

Глава 3

Метод наименьших квадратов

Для современного физика вполне естественно, что физическая реальность воспринимается и интерпретируется на математическом языке. С одной стороны, измерения различных физических величин, проводимые в экспериментах, по сути своей числа. С другой стороны, физические величины входят в уравнения, выражающие фундаментальные физические законы.

Математической моделью, или просто *моделью*, как раз и называется набор математических утверждений, описывающих конкретный эксперимент или явление. Слово модель используется, чтобы подчеркнуть эквивалентность математических абстракций и материального физического мира, при рассмотрении через призму физических теорий.

Чаще всего модель используют двумя способами. Во-первых, можно поставить *прямую задачу* — предсказать значение измеряемых физических величин до (или вместо) проведения эксперимента, зафиксировав параметры модели. Например, зная длину подвеса математического маятника L и ускорение свободного падения g , можно предсказать период малых колебаний маятника T .

Во-вторых, можно поставить *обратную задачу*, которая состоит в том, что проведя измерения некоторых физических величин, нужно оценить какими должны были бы быть параметры модели. Например, можно попытаться оценить ускорение свободного падения g , измерив периоды малых колебаний математических маятников T_i с разной длиной подвеса L_i . Если бы мы научились использовать маятник как прибор для точного измерения ускорения свободного падения, то можно было бы сформулировать более сложный, но и более реалистичный пример обратной задачи: измерив ускорение свободного падения в нескольких точках на поверхности Земли g_{ij} нужно восстановить объёмное распределение плотности вещества под поверхностью $\rho(\mathbf{x})$. В таком случае области с более низкой или более высокой плотностью указывали бы нам на места возможного расположения

полезных ископаемых. В рамках данного курса мы сталкиваемся преимущественно с обратными задачами.

В физике модель можно построить двумя основными способами. Во-первых, применив фундаментальные физические законы к конкретным условиям, например решив те или иные системы уравнений с нужными начальными или граничными условиями. В этом случае параметрами модели являются конкретные физические величины, непосредственно не измеряемые в рамках эксперимента, но определяемые в результате решения обратной задачи. Значения этих физических величин имеют самостоятельную ценность (очевидно, что масса шарика или сопротивление резистора являются присущими им характеристиками и не могут произвольно изменяться между экспериментами) и могут быть затем использованы в других моделях как известные параметры. Кроме того, фундаментальные физические законы допускают экстраполяцию предсказаний модели в разумных пределах. Это означает, что определив параметры модели при одних условиях проведения эксперимента, мы можем предсказывать интересующие нас значения в рамках применимости модели, которые могут быть шире рамок проведённого эксперимента. При сильном рассогласовании измерений и предсказаний модели фундаментальные физические законы как правило не подвергаются сомнению¹, однако конкретная модель может быть подвергнута ревизии на предмет неучтённых ранее эффектов. Так, например, может оказаться, что колебания температуры в помещении лаборатории, которые изначально считались пренебрежимо малыми, существенным образом сказываются на результате измерений, и температурные зависимости должны быть включены в модель, а термометр должен быть включён в экспериментальную установку.

Во-вторых, модель можно построить эмпирическим способом, т.е. исходя из данных измерений, имеющихся в наличии. Такой способ часто используется для так называемых калибровок, когда точное применение законов физики упирается либо в сложность их применения, либо в недостаток данных. Например, у нас есть термопарный датчик температуры: мы измеряем напряжение на его контактах, которое, как мы знаем, зависит от температуры. Мы теоретически могли бы построить полную модель датчика и установить связь между температурой и напряжением, но для этого нам потребовался бы слишком детальный анализ и знание всех дефектов изготовления конкретного датчика, которые пришлось бы исследовать отдельно. Гораздо проще окунуть конкретный датчик в емкости с веществами при заданной температуре и исследовать его отклик. Такими веществами могут быть кипящий жидкий азот, ледяная вода, и т.п. Построив несколько точек на графике, мы бы заметили, что зависимость практически линейная, и можно определить коэффициенты пересчёта из единиц измерения напряжения в единицы измерения температуры.

Или, например, нас интересует измерение положений спектральных ли-

¹Кроме небольшого числа известных случаев пост-фактум описанных в литературе по философии и методологии науки.

