz. Vrijedi

$$\begin{aligned} & \left(\int (f(x) - \mathcal{R}(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \leq \left(\int (f(x) - \hat{g}(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\int (\hat{g}(W_1^T x) - \mathcal{R}(W_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Teorem 2.2.5 ograničava prvi pribrojnik. Drugi pribrojnik zadovoljava

$$\int (\hat{g}(W_1^T x) - \mathcal{R}(W_1^T x))^2 \rho dx = \int \left(\int (\hat{g}(y) - \mathcal{R}(y))^2 \pi_{Z|Y} dz \right) \pi_Y dy \leq (C_2 \delta)^2. \quad (2.37)$$

Uzimanjem korijena dobivamo tvrdnju teorema. \square

Napomena 2.2.10. *Prethodni teorem možemo iskazati i pomoću očekivanja:*

$$\mathbb{E}[(f - \tilde{F})^2]^{\frac{1}{2}} \leq C_1 (1 + N^{-\frac{1}{2}}) (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} + C_2 \delta. \quad (2.38)$$

Sada imamo aproksimacije

$$f(x) \approx F(x) \approx \hat{F}(x) \approx \tilde{F}(x), \quad (2.39)$$

odnosno

$$f(x) \approx g(W_1^T x) \approx \hat{g}(W_1^T x) \approx \mathcal{R}(W_1^T x). \quad (2.40)$$

Aproksimacija svojstvenih vektora

Do sada smo koristili egzaktne svojstvene vektore W . U praksi imamo samo aproksimacije \hat{W} . Sada konstruiramo iste aproksimacije i *response surface* koristeći aproksimacije svojstvenih vektora. Za to nam je potrebna sljedeća pretpostavka.

Pretpostavka 2.2.11. Neka se matrice W i \hat{W} mogu particionirati na sljedeći način

$$W = \begin{bmatrix} W_1 & W_2 \end{bmatrix}, \quad \hat{W} = \begin{bmatrix} \hat{W}_1 & \hat{W}_2 \end{bmatrix}, \quad (2.41)$$

gdje W_1 i \hat{W}_1 sadrže prvih $n < m$ stupaca matrica W i \hat{W} . Tada postoji $\epsilon > 0$ takav da je

$$\text{dist}(\text{ran}(W_1), \text{ran}(\hat{W}_1)) \leq \epsilon, \quad (2.42)$$

gdje je $\text{dist}(\text{ran}(W_1), \text{ran}(\hat{W}_1))$ definirana u (1.41).

Aproksimacija \hat{W} definira aktivne varijable $\hat{y} = \hat{W}_1^T x$ i neaktivne varijable $\hat{z} = \hat{W}_2^T x$, koje imaju zajedničku funkciju gustoće, uvjetne funkcije gustoće te funkcije gustoće

$$\hat{\pi}(\hat{y}, \hat{z}) = \rho(\hat{W}_1 \hat{y} + \hat{W}_2 \hat{z}), \quad (2.43)$$

$$\hat{\pi}_{\hat{y}}(\hat{y}) = \int \hat{\pi}(\hat{y}, \hat{z}) d\hat{z}, \quad \hat{\pi}_{\hat{z}}(\hat{z}) = \int \hat{\pi}(\hat{y}, \hat{z}) d\hat{y}, \quad (2.44)$$

$$\hat{\pi}_{\hat{y}|\hat{z}}(\hat{y}|\hat{z}) = \frac{\hat{\pi}(\hat{y}, \hat{z})}{\hat{\pi}_{\hat{z}}(\hat{z})}, \quad \hat{\pi}_{\hat{z}|\hat{y}}(\hat{z}|\hat{y}) = \frac{\hat{\pi}(\hat{y}, \hat{z})}{\hat{\pi}_{\hat{y}}(\hat{y})}. \quad (2.45)$$

Domena aproksimacija je

$$\hat{\mathcal{Y}} = \{\hat{y} \in \mathbb{R}^n : \hat{y} = \hat{W}_1^T x, x \in X\}. \quad (2.46)$$

Konstruiramo iste aproksimacije za f koristeći nove aktivne varijable. Uvjetno očekivanje od f za dano \hat{y} tada postaje

$$f(x) \approx F_\epsilon(x) \equiv g_\epsilon(\hat{W}_1^T x), \quad (2.47)$$

gdje je

$$g_\epsilon(\hat{y}) = \mathbb{E}[f|\hat{y}] = \int f(\hat{W}_1 \hat{y} + \hat{W}_2 \hat{z}) \hat{\pi}_{\hat{z}|\hat{y}}(\hat{z}|\hat{y}) d\hat{z}. \quad (2.48)$$

Tada imamo sljedeću ocjenu greške.

Teorem 2.2.12.

$$\left(\int (f(x) - g_\epsilon(\hat{W}_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq C_1 \left(\epsilon (\lambda_1 + \dots + \lambda_n)^{\frac{1}{2}} + (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} \right), \quad (2.49)$$

gdje je C_1 konstanta iz teorema 2.2.3.

Dokaz. Koristeći zaključke iz teorema 2.2.3 te Poincaréovu nejednakost iz lema 2.2.1 i 2.2.2 dobivamo

$$\int (f(x) - g_\epsilon(\hat{W}_1^T x))^2 \rho dx \leq C_1^2 \int (\nabla_{\hat{z}} f(x))^T (\nabla_{\hat{z}} f(x)) \rho dx. \quad (2.50)$$

Koristeći lančano pravilo dobivamo

$$\nabla_{\hat{z}} f = \hat{W}_2^T W_1 \nabla_y f + \hat{W}_2^T W_2 \nabla_z f. \quad (2.51)$$

Pretpostavka 2.2.11 implicira $\|W_1^T \hat{W}_2\| \leq \epsilon$ i $\|W_2^T \hat{W}_2\| \leq 1$. Tada imamo

$$\begin{aligned} \nabla_{\hat{z}} f^T \nabla_{\hat{z}} f &= (\hat{W}_2^T W_1 \nabla_y f + \hat{W}_2^T W_2 \nabla_z f)^T (\hat{W}_2^T W_1 \nabla_y f + \hat{W}_2^T W_2 \nabla_z f) \\ &= \nabla_y f^T W_1^T \hat{W}_2 \hat{W}_2^T W_1 \nabla_y f + 2 \nabla_y f^T W_1^T \hat{W}_2 \hat{W}_2^T W_2 \nabla_z f \\ &\quad + \nabla_z f^T W_2^T \hat{W}_2 \hat{W}_2^T W_2 \nabla_z f \\ &\leq \epsilon^2 \nabla_y f^T \nabla_y f + 2\epsilon \nabla_y f^T \nabla_z f + \nabla_z f^T \nabla_z f. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Sada koristeći Cauchy-Schwarzovu nejednakost dobivamo

$$\begin{aligned} &\int (\nabla_{\hat{z}} f(x))^T (\nabla_{\hat{z}} f(x)) \rho dx \\ &\leq \int (\nabla_z f(x))^T (\nabla_z f(x)) \rho dx + 2\epsilon \int (\nabla_z f(x))^T (\nabla_y f(x)) \rho dx \\ &\quad + \epsilon^2 \int (\nabla_y f(x))^T (\nabla_y f(x)) \rho dx \\ &\leq \left(\int (\nabla_z f(x))^T (\nabla_z f(x)) \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} + \epsilon \left(\int (\nabla_y f(x))^T (\nabla_y f(x)) \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \left(\epsilon(\lambda_1 + \dots + \lambda_n)^{\frac{1}{2}} + (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} \right)^2. \end{aligned} \quad (2.53)$$

