

ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Метод наименьших квадратов принадлежит к основным классическим методам представления экспериментальных данных с помощью аппроксимирующих функций. Впервые указанный в работах Лежандра и Гаусса метод нашел широкое практическое применение в различных вопросах математической статистики и инженерного анализа [1].

Если поле экспериментальных данных аппроксимируется полиномом

$$y(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i,$$

то по методу наименьших квадратов коэффициенты a_i вычисляются из условия минимума

$$\Delta_2 = \sum_{j=1}^N [y(x_j) - y_j]^2 = \min,$$

где y_j — экспериментальное значение, соответствующее независимой переменной x_j ; N — общее число экспериментальных точек.

В результате этого получается система линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов a_i [2]

$$[a_{ik}] \{a_k\} = \{b_i\},$$

$$\text{где } a_{ik} = \sum_{j=1}^N x_j^{i+k} \quad b_i = \sum_{j=1}^N y_j x_j^i.$$

Метод наименьших квадратов отличается простотой (приводит к системе линейных уравнений) и дает наилучшие оценки для случайных величин, распределенных по нормальному закону.

Однако осреднение по минимуму квадратичного отклонения может оказаться неудовлетворительным, если «опасными» признать наибольшие отклонения экспериментальных данных от аппроксимирующей кривой.

В обобщенном методе исходят из условия минимума погрешности порядка ν :

$$\Delta_\nu = \sum_{j=1}^n |y(x_j; a_0, \dots, a_n) - y_j|^\nu, \quad (1)$$

где ν ($\nu > 0$) — порядок «погрешности». При $\nu = 2$ введенная погрешность совпадает с квадратичной погрешностью, при $\nu = 1$ погрешность получается как сумма модулей отклонений.

Отметим, что величина ν влияет на параметры a_i и при больших ν ($\nu > 3$), аппроксимирующая функция ближе подходит к точкам с наибольшими отклонениями.

Выбор значения ν зависит от физических особенностей задачи, т. е. от того, насколько «опасны» отдельные отклонения.

Используя зависимость (1), найдем параметры a_i из условия минимума обобщенной погрешности.

В результате получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta_\nu}{\partial a_i} &= \nu \sum_{j=1}^N |y(x_j; a_0, \dots, a_n) - y_j|^{\nu-1} \times \\ &\times \frac{\partial y(x_j; a_0, \dots, a_n)}{\partial a_i} \text{sign}[y(x_j, a_0, \dots, a_n) - y_j] = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

$(i = 0, 1, \dots, n),$

так как производная модуля функции будет

$$|y|' = y' \text{sign } y$$

в точках, где существует y' (угловые точки исключаются из рассмотрения).

Для аппроксимирующей функции в виде степенного полинома

$$y(x; a_0, \dots, a_n) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$$

будем иметь

$$\frac{\partial y(x; a_0, \dots, a_n)}{\partial a_i} = x^i.$$

Тогда система уравнений (2) получит следующий вид:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N [a_0 + a_1 x_j + \dots + a_n x_j^n - y_j]^{\nu-1} x_j^i \text{sign}[a_0 + a_1 x_j + \dots + \\ + a_n x_j^n - y_j]^\nu = 0 \end{aligned} \quad (i = 0, 1, \dots, n). \quad (3)$$

При $\nu = 2$ полученная система уравнений будет обычной линейной системой метода наименьших квадратов, при $\nu \neq 2$ получается система нелинейных уравнений

$$\varphi_i(a_0, a_1, \dots, a_n) = 0 \quad (i = 0, 1, \dots, n),$$

$$\text{где } \varphi_i(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{j=1}^N [a_0 + a_1 x_j + \dots + a_n x_j^n - y_j]^{\nu-1} \times \\ \times x_j^i \text{sign}[a_0 + a_1 x_j + \dots + a_n x_j^n - y_j]^\nu,$$

Прежде, чем перейти к дальнейшему анализу, рассмотрим простой частный случай: аппроксимацию экспериментальной зависимости постоянной величиной.

