Метод наименьших квадратов как управляемая динамическая система

Ю.И. Неймарк, Л.Г. Теклина (neymark@pmk.unn.runnet.ru)

Научно-исследовательский институт прикладной математики и кибернетики Нижегородского государственного университета

МНК – это метод оценивания неизвестных параметров теоретических моделей по косвенным измерениям при параметрическом анализе данных. Истоки МНК восходят к концу XVIII и началу XIX веков, к трудам К. Гаусса и А. Лежандра. Дальнейшее развитие этот метод получил в работах многих известных математиков: Лапласа, Чебышева, Неймана, Рао, Маркова, Колмогорова и др. Главные достоинства решения задачи оценивания с использованием МНК связаны с ее априорной разрешимостью и такими замечательными свойствами получаемых оценок, как несмещенность, эффективность и состоятельность, что сделало МНК одним из наиболее широко известных и многообразно используемых математических методов обработки наблюдений и экспериментальных данных. МНК позволяет на основе принимаемых гипотез и математических моделей определять неизвестные параметры и закономерности не только в задачах прямой обработки данных, но и в задачах фильтрации, идентификации, распознавания образов, сжатия описания (кодирования), автокорреляционного анализа и др.

В основе МНК лежит минимизация квадратичного функционала

$$J(a_1, a_2, ..., a_m) = \sum_{j=1}^{N} \left(\sum_{i=1}^{m} a_i \varphi_i(\mathbf{x}^j) - b_j \right)^2 \qquad (1)$$

при линейных ограничениях

$$\sum_{i=1}^{m} g_{ki} a_i - c_k = 0 \qquad (k = 1,2,...,L) \qquad (2)$$

по искомым значениям параметров $a_1, a_2, ..., a_m$ на основе используемых данных из N наблюдений $\{(b_j, \mathbf{x}^j) / j = 1,2,...,N\}$, где b_j – характеристика j- го объекта, а $\mathbf{x}^j = (x_1^j, ..., x_n^j)$– его описание в n-мерном евклидовом пространстве. Предположение о наличии зависимости вида $b = \sum_{i=1}^{m} a_i \varphi_i(\mathbf{x})$, которая может быть точным или принимаемым приближением, определяется выбранными базисными функциями $\varphi_1(\mathbf{x}), \varphi_2(\mathbf{x}), ..., \varphi_m(\mathbf{x})$ и линейными ограничениями (2), и вместе они составляют модель, положенную в основу конкретного применения МНК.

Если ввести матричные обозначения (индексы в скобках определяют значения элементов матриц, а индексы вне скобок - и значения элементов, и порядок матриц):

$\mathbf{a}_{m(N,L)} = \|a_i\|, i = 1,2,...,m - (m \times 1) -$ матрица искомых параметров a_i;

$\mathbf{b}_N = \|b_j\|, j = 1,2,...,N - (N \times 1) -$ матрица значений b_j;

$\mathbf{F}_{N,m} = \left\|\varphi_i(\mathbf{x}^j)\right\| j = 1,2,...,N; i = 1,2,...,m - (N \times m)$ – матрица значений функций $\varphi_1(\mathbf{x}),...,\varphi_m(\mathbf{x})$, на векторах $\mathbf{x}^1,...,\mathbf{x}^N$ (в матрице $\mathbf{F}_{N,m}$ столбцы Φ_i представляют собой значения функции $\varphi_i(\mathbf{x})$ в точках $\mathbf{x}^1,...,\mathbf{x}^N$, а строки $\mathbf{f}_j$ - это значения функций $\varphi_1(\mathbf{x}),...,\varphi_m(\mathbf{x})$ при $\mathbf{x} = \mathbf{x}^j$) -
то функционал (1) примет вид

$$J(\mathbf{a}_{m(N,L)}) = (\mathbf{F}_{N,m}\mathbf{a}_{m(N,L)} - \mathbf{b}_N)^T (\mathbf{F}_{N,m}\mathbf{a}_{m(N,L)} - \mathbf{b}_N).$$

При минимизации функционала (1) в условиях наличия L линейных ограничений вида (2) $\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{a}_{m(N,L)} = \mathbf{c}_L$ методами линейной алгебры и оптимизации (метод множителей Лагранжа для условной оптимизации) можно найти оптимальные значения параметров в виде явных формул [1]:

$$\begin{cases} \mathbf{a}_{m(N,L)} = (\mathbf{P}^{-1}_{m(N)} - \mathbf{D}_{m(N,L)})\mathbf{F}^T_{N,m}\mathbf{b}_N + \mathbf{S}^T_{L,m(N)}\mathbf{c}_L \\ \lambda_{L(N,m)} = \mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{F}^T_{N,m}\mathbf{b}_N - \mathbf{Q}^{-1}_{L(N,m)}\mathbf{c}_L \end{cases} \qquad (3)$$

