УДК 519.876.5

Весовые коэффициенты в методе взвешенных наименьших квадратов

И.В. Бычков[1], В.И. Зоркальцев[2], А.В. Казазаева[3]

[1]Институт динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова Сибирского отделения Российской академии наук, ул. Лермонтова, 134, а/я 292, Иркутск, 664033

[2]Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева Сибирского отделения Российской академии наук, ул. Лермонтова, 130, Иркутск, 664033

[3]Иркутский государственный университет, ул. Карла Маркса, 1, Иркутск, 664033
E-mails: ivbychkov@mail.ru (Бычков И.В.), zork@isem.sei.irk.ru (Зоркальцев В.И.), kuz-ann@yandex.ru (Казазаева А.В.)

Бычков И.В., Зоркальцев В.И., Казазаева А.В. Весовые коэффициенты в методе взвешенных наименьших квадратов // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2015. — Т. 18, № 3. — С. 275–288.

Рассматривается задача оценки параметров линейных математических моделей. Доказано, что за счет выбора весовых коэффициентов в методе наименьших квадратов можно получать решения, вырабатываемые путем минимизации любых штрафных функций из широкого класса, в том числе любой из гельдеровских норм. Установлена ограниченность множества решений, образуемого в результате варьирования весовых коэффициентов в методе наименьших квадратов. Возможности практического использования установленных теоретических фактов иллюстрируются на материале эколого-математической модели.

DOI: 10.15372/SJNM20150303

Ключевые слова: *математические модели, оценка параметров, метод наименьших квадратов, весовые коэффициенты.*

Bychkov I.V., Zorkaltsev V.I., Kazazaeva A.V. The weight coefficients in the weighted least squares method // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2015. — Vol. 18, № 3. — P. 275–288.

We consider the problem of estimating parameters of linear mathematical models. It is proved that due to the choice of weights in the least squares method it is possible to obtain solutions by minimizing any penalty functions of a wide class, including those of the Holder norms. A limitation on a set of solutions resulting from the variation of the weights in the least squares method has been determined. The possibility of the practical use of the established theoretical facts is illustrated by the ecology-mathematical models.

Keywords: *mathematical model, agreement of parameters, the least squares method, weight coefficients.*

1. Введение

Одной из актуальных проблем математического моделирования является определение численных значений показателей конструируемой модели. Нередко исходные экспериментальные данные представляют собой множество разрозненных наблюдений разных авторов, сделанные в разные моменты времени, что существенно затрудняет процесс идентификации параметров модели. В частности, не всегда ясно, какими методами следует пользоваться при оценке параметров, чем соизмерять степень близости наблюдаемых показателей и их расчетных величин в рамках конструируемой модели. Основная цель данной статьи — показать, что многие способы оценивания параметров могут быть сведены к использованию метода наименьших квадратов за счет выбора весовых коэффициентов. В качестве иллюстрации здесь рассматривается одна задача оценки параметров в эколого-математической модели экосистемы озера Байкал [6].

2. Задача оценки параметров линейной модели

Одним из широко используемых подходов к решению проблемы оценки числовых характеристик, в условиях неполноты и противоречивости данных, является аппроксимация на основе функциональных зависимостей, отражающих суть моделируемой системы. В качестве меры точности аппроксимации могут выступать различные нормы, в том числе октаэдрическая, евклидова, гельдеровская, чебышевская, причем возможно варьирование весовых коэффициентов в каждой из этих норм. Интерес представляет вопрос, как влияет выбор нормы и весовых коэффициентов на получаемые решения.

Рассмотрим случай линейной аппроксимации. Он имеет самостоятельное значение, так как часто взаимодействия компонентов моделируемой системы могут быть достаточно точно описаны при помощи линейных схем. К нему также можно прийти в результате простых преобразований (например в результате логарифмирования при мультипликативных зависимостях) либо в результате процедур линеаризации нелинейных зависимостей.

Сформулируем проблему поиска параметров линейной аппроксимации λ_i в виде задачи минимизации штрафной функции от вектора невязок:

$$f(\xi) \to \min, \quad \xi \in L, \tag{1}$$

где

$$L = \left(\xi \in R^n : \xi_j = y_j - \sum_{i=1}^{m} x_{ij}\lambda_i, \;\; j = 1, \ldots, n, \;\; \lambda_i \in R^m\right) \tag{2}$$

есть линейное многообразие возможных значений векторов невязок ξ: j — номера наблюдений, i — номера факторов, x_{ij} — значение i-го фактора в j-м наблюдении, y_j — наблюдаемое значение результирующего показателя. Отметим, что при решении задачи (1) одновременно со значением вектора ξ определяется и значение вектора λ.

Обозначим F множество функций от векторов R^n, каждая из которых в результате возрастающих преобразований переходит в некоторую строго выпуклую дифференцируемую функцию f, для которой при любом ξ из пространства R^n выполняется равенство

$$\operatorname{sign} \nabla_j f(\xi) = \operatorname{sign} \xi_j, \quad j = 1, \ldots, n. \tag{3}$$

Здесь $\operatorname{sign} \alpha$ — функция знака вещественного числа α, равная $+1$, -1 или 0, если α имеет соответственно положительное, отрицательное или нулевое значения.

