В.А. Крисилов, С.М. Побережник

АППРОКСИМАЦИЯ СЛОЖНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ СТРУКТУРНО-ГИБКИМИ ПОЛИНОМИАЛЬНЫМИ И ГАРМОНИЧЕСКИМИ РЯДАМИ

В статье рассматриваются вопросы аппроксимации сложных зависимостей линейными по параметрам функциями. Предложена модель, позволяющая сочетать степенной и гармонический ряды в единой зависимости, а также целенаправленно синтезировать их структуру. В рамках предложенной модели указан способ смещения структурных параметров ряда, что дает возможность существенно повысить функциональную гибкость рядов и расширить границы класса восстанавливаемых зависимостей.

Подходы к повышению функциональной гибкости линейных по параметрам зависимостей

В современных задачах моделирования, таких, как аппроксимация и интерполяция, а также, в первую очередь, в задачах экстраполяции или прогнозирования, когда на базе имеющихся выборочных данных необходимо выявить зависимость часто весьма сложного характера, широко применяются методы, использующие линейные по параметрам функции [1]. Гибкость линейно-регрессионных моделей, при этом, повышают за счет подстановки в качестве регрессоров некоторых нелинейных сверток исходного пространства признаков и, в частности, за счет использования аддитивных функциональных рядов, степенных или тригонометрических.

Современные методы структурного синтеза линейных зависимостей, такие, как метод группового учета аргументов (МГУА) [2] или метод структурной минимизации риска [3], способны отобрать из множества одночленов ряда некоторое подмножество регрессоров, наилучшее по используемому критерию достоверности зависимости, оцениваемому на базе дополнительной выборки или по методу скользящего контроля [3]. Очевидно, что результат аппроксимации будет существенно зависеть от состава исходного множества одночленов, от потенциальной гибкости используемого функционального базиса.

Известны подходы, в которых для расширения класса восстанавливаемых зависимостей предлагается сочетать разнородные (степенные и тригонометрические) одночлены в единой зависимости, а также использовать дробные и отрицательные показатели степени первичных факторов в полиномиальных одночленах [4, 5]. Использование подобных возможностей совместно с алгоритмами МГУА требует формализации синтеза состава членов аддитивного ряда и единообразного подхода к генерации структуры как степенного, так и тригонометрического ряда.

При разработке алгоритмов синтеза состава членов многомерного ряда, необходимо также учитывать проблему размерности ряда, заключающуюся в том, что с увеличением мерности пространства независимых факторов количество одночленов полного многомерного ряда возрастает по показательной зависимости. При этом с одной стороны, пропорционально квадрату числа членов ряда возрастает объем вычислений, связанных с оценкой коэффициентов регрессии [6]. С другой же стороны, с ростом числа регрессоров повышаются и требования к объему выборки исходных данных [3].

Очевидным путем преодоления этих проблем является снижение размерности задачи за счет исключения отдельных членов ряда из рассмотрения. Однако при этом необходимо сохранить аппроксимирующую способность функционального ряда, а также предусмотреть возможность управления общей структурой ряда для учета наиболее значимых факторов и построения в итоге наиболее компактной зависимости.

Комплексная модель представления структуры многомерного аддитивного ряда

Рассмотрим направления возможной унификации в способах задания структуры степенных и гармонических рядов.

Каждый из членов многомерного степенного ряда представляет собой произведение исходных факторов, возводимых в некоторые степени с целым неотрицательным показателем:

$$f_k(X_1,\ldots,X_m) = X_1^{r_{k1}} \cdot X_2^{r_{k2}} \cdot \ldots \cdot X_m^{r_{km}}$$

Причем, состав показателей степени ($r_{k1},\ldots,r_{km}$) независимых факторов ($X_1,\ldots,X_m$) фактически определяет вид рассматриваемого члена f_k. Ситуация, когда некоторый независимый фактор X_j не представлен в члене f_k соответствует тому, что показатель его степени обратился в ноль: $r_{kj} = 0$. Структура степенного ряда (состав и вид членов), таким образом, полностью задается набором векторов с элементами - показателями степени независимых факторов. Количество таких векторов соответствует числу членов ряда.

