

Расчетное задание 3

Аппроксимация результатов измерений зависимых переменных.

Дано:

В результате измерений при значениях независимой переменной

x_1, x_2, \dots, x_k

получены следующие данные:

$y_{11}, y_{21}, \dots, y_{k1}$

$y_{12}, y_{22}, \dots, y_{k2}$

.....

$y_{1n}, y_{2n}, \dots, y_{kn}$

Варианты

Выборочные значения находятся в файлах (для каждой группы свой каталог, для каждого студента файл с названием «Фамилия Имя.txt»). Формат файла следующий

```
Вариант: ##  
k = ##  
n = ##  
x= ## ## ## ... ##  
y[##] = ## ## ## ... ##  
.....  
y[##] = ## ## ## ... ##
```

где «Вариант» – номер варианта, «k» – число точек, в которых проводились измерения, «n» – количество измерений в каждой точке, «x» – сами точки, «y[##]» – все измерения (n штук) в соответствующей точке.

Вся теоретическая часть по работе изложена в [1], а также в разделах помощи Matlab, в частности Statistic Toolbox.

Задание

1. Вычислить в каждой точке x_i средние арифметические значения $\overline{y_i}$, оценки дисперсий s_i^2 , параметрические толерантные пределы для погрешностей, доверительные интервалы для математических ожиданий, проверить гипотезу о равенстве дисперсий в этих точках по критерию Кочрена (см. приложение 3);

2. Произвести последовательную полиномиальную аппроксимацию
Прим. В качестве значений y при аппроксимации необходимо использовать средние арифметические значения $\overline{y_i}$ (см. приложение 3).

2.1. Начать с нулевой степени полинома

2.2. вычислить оценки коэффициентов \hat{a} полинома МНК или МНД (в зависимости от исхода проверки гипотез о равенстве дисперсий) для заданной степени полинома.

Зам. При определении \hat{a} требуется обращать матрицу S_ε . Если $n > k$, то можно посчитать обратную матрицу S_ε^{-1} по исходной матрице S_ε , поскольку определитель S_ε не равен 0. В противном случае в качестве S_ε используется диагональная матрица с дисперсиями в каждой из k точек на диагонали.

2.3. Проверить гипотезу о степени q полинома, и если она не будет отвергнута, оценить дисперсии s_{ai}^2 и ковариационную матрицу оценок коэффициентов S_a , в противном случае увеличить степень полинома. Для проверки гипотезы используется критерий Фишера. Если число измерений n больше величины $k - q - 1$, то статистикой критерия является выражение $F = \frac{(n - k + q + 1)}{(n - q - 1)(n - 1)} R^2$, в противном случае $F = \frac{R^2}{(k - q - 1)}$.

Зам. Размерность S_a равна $(q+1)*(q+1)$, в то время как размерность S_ε равна $k*k$.

2.4. Вычислить корреляционную матрицу R_a и коэффициенты корреляции $r_a(i, j)$ между оценками коэффициентов по матрице ковариации

2.5. Пусть была получена степень q полинома, прошедшая гипотезу о степени полинома. Произвести все те же действия для полинома степени, равной $k-1$ (вычислить коэффициенты и корреляцию между ними). Сравнить результаты для степени q и $k-1$ (качество аппроксимации, корреляционная матрица коэффициентов, матрица ковариации исходных данных S_ε и ее обусловленность). См указания в приложении.

3. Произвести аппроксимацию исходной зависимости другими способами. Представить полученные графики аппроксимации (полученная аппроксимирующая кривая одним цветом, точки, по которым проводилась аппроксимация маркерами одного типа и все исходные точки маркерами другого типа). Проанализировать и сравнить полученные результаты.

3.1 Произвести аппроксимацию зависимости прямой линией с помощью функций regress (использует метод R-Square), robustfit (робастная регрессия), polyfit (полиномиальная регрессия с $n=1$), ridge (ридж-регрессия с регуляризацией). Проанализировать полученные результаты.

3.2. Произвести полиномиальную аппроксимацию с помощью функций polyfit (polyval). Можно воспользоваться утилитой polytool, являющейся графическим интерфейсом к polyfit. Подобрать степень полинома, наилучшим способом аппроксимирующую исходную зависимость.

3.3. Произвести кусочную полиномиальную аппроксимацию с помощью функций interp1 (линейная, кубическая), pchip (полиномами Эрмита), spline (сплайны). Сравнить качество аппроксимации с предыдущими результатами.

3.4 Произвести нелинейную аппроксимацию с помощью функции nlinfit. В качестве нелинейной функции использовать произведение полинома на гармоническую функцию:

$$y(x) = (\sin \alpha x + \beta)(a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0)$$

4. В выводах детально сравнить все использованные способы аппроксимации зависимостей, выделить преимущества и недостатки каждого из методов в смысле качества аппроксимации, трудоемкости вычислений и других факторов.

Литература

1. Солопченко Г.Н. Теория вероятностей и математическая статистика

Приложение 1

Указания к полиномиальной аппроксимации

- **Внимание!** Степень полинома *a-priori* не известна, поэтому необходимо начинать попытки аппроксимации с наименьшей степени и проверять гипотезу о степени полинома. При отклонении гипотезы увеличить степень аппроксимирующего полинома на единицу и проделать указанную процедуру вновь.
- Приводить все промежуточные результаты, получаемые при каждой попытке.
- Пусть гипотеза оказалась не отвергнутой при степени q . Тогда следует задать степень полинома равной $k-1$ и вновь вычислить оценки коэффициентов этого полинома и ковариационную матрицу оценок коэффициентов. Сопоставить с предыдущими результатами и прокомментировать возможное увеличение дисперсий оценок коэффициентов и ухудшение обусловленности задачи.

Представление результатов

- числовое - результаты, полученные на каждой итерации при каждом значении степени полинома q , в том числе, значения статистики критерия проверки степени полинома и критические значения критерия,
- графическое - изобразить все точки, толерантные пределы и границы доверительных интервалов, средние значения и полученную аппроксимирующую полиномиальную функцию, причем эту функцию, границы доверительных интервалов и толерантные пределы соединить плавной линией; там же нанести функцию, полученную при безызбыточной аппроксимации полиномом степени $k-1$.

Приложение 2 Оценивание коэффициентов аппроксимирующих полиномов

2.1. Формулировка задачи

Будем рассматривать следующую ситуацию.

Объективно существует функция $y = f(x)$, ограниченная и дифференцируемая не менее $q + 1$ раз на интервале $[x_{\min}, x_{\max}]$. Природа и происхождение этой функции могут быть различными:

- этой функцией связаны между собой естественные параметры и(или) явления в природе, в обществе, в экономике и т.п.,
- этой функцией описывается преобразование физических величин, происходящее в технических устройствах, таких как регуляторы, датчики, измерительные преобразователи, устройства телекоммуникаций и т.п.,
- этой функцией описываются взаимосвязи параметров технических объектов, в том числе, технологических процессов в различных режимах (штатный режим работы, испытания, нештатные режимы),
- этой функцией, по мнению исследователя, описываются объекты, явления, процессы, которые он моделирует на компьютере.

По теореме Вейерштрасса, функции, удовлетворяющие перечисленным условиям гладкости на ограниченном интервале, могут быть сколь угодно точно аппроксимированы степенным (и даже обобщенным) полиномом.

Понятно, что в реальном исследовании сколь угодно высокая точность достигнута быть не может, хотя стремление к максимально достижимой точности у каждого исследователя имеется. Пусть это естественное стремление выражается следующим образом.

Желательно аппроксимировать реальную функцию $y = f(x)$ полиномом степени q так, чтобы максимальное расхождение между реальной функцией и этим полиномом не превосходило пренебрежимо малой, с точки зрения исследователя, величины $\delta > 0$:

$$|a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_qx^q - f(x)| \leq \delta.$$

Поскольку, по теореме Вейерштрасса, такой полином существует при любом сколь угодно малом значении δ , будем считать коэффициенты a_0, a_1, \dots, a_q “истинными” и для их обозначения введем вектор этих

коэффициентов $\vec{a}^T = (a_0 \ a_1 \ \dots \ a_q)$. Степень полинома q будем считать известной. В этом случае говорят: “*модель объекта известна с точностью до параметров*”. Объектом для нас является полином, аппроксимирующий функцию $y = f(x)$.

Теперь задачей исследователя является организация такого эксперимента, в результате которого он смог бы определить значения этих коэффициентов. Необходимыми условиями выполнения такого эксперимента являются

- воспроизведение с необходимой точностью значений аргумента x_1, x_2, \dots, x_k , $k \geq q + 1$, в заданном диапазоне $[x_{\min}, x_{\max}]$, или, по крайней мере, фиксация фактически реализующихся этих значений с помощью измерений с заданной или хотя бы с известной точностью,

- измерение с необходимой или хотя бы с известной точностью значений функции $y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), \dots, y_k = f(x_k)$ при всех заданных (зафиксированных)

значениях аргумента.

