УДК 519.61

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ ДЛЯ СУММЫ ФУНКЦИЙ, УДОВЛЕТВОРЯЮЩИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМ УРАВНЕНИЯМ С ПОЛИНОМИАЛЬНЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

О. И. Бернгардт[1], **А. Л. Воронов**[1]

В работе предложен алгоритм аналитического определения параметров двух функций по их линейной комбинации. Эти функции должны удовлетворять дифференциальным уравнениям первого порядка с полиномиальными коэффициентами, а искомые параметры являются коэффициентами этих полиномов. Алгоритм состоит из последовательного решения в рамках метода наименьших квадратов двух линейных задач — определение коэффициентов полиномиальных членов дифференциального уравнения, которому удовлетворяет линейная комбинация этих функций, и выражение параметров искомых функций через найденные полиномы. Проведенное численное моделирование по предложенной схеме подтвердило работоспособность методики при наличии слабого нормального шума (с дисперсией, меньшей трех процентов).

1. Введение. Часто в практических приложениях возникает задача определения параметров двух функций одной переменной, принадлежащих известным классам, по их линейной комбинации. В физических приложениях такая задача часто называется проблемой разделения сигналов, мод или лучей. Примерами таких классов являются экспоненты от полиномов, гармонические функции с фазой в виде полинома, а также дробно-рациональные функции [1]. Подобные задачи могут возникать при интерпретации результатов эксперимента, когда класс функций, входящих в линейную комбинацию, известен из каких-либо теоретических предположений, но неизвестны их параметры.

Одним из методов, наиболее часто применяемых к задаче определения параметров функций, является метод наименьших квадратов, который в общем случае сводится к задаче безусловной минимизации функций из известного класса, зависящей от многих неизвестных параметров. В линейном случае эта задача имеет простое решение, сводящееся к решению системы линейных уравнений с известными матричными элементами. В рассматриваемом случае нелинейной зависимости от параметров эта задача достаточно сложна и не имеет точного аналитического решения; поэтому (когда прямой перебор параметров неприемлем из-за ограниченности ресурсов) задача обычно решается с помощью поэтапной квазилинеаризации функции (методы Ньютона) [2, 3]. Недавно были сделаны попытки решить аналогичные задачи для аппроксимации функции экспоненциальными суммами [4–6]. Другие авторы изучали задачу фитирования функций суммой гауссовых функций [7, 8]. Отметим, что эти задачи являются частными случаями нашей. Однако рассмотренные методы имеют недостатки — сильную зависимость от начального приближения и потребность в больших вычислительных ресурсах. Указанные недостатки становятся особенно серьезными, когда вычисление функции требует слишком много времени и хорошее начальное приближение неизвестно или когда нет уверенности в существовании единственного глобального минимума.

В работе предлагается алгоритм сведения описанной выше задачи к задаче поиска минимума функций, линейно зависящих от своих параметров, к которой применимы широко известные методы, основанные на решении систем линейных уравнений. Мы ограничимся классом функций, удовлетворяющих дифференциальным уравнениям первого порядка с полиномиальными коэффициентами. Такая задача становится линейной, если вместо параметров самих функций искать коэффициенты дифференциальных уравнений с учетом их линейности по отношению к этим коэффициентам.

Близкий к предлагаемому метод был разработан Куликовым [10] для дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами, однако в нашем случае этот метод не применим, поскольку наши функции не удовлетворяют дифференциальным уравнениям с постоянными коэффициентами.

2. Постановка задачи. Пусть $f_1(t)$, $f_2(t)$ — неизвестные функции, удовлетворяющие дифференциальному уравнению с полиномиальными коэффициентами

$$\big(D + P_i(t)\big)\, f_i(t) = 0,$$

[1] Институт солнечно-земной физики СО РАН, ул. Лермонтова, 126, 664033, г. Иркутск-33, а/я 4026; e-mail: berng@iszf.irk.ru

где

$$P_i(t) = \sum_{j=0}^{N} p_{ij} t^j \tag{1}$$

— полиномиальные коэффициенты порядка N с неизвестными коэффициентами p_{ij}, а сами операторы не равны: $P_1(t) \neq P_2(t)$. Допустим, что нам известна линейная комбинация этих функций на интервале $t \in [0,1]$:

$$F(t) = a_1 f_1(t) + a_2 f_2(t)$$

и что эта линейная комбинация ограничена на указанном интервале ($\sup(\|F(t)\|) < \infty$), но коэффициенты a_1, $a_2 \neq 0$ не известны.

Требуется свести задачу определения нелинейных параметров p_{ij}, входящих в модельную функцию

$$F_{\text{mod}}(t; p_{ij}) = a_1 f_1(t; p_{1j}) + a_2 f_2(t; p_{2j}),$$

к линейной задаче для определения p_{ij}.