Рассмотрим теперь многомерный гармонический ряд:

$$F(X_1,\ldots,X_m) = \sum_{k=1}^{l}\left(a_k \cdot U_k(X_1,\ldots,X_m) + b_k \cdot V_k(X_1,\ldots,X_m)\right),$$

где $U_k(X_1,\ldots,X_m) = \sin(\sum_{j=1}^{m}\omega_j \cdot r_{kj} \cdot X_j)$ и $V_k(X_1,\ldots,X_m) = \cos(\sum_{j=1}^{m}\omega_j \cdot r_{kj} \cdot X_j)$ -

соответственно синусная и косинусная части k–й гармоники,

ω_j - базовая частота по независимому фактору X_j,

r_{kj} – частотный коэффициент фактора X_j в k–й гармонике.

Как видим, синусная и косинусная части одной гармоники идентичны по составу независимых факторов и частотных коэффициентов. Состав последних и определяет окончательный вид гармоники в целом, поскольку базовые частоты независимых факторов неизменны для всех членов ряда Фурье. Следовательно, структура гармонического ряда, перечень параметров, от которых зависит вид и состав гармоник при варьировании сложности ряда, как и в степенных зависимостях, задается набором сочетаний некоторых коэффициентов, в данном случае – частотных.

Таким образом, несмотря на различия в функциональной природе, структура как степенного, так и гармонического ряда может быть задана с помощью следующей матрицы структурных коэффициентов:

$$R = \begin{array}{|c|c|c|c|} \multicolumn{1}{c}{X_1} & \multicolumn{1}{c}{X_2} & \multicolumn{1}{c}{\dots} & \multicolumn{1}{c}{X_m} \\ \hline r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1m} \\ \hline r_{21} & r_{22} & \dots & r_{2m} \\ \hline \dots & \dots & \dots & \dots \\ \hline r_{l1} & r_{l2} & \dots & r_{lm} \\ \hline \end{array}$$

Структурный коэффициент r_{kj} будем называть *кратностью* фактора X_j в k–м члене ряда. Суммарную же кратность первичных факторов в рамках некоторого члена ряда будем называть кратностью данного члена (вторичного фактора):

$$s_k = \sum_{j=1}^{m} r_{kj} \qquad \text{– кратность } k\text{–го члена ряда, } \forall k=1..l.$$

Избирательное включение независимых факторов в структуру ряда

При формировании состава членов ряда необходимо иметь в виду, что способность к аппроксимации произвольных данных в теории функциональных рядов доказана для степенного и гармонического рядов без пропуска членов. Иными словами, итоговая функция обладает аппроксимирующей способностью функционального ряда лишь в том случае, если в ходе наращивания сложности, последовательно реализуются все сочетания независимых факторов со всеми возможными на данном уровне сложности ряда, значениями кратностей (структурных коэффициентов). Так, например, при наращивании сложности одномерного полинома член X^3 включают после X^2. Иначе существует риск того, что полученная функция не сможет аппроксимировать имеющиеся данные, либо будет более громоздкой, что сделает ее поведение за пределами обучающих наборов менее предсказуемым. В многомерной ситуации, когда число независимых факторов возрастает, по показательной зависимости растет и число их возможных комбинаций (потенциальных членов ряда). Но и в этом случае в ряд не желательно включать одночлен, содержащий X^3, если в структуре ряда нет ни одного одночлена, включающего X^2.

Сформулируем эти соображения в виде *принципа структурной непрерывности функционального ряда*, выполнение которого позволит сохранить аппроксимирующую способность ряда при наименьшей сложности:

Член ряда, в котором фактор X_j обладает некоторой кратностью r, может быть включен в структуру ряда только в том случае, если в составе ряда уже имеется член, в котором данный фактор представлен с кратностью r-1.

Данный принцип применим и к степенному, и к гармоническому ряду. В многомерном случае для автоматизированного формирования структуры ряда принято применять алгоритм образования членов ряда, предусматривающий полный перебор всех сочетаний независимых факторов на каждом из уровней кратности формируемых членов ряда. Это означает что, например, при генерации состава членов многомерного полинома, каждый из независимых факторов достигает максимальной степени, соответствующей степени полинома. Реализация подобного алгоритма в общем случае, когда имеется m независимых факторов и задана максимальная кратность ряда k, приведет к образованию набора членов ряда, количество которых l, определяется из соотношения

$$l_m^k = 1 + \sum_{r=1}^{k} \sum_{i=1}^{m} i^{r-1}$$

и оценивается сверху величиной m^k.