где $\mathbf{P}_{m(N)} = \mathbf{F}^T_{N,m}\mathbf{F}_{N,m}$ – информационная матрица размерности $m \times m$,

$\lambda_{L(N,m)}$ – вектор коэффициентов Лагранжа размерности $L \times 1$,

$\mathbf{Q}_{L(m,N)} = \mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}^{-1}_{m(N)}\mathbf{G}^T_{L,m}$ – матрица размерности $L \times L$,

$\mathbf{D}_{m(N,L)} = \mathbf{P}^{-1}_{m(N)}\mathbf{G}^T_{L,m}\mathbf{Q}^{-1}_{L(N,m)}\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}^{-1}_{m(N)}$ – матрица размерности $m \times m$, ранг которой $rang\mathbf{D} \le L \le m$, $\mathbf{S}_{L,m(N)} = \mathbf{Q}^{-1}_{L(N,m)}\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}^{-1}_{m(N)}$ – матрица размерности $L \times m$.

Решение (3) имеет место при условии невырожденности матриц $\mathbf{P}_{m(N)}$ и $\mathbf{Q}_{L(N,m)}$, когда ранги матриц $\mathbf{P}_{m(N)}$ и $\mathbf{Q}_{L(N,m)}$ максимальны и равны m и L соответственно.

Для удобства записи в дальнейшем введем матрицу $\Gamma_{m(N,L)} = \mathbf{P}^{-1}_{m(N)} - \mathbf{D}_{m(N,L)}$, при $L = 0$ $\mathbf{\Gamma}_{m(N,0)} = \mathbf{P}^{-1}_{m(N)}$.

Это - МНК в своей исходной классической форме.

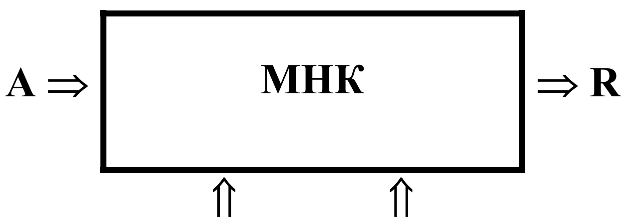

Рис.1

Преобразование, определяемое МНК, от входных данных и управляющих команд исследователя к выходным результатам можно представить схематически как показано на рис.1. Прямоугольник символизирует вычислительную процедуру МНК, A,B и C – входы для данных, необходимых для вычислений (A – исходные данные, B – базисные функции, C – линейные ограничения), R – выход, дающий значения искомых параметров и величину функционала качества решения. Классическая форма МНК предполагает, что сначала поступают все входные данные, а затем выполняются вычисления и выдаются требуемые выходные данные.

Но существуют две трудности применения классического МНК. Первая связана с обращением матрицы, подчас большой размерности, без уверенности в ее корректности. Вторая трудность вызвана тем, что задача анализа данных, осуществляющая преобразование от “исходных данных” к “результату”, обычно требует изменений в выборке данных и в принимаемых гипотезах в отношении изучаемых процессов и явлений. МНК в своей канонической форме при любых изменениях используемых данных, принимаемых моделей и гипотез требует полного повторения всех вычислений. Именно поэтому уже в 1821г. Гаусс предложил рекуррентный вариант процедуры, позволяющий корректировать ранее вычисленную оценку с учетом вновь поступивших дополнительных измерений без необходимости повторять все предшествующие вычисления, для случая, когда наблюдение представляется скаляром [2]. В 1950 г. Плакетт обобщил эту идею на случай векторной величины [3]. Рекуррентная форма МНК получила очень широкое распространение, особенно в теории идентификации, адаптивного управления и современной теории фильтрации. Вычисление оптимальных значений параметров с использованием рекуррентной формулы Плакетта представляет собой итерационный процесс, результат которого зависит от задания начальных значений для вектора искомых параметров и обратной информационной матрицы, а также от объема выборки данных. Дальнейшее расширение рекуррентной формы МНК для случая поиска единственного решения с минимальной нормой путем псевдообращения матрицы данных осуществлено в работах А.Алберта [4]. Но получаемый при этом набор операций итеративного изменения используемых данных и модели – базовых функций и линейных ограничений на искомые параметры – не полный. Доведение его до полного набора привело к универсальной рекуррентной форме МНК, полученной авторами данной работы [5-7]. Универсальность введенных рекуррентных процедур заключается, во-первых, в общности формул как для случая наличия линейных ограничений на оцениваемые параметры, так и при отсутствии таких ограничений и, во-вторых, в наличии рекуррентных процедур МНК и по числу данных в выборке, и по определяемым параметрам, и по количеству ограничений на параметры, причем возможные изменения включают в себя как увеличение, так и сокращение и выборки, и описания, и ограничений. Полнота введенных операций открывает новые более широкие возможности приложений и использования МНК.