Оптимальное решение задачи (1) обозначим

$$\xi(f) = \arg\min f(\xi), \quad \xi \in L. \tag{4}$$

Множество решений задачи (1) с различными штрафными функциями из класса F обозначим

$$PF = \{\xi(f) : f \in F\}. \tag{5}$$

Теорема 1. *Решение задачи* (1) *существует и единственно при любой функции* f, *принадлежащей множеству* F.

Доказательство. Пусть функция f принадлежит множеству F. Тогда множеству F принадлежат также и все функции, полученные из f путем возрастающего преобразования. Решение задачи (1), если оно существует, для каждой такой функции совпадает с решением, полученным с исходной функцией f. Поэтому можно считать исходную функцию f строго выпуклой дифференцируемой. Из строгой выпуклости следует, что если решение задачи (1) со штрафной функцией f существует, то оно единственно.

Докажем существование решения задачи (1) со штрафной строго выпуклой дифференцируемой функцией $f \in F$. Из строгой выпуклости функции f следует, что она является непрерывной. По теореме Вейерштрасса из непрерывности f следует, что она достигает своего минимума на любом компакте в пространстве R^n. То есть задача (1) может не иметь решения, только если существует последовательность векторов ξ^k линейного многообразия L, $k = 0, 1, 2, \ldots$, таких что

$$f(\xi^{k+1}) < f(\xi^k) \tag{6}$$

и

$$\|\xi^k\| \to \infty \text{ при } k \to \infty\,. \tag{7}$$

Предположим, что такая последовательность существует. Выберем из данной последовательности бесконечную подпоследовательность с одинаковыми знаками у отдельных компонент векторов ξ^k. Не нарушая общности, будем считать, что такой является исходная последовательность $\{\xi^k\}$. Итак, для всех j и $k = 0, 1, 2, \ldots$:

$$\operatorname{sign} \xi_j^k = \text{const}\,. \tag{8}$$

Введем в рассмотрение векторы:

$$b^k = \xi^k - \xi^0, \qquad d^k = \frac{1}{\|b^k\|}\, b^k, \quad k = 1, 2, \ldots\,. \tag{9}$$

Учитывая (7), будем считать, что

$$\|b^k\| > 1, \;\; k = 1, 2, \ldots\,. \tag{10}$$

В силу ограниченности последовательности $\{d^k\}$ в ней существует сходящаяся подпоследовательность. Не нарушая общности, будем считать, что таковой является исходная последовательность $\{d^k\}$. Итак, для некоторого $d \in R^n$:

$$d^k \to d, \quad k \to \infty. \tag{11}$$

Из (7)–(11) следует:

$$J(d) \neq \emptyset, \quad J_+(d) \subseteq J_+(\xi^0), \quad J_-(d) \subseteq J_-(\xi^0), \tag{12}$$

где $J(d)$ — множество номеров компонент вектора d с ненулевыми значениями (далее будем называть его носителем вектора d), $J_+(d)$ — множество номеров положительных компонент вектора d, $J_-(d)$ — множество номеров отрицательных компонент вектора d. Здесь и далее символ $\subseteq$ означает простое включение одного множества в другое (включено и возможно совпадение). Так как для функции f выполняется условие (3), то из (12) следует

$$f(\xi^0 + d) > f(\xi^0). \tag{13}$$

С другой стороны, из (9) следует

$$\xi^0 + d^k = \lambda_k \xi^k + (1 - \lambda_k)\xi^0, \text{ где } \lambda_k = \frac{1}{\|b^k\|}. \tag{14}$$

Согласно (10), $\lambda_k \in (0, 1)$. Из условия (6) и строгой выпуклости f следует

$$f(\xi^0 + d^k) < f(\xi^0). \tag{15}$$

Учитывая (11), получаем

$$f(\xi^0 + d) \le f(\xi^0), \tag{16}$$

что противоречит (13) и доказывает ошибочность предположения. □

Так как часто заранее неизвестно, какую именно функцию следует использовать в задаче (1), то важно знать, какое влияние на получаемое решение оказывает выбор штрафной функции.

Одним из вариантов выбора штрафной функции могут быть гельдеровские нормы

$$\rho_h^p(\xi) = \left(\sum_{j=1}^{n} h_j |\,\xi_j|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \tag{17}$$

где $\rho > 1$ — степенной коэффициент, $h_j > 0$ — весовые коэффициенты. Следует отметить, что все гельдеровские нормы принадлежат множеству F.

Частным случаем гельдеровских норм являются евклидовы нормы

$$\rho_h^2(\xi) = \left(\sum_{j=1}^{n} h_j |\,\xi_j\,|^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \tag{18}$$

Часто в качестве штрафной функции используют не саму евклидову норму, а функцию, являющуюся результатом возрастающего преобразования (возведения в квадрат и умножения на 0.5) евклидовой нормы

$$f_h^2\,(\xi) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} h_j |\,\xi_j\,|^2. \tag{19}$$

Обозначим множество решений задачи (1) с дифференцируемыми строго выпуклыми штрафными функциями вида (19):

$$P_2 = \{\xi(f_h^2) : \ h_j > 0, \quad j = 1, \ldots, n\}. \tag{20}$$

Использование в задаче (1) функции (19) дает такой же результат, что и использование евклидовой нормы. Использование функций (18) или (19) и означает, что задача (1) решается методом наименьших квадратов. При этом одной из проблем является выбор весовых коэффициентов в методе наименьших квадратов. В определении весовых коэффициентов можно выделить три подхода:

1. Часто в качестве весовых коэффициентов принимают характеристику точности наблюдений в отдельных экспериментах. В этом случае значение весового коэффициента для j-го наблюдения принимается равным обратной величине погрешности прибора, с помощью которого осуществлялось это наблюдение.