Подход к решению проблемы размерности дает потенциальная избыточность стандартного алгоритма полного перебора, которая состоит в том, что все независимые факторы достигают одинаковой максимальной кратности l.

С одной стороны, принцип непрерывности формирования структуры ряда вовсе не ставит такого условия. С другой стороны, далеко не для всех независимых факторов необходимым является достижение пикового уровня кратности. Для большинства из них, часто известен потенциальный характер функциональной взаимосвязи с зависимым фактором, и максимально необходимый уровень кратности обычно лежит в области 1-2. Вместе с тем, имеется некоторое число первичных факторов, для которых характер зависимости действительно заранее неизвестен либо потенциально весьма сложен, и в структуре ряда по данным факторам необходимо наличие членов с высокими значениями кратностей.

На базе принципа непрерывности может быть предложен экономичный алгоритм генерации структуры ряда, который позволяет избирательно достигать различного максимального уровня кратности по каждому из первичных факторов. Параметром алгоритма является вектор $(u_1, u_2, \dots, u_m)$ *уровней вхождения факторов* в структуру ряда, ограничивающих максимальную кратность в структуре ряда по каждому из первичных факторов. Предлагаемый алгоритм формирует матрицу структурных коэффициентов R, для которой:

$$u_j = \max_{k=1}^{l}\left(r_{kj}\right), \forall j=1,m.$$

Предлагаемый алгоритм реализует процесс порождения новых членов из членов уже присутствующих в структуре ряда, повышением на единицу кратности одного из первичных факторов (рис. 1).

В ходе этого процесса легко реализуется отслеживание максимального уровня кратности для каждого из независимых факторов.

Пусть на основе некоторого существующего члена k, заданного вектором кратностей $(r_{k1},r_{k2},\dots,r_{km})$, производится попытка порождения нового члена путем инкремента кратности некоторого фактора X_j. При этом, сформированный член включается в структуру ряда, если выполняется условие:

$$r_{kj} + 1 \le u_j.$$

Если же условие не выполняется, отказываемся от создания и включения данного члена.

Очевидно, однако, что подобная процедура порождения членов ряда будет приводить к их дублированию, поскольку один и тот же член ряда может быть порожден различными путями. На рис. 1 такие дублирующиеся вторичные факторы связаны пунктирными линиями.

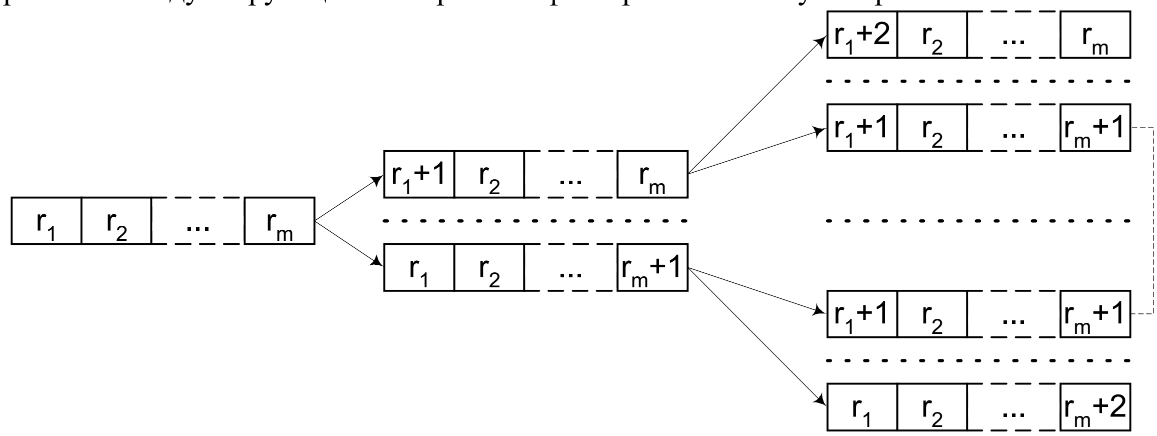

Рис. 1. Порождение членов ряда наращиванием кратностей факторов

Наиболее простым способом борьбы с дублированием является контроль и сравнение новообразованного члена с каждым из уже включенных членов того же уровня кратности. Этот способ является и наиболее трудоемким. Предлагается использовать иной способ - исключение дублирующихся вариантов специальным порядком генерации новых членов. Это означает, что для порождающих членов текущего уровня инкрементируется кратность не по каждому из первичных факторов, а только для некоторого их подмножества. Состав подмножества инкрементируемых факторов зависит от номера текущей ветви процесса порождения факторов. Для первых ветвей это подмножество шире, для последующих - оно сужается.