Пример графического представления результатов подобного эксперимента приведен на рис. 31. Непрерывной кривой изображен график исследуемой функции $y = f(x)$, точки на этой кривой - суть значения $y_1 = f(x_1)$, $y_2 = f(x_2), \dots, y_k = f(x_k)$. Для обозначения всей совокупности этих значений

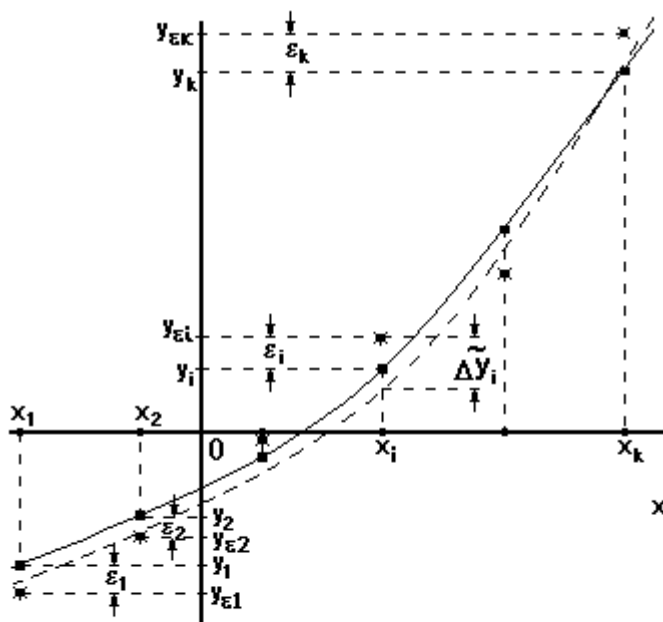


Рис. 31. Графики полиномов и экспериментальные точки

введем вектор \vec{y} : $\vec{y}^T = (y_1 \ y_2 \ \dots \ y_k)$. Точки вне этой кривой - результаты измерений, для обозначения которых введем вектор \vec{y}_ϵ :

$$\vec{y}_\epsilon^T = (y_{\epsilon 1} \ y_{\epsilon 2} \ \dots \ y_{\epsilon k}).$$

Будем считать, что воспроизведение (измерения) значений аргумента выполняются с настолько высокой точностью, что погрешностью результатов можно пренебречь.

Будем также считать, что погрешности $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k$ измерения значений функции суть компоненты случайного вектора $\vec{\varepsilon}$, не содержащие систематических составляющих (математическое ожидание всех компонент равно нулю), вектор $\vec{\varepsilon}$ распределен в соответствии с нормальным законом: $\vec{\varepsilon} \in N_k(0, \Sigma_\varepsilon)$, где Σ_ε - его ковариационная матрица. Диагональными элементами ковариационной матрицы Σ_ε являются дисперсии погрешностей измерений $\sigma_{\varepsilon i}^2$. Результаты измерений образуют в совокупности случайный вектор $\vec{y}_\varepsilon = \vec{y} + \vec{\varepsilon}$, который распределен нормально $\vec{y}_\varepsilon \in N_k(\vec{y}, \Sigma_\varepsilon)$. В случае независимости измерений ковариационная матрица Σ_ε диагональна.

Задача состоит в том, чтобы выполнить *полиномиальную аппроксимацию* исследуемой функции $y = f(x)$, то есть найти оценки коэффициентов $\vec{a}^T = (a_0 \ a_1 \ \dots \ a_q)$ полинома, аппроксимирующего эту функцию.

Измерения значений функции при каждом значении аргумента могут быть однократными или многократными.

Рассмотрим вначале случай однократных измерений, которым можно ограничиться только в том случае, если ковариационная матрица Σ_ε известна априори.

2.2. Измерения однократные

В соответствии с формулировкой задачи (п. 2.3.7.1) в результате эксперимента при фиксированных значениях x_1, x_2, \dots, x_k мы получаем значения $y_{\varepsilon 1}, y_{\varepsilon 2}, \dots, y_{\varepsilon k}$:

$$\begin{cases} y_{\varepsilon 1} = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \dots + a_q x_1^q + \varepsilon_1 \\ y_{\varepsilon 2} = a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 + \dots + a_q x_2^q + \varepsilon_2 \\ \vdots \\ y_{\varepsilon k} = a_0 + a_1 x_k + a_2 x_k^2 + \dots + a_q x_k^q + \varepsilon_k \end{cases}$$

Эти значения представлены на рис. 31 точками, лежащими вне кривых

Приведенная система равенств есть система k уравнений, из которой нам необходимо получить оценки $q + 1$ коэффициентов a_0, a_1, \dots, a_q .

Для того, чтобы эту систему записать в матричном виде, введем матрицу

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_1^2 & \dots & \mathbf{x}_1^q \\ 1 & \mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_2^2 & \dots & \mathbf{x}_2^q \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \mathbf{x}_k & \mathbf{x}_k^2 & \dots & \mathbf{x}_k^q \end{pmatrix}.$$

Тогда система уравнений записывается в виде

$$\bar{\mathbf{y}}_\varepsilon = \mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}},$$

где векторы $\bar{\mathbf{a}}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon$ определены выше в п. 2.3.7.1 и

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \in N_k(0, \Sigma_\varepsilon), \quad \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon \in N_k(\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}, \Sigma_\varepsilon).$$

Будем находить ММП-оценки неизвестных коэффициентов полинома.

Для этого запишем \mathbf{k} - мерную плотность распределения вектора $\bar{\mathbf{y}}_\varepsilon$:

$$\varphi(\mathbf{y}_\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^{k/2} |\Sigma_\varepsilon|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon) \right\}.$$

Функция правдоподобия в этом случае равна

$$L(\bar{\mathbf{a}}, \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon) = -\frac{n}{2} \ln \sqrt{(2\pi)^k |\Sigma_\varepsilon|} - \frac{1}{2} [(\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)].$$

Максимум функции правдоподобия находится там же, где находится минимум квадратичной формы $(\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)$:

$$\arg \max_{\bar{\mathbf{a}}} [L(\bar{\mathbf{a}}, \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)] = \arg \min_{\bar{\mathbf{a}}} [(\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)],$$

поэтому для нахождения ММП - оценок искомых коэффициентов будем отыскивать путем минимизации указанной квадратичной формы. С этой целью продифференцируем ее по вектору $\bar{\mathbf{a}}$ и приравняем производную нулю. Напомним предварительно правила дифференцирования по вектору (см., например, [5], стр 73):

$$\frac{d}{d\bar{\mathbf{u}}} (\mathbf{B}\bar{\mathbf{u}}) = \mathbf{B}^T, \quad \frac{d}{d\bar{\mathbf{u}}} (\bar{\mathbf{u}}^T \mathbf{B}) = \mathbf{B}.$$

Пользуясь этими правилами после раскрытия скобок, получим:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\bar{\mathbf{a}}} (\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon) &= \\ &= \frac{d}{d\bar{\mathbf{a}}} [\bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \mathbf{X} \bar{\mathbf{a}} + \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon - \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \mathbf{X} \bar{\mathbf{a}}] = \\ &= 2\mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \mathbf{X} \bar{\mathbf{a}} - 2\mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon = 0, \end{aligned}$$

откуда находим вектор ММП-оценок коэффициентов аппроксимирующего полинома :

$$\bar{\hat{\mathbf{a}}} = \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon}.$$

Обратим внимание на то, что эта оценка линейно зависит от результатов измерений $\bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon}$: $\bar{\hat{\mathbf{a}}} = \mathbf{D} \bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon}$, где $\mathbf{D} = \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1}$ - матрица размера $(q+1) \times k$.

Являясь ММП-оценкой, полученный вектор есть эффективная оценка вектора коэффициентов полинома. Проверим ее несмещенность.

$$\begin{aligned} \mathbf{M}[\bar{\hat{\mathbf{a}}}] &= \mathbf{M} \left[\left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon} \right] = \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \cdot \mathbf{M}[\bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon}] = \\ &= \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \cdot \bar{\mathbf{a}} = \bar{\mathbf{a}}, \end{aligned}$$

поскольку произведение взаимнообратных матриц есть единичная матрица. Несмещенность полученной оценки доказана.