□

Napomena 2.2.13. Prethodni teorem možemo iskazati i pomoću očekivanja:

$$\mathbb{E} [(f - F_\epsilon)^2]^{\frac{1}{2}} \leq C_1 \left(\epsilon(\lambda_1 + \dots + \lambda_n)^{\frac{1}{2}} + (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} \right). \quad (2.54)$$

Definirajmo *Monte Carlo* aproksimaciju kao

$$\hat{g}_\epsilon(\hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\hat{W}_1 \hat{y} + \hat{W}_2 \hat{z}_i), \quad (2.55)$$

gdje su \hat{z}_i uzeti neovisno iz uvjetne gustoće $\hat{\pi}_{\hat{z}|\hat{y}}$. Aproksimiramo f kao

$$f(x) \approx \hat{F}_\epsilon(x) \equiv \hat{g}_\epsilon(\hat{W}_1^T x). \quad (2.56)$$

Tada imamo sljedeću ocjenu greške.

Teorem 2.2.14.

$$\left(\int (f(x) - \hat{g}_\epsilon(\hat{W}_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq C_1 \left(1 + N^{-\frac{1}{2}}\right) \left(\epsilon (\lambda_1 + \dots + \lambda_n)^{\frac{1}{2}} + (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} \right), \quad (2.57)$$

gdje su C_1 i N iz teorema 2.2.5.

Napomena 2.2.15. Prethodni teorem možemo iskazati i pomoću očekivanja:

$$\mathbb{E} [(f - \hat{F}_\epsilon)^2]^{\frac{1}{2}} \leq C_1 \left(1 + N^{-\frac{1}{2}}\right) \left(\epsilon (\lambda_1 + \dots + \lambda_n)^{\frac{1}{2}} + (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} \right). \quad (2.58)$$

Response surface aproksimacija korištenjem aproksimacija svojstvenih vektora je

$$\hat{g}_\epsilon(\hat{y}) \approx \mathcal{R}_\epsilon(\hat{y}; \hat{g}_{\epsilon,1}, \dots, \hat{g}_{\epsilon,p}). \quad (2.59)$$

U navedenom zapisu ϵ označava da je *response surface* konstruiran s aproksimiranim aktivnim varijablama. $\hat{g}_{\epsilon,k}$ označava vrijednost *Monte Carlo* aproksimacije od \hat{g}_ϵ za točke $\hat{y}_k \in \mathcal{Y}$. Koristimo takav *response surface* za aproksimaciju funkcije f kao

$$f(x) \approx \tilde{F}_\epsilon(x) \equiv \mathcal{R}(\hat{W}_1^T x). \quad (2.60)$$

Tako dolazimo do posljednje ocjene greške.

Teorem 2.2.16.

$$\begin{aligned} & \left(\int (f(x) - \mathcal{R}_\epsilon(\hat{W}_1^T x))^2 \rho dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \leq C_1 \left(1 + N^{-\frac{1}{2}}\right) \left(\epsilon (\lambda_1 + \dots + \lambda_n)^{\frac{1}{2}} + (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} \right) + C_2 \delta, \end{aligned} \quad (2.61)$$

gdje su C_1, N, C_2 i δ iz teorema 2.2.9.

Napomena 2.2.17. Prethodni teorem možemo iskazati i pomoću očekivanja:

$$\mathbb{E} [(f - \tilde{F}_\epsilon)^2]^{\frac{1}{2}} \leq C_1 \left(1 + N^{-\frac{1}{2}}\right) \left(\epsilon (\lambda_1 + \dots + \lambda_n)^{\frac{1}{2}} + (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m)^{\frac{1}{2}} \right) + C_2 \delta. \quad (2.62)$$

Sada imamo aproksimacije

$$f(x) \approx F_\epsilon(x) \approx \hat{F}_\epsilon(x) \approx \tilde{F}_\epsilon(x), \quad (2.63)$$

odnosno

$$f(x) \approx g_\epsilon(\hat{W}_1^T x) \approx \hat{g}_\epsilon(\hat{W}_1^T x) \approx \mathcal{R}_\epsilon(\hat{W}_1^T x). \quad (2.64)$$

2.3 Integracija

Idući problem je određivanje prosjeka slike funkcije f . Problem se svodi na integral

$$I = \int f(x) \rho dx. \quad (2.65)$$

Numerička integracija aproksimira integral pomoću sume

$$I \approx \sum_{j=1}^M f(x_j) w_j, \quad (2.66)$$

gdje su x_j čvorovi, a w_j težine. Želimo iskoristiti aktivni potprostor da bi reducirali dimenziju problema te tako lakše izračunali integral. Neaktivni potprostor određuje smjerove gdje je promatrana funkcija relativno ravna. Prosjek po tom dijelu je jednostavno odrediti. Ako nam aktivni potprostor ponudi smjerove po kojima se funkcija u prosjeku mijenja više, promatrati ćemo te smjerove. Vrijedi

$$\int f(x) \rho dx = \int \left(\int f(W_1 y + W_2 z) \pi_{Z|Y} dz \right) \pi_Y dy = \int g(y) \pi_Y dy, \quad (2.67)$$

gdje je g uvjetno očekivanje od f uz dano y definirano u (2.14). Ove jednakosti nam govore da možemo koristiti samo prvih $n < m$ aktivnih varijabli y za aproksimaciju integrala

$$I \approx I_N = \sum_{k=1}^N g(y_k) w_k, \quad (2.68)$$

za čvorove $y_k \in \mathcal{Y}$ iz (2.5).

Sada nam se javlja problem aproksimacije uvjetnog očekivanja g u svakom čvoru. Kao rješenje tog problema navodimo *Monte Carlo* metodu definiranu u (2.22). Za dane čvorove i težine možemo definirati

$$I_N \approx \hat{I}_N = \sum_{k=1}^N \hat{g}(y_k) w_k. \quad (2.69)$$

Grešku člana $\hat{g}(y_k)$ teško je odrediti. Ono što možemo je ograničiti prosjek uvjetne varijance. Neka je σ_y^2 definirana kao u (2.25). Uzimajući prosjek po y dobivamo

$$\int \sigma_y^2 \pi_Y dy \leq C_1^2 (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m). \quad (2.70)$$

Za $\lambda_{n+1} = \dots = \lambda_m = 0$ (2.70) implicira $\hat{g}(y_k) = g(y_k)$ za svaki y_k te $\hat{I}_N = I_N$. Jedina greška kod aproksimacije integrala je ona numeričke integracije. U praksi, zadnjih $m - n$ svojstvenih vrijednosti su male, ali ipak nisu nula. Tada pretpostavljamo da se greška poništava u sumaciji te da je aproksimacija I_N dovoljno dobra.

Normalna razdioba

Pretpostavljamo da je domena $\mathcal{X} = \mathbb{R}^m$. Slika aktivnih varijabli je tada u \mathbb{R}^n , a neaktivnih u \mathbb{R}^{m-n} . Sve funkcije gustoće su standardne. Tada je odabir slučajnih uzoraka za *Monte Carlo* aproksimaciju $\hat{g}(y_k)$ od uvjetnog očekivanja $g(y_k)$ izravan. Težine u numeričkoj integraciji možemo postaviti na $w_k = 1/N$.