2. Так же весовые коэффициенты можно интерпретировать как показатели информативности или ценности отдельных наблюдений. При этом, чем выше значимость отклонения $|\xi_j|$, тем больше численное значение величины h_j по сравнению с другими компонентами вектора h.
3. Согласно третьему подходу, весовые коэффициенты могут определяться как управляющие параметры, сопоставляющие разные взаимопротиворечивые цели.

Теорема 2. *Множества PF и P_2 совпадают.*

Доказательство. Так как евклидовы нормы принадлежат множеству функций F, то справедливо включение

$$P_2 \subseteq PF. \tag{21}$$

Докажем обратное включение

$$PF \subseteq P_2. \tag{22}$$

Пусть функция f принадлежит множеству F, причем f — строго выпуклая функция. Определим весовые коэффициенты следующим образом:

$$h_j = \begin{cases} |\nabla_j f(\xi(f))|/(|\xi_j(f)|), & \xi_j(f) \neq 0, \\ 1, & \xi_j(f) = 0. \end{cases} \tag{23}$$

Из (3) и (19) следует, что

$$\nabla f_h^2(\xi(f)) = \nabla f(\xi(f)). \tag{24}$$

Отметим, что вектор $\xi(f)$ из L является решением задачи (1), если для любого $z \in Z$, где Z — некоторое подпространство параллельно многообразию L, выполняется условие

$$\sum_{j=1}^{n} \nabla_j f(\xi(f)) z_j = 0. \tag{25}$$

Из (24) следует, что это условие справедливо и для функции f_h^2 в точке $\xi(f)$. Из чего следует, что

$$\xi(f_h^2) = \xi(f). \tag{26}$$

Так как

$$\xi(f_h^2) = \xi(\rho_h^2), \tag{27}$$

то выполняется

$$\xi(\rho_h^2) = \xi(f). \tag{28}$$

Что и доказывает справедливость выражения (22). □

Следствие 1. *За счет выбора весовых коэффициентов метод наименьших квадратов позволяет получать решение задачи* (1) *при использовании в ней любой штрафной функции из очень широкого класса F.*

Так как решения задачи (1) методом наименьших квадратов зависят от возможных вариаций вектора весовых коэффициентов, важно знать, насколько сильно эти вариации могут влиять на получаемые решения.

Введем множество *особых решений* задачи (1), которое состоит из векторов линейного многообразия L с нерасширяемыми наборами нулевых компонент (или, что одно и тоже, векторов данного многообразия с минимальными носителями). Пусть

$$Q = \{\xi \in L : \neg\exists\bar{\xi} \in L,\ J_0(\xi) \subset J_0(\bar{\xi})\}, \tag{29}$$

где $J_0(\xi) = \{j : \xi_j = 0\}$ — множество номеров компонент вектора ξ с нулевыми значениями. Здесь и далее символ $\subset$ означает строгое включение одного множества в другое (включено и исключено совпадение).

Обозначим $\operatorname{co} Q$ выпуклую оболочку векторов Q.

Справедливо следующее утверждение.

Теорема 3. *Множество Q состоит из конечного числа векторов, $P_2 \subseteq \operatorname{co} Q$.*

Доказательство. Если два разных вектора линейного многообразия L имеют одинаковые носители, то среди их аффинных комбинаций будут векторы с более узким носителем, который будет строго включаться в носитель исходных векторов. Отсюда следует, что носители любых двух особых векторов линейного многообразия L различаются. Следовательно, число особых векторов конечно.

Рассмотрим некоторый вектор $\xi^* \in P_2$, такой, что $\xi^* \notin Q$.

Обозначим K как конечный набор векторов из P_2, удовлетворяющих условиям:

$$J_+(k) \subseteq J_+(\xi^*), \qquad J_-(k) \subseteq J_-(\xi^*)\ \forall\, k \in K, \tag{30}$$

$$\xi^* \in \operatorname{co} K. \tag{31}$$

Примем, что первоначально K состоит из одного вектора ξ^*.

Пусть существует некоторый вектор $v \in K$, такой, что $v \notin Q$. Следовательно, существует вектор $q \in Q$, такой, что

$$J(q) \subset J(v). \tag{32}$$

Положим $s = v - q$. Отметим, что

$$J(s) \notin \emptyset, \qquad J(s) \subseteq J(v). \tag{33}$$

Определим величины:

$$\lambda_1 = \max\{\lambda : v_j + \lambda s_j \geq 0,\ j \in J_+(v);\ v_j + \lambda s_j \leq 0,\ j \in J_-(v)\}, \tag{34}$$

$$\lambda_2 = \max\{\lambda : v_j - \lambda s_j \geq 0,\ j \in J_+(v);\ v_j - \lambda s_j \leq 0,\ j \in J_-(v)\}. \tag{35}$$