ний некоторого вещества с помощью спектрографа. В спектрографе, однако, мы получаем цифровое изображение спектра, где пиксели пронумерованы дискретными числами, а вовсе не физической длиной волны. Вооружившись законами оптики и сопротивления материалов, мы могли бы тщательно измерить все расстояния внутри нашего прибора, положение самого детектора изображений, всех оптических элементов, и т.п. Вероятно, потребуется учесть, как эти расстояния будут меняться в зависимости от температуры в лаборатории. Но в конечном счёте, выполнив сложные расчёты, мы теоретически нашли бы закон, который бы каждому номеру пикселя сопоставлял длину волны. На практике, обычно применяются методы калибровки: получим спектр известного вещества, посмотрим на какие пиксели придутся линии с известными длинами волн, и получим соотношение, которое бы для каждого номера пикселя предсказывало длину волны в физических единицах.

Полученные нами параметры эмпирической модели не будут иметь самостоятельного физического смысла, и пригодятся нам только для предсказаний конкретной модели, причём в условиях не выходящих за рамки, при которых проводилась калибровка. В таком случае говорят, что модель способна на интерполяцию. В отличие от первого случая, требуется убедиться, что предложенная эмпирическая модель, которая фактически выбирается произвольно, хорошо описывает данные. Обычно используются те или иные критерии проверки статистических гипотез или метрики качества предсказания модели. Кроме того, не всегда понятно, как подобрать модель, которая хорошо описывает данные, в случаях, когда зависимость не очевидна на глаз, однако методы машинного обучения могут быть существенным подспорьем в таких ситуациях.

3.1 Линейные модели

Вообразим, что некоторый физический процесс или эксперимент можно описать простой многомерной линейной моделью следующего вида

$$A\theta = \mathbf{b} \quad (3.1)$$

где $\theta \in \mathbf{R}^m$, $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^n$, обычно оказывается, что $n > m$. Здесь вектор θ — некоторые параметры модели, матрица A — известные обстоятельства эксперимента, вектор \mathbf{b} — измеряемые (наблюдаемые) физические величины. Матрица A считается известной, а если задать вектор θ , то можно рассчитать вектор \mathbf{b} , т.е. решить прямую задачу или, как иногда говорят, построить модельное предсказание. Заметим, что указанная линейная модель могла бы получиться из обоих источников, упомянутых выше.

Например, принимаемый некоторым устройством на каком-то телескопе поток фотонов от некоторой звезды F_i может быть выражен следующим уравнением:

$$\ln F_i = -kM_i + C, \quad 1 \leq i \leq n, \quad (3.2)$$

где k — способность атмосферы ослаблять свет, M_i — *воздушная масса* (длина отрезка на луче зрения от наблюдателя до верхней границы атмосферы), C — некоторая инструментальная константа, общая для всех измерений выполненных на этом приборе и включающая в себя его геометрию, и эффективность способности регистрировать свет. В этом случае вектор параметров:

$$\theta \equiv \begin{bmatrix} -k \\ C \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Матрица A принимает следующий вид:

$$A \equiv \begin{bmatrix} M_1 & 1 \\ M_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ M_n & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.4)$$

\mathbf{A} вектор предсказания модели:

$$\mathbf{b} \equiv \begin{bmatrix} \ln F_1 \\ \ln F_2 \\ \vdots \\ \ln F_n \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Обратим внимание, что вектор параметров θ может быть функцией от физических величин, так, например, в нашем случае первый компонент взят со знаком минус. Понятно, что если при решении обратной задачи нам удастся отыскать вектор θ , то и физические величины можно будет вычислить. Пусть, например, мы хотим изучить внутренние характеристики приёмника изображений на базе прибора с зарядовой связью (ПЗС), тогда нам пришлось бы анализировать статистические характеристики сигнала в отдельном пикселе (дисперсию $\sigma_{\Delta F_i}^2$) при разных интенсивностях засветки F_i . Если излучение подчиняется пуассоновскому закону, тогда можно получить следующую линейную модель:

$$\sigma_{\Delta F_i}^2 = 2 \frac{\sigma_r^2}{g^2} + \frac{2}{g} F_i, \quad 1 \leq i \leq n, \quad (3.6)$$

где g — *коэффициент усиления*, σ_r^2 — *шум считывания*, две интересующие нас характеристики прибора, которые имеют для нас самостоятельную ценность, так как мы намерены использовать их впоследствии для априорной оценки точности получаемых измерений. Видно, что в этом случае вектор параметров:

$$\theta \equiv \begin{bmatrix} 2\sigma_r^2 g^{-2} \\ 2g^{-1} \end{bmatrix}. \quad (3.7)$$

3.2 Метод наименьших квадратов

Понятно, что необходимо как-то уметь решать обратную задачу для линейных моделей. Одна из проблем при решении обратных задач заключается в

том, что любые измерения даны нам с некоторой погрешностью, величина которой остаётся для нас неизвестной. Таким образом вместо вектора \mathbf{b} мы измеряем некоторый вектор $\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{b} + \epsilon$, где вектор ϵ обозначает ту самую неизвестную погрешность. Одного этого достаточно, чтобы исходная система линейных уравнений оказалась неразрешимой, ведь в правую часть мы теперь подставляем реализацию некоторой случайной величины.