Учет смещения структурных параметров функционального ряда

Как было сказано выше, не сегодняшний день известны подходы, расширяющие класс зависимостей за счет использования дробных и отрицательных показателей степени независимых факторов в одночленах степенного ряда. Покажем, как данный прием может быть реализован в рамках предлагаемой модели представления структуры ряда. Для этого, помимо матрицы структурных коэффициентов, введем еще несколько параметров, дополнительно характеризующих структуру ряда:

1) $R^0=(r^0{}_1,r^0{}_2,\dots,r^0{}_m)$ – вектор начальных кратностей для независимых факторов $X_1,X_2,\dots,X_m$ в структуре ряда;
2) $DR=(dr_1,dr_2,\dots,dr_m)$ – вектор шагов приращения кратности независимых факторов $X_1,X_2,\dots,X_m$ в структуре ряда;

В общем случае, элементами обоих векторов являются любые вещественные числа. На базе этих параметров и матрицы структурных коэффициентов R, вычисление результирующей кратности фактора X_j для некоторого k - члена ряда может быть выполнено следующим образом:

$$r^*_{kj} = r^0{}_j + r_{kj} \cdot dr_j, \qquad \forall j=1\dots m,\ k=1\dots l$$

При этом, элементами матрицы структурных коэффициентов R по-прежнему являются целые неотрицательные числа, а предложенный экономичный алгоритм автоматического формирования этой матрицы сохраняет свою актуальность.

В качестве примера использования этой новой возможности приведем фрагмент одномерного степенного ряда с начальной кратностью независимого фактора, равной –0.5 и шагом приращения 0.5:

$$F(X) = a_1 \cdot \frac{1}{\sqrt{X}} + a_2 + a_3 \cdot \sqrt{X} + a_4 \cdot X + a_5 \cdot X\sqrt{X} + a_6 \cdot X^2 + \quad \dots$$

Смещение начальной кратности и шага приращения ряда, как видно из этого примера, дает возможность использования дробных и отрицательных структурных коэффициентов в одночленах ряда, что повышает уровень функциональной гибкости восстанавливаемых зависимостей и дает в руки эксперту мощный инструмент управления характером выявляемых закономерностей.

Анализ функциональной гибкости аддитивных рядов со смещенными структурными коэффициентами

В практике моделирования часто оказываются необходимы средства описания различных стабилизирующихся зависимостей, огибающих разнообразных переходных процессов, которыми изобилуют многие области от электротехники до макроэкономики. Обычные полиномиальные функции не могут описать монотонно возрастающую зависимость с постепенным замедлением темпов ее роста без того, чтобы рано или поздно производная не поменяла бы своего знака и зависимость не перешла бы от подъема к спаду. Иными словами, участок параболы, непосредственно примыкающий к точке экстремума, вполне подошел бы для описания области стабилизации некоторого процесса, но за экстремумом неминуемо последует перегиб функции, который в данном случае не отражает объективной природы восстанавливаемой зависимости.

Имеется потребность также в выявлении периодических функций по выборкам, в которых представлен ограниченный фрагмент полного периода зависимости. Стандартный ряд Фурье не дает такой возможности, поскольку опирается на то, что весь период первой, наиболее низкочастотной гармоники полагается равным ширине изменения независимого фактора в пределах обучающей выборки. Между тем, бывает необходимо восстановить колебательную функцию по наблюдаемой половине, или даже четверти периода.

Эти возможности легко реализуются в предлагаемой модели при помощи механизма управления структурными параметрами ряда (см. рис. 2). Так, например, использование дробных степеней независимых параметров позволяет восстанавливать монотонные зависимости с замедлением темпов роста или убывания, моделируя тем самым стабилизирующиеся процессы. Для гармонических рядов использование коэффициентов умножения базовой частоты, меньших 1, позволяет выявлять колебательный характер зависимости лишь по наблюдаемому ограниченному фрагменту гармоники.