Процесс обработки данных с использованием рекуррентного МНК – динамический процесс: все время на входы A, B и C могут подаваться извне данные или исключаться старые и в соответствии с ними выход R выдает соответствующие им значения искомых параметров, и происходит это не путем многократного повторения вычислительной процедуры МНК, а рекуррентно на основе состояния Ξ динамической системы, или точнее: управляемой динамической системы обработки и анализа данных на основе метода наименьших квадратов.

Оператор этой динамической системы задается универсальной рекуррентной формой МНК, включающей в себя шесть наборов рекуррентных процедур. Реализация оператора управляемой динамической системы не требует обращения матриц, а только их сложения и умножения. Управление системой состоит в выборе на каждом шаге необходимой рекуррентной процедуры и текущего входного воздействия для перехода системы в новое состояние. Выбор управления определяется результатами анализа информации с помощью МНК, числовыми показателями качества решения – значения функционала J - и данными, поступающими на вход системы.

Состояние системы Ξ описывается пятью ($\mathbf{a},\Gamma,\mathbf{Q}^{-1},\mathbf{S},\lambda$ - при наличии ограничений на параметры) или двумя ($\mathbf{a},\Gamma$ - при отсутствии ограничений на параметры) матрицами, включая и вектор определяемых параметров. При этом

$$\Xi^{k+1} = T(u^{k+1})\Xi^{k},$$

где Ξ^{k} и Ξ^{k+1} - состояния на k-ом и следующем k+1-ом тактах вычислений, u^{k+1}- вектор входа используемых данных и управляющих воздействий исследователя, поступающих после k-го шага. Выход системы содержит как выбранный базис и соответствующий ему вектор оптимальных параметров, так и числовые показатели качества решения поставленной задачи, а при необходимости и матрицу введенных линейных ограничений.

Вектор u^{k+1} представляет собой одно из следующих шести возможных входных воздействий I-VI, определяемых ниже.

I. Введение новых входных данных ($\mathbf{x}^{N+1},b_{N+1}$).

Вектору $\mathbf{x}^{N+1}$ соответствует вектор значений базисных функций $\mathbf{f}_{N+1}$. При поступлении новых данных новое состояние системы и оптимальное значение функционала определяются рекуррентными процедурами:

$$\mathbf{a}_{m(N+1,L)} = \mathbf{a}_{m(N,L)} + \frac{\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}}{1+\mathbf{f}_{N+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}}(b_{N+1}-\mathbf{f}_{N+1}\mathbf{a}_{m(N,L)}), \tag{4}$$

$$\Gamma_{m(N+1,L)} = \Gamma_{m(N,L)} - \frac{\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}\mathbf{f}_{N+1}\Gamma_{m(N,L)}}{1+\mathbf{f}_{N+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}}. \tag{5}$$

$$\mathbf{Q}_{L(N+1,m)}^{-1} = \mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1} + \frac{\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}\mathbf{f}_{N+1}\mathbf{S}_{L,m(N)}^{T}}{1+\mathbf{f}_{N+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}}, \tag{6}$$

$$\mathbf{S}_{L,m(N+1)} = \mathbf{S}_{L,m(N)} - \frac{\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}\mathbf{f}_{N+1}\Gamma_{m(N,L)}}{1+\mathbf{f}_{N+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}}, \tag{7}$$

$$\lambda_{L(N+1,m)} = \lambda_{L(N,m)} + \frac{\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}}{1+\mathbf{f}_{N+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}}(b_{N+1}-\mathbf{f}_{N+1}\mathbf{a}_{m(N,L)}). \tag{8}$$

$$J(\mathbf{a}_{m(N+1,L)}) = J(\mathbf{a}_{m(N,L)}) + \frac{(b_{N+1}-\mathbf{f}_{N+1}\mathbf{a}_{m(N,L)})^{2}}{1+\mathbf{f}_{N+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N+1}^{T}} \tag{9}$$

II. Исключение старых данных ($\mathbf{x}^{N},b_{N}$).

Вектору $\mathbf{x}^{N}$ соответствует вектор значений базисных функций $\mathbf{f}_{N}$. При исключении из выборки этого вектора система переходит в новое состояние, определяемое следующими рекуррентными формулами:

$$\mathbf{a}_{m(N-1,L)} = \mathbf{a}_{m(N,L)} - \frac{\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{N}^{T}}{1-\mathbf{f}_{N}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_{\mathbf{N}}^{T}}(b_{N}-\mathbf{f}_{N}\mathbf{a}_{m(N,L)}), \tag{10}$$

$$\Gamma_{m(N-1,L)} = \Gamma_{m(N,L)} + \frac{\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}}{1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T}. \tag{11}$$

$$\mathbf{Q}_{L(N-1,m)}^{-1} = \mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1} - \frac{\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{f}_N^T\mathbf{f}_N\mathbf{S}_{L,m(N)}^T}{1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T}, \tag{12}$$

$$\mathbf{S}_{L,m(N-1)} = \mathbf{S}_{L,m(N)} + \frac{\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{f}_N^T\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}}{1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T}, \tag{13}$$

$$\lambda_{L(N-1,m)} = \lambda_{L(N,m)} - \frac{\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{f}_N^T}{1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T}(b_N - \mathbf{f}_N\mathbf{a}_{m(N,L)}). \tag{14}$$

$$J(\mathbf{a}_{m(N-1,L)}) = J(\mathbf{a}_{m(N,L)}) - \frac{(b_N - \mathbf{f}_N\mathbf{a}_{m(N,L)})^2}{1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T} \tag{15}$$