Метод (принцип) наименьших квадратов заключается в том, что исходная обратная задача заменяется на следующую задачу:

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \|A\theta - \hat{\mathbf{b}}\|^2, \quad (3.8)$$

в такой формулировке мы можем вместо \mathbf{b} использовать наши измерения с погрешностью $\mathbf{b} + \epsilon$. Такой способ был независимо предложен как минимум двумя знаменитыми математиками XIX века: Лежандром и Гауссом (см. Stigler 1981).

В самом общем случае метод наименьших квадратов следует из здравого смысла и представлений о том, как устроены измерения. В частных случаях, метод наименьших квадратов может быть выведен из других принципов, например принципа максимального правдоподобия, о чём пойдёт речь в разделе 6.

Так или иначе, сейчас замена исходной задачи на задачу наименьших квадратов производится волонтаристическим образом. Конечно, при таком положении дел сразу же возникает вопрос как оценка $\hat{\theta}$ соотносится с истинными параметрами модели? В некоторых частных случаях, введя дополнительные предположения о характере ошибки измерений, удаётся продемонстрировать ряд свойств оценки параметров, получаемой методом наименьших квадратов, таким образом оправдав применение метода. Рассмотрим их по порядку.

Для начала найдём решение задачи линейных наименьших квадратов в виде формулы.

$$\begin{aligned} \|A\theta - \hat{\mathbf{b}}\|^2 &= (A\theta - \hat{\mathbf{b}}, A\theta - \hat{\mathbf{b}}) = \\ &= (A\theta, A\theta) - 2(A\theta, \hat{\mathbf{b}}) + (\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{b}}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

вычисляя градиент выражения по θ и приравнивая его к нулю (можно доказать, что если $\det A^T A \neq 0$, то функция, которую мы минимизируем выпуклая, а значит обладает единственным минимумом), получаем следующие уравнения

$$A^T A \hat{\theta} = A^T \hat{\mathbf{b}} \quad (3.10)$$

Эти уравнения называют *нормальными уравнениями*. В отличие от исходной линейной модели, матрица $A^T A$ квадратная. Вопрос равенства нулю определителя $\det A^T A$ будет рассмотрен в разделе 3.4, но если предположить, что он отличен от нуля, то можно записать выражения для оценки параметров модели

$$\hat{\theta} = (A^T A)^{-1} A^T \hat{\mathbf{b}} \quad (3.11)$$

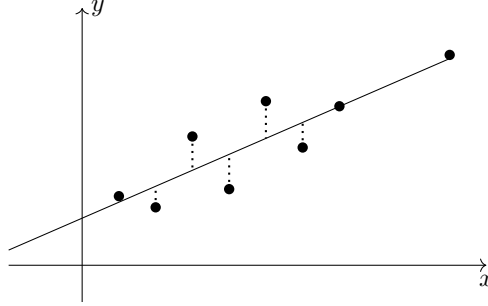


Рис. 3.1: Применение метода наименьших квадратов для определения параметров модели $\theta_1 x_i + \theta_2 = \hat{y}_i$. Точками показаны положения выборки (x_i, \hat{y}_i) ; сплошной линией показана модельная кривая $y = \hat{\theta}_1 x + \hat{\theta}_2$ на основе оценки параметров, полученной методом наименьших квадратов; пунктирные линии показывают минимизируемое расстояние между измерениями и предсказаниями модели.

Данное выражение² не единственный способ вычисления $\hat{\theta}$, и, в ряде случаев, не самый практичный, но он незаменим для теоретического анализа свойств решения задачи. На Рис. 3.1 графически показан пример применения метода наименьших квадратов для определения параметров линейной модели.

Итак, предположим, что ошибка ϵ в среднем равна нулю: $E[\epsilon] = 0$, тогда

$$\begin{aligned} E[\hat{\theta}] &= (A^T A)^{-1} A^T E[\hat{\mathbf{b}}] = \\ &= (A^T A)^{-1} A^T (\mathbf{b} + E[\epsilon]) = \\ &= (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b} = \\ &= (A^T A)^{-1} A^T A \theta = \theta. \end{aligned} \tag{3.12}$$

Откуда видно, что в предположении невырожденности матрицы $A^T A$ ($\det A^T A \neq 0$), оценка $\hat{\theta}$ является несмещённой. Иными словами, если эксперимент будет повторяться вновь и вновь, то среднее получаемых оценок будет стремиться к истинным значениям параметров.