Как показано в п. 2.3.7.1, ковариационная матрица вектора $\bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon}$ есть Σ_{ε} . Тогда, поскольку $\bar{\hat{\mathbf{a}}} = \mathbf{D} \bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon}$ и в соответствии с п. 1.7.4 ковариационная матрица вектора оценок коэффициентов равна

$$\Sigma_{\bar{\hat{\mathbf{a}}}} = \mathbf{D} \Sigma_{\varepsilon} \mathbf{D}^T = \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \Sigma_{\varepsilon} \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1}.$$

Производя перемножение ряда взаимнообратных матриц, находящихся в середине правой части, окончательно получим:

$$\Sigma_{\bar{\hat{\mathbf{a}}}} = \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1}.$$

Напомним также, что при линейном преобразовании случайных величин вид плотности распределения не изменяется (п. 1.6.7). Поэтому в связи с обнаруженной нами несмещенностью оценки

$$\bar{\hat{\mathbf{a}}} \in N_{q+1} \left(\bar{\mathbf{a}}, \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} \right)^{-1} \right).$$

Если измерения независимые, то ковариационная матрица Σ_{ε} диагональна. Если при этом измерения равноточные, когда при всех $i = 1, 2, \dots, k$ $\sigma_{\varepsilon i}^2 = \sigma_{\varepsilon}^2$, тогда $\Sigma_{\varepsilon} = \sigma_{\varepsilon}^2 \cdot \mathbf{E}$, где \mathbf{E} - единичная матрица, $\Sigma_{\varepsilon}^{-1} = \sigma_{\varepsilon}^{-2} \cdot \mathbf{E}$. В этих условиях квадратичная форма, подлежащая минимизации, принимает вид $\sigma_{\varepsilon}^{-2} \cdot (\mathbf{X} \bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon})^T (\mathbf{X} \bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon})$, и

$$\bar{\hat{\mathbf{a}}} = \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon}, \quad \Sigma_{\bar{\hat{\mathbf{a}}}} = \sigma_{\varepsilon}^2 \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X} \right)^{-1}, \quad \bar{\hat{\mathbf{a}}} \in N_{q+1} \left(\bar{\mathbf{a}}, \sigma_{\varepsilon}^2 \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X} \right)^{-1} \right).$$

Компонентами вектора $(\bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)$ являются разности

$$\Delta y_i = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_q x_i^q - y_{\varepsilon i}, \quad i = 1, 2, \dots, k,$$

и минимизируемая квадратичная форма представляет собой сумму квадратов этих разностей:

$$(\bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T (\bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon) = \sum_{i=1}^k (\Delta y_i)^2 = \sum_{i=1}^k \left(a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_q x_i^q - y_{\varepsilon i} \right)^2$$

.

По этой причине приведенный метод определения коэффициентов аппроксимирующих полиномов называется *методом наименьших квадратов (МНК)*, а получаемые этим методом оценки коэффициентов полиномов называются *МНК-оценками*.

Общий метод оценивания коэффициентов аппроксимирующих полиномов путем минимизации квадратичной формы $(\bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (\bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)$ называется *обобщенным методом наименьших квадратов (ОМНК)*, и оценки, вычисляемые по формуле $\hat{\bar{\mathbf{a}}} = (\mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon$, - *ОМНК-оценками*.

Конечным итогом и целью оценивания является полином, коэффициентами которого являются найденные оценки:

$$\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x + \hat{a}_2 x^2 + \dots + \hat{a}_q x^q.$$

При значениях аргумента x_1, x_2, \dots, x_k этот полином принимает значения, которые суть компоненты вектора $\hat{\bar{\mathbf{y}}} = \bar{\mathbf{X}}\hat{\bar{\mathbf{a}}}$. График этого полинома представлен на рис. 31 пунктирной линией. В точке $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ показана разность $\hat{\Delta y}_i = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_i + \hat{a}_2 x_i^2 + \dots + \hat{a}_q x_i^q - y_{\varepsilon i}$ между значением построенного полинома и результатом измерений. Эти разности составляют вектор

$$\vec{\Delta \mathbf{y}}^T = (\bar{\mathbf{X}}\hat{\bar{\mathbf{a}}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T = \begin{pmatrix} \hat{\Delta y}_1 & \hat{\Delta y}_2 & \dots & \hat{\Delta y}_k \end{pmatrix}.$$

Итак, в результате выполненных операций мы определили, что квадратичная форма $(\bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (\bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon)$ принимает минимальное значение при $\hat{\bar{\mathbf{a}}} = (\mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon$. Обозначим это минимальное значение через \mathbf{R}^2 . В случае ОМНК

$$\mathbf{R}^2 = (\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\epsilon})^T \Sigma_{\epsilon}^{-1} (\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\epsilon}).$$

Применительно к МНК, когда $\Sigma_{\epsilon} = \sigma_{\epsilon}^2 \cdot \mathbf{E}$,

$$\mathbf{R}^2 = \sigma_{\epsilon}^{-2} \cdot (\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\epsilon})^T (\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\epsilon}).$$

В обоих вариантах величина \mathbf{R}^2 случайна, поскольку зависит от выборочных данных. Естественно выяснить плотность распределения величины \mathbf{R}^2 . Этот вопрос мы рассмотрим отдельно в следующем пункте.

2.3. Плотность распределения величины \mathbf{R}^2

Начнем с рассмотрения величины

$$\mathbf{R}^2 = \sigma_{\epsilon}^{-2} \cdot (\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\epsilon})^T (\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\epsilon}),$$

которая вычисляется в рамках применения МНК, когда для получения оценок коэффициентов $\tilde{\mathbf{a}}$ достаточно знать лишь о факте равноточности измерений, а значение дисперсии σ_{ϵ}^2 погрешностей измерений может быть неизвестным.

В выражении для \mathbf{R}^2 $\bar{\mathbf{y}}_{\epsilon}$ - вектор выборочных значений, $\mathbf{M}[\bar{\mathbf{y}}_{\epsilon}] = \mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}}$.

Вектор $\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}}$ - несмещенная ММП-оценка математического ожидания $\mathbf{M}(\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}}) = \mathbf{X} \cdot \mathbf{M}[\tilde{\mathbf{a}}] = \mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}}$. В соответствии с МНК и постановкой задачи в п. 2.3.7.1 компоненты ϵ_i вектора случайных погрешностей $\bar{\epsilon}$ распределены нормально с одинаковыми параметрами $\mathbf{M}[\epsilon_i] = 0$, $\mathbf{D}[\epsilon_i] = \sigma_{\epsilon}^2$. Поэтому компоненты вектора $\mathbf{X}\tilde{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_{\epsilon}$, то есть разности

$$\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_i + \hat{a}_2 x_i^2 + \dots + \hat{a}_q x_i^q - y_{\epsilon i} = \Delta \hat{y}_i$$

можно считать выборочными значениями погрешностей, изъятыми из одной нормальной генеральной совокупности.

Если дисперсия погрешностей ϵ_i неизвестна, то в соответствии с п. 2.3.4.2 с) ее оценкой может быть средний квадрат упомянутых разностей:

$$s^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^k \left(\Delta \hat{y}_i \right)^2,$$

где \mathbf{m} - количество степеней свободы, которое равно количеству слагаемых \mathbf{k} за вычетом потери, равной количеству уравнений, из которых определяются коэффициенты аппроксимирующего полинома. Количество этих уравнений равно количеству определяемых коэффициентов, то есть $(\mathbf{q} + 1)$. Поэтому $\mathbf{m} = \mathbf{k} - \mathbf{q} - 1$. В связи с этим запишем предыдущее равенство с применением правил вычисления скалярного произведения вектора $\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon$ самого на себя:

$$s^2 = \frac{1}{\mathbf{k} - \mathbf{q} - 1} \sum_{i=1}^{\mathbf{k}} \left(\hat{\Delta y}_i \right)^2 = \frac{\left(\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon \right)^T \left(\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon \right)}{\mathbf{k} - \mathbf{q} - 1} = \frac{\sigma_\varepsilon^2 \cdot \mathbf{R}^2}{\mathbf{k} - \mathbf{q} - 1},$$

откуда, в частности, следует, что при однократных равноточных измерениях несмещенной оценкой дисперсии погрешностей измерений является

$$s^2 = \frac{\left(\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon \right)^T \left(\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon \right)}{\mathbf{k} - \mathbf{q} - 1}.$$

Если $\mathbf{k} = \mathbf{q} + 1$, это выражение теряет смысл. Эта ситуация эквивалентна ситуации, которая возникает в одномерном случае, когда математическое ожидание исследуемой случайной величины неизвестно и выполняется только одно измерение, то есть $\mathbf{n} = 1$. В подобной ситуации оценить характеристику разброса, каковой является дисперсия, принципиально невозможно (см. также п. 2.3.4.2. b).

По аналогии с п. 2.3.4.2 с) сформируем случайную величину

$$\zeta = \frac{s^2 \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q} - 1)}{\sigma_\varepsilon^2} = \mathbf{R}^2 = \sum_{i=1}^{\mathbf{k}} \left(\frac{\hat{\Delta y}_i}{\sigma_\varepsilon} \right)^2.$$

Поскольку в рассматриваемых условиях $\hat{\Delta y}_i \in N(0, \sigma_\varepsilon^2)$, и $\frac{\hat{\Delta y}_i}{\sigma_\varepsilon} \in N(0, 1)$, то, как и в п. 2.3.4.2 с), плотность распределения случайной величины ζ , а значит, и \mathbf{R}^2 есть $\chi^2(\mathbf{k} - \mathbf{q} - 1)$. Этот факт заслуживает специальной записи:

$$\mathbf{R}^2 \in \chi^2(\mathbf{k} - \mathbf{q} - 1).$$

В случае применения ОМНК также

$$\mathbf{R}^2 = \left(\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon \right)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \left(\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon \right) \in \chi^2(\mathbf{k} - \mathbf{q} - 1).$$

По материалам настоящего пункта см. также [5, 7].

