

# Теория метода наименьших квадратов для решения обратных задач

В. Г. Кон

начало 23-07-2010, конец 11-01-2013

1. На сайте <http://users.kpi.kharkov.ua/fmp/biblio/BOOK1/2-3.html> я нашел текст с идеями, весьма близкими к тем, которые я когда-то сам придумал. В нем, однако, рассматривается простая задача линейной зависимости  $y = f(x) = ax + b$ . Тем не менее я сначала изложу исходный текст сайта, а затем попробую представить свой подход в случае более сложной зависимости..

Итак, в эксперименте при измерении какой-то кривой зависимости  $y(x)$ , как правило, неточными являются как аргументы  $x_i$  так и значения функции  $y_i$ . Однако часто предполагается, что шаг сетки точек  $x_i$  является точным, а начало координат всегда можно подобрать, после чего точки  $x_i$  можно считать известными точно. Дело в том, что эти точки очень часто задаются прибором и его точность можно контролировать.

Что же касается экспериментальных значений функции  $y_i$ , то они определяются физическими процессами, которые имеют неустранимую статистическую ошибку. Сделаем разумное предположение, что измеряемые значения  $y_i$  статистически распределены вокруг точных значений  $f(x_i)$ , которые соответствуют теории изучаемого процесса, причем функция вероятности этого распределения имеет гауссовый вид с дисперсией  $\sigma$ .

$$W(y_i) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma} \exp\left(-\frac{[y_i - f(x_i)]^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1)$$

Так как распределения  $W(y_i)$  в разных точках  $x_i$  независимы, то полная функция вероятности распределения всех точек около точных значений задается произведением отдельных функций вероятности. Ее называют функцией правдоподобия  $L(y_1, \dots, y_n)$

Предполагая для простоты, что дисперсии во всех точках одинаковы, получаем

$$L(y_1, \dots, y_n) = \left(\frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma}\right)^n \exp\left(-\sum_i \frac{[y_i - f(x_i)]^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2)$$

Это выражение описывает вероятность реализации случайных величин  $y_i$  около точных значений  $f(x_i)$ . Очевидно, что точные значения имеют наибольшую вероятность, но не стопроцентную. Такое выражение можно записать не только для линейной функции, но и для произвольной функции. Это общий подход.

В этом месте перевернем задачу. Пусть нам из эксперимента известны случайные величины  $y_i$ , но мы не знаем точного вида функции  $f(x_i)$ , зависящей от некоторых параметров. В случае линейной зависимости параметров два, то есть  $a$  и  $b$ . Но можно считать, что  $\sigma$  тоже неизвестно, тогда параметров три. Очевидно, что параметры надо определять из условия максимума функции  $L$ , а еще проще - из условия

минимума величины  $-\ln L$ . Далее для простоты записи обозначим  $\sigma^2 = s$ .

$$-\ln L = \frac{n}{2} \ln(2\pi s) + \frac{1}{2s} \sum_i [y_i - f(x_i)]^2 = \frac{n}{2} \ln(2\pi s) + \frac{1}{2s} \chi^2 \quad (3)$$

Здесь величина

$$\chi^2 = \sum_i [y_i - f(x_i)]^2 \quad (4)$$

есть сумма наименьших квадратов.

Очевидно, что параметры функции  $f(x_i)$  находятся из условия минимума  $\chi^2$ . В случае линейной зависимости для параметров  $a$  и  $b$  можно выписать точные аналитические выражения. Для нахождения параметра  $s$  имеем уравнение

$$-\frac{\partial \ln L}{\partial s} = \frac{n}{2s} - \frac{\chi_{\min}^2}{2s^2} = 0 \quad (5)$$

Здесь  $\chi_{\min}^2$  есть минимальное значение суммы наименьших квадратов, найденное вариацией параметров аппроксимирующей функции  $f(x_i)$ . Из простого уравнения сразу получаем решение

$$s = \frac{\chi_{\min}^2}{n} \quad (6)$$

Это очень важное соотношение. Его вывод не совсем очевиден, но раз математики пишут, значит тут что-то есть. То есть дисперсия равна минимальному значению  $\chi^2$ , деленному на число точек. Но утверждается без вывода даже больше, что из математической статистики следует вывод, что значение  $n$  в знаменателе надо заменить на  $(n - 2)$ , то есть более правильная формула имеет вид

$$s = \frac{\chi_{\min}^2}{n - 2} \quad (7)$$

Но для больших значений  $n$  эта разница несущественна и я не буду это учитывать.

