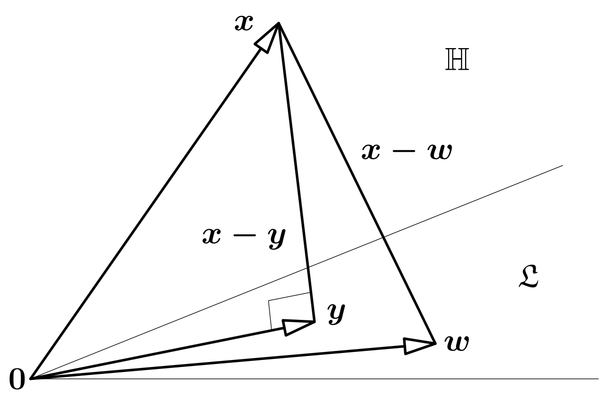
И. В. Семушин

НАИМЕНЬШИЕ КВАДРАТЫ

от теории к алгоритмам

Часть I – Теория



Ульяновск 2005

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
«Ульяновский государственный технический университет»

И. В. Семушин

НАИМЕНЬШИЕ КВАДРАТЫ
от теории к алгоритмам

Часть I – Теория

Ульяновск 2005

УДК 51(075.8)
ББК В1я 731-1
С30

Рецензенты: д-р физ-мат. наук, профессор В. Н. Латышев
д-р физ-мат. наук, профессор А. И. Жданов

И. В. Семушин

С30 Наименьшие квадраты от теории к алгоритмам. Часть I – Теория.: Учеб. пособие для вузов. — Ульяновск: УлГТУ, 2005. — XXXс.
ISBN 5-00000-000-0

Содержит учебный материал, по специальному курсу «Рекуррентные наименьшие квадраты», составляющий также существенную часть других курсов: «Математическая статистика», «Вычислительная линейная алгебра», «Регрессионное моделирование», «Принципы эконометрики» и др.

Для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлениям и специальностям «Прикладная математика и информатика», «Моделирование и оптимизация технических систем», «Информационные системы в экономике, технике и технологиях», а также для специалистов, желающих углубить свои знания по современной теории и вычислительной практике классического метода наименьших квадратов.

УДК 51(075.8)
ББК В1я 731-1

ISBN 5-00000-000-0

Оглавление

Предисловие **5**

1 Общая теория **7**

1.1 Линейные векторные пространства 8
1.2 Ортогональная проекция 17
1.3 Пространства случайных переменных 19
1.4 Конечномерные линейные пространства 22
1.5 Наименьшие квадраты и псевдоинверсия 30
1.6 Отыскание псевдообратной матрицы 34
1.7 Основные теоремы по наименьшим квадратам и псевдоинверсии 45
1.8 Вычисление матриц проектирования 47
1.9 Рекурсия в задаче МНК 53
1.10 Основные свойства симметрических (эрмитовых) матриц 56

2 Линейная задача наименьших квадратов **61**

2.1 Модели, регрессии и оценки 61
2.2 Линейная задача наименьших квадратов 62
2.3 Статистическая интерпретация 64
2.4 Включение априорных статистических данных 65
2.5 Включение предшествующего МНК-решения 68
2.6 Рекурсия для МНК в стандартной информационной форме 69
2.7 Рекурсия для МНК в стандартной ковариационной форме 70
2.8 Факторизованный алгоритм Поттера для ковариационной формы МНК 75
2.9 Полная статистическая интерпретация рекурсии в методе наименьших квадратов 77

2.10 Основные результаты 86

3 Декомпозиция (разложение) матриц 89

4 Ортогональные преобразования 91

5 Последовательные алгоритмы 93

6 Оценка качества алгоритмов 95

A Общая теория 97

A.1 Линейные векторные пространства 98
A.2 Ортогональная проекция 107
A.3 Пространства случайных переменных 109
A.4 Конечномерные линейные пространства 112
A.5 Наименьшие квадраты и псевдоинверсия 120
A.6 Отыскание псевдообратной матрицы 124
A.7 Основные теоремы по наименьшим квадратам и псевдоинверсии 135
A.8 Вычисление матриц проектирования 137
A.9 Рекурсия в задаче МНК 143
A.10 Основные свойства симметрических (эрмитовых) матриц 146

Литература 151

Предисловие

Пишите ваше предисловие здесь...

.....

Ульяновск, *И.В. Семушин*

Апрель 2004

Глава 1

Общая теория

Задача и метод наименьших квадратов (МНК) возникли на базе Линейной алгебры (ЛА) и Теории вероятностей (ТВ). К настоящему времени они вышли за рамки этих классических дисциплин, поскольку накопили множество приложений и эффективных численных реализаций. Они часто излагаются как важный раздел Эконометрики [1], Математических методов обработки данных [33], как Прикладной регрессионный анализ [21] или Регрессионное моделирование при обработке данных [14].

Линейная алгебра придает задаче наименьших квадратов строгую математическую форму, позволяет анализировать все решения этой задачи и формулировать метод. Теория вероятностей дает возможность подходить к той же задаче не формально алгебраически, а с точки зрения неопределенности, присущей реальным экспериментальным данным и уменьшаемой при их статистической обработке. Замечательно, что ТВ, формулируя задачу независимо и совершенно в других терминах, приводит к тем же решениям, что и ЛА. Можно считать, что ТВ дает статистическую интерпретацию для чисто алгебраической задачи и алгебраического метода решения переопределенных систем линейных алгебраических уравнений. С другой стороны, Вычислительная линейная алгебра (ВЛА) поставляет множество идей и подходов для эффективной численной реализации метода. Таким образом, ЛА, ТВ и ВЛА дополняют и усиливают друг друга на материале этой очень важной задачи.

Следующий раздел носит вводный характер. В нем приведены базовые концепции ЛА и ТВ, необходимые для анализа задачи наименьших квадратов. Методы ВЛА применяются в последующих разделах для изложения эффективных численных алгоритмов решения этой задачи.

1.1 Линейные векторные пространства

Прежде чем приступить к изложению метода наименьших квадратов (МНК), напомним читателю основные понятия и факты из теории линейных векторных пространств. При этом для обозначения математических объектов будем использовать следующие алфавиты:
✓ *главные пространства и поля* — латинский контурный: $\mathbb{R}, \mathbb{H}, \mathbb{Z}, \ldots$
✓ *другие подпространства* — заглавный готический: $\mathfrak{L}, \mathfrak{M}, \mathfrak{S}, \ldots$ [1]
✓ *множества* — латинский полужирный: $\boldsymbol{L}, \boldsymbol{M}, \boldsymbol{S}, \boldsymbol{l}^2_{pm}, \ldots$
✓ *события, семейства* — каллиграфический латинский: $\mathscr{A}, \mathscr{B}, \mathscr{T}, \ldots$
✓ *векторы* — строчный латинский: $u, v, \ldots$
✓ *пронумерованные векторы* — векторы с верхними индексами: $a^1, a^2, \ldots$
✓ *элементы векторов* — векторы с нижними индексами: $a^1_1, a^1_2, \ldots$
✓ *члены последовательности* — члены с нижними индексами: x_1, ... [2]
✓ *скаляры* — строчный греческий: $\alpha, \beta, \ldots$
✓ *матрицы, отображения, подмножества* [3] — заглавный латинский: A, B, ... Запись $A = A(n, m)$ означает, что матрица A имеет n строк и m столбцов; она именуется также $(n \times m)$-матрицей.

Определение 1.1. *Вещественное* (соответственно, *компле́ксное*) *векторное* (или *линейное*) *пространство*:
✠ состоит из некоторой абелевой группы $(\boldsymbol{V}, +)$, поля вещественных чисел $\mathbb{R}$ (соответственно, поля $\mathbb{C}$ комплексных чисел) и бинарной операции (обозначаемой точкой $\cdot$, которая обычно – для удобства записи – опускается) между членами (элементами) основополагающего множества $\boldsymbol{V}$ и поля $\mathbb{R}$ (соответственно, $\mathbb{C}$) и при этом
✠ удовлетворяет следующим восьми аксиомам для всех $u, v, w \in \boldsymbol{V}$ и всех $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ (соответственно, $\mathbb{C}$):

Абелева группа (для всех элементов множества $\boldsymbol{V}$)

(i) Коммутативный закон .... $v + w = w + v$

(ii) Ассоциативный закон .... $(u + v) + w = u + (v + w)$

---

[1] В отдельных случаях – при необходимости пояснить чтение логических выражений – более мелкий готический шрифт: $\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \ldots$ будет использован для обозначения любого *высказывания*, т. е., некоторой *логико-предметной формулы* (ЛПФ).

[2] Отличие от элементов векторов должно быть ясно из контекста.

[3] Различие будет ясно из контекста.

(iii) Существование аддитивной *единицы* [4] $\exists\, 0 \in \boldsymbol{V} \quad (0 + v = v)$

(iv) Существование *инверсии* .... $\exists\, (-v) \in \boldsymbol{V} \quad (v + (-v) = 0)$

Скалярное умножение (для всех элементов множества $\boldsymbol{V}$ и поля $\mathbb{R}$)

(v) Дистрибутивный закон .... $\alpha \cdot (v + w) = \alpha \cdot v + \alpha \cdot w$

(vi) Дистрибутивный закон .... $(\alpha + \beta) \cdot v = \alpha \cdot v + \beta \cdot v$

(vii) Ассоциативный закон .... $\alpha \cdot (\beta \cdot v) = (\alpha\beta) \cdot v$

(viii) Существование мультипликативной единицы .... $1 \cdot v = v$

Замечание 1.1. Множество $\boldsymbol{V}$, названное в Определении A.1 *основополагающим*, там не задано конкретно. Конкретизируя его, можно, например, рассматривать множество всевозможных последовательностей $X = \{X_n : n \in \mathbb{Z}_+, X_n \in \mathbb{R}^{pm}\}$ всех вещественных $(p \times m)$-матриц на множестве $\mathbb{Z}_+$ целых положительных чисел n при задании функции внутреннего (скалярного) произведения между элементами X и Y этого множества соотношением $(X, Y) \triangleq \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{tr}\left\{X_n Y_n^T\right\}$ во всех случаях, когда эта сумма сходится. [5]

Определение 1.2. *Вещественное* (соответственно, *комплексное*) *предгильбертово* пространство есть вещественное (соответственно, комплексное) векторное пространство $\mathbb{H}$, на котором определена функция *внутреннего (скалярного) произведения* $(\cdot,\cdot) : \mathbb{H} \times \mathbb{H} \to \mathbb{R}$ (соответственно, $(\cdot,\cdot) : \mathbb{H} \times \mathbb{H} \to \mathbb{C}$) такая, что следующие три свойства выполняются для всех $x, y, z \in \mathbb{H}$ и всех $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ (соответственно, всех $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$):

(i) $(x, y) = (y, x)$ (соответственно, $(x, y) = \overline{(y, x)}$).

(ii) $(x, x) \geq 0$ и $(x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$.

(iii) $(\alpha x + \beta y, z) = \alpha(x, z) + \beta(y, z)$.

Норма вектора $x \in \mathbb{H}$ есть функция $\|\cdot\| : \mathbb{H} \to \mathbb{R}$, определенная равенством

$$\|x\| \triangleq \sqrt{(x, x)} \geq 0\,.$$

[4] Элемент $e \in \boldsymbol{S}$ есть *единица* для *бинарной операции* $\star$ на множестве $\boldsymbol{S}$, если $\forall\, a \in \boldsymbol{S} \quad (a \star e = e \star a)$. Если $\star = +$, то $e = 0$ (число нуль); если $\star = \cdot$, то $e = 1$ (число единица).

[5] Символ $\triangleq$ означает равенство по определению.

Замечание 1.2. Для определенности, в этой книге мы будем иметь дело только с вещественными векторными пространствами. Все результаты обобщаются очевидным образом на комплексные векторные пространства.

Докажите следующий результат в качестве упражнения.