2.4. Практически важные замечания

Замечание 1. При однократных измерениях применение ОМНК затруднено тем, что ковариационная матрица в большинстве случаев неизвестна. Реально известными могут быть только дисперсии $\sigma_{\varepsilon_i}^2$ случайных погрешностей ε_i из нормативной документации на средство измерений, применяемое для измерения значений функции $y = f(x)$. В этой ситуации ковариационная матрица вынужденно оказывается неполной: в ней остаются только диагональные элементы $\sigma_{\varepsilon_i}^2$, а внедиагональные элементы, которые характеризуют степень корреляции между результатами измерений, отсутствуют. Возникает естественный вопрос о том, как влияет недостаток этой информации на качество получаемых оценок.

Исследования показывают, что *неучет корреляции* в пределах $|\rho| \leq 0.8$ приводит лишь к *незначительной потере эффективности оценок*. *Оценки остаются несмещенными.*

В случаях, когда при неравноточных измерениях применяется МНК, то есть когда неравноточность не учитывается, в оценках коэффициентов появляется нежелательное смещение.

Замечание 2. Отличие фактической плотности распределения погрешностей ε_i от нормальной приводит к потере эффективности оценок среди всех возможных. Однако *на множестве всех линейных оценок*, то есть оценок, которые линейно зависят от экспериментальных данных, *ОМНК и МНК-оценки эффективны для любых плотностей распределения погрешностей ε_i* . Это означает, что при каждом конкретном виде плотности распределения может быть получена более эффективная оценка, чем оценка ОМНК или МНК, но она обязательно будет нелинейно зависеть от экспериментальных данных.

Замечание 3. Нестатистический вариант полиномиальной аппроксимации сложных функций.

Этот вариант может возникать при желании упростить представление и(или) вычисление сложных функций. В этом варианте исходными данными могут быть:

- значения аппроксимируемой функции, вычисленные на компьютере с высокой точностью, или табличные значения, взятые из математических или иных справочников,

- заданная исследователем точность аппроксимации в виде неравенств типа $|\epsilon_i| \leq \Delta_i$.

Если заданные значения Δ_i одинаковы, то можно применить МНК с подбором подходящей степени полинома q по признаку удовлетворения требований к точности аппроксимации.

При различии значений Δ_i можно применить ОМНК, а в качестве ковариационной матрицы Σ_ϵ использовать диагональную матрицу с элементами в диагонали, равными Δ_i или Δ_i^2 - по усмотрению исследователя. Степень полинома, необходимая для достижения требуемой точности аппроксимации, подбирается путем проб.

В этой ситуации статистические и вероятностные термины и характеристики не применяются.

Замечание 4. Все установленные выше свойства ОМНК и МНК- оценок коэффициентов аппроксимирующих полиномов справедливы только тогда, когда модель, то есть вид полинома (степенной полином) и его степень известны. Если *фактическая* степень полинома выше, чем q , то получаемые оценки коэффициентов будут смещены, и оценки не будут обладать теми свойствами, которые были обнаружены выше в пп. 2.3.7.2, 2.3.7.3. Оценки коэффициентов будут смещены, а плотность распределения величины R^2 не будет соответствовать распределению “хи-квадрат”.

2.5. Измерения многократные, характеристики погрешностей измерений известны.

Полагаем, что известны характеристики погрешностей измерения ϵ_i значений y_i аппроксимируемой функции:

- при равноточных измерениях - дисперсия σ_ϵ^2 ,
- при неравноточных измерениях - ковариационная матрица Σ_ϵ .

В частном случае ковариационная матрица может быть диагональной, i -ми элементами диагонали являются дисперсии $\sigma_{\varepsilon i}^2$ погрешностей измерения значений y_i аппроксимируемой функции.

При каждом значении аргумента $x_i, i = 1, 2, \dots, k$, выполняется n измерений функции. Обозначим результаты этих измерений, через y_{ij} , где j - номер эксперимента, $j = 1, 2, \dots, n$. Вычисляются средние арифметические значения

$$\bar{y}_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n y_{ij},$$

из которых составляется вектор $\bar{\bar{y}}^T = (\bar{y}_1 \quad \bar{y}_2 \quad \dots \quad \bar{y}_k)$, после чего в зависимости от обстоятельств вычисляются МНК или ОМНК - оценки коэффициентов аппроксимирующего полинома по формулам п. 2.3.7.2, где вместо вектора \bar{y}_ε следует использовать вектор $\bar{\bar{y}}$.

В силу центральной предельной теоремы плотность распределения среднего арифметического стремится к нормальной довольно быстро при любых плотностях распределения исходных погрешностей, которые не слишком сильно различаются по размеру (см. п. 1.6.6.4). Поэтому при многократных измерениях требование к нормальности распределения погрешностей измерений значительно смягчается.

Как известно из п. 2.3.4.1, дисперсии средних арифметических $\sigma_{\bar{y}i}^2 = \sigma_{\varepsilon i}^2 / n$. Точно так же из п. 2.3.4.4 следует, что ковариационная матрица вектора средних арифметических $\Sigma_{\bar{y}} = (1/n) \cdot \Sigma_\varepsilon$. В связи с этими обстоятельствами формулы пп. 2.3.7.2, 2.3.7.3 несколько изменятся.

а) В случае применения МНК.

$$\bar{\hat{a}} = (X^T X)^{-1} X^T \bar{\bar{y}}, \quad \Sigma_{\bar{\hat{a}}} = \frac{1}{n} \sigma_\varepsilon^2 (X^T X)^{-1}, \quad \bar{\hat{a}} \in N_{q+1} \left(\bar{\hat{a}}, \frac{1}{n} \sigma_\varepsilon^2 (X^T X)^{-1} \right),$$

$$R^2 = n \cdot \sigma_\varepsilon^{-2} \cdot (\bar{\bar{y}} - X \bar{\hat{a}})^T (\bar{\bar{y}} - X \bar{\hat{a}}),$$

но, как и прежде, $R^2 \in \chi^2(k - q - 1)$.

б) В случае применения ОМНК.

$$\bar{\hat{a}} = (X^T \Sigma_\varepsilon^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \bar{\bar{y}}, \quad \Sigma_{\bar{\hat{a}}} = \frac{1}{n} (X^T \Sigma_\varepsilon^{-1} X)^{-1}, \quad \bar{\hat{a}} \in N_{q+1} \left(\bar{\hat{a}}, \frac{1}{n} (X^T \Sigma_\varepsilon^{-1} X)^{-1} \right)$$

$$\mathbf{R}^2 = \mathbf{n} \cdot (\bar{\bar{\mathbf{y}}} - \mathbf{X}\bar{\mathbf{a}})^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} (\bar{\bar{\mathbf{y}}} - \mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}),$$

но, как и прежде, $\mathbf{R}^2 \in \chi^2(k - q - 1)$.

2.6. Измерения многократные, характеристики погрешностей измерений неизвестны.

В предыдущем пункте предполагалось, что ковариационная матрица Σ_{ε} или, по крайней мере, дисперсии $\sigma_{\varepsilon i}^2$ погрешностей результатов измерений известны, что на практике бывает достаточно редко, особенно в отношении ковариационной матрицы.

Однако, при многократных измерениях предоставляется возможность оценить дисперсии $\sigma_{\varepsilon i}^2$ при каждом i :

$$s_{\varepsilon i}^2 = \frac{1}{n-1} \cdot \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_i)^2$$

или ковариационную матрицу в целом.

Корректная оценка всех элементов ковариационной матрицы Σ_{ε} , не только диагональных, но и внедиагональных возможна лишь при выполнении специально организованного эксперимента.

Выполняется один цикл измерений в такой последовательности:

- воспроизводится значение физической или иной величины, соответствующее первому значению аргумента \mathbf{x}_1 и выполняется измерение (определение) значения функции, полученный результат - y_{11} ,

- воспроизводится значение физической или иной величины, соответствующее первому значению аргумента \mathbf{x}_2 и выполняется измерение (определение) значения функции, полученный результат - y_{21} ,

- описанная процедура продолжается до достижения последнего, k - го значения, таким образом будет получен первый вектор результатов измерений

$$\bar{\mathbf{y}}_1^T = (y_{11} \quad y_{21} \quad \cdots \quad y_{i1} \quad \cdots \quad y_{k1}),$$

- устанавливается значение физической величины \mathbf{x} , превышающее значение \mathbf{x}_k , затем вновь устанавливается значение \mathbf{x}_k , и процесс повторяется, но в обратном порядке, при уменьшении значений \mathbf{x} ; таким

образом будет получен второй вектор результатов

$$\bar{y}_2^T = (y_{12} \ y_{22} \ \cdots \ y_{i2} \ \cdots \ y_{k2}),$$

- в конечном итоге так будет получено n векторов вида

$$\bar{y}_j^T = (y_{1j} \ y_{2j} \ \cdots \ y_{ij} \ \cdots \ y_{kj}), j = 1, 2, \dots, n.$$

По этому массиву экспериментальных данных вычисляются оценки (см. пп. 2.3.4.3, 2.3.4.4) :

$$\bar{\bar{y}} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n \bar{y}_j, \quad S_{\varepsilon} = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (\bar{y}_j - \bar{\bar{y}})(\bar{y}_j - \bar{\bar{y}})^T.$$

Оценка ковариационной матрицы построена в соответствии с ее математическим определением, приведенным в п. 1.7.3. Поскольку при реализации ОМНК эту матрицу придется обращаться, она не должна быть особенной. Для этого необходимо, чтобы $n > k$. Но если по техническим, экономическим или иным причинам это условие выполнить невозможно, то придется ограничиться вычислением только оценок дисперсий $s_{\varepsilon i}^2$ при каждом значении x_i . По этим значениям строится диагональная матрица S_{ε} , в диагонали которой на i - ом месте стоит оценка дисперсии $s_{\varepsilon i}^2$. В таком случае не учитывается ковариация между измерениями в точках x_i , что приводит к незначительной потере в эффективности оценок коэффициентов, но они остаются несмещенными (см. п. 2.3.7.4, замечание 1).