Предположим далее, что ошибка измерений независима и обладает одинаковой дисперсией, т.е. $\text{cov } \epsilon = \sigma^2 I$, тогда

$$\hat{\theta} - E[\hat{\theta}] = (A^T A)^{-1} A^T \epsilon, \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned} \text{cov } \hat{\theta} &= (A^T A)^{-1} A^T \text{cov } \epsilon ((A^T A)^{-1} A^T)^T = \\ &= \sigma^2 (A^T A)^{-1} \end{aligned} \tag{3.14}$$

²Матрицу $(A^T A)^{-1} A^T$ иногда называют *псевдообратной матрицей* для матрицы A .

Мы нашли матрицу ковариации оценки параметров методом наименьших квадратов. Однако, тут есть две проблемы: во-первых дисперсия σ^2 обычно заранее не известна; во-вторых для интерпретации ошибки параметров в терминах доверительных интервалов нужно дополнительно потребовать, что ϵ распределен тем или иным образом (чаще всего предполагается нормальное распределение).

Попытаемся оценить дисперсию измерений σ^2 , для этого введём оценку ошибки измерений $\hat{\epsilon}$, которую часто называют невязкой:

$$\hat{\epsilon} = \hat{\mathbf{b}} - A\hat{\theta} = (I - A(A^T A)^{-1} A^T) \hat{\mathbf{b}}. \quad (3.15)$$

Среднее такого вектора равно нулю, а матрица ковариации в предположении $\text{cov } \epsilon = \sigma^2 I$:

$$\text{cov } \hat{\epsilon} = \sigma^2 (I - A(A^T A)^{-1} A^T). \quad (3.16)$$

Обратим внимание, на средний квадрат нормы невязки $\|\hat{\epsilon}\|^2$:

$$\mathbb{E} [\|\hat{\epsilon}\|^2] = \text{tr } \text{cov } \hat{\epsilon} = \sigma^2 \text{tr} (I - A(A^T A)^{-1} A^T) = \sigma^2 (n - m) \quad (3.17)$$

Откуда получается окончательная оценка матрицы ковариации оценки параметров методом наименьших квадратов:

$$\text{cov } \hat{\theta} = \hat{\sigma}^2 (A^T A)^{-1} = \frac{\|\hat{\epsilon}\|^2}{n - m} (A^T A)^{-1}, \quad (3.18)$$

где $n - m$ часто называют *числом степеней свободы*.

Если предположить, что вектор ϵ распределён в соответствии с многомерным нормальным распределением с нулевым средним и матрицей ковариации $\sigma^2 I$, тогда из свойств нормального распределения следует, что вектор $\hat{\theta}$ тоже распределён нормально, причём его среднее и дисперсию мы уже вычислили выше. Теперь мы не просто можем охарактеризовать дисперсию оценки интересующих нас параметров модели, но и легко вычислить вероятность, с которой доверительный интервал покрывает истинное значение параметра.

3.3 Метод взвешенных наименьших квадратов

На практике разные компоненты вектора \mathbf{b} могут иметь различную физическую размерность, а значит предположение о $\text{cov } \epsilon = \sigma^2 I$ заведомо не выполняется. В случае неодинаковых ошибок оказывается полезным следующее обобщение метода наименьших квадратов:

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \left(A\theta - \hat{\mathbf{b}}, W^{-1} (A\theta - \hat{\mathbf{b}}) \right), \quad (3.19)$$

где матрица $W = W^T$ называют *матрицей весов*. Фактически, мы заменили норму линейного пространства на некоторую другую. Интуитивно понятно, что если данные состоят из набора более точных измерений и менее точных

измерений, то параметры модели нужно подбирать так, чтобы предсказания точных измерений имели бы меньшую невязку, чем предсказания для менее точных.

Найдём значение матрицы весов W следующим образом: во-первых, новая оценка параметров $\hat{\theta}$ должна быть несмещённой, во-вторых, по возможности, иметь наименьшую дисперсию.

Для начала, по аналогии с предыдущими вычислениями мы можем установить, что

$$\hat{\theta} = (A^T W^{-1} A)^{-1} A^T W^{-1} \hat{\mathbf{b}}, \quad (3.20)$$

следовательно $E[\hat{\theta}] = \theta$, т.е. оценка по-прежнему не смещённая при любом выборе W .