3. Алгоритм построения аналитического решения. Имеет место следующая теорема.

Теорема 1 (существование). *Пусть имеются две функции $f_1(t)$ и $f_2(t)$, тождественно не равные нулю, которые на интервале $D_t : t \in [0,1]$ удовлетворяют дифференциальным уравнениям первого порядка с известными полиномиальными коэффициентами $P_i(t)$:*

$$\big(D + P_i(t)\big)\, f_i(t) = 0, \tag{2}$$

где $P_1 \neq P_2 \neq 0$. Пусть также имеется функция

$$F(t) = \alpha_1 f_1(t) + \alpha_2 f_2(t), \tag{3}$$

причем α_1, $\alpha_2 \neq 0$ не известны. Тогда функция $F(t)$ удовлетворяет на D_t дифференциальному уравнению с полиномиальными коэффициентами известного порядка:

$$\widehat{L}F = \big(AD^2 + BD + C\big)\, F = 0, \tag{4}$$

где

$$\begin{aligned} A(t) &= P_1 - P_2, \\ B(t) &= \big(P_1^2 - P_2^2\big) - \frac{d}{dt}(P_1 - P_2), \\ C(t) &= P_1 P_2 (P_1 - P_2) + \left(P_1 \frac{dP_2}{dt} - \frac{dP_1}{dt} P_2\right), \end{aligned} \tag{5}$$

и эти выражения для A, B, C единственны с точностью до произвольного ненулевого постоянного множителя.

Доказательство. Будем искать коэффициенты A, B, C оператора $\widehat{L}$ исходя из условия обращения в нуль результата действия этого оператора на каждое слагаемое в (3): $\widehat{L} f_i = 0$, $i = 1, 2$. С учетом уравнений (2) получаем следующие выражения для производных от $f_i(t)$:

$$Df_i = -P_i f_i, \quad D^2 f_i = \left(P_i^2 - \frac{d}{dt} P_i\right) f_i.$$

Поскольку сами функции f_i не равны нулю, получаем систему двух линейных уравнений для трех неизвестных коэффициентов A, B, C:

$$A\left(P_i^2 - \frac{d}{dt} P_i\right) + BP_i + C = 0.$$

Перенося член с A в правую часть, получим условие существования единственного решения при фиксированном A:

$$\left\| \begin{matrix} P_1 & 1 \\ P_2 & 1 \end{matrix} \right\| = P_1 - P_2 \neq 0,$$

совпадающее с условием задачи. Тогда имеем

$$B(t) = A(t)\,\frac{(P_1^2 - P_2^2) - \dfrac{d}{dt}(P_1 - P_2)}{P_1 - P_2}, \quad C(t) = A(t)\,\frac{P_1P_2(P_1 - P_2) + \left(P_1\dfrac{dP_2}{dt} - \dfrac{dP_1}{dt}P_2\right)}{P_1 - P_2}.$$

Эти соотношения при выборе $A(t) = P_1 - P_2$ переходят в выражения, которые необходимо получить.

Теорема 2 (единственность). *Если некоторая функция $F(t)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению вида (4), коэффициенты которого A, B, C выражаются известным образом (с точностью до постоянного множителя) через некоторые полиномы P_1, $P_2 \neq 0$, $P_1 \neq P_2$ (см. (5)), то эта функция представима в виде (3) при некоторых α_1, $\alpha_2 \neq 0$, а функции P_1, P_2 являются решениями системы уравнений (сводящейся к квадратному уравнению) и единственны:*

$$\begin{aligned} &P_1 + P_2 = \left(B + \frac{dA}{dt}\right)A^{-1}, \\ &P_1P_2 = \left(C - \left(A\frac{d}{dt}\left(\left(B + \frac{dA}{dt}\right)A^{-1}\right) - \left(\left(B + \frac{dA}{dt}\right)A^{-1}\right)\frac{dA}{dt}\right)\Big/2\right)A^{-1}. \end{aligned} \tag{6}$$

Доказательство. Из теоремы 1 следует существование таких коэффициентов P_1, P_2, при которых функция $F(t)$ представима в виде (4), где функции $f_i(t)$ удовлетворяют уравнениям (2). Докажем сначала, что коэффициенты P_1, P_2 выражаются в виде (6). Из (5) можно выразить две функции, равные сумме и произведению P_{11}, P_{12} и не зависящие от общего постоянного множителя:

$$\begin{aligned} K_1(t) &= \left(B(t) + \frac{d}{dt}A(t)\right)A^{-1} = P_1 + P_2, \\ K_2(t) &= \left(C(t) + \left(\frac{dK_1}{dt}A - K_1\frac{dA}{dt}\right)\Big/2\right)A^{-1} = P_1P_2. \end{aligned} \tag{7}$$

Согласно (7) и теореме Виета, P_1 и P_2 являются решениями квадратного уравнения $P^2 - PK_1 + K_2 = 0$, у которого существует единственная пара решений

$$P_{1,2} = \frac{K_1 \pm \sqrt{K_1^2 - 4K_2}}{2}.$$

Это доказывает единственность решения.