III. Введение новой функции $\varphi_{m+1}(\mathbf{x})$ с соответствующим введением нового параметра a_{m+1}.

При вводе новой базисной функции матрица $\mathbf{F}_{N,m}$ пополняется новым столбцом Φ_{m+1}, а матрица $\mathbf{G}_{L,m}$ - столбцом η_{m+1}, но вид ограничений для старых параметров остается неизменным. Необходима и дополнительная информация о связи новой функции с уже сформированным базисом. Эта информация представляется вектором $\mathbf{z}_{m+1} = \Phi_{m+1}^T\mathbf{F}_{N,m}$, который является строкой матрицы $\mathbf{P}_{M(N)}$, $M \geq m$, рекуррентно формируемой в процессе ввода статистических данных (увеличения N) согласно формуле $\mathbf{P}_{M(N+1)} = \mathbf{P}_{M(N)} + \mathbf{f}_{N+1}^T\mathbf{f}_{N+1}$. Новое состояние системы и оптимальное значение функционала определяются в соответствии с рекуррентными процедурами:

$$\mathbf{a}_{m+1(N,L)} = \left\| \begin{matrix} \mathbf{a}_{m(N,L)} - \Omega_{m+1}^{-1}\mathbf{w}_{m+1}(\Phi_{m+1}^T\mathbf{b}_N - \mathbf{z}_{m+1}\mathbf{a}_{m(N,L)} - \eta_{m+1}^T\lambda_{L(N,m)}) \\ \Omega_{m+1}^{-1}(\Phi_{m+1}^T\mathbf{b}_N - \mathbf{z}_{m+1}\mathbf{a}_{m(N,L)} - \eta_{m+1}^T\lambda_{L(N,m)}) \end{matrix} \right\|, \tag{16}$$

$$\lambda_{L(N,m+1)} = \lambda_{L(N,m)} - \Omega_{m+1}^{-1}\mathbf{v}_{m+1}(\Phi_{m+1}^T\mathbf{b}_N - \mathbf{z}_{m+1}\mathbf{a}_{m(N,L)} - \eta_{m+1}^T\lambda_{L(N,m)}), \tag{17}$$

$$\Gamma_{m+1(N,L)} = \left\| \begin{matrix} \Gamma_{m(N,L)} + \Omega_{m+1}^{-1}\mathbf{w}_{m+1}\mathbf{w}_{m+1}^T & -\Omega_{m+1}^{-1}\mathbf{w}_{m+1} \\ -\Omega_{m+1}^{-1}\mathbf{w}_{m+1}^T & \Omega_{m+1}^{-1} \end{matrix} \right\|, \tag{18}$$

$$\mathbf{Q}_{L(N,m+1)}^{-1} = \mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1} - \Omega_{m+1}^{-1}\mathbf{v}_{m+1}\mathbf{v}_{m+1}^T, \tag{19}$$

$$\mathbf{S}_{L,m+1(N)}^T = \left\| \begin{matrix} \mathbf{S}_{L,m(N)}^T + \Omega_{m+1}^{-1}\mathbf{w}_{m+1}\mathbf{v}_{m+1}^T \\ -\Omega_{m+1}^{-1}\mathbf{v}_{m+1}^T \end{matrix} \right\|, \tag{20}$$

$$J(\mathbf{a}_{m+1(N,L)}) = J(\mathbf{a}_{m(N,L)}) - \Omega_{m+1}^{-1}\left(\Phi_{m+1}^T\mathbf{b}_N - \mathbf{z}_{m+1}\mathbf{a}_{m(N,L)} - \eta_{m+1}^T\lambda_{L(N,m)}\right)^2 \tag{21}$$

где $\mathbf{w}_{m+1} = \Gamma_{m(N,L)}\mathbf{z}_{m+1}^T + \mathbf{S}_{L,m(N)}^T\eta_{m+1}$ и $\mathbf{v}_{m+1} = \mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{z}_{m+1}^T - \mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}\eta_{m+1}$,

$$\Omega_{m+1} = \Phi_{m+1}^T \Phi_{m+1} - z_{m+1}\Gamma_{m(N.L)}\mathbf{z}_{m+1}^T - \mathbf{z}_{m+1}\mathbf{S}_{L,m(N)}^T \eta_{m+1} - \eta_{m+1}^T \mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{z}_{m+1}^T +$$
$$+\eta_{m+1}^T \mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}\eta_{m+1} = \Phi_{m+1}^T \Phi_{m+1} - z_{m+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{z}_{m+1}^T +$$
$$+(\mathbf{z}_{m+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T - \eta_{m+1}^T)\mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{z}_{m+1}^T - \eta_{m+1}) =$$
$$= H_{m+1} + (\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{z}_{m+1}^T - \eta_{m+1})^T \mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{z}_{m+1}^T - \eta_{m+1})\,. \qquad (22)$$