Затем, аналогичным образом найдём матрицу ковариации оценки $\hat{\theta}$:

$$\text{cov } \hat{\theta} = ((A^T W^{-1} A)^{-1} A^T W^{-1}) (\text{cov } \epsilon) ((A^T W^{-1} A)^{-1} A^T W^{-1})^T, \quad (3.21)$$

если принять, что $W = \text{cov } \epsilon$, то выражение значительно упрощается:

$$\text{cov } \hat{\theta} = (A^T W^{-1} A)^{-1}. \quad (3.22)$$

Докажем от противного, что этот выбор гарантирует наименьшую ошибку оценки параметров. Предположим, что существует некоторая альтернативная линейная оценка параметров:

$$\hat{\theta}' = (A^T W^{-1} A)^{-1} A^T W^{-1} \hat{\mathbf{b}} + D \hat{\mathbf{b}}, \quad (3.23)$$

где D некоторая новая дополнительная матрица, из требования несмещённости оценки следует $DA = 0$. Тогда

$$\text{cov } \hat{\theta}' = (A^T W^{-1} A)^{-1} + D W D^T, \quad (3.24)$$

где второе слагаемое — положительно определённая матрица, т.е. для любого $D \neq 0$ дополнительная добавка к ошибке оценки параметров. Итак, оценка параметров методом взвешенных наименьших квадратов является оценкой с наименьшей дисперсией в случае $W = \text{cov } \epsilon$. Кстати, оценка параметров обычным методом наименьших квадратов тоже обладает наименьшей дисперсией среди всех линейных оценок, чтобы показать это, достаточно положить $W = I$.

Другим важным частным случаем является случай когда W диагональная матрица, это случай независимых, но неравноточных измерений. В таком случае вычисление обратной матрицы W^{-1} выполняется особенно удобно.

В самом общем случае, если вспомнить, что $W = W^T$, то можно представить $W^{-1} = N N^T$, где N некоторая матрица. Одним из вариантов (но не единственным) вычисления матрицы N является алгоритм разложения Холецкого. В таком случае технически удобно свести задачу вычисления оценки параметров к задаче невзвешенных наименьших квадратов:

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \|N^T A \theta - N^T \hat{\mathbf{b}}\|^2, \quad (3.25)$$

перед последующими вычислениями вектор правой части $\hat{\mathbf{b}}$ и матрица A домножаются слева на N^T .

К сожалению, матрицу ковариации измерений $\text{cov } \epsilon = W$ следует знать заранее. Если нет никаких теоретических предпосылок, позволяющих вычислить W , то одним из самых простых способов является вычисление выборочной матрицы ковариации измерений $\hat{\mathbf{b}}$, где выборка формируется из повторений всех измерения несколько раз. Однако такой способ сопряжен и с практическими трудностями, ведь для уверенного определения выборочной матрицы ковариации следует получить много реализаций вектора $\hat{\mathbf{b}}$, по крайней мере много больше n^2 . Недостаточная точность оценки W приведёт к численным трудностям при последующем обращении матрицы или при её факторизации.

Полезно рассмотреть случай, когда $\text{cov } \epsilon = \sigma^2 W_0$, где W_0 известная матрица, а σ^2 неизвестный масштабирующий фактор. В таком случае удобно положить матрицу весов $W = W_0$, а затем оценить σ^2 по аналогии со случаем метода наименьших квадратов без весов. Оценка ошибки оценки параметров линейной модели будет задаваться следующей формулой:

$$\text{cov } \hat{\theta} = \frac{\|\hat{\epsilon}\|^2}{n - m} (A^T W_0^{-1} A)^{-1}, \quad (3.26)$$

где $\hat{\epsilon}$ теперь вычисляется как

$$\hat{\epsilon} = \hat{\mathbf{b}} - A\hat{\theta} = (I - A(A^T W_0^{-1} A)^{-1} A^T W_0^{-1}) \hat{\mathbf{b}}. \quad (3.27)$$

3.4 Плохо обусловленные и некорректные задачи

При получении оценки (3.11) мы предполагали, что $\det A^T A \neq 0$, а случай когда матрица $A^T A$ вырождена остался пока не рассмотрен. Стоит сразу сказать, что это не исключительный случай, а скорее предельный. Действительно, технически проверить условие $\det A^T A = 0$ оказывается затруднительным из-за наличия ошибок округления при численных расчётах. Так, вычисление определителя квадратной матрицы потребует порядка $O(n^3)$ операций умножения, которые внесут ошибки округления и в ответе почти наверняка получится некоторое малое число. Поэтому, как часто и бывает в численных методах, задачи с $\det A^T A = 0$ для нас на практике не отличимы от некоторого более широкого класса задач, где матрица $A^T A$ формально невырожденная.