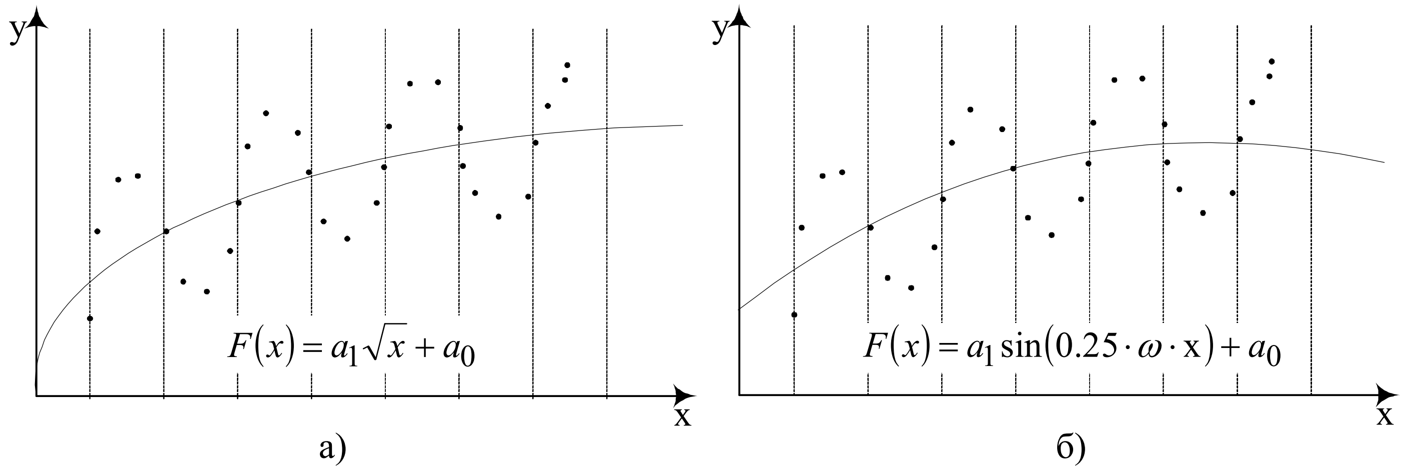

Рис. 2. Смещение начальной кратности: а) в степенном ряде (степень первого одночлена 0,5); б) в гармоническом ряде (частотный коэффициент первой гармоники 0,25)

Функциональная гибкость, достигаемая смещением начальной кратности и шага приращения ряда, позволяет, кроме того, аппроксимировать и гиперболические зависимости при использовании отрицательных начальных кратностей.

Рис. 3 иллюстрирует возможности модифицированных рядов по аппроксимации сложной зависимости, характерной для ряда практических приложений. В данном примере был использован смещенный степенной ряд (корневая зависимость) для аппроксимации общей тенденции стабилизирующегося подъема. Периодичный функциональный остаток затем был объяснен с использованием одной из смещенных гармоник ряда Фурье.

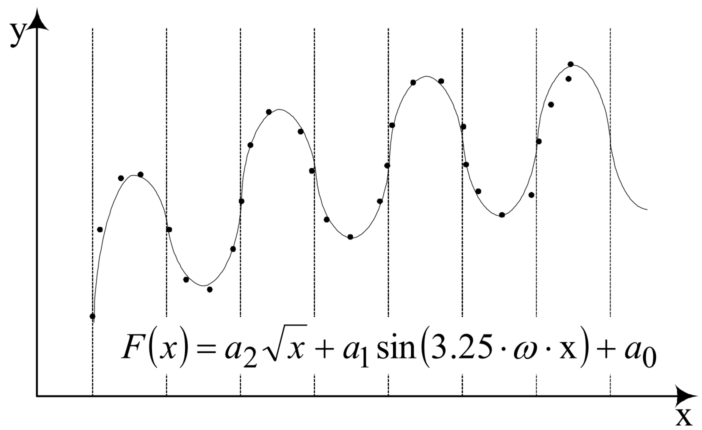

Рис. 3. Аппроксимация смещенным степенным и гармоническим рядом и их сочетание в рамках единой зависимости

Достоинством предлагаемой модели является не принципиальная возможность аппроксимации подобных видов зависимостей, а то, что данный результат может быть получен автоматически, без необходимости задания вручную конкретного вида слагаемых. При этом, алгоритм синтеза структуры смещенного степенного и гармонического ряда автоматически формирует исходное множество одночленов – кандидатов на включение в структуру зависимости по заданным структурным параметрам степенного и тригонометрического рядов, а внешний метод отбора регрессоров, например МГУА, определяет окончательный вид структуры восстановленной зависимости.