Теорема 1.1. Для любых $x, y \in \mathbb{H}$ справедливы:

(i) неравенство Коши-Шварца $|(x,y)| \leq \|x\| \cdot \|y\|$,

(ii) неравенство треугольника $\|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|$ и

(iii) равенство параллелограмма $\|x+y\|^2 + \|x-y\|^2 = 2\|x\|^2 + 2\|y\|^2$.

□

Определение 1.3. *Расстояние* между $x, y \in \mathbb{H}$ есть $d(x,y) = \|x-y\|$. Можно видеть, что $d(\cdot,\cdot)$ обладает свойствами:

(i) $d(x,y) = d(y,x)$,

(ii) $d(x,y) = 0 \Leftrightarrow x = y$ и

(iii) $d(x,z) \leq d(x,y) + d(y,z)$.

Такая функция из $\mathbb{H} \times \mathbb{H}$ в $\mathbb{R}_+$, где $\mathbb{R}_+$ обозначает $\{x; x \in \mathbb{R} \ \& \ x \geq 0\}$, называется *метрикой*. Любое множество $\boldsymbol{M}$, в котором для любых его элементов x и y определено расстояние, называется *метрическим пространством*.

Заметим, что $(\mathbb{H}, d)$ есть *метрическое топологическое пространство* (т. е. топологическое пространство, чья топология задается некоторой метрикой), когда базис для этой топологии берется как множество *открытых* шаров $\boldsymbol{O}_x(r) \triangleq \{y \in \mathbb{H}; \|x-y\| < r\}$ для всех $x \in \mathbb{H}, r > 0$. Мы говорим $\{x_n; n \in \mathbb{Z}_+\}$ *сходится* к x (и пишем $x_n \to x$ при $n \to \infty$), если $d(x_n, x) \to 0$ при $n \to \infty$.

Определение 1.4. *Топология* на некотором множестве $\boldsymbol{S}$ есть семейство $\mathscr{T}$ подмножеств множества $\boldsymbol{S}$, обладающее свойствами:

(i) $\varnothing \in \mathscr{T}$ и $\boldsymbol{S} \in \mathscr{T}$.

(ii) $\boldsymbol{T}_1 \in \mathscr{T}$ и $\boldsymbol{T}_2 \in \mathscr{T}$ влечет $\boldsymbol{T}_1 \cap \boldsymbol{T}_2 \in \mathscr{T}$.

(iii) $\forall \mathscr{T}' \subset \mathscr{T}$ выполняется $\bigcup_{i \in \boldsymbol{I} \subseteq \mathbb{Z}_+} \{\boldsymbol{T}_i; \boldsymbol{T}_i \in \mathscr{T}'\} \in \mathscr{T}$.

$\mathfrak{T} = (\boldsymbol{S}, \mathscr{T})$ называется *топологическим пространством*. Элеметны топологии $\mathscr{T}$ называются ее *открытыми множествами*. *Базис* $\mathscr{B}$ для топологии $\mathscr{T}$ есть семейство открытых множеств, таких что каждое открытое множество в $\mathscr{T}$ есть объединение членов базиса $\mathscr{B}$. Множество называется *замкнутым*, если его дополнение — открытое множество. [6)]

В стандартной терминологии, *метрическая топология* на некотором предгильбертовом пространстве $\mathbb{H}$ есть та топология, которая задается расстоянием $d(x,y) = \|x-y\|$, $x, y \in \mathbb{H}$, а *евклидова (метрическая) топология* на $\mathbb{R}^n$ есть та топология, которая задается расстоянием $d(x,y) = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^2\right)^{1/2}$, $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Теорема 1.2. Внутреннее (скалярное) произведение является непрерывной функцией из $\mathbb{H} \times \mathbb{H}$ в $\mathbb{R}$, то есть, если $x_n \to x$ и $y_n \to y$ при $n \to \infty$ в метрической топологии на $\mathbb{H}$, то $(x_n, y_n) \to (x, y)$ при $n \to \infty$ в евклидовой топологии на $\mathbb{R}^1$. В частности, $x_n \to x$ влечет $\|x_n\| \to \|x\|$ при $n \to \infty$.

Доказательство. Имеем

$$\begin{aligned}(x,y) - (x_n, y_n) &= ((x - x_n) + x_n, (y - y_n) + y_n) - (x_n, y_n) = \\ &= (x - x_n, y - y_n) + (x - x_n, y_n) + (x_n, y - y_n)\,. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Согласно неравенству треугольника, из $x_n \to x$ при $n \to \infty$ следует, что $\{\|x_n\|; n \in \mathbb{Z}_+\}$ ограничена, и аналогичное утверждение верно для $\{\|y_n\|; n \in \mathbb{Z}_+\}$. Используя неравенство Коши-Шварца вместе с этим фактом, получаем $(x_n, y_n) \to (x, y)$ при $n \to \infty$, что и требовалось.

□

Определение 1.5. Определяющим свойством *последовательности Коши* $\{x_n; n \in \mathbb{Z}_+\}$ является то, что $d(x_n, x_m) \to 0$ при $n, m \to \infty$. Это свойство последовательности называется ее *фундаментальностью* (или *сходимостью в себе*).

Если $x_n \to x$ при $n \to \infty$, то последовательность $\{x_n; n \in \mathbb{Z}_+\}$ — фундаментальная: $d(x_n, x_m) \le d(x_n, x) + d(x_m, x) \to 0$ при $n, m \to \infty$.

Определение 1.6. Если для каждой последовательности Коши $\{x_n; n \in \mathbb{Z}_+\}$ в $\mathbb{H}$ существует некоторый $x \in \mathbb{H}$, такой что $x_n \to x$ при $n \to \infty$, то $\mathbb{H}$ называется *полным*.

[6)] См. также ниже Определение A.9.

Определение 1.7. Гильбертово пространство $\mathbb{H}$ есть предгильбертово пространство, которое является полным по отношению к метрике $d(x,y) = \|x-y\|$, $x,y \in \mathbb{H}$.

Пример 1.1. (i) Пространство $\mathbb{R}^n$ является конечномерным гильбертовым пространством с внутренним произведением, определенным по правилу [7] $(x,y) \triangleq ((x_1,\ldots,x_n),(y_1,\ldots,y_n)) = \sum_{i=1}^n x_i y_i = x^T y = \mathbf{tr}\left\{xy^T\right\}$. [8] Полнота всего $\mathbb{R}^n$ относительно так определенной метрики следует из полноты каждого из n координатных подпространств, которые являются копиями полного пространства $\mathbb{R}^1$.

(ii) Любое конечномерное предгильбертово пространство $\mathbb{H}$ является полным. Это можно видеть, сначала используя процедуру Грама-Шмидта, [9] чтобы построить какой-нибудь ортогональный базис для $\mathbb{H}$, и затем показывая, что последовательности Коши в $\mathbb{H}$ приводятся к покоординатным (в $\mathbb{R}^n$) последовательностям Коши. В действительности, такое построение показывает, что существует некоторое линейное обратимое отображение W, для которого, — в терминах *взвешенного, или обобщенного* [10] скалярного произведения, — имеем $(x,y)_{\mathbb{H}} = (Wu, Wv)_{\mathbb{R}^n}$. Это отображение W представляет, таким образом, *линейную изометрию* из $\mathbb{H}$ в $\mathbb{R}^n$. Нетрудно показать, что если существует такой изометрический изоморфизм между некоторым предгильбертовым пространством и некоторым гильбертовым пространством, то первое из указанных пространств — полное.

(iii) Пространство вещественных непрерывных функций на $[0;1]$, обозначаемое $\boldsymbol{C}[0;1]$, может быть превращено в предгильбертово пространство путем определения $(f,g) \triangleq \int_0^1 f(t)g(t)\,\mathrm{d}t$, где $\mathrm{d}t$ есть мера Лебега. Это пространство не является полным.

---

[7] Из последующей записи $x^T y = \mathbf{tr}\left\{xy^T\right\}$ видно, что векторы — в данном случае, $x = (x_1,\ldots,x_n)$ и $y = (y_1,\ldots,y_n)$ — в векторно-матричных выражениях принято считать одностолбцовыми матрицами и, соответственно, применять к ним символ ^{T} транспонирования.

[8] Благодаря такому определению скалярного произведения векторов, метрика в $\mathbb{R}^n$ является евклидовой и само $\mathbb{R}^n$ называется также *конечномерным евклидовым пространством*, которое, — специально подчеркивая этот факт, — можно обозначить $\mathbb{E}^n$. Однако, специальное обозначение $\mathbb{E}^n$ практически не используется.

[9] В последующей Теореме А.6 так фактически и делается.

[10] Для произвольной обратимой ($n \times n$)-матрицы W взвешенное скалярное произведение векторов $x,y \in \mathbb{R}^n$ определяется выражениями: $(x,y)_W \triangleq (Wx, Wy)$ и $\|x\|_W = \|Wx\|$.

(iv) Важный пример гильбертова пространства дает $\boldsymbol{L}^2([0;1])$, — пространство вещественнозначных измеримых по Лебегу функций с $(f,g) \triangleq \triangleq \int_0^1 f(t)g(t)\,\mathrm{d}t$ и $\|x\|^2 \triangleq \int_0^1 f^2(t)\,\mathrm{d}t < \infty$. Соответственно, пространство $\boldsymbol{L}^2([0;1])$ комплекснозначных измеримых по Лебегу функций с $(f,g) \triangleq \triangleq \int_0^1 f(t)\overline{g(t)}\,\mathrm{d}t$ и $\|x\|^2 \triangleq \int_0^1 |f(t)|^2\,\mathrm{d}t < \infty$ есть важный пример комплексного гильбертова пространства. Полнота этих пространств следует из нижеследующей Теоремы **??**. Здесь, конечно, $[0;1]$ может быть заменен на любой конечный или бесконечный интервал E, тогда соответствующее пространство обозначают $\boldsymbol{L}^2(E)$. Вещественное пространство $\boldsymbol{L}^2$ по своим геометрическим свойствам аналогично пространству $\mathbb{R}^n$. Более того, если $\boldsymbol{L}^2$ построить на множестве E, состоящем из n точек, причем задать μE — меру в E — так, что для каждого одноточечного множества мера равна 1, то $\boldsymbol{L}^2(E)$ превратится в $\mathbb{R}^n$. Таким образом, $\mathbb{R}^n$ может рассматриваться как частный случай $\boldsymbol{L}^2(E)$ — вещественного пространства функций, интегрируемых с квадратом.

(v) В заключение примеров вернемся к Замечанию A.1, где введено пространство последовательностей $X = \{X_n : n \in \mathbb{Z}_+, X_n \in \mathbb{R}^{pm}\}$ вещественных $(p\times m)$-матриц на множестве $\mathbb{Z}_+$. Определим норму n-го элемента последовательности X формулой $\|X_n\|^2 \triangleq \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^n X_n^2(i,j) \triangleq \triangleq \mathbf{tr}\left\{X_n X_n^T\right\}$. Тогда $(\cdot,\cdot)$, введенное в Замечании A.1, дает скалярное произведение на линейном пространстве, которое порождено множеством $\boldsymbol{l}^2_{p,m} = \{X;\ X : \mathbb{Z}_+ \to \mathbb{R}^{pm}, \sum_{n=1}^\infty \|X_n\|^2 < \infty\}$ всех суммируемых с квадратом последовательностей вещественных $(p\times m)$-матриц. Полнота $\boldsymbol{l}^2_{p,m}$ следует из Теоремы **??**, сформулированной ниже.

Упражнение 1.1. Проверьте справедливость утверждений в Примере A.1.