IV. Исключение из базиса некоторой функции $\varphi_\nu(\mathbf{x})$ и соответствующего ей параметра a_ν.

Если из рассмотрения исключается ν-ый параметр, $\nu < m$, то удобнее предварительно изменить порядок следования функций в базисе на $\varphi_1(\mathbf{x}),...,\varphi_{\nu-1}(\mathbf{x}),\varphi_{\nu+1}(\mathbf{x}),...,\varphi_m(\mathbf{x}),\varphi_\nu(\mathbf{x})$ с соответствующей перестановкой строк и столбцов в тех рассматриваемых матрицах и векторах, порядок элементов в которых определяется упорядоченностью базиса: $\mathbf{a}_{m(N,L)}, \Gamma_{m(N,L)}, \mathbf{S}_{L,m(N)}, \mathbf{P}_{m(N)}$, после чего воспользоваться рекуррентными формулами для определения нового состояния системы после исключения m-ого параметра:

$$\mathbf{a}_{m-1(N,L)} = \overline{\mathbf{a}_{m(N,L)}} - \gamma_{mm}^{-1}\gamma_{.m}a_m\,, \qquad (23)$$

$$\lambda_{L(N,m-1)} = \lambda_{L(N,m)} - \gamma_{mm}^{-1}\mathbf{s}_{.m}a_m\,, \qquad (24)$$

$$\Gamma_{m-1(N,L)} = \overline{\Gamma_{m(N,L)}} - \gamma_{mm}^{-1}\gamma_{.m}\gamma_{.m}^T\,, \qquad (25)$$

$$\mathbf{Q}_{L(N,m-1)}^{-1} = \mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1} + \gamma_{mm}^{-1}\mathbf{s}_{.m}\mathbf{s}_{.m}^T\,, \qquad (26)$$

$$\mathbf{S}_{L,m-1(N)} = \overline{\mathbf{S}_{L,m}} - \gamma_{mm}^{-1}\mathbf{s}_{.m}\gamma_{.m}^T\,, \qquad (27)$$

$$J(\mathbf{a}_{m-1(N,L)}) = J(\mathbf{a}_{m(N,L)}) + a_m^2\gamma_{mm}^{-1} \qquad (28)$$

где $\overline{\mathbf{A}}, \overline{\Gamma}, \overline{\mathbf{S}}$ – подматрицы (порядка *m-1*) соответствующих матриц, γ_{mm} - элемент матрицы $\Gamma_{m(N,L)}$, $\gamma_{.m}$ - m-ый столбец матрицы $\Gamma_{m(N,L)}$ (без γ_{mm}), $\mathbf{s}_{.m}$ - m-ый столбец в матрице $\mathbf{S}_{L,m(N)}$, a_m - m-ый элемент в векторе $\mathbf{a}_{m(N,L)}$.

V. Добавление нового линейного ограничения на оцениваемые параметры.

Если к $L \ge 0$ (подчеркнем, что допускается и $L = 0$) известным соотношениям добавляется новое, определяемое вектором коэффициентов $\mathbf{g}_{L+1}$ и величиной c_{L+1}, то система переходит в новое состояние, определяемое следующими рекуррентными формулами:

$$\mathbf{a}_{m(N,L+1)} = \mathbf{a}_{m(N,L)} + \frac{\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^T}{\mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^T}(c_{L+1} - \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{a}_{m(N,L)}), \qquad (29)$$

$$\Gamma_{m(N,L+1)} = \Gamma_{m(N,L)} - \frac{\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^T\mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)}}{\mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^T}, \qquad (30)$$

$$\mathbf{Q}_{L+1(N,m)}^{-1} = \left\| \begin{matrix} \mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1} + h_{L+1}^{-1}\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{g}_{L+1}^T\mathbf{g}_{L+1}\mathbf{S}_{L,m(N)}^T & -h_{L+1}^{-1}\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{g}_{L+1}^T \\ -h_{L+1}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}\mathbf{S}_{L,m(N)}^T & h_{L+1}^{-1} \end{matrix} \right\|, \qquad (31)$$

$$\mathbf{S}_{L+1,m(N)} = \left\| \begin{matrix} \mathbf{S}_{L,m(N)} - h_{L+1}^{-1}\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{g}_{L+1}^{T}\mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)} \\ h_{L+1}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)} \end{matrix} \right\|, \tag{32}$$

$$\lambda_{L+1(N,m)} = \left\| \begin{matrix} \lambda_{L(N,m)} + h_{L+1}^{-1}\mathbf{S}_{L,m(N)}\mathbf{g}_{L+1}^{T}(c_{L+1} - \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{a}_{m(N,L)}) \\ -h_{L+1}^{-1}(c_{L+1} - \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{a}_{m(N,L)}) \end{matrix} \right\|, \tag{33}$$

$$J(\mathbf{a}_{m(N,L+1)}) = J(\mathbf{a}_{m(N,L)}) + \frac{(c_{L+1} - \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{a}_{m(N,L)})^2}{\mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^{T}} \tag{34}$$

где $h_{L+1} = \mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^{T}$.