Дисперсию параметров в случае линейной зависимости вычисляют в явном виде. Так для параметра  $a$  получается аналитическое решение

$$a = \frac{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle}{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad \langle o \rangle = \frac{1}{n} \sum_i o_i \quad (8)$$

Это выражение можно записать в виде

$$a = \sum_i k_i y_i, \quad k_i = \frac{x_i - \langle x \rangle}{n(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)} \quad (9)$$

В этом выражении коэффициенты  $k_i$  считаются точными, так как они определяются только аргументами функции, которые считаются точными, случайными величинами являются только значения  $y_i$ . Соответственно предполагается, что дисперсия  $s_a$  параметра  $a$  выражается через дисперсию  $s$  суммой квадратов величин, то есть

$$s_a = \sum_i k_i^2 s = \frac{s}{n(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)} \quad (10)$$

Это не очень понятно, то так там написано.

2. В этом месте текст из книги заканчивается Далее я буду действовать самостоятельно. В нашем случае есть две проблемы. Первая проблема состоит в том, что аппроксимирующая функция  $f(x_i, p)$  может быть очень сложной и ее зависимость от параметров не прописывается в явном виде. Вторая проблема состоит в том, что удобно выбирать безразмерную функцию, например, отношение кривой к среднему значению, а нормировка экспериментальной кривой очень часто не известна и зависит от многих факторов, не представляющих интереса. А аппроксимирующая (модельная) функция всегда нормирована правильно. Поэтому я привык выражение для суммы наименьших квадратов записывать в виде

$$\chi^2 = \sum_i [Ky_i - f(x_i, p)]^2 \quad (11)$$

и при заданном значении параметров  $p$  всегда определять значение параметра  $K$  из условия минимума  $\chi^2$ . При этом

$$K = \frac{\langle yf \rangle}{\langle y^2 \rangle}. \quad (12)$$

Хотя такой подход не согласуется с формулами (2)-(7), но можно рассуждать так. Найдем минимум  $\chi^2$  варьируя параметры  $p$  и точно вычисляя  $K$  при заданных  $p$  по формуле (12). Затем фиксируем коэффициент  $K$  в точке минимума, после чего назовем величины  $Ky_i$  новыми экспериментальными точками. Соответственно дисперсия этих точек будет определяться по формуле (6). Нас не интересует ошибка в определении коэффициента  $K$ , мы будем считать его точно определенным и забываем про него после переопределения экспериментальных точек  $y_i$ .

Следующий этап – обратимся к функции (2) и будем считать ее функцией распределения вероятности для параметра  $p$ . Для простоты сначала ограничимся одним параметром. Мы знаем значение параметра  $p_0$  при котором эта функция имеет минимум, то есть

$$\chi_{\min}^2 = \sum_i [y_i - f(x_i, p_0)]^2 \quad s = \frac{\chi_{\min}^2}{n} \quad (13)$$

далее

$$L(p) = \left( \frac{1}{2\pi s} \right)^{n/2} \exp \left( -\frac{1}{2s} \chi^2(p) \right) \quad (14)$$

Так как в точке  $p = p_0$  функция  $\chi^2$  имеет минимум, то ее разложение в ряд Тейлора начинается со второй степени

$$\chi^2(p) = \chi_{\min}^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial p^2} (p - p_0)^2 + \dots = \chi_{\min}^2 (1 + D_2 (p - p_0)^2 + \dots) \quad (15)$$

Подставляя (15) в (14) и учитывая (13) имеем

$$L(p) = \left( \frac{1}{2\pi s e} \right)^{n/2} \exp \left( -\frac{n D_2}{2} (p - p_0)^2 \right) \quad (16)$$

Итак, если не обращать внимания на нормировку, то функция вероятности записана в виде гауссового распределения для параметра  $p$ . Наиболее вероятное значение есть  $p_0$ , а дисперсия

$$s_p = \frac{1}{nD_2} = \left( \frac{2\chi^2}{n(\partial^2\chi^2/\partial p^2)} \right)_{p=p_0} \quad (17)$$

Эта формула имеет правильную размерность и очень разумный вид. Действительно, если сумма наименьших квадратов в минимуме равна нулю, то параметр определен точно и его дисперсия равна нулю. Это просто следует из того, что равна нулю дисперсия экспериментальных точек. С другой стороны, если  $\chi^2$  не равно нулю, то играет роль крутизна параболы в зависимости  $\chi^2$ . Чем она круче, тем меньше дисперсия и наоборот.