Определение 1.8. *Подпространством* $\mathfrak{L}$ векторного пространства $\mathfrak{X}$ называют любое подмножество $\mathfrak{L}$ данного множества $\mathfrak{X}$, $\mathfrak{L} \subseteq \mathfrak{X}$, на котором $x, y \in \mathfrak{L}$ влечет $\alpha x + \beta y \in \mathfrak{L}$ для всех $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. При этом $\mathfrak{L}$ называют *собственным подпространством*, если $\mathfrak{L} \neq \mathfrak{X}$, т. е. $\mathfrak{L} \subset \mathfrak{X}$. Для любого множества $\mathfrak{L} \subseteq \mathfrak{X}$ обозначение $\mathrm{Sp}\{\mathfrak{L}\}$ используют для множества всех конечных линейных комбинаций элементов множества $\mathfrak{L}$. Множество $\mathrm{Sp}\{\mathfrak{L}\}$ называют *линейной оболочкой* [11] множества $\mathfrak{L}$.

Упражнение 1.2. (i) Покажите, что $\forall \mathfrak{L} \subseteq \mathfrak{X}\ \ (\mathrm{Sp}\{\mathfrak{L}\} \subseteq \mathfrak{X})$.

[11] Span = оболочка.

(ii) Покажите, что $\mathrm{Sp}\{\mathfrak{L}\}$ совпадает с пересечением всех подмножеств множества $\mathfrak{X}$, которые содержат $\mathfrak{L}$.

Определение 1.9. Множество $\boldsymbol{S}$ называется *замкнутым*, если вместе во всеми сходящимися к пределам x последовательностями $\{x_n;\ n \in \mathbb{Z}_+\}$ оно содержит и сами пределы x. Множество $\overline{\boldsymbol{S}}$ называется *замыканием* множества $\boldsymbol{S}$, если оно получено присоединением к $\boldsymbol{S}$ пределов x всех последовательностей $\{x_n;\ n \in \mathbb{Z}_+,\ x_n \to x$ при $n \to \infty\}$.

Упражнение 1.3. Покажите, что некоторое $\mathfrak{L} \subseteq \mathbb{H}$, где $\mathbb{H}$ — данное гильбертово пространство, замкнуто по отношению к метрике $\|\cdot\|$ тогда и только тогда, когда $\mathfrak{L}$ есть гильбертово пространство по отношению к этой метрике.

Упражнение 1.4. Примером линейного подпространства гильбертова пространства, которое не является замкнутым, может служить пространство $\boldsymbol{C}[0;1] \subset \boldsymbol{L}^2[0;1]$. Пусть $V[\alpha_1,\ldots,\alpha_n]$ обозначает множество непрерывных функций, обращающихся в нуль в точках $(\alpha_1,\ldots,\alpha_n) \subset \subset [0;1]$. Проверьте, что $V[\alpha_1,\ldots,\alpha_n] \subset \boldsymbol{C}[0;1] \subset \boldsymbol{L}^2[0;1]$ не является также гильбертовым пространством.

В дальнейшем в качестве любого гильбертова пространства $\mathbb{H}$ *будем рассматривать только замкнутые подпространства в* $\mathbb{H}$. То есть, $\mathfrak{L} \subset \mathbb{H}$ есть некоторое *подпространство*, если и только если оно является подмножеством из $\mathbb{H}$, таким что:

(i) $\forall \alpha,\beta \in \mathbb{R}\ \ (x,y \in \mathfrak{L} \Rightarrow \alpha x + \beta y \in \mathfrak{L})$, т. е., $\mathfrak{L}$ — линейное пространство;

(ii) если $\{x_n : n \in \mathbb{Z}_+\}$ есть последовательность Коши в $\mathfrak{L}$, то $x \triangleq \triangleq \lim_{n\to\infty} x_n \in \mathfrak{L}$, т. е., $\mathfrak{L}$ замкнуто в метрической топологии, заданной нормой $\|\cdot\|$.

Как сказано в Определении A.9, чтобы получить замкнутое подпространство $\mathfrak{L}$ из подпространства $\mathfrak{L}^\circ$ в гильбертовом пространстве $\mathbb{H}$, необходимо присоединить к $\mathfrak{L}^\circ$ все точки, которые являются пределами в метрической топологии последовательностей в $\mathfrak{L}^\circ$. [12)]

[12)] Эти предельные точки называются *точками сгущения* последовательности.

Пример 1.2. В множестве всех вещественных чисел $\mathbb{R}^1$ множество $\boldsymbol{R}$ рациональных чисел обладает известным важным свойством: каждое вещественное число представимо как предел последовательности рациональных чисел, т. е. $\overline{\boldsymbol{R}} = \mathbb{R}^1$. Это свойство называют *плотностью* множества $\boldsymbol{R} \subset \mathbb{R}^1$. Это понятие применимо к любым метрическим пространствам.

Определение 1.10. *Собственное* подмножество $\boldsymbol{S}$ метрического пространства $\boldsymbol{M}$ (т. е., $\boldsymbol{S} \subset \boldsymbol{M}$) *всюду плотно* (в $\boldsymbol{M}$), если $\overline{\boldsymbol{S}} = \boldsymbol{M}$.

Определение 1.11. Метрическое пространство называется *сепарабельным*, если в нем существует счетное или конечное всюду плотное подмножество. [13)]

Пример 1.3. Большинство пространств, рассмотренных выше, сепарабельны. Важным примером сепарабельного пространства является $\boldsymbol{l}^2$ — *бесконечномерное евклидово пространство*. По определению, $\boldsymbol{l}^2$ есть множество последовательностей $\{x_n; n \in \mathbb{Z}_+\}$, суммируемых с квадратом: $\boldsymbol{l}^2 = \{x;\, x : \mathbb{Z}_+ \to \mathbb{R}^1,\, (x,y) \triangleq \sum_{n=1}^{\infty} x_n y_n,\, \|x\|^2 < \infty\}$. Нетрудно доказать, что это предгильбертово пространство — полное, т. е., оно — гильбертово, и его сепарабельность также легко проверяется. [14)] Можно доказать, [15)] что в любом сепарабельном пространстве $\boldsymbol{L}^2(E)$ (для любого измеримого множества E с мерой $\mu E > 0$) существует полная ортонормированная система функций [16)] $\varphi = \{\varphi_n; n \in \mathbb{Z}_+\}$ такая, что для любой функции $f \in \boldsymbol{L}^2(E)$ последовательность коэффициентов Фурье $\alpha = \{\alpha_n : n \in \mathbb{Z}_+,\, \alpha_n = (f, \varphi_n)\} \in \boldsymbol{l}^2$ ряда Фурье $\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \varphi_n$ этой функции обладает свойством *сохранения нормы*: $\|f\|_{\boldsymbol{L}^2} = \|\alpha\|_{\boldsymbol{l}^2}$.

Определение 1.12. Если в некотором множестве $\boldsymbol{X}$ высказывание $\mathfrak{A}$ справедливо для одних элементов подмножества $E \subseteq \boldsymbol{X}$ и, возможно, не справедливо для других, но совокупность тех элементов из E, где $\mathfrak{A}$

[13)] Можно видеть, что если пространство содержит *бесконечное* множество *точек* (элементов), то никакое его всюду плотное подмножество не может быть конечным.

[14)] См., например, [18, сс. 71, 74].

[15)] См. [17, теорема 6.9.1].

[16)] Система функций $\{\varphi_n; n \in \mathbb{Z}_+\}$ из $\boldsymbol{L}^2(E)$ называется *ортонормированной* на множестве E, если $\forall i, j$ $((\varphi_i, \varphi_j) = 0$ при $i \neq j$ и $\|\varphi_i\| \triangleq \sqrt{(\varphi_i, \varphi_i)} = 1)$. Ортонормированная система функций $\{\varphi_n; n \in \mathbb{Z}_+\}$ из $\boldsymbol{L}^2(E)$ называется *полной*, если в $\boldsymbol{L}^2(E)$ не существует функции, отличной от $\emptyset$ и в то же время ортогональной всем функциям этой системы. По поводу $\emptyset$ см. Определение А.13.

не справедливо, содержится в каком-нибудь множестве меры 0, [17] то говорят, что данное $\mathfrak{A}$ справедливо *почти всюду* на E, или *для почти всех* $x \in E$, что будем записывать так: $\widetilde{\forall} x \in E \ \ (\mathfrak{A})$.

Определение 1.13. Две функции f и g, определенные на $E \subseteq \boldsymbol{X}$, называются *эквивалентными* на E, — и в таком случае мы пишем $f \sim g$ на E, — если $\widetilde{\forall} x \in E \ \ (f(x) = g(x))$. *Нулевой элемент* $\emptyset$ некоторого пространства функций, например, пространства $\boldsymbol{L}^2(E)$, изображается не только функцией, тождественно равной нулю, но и любой функцией $f(x) \sim 0$ на E, т. е., мы говорим $f(x) = \emptyset$, когда $\widetilde{\forall} x \in E \ \ (f(x) = 0)$.

Ясно, что $f \sim g$ на E, если $\widetilde{\forall} x \in E \ \ (f(x) - g(x) = 0)$.

Замечание 1.3. Из Примера А.3 следует, что построением ряда Фурье пространство $\boldsymbol{L}^2(E)$ отображается на $\boldsymbol{l}^2$, т. е., что каждая последовательность $\alpha = \{\alpha_n : n \in \mathbb{Z}_+\} \in \boldsymbol{l}^2$ является образом некоторой функции $f \in \boldsymbol{L}^2(E)$. Кроме того, благодаря полноте системы $\varphi = \{\varphi_n; n \in \mathbb{Z}_+\} \in \in \boldsymbol{L}^2(E)$, построенное отображение взаимно однозначно, т. е., по каждой последовательности $\alpha = \{\alpha_n : n \in \mathbb{Z}_+\} \in \boldsymbol{l}^2$ функция $f \in \boldsymbol{L}^2(E)$, для которой данные числа $\{\alpha_n : n \in \mathbb{Z}_+\}$ служат коэффициетами Фурье, определяется единственным образом с точностью до эквивалентности функций.

Отмеченное взаимно однозначное соответствие между сепарабельным пространством $\boldsymbol{L}^2(E)$ и пространством $\boldsymbol{l}^2$ обладает еще следующим свойством:

($\star$) Если $\alpha = \{\alpha_n : n \in \mathbb{Z}_+\}$, $\beta = \{\beta_n : n \in \mathbb{Z}_+\} \in \boldsymbol{l}^2$, соответственно, суть последовательности коэффициентов Фурье для $f, g \in \boldsymbol{L}^2(E)$ и $\gamma, \delta \in \mathbb{R}$, то сумме $\gamma f + \delta g$ соответствует сумма $\delta\alpha + \delta\beta = \{\delta\alpha_n + \delta\beta_n : n \in \mathbb{Z}_+\}$.

Определение 1.14. При наличии взаимно однозначного отображения одного нормированного пространства на другое, сохраняющего норму и обладающего отмеченным выше свойством ($\star$), говорят, что эти пространства *алгебраически изоморфны и изометричны.* [18]

---

[17] Определение и общая схема построения меры даются в базовых курсах Теории функций вещественной переменной или Функционального анализа.

[18] По поводу изометрического изоморфизма, сохраняющего скалярное произведение вместе с его свойствами (i)–(iii) из Определения А.2, см. также Пример А.1(ii).

1.2 Ортогональная проекция

Понятие внутреннего (скалярного) произведения дает нам абстрактную формулировку концепции угла, и как результат, мы можем дать обобщенное понятие перепендикулярности.

Определение 1.15. Векторы $x, y \in \mathbb{H}$ называются *ортогональными*, если $(x, y) = 0$, и мы пишем $x \perp y$. Если $\boldsymbol{S} \subset \mathbb{H}$ есть любое подмножество (и, в особенности, если $\boldsymbol{S}$ есть подпространство) в $\mathbb{H}$, тогда мы пишем $x \perp \boldsymbol{S}$, если $\forall s \in \boldsymbol{S} \ (x \perp s)$. Подобно этому, обозначение $\boldsymbol{S} \perp \boldsymbol{T}$ для двух подмножеств $\boldsymbol{S}$ и $\boldsymbol{T}$ в $\mathbb{H}$, указывает, что все элементы подмножества $\boldsymbol{S}$ ортогональны всем элементам подмножества $\boldsymbol{T}$.