Если имеется N точек со значениями $y_1, y_2, \dots, y_N$, то в качестве наиболее «представительной» постоянной величины выбирается обычно среднее значение:

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j.$$

Рассмотрим теперь эту задачу с точки зрения общего метода аппроксимации. Очевидно, что аппроксимирующий полином имеет здесь нулевую степень

$$y(x; a_0, a_1, \dots, a_n) = a_0.$$

Если выбирается аппроксимация по минимуму квадратичной погрешности $v = 2$, то из уравнений (3) получаем:

$$\sum_{j=1}^N (a_0 - y_j) = 0; \quad a_0 = \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j,$$

что совпадает с обычным подходом. При $v = 1$ из уравнений (3) получаем

$$\sum_{j=1}^N \text{sign}[a_0 - y_j] = 0.$$

Располагая y_j в возрастающем порядке ($y_1 < y_2 < \dots < y_N$), легко показать, что при нечетном N величина a_0 совпадает с медианным значением y

$$a_0 = y_{1/2(N+1)}.$$

При четном значении N величина a_0 может иметь произвольные значения

$$y_{1/2N} < a_0 < y_{1/2N+1}$$

При возрастании v ($v \rightarrow \infty$) значение a_0 стремится к

$$a_0 = \frac{1}{2} (y_1 + y_N)$$

(точка a_0 равноудалена от крайних точек).

Интересно, что все указанные значения a_0 применяются при статистическом анализе.

Рассмотрим общий метод решения систем нелинейных алгебраических уравнений:

$$\varphi_i(a_0, a_1, \dots, a_n) = 0 \quad (i = 0, 1, \dots, n), \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_i(a_0, a_1, \dots, a_n) = & \sum_{j=1}^N [y(x_j; a_0, a_1, \dots, a_n) - y_j]^{v-1} \times \\ & \times \frac{\partial y(x_j; a_0, a_1, \dots, a_n)}{\partial a_i} \operatorname{sign}[y(x_j; a_0, a_1, \dots, a_n) - y_j]^v. \end{aligned}$$

Будем использовать обобщенный метод Ньютона. Выберем (произвольным образом) некоторые нулевые значения параметров $a_0^{(0)}, a_1^{(0)}, \dots, a_n^{(0)}$. Тогда истинные значения параметров представим так:

$$a_i = a_i^{(0)} + h_i^{(0)},$$

где $h_i^{(0)}$ — дополнительные величины, которые рассматриваются как малые.

Ограничиваясь первыми членами разложения в ряд Тейлора, из уравнений (4) будем иметь:

$$\varphi_i(a_0, \dots, a_n) = \varphi_i(a_0^{(0)}, \dots, a_n^{(0)}) + \frac{\partial \varphi_i}{\partial a_0} h_0^{(0)} + \dots + \frac{\partial \varphi_i}{\partial a_n} h_n^{(0)} = 0.$$

Значения производных берутся при $a_0^{(0)}, \dots, a_n^{(0)}$. Для отыскания «нулевого приближения» дополнительных величин получим систему линейных алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_i}{\partial a_0} h_0^{(0)} + \dots + \frac{\partial \varphi_i}{\partial a_n} h_n^{(0)} = & -\varphi_i(a_0^{(0)}, \dots, a_n^{(0)}) \\ (i = 0, 1, \dots, n). \end{aligned}$$

После определения $h_i^{(0)}$ находим

$$a_i^{(1)} = a_i^{(0)} + h_i^{(0)}$$

и процесс расчета повторяется. В практических расчетах удовлетворительная точность получается после 3—6 приближений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Линник Ю. В. Метод наименьших квадратов. — М.: Госиздат, 1962.
2. Биргер И. А. Техническая диагностика. — М.: Машиностроение, 1973.