Напомним, что *числом обусловленности* квадратной матрицы H называется

$$k \equiv \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}, \quad (3.28)$$

где λ_{\max} , λ_{\min} — максимальное и минимальное собственные значения мат-

рицы H . Можно показать, что

$$\frac{\|\delta\hat{\theta}\|}{\|\hat{\theta}\|} < k \frac{\|\delta\hat{\mathbf{b}}\|}{\|\hat{\mathbf{b}}\|}, \quad (3.29)$$

т.е. малые возмущения правой части задачи увеличиваются (или усиливаются) пропорционально числу обусловленности, поэтому иногда число обусловленности называют коэффициентом усиления шума. Задачи с большим числом обусловленности k матрицы $A^T A$ принято называть *плохо обусловленными задачами*, а у задач с вырожденной матрицей $A^T A$ число обусловленности $k = \infty$. Конечно, плохая обусловленность задачи это скорее качественная характеристика, потому-что нельзя указать универсальное пороговое значение числа обусловленности k при котором задача становится плохо обусловленной, хотя обычно в литературе говорят о $k > 1000$. Скорее, по мере увеличения k свойства решения задачи плавно ухудшаются, и в какой-то момент становится очевидно, что для получения разумного решения задачи следует применять специальный подход.

Чтобы понять как взаимодействовать с вырожденными и плохо обусловленными задачами перечислим необходимые свойства, которыми должно обладать решение задачи. Впервые их сформулировал французский математик Жак Адамар, назовём обратную задачу задачу $\theta = R[\mathbf{b}]$ *корректно поставленной*, если одновременно выполняются все следующие условия:

1. для всякого \mathbf{b} существует решение θ ,
2. решение θ единственно,
3. задача устойчива, т.е.

$$\forall \epsilon > 0, \exists \delta(\epsilon) > 0 : \rho_b(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2) \leq \delta(\epsilon) \Rightarrow \rho_\theta(\theta_1, \theta_2) \leq \epsilon. \quad (3.30)$$

В противном случае задача называется *некорректно поставленной*. Здесь $R[\mathbf{b}]$ обозначает некоторый оператор, который вычисляет оценку параметров модели θ по заданным измерениям \mathbf{b} , $\rho_b(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)$ и $\rho_\theta(\theta_1, \theta_2)$ обозначают метрики соответствующих пространств. Например, в случае метода наименьших квадратов:

$$\begin{aligned} R[\mathbf{b}] &= (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}, \\ \rho_b(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2) &= \|\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2\|, \\ \rho_\theta(\theta_1, \theta_2) &= \|\theta_1 - \theta_2\|. \end{aligned} \quad (3.31)$$

С первым требованием корректности задачи мы уже встречались, когда посмотрели на модель (3.1) как на уравнение относительно θ . Действительно, если вектор правой части \mathbf{b} принадлежит образу линейного оператора A , то решение такого уравнения существует, а если не принадлежит, то решения не существует. Однако, вместо вектора \mathbf{b} мы имеем дело с вектором $\hat{\mathbf{b}}$, отягощённым случайной погрешностью, и вектор $\hat{\mathbf{b}}$ в зависимости

от конкретной реализации погрешности может либо принадлежать образу линейного оператора A , либо нет. Такое поведение не имеет физического смысла, потому что для эксперимента повторенного два раза в одном случае решение может существовать, а во втором — нет.

Второе требование тоже легко интерпретировать: искомые параметры модели являются физическими величинами, присущими конкретным объектам, и было бы очень странно, например, если бы один и тот же металлический шарик имел одновременно два различных значения массы.

Третье требование означает, что для близких результатов измерений должны получаться близкие значения оценок параметров модели. В противном случае, полученным оценкам может быть невозможно дать физическую интерпретацию, так как сильно различающиеся количественные характеристики могут приводить к различным качественным интерпретациям. Например, предположим, что у нас есть неустойчивый метод определения электропроводности какого-то вещества, тогда при разумной погрешности измерений соответствующий разброс получаемых значений оценки электропроводности может оказаться настолько велик, что будет невозможно сделать вывод диэлектрик перед нами или проводник.