Определение 1.16. Предположим, в $\mathbb{H}$ существуют подпространства $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{B}$, такие что $\mathbb{H} = \mathfrak{A} + \mathfrak{B}$ в смысле, что для всякого $h \in \mathbb{H}$ найдутся $a \in \mathfrak{A}$ и $b \in \mathfrak{B}$, такие что $h = a + b$. Если $\mathfrak{A} \perp \mathfrak{B}$, тогда пишем $\mathbb{H} = \mathfrak{A} \oplus \mathfrak{B}$ и говорим, что $\mathbb{H}$ есть *прямая сумма* подпространств $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{B}$.

Сейчас мы приходим к главному результату геометрии гильбертовых пространств. Он называется Теоремой о проекции, и в случае конечномерных пространств (см. Разд. А.7) он просто устанавливает, что кратчайший путь от точки до плоскости лежит на перпендикуляре от этой точки до данной плоскости. Нижеследующая Теорема о проекции обобщает этот результат на гильбертовы пространства.

Теорема 1.3. *Теорема об ортогональной проекции.* Пусть $\mathfrak{L}$ есть собственное подпространство некоторого гильбертова пространства $\mathbb{H}$ и пусть x есть точка в $\mathbb{H}$. Тогда x может быть единственным образом представлено в форме

$$x = y + z$$

с $y \in \mathfrak{L}$ и $z \perp \mathfrak{L}$. Кроме того, для всех $w \in \mathfrak{L}$ имеем

$$\|x - w\| \geq \|x - y\|,$$

где равенство возможно, если и только если $w = y$ (Рис. А.1).

Доказательство. Для начала заметим, что $\inf_{w \in \mathfrak{L}} \|x - w\|$ должен быть положительным и, следовательно, существуют $w_1, w_2, \ldots$ такие, что

$$\|x - w_n\| \to h \triangleq \inf_{w \in \mathfrak{L}} \|x - w\| \geq 0 \quad \text{при } n \to \infty .$$

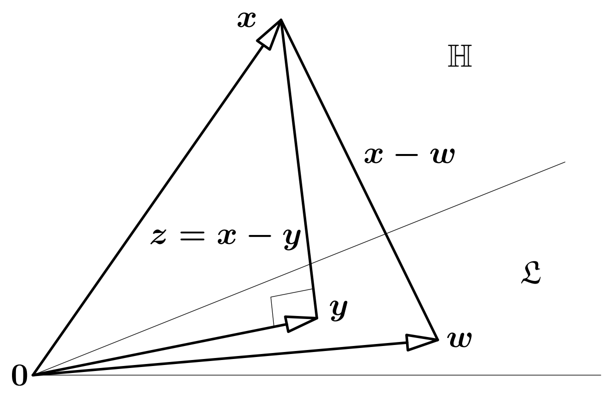


Рис. 1.1: Теорема об ортогональной проекции.

Из равенства параллелограмма имеем

$$\|w_m - w_n\|^2 + \|w_m + w_n - 2x\|^2 = 2\,\|w_m - x\|^2 + 2\,\|w_n - x\|^2\,,$$

и поскольку $\frac{1}{2}(w_m + w_n) \in \mathfrak{L}$, то

$$\|w_m + w_n - 2x\|^2 = 4\,\|\tfrac{1}{2}(w_m + w_n) - x\|^2 \geq 4h^2\,.$$

Следовательно, для произвольного $\varepsilon > 0$ и достаточно больших m, n получаем

$$\|w_m - w_n\|^2 < 2(h^2 + \varepsilon) + 2(h^2 + \varepsilon) - 4h^2 = 4\varepsilon\,.$$

Поэтому w_n сходится к некоторому пределу y, который вследствие замыкания подпространства $\mathfrak{L}$ лежит в $\mathfrak{L}$ и в силу непрерывности нормы $\|\cdot\| : \mathbb{H} \to \mathbb{R}$ обладает свойством

$$\|y - x\| = \inf_{w_n \in \mathfrak{L}} \|w_n - x\| = h\,.$$

Покажем, что $z \triangleq x - y \perp \mathfrak{L}$. Возьмем $w^\circ \in \mathfrak{L}$ с $\|w^\circ\| = 1$. Тогда любой вектор $w \in \mathfrak{L}$ имеет вид $w = \alpha w^\circ$, где $\alpha \in \mathbb{R}$ есть некоторая произвольная константа. Минимальное свойство вектора y влечет

$$\|z\|^2 = \|y - x\|^2 \leq \|y - \alpha w^\circ - x\|^2 = \|z - \alpha w^\circ\|^2 = (z - \alpha w^\circ, z - \alpha w^\circ)\,,$$

то есть,

$$\forall \alpha \in \mathbb{R} \quad \left(0 \le -\alpha(w^\circ, z) - \alpha(z, w^\circ) + |\alpha|^2 \right) .$$

Возьмем для α значение $\alpha = (z, w^\circ)$, тогда $0 \le -(z, w^\circ)^2$. Следовательно, $(z, w^\circ) = 0$, т. е., $z \perp w^\circ$ для любых $w^\circ \in \mathfrak{L}$ с $\|w^\circ\| = 1$. Отсюда, отношение ортогональности $z \perp w$ выполняется для всех $w \in \mathfrak{L}$, что означает $w \perp \mathfrak{L}$. Возьмем в $\mathfrak{L}$ вектор $y - w$ с произвольным $w \in \mathfrak{L}$, тогда из $x - y \perp y - w$ получаем по теореме Пифагора

$$\forall w \in \mathfrak{L} \quad \left(\|x - w\|^2 = \|x - y + y - w\|^2 = \|z\|^2 + \|y - w\|^2 \right) .$$

В результате

$$\forall w \in \mathfrak{L} \quad (\|x - w\| \ge \|x - y\|)$$

со знаком равенства только при $w = y$, что и требовалось.

Предположим, представление $x = y + z$ не является единственным, тогда $x = y + z = y' + z'$. Имеем

$$y - y' = z - z' , \quad y - y' \in \mathfrak{L} \quad \text{и} \quad z - z' \perp \mathfrak{L} ,$$

то есть, $y - y'$ лежит в $\mathfrak{L}$ в то время как $z - z'$ лежит в $\mathfrak{L}^\perp$, — ортогональном дополнении к нему. Но $\mathfrak{L} \cap \mathfrak{L}^\perp = \{0\}$, что дает $y - y' = 0$ и $z - z' = 0$ и устанавливает единственность данного представления. □

Определение 1.17. Пусть $\mathfrak{L}$ — подпространство в $\mathbb{H}$ и $x \in \mathbb{H}$. Единственный элемент $y \in \mathfrak{L}$, для которого $x = y + z$ с $z \perp \mathfrak{L}$, называется *ортогональной проекцией* вектора x на $\mathfrak{L}$. Он обозначается $(x \big| \mathfrak{L})$.

Замечание 1.4. Если $\mathfrak{L} \subset \mathbb{H}$ и $x \ne 0$, $x \notin \mathfrak{L}$, то $z \ne 0$, т. е., $x \ne y = (x \big| \mathfrak{L})$. Если же $\mathfrak{L} \subseteq \mathbb{H}$ (т. е., $\mathfrak{L}$ не является собственным подпространством в $\mathbb{H}$), мы просто получаем $z = 0$ и $x = (x \big| \mathfrak{L})$.

Теорема A.3 показывает, что ортогональная проекция вектора x на $\mathfrak{L}$ *характеризуется* тем свойством, что $\|x - w\|$ с $w \in \mathfrak{L}$ достигает минимума при $w = (x \big| \mathfrak{L})$.

1.3 Пространства случайных переменных

Этот раздел представляет некоторые основные положения теории вероятностей. Не предполагается, что по нему следует изучать теорию вероятностей; здесь дается только краткий выборочный перечень исходных определений, насколько эта терминология необходима для статистической интерпретации метода наименьших квадратов. Для изучения теории вероятностей рекомендуются другие источники, среди которых отметим [5, 12, 28, 29, 30, 40, 44, 45, 52, 55, 56], где можно найти также другие ссылки.

Определение 1.18. *Выборочное пространство* Ω есть некоторое непустое множество.

Определение 1.19. Некоторое семейство $\mathscr{S}$ подмножеств из Ω называется *полем* (на Ω) при следующих условиях:

(F1) $\Omega \in \mathscr{S}$.

(F2) Если $\boldsymbol{S} \in \mathscr{S}$, то $\boldsymbol{S}^{\mathrm{c}} \triangleq \Omega - \boldsymbol{S} \in \mathscr{S}$.

(F3) Если $\forall i = 1, \dots, n \quad (\boldsymbol{S}_i \in \mathscr{S})$, то $\bigcup_{i=1}^{n} \boldsymbol{S}_i \in \mathscr{S}$.

Некоторое поле называется σ*-полем*, если условие (F3) заменяется следующим более сильным условием:

(F4) Если $\forall i \in \mathbb{Z}_1 \triangleq \{1, 2, \dots\} \quad (\boldsymbol{S}_i \in \mathscr{S})$, то $\bigcup_{i=1}^{\infty} \boldsymbol{S}_i \in \mathscr{S}$. Члены семейства $\mathscr{S}$ называются *событиями* и пара $(\Omega, \mathscr{S})$ называется *измеримым пространством.*

В силу аксиомы (F2), для поля имеем: $\forall i = 1, \dots, n \quad (\boldsymbol{S}_i \in \mathscr{S})$ влечет $\bigcap_{i=1}^{n} \boldsymbol{S}_i \in \mathscr{S}$; соответственно, для σ-поля имеем $\bigcap_{i=1}^{\infty} \boldsymbol{S}_i \in \mathscr{S}$. Ясно, что как для поля, так и для σ-поля пустое множество $\varnothing$ есть элемент семейства $\mathscr{S}$.

Теорема 1.4. Если $\mathscr{S}_0$ есть некоторое семейство подмножеств на Ω, тогда существует единственным образом определяемое σ-поле $\mathscr{S}$ на Ω, которое является наименьшим σ-полем, содержащим $\mathscr{S}_0$, в том смысле, что

(i) $\mathscr{S}_0 \subset \mathscr{S}$.

(ii) Если $\mathscr{S}_1$ есть σ-поле на Ω и если $\mathscr{S}_0 \subset \mathscr{S}_1$, то $\mathscr{S} \subset \mathscr{S}_1$.

Определение 1.20. σ-поле $\mathscr{S}$, указанное в Теореме А.4, называется σ*-полем, порожденным семейством* $\mathscr{S}_0$, и обозначается $\mathscr{B}(\mathscr{S}_0)$. Кроме того, наименьшее σ-поле, содержащее два σ-поля $\mathscr{A}$ и $\mathscr{B}$, обозначается $\mathscr{A} \otimes \mathscr{B}$.

Если $\mathscr{S}_0$ есть некоторая топология, тогда $\mathscr{B}(\mathscr{S}_0)$ часто называется *полем борелевских множеств* на Ω и $(\Omega, \mathscr{B}(\mathscr{S}_0))$ называется *борелевским пространством.*

Определение 1.21. Пусть Ω — некоторое выборочное пространство и $\mathscr{S}$ есть σ-поле на Ω. *Вероятностная мера* P (на Ω) есть вещественнозначная функция множества $\mathscr{S} \to \mathbb{R}^1$, такая что:

(P1) $\forall\, \boldsymbol{S} \in \mathscr{S} \quad (P(\boldsymbol{S}) \geq 0)$.

(P2) Если $\{\boldsymbol{S}_i; i \in \mathbb{Z}_1\}$ есть совокупность непересекающихся множеств в $\mathscr{S}$, то есть, $\boldsymbol{S}_i \cap \boldsymbol{S}_j = \varnothing$, когда $i \neq j$, то

$$P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} \boldsymbol{S}_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(\boldsymbol{S}_i) \ .$$

(P3) $P(\Omega) = 1$.