Реальная ошибка на параметр определяется шириной кривой на половине высоты, то есть окончательная формула гласит

$$e_p = 2.355\sigma_p = 2.355 \left( \frac{2\chi^2}{n(\partial^2\chi^2/\partial p^2)} \right)_{p=p_0}^{1/2} \quad (18)$$

**3.** Рассмотрим совсем простой пример  $f(x_i, p) = px_i$ . Тогда сразу находим  $p_0 = \langle xy \rangle / \langle x^2 \rangle$ . Согласно методу, изложенному в разделе 1 имеем  $s_p = s / (n\langle x^2 \rangle)$ . А согласно методу, изложенному в разделе 2, получаем тот же самый ответ, так как  $(\partial^2\chi^2/\partial p^2) = 2n\langle x^2 \rangle$ . Отсюда следует, что частный способ вывода дисперсии, данный в разделе 1 совпадает с общим методом.

Для полной линейной зависимости  $f(x_i, a, b) = ax_i + b$ , рассмотренной в разделе 1, значение  $a_0$  дается формулой (8), а  $b_0 = \langle y \rangle - a_0\langle x \rangle$ . Сложность в том, что в этом случае разложение (15) уже имеет смешанные производные

$$\chi^2(a, b) = \chi_{\min}^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\chi^2}{\partial a^2} (a - a_0)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\chi^2}{\partial b^2} (b - b_0)^2 + \frac{\partial^2\chi^2}{\partial a\partial b} (a - a_0)(b - b_0) + \dots \quad (19)$$

и поэтому функцию вероятности невозможно представить в виде произведения вероятностей для каждого параметра в отдельности. Если этим пренебречь и формально определять дисперсию только через чистые вторые производные, то по-прежнему имеем  $(\partial^2\chi^2/\partial a^2) = 2n\langle x^2 \rangle$  и соответственно  $s_a = s / (n\langle x^2 \rangle)$ . Этот ответ уже не совпадает с формулой (10). Вероятно, нужно провести вращение в плоскости параметров  $a$  и  $b$  таким образом, чтобы исключить смешанную производную и определить дисперсии для новых переменных. Затем их нужно пересчитать на старые переменные.

Обозначим  $(a - a_0) = u_1$ ,  $(b - b_0) = u_2$ . Тогда разложение можно записать в виде

$$\chi^2 - \chi_{\min}^2 = \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^2 \alpha_{ik} u_i u_k + \dots \quad (20)$$

Далее, можно ввести матрицу преобразования к новым переменным

$$\sigma_{ik} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad \tan 2\varphi = \frac{2\alpha_{12}}{(\alpha_{11} - \alpha_{22})} \quad (21)$$

Диагональные элементы новой матрицы

$$A_i \delta_{ik} = \sigma^{-1} \alpha \sigma \quad (22)$$

определяются формулами

$$A_{1,2} = \frac{1}{2} \left\{ \alpha_{11} + \alpha_{22} \pm \operatorname{sgn}(\alpha_{11} - \alpha_{22}) [(\alpha_{11} - \alpha_{22})^2 + 4\alpha_{12}^2]^{1/2} \right\} \quad (23)$$

Итак, в этом методе диагональные элементы преобразованной матрицы выражаются через недиагональные элементы с помощью формулы, имеющей квадратный корень, в то время как в формуле (10) все достаточно просто. Так что вряд ли это поможет. То есть в случае двух параметров есть проблемы сравнения с линейной зависимостью. Метод раздела 1 применим только в том случае, когда параметр можно выписать в явном виде. Метод раздела 2 не позволяет разделить параметры.

4. Тем не менее, в случае многих параметров метод диагонализации матрицы вторых производных представляется разумным и соответствует общим идеям книг по статистике эксперимента. Можно рассуждать так. Сначала мы находим минимум  $\chi^2$  по всем параметрам. Затем при оценке ошибки, связанной с каждым параметром, нужно исключить влияние одних параметров на другие. То есть вместо исходных параметров надо выбрать их линейные комбинации таким образом, чтобы для новых параметров матрица вторых производных была диагональной. Тогда вероятности для новых параметров определяются независимо по схеме, описанной в разделе 2. В важном случае двух параметров формулы написаны в разделе 3, то есть диагонализация выполняется аналитически точно.