Теорема 3 (алгоритм). *Если функции $P_1(t)$, $P_2(t)$ являются полиномами вида (1) и удовлетворяют условиям теоремы 1, то по $F(t)$ можно аналитически определить функции $P_1(t)$, $P_2(t)$, и поиск аналитического представления сводится к последовательному решению трех систем линейных уравнений известного порядка.*

Доказательство. Если $P_1(t)$, $P_2(t)$ — имеют полиномиальный вид, то и коэффициенты дифференциального уравнения (4) представимы в виде полиномов:

$$A(t) = \sum_{k=0}^{N} q_{Ak}t^k, \quad B(t) = \sum_{k=0}^{2N} q_{Bk}t^k, \quad C(t) = \sum_{k=0}^{3N} q_{Ck}t^k.$$

В дифференциальное уравнение (4) все неизвестные коэффициенты q_{Ak}, q_{Bk}, q_{Ck} входят линейно и могут быть найдены аналитически как решение, удовлетворяющее минимуму функционала

$$\int \left\| L(t; q_{Ak}, q_{Bk}, q_{Ck})\, F(t) \right\|^2 dt = \min.$$

Действительно, определим коэффициенты полиномов $A(t)$, $B(t)$, $C(t)$ в предположении, что все они независимы. Эта задача линейна, поскольку все коэффициенты линейно входят в дифференциальное уравнение (4):

$$\left(\sum_{k=0}^{N} q_{Ak}t^k D^2 + \sum_{k=0}^{2N} q_{Bk}t^k D + \sum_{k=0}^{3N} q_{Ck}t^k\right) F = 0.$$

Поэтому поиск коэффициентов q_{Ak}, q_{Bk}, q_{Ck} в рамках метода наименьших квадратов является линейной задачей с $6N + 3$ линейными параметрами и мы можем легко получить ее аналитическое решение [11].

Для уменьшения ошибок численного счета преобразуем наше дифференциальное уравнение (4) в интегральное, дважды проинтегрировав его:

$$A(t)F(t)+\int\limits_0^t\left(B(x)-2\,\frac{dA(x)}{dx}\right)F(x)\,dx+\int\limits_0^t dx\int\limits_0^x\left(C(y)-\frac{dB(y)}{dy}+\frac{d^2A(y)}{d^2y}\right)F(y)\,dy+L_1t=L_0.$$

Это интегральное уравнение также линейно по q_{Ak}, q_{Bk}, q_{Ck} и все его коэффициенты являются известными функциями — различными комбинациями самой функции $F(t)$ и интегралов от произведений $F(t)$ на полиномы. Поскольку все коэффициенты известны, а дополнительные постоянные интегрирования (также подлежащие нахождению) также линейны, линейный метод наименьших квадратов допускает аналитическое решение. Чтобы исключить тривиальное решение, мы должны положить один из коэффициентов (например, L_0) равным единице, после чего можно получить параметры q_{Ak}, q_{Bk}, q_{Ck}, L_1 минимизацией функционала

$$\begin{aligned}\Omega(L_1,q_{Ak},q_{Bk},q_{Ck})=\int\limits_0^1 dt\biggl(A(t)F(t)+\int\limits_0^t\left(B(x)-2\,\frac{dA(x)}{dx}\right)F(x)\,dx\,+\\ +\int\limits_0^t dx\int\limits_0^x\left(C(y)-\frac{dB(y)}{dy}+\frac{d^2A(y)}{d^2y}\right)F(y)\,dy+L_1t-1\biggr)^2=\min.\end{aligned}\tag{8}$$

Поскольку задача линейна по всем неизвестным q_{Ak}, q_{Bk}, q_{Ck}, L_1, мы можем получить аналитическое решение линейным методом наименьших квадратов, сводящееся к решению системы линейных уравнений известного порядка.

Найдя таким образом аналитические выражения для коэффициентов полиномов q_{Ak}, q_{Bk}, q_{Ck}, мы получим тем самым аналитические выражения для самих полиномов $A(t)$, $B(t)$, $C(t)$.