Uniformna razdioba

Domena nam je sada $\mathcal{X} = [-1, 1]^m$. Funkcija gustoće je standardna. Slika aktivnih varijabli \mathcal{Y} iz (2.5) u ovom je slučaju slika hiperkocke po nekoj linearnoj transformaciji iz \mathbb{R}^m u \mathbb{R}^n . Takav objekt zovemo politop.

Funkcija gustoće je

$$\pi_Y(y) = \int \pi(y, z) dz = 2^{-m} \int_{\mathcal{S}} dz = 2^{-m} \text{Vol}(\mathcal{S}), \quad (2.71)$$

gdje je \mathcal{S} politop

$$\mathcal{S} = \{z \in \mathbb{R}^{m-n} : -1 - W_1 y \leq W_2 z \leq 1 - W_1 y\} \quad (2.72)$$

u čijoj se definiciji nejednakosti smatraju po komponentama i $\text{Vol}(\cdot)$ funkcija koja vraća volumen argumenta. Računanje volumena politopa u više dimenzija je općenito težak posao.

Ako je broj n aktivnih varijabli dovoljno malen, možemo konstruirati mrežu na \mathcal{S} . Tako dobivamo elemente $\{V_k\}$ gdje je y_k centar od V_k za svaki k . Tada težine možemo računati kao

$$w_k = \int_{V_k} \pi_Y(y) dy. \quad (2.73)$$

2.4 Optimizacija

Polazimo od sljedećeg problema optimizacije

$$\text{pronaći } x^* \in \mathcal{X}, \text{ takav da je } f(x^*) \leq f(x), \forall x \in \mathcal{X}. \quad (2.74)$$

Taj problem možemo zapisati i kao

$$\min_x f(x), \text{ za } x \in \mathcal{X}. \quad (2.75)$$

Problem optimizacije može sadržavati i neke dodatne jednakosti ili nejednakosti, no mi ćemo pretpostaviti da su one sadržane u funkciji f . Također, pretpostavljamo da minimum postoji, ali ne mora nužno biti jedinstven. Cilj nam je iskoristiti aktivni potprostor kako bi

poboljšali ili ubrzali traženje minimuma.

Napišimo (2.75) s aktivnim i neaktivnim varijablama kao

$$\min_{y,z} f(W_1y + W_2z), \text{ za } W_1y + W_2z \in \mathcal{X}. \quad (2.76)$$

Ako su svojstvene vrijednosti $\lambda_{n+1} = \dots = \lambda_m = 0$ i domena $\mathcal{X} = \mathbb{R}^m$, možemo postaviti $z = 0$ i ograničiti se na podskup od \mathbb{R}^m razapet svojstvenim vektorima W_1 . Drugim riječima, imamo novi problem

$$\min_y f(W_1y), \text{ za } W_1y \in \mathcal{X}. \quad (2.77)$$

Situacija je složenija ako je \mathcal{X} ograničen. Pretpostavimo da smo riješili problem (2.77). Neka je y^* rješenje. Ako je \mathcal{X} hiperkocka, tada je izraz $W_1y \in \mathcal{X}$ zapravo skup nejednakosti od y . Ako je y^* u interioru domene, došli smo do rješenja. Ako je na rubu, potrebna je daljnja analiza. Pretpostavimo da imamo vektor s takav da vrijedi

$$W_1y^* + s \in \partial\mathcal{X}, \quad W_1^T s \neq 0. \quad (2.78)$$

Tada pomicanjem na točku $y^* + W_1^T s$ možda mijenjamo vrijednost od f . Iz dosadašnje analize nije jasno povećava li se vrijednost funkcije ili smanjuje.

Zanimljivi nam je slučaj ograničene domene i svojstvenih vrijednosti povezanih s neaktivnim varijablama koje nisu nužno nula. Pretpostavimo da je $\mathcal{X} = [-1, 1]^m$. Definirajmo funkciju $g = g(y)$ kao

$$g(y) = \min_z f(W_1y + W_2z), \text{ za } -1 - W_1y \leq W_2z \leq 1 - W_1y. \quad (2.79)$$

Drugim riječima, za svaki $y \in \mathcal{Y}$ definiran u (2.5) postavimo g na minimum od f za fiksirani y gdje z varira tako da vrijedi $x = W_1y + W_2z$ koji ostaje u domeni od f .

Imajući u vidu (2.79), možemo minimizirati g kao

$$\min_y g(y), \text{ za } y \in \mathcal{Y}. \quad (2.80)$$

Ovo je problem optimizacije u $n < m$ varijabli. Ako je y^* minimizator za (2.80), nadamo se da je minimizator za f u skupu kojeg dobivamo za $y^* = W_1^T x$. Pretpostavljamo da će aktivni potprostor pomoći s pronalaženjem minimuma od f ili biti dobra početna točka za pronalazak istog.

U ovom pristupu imamo nekoliko problema. Prvo, gradijent funkcije g po y ne mora biti neprekidan. Očekivana definicija gradijenta $\nabla_y g(y)$ bila bi

$$\nabla_y g(y) = W_1^T \nabla_x f(x^*), \quad x^* = W_1y + W_2z^*, \quad (2.81)$$

gdje z^* minimizira (2.79). Ako minimizator nije jedinstven, izbor gradijenta je nesiguran. Neki smjerovi mogu rezultirati povećanjem funkcije g .

Drugo, minimum od $g(y)$ ne mora biti minimum od $f(x)$. No ako je aktivni potprostor dovoljno dobar, očekujemo da je minimum od g dovoljno blizu minimumu od f .

Treće, konstrukcija od g nam ne olakšava račun. Minimiziranje po z za svaku iteraciju minimiziranja po y je u najboljem slučaju zahtjevno kao i minimiziranje po x . Uštede u računu možemo dobiti ako iskoristimo relativno malu promjenu po z . Zamjenimo f s aproksimacijom \hat{f} u (2.79)

$$g(y) = \min_z \tilde{f}(W_1 y + W_2 z), \quad z a - 1 - W_1 y \leq W_2 z \leq 1 - W_1 y. \quad (2.82)$$

Funkciju \hat{f} konstruiramo tako da iskoristimo izračunate vrijednosti funkcije $\{f(x_j)\}$ dobivene iz algoritma 3 pri računanju aktivnog potprostora. Pretpostavimo da imamo dovoljno uređenih parova (x_j, f_j) da dobijemo koeficijente c, b, A u aproksimaciji

$$f(x) \approx \tilde{f}(x) = c + x^T b + \frac{1}{2} x^T A x. \quad (2.83)$$

Ako broj uređenih parova nije dovoljan, uz aktivne varijable koristimo i prvih nekoliko neaktivnih varijabli. Neka je W'_1 prvih $n' > n$ stupaca matrice W . Definirajmo $y' = (W'_1)^T x$ kao aktivne varijable i prvih $n' - n$ neaktivnih varijabli. Koristimo uređene parove $\{(W'_1)^T x_j, f_j\}$ da dobijemo koeficijente c', b', A' u aproksimaciji

$$g(y') = c' + (y')^T b' + \frac{1}{2} (y')^T A' y'. \quad (2.84)$$

Tada konstruiramo \tilde{f} kao

$$\tilde{f} = c' + x^T W'_1 b' + \frac{1}{2} x^T W'_1 A' (W'_1)^T x, \quad (2.85)$$

gdje dodatno označavamo $W'_1 b' = b$ te $W'_1 A' (W'_1)^T = A$.