VI. Исключение введенного ранее линейного ограничения.

Если из рассмотрения исключается ν-ое ограничение, $\nu<L$, то удобнее предварительно изменить порядок их следования, сделав ν-ое ограничение последним, с соответствующей перестановкой строк и столбцов в тех рассматриваемых матрицах и векторах, порядок элементов в которых определяется порядком введенных ограничений: $\mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}, \mathbf{S}_{L,m(N)}, \lambda_{L(N,m)}$. После этого новое состояние системы определяется в соответствии с рекуррентными процедурами по исключению L-ого ограничения:

$$\mathbf{a}_{m(N,L-1)} = \mathbf{a}_{m(N,L)} + q_{LL}^{-1}\mathbf{s}_{L.}^{T}\lambda_{L}, \tag{35}$$

$$\lambda_{L-1(N,m)} = \overline{\lambda_{L(N,m)}} - q_{LL}^{-1}\mathbf{q}_{.L}\lambda_{L}, \tag{36}$$

$$\Gamma_{m(N,L-1)} = \Gamma_{m(N,L)} + q_{LL}^{-1}\mathbf{s}_{L.}^{T}\mathbf{s}_{L.}, \tag{37}$$

$$\mathbf{Q}_{L-1(N,m)}^{-1} = \overline{\mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}} - q_{LL}^{-1}\mathbf{q}_{.L}\mathbf{q}_{.L}^{T}, \tag{38}$$

$$\mathbf{S}_{L-1,m(N)} = \overline{\mathbf{S}_{L,m(N)}} - q_{LL}^{-1}\mathbf{q}_{.L}\mathbf{s}_{L.}, \tag{39}$$

$$J(\mathbf{a}_{m(N,L-1)}) = J(\mathbf{a}_{m(N,L)}) - \lambda_{L}^{2}q_{LL}^{-1}. \tag{40}$$

где $\overline{\mathbf{Q}}, \overline{\mathbf{S}}, \overline{\lambda}$ - подматрицы (порядка L-1) соответствующих матриц, q_{LL} - элемент матрицы $\mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}$, $\mathbf{q}_{.L}$ - L-ый столбец матрицы $\mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}$ (без q_{LL}), $\mathbf{s}_{L.}$ - L-я строка в матрице $\mathbf{S}_{L,m(N)}$, λ_L - L-ый элемент в векторе $\lambda_{L(N,m)}$.

Итак, вывод универсальной рекуррентной формы МНК позволил довести технологию применения этого метода до уровня управляемой динамической системы. Оператор этой адаптивной системы описывается рекуррентными процедурами (4-40). Условия их применимости сформулированы и доказаны в пяти приводимых ниже утверждениях.

Формулы (4-9) применимы всегда, т.к. верно следующее утверждение:

Утверждение 1. Квадратичная форма $\mathbf{y}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{y}^{T}$ неотрицательно определенная.

Доказательство: Доказываемое утверждение не зависит от порядка рассматриваемых матриц, поэтому в приводимых выкладках индексы у матриц будут опущены.

Рассмотрим квадратичную форму

$$\mathbf{y}\Gamma\mathbf{y}^{T} = \mathbf{y}(\mathbf{P}^{-1} - \mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{T}(\mathbf{G}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{T})^{-1}\mathbf{G}\mathbf{P}^{-1})\mathbf{y}^{T}.$$

Матрица $\mathbf{P}^{-1} = (\mathbf{F}^T\mathbf{F})^{-1}$ – положительно определенная, поэтому рассматриваемую квадратичную форму можно представить в виде

$$\mathbf{y}\Gamma\mathbf{y}^T = (\mathbf{y}\mathbf{P}^{-1/2})(\mathbf{P}^{-1/2}\mathbf{y}^T) - (\mathbf{y}\mathbf{P}^{-1/2})(\mathbf{P}^{-1/2}\mathbf{G}^T)(\mathbf{G}\mathbf{P}^{-1/2}\mathbf{P}^{-1/2}\mathbf{G}^T)^{-1}(\mathbf{G}\mathbf{P}^{-1/2})(\mathbf{P}^{-1/2}\mathbf{y}^T) =$$

$= \mathbf{u}\mathbf{u}^T - \mathbf{u}\mathbf{R}(\mathbf{R}^T\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}^T\mathbf{u}^T$, если обозначить вектор $\mathbf{y}\mathbf{P}^{-1/2} = \mathbf{u}$ и прямоугольную матрицу $\mathbf{P}^{-1/2}\mathbf{G}^T = \mathbf{R}$.