Введем векторы:

$$v^1 = v + \lambda_1 s, \tag{36}$$

$$v^2 = v - \lambda_2 s. \tag{37}$$

Отметим, что для этих векторов выполняются соотношения:

$$J_+(v^1) \subseteq J_+(v), \qquad J_-(v^1) \subseteq J_-(v), \tag{38}$$

$$J_+(v^2) \subseteq J_+(v), \qquad J_-(v^2) \subseteq J_-(v). \tag{39}$$

Вектор v является линейной комбинацией векторов v^1 и v^2:

$$v = \alpha v^1 + (1 - \alpha) v^2 \tag{40}$$

при

$$\alpha = \frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2}. \tag{41}$$

Поэтому из набора K можно исключить вектор v, заменив его векторами v^1 и v^2. Новый набор будет обладать теми же свойствами, при этом векторы v^1 и v^2 имеют более узкие носители, чем замененный ими вектор

$$J(v^1) \subset J(v), \qquad J(v^2) \subset J(v). \tag{42}$$

В набор $J(v^1)$ не входит номер $j \in J(v)$, при котором реализуется значение λ_1, а в набор $J(v^2)$ не входит номер, соответствующий значению λ_2.

Повторяя предложенную процедуру, через конечное число замен в наборе K останутся только особые векторы многообразия L. □

Следствие 2. *Все решения, получаемые в рассмотренной постановке, находятся внутри множества* $\operatorname{co} Q$, *и диапазоны значений их компонент могут быть оценены путем перебора конечного числа векторов из множества* Q.

Эта теорема вместе с теоремой 2 позволяет оценивать диапазон возможных значений компонент векторов, являющихся решениями задачи (1) при различных штрафных функциях из рассматриваемого здесь класса, на основании определения диапазонов изменений соответствующих компонент конечного числа особых решений.

Отметим ряд преимуществ выбора штрафной функции вида (19). Во-первых, с такой функцией задача (1) имеет единственное решение. Во-вторых, она непрерывно меняется при изменении вектора весовых коэффициентов h. В-третьих, за счет выбора весовых коэффициентов она может заменить многие другие постановки. И, наконец, она удобна для вычислений, так как задача сводится к решению системы линейных уравнений.

3. Задача оценки параметров математической модели экосистемы озера Байкал

В качестве примера применения представленных выше теоретических исследований рассмотрим задачу определения коэффициентов смертности при моделировании динамики численности популяций пелагических рыб озера Байкал — большой и малой голомянок. Под коэффициентом смертности будем понимать отношение числа особей, выбывших из популяции в связи с гибелью, к общему числу особей популяции в единицу времени. В решении данной задачи существует несколько подходов, в частности одним из них является анализ экспериментальных данных уловов. Соотношения численностей разных возрастов в улове позволяет судить о соотношениях численностей разных возрастов в самом водоеме и, следовательно, о скорости выбывания особей из популяции в результате смертности.

В табл. 1 и на рисунке представлены данные о процентном соотношении численности особей в определенном возрасте для каждой из популяций голомянок из работы Г.В. Старикова [9]. Согласно разработанной им методике, в течение 7 лет с 1969 по 1975 гг. производился лов. В каждом улове в процентном отношении к общему количеству особей в улове подсчитывалась численность особей определенного возраста. Автором были выделены шесть возрастов — от одного до шести лет. Следует отметить, что в [9] были представлены данные только о соотношениях численностей разных возрастных групп. Можно предположить, что большой голомянки в уловах было стабильно меньше, чем малой голомянки. Большая голомянка значительно реже попадается в сети рыбаков и по имеющимся оценкам ее в три раза меньше по численности, чем малой голомянки.

Таблица 1. Возрастной состав большой и малой голомянок

Возраст, лет	Численность особей (% от общего числа особей в улове данного года)						
	1969 г.	1970 г.	1971 г.	1972 г.	1973 г.	1974 г.	1975 г.
Большая голомянка							
1	51.25	36.67	39.17	30.83	40.83	46.67	42.92
2	24.17	32.92	30.83	28.33	24.58	17.5	15.42
3	10.08	14.17	16.67	12.50	15.42	14.17	10.00
4	5.42	8.00	9.58	12.92	8.33	7.08	11.67
5	4.17	7.00	5.42	11.25	7.92	7.08	8.75
6	3.33	1.20	4.58	6.25	3.75	3.75	6.25
Малая голомянка							
1	32.50	79.25	39.50	42.12	56.00	46.25	51.25
2	28.12	15.62	37.50	33.12	30.00	25.62	29.00
3	23.50	8.50	11.87	18.75	14.37	12.00	11.00
4	11.87	4.37	5.62	8.12	7.50	11.00	10.00
5	5.62	3.00	5.00	3.50	4.00	5.62	1.87
6	2.50	1.62	1.10	2.70	2.50	1.62	1.10