U praksi očekujemo da će nam aktivni potprostor dati dobru početnu točku za traženje globalnog minimuma.

2.5 Statistički inverz

Statistički inverz je metoda karakterizacije nepouzdanosti u ulaznim podacima simulacije analiziranjem šuma u izlaznim podacima. Neka je $d \in \mathbb{R}^d$ proizvoljan vektor koji predstavlja šum. Tada imamo

$$d = m(x) + \epsilon, \quad (2.86)$$

gdje je x vektor ulaznih podataka, $m : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^d$ simulacija, a ϵ šum u mjerenju. Pretpostavljamo da šum ima normalnu razdiobu s očekivanjem nula i matricom kovarijance punog

ranga Γ_d , $\epsilon \sim N(0, \Gamma_d)$.

Funkcija gustoće $\rho_{pr}(x)$ označava poznate informacije ulaznih podataka. Pretpostavljamo da su ulazni podaci normalizirani tako da je funkcija gustoće *a priori* $\rho_{pr}(x)$ iz normalne razdiobe s očekivanjem nula i kovariancom $\sigma^2 I$,

$$\rho_{pr}(x) = \frac{1}{c_{pr}} \exp\left(\frac{-1}{2\sigma^2} x^T x\right), \quad c_{pr} = \int \exp\left(\frac{-1}{2\sigma^2} x^T x\right) dx = (2\pi\sigma^2)^{\frac{m}{2}}. \quad (2.87)$$

Iz (2.86) slijedi

$$\epsilon = d - m(x) \sim N(0, \Gamma_d). \quad (2.88)$$

Tada definiramo

$$\rho_{lik}(d; x) = \exp\left(\frac{-1}{2}(d - m(x))^T \Gamma_d^{-1} (d - m(x))\right). \quad (2.89)$$

S $f(x)$ označavamo negativni dio u eksponencijalnoj funkciji

$$f(x) = \frac{1}{2}(d - m(x))^T \Gamma_d^{-1} (d - m(x)). \quad (2.90)$$

Tada je $\rho_{lik}(d; x) = \exp(-f(x))$, gdje i f ovisi o d . Funkcija gustoće *a posteriori* je uvjetna funkcija gustoće koju označavamo s $\rho_{post}(x|d)$. Tada je relacija između funkcija gustoće *a priori* i *a posteriori* dana s

$$\rho_{post}(x|d) = \frac{1}{c_{post}} \rho_{lik}(d; x) \rho_{pr}(x) = \frac{1}{c_{post}} \exp(-f(x)) \rho_{pr}(x), \quad (2.91)$$

gdje je

$$c_{post} = \int \exp(-f(x)) \rho_{pr}(x) dx. \quad (2.92)$$

Vrijednost c_{post} je kao integral velike dimenzije teško izračunati. Ipak, i bez računanja integrala, znamo *a posteriori* vrijednost do na konstantu. To je dovoljno informacija za korištenje *Monte Carlo* metode markovljevih lanaca (MCMC) čija je stacionarna distribucija jednaka distribuciji *a posteriori*.

MCMC metoda je loša u slučaju velike dimenzije ulaznih parametara m . Nama je cilj reducirati dimenziju koristeći aktivni potprostor. Koristimo funkciju f iz (2.90) te $\rho(x) = \rho_{pr}(x)$. Gradijent funkcije f je

$$\nabla_x f(x) = \Gamma_d^{-\frac{1}{2}} \nabla_x m(x)^T (d - m(x)), \quad (2.93)$$

gdje je $\nabla_x m \in \mathbb{R}^{d \times m}$ Jacobian izlaznih podataka simulacija po ulaznim podacima. Slučajni uzorci x mogu se uzeti *a priori* te se gradijenti mogu izračunati neovisno i paralelno. Taj postupak nam daje poboljšanje u odnosu na odabir uzoraka x *a posteriori*.

Za korištenje aktivnog potprostora, aproksimiramo funkciju f uvjetnim očekivanjem g iz (2.14). Rastavimo ρ_{pr} u vidu aktivnih i neaktivnih varijabli

$$\begin{aligned}\rho_{pr}(x) &= \rho_{pr}(W_1 y + W_2 z) \\ &= (2\pi \sigma^2)^{-\frac{m}{2}} \exp\left(\frac{-1}{2\sigma^2}(W_1 y + W_2 z)^T (W_1 y + W_2 z)\right) \\ &= (2\pi \sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(\frac{-1}{2\sigma^2} y^T y\right) (2\pi \sigma^2)^{-\frac{(m-n)}{2}} \exp\left(\frac{-1}{2\sigma^2} z^T z\right) \\ &= \rho_{pr,Y}(y) \rho_{pr,Z}(z)\end{aligned}\tag{2.94}$$

Drugim riječima, odnos aktivnih i neaktivnih varijabli ovisi o izboru *a priori*. Tada je aproksimacija *a posteriori*

$$\begin{aligned}\rho_{post}(x|d) &\approx \tilde{\rho}_{post}(x|d) \\ &= \frac{1}{\tilde{c}_{post}} \exp(-g(W_1^T x)) \rho_{pr}(x) \\ &= \frac{1}{\tilde{c}_{post}} \exp(-g(y)) \rho_{pr,Y}(y) \rho_{pr,Z}(z) \\ &= \rho_{post,Y}(y|d) \rho_{pr,Z}(z)\end{aligned}\tag{2.95}$$

gdje je

$$\tilde{c}_{post} = \int \exp(-g(W_1^T x)) \rho_{pr}(x) dx.\tag{2.96}$$

Aproksimacija *a posteriori* je produkt *a posteriori* aktivnih varijabli y te *a priori* neaktivnih varijabli z . Tada je z neovisno o d .

MCMC metoda može uzeti uzorke iz $\tilde{\rho}_{post}$ u samo n dimenzija aktivnih varijabli. Varijable z su odabrane neovisno o y . U ovom slučaju očekujemo bolju konvergenciju MCMC metode. Metoda je opisana u algoritmu 5.

Markovljev lanac u algoritmu 5 nalazi se u n dimenzionalnom prostoru aktivnih varijabli, dok su neaktivne varijable odabrane neovisno. Slijedi teorem koji daje ocjenu greške metode. Za dokaz teorema te više informacija pogledati [4].

Teorem 2.5.1. *Hellingerova udaljenost $H(\rho_{post}, \tilde{\rho}_{post})$ između ρ_{post} i $\tilde{\rho}_{post}$ ograničena je s*

$$H(\rho_{post}, \tilde{\rho}_{post}) \leq \frac{C_1^2}{4(c_{post} \tilde{c}_{post})^{\frac{1}{2}}} (\lambda_{n+1} + \dots + \lambda_m),\tag{2.98}$$

gdje je C_1 iz teorema 2.2.3.

Napomena 2.5.2. *Hellingerova udaljenost definirana je kao*

$$H(a, b) = \frac{1}{2} \int \left((a)^{\frac{1}{2}} - (b)^{\frac{1}{2}} \right)^2 dx.\tag{2.99}$$

Algoritam 5 MCMC metoda za aktivne potprostore.