Матрица $\mathbf{R}(\mathbf{R}^T\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}^T$ обладает следующими свойствами:

1) $(\mathbf{R}(\mathbf{R}^T\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}^T)^T = \mathbf{R}(\mathbf{R}^T\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}^T$ симметричная,

2) $(\mathbf{R}(\mathbf{R}^T\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}^T)^2 = \mathbf{R}(\mathbf{R}^T\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}^T$ проекционная.

Из свойств (1,2) следует, что собственные значения этой матрицы равны 0 или 1, но тогда, согласно экстремальным свойствам квадратичных форм,

$$0 \le \frac{\mathbf{u}\mathbf{R}(\mathbf{R}^T\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}^T\mathbf{u}^T}{\mathbf{u}\mathbf{u}^T} \le 1, \text{ т.е. } \mathbf{u}\mathbf{u}^T - \mathbf{u}\mathbf{R}(\mathbf{R}^T\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}^T\mathbf{u}^T \ge 0 \quad \text{для всех } \mathbf{u}.$$

Итак, $\forall \mathbf{y} \quad \mathbf{y}\Gamma\mathbf{y}^T \ge 0$, что и доказывает неотрицательную определенность рассматриваемой квадратичной формы.

Условие применимости формул (10-15):

Утверждение 2. Если система функций $\{\varphi_1(\mathbf{x}),...,\varphi_m(\mathbf{x})\}$ – линейно независима на множестве $\mathbf{X}/\mathbf{x}^N = \{\mathbf{x}^1,\mathbf{x}^2,...,\mathbf{x}^{N-1}\}$, то $1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T > 0$.

Доказательство: $1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T = 1-\mathbf{f}_N\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{f}_N^T + \mathbf{f}_N\mathbf{D}_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T$.

В работе [6] доказано, что $1-\mathbf{f}_N\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{f}_N^T > 0$, но второе слагаемое в выражении для $1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T$ удовлетворяет неравенству $\mathbf{f}_N\mathbf{D}_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T \ge 0$, т.к. и $\mathbf{Q}_{L,m(N)} = \mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T = (\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1/2})(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1/2})^T$ и, следовательно,

$\mathbf{D}_{m(N,L)} = \mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T\mathbf{Q}_{L(m,N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1} =$

$= (\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T\mathbf{Q}_{L(m,N)}^{-1/2})(\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T\mathbf{Q}_{L(m,N)}^{-1/2})^T$ - неотрицательно определенные матрицы. Поэтому $1-\mathbf{f}_N\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{f}_N^T > 0$.

Рекуррентные формулы (16-22) применимы, если $\Omega_{m+1} \ne 0$. В работе [6] доказано следующее утверждение:

Утверждение 3. $H_{m+1} = 0$ тогда и только тогда, когда система функций $\{\varphi_1(\mathbf{x}),\varphi_2(\mathbf{x}),...,\varphi_m(\mathbf{x}),\varphi_{m+1}(\mathbf{x})\}$ линейно зависима на множестве $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}^1,\mathbf{x}^2,...,\mathbf{x}^N\}$.

Утверждение 4. $\Omega_{m+1} > 0$ при выполнении хотя бы одного из двух условий:

- система функций $\{\varphi_1(\mathbf{x}),\varphi_2(\mathbf{x}),...,\varphi_m(\mathbf{x}),\varphi_{m+1}(\mathbf{x})\}$ линейно независима;

– $\eta_{m+1} \ne \mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{z}_{m+1}^T$.

Доказательство: $H_{m+1} = \Phi_{m+1}^T\Phi_{m+1} - \Phi_{m+1}^T\mathbf{F}_{N,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{F}_{N,m}^T\Phi_{m+1}$.

Аналогично утверждению 1 легко показать, что $\mathbf{F}_{N,m}(\mathbf{F}_{N,m}^T\mathbf{F}_{N,m})^{-1}\mathbf{F}_{N,m}^T$ - симметричная и проекционная матрица. Следовательно, согласно экстремальным свойствам квадратичных форм,

$$0 \le \frac{\Phi_{m+1}^T \mathbf{F}_{N,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{F}_{N,m}^T\Phi_{m+1}}{\Phi_{m+1}^T\Phi_{m+1}} \le 1, \quad \text{т.е.} \quad H_{m+1} \ge 0 \quad \text{для всех } \Phi_{m+1}.$$

С учетом выражения (22) для Ω_{m+1} из доказанного, из утверждения 3 и из положительной определенности матрицы $\mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}$ (см. доказательство утверждения 2), когда $\forall \mathbf{y} \ne 0$ $\mathbf{y}^T\mathbf{Q}_{L(N,m)}^{-1}\mathbf{y} > 0$, следует верность доказываемого утверждения.