В качестве практических рекомендаций по выбору максимального уровня кратности первичных факторов для автоматического формирования структуры ряда можно привести следующие соображения:

1. Для степенного ряда в реальных задачах моделирования, как правило, нет необходимости в установке уровня кратности (максимальной степени факторов) выше третьей. Более высокие значения степени исходного полинома на результате аппроксимации, вероятнее всего, не скажутся, поскольку МГУА отсекает лишние регрессоры, однако приведут к увеличению времени моделирования.

2. Высокие значения коэффициента парной корреляции (порядка 0,65–0,9) некоторого фактора с зависимым параметром свидетельствует о том, что данный фактор, по всей видимости, связан с зависимым параметром линейно. Для таких факторов целесообразно ограничиться единичным уровнем максимальной кратности в структуре степенного ряда.

3. Слабовыраженная линейная взаимосвязь фактора с зависимым параметром (коэффициент парной корреляции менее 0,4) может свидетельствовать о более сложных видах функциональной взаимосвязи. Для таких факторов целесообразно установить максимальную кратность на уровне 2-3.

4. При выборе максимальной кратности факторов в тригонометрических рядах, целесообразным представляется ограничить максимальное значение частотного коэффициента гармоник уровнем, при котором, период наиболее высокочастотной гармоники будет в 2-3 превышать минимальное расстояние между соседними измерениями в обучающей выборке по данному фактору.

ВЫВОДЫ

Предложенная модель на базе матрицы структурных коэффициентов ряда позволила единообразно и формализовано описывать структуру аддитивного функционального ряда и целенаправленно формировать состав его членов, вне зависимости от конкретной функциональной природы ряда. Это дало возможность в рамках модели разработать единый алгоритм наращивания сложности многомерного аддитивного ряда, применимый, в частности, как для степенных, так и для гармонических рядов. Разработанный алгоритм в случае многомерного ряда позволяет дифференцированно задавать уровень вхождения для каждого из исходных независимых факторов, что дает возможность генерации компактного ряда с обеспечением необходимого уровня сложности функциональной взаимосвязи для отдельных параметров.

Кроме того, предложенная модель обладает средствами, позволяющими расширить функциональный класс зависимостей за счет использования произвольного (в том числе дробного и отрицательного) шага приращения и начального уровня кратности членов – степени полиномиального члена или частотного коэффициента гармоник. Это, в частности, дает возможность формально оперируя степенным рядом, восстанавливать корневые зависимости, либо в случае гармонического ряда иметь возможность автоматического синтеза структуры ряда, когда восстановление ведется только по фрагменту низкочастотной гармоники.

Таким образом предложенная модель позволяет стандартизовать и автоматизировать процесс формирования структуры аддитивных функциональных рядов, гибко настраивая при этом необходимый уровень сложности ряда по отдельным параметрам, а также при необходимости выходить за пределы базиса классических типов степенного и гармонического ряда, повышая их гибкость введением членов с дробной кратностью. Данный комплекс наработок позволит, на наш взгляд, дать в руки эксперту мощный и гибкий инструмент манипулирования функциональной природой аппроксимирующей функции в задачах автоматизированного восстановления зависимостей по выборочным данным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Себер. Линейный регрессионный анализ. – М.: изд-во "Мир". 1980. 456с.
2. А.Г. Ивахненко, В.С. Степашко. Помехоустойчивость моделирования. – К.: Наукова думка, 1985. 216 с.
3. Алгоритмы и программы восстановления зависимостей под редакцией В.Н. Вапника. – М.: Наука, 1984. 816 с.
4. Висоцький В.М., Івахненко О.Г., Чеберкус В.І. Довгострокове прогнозування коливальних процесів за допомогою виділення гармонічного тренда оптимальної складності. – К.: Автоматика, 1979. с. 31-35.
5. Ивахненко А.Г., Кротов Г.И. Мультипликативно-аддитивный нелинейный алгоритм МГУА с оптимизацией степени факторов. – К.: Автоматика, 1984. №3, с. 13-18.
6. Крисилов В.А., Побережник С.М. Ускорение параметрического синтеза линейной регрессии на основе редукционного оценивания коэффициентов // Ре-єстрація, зберігання і оброб. даних. – 2002. – Т. 4. – №3. – с. 62-68.