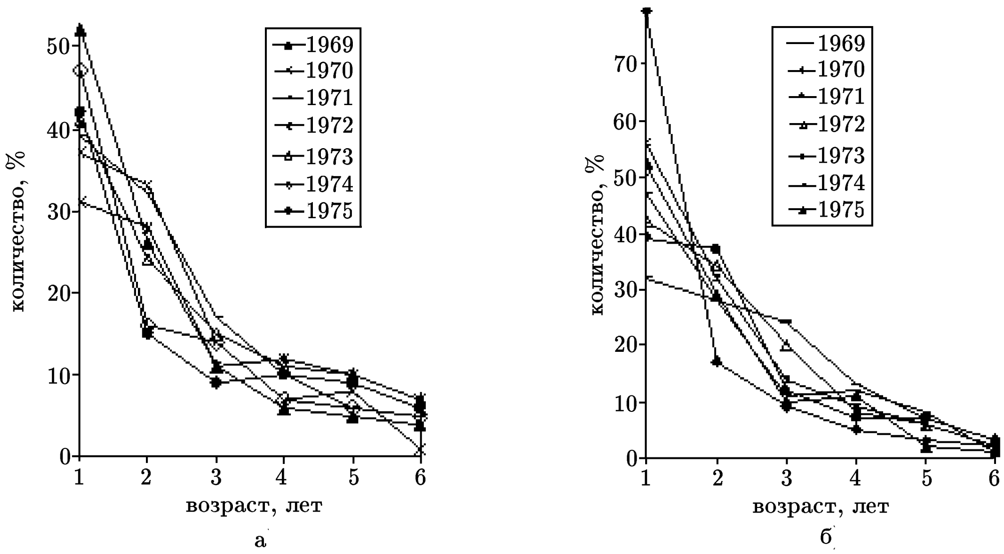

Рис. Соотношение численностей особей разных возрастов для популяций большой (а) и малой (б) голомянок в уловах в %

На рисунке хорошо видно, что кривые возрастного состава популяций большой и малой голомянок близки к экспоненте. Это согласуется с предположением о том, что численность популяции убывает по экспоненциальному закону, т. е. кривая возрастного состава описывается функцией

$$N = Ce^{-\lambda x}, \tag{43}$$

где N — численность особей, λ — коэффициент смертности, x — возраст, C — некоторая константа. Путем логарифмирования экспоненциальную зависимость можем свести к линейной.

Обозначим:

$$y = \ln N, \tag{44}$$

$$b = \ln C. \tag{45}$$

Тогда приведенное выше экспоненциальное соотношение (43) переходит в следующее линейное уравнение:

$$y = b - \lambda x. \tag{46}$$

Из табл. 1 и из рисунка видно, что распределения по возрастному составу имеют нестабильный характер по годам. Это объясняется относительно небольшим числом рыб в уловах. Поэтому оценку параметров будем проводить по усредненным за многолетний период данным. Для этого рассчитываем средние значения численности для каждого возраста из табл. 1.

В табл. 2 представлены логарифмы от этих средних значений.

Таблица 2. Усредненный за период 1969–1975 гг. возрастной состав популяций в логарифмической шкале

Возраст, лет	Большая голомянка y^1	Малая голомянка y^2
1	3.72	3.83
2	3.20	3.29
3	2.58	2.60
4	2.20	2.07
5	2.08	1.35
6	1.48	0.56

Для определения значений параметров λ и b для каждой из рассматриваемых популяций рыб применим метод наименьших квадратов.

Определим компоненты вектора невязок

$$\xi_j = y_j + \lambda x_j - b, \quad j = 1, \dots, 6. \tag{47}$$

Задача оценки параметров будет иметь вид:

$$f(\xi) = \sum_{j=1}^{6} h_j (y_j + \lambda x_j - b)^2 \to \min . \tag{48}$$

Оценим диапазон возможных значений параметра λ при разных весовых коэффициентах h_j. Согласно следствию теоремы 3, получить эту оценку можно, перебрав конечное число особых векторов. Каждый особый вектор, в данном случае, определяется из условия равенства нулю двух компонент вектора невязок ξ.

Так, для первых пяти особых векторов в табл. 3 и табл. 4 нулевыми полагаются значения компонент вектора невязок ξ_1, соответствующие возрасту $x = 1$. Другое нулевое значение последовательно принимают компоненты для остальных пяти возрастов. Для каждой популяции рыб рассчитывается 15 особых векторов.

На основании данных табл. 3 и табл. 4 можно сделать следующие выводы: для большой голомянки значение λ в зависимости от выбора весовых коэффициентов в методе наименьших квадратов может изменяться в диапазоне [0.2–0.62], значению λ для малой голомянки соответствует диапазон [0.53–0.79]. Более широкий диапазон значений параметра λ для большой голомянки свидетельствует о меньшей устойчивости искомой оценки от располагаемых данных по сравнению с малой голомянкой. Это может быть объяснено меньшей численностью в уловах большой голомянки, чем малой.

Значения параметра λ ведут себя более устойчиво при построении их по данным наблюдений первых лет жизни. Значения λ, построенные на основании последних лет жизни, сильно варьируются. Это говорит о том, что при оценке коэффициентов смертности следует придавать большее значение весам информативности h_j первых лет жизни, чем последних. В поддержку этого можно привести следующие доводы: во-первых, количество наблюдений в старших возрастах меньше, чем в младших, потому оценки и удельные веса менее устойчивы (что особенно сильно проявляется в данных по большой голомянке); во-вторых, есть основания полагать, что процесс гибели особей старших возрастов осуществляется более ускоренными темпами, чем младших (что особенно проявляется в данных по малой голомянке). Можно также предположить, что классификация по годам жизни рыб старших возрастов осуществляется с большими погрешностями.