Формулы (29-34) применимы, если $h_{L+1} \ne 0$.

Утверждение 5. $\mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^T = 0$ тогда и только тогда, когда система векторов $\{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,...,\mathbf{g}_L,\mathbf{g}_{L+1}\}$ линейно зависима.

Доказательство: Сформулированное утверждение имеет смысл лишь при условии линейной независимости векторов $\{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,...,\mathbf{g}_L\}$, когда $L \le m$.

Необходимое и достаточное условие линейной зависимости системы векторов - равенство нулю определителя Грама в любом базисе. Рассмотрим базис, определяемый положительно определенной матрицей $\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}$. Условие линейной независимости векторов $\{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,...,\mathbf{g}_L\}$ в этом базисе: $\det(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T) \ne 0$.

<u>Необходимость.</u> Пусть $\mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^T =$

$= \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T - \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T)^{-1}\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T = 0$. Найдем $\det(\mathbf{G}_{L+1,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L+1,m}^T)$. $\mathbf{G}_{L+1,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L+1,m}^T = \begin{Vmatrix}\mathbf{G}_{L,m}\\ \mathbf{g}_{L+1}\end{Vmatrix}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\begin{Vmatrix}\mathbf{G}_{L,m}^T & \mathbf{g}_{L+1}^T\end{Vmatrix} =$

$= \begin{Vmatrix}\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T & \mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T\\ \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T & \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T\end{Vmatrix}$. Согласно обобщенному алгоритму Гаусса

$$\det(\mathbf{G}_{L+1,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L+1,m}^T) = \det(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T)\times$$
$$\times(\mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T - \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T)^{-1}\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T) = 0,$$

поэтому вектора $\{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,...,\mathbf{g}_L,\mathbf{g}_{L+1}\}$ линейно зависимы.

<u>Достаточность.</u> Если вектора $\{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,...,\mathbf{g}_L,\mathbf{g}_{L+1}\}$ линейно зависимы, то $\det(\mathbf{G}_{L+1,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L+1,m}^T) = \det(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T)\times\Big(\mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T - \mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T)^{-1}\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T\Big) = 0$. Но т.к. $\det(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T) \ne 0$, то $\mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T -$

$$-\mathbf{g}_{L+1}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T(\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{G}_{L,m}^T)^{-1}\mathbf{G}_{L,m}\mathbf{P}_{m(N)}^{-1}\mathbf{g}_{L+1}^T = \mathbf{g}_{L+1}\Gamma_{m(N,L)}\mathbf{g}_{L+1}^T = 0$$

Утверждения доказаны.

На данном этапе разработки представленная динамическая система является неавтономной, хотя существует принципиальная возможность полной автоматизации вычислительного процесса при решении целого ряда задач обработки и анализа данных на основе МНК.

Отметим, что динамическая реализация метода наименьших квадратов исключает необходимость введения какого-либо начального приближения для оцениваемых параметров. Решение модельных примеров и реальных задач аппроксимации и распознавания образов [6] на основе МНК с использованием адаптивной динамической системы обработки и анализа данных продемонстрировало такие ее возможности, как:

- ✓ подбор системы базисных функций, подходящей для заданной выборки данных;
- ✓ построение оптимального решения с точностью, сопоставимой с точностью задания данных и точностью счета, для хорошо обусловленных информационных матриц;
- ✓ коррекция результатов, являющихся следствием накопления ошибок вычислений для плохо обусловленных матриц;
- ✓ поиск оптимального решения в случае вырожденности информационной матрицы;
- ✓ обнаружение сильно уклоняющихся или ошибочных данных;
- ✓ обработка потоковых данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Рао С.Р.* Линейные статистические методы и их применения. М.: Наука, 1968.
2. *Gauss C.F.* Theoria combinations observationum erroribus minimis obnoxiae. 1821. – Gesammelte Werke, Bd. 4. Gottingen, 1873.
3. *Plackett R.L.* Some theorems in least squares. // Biometrika, v.37, 1950. P. 149-157.
4. *Алберт А.* Регрессия, псевдоинвверсия и рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1977.
5. *Неймарк Ю.И., Теклина Л.Г.* Рекуррентная форма метода наименьших квадратов по определяемым параметрам.// Докл. РАН, т. 349, №5, 1996. С. 608-609.
6. *Неймарк Ю.И., Теклина Л.Г.* Расширенная рекуррентная форма метода наименьших квадратов в применении к задачам распознавания. // Сб. Динамика систем. Нижний Новгород. Изд. Нижегородского университета, 1995. С.29-45.
7. *Neimark Yu.I., Teklina L.G.* Recurrent procedures of the least-squares method under restrictions on parameters in coding and recognition problems. // Pattern recognition and image analysis, v.11, no.1, 2001. Pp.228-230.