1. Odaberi početne vrijednosti y_1, z_1 i $x_1 = W_1 y_1 + W_2 z_1$. Postavi $k = 1$.
2. Odaberi $y' \in \mathbb{R}^n$ iz dane distribucije.
3. Izračunaj

$$\gamma(y_k, y') = \min \left(1, \frac{\exp(-g(y')) \rho_{pr, Y(y')}}{\exp(-g(y_k)) \rho_{pr, Y(y_k)}} \right). \quad (2.97)$$

4. Odaberi t uniformno iz $[0, 1]$.
 5. Za $\gamma(y_k, y') \geq t$ postavi $y_{k+1} = y'$. Inače postavi $y_{k+1} = y_k$.
 6. Odaberi z_{k+1} iz $\rho_{pr, Z}$ i izračunaj $x_{k+1} = W_1 y_{k+1} + W_2 z_{k+1}$.
 7. Povećaj k i idi na 2.
-

Teorem nam govori da ako su $\lambda_{n+1} = \dots = \lambda_m = 0$, tada je uzimanje uzoraka pomoću aproksimacije *a posteriori* koristeći MCMC metodu u n dimenzija ekvivalentno uzimanju uzoraka pravog *a posteriori*. Daljnja analiza moguća je korištenjem aproksimacije svojstvenih vektora \hat{W}_1 i aproksimacije \hat{g} .

Poglavlje 3

Primjeri u praksi

U ovom poglavlju prikazati će se pogodnosti korištenja aktivnih potprostora kod dva konkretna primjera. Kodovi su napisani u programskom jeziku *Python*. Za više informacija o predstavljenim primjerima, kodovima te drugim primjerima pogledati [1].

3.1 Dioda u solarnoj ćeliji

Model diode u solarnoj ćeliji opisuje odnos jakosti električne struje I i napona U u jednoj diodi. Postoji mnogo modela diode, a mi ćemo iskoristiti sljedeći

$$I = I_L - I_S \left(\exp \left(\frac{U + I R_S}{N_S n U_{th}} \right) - 1 \right) - \frac{U + I R_S}{R_P}, \quad (3.1)$$

gdje je N_S broj ćelija spojenih u serijski spoj, u našem slučaju $N_S = 1$. Konstanta U_{th} je napon kod određene temperature, u ovom modelu $T = 25^\circ C$. Vrijednost I_L je

$$I_L = I_{SC} + I_S \left(\exp \left(\frac{I_{SC} R_S}{N_S n U_{th}} \right) - 1 \right) + \frac{I_{SC} R_S}{R_P}. \quad (3.2)$$

Ostale vrijednosti su ulazni parametri modela dani u sljedećoj tablici. Ulazni parametri

Parametar	Naziv	Donja granica	Gornja granica
I_{SC}	jakost struje u strujnom krugu	0.05989	0.23958
I_S	reverzna struja zasićenja	2.2e-11	2.2e-7
n	koeficijent idealnosti	1	2
R_S	otpor kod serijskog spoja	0.16625	0.66500
R_P	otpor kod paralelnog spoja	93.75	375.00

I_{SC} , I_S imaju mjernu jedinicu amper, n nema mjernu jedinicu dok je mjerna jedinica za R_S i R_P om.

S fiksiranim ulaznim podacima možemo odrediti maksimalnu snagu diode kao

$$P_{max} = \max_{I,U} I U, \quad (3.3)$$

gdje su jakost električne struje I te napon U dani jednadžbama (3.1), (3.2). Promjena ulaznih podataka (I_{SC} , I_S , n , R_S , R_P) rezultira promjenom vrijednosti P_{max} . Tada možemo pisati

$$P_{max} = P_{max}(I_{SC}, I_S, n, R_S, R_P). \quad (3.4)$$

Za početak normaliziramo domenu funkcije P_{max} na hiperkocku, gdje su normalizirane varijable $x = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5]^T$. Umjesto varijable I_S promatramo $\log(I_S)$ kojoj je donja granica -24.54, a gornja granica -15.32.

Neka $\mathcal{L}(\cdot)$ i $\mathcal{U}(\cdot)$ vraćaju donju i gornju granicu argumenta. Tada normaliziramo ulazne parametre kao

$$x_1 = 2 \left(\frac{I_{SC} - \mathcal{L}(I_{SC})}{\mathcal{U}(I_{SC}) - \mathcal{L}(I_{SC})} \right) - 1, \quad (3.5)$$

$$x_2 = 2 \left(\frac{\log(I_S) - \mathcal{L}(\log(I_S))}{\mathcal{U}(\log(I_S)) - \mathcal{L}(\log(I_S))} \right) - 1, \quad (3.6)$$

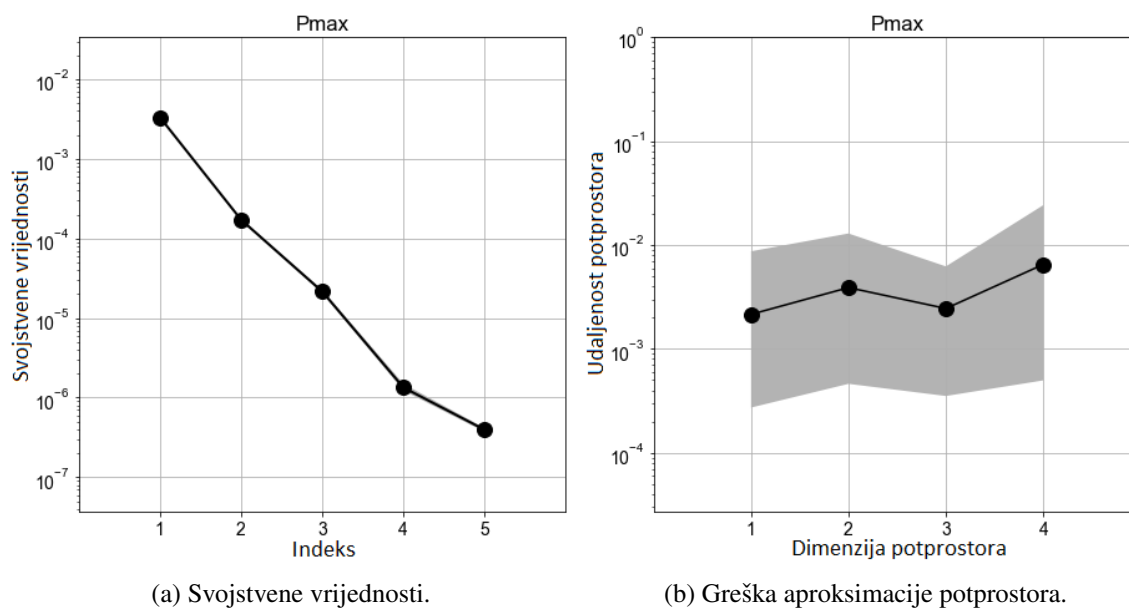
$$x_3 = 2 \left(\frac{n - \mathcal{L}(n)}{\mathcal{U}(n) - \mathcal{L}(n)} \right) - 1, \quad (3.7)$$

$$x_4 = 2 \left(\frac{R_S - \mathcal{L}(R_S)}{\mathcal{U}(R_S) - \mathcal{L}(R_S)} \right) - 1, \quad (3.8)$$

$$x_5 = 2 \left(\frac{R_P - \mathcal{L}(R_P)}{\mathcal{U}(R_P) - \mathcal{L}(R_P)} \right) - 1. \quad (3.9)$$

Tada $x \in [-1, 1]^5$ nema mjernu jedinicu. Ova preslikavanja možemo invertirati, odnosno, za dani $x \in [-1, 1]^5$ možemo naći odgovarajuće ulazne podatke za model diode. Uzimamo težinsku funkciju ρ kao konstantu 2^{-5} unutar domene, a nula izvan. Težinska funkcija je zapravo funkcija gustoće uniformne razdiobe na zadanoj domeni.