Таблица 3. Значения компонент особых векторов и соответствующих им значений λ для большой голомянки

№	Компоненты особого вектора ξ						λ
	ξ_1	ξ_2	ξ_3	ξ_4	ξ_5	ξ_6	
1	0.00	0.00	−0.11	0.02	0.34	0.34	0.51
2	0.00	0.05	0.00	0.18	0.55	0.51	0.57
3	0.00	−0.01	−0.12	0.00	0.31	0.30	0.51
4	0.00	−0.09	−0.28	−0.23	0.00	−0.09	0.43
5	0.00	−0.07	− 0.24	−0.18	0.07	0.00	0.45
6	−0.11	0.00	0.00	0.24	0.66	0.77	0.62
7	0.01	0.00	−0.12	0.00	0.31	−0.29	0.50
8	0.11	0.00	−0.22	−0.20	0.00	−0.12	0.40
9	0.08	0.00	−0.10	−0.15	0.09	0.00	0.43
10	0.37	0.24	0.00	0.00	0.19	0.05	0.39
11	0.55	0.33	0.00	−0.09	0.00	−0.23	0.29
12	0.40	0.26	0.00	−0.02	0.15	0.00	0.38
13	0.93	0.61	0.19	0.00	0.00	−0.32	0.20
14	0.45	0.29	0.03	0.00	0.16	0.00	0.36
15	−0.35	−0.35	−0.45	−0.32	0.00	0.00	0.52

Таблица 4. Значения компонент особых векторов и соответствующих им значений λ для малой голомянки

№	Компоненты особого вектора ξ						λ
	ξ_1	ξ_2	ξ_3	ξ_4	ξ_5	ξ_6	
	0.00	0.00	−0.15	−0.14	−0.31	−0.56	0.54
2	0.00	0.07	0.00	0.09	−0.01	−0.19	0.62
3	0.00	0.05	−0.06	0.00	−0.13	−0.33	0.59
4	0.00	0.08	0.01	0.09	0.00	−0.17	0.62
5	0.00	0.11	0.07	0.20	0.14	0.00	0.65
6	−0.15	0.00	0.00	0.16	0.14	0.04	0.69
7	−0.07	0.00	−0.05	0.00	−0.10;	−0.28	0.61
8	−0.10	0.00	−0.05	0.07	0.00	−0.15	0.65
9	−0.14	0.00	−0.01	0.14	0.11	0.00	0.68
10	0.17	0.16	0.00	0.00	−0.18	0.44	0.53
11	−0.01	0.07	0.00	0.09	0.00	−0.17	0.62
12	−0.12	0.01	0.00	0.15	0.11	0.00	0.68
13	−0.38	−0.21	−0.18	0.00	0.00	−0.08	0.72
14	−0.49	−0.28	−0.22	0.00	0.04	0.00	0.75
15	−0.89	−0.44	−0.34	−0.08	0.00	0.00	0.79

Проблема выбора весовых коэффициентов в задаче (48). Согласно общим рекомендациям, весовые коэффициенты при использовании метода наименьших квадратов должны задаваться пропорционально точности сопоставляемых измерений. При этом точность полагается равной обратной величине погрешности измеряемой среднеквадратическим отклонением [1].

Обозначим p^j вероятность того, что какая-то из конкретных рыб в улове имеет возраст j. Эту величину можно считать равной удельному весу численности рыб данного возраста в общей численности рыб рассматриваемого вида в Байкале. Поскольку количество рыб данного вида в Байкале можно считать бесконечно большим по сравнению с количеством рыб в улове, то можем считать, что мы имеем дело с испытаниями по схеме Бернулли с неизменной вероятностью реализации рассматриваемого события. Тогда среднеквадратическое отклонение числа рыб данного возраста относительно всех рыб в улове равно, как известно, величине

$$D^j = p^j(1 - p^j), \quad j = 1, \ldots, 6. \tag{49}$$

Весовые коэффициенты, согласно рассматриваемой здесь концепции, определяются по формуле

$$h_j = \frac{1}{D^j}, \quad j = 1, \ldots, 6. \tag{50}$$

Несложно убедится, что среднеквадратическое отклонение (49) достигает максимума при p^j, равном 0.5. При дальнейшем уменьшении p^j эта величина будет уменьшаться. При рассматриваемом способе (50) определения весовых коэффициентов получается, что большее значение должно придаваться данным наблюдений в старших возрастах рыб, чем в младших. Это противоречит приведенным выше соображениям и результатам. Полученный парадоксальный вывод о некорректности использования весовых коэффициентов, получаемых на основе рекомендаций “общего плана”, нуждается в дальнейших более подробных исследованиях, в том числе о применимости рекомендаций “общего плана” в данном случае.

Более уместной представляется идея использования весов пропорциональных численности особей отдельных лет, т. е. по рассматриваемой здесь экспоненциальной зависимости (43). В таком случае

$$h_j = Ce^{-\lambda j}, \quad j = 1, \ldots, 6. \tag{51}$$

Применение правила (51) означает, что более информативными для расчетов мы считаем данные тех лет, по которым больше объектов в выборке. Это согласуется с приведенными ранее оценками (и объясняющими их соображениями) о большей устойчивости соотношений численности младших возрастных групп по сравнению с соотношениями численностей старших возрастных групп в выборках (в уловах).

В использовании весов (51) возникает новая проблема. В выражении (51) используются параметры, которые предстоит еще определить в результате решения задачи (43) с рассматриваемыми весами. Причем нельзя делать прямую подстановку выражения (51) в задачу (43), поскольку эта задача состоит только в минимизации взвешенных невязок и не в минимизации рассматриваемой функции за счет выбора весов.