Пусть $\boldsymbol{S}_n \uparrow \boldsymbol{S}$ при $n \to \infty$ обозначает

$$\forall\, n_1 \leq n_2,\ \ n_1, n_2 \in \mathbb{Z}_1 \quad (\boldsymbol{S}_{n_1} \subset \boldsymbol{S}_{n_2} \subset \boldsymbol{S}) \quad \text{и} \quad \bigcup_{n \in \mathbb{Z}_1} \boldsymbol{S}_n = \boldsymbol{S} \ ;$$

аналогично, пусть $\boldsymbol{S}_n \downarrow \boldsymbol{S}$ при $n \to \infty$ обозначает

$$\forall\, n_1 \leq n_2,\ \ n_1, n_2 \in \mathbb{Z}_1 \quad (\boldsymbol{S}_{n_1} \supset \boldsymbol{S}_{n_2} \supset \boldsymbol{S}) \quad \text{и} \quad \bigcap_{n \in \mathbb{Z}_1} \boldsymbol{S}_n = \boldsymbol{S} \ .$$

Тогда аксиомы (P1)–(P3) влекут выполнение следующих свойств:

(i) $\forall\, \boldsymbol{S} \in \mathscr{S} \quad (P(\boldsymbol{S}) \leq 1)$.

(ii) $P(\varnothing) = 0$.

(iii) $\forall\, \boldsymbol{S} \in \mathscr{S} \quad (P(\boldsymbol{S}^{\mathrm{c}}) = 1 - P(\boldsymbol{S}))$.

(iv) $\forall\, \boldsymbol{S}, \boldsymbol{T} \in \mathscr{S} \quad (P(\boldsymbol{S} \cup \boldsymbol{T}) + P(\boldsymbol{S} \cap \boldsymbol{T}) = P(\boldsymbol{S}) + P(\boldsymbol{T}))$.

(v) $\boldsymbol{S} \subset \boldsymbol{T} \Rightarrow P(\boldsymbol{S}) = P(\boldsymbol{T}) - P(\boldsymbol{T} - \boldsymbol{S}) \leq P(\boldsymbol{T})$, где $\boldsymbol{T} - \boldsymbol{S} \triangleq \boldsymbol{T} \cap \boldsymbol{S}^{\mathrm{c}}$.

(vi) Свойство монотонности:

$$\boldsymbol{S}_n \uparrow \boldsymbol{S} \ \text{при} \ n \to \infty \quad \Rightarrow \quad P(\boldsymbol{S}_n) \to P(\boldsymbol{S}) \ \text{при} \ n \to \infty \ .$$

(vii) Неравенство Буля:

$$P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} \boldsymbol{S}_i\right) \le \sum_{i=1}^{\infty} P(\boldsymbol{S}_i)\ .$$

Свойство (vi) подразумевает *аксиому непрерывности:* P непрерывна везде и, в частности, непрерывна сверху на пустом множестве, то есть,

$$\boldsymbol{S}_n \downarrow \varnothing \text{ при } n \to \infty \quad \Rightarrow \quad P(\boldsymbol{S}_n) \to 0 \text{ при } n \to \infty\ .$$

Аксиома (P2) называется *аксиомой счетной аддитивности*; для случая конечной совокупности она называется *аксиомой конечной аддитивности.*

Теорема 1.5. Аксиомы конечной аддитивности и непрерывности меры P вместе эквивалентны аксиоме счетной аддитивности.

Определение 1.22. Некоторое *вероятностное пространство* есть тройка $(\Omega, \mathscr{S}, P)$, где $\mathscr{S}$ есть σ-поле подмножеств непустого выборочного пространства Ω и P есть вероятностная мера на Ω.

1.4 Конечномерные линейные пространства

Множество $\mathfrak{L}$ в $\mathbb{R}^n$ $(\mathfrak{L} \subseteq \mathbb{R}^n)$ называется *линейным подпространством* пространства $\mathbb{R}^n$ всех вещественных n-*мерных* [19] векторов, или, короче, подпространством в $\mathbb{R}^n$, если при любых скалярных величинах α и β принадлежность $x \in \mathfrak{L}$ и $y \in \mathfrak{L}$ влечет принадлежность $\alpha x + \beta y \in \mathfrak{L}$. Это выражается следующей ЛПФ: [20]

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}^1\ \left((x \in \mathfrak{L}\ \&\ y \in \mathfrak{L}) \Rightarrow (\alpha x + \beta y \in \mathfrak{L})\right)\ .$$

Линейная независимость системы $\{a^1, \ldots, a^m\} \in \mathbb{R}^n$ означает, что справедлива импликация

$$\left(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i a^i = 0\right) \Rightarrow \left(\overset{m}{\underset{i=1}{\forall}} \lambda_i = 0\right)\ ,$$

[19] n-мерный вектор содержит n-компонент.

[20] Импликация $\mathfrak{A} \Rightarrow \mathfrak{B}$ означает: «*из* $\mathfrak{A}$ *следует* $\mathfrak{B}$», или «$\mathfrak{A}$ *влечет* $\mathfrak{B}$», или «если $\mathfrak{A}$, *то* $\mathfrak{B}$».

в противном случае система называется *линейно зависимой*.

Подпространство $\mathfrak{L} \subseteq \mathbb{R}^n$ называется m-мерным, т. е. имеющим размерность $\dim \mathfrak{L} = m$, если в нем имеется такая линейно независимая система векторов $\{a^1, \ldots, a^m\}$, что добавление к этой системе любого вектора $a \in \mathbb{R}^n$ дает уже линейно зависимую систему, содержащую $m+1$ векторов. [21] Это выражается следующей ЛПФ:

$$\left(\exists \{a^1, \ldots, a^m\} \in \mathfrak{L} \left(\left(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i a^i = 0 \right) \Rightarrow \left(\mathop{\forall}_{i=1}^{m} \lambda_i = 0 \right) \right) \right) \ \& $$
$$\& \ \left(\forall a \in \mathfrak{L} \left(\left(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i a^i + \lambda_{i+1} a = 0 \right) \ \& \ (\lambda_{i+1} \neq 0) \right) \right).$$

Так как $\lambda_{m+1} \neq 0$, то

$$a = \sum_{i=1}^{m} \mu_i a^i, \quad \mu_i = -\lambda_i / \lambda_{m+1}.$$

Следовательно, любой вектор $a \in \mathfrak{L}$, где $\dim \mathfrak{L} = m$, может быть представлен в виде линейной комбинации векторов $\{a^1, \ldots, a^m\}$. Система векторов $\{a^1, \ldots, a^m\}$, обладающая этим свойством, образует *базис* в $\mathfrak{L}$. В этом случае записывают $\mathfrak{L} = \mathfrak{L}(a^1, \ldots, a^m)$ и говорят, что $\mathfrak{L}$ *натянуто на* $\{a^1, \ldots, a^m\}$. Если каждый вектор из $\mathfrak{L}$ может быть выражен линейной комбинацией системы векторов $a^1, \ldots, a^m$, то $\mathfrak{L}$ называют *линейной оболочкой* векторов $\{a^1, \ldots, a^m\}$.

Множество $\mathfrak{L}_0$, состоящее из одного нулевого вектора 0, является подпространством в $\mathbb{R}^n$ размерности 0 и называется *нулевым подпростанством.*

n-мерное евклидово пространство $\mathbb{E}^n$ — это пространство $\mathbb{R}^n$, в котором определено скалярное произведение двух векторов x и y по формуле $(x, y) = x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n = x^T y$. [22] *Норма* $\|x\|$ *вектора* $x \in \mathbb{E}^n$ равна $(x, x)^{1/2}$, то есть $\|x\|^2 = x^T x$. *Расстояние* между $x, y \in \mathbb{E}^n$ есть $\|x - y\|$. Векторы x и y *ортогональны*, $x \perp y$, если их скалярное произведение равно нулю: $(x, y) = x^T y = 0$. Вектор $v \in \mathbb{R}^n$ ортогонален к

---

[21] Такая система $\{a^1, \ldots, a^m\}$ называется *максимальной* линейно независимой системой.

[22] Везде, где не оговорено противное, в этой книге рассматривается пространство вещественных чисел и, кроме того, любой вектор ассоциируется с матрицей-столбцом.

$\mathfrak{L}$, $v \perp \mathfrak{L}$, если он ортогонален к любому вектору $u \in \mathfrak{L}$. *Ортогональное дополнение к* $\mathfrak{L}$, обозначаемое $\mathfrak{L}^{\perp}$, есть множество всех векторов в $\mathbb{R}^n$, каждый из которых ортогонален к $\mathfrak{L}$.

Теорема 1.6. Пусть $\mathfrak{L}_0 \subset \mathfrak{L} \subset \mathbb{R}^n$. Тогда:

(1) существуют целое число m, $1 \le m < n$, и ортонормированный базис $\{a^1, \ldots, a^m\}$ в $\mathfrak{L}$. Если этот базис продолжить любым способом до ортонормированного базиса

$$a^1, \ldots, a^m, a^{m+1}, \ldots, a^n \tag{1.2}$$

в $\mathbb{R}^n$, то линейное подпространство $\mathfrak{M}$ с базисом $a^{m+1}, \ldots, a^n$ обладает свойствами:

(2) $\mathfrak{M} = \mathfrak{L}^{\perp}$,

(3) $\mathfrak{L} = \mathfrak{M}^{\perp}$,

(4) для любого вектора $x \in \mathbb{R}^n$ существует единственное разложение

$$x = \hat{x} + \tilde{x}, \tag{1.3}$$

где $\hat{x} \in \mathfrak{L}$, $\tilde{x} \in \mathfrak{M}$.

Доказательство.

(1) Так как $\mathfrak{L}$ отлично от нулевого подпространства, $\mathfrak{L} \supset \mathfrak{L}_0$, то в нем существует вектор a, отличный от 0. Образуем нормальный (т. е. с единичной нормой) вектор $a^1 = a/\|a\|$. Если в $\mathfrak{L}$ найдется вектор, ортогональный к a^1, нормируем его аналогично и обозначим a^2. Если найдется вектор, ортогональный к a^1 и к a^2, нормируем его и обозначим a^3. Продолжая этот процесс, завершим его построением *ортонормированной системы векторов* $\{a^1, \ldots, a^m\}$, где $m \ge 1$ и $m < n$. Действительно, $a^1 \in \mathfrak{L}$, но m не может быть равно n. В противном случае векторы $\{a^1, \ldots, a^n\}$ образовали бы базис в $\mathfrak{L}$ (так как ортонормированные векторы линейно независимы), что означало бы $\mathfrak{L} = \mathbb{R}^n$. Однако по условию $\mathfrak{L}$ не совпадает с $\mathbb{R}^n$ ($\mathfrak{L} \subset \mathbb{R}^n$), поэтому $m < n$.

Построенная система $\{a^1, \ldots, a^m\}$ есть базис в $\mathfrak{L}$. Действительно, вместе с векторами $\{a^1, \ldots, a^m\}$ к $\mathfrak{L}$ принадлежат и все их линейные комбинации, то есть векторы вида

$$u = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a^i, \quad \lambda_i = (u, a^i) . \tag{1.4}$$

Однако кроме них, других векторов в $\mathfrak{L}$ нет. Допустив противное, следовало бы считать, что и векторы вида

$$x = \sum_{i=1}^{m} (x, a^i)\ a^i + y , \tag{1.5}$$

где $y \neq 0$, входят в $\mathfrak{L}$, $x \in \mathfrak{L}$. А так как все $a^i \in \mathfrak{L}$, то и вектор

$$y = x - \sum_{i=1}^{m} (x, a^i)\ a^i$$

следовало бы включить в $\mathfrak{L}$. Но для всех $k = 1, \ldots, m$ имеем

$$(y, a^k) = (x, a^k) - \sum_{i=1}^{m} (x, a^i)(a^i, a^k) = 0 , \tag{1.6}$$

то есть $\forall k = 1, \ldots, m \quad (y \perp a^k)$. Пронормированный вектор $y/\|y\|$ мог бы стать тем a^{m+1}, который расширил бы систему $\{a^1, \ldots, a^m\}$ до системы $\{a^1, \ldots, a^m, a^{m+1}\}$. Однако это невозможно из-за доказанного ограничения для числа m. Тем самым утверждение (1) теоремы доказано.