Некорректные задачи часто встречаются в различных областях физики: от геофизики до астрономии, и заслуживают отдельного изучения. Подробности можно узнать в монографии А.Н. Тихонова (Тихонов и Арсенин 1986), признанного классика в исследовании некорректных задач. Однако, далее мы ограничимся рассмотрением случая вырожденных ($\det A^T A = 0$) и плохо обусловленных задач наименьших квадратов, чтобы на их примере продемонстрировать понятие *регуляризации* задачи.

Итак, пусть $\det A^T A = 0$, и нас по-прежнему интересует решение задачи (3.8), тогда соответствующие нормальные уравнения (3.10) имеют множество решений, образующих линейное подпространство. *Нормальным относителем вектора θ_0 решением задачи (3.8)* будем называть $\hat{\theta}_0$ такой что:

$$\hat{\theta}_0 = \arg \min_{\hat{\theta}} \|\hat{\theta} - \theta_0\|^2, \quad (3.32)$$

$$\|A\hat{\theta}_0 - \hat{\mathbf{b}}\|^2 = \min_{\theta} \|A\theta - \hat{\mathbf{b}}\|^2. \quad (3.33)$$

Просто *нормальным решением* будем называть нормальное решение относительно $\theta_0 = 0$. Очевидно, что нормальное решение $\hat{\theta}_0$ единственно. Его физический смысл состоит в том, что мы предполагаем, что искомые параметры модели должны быть близки к θ_0 , а отклонение от этой априорной оценки определяется исходя из нормы невязки модельного предсказания и измерений.

Далее покажем, почему вычисление нормального решения неустойчиво, строгое доказательство приведено в книге А.Н. Тихонова (см. Тихонов и Арсенин 1986). Итак, с помощью сингулярного разложения матрица A представима в виде произведения:

$$A = USV^T, \quad (3.34)$$

где U — ортогональная матрица размера m , V — ортогональная матрица размера n , S — прямоугольная матрица, все элементы которой равны нулю, кроме некоторых элементов, стоящих на её диагонали. Элементы, стоящие на диагонали матрицы S называются *сингулярными числами* и обозначаются σ_i , причём считается, что числа убывают с ростом индекса.³ Собственные числа λ_i матрицы $A^T A$ связаны с сингулярными числами матрицы A следующим образом:

$$\lambda_i = \sigma_i^2, \quad (3.35)$$

и, поскольку $\det A^T A = 0$, некоторые сингулярные числа σ_i равны нулю. Кроме того, введём следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \mathbf{z} &\equiv V^T \boldsymbol{\theta}, \\ \mathbf{u} &\equiv U^T \hat{\mathbf{b}}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Теперь задача о поиске нормального решения запишется следующим образом:

$$\hat{\mathbf{z}}_0 = \arg \min_{\hat{\mathbf{z}}} \|\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}_0\|^2, \quad (3.37)$$

$$\|S\hat{\mathbf{z}}_0 - \hat{\mathbf{u}}\|^2 = \min_{\mathbf{z}} \|S\mathbf{z} - \hat{\mathbf{u}}\|^2; \quad (3.38)$$

откуда благодаря диагональной форме матрицы S находится $\hat{\mathbf{z}}_0$:

$$(\hat{z}_0)_i = \begin{cases} \frac{\hat{u}_i}{\sigma_i} & \sigma_i \neq 0 \\ (z_0)_i & \sigma_i = 0. \end{cases} \quad (3.39)$$

Понятно, что как только найден $\hat{\mathbf{z}}_0$, то $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0 = V\hat{\mathbf{z}}_0$ находится элементарно. Если σ_i находятся численно, как чаще всего и происходит, то, точно так же как и в случае с вычислением $\det A^T A$, результат будет отягощен ошибками округления. Это также можно интерпретировать, как внесение возмущения в матрицу A . Значит, на практике вместо вектора $\hat{\mathbf{z}}_0$ будет вычислен некоторый вектор $\hat{\mathbf{z}}'_0$:

$$(\hat{z}'_0)_i = \begin{cases} \frac{\hat{u}_i}{\hat{\sigma}_i} & \hat{\sigma}_i \neq 0 \\ (z_0)_i & \hat{\sigma}_i = 0, \end{cases} \quad (3.40)$$

где $\hat{\sigma}_i$ обозначают сингулярные значения, вычисленные с ошибкой округления, т.е. сингулярные значения возмущённой матрицы \hat{A} (кстати, матрица $\hat{A}^T \hat{A}$ может оказаться уже не вырожденной, а просто плохо обусловленной). Видно, что когда для некоторого i сингулярное число $\sigma_i = 0$, а его возмущенная версия $\hat{\sigma}_i \neq 0$ (либо наоборот), расстояние между векторами $\hat{\mathbf{z}}_0$ и $\hat{\mathbf{z}}'_0$ может оказаться сколь угодно большим. Это показывает неустойчивость задачи нахождения нормального решения.