Поскольку для задачи (43) существенное значение имеют не абсолютные значения, а соотношения значений весовых коэффициентов, то для решения этой задачи важно правильно оценить только коэффициент смертности. Это можно попытаться сделать итеративным путем. Сначала задать какие-то положительные веса, затем решить с ними задачу (43). На основе полученного коэффициента смертности по правилу (51) задать новые веса, с ними решить опять задачу (43). Полученный новый коэффициент смертности можно использовать для пересчета весов (51). Данная процедура, конечно, нуждается в теоретическом обосновании. Во-первых, надо показать, что она даст сходящийся процесс. Во-вторых, надо доказать, что она будет приводить из разных (в каком-то смысле разумных) исходных приближений к одному и тому же стационарному решению, т. е. к ситуации, когда веса (51) с имеющимся коэффициентом смертности будут давать в результате решения задачи (43) такой же коэффициент смертности.

Ограничимся пока экспериментальными расчетами для рассматриваемого здесь числового примера. В качестве стартового значения рассмотрим два варианта весовых коэффициентов. Первый вариант — все весовые коэффициенты равны единице, $h_j^0 = 1$, $j = 1, \ldots, 6$. Второй вариант — весовые коэффициенты в начальном приближении зададим равными удельному весу особей данного возраста в уловах. Результаты расчетов по обоим вариантам исходного приближения для обоих видов рыб представлены в табл. 5 и в табл. 6.

Таблица 5. Значения компонент вектора весовых коэффициентов и соответствующих им значений λ и b для большой голомянки

№	Компоненты вектора весовых коэффициентов h						λ	b
	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6		
Вариант 1								
0	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.43	4.05
1	2.62	1.70	1.10	0.71	0.46	0.30	0.47	4.14
2	2.60	1.63	1.02	0.64	0.40	0.25	0.47	4.14
Вариант 2								
0	0.41	0.25	0.13	0.09	0.07	0.04	0.47	4.14
1	2.60	1.63	1.02	0.64	0.40	0.25	0.47	4.14

Таблица 6. Значения компонент вектора весовых коэффициентов и соответствующих им значений λ и b для малой голомянки

№	Компоненты вектора весовых коэффициентов h						λ	b
	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6		
Вариант 1								
0	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.65	4.55
1	2.38	1.24	0.65	0.34	0.18	0.09	0.62	4.47
2	2.40	1.30	0.70	0.38	0.20	0.11	0.62	4.47
Вариант 2								
0	0.46	0.27	0.13	0.08	0.04	0.02	0.62	4.47
1	2.41	1.30	0.70	0.38	0.20,	0.11	0.62	4.47

Во всех случаях наблюдается сходимость к стационарному решению и это решение одно и то же для обоих рассматриваемых исходных приближений (естественно, решения разные для разных видов рыб). Причем процесс сходится очень быстро: на второй и третьей итерациях получаем стационарное (с точностью до третьей значащей цифры) решение. Результаты расчета, представленные в табл. 5 и в табл. 6, показывают, что второй вариант исходного приближения оказался в данных случаях несколько предпочтительнее, так как позволил быстрее получить стационарное решение.

Необходимо отметить, что проблема выбора метода для построения аппроксимирующих зависимостей возникает во многих областях прикладных исследований. Исторически первой проблемой такого типа, вероятно, следует считать задачи оценки параметров траектории движения планет на основе разновременных астрономических наблюдений. Эта задача решалась еще древнегреческими и арабскими учеными. Согласно сведениям

Г.В. Багратуни, приведенным в его вводной статье к книге [2], первая строгая математическая постановка этой проблемы была дана итальянским астрономом и математиком Р. Босковичем. Он сформулировал проблему аппроксимации в виде задачи минимизации суммы модулей отклонений наблюдений от расчетных значений траекторий. Такой подход развивал в конце XVIII века Лаплас, которого иногда называют первооткрывателем метода минимизации суммы модулей отклонений. Этот метод обладает известными для специалистов в области прикладной математики неудобствами. В частности, даже при использовании взвешенных сумм модулей отклонений при линейных аппроксимациях всегда получаются, в некотором смысле, "крайние" решения, имеющие максимальные (нерасширяемые) наборы нулевых отклонений (соответствующие "особым решениям", рассмотренным в данной статье). В целях борьбы с явными недостатками метода минимизации суммы модулей Лаплас предлагал дополнить его условием, что сумма отклонений должна равняться нулю (это свойство автоматически достигается при использовании метода наименьших квадратов с одинаковыми весовыми коэффициентами).

В 1794 году семнадцатилетний Гаусс пришел к методу наименьших квадратов, полагая, что он общеизвестен. Позднее этот метод был открыт независимо Лежандром, который опубликовал его в вышедшей в 1806 году работе "Новый метод определения орбит планет". В 1804 году была опубликована статья Гаусса, где приводится метод наименьших квадратов применительно к проблеме оценки параметров траекторий небесных тел. В 1821 году вышла вторая статья Гаусса с изложением метода наименьших квадратов, проблем в его использовании применительно к топографическим задачам.