(2) Поскольку $m < n$, в $\mathbb{R}^n$ существует вектор x, не зависящий линейно от $\{a^1, \ldots, a^m\}$, то есть выражаемый равенством (A.5), в котором $y \neq 0$, $y \in \mathbb{R}^n$. Так как для y справедливо (A.6), построение базиса в $\mathbb{R}^n$ можно продолжить, как только что указано, до (A.2). Но любой вектор $v \in \mathfrak{M}$ определяется, подобно (A.4), в виде

$$v = \sum_{i=m+1}^{n} \lambda_i a^i, \quad \lambda_i = (v, a^i) . \tag{1.7}$$

Очевидно, что $v \perp u$, и если известно, что какой-нибудь вектор $a \in \mathbb{R}^n$ ортогонален ко всем векторам из $\mathfrak{L}$, $a \perp \mathfrak{L}$, то $a \in \mathfrak{M}$. Тем самым доказано утверждение (2) теоремы.

(3) Имеем $u \perp v$. Если для какого-нибудь вектора $a \in \mathbb{R}^n$ известно, что $a \perp \mathfrak{M}$, то $a \in \mathfrak{L}$. Доказано утверждение (3) теоремы.

(4) Наконец, если x – произвольный вектор в $\mathbb{R}^n$, то его единственно его представление

$$x = \sum_{i=1}^{n} \mu_i a^i ,$$

так как единственным образом определяются числа $\mu_i = (x, a^i) = x^T a^i$, называемые *числовыми проекциями вектора* x на направление единичного вектора a^i. Отсюда единственно разложение (A.3), причем

$$\hat{x} = \sum_{k=1}^{m} \mu_i a^i \in \mathfrak{L}, \quad \tilde{x} = \sum_{k=m+1}^{n} \mu_i a^i \in \mathfrak{M} .$$

□

Эта теорема для последующего материала является важнейшей. Ее называют также теоремой об ортогональном разложении пространства $\mathbb{R}^n$ и формулируют следующим образом [?].

Теорема 1.7. Если оба $\mathfrak{L}$ и $\mathfrak{M} \in \mathbb{R}^n$ и выполнено хотя бы одно из следующих условий:

(1) $\mathfrak{L} = \mathfrak{M}^\perp$ ($\mathfrak{L}$ состоит из векторов, ортогональных к $\mathfrak{M}$),

(2) $\mathfrak{M} = \mathfrak{L}^\perp$ ($\mathfrak{M}$ состоит из векторов, ортогональных к $\mathfrak{L}$),

(3) $\mathfrak{L}$ *и* $\mathfrak{M}$ взаимно ортогональны и $\dim \mathfrak{L} + \dim \mathfrak{M} = n$,

то $\mathfrak{L}$ *и* $\mathfrak{M}$ являются ортогональными дополнениями друг к другу. Если выполняется хотя бы одно из этих трех эквивалентных условий, то любой вектор $x \in \mathbb{R}^n$ может быть разложен единственным образом в сумму $x = \hat{x} + \tilde{x}$, где $\hat{x} \in \mathfrak{L}$, $\tilde{x} \in \mathfrak{M}$. Составляющие этого разложения $\hat{x}$ и $\tilde{x}$ являются проекциями вектора x на подпространства $\mathfrak{L}$ и $\mathfrak{M}$, соответственно, и они взаимно ортогональны, т. е. $\tilde{x}^T \hat{x} = 0$.

Доказательство. Все, что есть в этой формулировке, уже доказано в Теореме 1.1, кроме последнего утверждения о проекциях вектора x. Чтобы доказать и это, напомним, что *проекцией вектора* x *на подпространство* $\mathfrak{L}$ называется вектор из $\mathfrak{L}$, ближайший к вектору x.

Для любого $y \in \mathfrak{L}$ имеем

$$\|x - y\|^2 = \|\hat{x} + \tilde{x} - y\|^2 = \|(\hat{x} - y) + \tilde{x}\|^2 = \|\hat{x} - y\|^2 + \|\tilde{x}\|^2,$$

так как $\hat{x} - y \in \mathfrak{L}$ и $(\hat{x} - y) \perp \tilde{x}$. Поэтому $\|x - y\|^2 \geq \|\tilde{x}\|^2$, и строгое неравенство выполняется, если и только если $y \neq \hat{x}$. Следовательно, $\hat{x}$ — проекция x на $\mathfrak{L}$. □

Замечание 1.5. Проекцию $\hat{x}$ вектора x на подпространство $\mathfrak{L}$ будем обозначать следующим образом: $\hat{x} = (x \mid \mathfrak{L})$.

На основании Теоремы А.7 может быть построено доказательство следующего утверждения, в котором используется понятие *ранга* матрицы A, а именно: $\operatorname{rank} A$ равен максимальному числу строк (или столбцов) матрицы A, образующих линейно независимую систему.

Теорема 1.8. *(Основная теорема линейной алгебры).* С любой $n \times m$-матрицей A, имеющей $\operatorname{rank} A = r$, ассоциированы четыре фундаментальных подпространства:

(1) $\mathfrak{R}(A^T)$ — пространство строк матрицы A, его размерность r,

(2) $\mathfrak{N}(A)$ — нуль-пространство, т. е., ядро матрицы A, его размерность $m - r$,

(3) $\mathfrak{R}(A)$ — пространство столбцов, т. е., образ матрицы A, его размерность r, и

(4) $\mathfrak{N}(A^T)$ — левое нуль-пространство матрицы A, его размерность $n - r$,

при этом

$$\mathfrak{N}(A) = (\mathfrak{R}(A^T))^{\perp}, \qquad \mathfrak{R}(A^T) = (\mathfrak{N}(A))^{\perp},$$
$$\mathfrak{N}(A^T) = (\mathfrak{R}(A))^{\perp}, \qquad \mathfrak{R}(A) = (\mathfrak{N}(A^T))^{\perp}.$$

Последнее означает, что система $Ax = z$ имеет решение тогда и только тогда, когда вектор $z \perp \mathfrak{N}(A^T)$, то есть $z \in \mathfrak{R}(A)$ тогда и только тогда, когда z ортогонален к каждому решению системы $A^T y = 0$.

Базовые понятия, отмеченные в этой теореме, широко используются в дальнейшем.

Определение 1.23. Квадратная матрица P называется *матрицей проектирования* или *проектором* на $\mathfrak{L}$, если $(x - Px) \perp \mathfrak{L}$, т. е. для всех $x \in \mathbb{R}^n$ проекция $\hat{x} = Px$.

Теорема 1.9.

(1) Проекционная матрица P обладает свойствами:

(i) $P^2 = P$ (идемпотентность),

(ii) $P = P^T$ (симметричность).

(2) Любая матрица P, обладающая этими свойствами, является проекционной матрицей, причем она проектирует любой вектор на свое пространство столбцов, $\mathfrak{R}(P)$.

(3) Если $\mathfrak{L} = \mathfrak{L}(a^1, \ldots, a^m)$, $a^i \in \mathbb{R}^n$ и $\{a^1, \ldots, a^m\}$ — базис в $\mathfrak{L}$, то $P = P_A = A(A^TA)^{-1}A^T$, где $A = [a^1 \mid \cdots \mid a^m]$ – матрица, столбцами которой служат векторы a^i $(i = 1, 2, \ldots, m)$.

Доказательство.

(1) *Свойство* (i). Определение проектора на $\mathfrak{L}$ означает, что

$$\forall x \quad (Px = \hat{x},\ \ x = \hat{x} + \tilde{x},\ \ \hat{x} \in \mathfrak{L},\ \ \tilde{x} \perp \mathfrak{L},\ \ P\tilde{x} = 0).$$

Отсюда

$$\forall x \quad (P^2x = P\hat{x} = P(x - \tilde{x}) = Px - P\tilde{x} = Px,\ \ (P^2 - P)x = 0).$$

Следовательно, $P^2 = P$.

Свойство (ii). Имеем $\forall x, y \quad (Px \in \mathfrak{L}, \quad (I - P)y \in \mathfrak{L}^{\perp})$. Отсюда $(Px)^T(I - P)y = 0$, $x^T(P^T - P^TP)y = 0$, $P^T = P^TP$, $P = (P^TP)^T = P^TP$. Следовательно, $P = P^T$.

(2) Пусть P — $n \times n$-матрица со свойствами (i) и (ii) из предыдущего пункта теоремы. Имеем $Px \in \mathfrak{R}(P)$. В то же время $\mathfrak{R}(P)$ есть множество векторов вида Py, где y – любой вектор из $\mathbb{R}^n$.

Найдем скалярное произведение

$$
\begin{aligned}
(x - Px)^T Py = x^T(I - P^T)Py = x^T(P - P^T P)y = \\
= x^T(P - P^2)y = x^T(P - P)y = 0\ .
\end{aligned}
$$

Следовательно, для любого $x \in \mathbb{R}^n$ произведение Px есть проекция вектора x на $\mathfrak{R}(P)$.

(3) Пусть $P = A(A^T A)^{-1} A^T$. Имеем $Px \in \mathfrak{L} = \mathfrak{R}(A)$. В то же время $\mathfrak{R}(A)$ есть множество векторов вида Ay, где y — любой вектор из $\mathbb{R}^n$. Найдем скалярное произведение

$$
\begin{aligned}
(Ay)^T(x - Px) = y^T A^T [I - A(A^T A)^{-1} A^T]x = \\
= y^T [A^T - A^T A(A^T A)^{-1} A^T]x = 0\ .
\end{aligned}
$$

Следовательно, $x - Px \perp \mathfrak{L}$ для всех $x \in \mathbb{R}^n$. □

В качестве простого следствия отсюда легко видеть, что проекция вектора x на $\mathfrak{L}(y)$ задается формулой $(x^T y)y/\|y\|^2$, если $y \neq 0$. Также в качестве следствия можно получить так называемую *теорему разложения Фурье* [**?**].

Теорема 1.10. Пусть $\mathfrak{L} = \mathfrak{L}(a^1, \ldots, a^m) \subset \mathbb{R}^n$ и $\{a^1, \ldots, a^m\}$ — ортонормированный базис в $\mathfrak{L}$. Тогда для произвольного $x \in \mathbb{R}^n$ проекция $\hat{x}$ на $\mathfrak{L}$ задается формулой

$$
\hat{x} = \left[\sum_{i=1}^{m} a^i (a^i)^T \right] x = AA^T x\ ,
$$

где $A = [a^1 \mid \ldots \mid a^m]$, т. е. $P = P_A = AA^T$, или же равносильной формулой

$$
\hat{x} = \sum_{i=1}^{m} (x^T a^i)\ a^i = \sum_{i=1}^{m} (x, a^i)\ a^i\ .
$$

Кроме того, легко видеть в качестве следствия Теоремы А.9, что если P есть проектор на $\mathfrak{L}$, то $(I - P)$ есть проектор на $\mathfrak{L}^\perp$, где $\mathfrak{L} = \mathfrak{R}(P)$ и $\mathfrak{L}^\perp = \mathfrak{N}(P^T)$.

Замечание 1.6. Теорема А.9 в пункте (3) определяет матрицу проектирования на пространство $\mathfrak{R}(A)$ столбцов данной $(n \times m)$-матрицы

A, когда $\operatorname{rank} A = m$. Эту матрицу удобно обозначить P_A. Теорема A.9 устанавливает, что в этом случае $P_A = A(A^T A)^{-1} A^T$, в то время как Теорема A.10 рассматривает частный, но для вычислений очень удобный подслучай, когда $A^T A = I$, при этом $P_A = AA^T$. Наиболее общий случай проектирования на $\Re(A)$, когда $(n \times m)$-матрица A произвольна и не ограничена условием $\operatorname{rank} A = m$, рассмотрен ниже (разд. A.5).