После этого для вычисления оценок коэффициентов аппроксимирующего полинома применяется ОМНК с заменой во всех формулах п. 2.3.7.5 матрицы Σ_{ε} на S_{ε} :

$$\hat{\bar{a}} = (X^T S_{\varepsilon}^{-1} X)^{-1} X^T S_{\varepsilon}^{-1} \bar{\bar{y}}, \quad s_{\hat{\bar{a}}} = \frac{1}{n} (X^T S_{\varepsilon}^{-1} X)^{-1}, \quad \hat{\bar{a}} \in N_{q+1} \left(\bar{\bar{a}}, \frac{1}{n} (X^T S_{\varepsilon}^{-1} X)^{-1} \right),$$

$$R^2 = n \cdot (\bar{\bar{y}} - X \hat{\bar{a}})^T S_{\varepsilon}^{-1} (\bar{\bar{y}} - X \hat{\bar{a}}).$$

Вследствие случайности исходных данных величина R^2 также случайна. Из-за участия в формуле для R^2 вместо генеральной ковариационной матрицы ее оценки в данном случае распределение “хи - квадрат” неприменимо. Вместо него здесь применяется плотность F - распределения Фишера (иногда она именуется, как плотность распределения Фишера - Снедекора), и обозначается, как $F(k_1, k_2)$, где k_1 и k_2 - количества степеней свободы. Плотность распределения Фишера имеет случайная величина [5]

$$F = \frac{(n - k + q + 1)}{(k - q - 1)(n - 1)} \cdot R^2,$$

что записывается в виде

$$F = \frac{(n - k + q + 1)}{(k - q - 1)(n - 1)} \cdot R^2 \in F(k - q - 1, n - k + q + 1).$$

Эта плотность распределения широко используется при сопоставлении дисперсий генеральных совокупностей при дисперсионном анализе посредством исследования отношения оценок этих дисперсий. Нетрудно увидеть, что величина R^2 также, в некотором смысле есть отношение дисперсий. Функция распределения Фишера табулирована, таблицы приводятся в специальных таблицах математической статистики (например, [1,13, 14]).

Из последних выражений для величины F следует, что при подготовке эксперимента по аппроксимации зависимостей необходимо обеспечивать выполнение неравенства $n > k - q - 1$, то есть превышение количества повторных измерений над числом степеней свободы квадратичной формы $(\bar{Xa} - \bar{\bar{y}}_\varepsilon)^T S_\varepsilon^{-1} (\bar{Xa} - \bar{\bar{y}}_\varepsilon)$. Иногда по техническим, экономическим или иным объективным причинам это условие оказывается невыполнимым. В таком вынужденном случае придется формировать диагональную матрицу S_ε :

$$S_\varepsilon = \begin{pmatrix} s_{\varepsilon 1}^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s_{\varepsilon 2}^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s_{\varepsilon k}^2 \end{pmatrix}, \quad \bar{\bar{y}} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n \bar{y}_j, \quad s_{\varepsilon i}^2 = \frac{1}{n-1} \cdot \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_i)^2$$

и применять ее при вычислении оценок коэффициентов.

В этой ситуации F - распределению Фишера подчиняется случайная величина

$$F = \frac{R^2}{(k - q - 1)} \in F(k - q - 1, n - 1).$$

Число степеней свободы $k - q - 1$ и $n - 1$.

В частном случае, когда по результатам проверки по критерию Кочрена (п. 2.5.6.1) гипотезы о равенстве дисперсий $\sigma_{\varepsilon i}^2$ будет принято решение о применении МНК, тогда вычисляется средняя оценка дисперсии

$$s_{\varepsilon}^2 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k s_{\varepsilon i}^2,$$

которая подставляется вместо σ_{ε}^2 во всех соответствующих формулах п. 2.3.7.5 :

$$\bar{\hat{\mathbf{a}}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \bar{\hat{\mathbf{y}}}, \quad S_{\bar{\hat{\mathbf{a}}}} = \frac{1}{n} s_{\varepsilon}^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}, \quad \bar{\hat{\mathbf{a}}} \in N_{q+1} \left(\bar{\hat{\mathbf{a}}}, \frac{1}{n} s_{\varepsilon}^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \right),$$

$$R^2 = n \cdot s_{\varepsilon}^{-2} \cdot (\bar{\hat{\mathbf{y}}} - \mathbf{X} \bar{\hat{\mathbf{a}}})^T (\bar{\hat{\mathbf{y}}} - \mathbf{X} \bar{\hat{\mathbf{a}}}),$$

И в этом случае случайная величина

$$F = \frac{R^2}{(k - q - 1)} \in F(k - q - 1, n - 1).$$

распределена в соответствии с F - распределением Фишера с числом степеней свободы $k - q - 1$ и $n - 1$.

Все замечания, сделанные выше в п. 2.3.7.4, распространяются на случаи многократных измерений в полном объеме.

2.7. Особенности вычислений при реализации МНК и ОМНК

Как следует из пп. 2.3.7.2, 2.3.7.3, в процессе оценивания коэффициентов аппроксимирующих полиномов приходится обращаться матрицы $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$ и $(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X})$. Из линейной алгебры и вычислительной математики известно, что *устойчивость* результатов подобных действий в сильной степени зависит от *обусловленности* обрабатываемых матриц. Что касается матриц Σ_{ε} и S_{ε} , то здесь следует опасаться того, что они могут оказаться особенными. В частности, одна из причин появления особенности у матрицы S_{ε} указана в предыдущем пункте.

Обусловленность матриц характеризуется *числом обусловленности*, которое есть не что иное, как коэффициент “усиления” погрешностей экспериментальных данных и погрешностей округления к погрешностям результатов вычислений.

Для квадратных симметричных матриц, каковыми являются матрицы, перечисленные выше, число обусловленности определено равенствами

$$\text{cond}(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})}{\lambda_{\min}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})}}, \quad \text{cond}(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X}) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X})}{\lambda_{\min}(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X})}}$$

где $\lambda_{\max}(\bullet)$, $\lambda_{\min}(\bullet)$ - наибольшее и наименьшее собственные числа соответствующей матрицы.

Число обусловленности матриц, используемых в МНК или в ОМНК, может достигать значений $10^6 \div 10^{12}$ и выше.

Известно, что число обусловленности указанных матриц монотонно возрастает с увеличением количества столбцов матрицы \mathbf{X} , то есть с увеличением порядка \mathbf{q} или, что то же самое, с увеличением числа коэффициентов полинома (см. конструкцию матрицы \mathbf{X} в п. 2.3.7.2). Максимального значения число обусловленности достигает при $\mathbf{q} + 1 = \mathbf{k}$. Особенно опасной оказывается ситуация, когда количество оцениваемых коэффициентов превышает их фактическое количество, то есть при завышении степени полинома.

Можно рекомендовать три способа повышения устойчивости оценок коэффициентов МНК и ОМНК.

1. Не стремиться к излишне высокому порядку аппроксимирующего полинома, использовать априорную информацию о гладкости аппроксимируемой функции.

2. При необходимости аппроксимации функции $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ полиномом высокого порядка вплоть до $\mathbf{q} = \mathbf{k} - 1$ использовать *метод регуляризации* А.Н.Тихонова.

Применительно к МНК и ОМНК этот метод заключается в следующем [7].

Исходное уравнение преднамеренно искажается таким образом, чтобы это искажение заведомо улучшало обусловленность. Таким регуляризирующим искажением является, по Тихонову, увеличение диагональных элементов матрицы системы уравнений. Регуляризированное

таким образом решение имеет вид $\bar{\mathbf{a}}_{\alpha} = \left(\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X} + \alpha \mathbf{E} \right)^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \bar{\mathbf{y}}_{\varepsilon}, \quad \alpha > 0$

.



Рис. 32. Поведение погрешностей оценки при изменении параметра регуляризации

Число α называется *параметром регуляризации*. Оценка $\hat{\mathbf{a}}_\alpha$ в англоязычной литературе называется *ридж-оценкой*. В отечественной литературе встречается калькоподобный перевод этого термина: “*гребневая оценка*”.