В обеих работах Гаусс применял вероятностные подходы к обоснованию метода наименьших квадратов, в том числе как способ оценки параметров по принципу максимизации правдоподобия в нашей терминологии, как способ получения несмещенных и эффективных оценок. Уместно также отметить, что Гаусс, особенно во второй его статье, подчеркивал шаткость вероятностного подхода к обоснованию метода наименьших квадратов (в том числе, в связи с необходимостью использования в этом случае очень большого, обычно реально не располагаемого числа наблюдений) и целесообразного использования "интуитивного" обоснования этого метода в форме задачи минимизации штрафных функции. В качестве возможных штрафных функций он рассматривал гельдеровские нормы (в нашей терминологии) с любыми целыми четными степенными коэффициентами, указывая при этом, что вторая степень имеет предпочтение с вычислительной точки зрения. В связи с тем, что авторы некоторых публикаций различают "метод наименьших квадратов" и "метод взвешенных наименьших квадратов", уместно отметить, что Гаусс рассматривал метод наименьших квадратов сразу с весовыми коэффициентами, т. е. не проводя указанного различия.

К настоящему времени по методу наименьших квадратов опубликовано большое количество оригинальных научных работ. Среди работ российских математиков можно упомянуть глубокие исследования, представленные в [7, 8, 10]. Метод наименьших квадратов и его конкуренты широко используются во многих разделах прикладной математики, в том числе при регуляризации задач математического программирования (см. например, [4]). В качестве примера широты области приложения можно отметить, что предложенная Л.В. Канторовичем идея формирования на основе метода взвешенных наименьших квадратов "объективно обусловленных оценок" ресурсов послужила исходным импульсом для создания очень эффективного метода оптимизации — алгоритмов внутренних точек [3]. Более подробный обзор области приложения и свойств метода наименьших квадратов имеется в книге [5].

Литература

1. **Айвазян С.А.** Прикладная статистика: Основы моделирования и первичная обработка данных. Справочное изд-ние / С.А. Айвазян, И.С. Енюков, Л.Д. Мешалкин — М.: Финансы и статистика, 1983.
2. **Гаусс К.Ф.** Избранные геодезические сочинения. — М.: Геодезиздат, 1957.
3. **Дикин И.И., Зоркальцев В.И.** Итеративное решение задач математического программирования (алгоритмы метода внутренних точек). — Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1980.
4. **Еремин И.И., Мазуров В.Д., Астахов Н.Н.** Несобственные задачи линейного и выпуклого программирования — М.: Наука, 1983.
5. **Зоркальцев В.И.** Метод наименьших квадратов: геометрические свойства, альтернативные подходы, приложения. Отв. ред.: Е.Г. Анциферов, В.П. Булатов. — Новосибирск: ВО "Наука". Сибирская издательская фирма, 1995.
6. **Зоркальцев В.И., Мокрый И.В., Казазаева А.В.** Моделирование пелагического сообщества озера Байкал // Вычислительные технологии. — 2011. — Т. 16, № 1. — С. 48–66.
7. **Колмогоров А.И.** Теория вероятности и математическая статистика. — М.: Наука, 1986.
8. **Линник Ю.В.** Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории наблюдений. — М.: Физматгиз, 1962.
9. **Стариков Г.В.** Голомянки Байкала. — Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1977.
10. **Чеботарев А.С.** Способ наименьших квадратов с основами теории вероятности. — М.: Геодезиздат, 1958.

Поступила в редакцию 2 сентября 2014 г.,
в окончательном варианте 9 декабря 2014 г.

Литература в транслитерации

1. **Ajvazyan S.A.** Prikladnaya statistika: Osnovy modelirovaniya i pervichnaya obrabotka dannykh. Spravochnoe izd-nie / S.A. Ajvazyan, I.S. Enyukov, L.D. Meshalkin — M.: Finansy i statistika, 1983.
2. **Gauss K.F.** Izbrannye geodezicheskie sochineniya. — M.: Geodezizdat, 1957.
3. **Dikin I.I., Zorkal'tsev V.I.** Iterativnoe reshenie zadach matematicheskogo programmirovaniya (algoritmy metoda vnutrennikh tochek). — Novosibirsk: Nauka. Sib. otd-nie, 1980.
4. **Eremin I.I., Mazurov V.D., Astakhov N.N.** Nesobstvennye zadachi linejnogo i vypuklogo programmirovaniya — M.: Nauka, 1983.
5. **Zorkal'tsev V.I.** Metod naimen'shikh kvadratov: geometricheskie svojstva, al'ternativnye podkhody, prilozheniya. Otv. red.: E.G. Antsiferov, V.P. Bulatov. — Novosibirsk: VO "Nauka". Sibirskaya izdatel'skaya firma, 1995.
6. **Zorkal'tsev V.I., Mokryj I.V., Kazazaeva A.V.** Modelirovanie pelagicheskogo soobshchestva ozera Bajkal // Vychislitel'nye tekhnologii. — 2011. — T. 16, № 1. — S. 48–66.
7. **Kolmogorov A.I.** Teoriya veroyatnosti i matematicheskaya statistika. — M.: Nauka, 1986.
8. **Linnik Yu.V.** Metod naimen'shikh kvadratov i osnovy matematiko-statisticheskoj teorii nablyudenij. — M.: Fizmatgiz, 1962.
9. **Starikov G.V.** Golomyanki Bajkala. — Novosibirsk: Nauka. Sib. otd-nie, 1977.
10. **Chebotarev A.S.** Sposob naimen'shikh kvadratov s osnovami teorii veroyatnosti. — M.: Geodezizdat, 1958.