Odabiremo $M = 1000$ točaka x_i uniformno na $[-1, 1]^5$ te za svaki x_i računamo P_{max} i aproksimaciju gradijenta. Za proučavanje varijabilnosti izračunatih komponenti \hat{C} definiranih u (1.29) koristimo *bootstrap* intervale s $M' = 1000$ uzoraka. Na slici 3.1a vidimo aproksimirane svojstvene vrijednosti matrice \hat{C} s *bootstrap* intervalom. Interval je jako uzak što nam govori o dobroj aproksimaciji svojstvenih vrijednosti. Postoje velike razlike između prva i druge, te druge i treće svojstvene vrijednosti što nam daje nadu za egzistenciju jednodimenzionalnog aktivnog potprostora. Slika 3.1b prikazuje procjenu greške



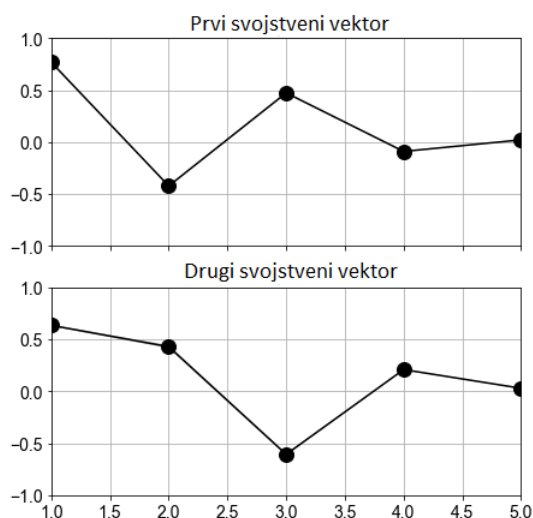
(a) Svojevstvene vrijednosti.

(b) Greška aproksimacije potprostora.

Slika 3.1: Na lijevoj slici vidimo svojevstvene vrijednosti matrice \hat{C} . Desna slika prikazuje procjenu greške aproksimacije potprostora.

akproksimacije potprostora. Ona je uvijek odozgo ograničena s 1.

Slika 3.2 prikazuje komponente prva dva svojevstvena vektora matrice \hat{C} zajedno s *bootstrap* intervalima. Mali *bootstrap* intervali pokazuju stabilnost jednodimenzionalnog i dvodimenzionalnog aktivnog potprostora.

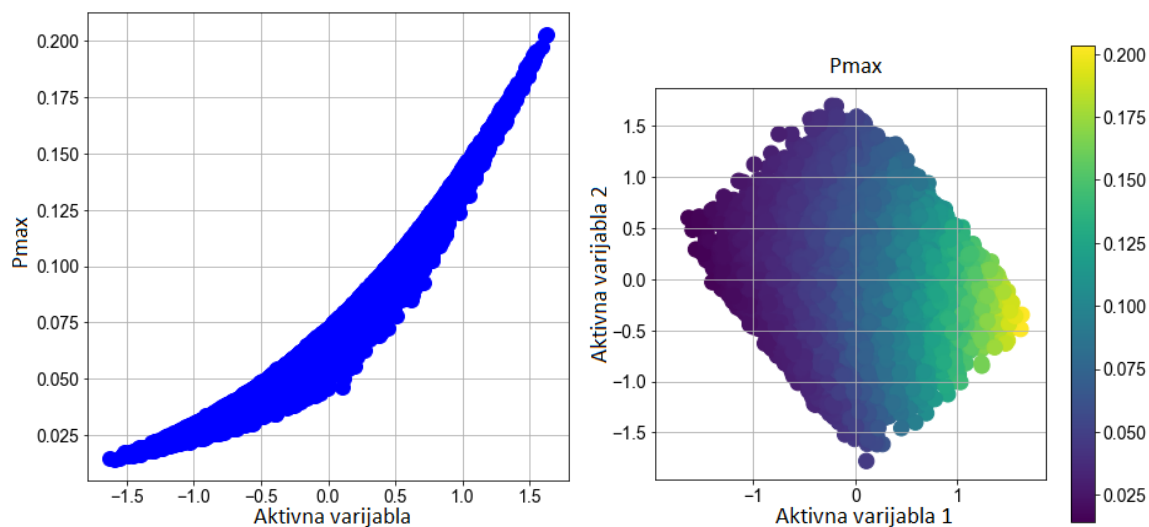


Slika 3.2: Prikaz komponenti prva dva svojstvena vektora matrice \hat{C} zajedno s *bootstrap* intervalima.

Slika 3.3a prikazuje 100 vrijednosti P_{max} dobivenih linearnom kombinacijom komponenti prvog svojstvenog vektora. Odnosno, slika je prikaz jednodimenzionalnog aktivnog potprostora. Na slici 3.3b vidimo prikaz dvodimenzionalnog aktivnog potprostora, generiranog s prva dva svojstvena vektora. Vidljiva je primarna ovisnost o prvoj svojstvenoj vrijednosti. To je jedan od pokazatelja egzistencije dominantnog jednodimenzionalnog aktivnog potprostora.

Komponente prvog svojstvenog vektora povezuju jednodimenzionalni aktivni potprostor s varijablama modela. Apsolutna vrijednost svake komponente svojstvenog vektora može nam koristiti kao mjera relativne promjene vrijednosti funkcije. Veća apsolutna vrijednost komponente implicira veću promjenu vrijednosti funkcije. Komponente koje dolaze od ulaznih parametara R_P i R_S su blizu nule, stoga promjene u R_P i R_S ne rezultiraju velikom promjenom vrijednosti P_{max} . U sljedećoj tablici vidimo vrijednosti komponenata prvog svojstvenog vektora.

Parametar	\hat{w}_1
I_{SC}	0.77
I_S	-0.42
n	0.47
R_S	-0.09
R_P	0.02



(a) Aktivni potprostor generiran prvom svojstvenom vrijednosti.

(b) Aktivni potprostor generiran s prve dvije svojstvene vrijednosti.

Slika 3.3: Prikaz jednodimenzionalnog i dvodimenzionalnog aktivnog potprostora.

Ako bismo tražili podskup parametara, ograničili bismo se na prva tri parametra te aproksimirali P_{max} kao funkciju ta tri parametra. No, našli smo aktivni potprostor koji uzima linearnu kombinaciju svih 5 parametara. Tako svi utječu na vrijednost funkcije, ali je potprostor jednodimenzionalan. Time smo postigli velike uštede pri računanju. Za više informacija o opisanom primjeru pogledati [7].