Эта оценка, конечно, смещена. Ее смещение примерно равно

$$\approx \alpha (\mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \bar{\mathbf{y}}_\varepsilon.$$

Проблема состоит в выборе такого значения параметра регуляризации, при котором результирующая погрешность, вызванная смещением оценки и плохой обусловленностью матрицы системы, была минимальной.

На рис. 32 показана принципиальная возможность такого выбора. Однако, универсального практического рецепта выбора оптимального значения параметра регуляризации пока не существует.

3. Третий способ заключается в таком размещении значений аргумента \mathbf{x} , при котором число обусловленности матрицы $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$ или $(\mathbf{X}^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \mathbf{X})$ было минимальным. Этот способ рассматривается в следующем пункте.

2.8. Основные принципы планирования эксперимента, выполняемого с целью полиномиальной аппроксимации

Снова обратимся к конструкции матрицы \mathbf{X} , приведенной в п. 2.3.7.2, и к одной из формул вычисления ковариационной матрицы оценок коэффициентов полинома, например, $\Sigma_{\hat{\mathbf{a}}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$. Из конструкции матрицы \mathbf{X} видно, что ее элементы изменяют свои значения в зависимости от значений аргумента полинома: $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k$. Стало быть, можно надеяться на то, что существует такой план расстановки этих значений, при котором погрешности в каком-либо смысле будут минимальными.

Такие планы, действительно, существуют. Назовем некоторые из них (см., например, [15]).

A - оптимальный план эксперимента - план, при котором достигается минимум следа матрицы $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$, то есть минимум суммы ее диагональных элементов.

D - оптимальный план эксперимента - план, при котором достигается минимальное значение определителя матрицы $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$.

C - оптимальный план эксперимента - план, при котором достигается минимальное значение числа обусловленности матрицы $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$. **C** - оптимальный план эквивалентен **D** - оптимальному плану.

2.9. Расширение класса аппроксимирующих полиномов

Материал, изложенный выше в пп. 2.3.7.1 - 2.3.7.8, в равной степени относится к оценке коэффициентов обобщенных аппроксимирующих полиномов с заменой понятия “степень полинома” на “порядок полинома”.

Обобщенным полиномом называется полином вида

$$y(\mathbf{x}) = a_0 + a_1 \varphi_1(\mathbf{x}) + a_2 \varphi_2(\mathbf{x}) + \dots + a_q \varphi_q(\mathbf{x}),$$

$\{\varphi_i(\mathbf{x})\}, i = 0, 1, 2, \dots, q$ - система базисных функций.

Если эти функции ортогональны и соответствуют характеру аппроксимируемой зависимости лучше, чем степени \mathbf{x} , то для достижения необходимой точности аппроксимации может понадобиться меньше членов, чем в случае аппроксимации степенным полиномом. А это обстоятельство способствует улучшению обусловленности задачи и является *четвертым средством повышения устойчивости оценок* МНК и ОМНК.

Матрица \mathbf{X} в этом случае будет иметь следующую конструкцию:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & \varphi_1(\mathbf{x}_1) & \dots & \varphi_q(\mathbf{x}_1) \\ 1 & \varphi_1(\mathbf{x}_2) & \dots & \varphi_q(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & \varphi_1(\mathbf{x}_k) & \dots & \varphi_q(\mathbf{x}_k) \end{pmatrix}.$$

Это единственное отличие от изложенного выше. Все остальные формулы, замечания и рекомендации остаются в силе без каких-либо изменений.

3.1. Критерий Кочрена проверки гипотезы о равенстве дисперсий

Проверка гипотезы о равенстве дисперсий при полиномиальной аппроксимации это, по сути дела, проверка гипотезы о равноточности измерений значений аппроксимируемой функции. От исхода проверки этой гипотезы зависит выбор метода аппроксимации: МНК или ОМНК (см. п. 2.3.7.2). Применяется в тех случаях, когда характеристики погрешностей измерений аппроксимируемой функции неизвестны и трудоемкость выполнения ОМНК значительно выше трудоемкости выполнения МНК.

Формулировка гипотезы.

Имеются k выборок $y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{in}$, $i = 1, 2, \dots, k$ объемом n каждая. Выборки изъяты из нормальных генеральных совокупностей, дисперсии которых $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_k^2$. По выборочным значениям вычислены оценки математических ожиданий и дисперсий

$$\bar{y}_i = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n y_{ij}, \quad s_i^2 = \frac{1}{n-1} \cdot \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_i)^2.$$

Выдвигается гипотеза

$H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \dots = \sigma_k^2$ против альтернативы $H_1: \bar{H}_0$.

Статистика критерия Кочрена

$$g = \frac{s_{\max}^2}{\sum_{i=1}^k s_i^2}.$$

Критическое значение $g_\alpha(n-1, k)$ выбирается из таблиц критических значений критерия Кочрена. Эти таблицы приведены в учебниках и специальных таблицах математической статистики.

Расчитанное значение статистики критерия сравнивается с критическим значением. Если $g \leq g_\alpha(n-1, k)$, делается вывод о том, что нулевая гипотеза не противоречит экспериментальным данным, и для аппроксимации применяется МНК (пп. 2.3.7.2, 2.3.7.6).

В противном случае, если $g > g_\alpha(n-1, k)$, делается противоположный вывод, и для аппроксимации применяется ОМНК (пп. 2.3.7.2, 2.3.7.6).

3.2. Проверка гипотезы о степени аппроксимирующего полинома, характеристики погрешностей измерений известны.

а) Измерения однократные.

Постановка задачи полиномиальной аппроксимации некоторой исследуемой функции $y = f(x)$ и метод ее решения изложены в пп. 2.3.7.1, 2.3.7.2. В соответствии с материалами этих пунктов исходными данными для полиномиальной аппроксимации функции $y = f(x)$ являются ее значения в k дискретных точках, возмущенные погрешностями. Эти значения были объединены в вектор \bar{y}_ε . С другой стороны, вектор точных значений аппроксимируемой функции выражался, как $X\bar{a}$, где \bar{a} - вектор точных значений коэффициентов искомого полинома. Степень искомого полинома q полагалась известной, а погрешности - распределенными нормально: $\bar{\varepsilon} \in N_k(0, \Sigma_\varepsilon)$. Тогда вектор отсчетов также распределен нормально: $\bar{y}_\varepsilon \in N_k(X\bar{a}, \Sigma_\varepsilon)$, то есть $M[\bar{y}_\varepsilon] = X\bar{a}$. Эта ситуация именовалась, как случай известной модели.

В п. 2.3.7.2 были получены ММП - оценки $\tilde{\bar{a}}$ коэффициентов путем минимизации квадратичных форм

- $(X\bar{a} - \bar{y}_\varepsilon)^T (X\bar{a} - \bar{y}_\varepsilon)$ - в случае равноточных измерений и применения МНК,

- $(X\bar{a} - \bar{y}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (X\bar{a} - \bar{y}_\varepsilon)$ - в случае неравноточных измерений и применения ОМНК.

Из-за случайности погрешностей измерений оценки $\tilde{\bar{a}}$ также случайны, а значит, случайными являются векторы $(X\tilde{\bar{a}} - \bar{y}_\varepsilon)$ и вслед за ними - квадратичные формы, которые определены в п. 2.3.7.2:

- $R^2 = \sigma_\varepsilon^{-2} (X\tilde{\bar{a}} - \bar{y}_\varepsilon)^T (X\tilde{\bar{a}} - \bar{y}_\varepsilon)$ - в случае применения МНК

- $R^2 = (X\tilde{\bar{a}} - \bar{y}_\varepsilon)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} (X\tilde{\bar{a}} - \bar{y}_\varepsilon)$ - в случае применения ОМНК.

Поскольку найденные оценки коэффициентов несмещены,

$$M[X\tilde{\bar{a}} - \bar{y}_\varepsilon] = 0.$$

В п. 2.3.7.3 приведены плотности распределения этих квадратичных форм в условиях, когда плотности распределения погрешностей нормальны и

модель известна. Плотности распределения обеих квадратичных форм одинаковы: это плотность распределения “хи - квадрат” с $(k - q - 1)$ степенями свободы, то есть

$$R^2 \in \chi^2(k - q - 1).$$

На практике модель практически никогда не бывает известной. Тогда, при ошибочном назначении степени p аппроксимирующего полинома, меньшей, чем истинная степень q , оценки коэффициентов оказываются смещенными (см. также п. 2.3.7.4, замечание 4), поэтому $M[\bar{X}\hat{a} - \bar{y}_\varepsilon] \neq 0$, значения R^2 существенно возрастают, и плотность распределения изменяется. При увеличении степени аппроксимирующего полинома и, в особенности, при $p > q$ ухудшается обусловленность матриц $(X^T X)$ и $(X^T \Sigma_\varepsilon^{-1} X)$, и теряется вычислительная устойчивость МНК и ОМНК (см. п. 2.3.7.7). Поэтому случаи, когда $p > q$, не рассматриваются.