Искомые полиномы $P_1(t)$, $P_2(t)$ аналитически определяются по полиномам $A(t)$, $B(t)$, $C(t)$ (согласно теореме 2). Коэффициенты p_{ik} этих полиномов могут быть аналитически определены линейным методом наименьших квадратов. Действительно, в уравнения (6) эти коэффициенты входят линейно, поскольку правые части аналитически выражены через функцию $F(t)$ и ее интегралы. Поэтому в рамках метода наименьших квадратов минимизация двух функционалов

$$\Omega_i(p_{ik})=\int\limits_0^1 dt\left\|\sum_{j=0}^N p_{ij}t^j-\frac{K_1+(-1)^i\sqrt{K_1^2-4K_2}}{2}\right\|^2,\tag{9}$$

где K_1, K_2 заданы в (7), сводится к решению двух систем линейных уравнений известного порядка и дает аналитические выражения для коэффициентов p_{ik} искомых полиномов $P_{1,2}$. Таким образом, существует аналитическое выражение для полиномов $P_{1,2}$ через функцию $F(t)$ и ее интегралы. Само аналитическое решение получается последовательной минимизацией функционалов (8) и (9).

4. Проверка методики. Наш алгоритм был проверен для задач разделения двух перекрывающихся гауссовых функций $f_i(t)=R_i\exp\bigl(-(\alpha_i t^2+\beta_i t)\bigr)$, удовлетворяющих дифференциальному уравнению

$$\bigl(D+(2\alpha_i t+\beta_i)\bigr)\,f_i=0.$$

Исходная функция имела вид

$$F(t)=0.005\exp^{-25t^2+40t}+800\exp^{-30t^2+20t},$$

что соответствует двум пикам с амплитудами порядка 45000 и 22000 примерно с половинным перекрытием (уровень провала между ними порядка 15000). При моделировании на функцию накладывался аддитивный шум с гауссовым распределением, нулевым средним и дисперсией, порядка процентов от амплитуды меньшего пика.

Производные в (8) вычислялись как формальные производные от полиномов. Интегрирование проводилось с использованием сплайн-интерполяции для функции $F(x)$, ее произведений и интегралов с полиномами для улучшения точности интегрирования. Вычисление коэффициентов полиномов из уравнения (9) сводится к задаче полиномиальной регрессии. Случай определения амплитуд при известных остальных параметрах сводится к линейной задаче и при моделировании не исследовался. Результаты вычислений параметров для различных уровней шума приводятся в таблице.

Относительная ошибка,%	Шум,%	Кол-во точек
20	0	100
30	2	100
5	0	1000
25	2	1000
1.8	0	5000
28	2	5000

Уменьшение ошибки с ростом числа точек указывает на необходимость применения более точных алгоритмов интегрирования (например, использование сплайнов более высокой степени) при необходимости увеличения точности получаемых параметров. Как видно из приведенной таблицы, алгоритм дает приемлемую точность при дисперсии, меньшей трех процентов.

5. Заключение. В работе предложен алгоритм аналитического определения параметров двух функций, удовлетворяющих дифференциальному уравнению первого порядка с полиномиальными коэффициентами, по их линейной комбинации. Алгоритм сводит исходную нелинейную задачу к последовательному решению двух линейных задач: определение полиномиальных коэффициентов линейного дифференциального уравнения второго порядка с полиномиальными коэффициентами (8) и определение коэффициентов исходных полиномов по результатам первого шага (9). Численная проверка показала работоспособность алгоритма при слабом нормальном шуме (с дисперсией, меньшей трех процентов).

Авторы благодарны В. Е. Носову за проявленный интерес к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Камке Э.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1976.
2. *Дэннис Дж., Шнабель Р.* Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. М.: Мир, 1988.
3. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1974.
4. *Petersson J., Holmstrom K.* Methods for parameter estimation in exponential sums // Research Reports in Mathematics/Applied Mathematics. Technical Report IMa-TOM-1997-5. Petersson–Holmstrom: Mälarden University, 1997.
5. *Feldman A., Whitt W.* Fitting mixtures of exponentials to long-tail distributionas to analyze network performance models // AT&T Laboratory–Research. Presented at IEEE INFOCOM'97. Kobe (Japan), 1997.
6. *Chocholaty P.* A method of inversion of the Laplace transform // Math. Slov. 1992. **42**, N 2. 239–246.
7. *Chem T., Rehg J.* A multiple hypothesis approach to figure tracking // Cambridge Research Laboratory. Technical Reports Series. CRL 98/8. Cambridge, 1998.
8. *Laidlaw D.* Material classification of magnetic resonance volume data. Thesis for the Master of Science Degree. California Institute of Technology. Pasadena, 1992.
9. *Dennis J.E., Schnabel R.B.* Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations. Englewood Clifs: Prentice-Hall, 1983.
10. *Куликов Н.К., Багаутдинов Г.Н.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. Решение дифференциальных уравнений на основе функций с гибкой структурой. Алма-Ата, 1973.
11. *Уилкинсон Дж., Райнш К.* Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976.

Поступила в редакцию
04.04.2003