Переопределенные системы. МНК (метод наименьших квадратов)

В приложениях часто встречаются переопределенные системы, в которых число уравнений больше числа неизвестных:

$$\sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k = f_i\,,\ i = \overline{1,\ m}\,,\ m > n\,, \qquad (1)$$

или в матричном виде:

$$A\vec{x} = \vec{f}\,,\ A = A_{m\times n}\,,\ \vec{x} \in R^n\,,\ \vec{f} \in R^m\,,\ m > n\,. \qquad (2)$$

Вводится следующее *существенное предположение*: ранг системы (2) (т.е. число линейно независимых уравнений) равен числу неизвестных n.

Как правило, система (2) в обычном смысле не имеет решений (теорема Кронекера-Капелли).

Определение.Согласно методу наименьших квадратов под ***обобщенным*** решением системы (2) понимается набор чисел $x_1,\ x_2,\ \dots\ ,\ x_n$, для которого минимальна сумма квадратов ***невязок***:

$$F(x_1,\ x_2,\ \dots\ ,\ x_n) \equiv \sum_{k=1}^{n} (a_{ik} x_k - f_i)^2\,,\ F = \min\,. \qquad (3)$$

Решение задачи (3) находится следующим образом. Записываются необходимые условия минимума, известные из математического анализа:

$$0 = \frac{1}{2}\frac{\partial F}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k - f_i\right) a_{ij}\,,\ j = \overline{1, n}\,.$$

Меняя порядок суммирования по i и по k

$$\sum_{k=1}^{n}\left(x_k \sum_{i=1}^{n} a_{ik} a_{ij} - \sum_{i=1}^{n} a_{ik} f_i\right) = 0$$

и обозначая

$$b_{jk} = \sum_{i=1}^{n} a_{ik} a_{ij}\,,\ g_k = \sum_{i=1}^{n} a_{ik} f_i\,, \qquad (4)$$

получаем для определения $x_1,\ x_2,\ \dots\ ,\ x_n$ систему уже из n уравнений:

$$\sum_{k=1}^{n} b_{jk} x_k = f_j\,,\ j = \overline{1, n}\,, \qquad (5)$$

или в матричном виде:

$$B\vec{x} = \vec{g}\,,\ B = B_{n\times n}\ \vec{x} \in R^n\,,\ \vec{g} \in R^n\,, \qquad (6)$$

причем согласно (4)

$$B = A^T A\,,\ \vec{g} = A^T \vec{f}\,. \qquad (7)$$

Систему (5) в матричном виде, учитывая (6) и (7):

$$A^T A\vec{x} = A^T \vec{f}\,, \qquad (8)$$

принято называть ***нормальным уравнением***.

Можно доказать (см. Рябенький. Введение в вычислительную математику), что система (8) всегда имеет и притом единственное решение, а ее матрица является положительно определенной.

Пример 1. Найти решение $\begin{cases} x+2y &= 8.5 \\ 2x+y &= 6.7 \\ x+3y &= 11.1 \end{cases}$.

① Эта система не имеет решения в обычном смысле.
Для получения ее <u>нормального псевдорешения</u> (***обобщенного решения***), т.е. решения в смысле МНК, составляем новую систему по типу ***нормального уравнения*** (8) при $n=2$, $m=3$:

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix},\ A^T=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix},\ \vec{f}=\begin{pmatrix} 8.5 \\ 6.7 \\ 11.1 \end{pmatrix}$$

$$B=A^TA=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 6 & 7 \\ 7 & 14 \end{pmatrix},\ \vec{g}=A^T\vec{f}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 8.5 \\ 6.7 \\ 11.1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 33 \\ 57 \end{pmatrix}.$$

Система $A^TA\vec{x}=A^T\vec{f}$: $\begin{cases} 6x+7y &= 33 \\ 7x+14y &= 57 \end{cases}$ - «эквивалентна» системе $A\vec{x}=\vec{f}$.

$$\left(\begin{array}{cc|c} 6 & 7 & 33 \\ 7 & 14 & 57 \end{array}\right) \xrightarrow{(2)-2(1)} \left(\begin{array}{cc|c} 6 & 7 & 33 \\ -5 & 0 & -9 \end{array}\right) \xrightarrow[(1)]{-\frac{1}{5}(2)} \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1.8 \\ 6 & 7 & 33 \end{array}\right) \xrightarrow{(2)-6(1)} \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1.8 \\ 0 & 7 & 22.2 \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow{\frac{1}{7}(2)} \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1.8 \\ 0 & 1 & 3.171 \end{array}\right).$$

Ответ: $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1.8 \\ 3.171 \end{pmatrix}$. ❶

Замечание. Если второе уравнение исходной системы умножить, например, на 100, т.е решать систему $\begin{cases} x+2y &= 8.5 \\ 200x+100y &= 670 \\ x+3y &= 11.1 \end{cases}$ эквивалентную исходной в классическом смысле, то получим нормальное уравнение $\begin{cases} 40002x+20005y &= 134019.6 \\ 20005x+10013y &= 67050.3 \end{cases}$, решая которое находим решение $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1.756 \\ 3.188 \end{pmatrix}$ близкое к полученному выше, но все же отличное от него.