3.2 Hidrološki ciklus

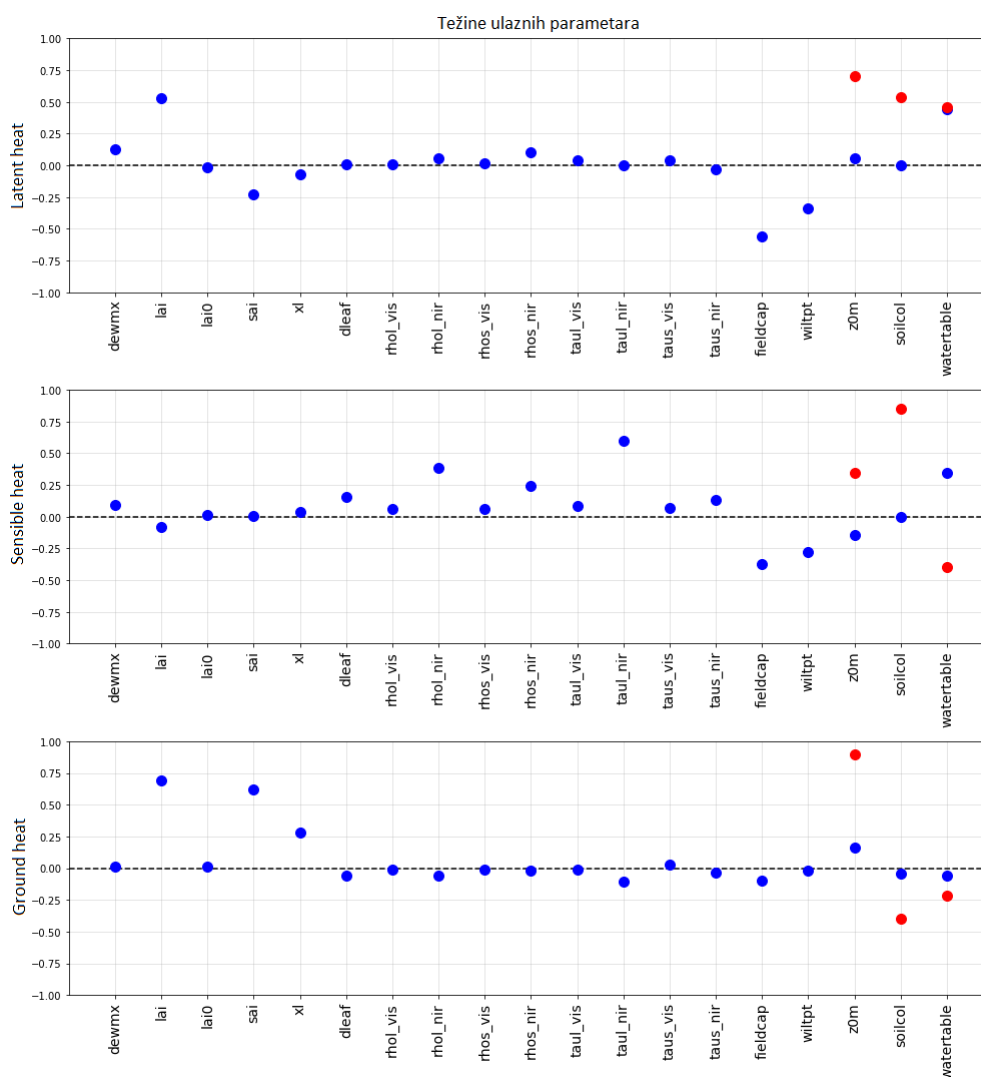
Vrijeme i klimatski uvjeti su uvelike ovisni o protoku energije u i iz zemljine površine. Mi promatramo tri vrste protoka. *Latent heat flux* povezan je s isparavanjem i kondenzacijom vodene pare u blizini zemljine površine. *Sensible heat flux* je prijenos topline uzrokovan razlikom temperature mora i zraka. *Ground heat flux* protok je energije na zemlji. Integri-rani hidrološki modeli kombiniraju utjecaj voda te površine zemlje kako bi odredili nave-dene protoke energije. Mi ćemo koristiti *ParFlow-Common Land Model* pri proučavanju njegovih 19 parametara te kako oni utječu na protoke topline. Ulazni parametri dani su u sljedećoj tablici. U zadnjem stupcu tablice $U(\cdot, \cdot)$ označava uniformnu distribuciju s mini-

Parametar	Naziv	Distribucija
<i>dewmx</i>	maksimalna vlaga na krošnji	$U(0.05, 0.15)$
<i>lai</i>	maksimalna površina lista	$U(1, 4)$
<i>lai0</i>	minimalna površina lista	$U(0.05, 3)$
<i>sai</i>	volumen stabljike	$U(0.5, 4)$
<i>xl</i>	orijentacija lista i stabljike	$U(-0.3, 0.4)$
<i>dleaf</i>	dimenzija lista	$U(0, 0.16)$
<i>rhol_vis</i>	refleksija lista (vidljiva svjetlost)	$U(0.06, 0.13)$
<i>rhol_nir</i>	refleksija lista (nevidljiva svjetlost)	$U(0.35, 0.55)$
<i>rhos_vis</i>	refleksija stabljike (vidljiva svjetlost)	$U(0.3, 0.4)$
<i>rhos_nir</i>	refleksija stabljike (nevidljiva svjetlost)	$U(0.5, 0.6)$
<i>taul_vis</i>	providnost lista (vidljiva svjetlost)	$U(0.01, 0.09)$
<i>taul_nir</i>	providnost lista (nevidljiva svjetlost)	$U(0.1, 0.45)$
<i>taus_vis</i>	providnost stabljike (vidljiva svjetlost)	$U(0.15, 0.25)$
<i>taus_nir</i>	providnost stabljike (nevidljiva svjetlost)	$U(0.3, 0.4)$
<i>fieldcap</i>	vlažnost tla	$U(0.3, 1)$
<i>wiltpt</i>	trenutak uvenuća	$U(0.1, 0.3)$
<i>z0m</i>	brzina vjetra (golo tlo)	$LN(-8.83, 1.47)$
<i>z0m</i>	brzina vjetra (trava)	$LN(-5.11, 0.52)$
<i>soilcol</i>	boja tla	$U(1, 8)$
<i>watertable</i>	dubina podzemnih voda	$U(-10, -1)$

malnom i maksimalnom vrijednosti, a $LN(\cdot, \cdot)$ log-normalnu distribuciju (slučajna varijabla čiji logaritam ima normalnu distribuciju) s očekivanjem i standardnom devijacijom.

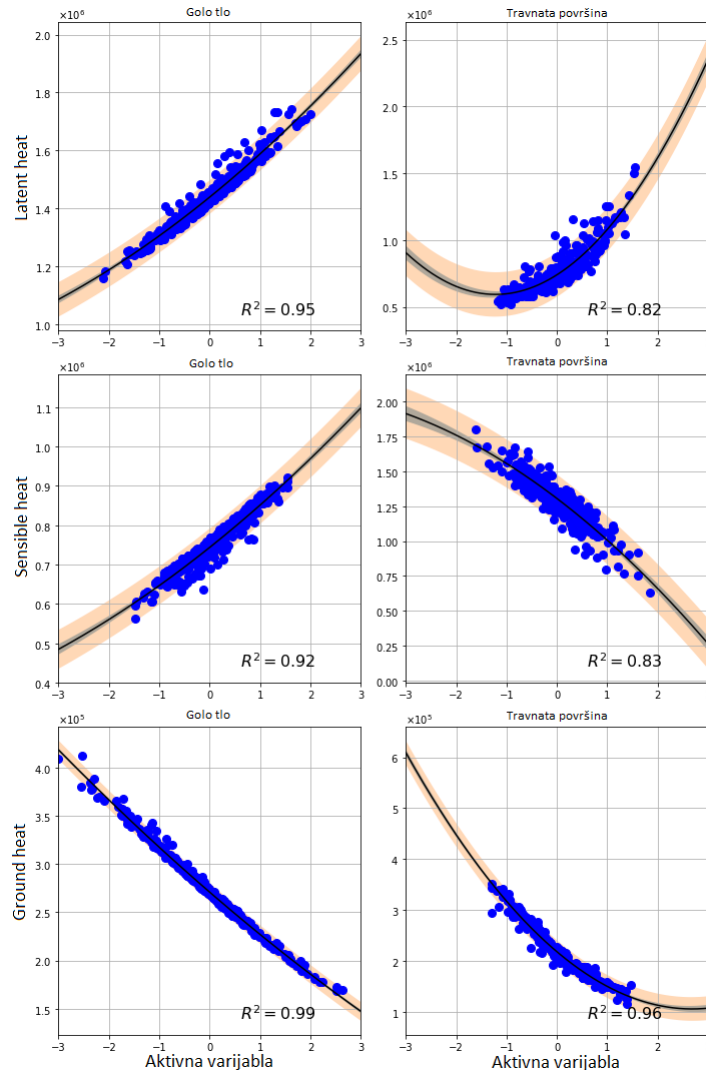
Imamo puno ulaznih parametara zbog kojih su funkcije za protok energije komplicirane te sadrže, uz navedenih 19 ulaznih parametara, i mnogo konstanti. Pošto je nama cilj promatrati pogodnosti korištenja aktivnih potprostora, a ne sami model, konkretne funkcije nećemo navoditi. Za više informacija o cijelom modelu te funkcijama pogledati [6].