1.5 Наименьшие квадраты и псевдоинверсия

Линейная задача наименьших квадратов возникает из необходимости решать систему линейных алгебраических уравнений $Ax = z$ с произвольно заданными $(n \times m)$-матрицей A и правой частью $z \in \mathbb{R}^n$. При этом в силу произвольности A и z система может оказаться несовместной или же иметь одно или бесконечно много решений $x \in \mathbb{R}^m$. Решение *линейной* системы $Ax = z$ в смысле наименьших квадратов [23] определяют как вектор $\bar{x}$, доставляющий *наименьшее* значение *квадратическому* критерию качества

$$\mathcal{J}(x) = \|z - Ax\|^2 = (z - Ax)^T (z - Ax)\,. \tag{1.8}$$

Таким образом, [24]

$$\bar{x} \triangleq \arg \min_{x \in \mathbb{R}^m} (z - Ax)^T (z - Ax)\ .$$

Очевидно, данное определение эквивалентно соглашению принять в качестве МНК-решения любой вектор $\bar{x}$, если и только если $A\bar{x} = \hat{z}$, где $\hat{z}$ — проекция z на $\Re(A)$.

Теорема 1.11. МНК-решение $\bar{x}$ системы $Ax = z$, где $A = A(n, m)$, удовлетворяет системе *нормальных уравнений*:

$$A^T A\bar{x} = a^T z\ . \tag{1.9}$$

Это решение всегда существует, хотя может быть неединственным. Оно единственно тогда и только тогда, когда A имеет полный столбцовый ранг, $\operatorname{rank} A = m$.

[23] Иначе, *МНК-решение.*

[24] Символ $\triangleq$ обозначает «равно по определению».

Доказательство. По определению $\bar{x}$, имеем $A\bar{x} = \hat{z}$, $(z - \hat{z}) \perp Ac$, где c — любой вектор из $\mathbb{R}^m$. Это означает, что

$$\forall c \in \mathbb{R}^m, \quad (Ac)^T(z - \hat{z}) = c^T(A^T z - A^T A\bar{x}) = 0 .$$

Следовательно, $A^T z - a^T A\bar{x} = 0$, т. е. $\bar{x}$ удовлетворяет (A.9). Эта система всегда совместна, так как оба вектора $A^T z$ и $A^T(A\bar{x})$ принадлежат одному и тому пространству $\mathfrak{R}(A^T)$ при $\forall \bar{x} \in \mathbb{R}^m$. Для установления условия единственности решения $\bar{x}$ докажем промежуточный результат.

Лемма 1.1. Справедливы равенства:

$$\begin{array}{llll} (1) & \mathfrak{R}(A^T) = \mathfrak{R}(A^T A) & (2) & \mathfrak{R}(A) = \mathfrak{R}(AA^T) \\ (3) & \mathfrak{N}(A^T) = \mathfrak{N}(AA^T) & (4) & \mathfrak{N}(A) = \mathfrak{N}(A^T A) \end{array}$$

Доказательство. На основании соотношений подпространств из Теоремы (A.8), утверждение (1) Леммы A.1 эквивалентно утверждению (4); аналогично этому, утверждение (2) Леммы A.1 эквивалентно утверждению (3). Поэтому достаточно доказать утверждение (3) и утверждение (4). Чтобы доказать совпадение $\mathfrak{N}(A)$ с $\mathfrak{N}(A^T A)$, заметим, что $A^T Ax = 0$, если $Ax = 0$. В обратную сторону: если $A^T Ax = 0$, то $x^T A^T Ax = 0$, т. е. $\|Ax\|^2 = 0$, что влечет $Ax = 0$. Таким образом, $Ax = 0$ эквивалентно $A^T Ax = 0$, т. е. $\mathfrak{N}(A) = \mathfrak{N}(A^T A)$. Аналогично устанавливается утверждение (3). □

Завершая доказательство Теоремы A.11, используем из только что доказанной Леммы A.1 утверждение (1). Согласно этому утверждению, $\operatorname{rank} A = \operatorname{rank} A^T A$. По условию теоремы, $\operatorname{rank} A = m$. Отсюда, $(m \times m)$-матрица $A^T A$ системы (A.9) имеет полный ранг, т. е. $(A^T A)^{-1}$ существует. В этом случае имеем единственное МНК-решение $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T z$. Очевидно, это возможно только при $n \geq m$ (переопределенные системы $Ax = z$) и $\operatorname{rank} A = m$ (полный столбцовый ранг). В других случаях, а именно: (i) при $n \geq m$, но $\operatorname{rank} A = r < m$, или (ii) при $n < m$, — решение $\bar{x}$ не может быть единственным.

□

Каким образом в случае неединственности $\bar{x}$ выбрать среди $\bar{x}$ единственный вектор $\bar{x}_0$, в некотором смысле оптимальный?

Определение 1.24. Оптимальным МНК-решением, или иначе — *нормальным псевдорешением* системы $Ax = z$, называется вектор $\bar{x}_0$, который имеет минимальную (евклидову) норму среди всех $\bar{x}$, удовлетворяющих системе $A\bar{x} = \hat{z}$, $\hat{z} \in \mathfrak{R}(A)$, $(z - \hat{z}) \perp \mathfrak{R}(A)$.

Замечание 1.7. Пусть $\operatorname{rank} A = m$, когда в согласии с Теоремой (A.11) имеем единственное $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T z$, оно же $\bar{x}_0$. Если теперь записать $\bar{x}_0 = A^+ z$, где A^+ — некоторая матрица, то для этого случая она определяется как $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$. Эта формула (при условии $\operatorname{rank} A = m$) включает в себя наиболее простой случай, когда $n = m$. Тогда A^{-1} существует, $A^+ = A^{-1}$ и $\bar{x}_0 = A^{-1} z$, что совпадает с обычным решением системы $Ax = z$, которая при этих условиях есть стандартная совместная система с квадратной матрицей A. Таким образом, матрица A^+ обобщает понятие обратной матрицы A^{-1} на случай, когда матрица A в системе $Ax = z$ произвольна по своим размерам и рангу. В связи с этим она названа *псевдообратной* матрицей A^+ к $n \times m$-матрице A; при $\operatorname{rank} A = m$ она, как выше отмечено, равна $(A^T A)^{-1} A^T$, но перейдем к общему случаю.

Определение 1.25. *Псевдообратная матрица* (в общем случае произвольной матрицы A) есть такая матрица A^+, которая из всех решений $\bar{x}$ системы $A\bar{x} = \hat{z}$, где $\hat{z} \in \mathfrak{R}(A)$ и $(z - \hat{z}) \perp \mathfrak{R}(A)$ при произвольном векторе z, выбирает $\bar{x}_0$ с минимальной нормой, определяя его как $\bar{x}_0 = A^+ z$.

Следствие 1.1. *Проектор на* $\mathfrak{R}(A) = \mathfrak{L}(a^1, \ldots, a^m)$, где векторы $a^1, \ldots, a^m \in \mathbb{R}^n$ суть все столбцы матрицы A, не обязательно образующие линейно независимую систему векторов, определяется выражением $P_A = AA^+$. Соответственно, $(I - AA^+)$ — *проектор на* $\mathfrak{N}(A^T) = \mathfrak{R}(A)^\perp$.

Действительно, проекция любого вектора z на $\mathfrak{R}(A)$ равна $\hat{z} = A\bar{x}_0 = (AA^+)z = P_A z$, а $\tilde{z} = z - \hat{z} = (I - P_A)z$. □

То, что $\bar{x}_0$ (а значит, и A^+) существует, ясно из Теоремы A.11. Однако, единствен ли вектор $\bar{x}_0$? В каком подпространстве и как его найти? Ответить на эти вопросы означает, по существу, выяснить все о псевдообратной матрице A^+, поскольку приведенное для нее Определение A.25 ее конструктивно не характеризует.

Теорема 1.12. Пусть $x \in \mathbb{R}^n$ и A — матрица размера $n \times m$. Среди всех векторов $\bar{x}$, минимизирующих $\|z - Ax\|^2$, то есть удовлетворяющих уравнению

$$A\bar{x} = \hat{z} , \quad \hat{z} \in \mathfrak{R}(A) , \quad (z - \hat{z}) \perp \mathfrak{R}(A) , \tag{1.10}$$

или, что эквивалентно, системе нормальных уравнений $A^T A\bar{x} = A^T z$, вектор $\bar{x}_0$, имеющий минимальную норму, является единственым вектором из $\mathfrak{R}(A^T)$, то есть вектором вида

$$\bar{x}_0 = A^T y , \quad y \in \mathbb{R}^n .$$

Доказательство. Каждый вектор $\bar{x}$, согласно Теореме A.6 (или Теоремам A.7, A.8), может быть разложен в сумму

$$\bar{x} = \bar{x}_{\mathrm{r}} + \bar{x}_{\mathrm{n}} , \quad \bar{x}_{\mathrm{r}} \in \mathfrak{R}(A^T) , \quad \bar{x}_{\mathrm{n}} \in \mathfrak{N}(A) , \quad \bar{x}_{\mathrm{r}} \perp \bar{x}_{\mathrm{n}} .$$

Поэтому (теорема Пифагора)

$$\|\bar{x}\|^2 = \|\bar{x}_{\mathrm{r}}\|^2 + \|\bar{x}_{\mathrm{n}}\|^2 \geq \|\bar{x}_{\mathrm{r}}\|^2 .$$

Компонента $\bar{x}_{\mathrm{r}}$ сама является решением уравнения $A\bar{x}_{\mathrm{r}} = \hat{z}$, так как $A\bar{x}_{\mathrm{n}} = 0$ по определению нуль-пространства $\mathfrak{N}(A)$. Все $\bar{x}$ отличаются от $\bar{x}_{\mathrm{r}}$ добавлением всевозможных ортогональных компонент $\bar{x}_{\mathrm{n}}$, причем $\|\bar{x}\| > \|\bar{x}_{\mathrm{r}}\|$ при единственном условии: $\|\bar{x}_{\mathrm{n}}\| \neq 0$. Наименьшее значение $\|\bar{x}\| = \|\bar{x}_{\mathrm{r}}\|$ требует равенства $\|\bar{x}_{\mathrm{n}}\| = 0$, т. е. достигается при единственном значении $\bar{x}_{\mathrm{n}} = 0$. Тем самым доказано, что $\bar{x}_0 = \bar{x}_{\mathrm{r}}$. Чтобы установить единственность вектора $\bar{x}_0 = \bar{x}_{\mathrm{r}}$ с минимальной нормой, предположим, что существуют два различных $\bar{x}_{\mathrm{r}}^1$ и $\bar{x}_{\mathrm{r}}^2$, оба из $\mathfrak{R}(A^T)$, такие что для них выполняется (A.10):

$$A\bar{x}_{\mathrm{r}}^1 = \hat{z} , \quad A\bar{x}_{\mathrm{r}}^2 = \hat{z} .$$

Тогда, очевидно, $A(\bar{x}_{\mathrm{r}}^1 - \bar{x}_{\mathrm{r}}^2) = 0$, так что $(\bar{x}_{\mathrm{r}}^1 - \bar{x}_{\mathrm{r}}^2) \in \mathfrak{N}(A) = (\mathfrak{R}(A^T))^{\perp}$. Оказалось, что вектор $(\bar{x}_{\mathrm{r}}^1 - \bar{x}_{\mathrm{r}}^2)$ ортогонален сам себе, $(\bar{x}_{\mathrm{r}}^1 - \bar{x}_{\mathrm{r}}^2)^T(\bar{x}_{\mathrm{r}}^1 - \bar{x}_{\mathrm{r}}^2) = \|\bar{x}_{\mathrm{r}}^1 - \bar{x}_{\mathrm{r}}^2\|^2 = 0$, и тем самым $\bar{x}_{\mathrm{r}}^1 = \bar{x}_{\mathrm{r}}^2$.