³Путем перестановки соответствующих столбцов, элементов, и строк матриц U , S , V^T можно добиться любого порядка следования диагональных элементов.

Процедура замены некорректной задачи на близкую по смыслу корректную задачу называется *регуляризацией*. Например, вместо поиска нормального решения вырожденной задачи мы могли бы искать решение $\hat{\theta}_\delta$, стремящееся к нормальному решению невозмущённой задачи $\hat{\theta}_0$ по мере уменьшения возмущений, но не обязательно минимизирующее норму строго:

$$\|A\hat{\theta}_\delta - \hat{\mathbf{b}}\|^2 \leq \min_{\theta} \|A\theta - \hat{\mathbf{b}}\|^2 + \delta. \quad (3.41)$$

Подразумевается, что все возмущённые задачи для нас неразличимы на практике, значит и от идеального минимума можно отступить на характерную величину возмущения.

Такой подход называется *регуляризацией Тихонова*⁴ или регуляризацией в второй норме, и приводит к следующей модификации задачи наименьших квадратов:

$$\hat{\theta}_\delta = \arg \min_{\theta} \left(\|A\theta - \hat{\mathbf{b}}\|^2 + \alpha \|\theta - \theta_0\|^2 \right), \quad (3.42)$$

где α — некоторый параметр регуляризации. Нетрудно видеть, что решение выражается как

$$\hat{\theta}_\delta = (A^T A + \alpha I)^{-1} (A^T b + \alpha \theta_0) \quad (3.43)$$

и при $\alpha \rightarrow 0$ решение стремится к решению исходной задачи наименьших квадратов. При $\alpha \rightarrow \infty$, коэффициент обусловленности матрицы $A^T A + \alpha I$ приближается к единице, а $\hat{\theta}_\delta \rightarrow \theta_0$. На практике параметр α подбирается эмпирически.

Возможный альтернативный подход — *регуляризация на основе усечённого сингулярного разложения*⁵. Вернёмся к выражению (3.40) и изменим его следующим образом:

$$(\hat{z}_\delta)_i = \begin{cases} \frac{\hat{u}_i}{\hat{\sigma}_i} & \hat{\sigma}_i \geq \sigma_0 \\ (z_0)_i & \hat{\sigma}_i < \sigma_0. \end{cases} \quad (3.44)$$

Фактически, подбирая порог σ_0 мы варьируем число обусловленности матрицы $\hat{A}^T \hat{A}$, которое составит:

$$k = \frac{\hat{\sigma}_1^2}{\sigma_0^2}. \quad (3.45)$$

При достаточно большом значении σ_0 коэффициент обусловленности будет иметь умеренное значение, это значит, что вместо исходной плохо обусловленной задачи мы вычислим решение некоторой хорошо обусловленной задачи, близкой к исходной.

Запишем теперь решение задачи (3.42) в терминах сингулярного разложения, чтобы сравнить с (3.40) и (3.44):

$$(\hat{z}_\delta)_i = \frac{\hat{\sigma}_i}{\hat{\sigma}_i^2 + \alpha} \hat{u}_i + \frac{\alpha}{\hat{\sigma}_i^2 + \alpha} (z_0)_i. \quad (3.46)$$

⁴ridge regression

⁵truncated SVD

Видно, что α и σ_0 имеют похожий смысл, и решения рассматриваемых подходов совпадают в двух предельных случаях: при $\alpha \rightarrow \infty$, $\sigma_0 \rightarrow \infty$ и при $\alpha \rightarrow 0$, $\sigma_0 \rightarrow 0$. В промежуточных условиях, в (3.46) априорное решение \mathbf{z}_0 подмешивается более гладко, чем в (3.44).

Отметим, однако, что подходы регуляризации предполагают включение в решение априорных знаний, т.е. знаний полученных до опыта или эксперимента. Видно, что в предельном случае, результат обработки данных от самих этих данных вовсе не зависит и определяется исключительно априорными предположениями о «правильном ответе». Если есть возможность улучшить плохую обусловленность задачи проведя дополнительные измерения при некоторых других, отличных от исследованных ранее, условиях, то такой вариант должен считаться предпочтительнее применения описанных здесь математических приёмов.