Kao i u prethodnom primjeru normaliziramo podatke tako da nam domena postane hiperkocka $[-1, 1]^{19}$. Promatramo dva slučaja, golo tlo te travnatu površinu. Kod svakog slučaja imamo tri protoka energije što nas dovodi do 6 kombinacija. Slika 3.4 prikazuje težine ulaznih parametara za svaki protok topline. Plave točke predstavljaju slučaj travnate



Slika 3.4: Težine ulaznih parametara za svaki protok topline.

površine, a crvene točke golo tlo. Vidimo da na golo tlo utječu samo zadnja tri parametra. Težina svake komponente govori nam koliko ona utječe na protok topline. Što je težina veća, utjecaj na protok je veći. Na slici 3.5 vidimo prikaz aktivne varijable (plave točke) te kvadratnog *response surface* (crna linija) s intervalom pouzdanosti. Za određivanje vrijed-



Slika 3.5: Prikaz aktivne varijable i *response surface* s intervalom pouzdanosti.

nosti protoka energije možemo koristiti formulu

$$g(y) \approx C_0 + C_1 y + C_2 y^2 \approx C_0 + C_1 (\hat{w}^T x) + C_2 (\hat{w}^T x)^2, \quad (3.10)$$

gdje je x normalizirani ulazni podatak. Vrijednost $g(y)$ može vratiti svaki od tri navedena oblika protoka energije. Oznaka y predstavlja aktivne varijable. U sljedećoj tablici prikazani su koeficijenti za navedeni kvadratni polinom.

Model	C_0	C_1	C_2
Golo tlo			
<i>Latent heat</i>	8.41e3	1.11e3	1.04e2
<i>Sensible heat</i>	1.81e3	5.27e2	-1.57e2
<i>Ground heat</i>	9.10e2	2.05e2	1.01e1
Travnata površina			
<i>Latent heat</i>	7.22e3	1.53e3	3.17e2
<i>Sensible heat</i>	2.28e3	1.54e3	-1.48e2
<i>Ground heat</i>	3.54e2	2.95e2	7.36e1

Opisanim postupkom pronašli smo jednodimenzionalan aktivni potprostor na domeni od 19 ulaznih parametara. Jasno je da će korištenjem jednodimenzionalnog aktivnog potprostora svi računi biti brže izvedeni te da ćemo moći bolje aproksimirati vrijednosti protoka energije u ovisnosti o ulaznim podacima. Pretpostavka je da se ovaj model može iskoristiti ne samo na ovdje navedenim podacima, već i na svim ostalim varijantama klime i tla.

Bibliografija

- [1] *Active Subspaces*, <http://activesubspaces.org/>, (Srpanj 2019.).
- [2] *Monte Carlo integration*, https://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_integration, (Travanj 2019.).
- [3] D. Bakić, *Linearna algebra*, Školska knjiga, 2008.
- [4] P. Constantine, *Active Subspaces: Emerging Ideas for Dimension Reduction in Parameter Studies*, SIAM Spotlights, 2015.
- [5] P. Constantine, E. Dow i Q. Wang, *Active Subspace Methods in Theory and Practice: Applications to Kriging Surfaces*, SIAM Journal of Scientific Computing **36** (2014), br. 4, A1500–A1524.
- [6] P. Constantine, J. Jefferson, J. Gilbert i R. Maxwell, *Active subspaces for sensitivity analysis and dimension reduction of an integrated hydrologic model*, Computers & Geosciences **83** (2015), 127–138.
- [7] P. Constantine, B. Zaharatos i M. Campanelli, *Discovering an active subspace in a single-diode solar cell model*, Statistical Analysis and Data Mining **8** (2015), br. 5-6, 264–273.
- [8] N. Sarapa, *Teorija vjerojatnosti*, Školska knjiga, 2002.

Sažetak

Aktivni potprostor je linearan potprostor definiran važnim smjerovima ulaznih podataka modela. Promjena ulaznih podataka duž tih smjerova mijenja vrijednost funkcije u prosjeku više nego promjene duž njima ortogonalnih smjerova. Nemaju svi modeli aktivni potprostor. Kod takvih modela vrijednost funkcije se značajno mijenja duž svih smjerova. Ako kod modela postoji aktivni potprostor, možemo promatrati kako se vrijednost funkcije mijenja promjenom ulaznih podataka duž važnih smjerova - aktivnih varijabli. Stoga postoje velike prednosti pronalaska aktivnog potprostora za dani model.

U prvom poglavlju razvijamo teorijsku pozadinu aktivnih potprostora. Definiramo ih te navodimo metode i algoritme za pronalazak aktivnog potprostora. U drugom poglavlju predstavljamo primjere za primjenu aktivnih potprostora kod višedimenzionalne analize promjene vrijednosti funkcije promjenom ulaznih podataka. U trećem poglavlju primjenjujemo usvojena znanja o aktivnim potprostorima na dva konkretna primjera u praksi: analiza povezanosti ulaznih podataka modela i maksimalne snage diode u solarnoj ćeliji te analiza hidrološkog ciklusa.

Summary

The active subspace is a linear subspace defined by important directions in the function's domain. Changes along these directions alter the function's value more, on average, than changes orthogonal to the important directions. Some function's values react significantly to changes along all directions. These function's don't have an active subspace. But if a function has an active subspace, then we can make use of it to perform parameter studies in the active variables, which are linear combinations of the function's variables.

The first chapter develop the technical background, including defining the active subspace and suggesting a method to find the active subspace. The second chapter presents strategies to make use of the active subspace for parameter studies. The third chapter reveal the usefulness of active subspaces in two engineering applications: characterizing the relationship between model inputs and maximum power in a photovoltaic solar cell model and sensitivity analysis of an integrated hydrologic model.

Životopis

Rođen sam 12. ožujka 1996. godine u Karlovcu. U Karlovcu sam završio osnovnu školu i Gimnaziju Karlovac, prirodoslovno-matematički smjer. Godine 2014. upisujem preddiplomski sveučilišni studij Matematika na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu, koji završavam 2017. godine te stičem naziv sveučilišni prvostupnik matematike. Iste godine upisujem diplomski studij Primijenjena matematika, kojeg završavam ovim radom.