Итак, пусть в изложенных условиях при истинной степени аппроксимирующего полинома q была назначена степень $p < q$, и с помощью МНК или ОМНК получены оценки $p + 1$ коэффициента. Обозначим вектор найденных таким образом оценок через \hat{a}_p , а квадратичные формы, вычисленные при этих значениях оценок - через R_p^2 .

Сформулируем гипотезу.

H_0 : степень аппроксимирующего полинома $p = q$,

H_1 : степень аппроксимирующего полинома $p < q$.

Статистикой критерия проверки этой гипотезы является квадратичная форма R_p^2 , которая при $p = q$, то есть при справедливости нулевой гипотезы равна R^2 и распределена, как $\chi^2(k - q - 1)$ (см. п. 2.3.7.3). Поэтому в качестве критического значения при заданной вероятности α выбирается $(1 - \alpha) \cdot 100$ - процентная квантиль из таблицы квантилей распределения “хи - квадрат” с $(k - q - 1)$ степенями свободы.

Процедура проверки гипотезы в условиях, когда заданы вид полинома (степенной, обобщенный по п. 2.3.7.9) и вероятность α .

1. Оцениваются коэффициенты полинома

$$\hat{a}_p = (X^T X)^{-1} X^T \bar{y}_\varepsilon \quad \text{или} \quad \hat{a}_p = (X^T \Sigma_\varepsilon^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \bar{y}_\varepsilon.$$

2. Вычисляется статистика критерия

$$R_p^2 = \sigma_\varepsilon^{-2} \left(X \tilde{a}_p - \bar{y}_\varepsilon \right)^T \left(X \tilde{a}_p - \bar{y}_\varepsilon \right) \quad \text{или}$$

$$R_p^2 = \left(X \tilde{a}_p - \bar{y}_\varepsilon \right)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \left(X \tilde{a}_p - \bar{y}_\varepsilon \right).$$

3. Значение статистики R_p^2 сравнивается с критическим значением:

- если $R_p^2 \leq \chi_{1-\alpha}^2(k - q - 1)$, делается вывод о том, что нет достаточных оснований для того, чтобы отвергнуть нулевую гипотезу,

- в противном случае, если $R_p^2 > \chi_{1-\alpha}^2(k - q - 1)$, делается вывод о том, что нет достаточных оснований для того, чтобы считать нулевую гипотезу справедливой.

б) Измерения многократные.

Этот случай отличается от предыдущего тем, что в качестве исходных данных для полиномиальной аппроксимации используется не вектор результатов однократных измерений \bar{y}_ε , а вектор средних арифметических значений $\bar{\bar{y}}$ результатов многократных измерений. В условиях, перечисленных выше в п. а), вектор средних арифметических обладает свойствами (см. также пп. 2.3.4.3, 2.3.7.5) :

$$M[\bar{\bar{y}}] = X \bar{a}, \quad \bar{\bar{y}} \in N_k \left(X \bar{a}, \frac{\Sigma_\varepsilon}{n} \right), \quad \Sigma_{\bar{\bar{y}}}^{-1} = n \cdot \Sigma_\varepsilon^{-1}.$$

В случае равноточных измерений, когда применяется МНК,

$$\Sigma_{\bar{\bar{y}}} = \sigma_\varepsilon^2 \cdot E \quad \Sigma_{\bar{\bar{y}}}^{-1} = n \cdot \sigma_\varepsilon^{-2} \cdot E,$$

где E - единичная матрица (см. также п. 2.3.7.2) .

Тогда, если для аппроксимации назначена степень полинома p , и \tilde{a}_p - вектор оценок $(p + 1)$ коэффициента этого полинома, то статистикой критерия проверки гипотезы о степени полинома будет

$$R_p^2 = n \cdot \left(X \tilde{a}_p - \bar{\bar{y}} \right)^T \Sigma_\varepsilon^{-1} \left(X \tilde{a}_p - \bar{\bar{y}} \right).$$

В случае, когда измерения равноточные и применяется МНК,

$$R_p^2 = n \cdot \sigma_\varepsilon^{-2} \cdot \left(X \tilde{a}_p - \bar{\bar{y}} \right)^T \left(X \tilde{a}_p - \bar{\bar{y}} \right).$$

Как и ранее, при условии справедливости нулевой гипотезы, то есть при $p = q$ $R_p^2 = R_q^2$, и $R_q^2 \in \chi^2(k - q - 1)$. Критическое значение при заданном значении вероятности α есть $\chi_{1-\alpha}^2(k - q - 1)$.

Гипотеза формулируется по аналогии с формулировкой, приведенной в предыдущем п. а).

H_0 : степень аппроксимирующего полинома $p = q$,

H_1 : степень аппроксимирующего полинома $p < q$.

Процедура проверки гипотезы в условиях, когда заданы вид полинома (степенной, обобщенный по п. 2.3.7.9) и вероятность α .

1. Оцениваются коэффициенты полинома

$$\vec{\hat{a}}_p = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \vec{\bar{y}} \quad \text{или} \quad \vec{\hat{a}}_p = (\mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} \vec{\bar{y}}.$$

2. Вычисляется статистика критерия

$$R_p^2 = n \cdot \sigma_{\varepsilon}^{-2} \cdot (\mathbf{X} \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}})^T (\mathbf{X} \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}}) \quad \text{или} \quad R_p^2 = n \cdot (\mathbf{X} \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}})^T \Sigma_{\varepsilon}^{-1} (\mathbf{X} \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}}).$$

3. Значение статистики R_p^2 сравнивается с критическим значением:

- если $R_p^2 \leq \chi_{1-\alpha}^2 (k - q - 1)$, делается вывод о том, что нет достаточных оснований для того, чтобы отвергнуть нулевую гипотезу,

- в противном случае, если $R_p^2 > \chi_{1-\alpha}^2 (k - q - 1)$, делается вывод о том, что нет достаточных оснований для того, чтобы считать нулевую гипотезу справедливой.

Заметим, что в соответствии с центральной предельной теоремой плотность распределения средних арифметических асимптотически нормальна. Поэтому, начиная с $n = 15 \div 20$, требования к нормальности погрешностей измерений могут быть значительно смягчены.

3.3. Проверка гипотезы о степени аппроксимирующего полинома, характеристики погрешностей измерений неизвестны.

Если характеристики погрешностей измерения значений аппроксимируемой функции неизвестны, то неизбежно приходится выполнять многократные измерения и по результатам этих измерений оценивать характеристики погрешностей: дисперсии $\sigma_{\varepsilon i}^2$ или ковариационную матрицу \mathbf{S}_{ε} . Выполнение эксперимента в этой ситуации и вычисление оценок производится в соответствии с указаниями пп. 2.3.4.3, 2.3.4.4, 2.3.7.6. Для выяснения равноточности или неравноточности выполненных измерений проверяется гипотеза о равенстве дисперсий по критерию Кочрена (п. 2.5.6.1)

и принимается решение о применении МНК или ОМНК. При вынужденном пренебрежении коррелированностью между измерениями по причине, отмеченной в п. 2.3.4.7, матрица \mathbf{S}_ε оказывается диагональной (см. п. 2.3.7.6), и это обстоятельство несколько снижает эффективность оценок коэффициентов аппроксимирующего полинома, но оценки коэффициентов остаются несмещенными, если, конечно, назначенная степень полинома \mathbf{p} равна истинной степени \mathbf{q} .

Здесь, как и ранее в п. 2.5.6.2 б), в качестве исходных данных для полиномиальной аппроксимации используется не вектор результатов однократных измерений $\bar{\mathbf{y}}_\varepsilon$, а вектор средних арифметических значений $\bar{\bar{\mathbf{y}}}$ результатов многократных измерений. С учетом замены матрицы Σ_ε ее оценкой \mathbf{S}_ε (см. п. 2.5.6.2 б) :

$$\mathbf{M}[\bar{\bar{\mathbf{y}}}] = \mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}, \quad \bar{\bar{\mathbf{y}}} \in \mathbf{N}_k \left(\mathbf{X}\bar{\mathbf{a}}, \frac{\mathbf{S}_\varepsilon}{n} \right), \quad \mathbf{S}_{\bar{\bar{\mathbf{y}}}}^{-1} = n \cdot \mathbf{S}_\varepsilon^{-1}.$$

Если по результатам проверки гипотезы о равенстве дисперсий по критерию Кочрена принято решение о применении МНК, то

$$\mathbf{S}_{\bar{\bar{\mathbf{y}}}} = n^{-1} s_\varepsilon^2 \cdot \mathbf{E} \quad \mathbf{S}_{\bar{\bar{\mathbf{y}}}}^{-1} = n \cdot s_\varepsilon^{-2} \cdot \mathbf{E},$$

где \mathbf{E} - единичная матрица, s_ε^2 - оценка дисперсии равноточных измерений, которая вычисляется, как среднее арифметическое значение оценок дисперсий $s_{\varepsilon i}^2$, вычисленных при каждом значении \mathbf{x}_i , как указано в п. 2.3.7.6 :

$$s_\varepsilon^2 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k s_{\varepsilon i}^2.$$

Тогда, если для аппроксимации назначена степень полинома \mathbf{p} , и $\bar{\bar{\mathbf{a}}}_p$ - вектор оценок $\mathbf{p} - 1$ коэффициента этого полинома, то статистикой критерия проверки гипотезы о степени полинома будет

- в случае, когда по результатам проверки гипотезы о равенстве дисперсий принято решение о применении МНК,

$$\mathbf{F}_p = \frac{1}{k - \mathbf{q} - 1} \cdot \mathbf{R}_p^2,$$

$$\text{где } \mathbf{R}_p^2 = n \cdot s_\varepsilon^{-2} \cdot (\mathbf{X}\bar{\bar{\mathbf{a}}}_p - \bar{\bar{\mathbf{y}}})^T (\mathbf{X}\bar{\bar{\mathbf{a}}}_p - \bar{\bar{\mathbf{y}}}),$$

- в противном случае, при применении ОМНК

$$F_p = \frac{n - k + q + 1}{(k - q - 1)(n - 1)} \cdot R_p^2,$$

$$\text{где } R_p^2 = n \cdot \left(X \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}} \right)^T S_\varepsilon^{-1} \left(X \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}} \right).$$

При условии справедливости нулевой гипотезы, то есть при $p = q$, как указано выше в п. 2.3.7.6, статистика $F_q = F$ в обоих случаях распределена по закону распределения Фишера (см. [5], стр. 485):

- при применении МНК $F \in F(k - q - 1, n - 1)$ с количеством степеней свободы $(k - q - 1)$ и $(n - 1)$,

- при применении ОМНК $F \in F(k - q - 1, n - k + q + 1)$ с количеством степеней свободы $(k - q - 1)$ и $(n - k + q + 1)$.

Гипотеза о степени полинома формулируется по аналогии с формулировкой, приведенной в п. 2.5.6.2 :

H_0 : степень аппроксимирующего полинома $p = q$,

H_1 : степень аппроксимирующего полинома $p < q$.

Процедура проверки гипотезы в условиях, когда заданы вид полинома (степенной, обобщенный по п. 2.3.7.9) и вероятность α , а также вычислены оценки $\vec{\bar{y}}$ и s_ε^2 или $\vec{\bar{y}}$ и S_ε .

1. Оцениваются коэффициенты полинома

$$\vec{\hat{a}}_p = \left(X^T X \right)^{-1} X^T \vec{\bar{y}} \quad \text{или} \quad \vec{\hat{a}}_p = \left(X^T S_\varepsilon^{-1} X \right)^{-1} X^T S_\varepsilon^{-1} \vec{\bar{y}}.$$

2. Вычисляется статистика критерия

$$\text{- в случае МНК } F_p = \frac{n}{k - q - 1} \cdot s_\varepsilon^2 \cdot \left(X \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}} \right)^T \left(X \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}} \right),$$

$$\text{- в случае ОМНК } F_p = \frac{n(n - k + q + 1)}{(k - q - 1)(n - 1)} \cdot \left(X \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}} \right)^T S_\varepsilon^{-1} \left(X \vec{\hat{a}}_p - \vec{\bar{y}} \right).$$

3. Значение статистики F_p сравнивается с критическим значением распределения Фишера:

- в случае МНК, если $F_p \leq F_{1-\alpha}(k - q - 1, n - 1)$,

или

- в случае ОМНК, если $F_p \leq F_{1-\alpha}(k - q - 1, n - k + q + 1)$,

делается вывод о том, что нет достаточных оснований для того, чтобы отвергнуть нулевую гипотезу,

- в противном случае делается вывод о том, что нет достаточных оснований для того, чтобы считать нулевую гипотезу справедливой.

Критические значения плотности распределения Фишера приведены в таблицах математической статистики (см. [13, 14] и др.)

3.4. Последовательная полиномиальная аппроксимация с проверкой гипотезы о степени полинома

На практике при экспериментальном исследовании (идентификации) функциональных зависимостей, которые имеют место в природном или рукотворном объекте или в компьютерной модели, порядок степенного или обобщенного полинома, как правило, неизвестен, за исключением случаев, когда этот порядок задан заранее. Поэтому практически важной задачей является выбор такого порядка (степени) полинома, при котором обеспечиваются:

- заданная точность аппроксимации исследуемой функции,
- вычислительная устойчивость операций, выполняемых для нахождения оценок коэффициентов аппроксимирующего полинома.

Эти два требования противоположны.

С одной стороны, точность аппроксимации гладких функций степенным или обобщенным полиномами повышается с увеличением степени полинома.

С другой стороны, с увеличением степени полинома, как указано в п. 2.3.7.7, увеличивается количество оцениваемых коэффициентов и в связи с этим ухудшается обусловленность матриц, участвующих в выполняемых операциях, что приводит к утрате вычислительной устойчивости этих операций. Неустойчивость вычислений доходит до экстремально высокого уровня, когда заданная при аппроксимации степень полинома настолько высока, что приходится находить оценки несуществующих или пренебрежимо малых коэффициентов.

Выше назывались средства повышения вычислительной устойчивости полиномиальной аппроксимации, такие, как **C** - оптимальное планирование эксперимента (п. 2.3.7.8) и регуляризация по Тихонову (ридж - оценивание, п. 2.3.7.7), но эти средства не являются радикальными по следующим причинам.

Далеко не всегда имеется возможность выполнять эксперимент при значениях x_i , расстановка которых соответствует **C** - оптимальному плану.

Это может быть при исследовании природных зависимостей, когда воспроизведение заданных значений x_i не подвластно человеку, или когда воспроизведение этих значений с заданной точностью технически невозможно.

Применение метода тихоновской регуляризации (ридж - оценивания) затруднено неопределенностью в выборе параметра регуляризации, универсальные практические рецепты выбора его оптимального значения пока отсутствуют.

Практически реализуемой является стратегия полиномиальной аппроксимации (как и всякой другой), основанная на следующих принципах:

- не стремиться к точности аппроксимации, превышающей точность исходных данных, которая определяется характеристиками погрешностей измерений $\bar{\epsilon}$ и количеством независимых повторных измерений n ,
- подбирать подходящую степень (порядок) полинома путем направленного перебора от наименьшей в сторону возрастания до того значения, при котором характеристики погрешности аппроксимации окажутся согласованными с погрешностями исходных данных.

При реализации такой стратегии погрешность аппроксимации монотонно уменьшается, а погрешность, порождаемая вычислительной неустойчивостью, монотонно повышается. М.А.Красносельским доказано, что подобная стратегия является регуляризирующей стратегией решения плохообусловленных и некорректных задач.

Может оказаться, что этот процесс наращивания степени полинома остановится до достижения заданной заранее точности аппроксимации. Это значит, что при имеющейся погрешности исходных данных данная точность недостижима. Что делать в этом случае? Есть два пути: повысить точность измерений или увеличить количество независимых многократных измерений.

В противном случае, когда заданная точность уже достигнута, а процесс наращивания степени полинома еще не остановлен по указанному выше признаку согласования погрешностей, возможны варианты: остановить процесс по признаку достижения заданной точности или продолжить процесс и зафиксировать ту точность, которая достигнута и превышает заданную.

В условиях, когда погрешности $\bar{\epsilon}$ исходных данных случайны, остановка процесса монотонного наращивания степени аппроксимирующего полинома

может осуществляться только путем проверки гипотезы о степени полинома в соответствии с одним из вариантов, рассмотренных в п. 2.5.

Алгоритм последовательной полиномиальной аппроксимации функций с проверкой гипотезы о степени полинома:

1. Выполняются эксперименты при значениях x_i , $i = 1, 2, \dots, k$, где k должно быть больше максимально возможного предполагаемого количества коэффициентов искомого полинома.

2. Задается вероятность $\alpha \in [0.05, 0.2]$.

3. При необходимости в зависимости от ситуации вычисляются оценки $\bar{y}, s_{\varepsilon i}^2, s_{\varepsilon}^2, S_{\varepsilon}$, проверяется гипотеза о равенстве дисперсий $\sigma_{\varepsilon i}^2$ и принимается решение о применении МНК или ОМНК.

4. Задается начальная степень полинома p .

5. Формируется матрица X .

6. По формулам п. 2.5 в зависимости от ситуации вычисляются оценки коэффициентов аппроксимирующего полинома порядка (степени) p .

7. Вычисляется статистика R_p^2 или F_p (в зависимости от ситуации) критерия проверки гипотезы о степени полинома, значение этой статистики сравнивается с соответствующим критическим значением (пп. 2.5.6.2, 2.5.6.3).

8. Делается вывод о справедливости нулевой гипотезы.

Если принято решение об отклонении нулевой гипотезы, $p = p + 1$, переход на шаг алгоритма 5.

В противном случае переход на шаг алгоритма 9.

9. По одной из подходящих формул пп. 2.5.6.2, 2.5.6.3 вычисляется ковариационная матрица $\Sigma_{\hat{a}}$ погрешностей определения коэффициентов аппроксимирующего полинома.

Конец.

Замечание. Шаг 9 приведенного алгоритма обязателен, ибо всякий результат эксперимента или оценивания должен сопровождаться сообщением о характеристиках его погрешности.