□

Замечание 1.8. Теорема A.12 устанавливает, что при любом $z \in \mathbb{R}^n$ $\bar{x}_0$ может быть получен из любого вектора $y \in \mathbb{R}^n$, найденного как решение совместной системы $A^T A(A^T y) = A^T z$, по формуле $\bar{x}_0 = A^T y$.

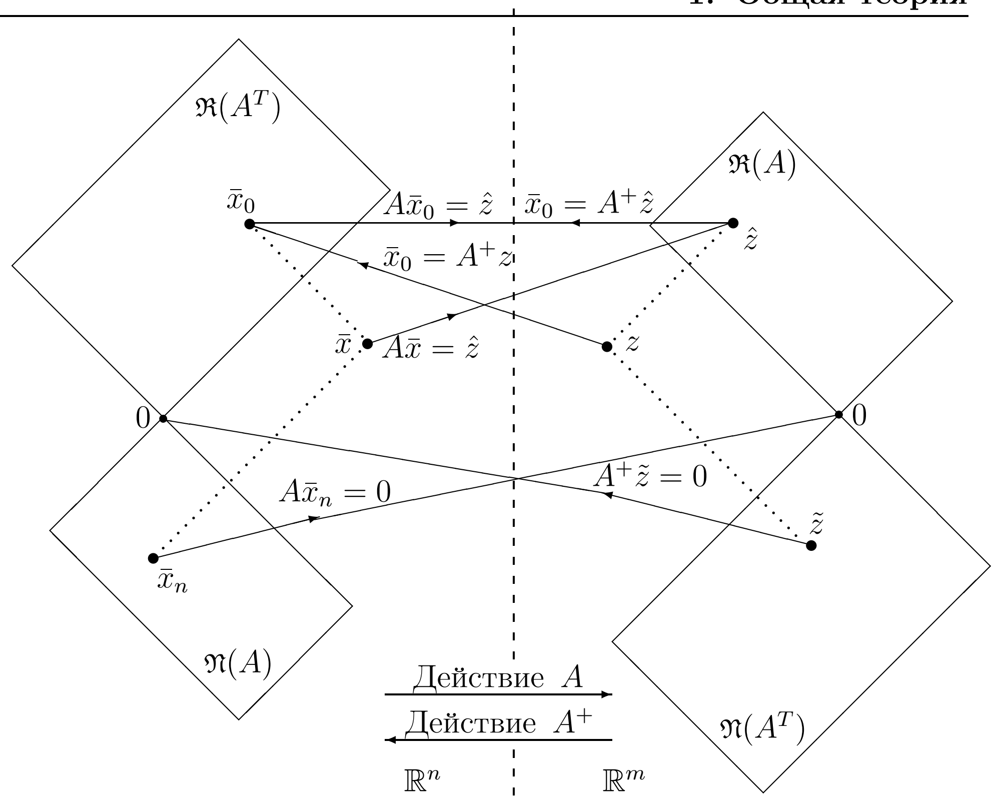


Рис. 1.2: Матрица A и ее псевдообратная A^+

1.6 Отыскание псевдообратной матрицы

Переформулируем Определение A.25 псевдообратной матрицы.

Определение 1.26. Псевдообратная матрица A^+ к матрице A есть такая матрица, что $\forall z \;\; (\exists \bar{x}_0 \;\; (\bar{x}_0 = A^+z))$, для которого

(1) $A\bar{x}_0 = \hat{z}$, где $\hat{z}$ — проекция вектора z на $\Re(A)$: $z - \hat{z} \perp \Re(A)$;

(2) $\bar{x}_0 \in \Re(A^T)$.

Пример 1.4.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathfrak{R}(A) = \mathfrak{R}(A^T) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 0 \end{pmatrix} = x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = x_1 e_1 + x_2 e_2$$

$$\mathfrak{R}(A) \;\; = \mathfrak{L}(e_1, e_2)$$

$$\mathfrak{R}(A^T) = \mathfrak{L}(e_1, e_2)$$

$$\mathfrak{N}(A) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ x_3 \end{pmatrix} = x_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \mathfrak{N}(A) = \mathfrak{L}(e_3); \quad \mathfrak{N}(A) \perp \mathfrak{R}(A^T).$$

1° Проектируем $z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}$ на $\mathfrak{R}(A)$. Находим $\hat{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ 0 \end{pmatrix}$.

2° Решаем систему $A\bar{x} = \hat{z}$. Имеем $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \bar{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \bar{x} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \bar{x}_3 \end{pmatrix} \begin{matrix} \left.\begin{matrix} \\ \\ \end{matrix}\right\} \leftarrow \text{фиксированы,} \\ \leftarrow \text{произвольный.} \end{matrix}$$

3° Выбираем из $\bar{x}$ тот $\bar{x}_0 = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ 0 \end{pmatrix}$, который имеет минимальную норму. Видно, что $\bar{x}_0 \in \mathfrak{R}(A^T)$, так как $\bar{x}_0 = z_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + z_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} =$
$= z_1 e_1 + z_2 e_2$.

4° Находим A^+ такую, что $A^+ z = \bar{x}_0$:

$$\begin{pmatrix} & & \\ & A^+ & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad A^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Пример 1.5.

$$A = \begin{bmatrix} \mu_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \qquad \mu_1 > 0, \quad \mu_2 > 0.$$

$$\mathfrak{R}(A) = \mathfrak{L}(e_1, e_2) \subset \mathbb{R}^3 = \mathbb{E}(e_1, e_2, e_3).$$

1° Проектируем $z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}$ на $\Re(A) \implies z_3 = 0$. Имеем

$$\hat{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ 0 \end{pmatrix} = z_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + z_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = z_1 e_1 + z_2 e_2 \in \Re(A)\,.$$

2° Решаем систему $A\bar{x} = \hat{z}$: $\begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \bar{x}_3 \\ \bar{x}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$

$$\Rightarrow\ \bar{x} = \begin{pmatrix} z_1/\mu_1 \\ z_2/\mu_2 \\ \bar{x}_3 \\ \bar{x}_4 \end{pmatrix} \begin{matrix} \left.\begin{matrix} \\ \\ \end{matrix}\right\} \leftarrow \text{фиксированы,} \\ \left.\begin{matrix} \\ \\ \end{matrix}\right\} \leftarrow \text{произвольные.} \end{matrix}$$

3° Выбираем из $\bar{x}$ тот $\bar{x}_0 = \begin{pmatrix} z_1/\mu_1 \\ z_2/\mu_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, у которого $\|\bar{x}_0\| = \min\limits_{\bar{x}} \|\bar{x}\|$.

4° Находим A^+ такую, что $A^+ z = \bar{x}_0$:

$$\begin{pmatrix} & & \\ & A^+ & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1/\mu_1 \\ z_2/\mu_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad\Rightarrow\quad A^+ = \begin{pmatrix} \mu_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Пример 1.6. (обобщенный)
Рассмотрим класс матриц вида $\Sigma = \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \Sigma(m,n)$, где $D = \operatorname{diag}(\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_r)$. Имеем, на основании примеров А.4 и А.5, что всегда $\Sigma^+ = \begin{bmatrix} D^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \Sigma^+(n,m)$.

Теорема 1.13. (о сингулярном разложении матрицы $A = A(m,n)$). Для произвольной матрицы $A = A(m,n)$ ранга r существуют две ортогональные матрицы $Q_1 = Q_1(m,m)$ и $Q_2 = Q_2(n,n)$ и положительные действительные числа $\mu_1 \ge \mu_2 \ge \ldots \ge \mu_r > 0$, такие что:

1.

$$A = Q_1 \Sigma Q_2^T, \quad \Sigma = \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \Sigma(m,n), \quad D = \mathrm{diag}\ (\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_r), \tag{1.11}$$

причем $\mu_i^2 = \lambda_i$, где λ_i — собственные числа матрицы $A^T A$.

2. Для псевдообратной матрицы A^+ справедливо выражение

$$A^+ = Q_2 \Sigma^+ Q_1^T, \quad \Sigma^+ = \begin{bmatrix} D^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Определение 1.27. Числа μ_i называются сингулярными числами матрицы A, и разложением (A.11) называется сингулярным разложение матрицы A.

Доказательство.

1. Рассмотрим матрицу $A^T A$. Она — симметрическая или эрмитова (в комплексном случае). Если A — вещественная, то $A^T A$ — симметрическая, то есть она совпадает со своей транспонированной матрицей: $(A^T A)^T = A^T A$. Если A — комплексная, то $A^* A$ — эрмитова, то есть она совпадает со своей сопряженно-транспонированной: $(A^* A)^* = A^* A$. Фундаментальное свойство таких матриц заключается в следующем:

Только эрмитовы матрицы обладают одновременно:

- вещественными неотрицательными собственными числами,
- ортонормированными собственными векторами.

Имеем: матрица $A^T A$ $(n \times n)$ эрмитова.

Обозначим: $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ — набор собственных векторов в $\mathbb{R}^n$

$\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$ — набор соответствующих собственных чисел.

Имеем:

$$A^T A x_i = \lambda_i x_i, \qquad \begin{cases} x_i^T x_j = 1, & i = j \\ x_i^T x_j = 0, & i \neq j \end{cases}, \quad \text{где } i, j = 1, 2, \ldots, n.$$

Умножим скалярно на x_i:

$$x_i^T (A^T A) x_i = \lambda_i x_i^T x_i = \lambda_i \|x_i\|^2 = \lambda_i,$$

$$\|Ax_i\|^2 = \lambda_i \quad \Longrightarrow \quad \lambda_i \geq 0.$$

Пронумеруем λ_i так, чтобы $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_r > 0$, а остальные $\lambda_i = 0$, $i = r+1, r+2, \ldots, n$. Это возможно, так как $\operatorname{rank}(A^T A) = \operatorname{rank} A = r$.

Вычислим $\mu_i = \sqrt{\lambda_i}$ для $i = 1, 2, \ldots, r$. Заметим, что $\mu_i = \sqrt{\lambda_i} = 0$ для $i = r+1, r+2, \ldots, n$. Для μ_i, $i = 1, 2, \ldots, r$ снова запишем:

$$A^T A x_i = \lambda_i x_i \quad \Longrightarrow \quad x_i^T (A^T A) x_i = \lambda_i = \mu_i^2,$$

$$\frac{x_i^T A^T A x_i}{\mu_i^2} = 1, \qquad \frac{x_i^T A^T}{\mu_i} \cdot \frac{Ax_i}{\mu_i} = 1, \quad Ax_i \neq 0.$$

Обозначим $y_i = Ax_i/\mu_i$, $i = 1, 2, \ldots, r$. Тогда

$$y_i^T y_j = \frac{x_i^T A^T}{\mu_i} \cdot \frac{Ax_j}{\mu_j} = \frac{x_i^T A^T A x_j}{\mu_i \mu_j} = \frac{x_i^T \lambda_j x_j}{\mu_i \mu_j} = \begin{cases} 1, & i = j = 1, 2, \ldots, r, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Следовательно, $\{y_1, y_2, \ldots, y_r\}$ — ортонормированы в $\mathbb{R}^m$, так как $y_i \in \mathbb{R}^m$. Все y_i — линейные комбинации столбцов матрицы A: $y_i \in \Re(A)$. Они могут быть дополнены в $\mathbb{R}^m$ до полного ортонормированного базиса:

$$\{y_1, y_2, \ldots, y_r, y_{r+1}, \ldots, y_m\}.$$

Таким образом, имеем:

- в $\mathbb{R}^m$ — ортонормированный базис из векторов $\{y_1, y_2, \ldots, y_m\}$,
- в $\mathbb{R}^n$ — ортонормированную систему векторов $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$.

Соберем эти вектора в две матрицы:

$$Q_1 = [y_1, y_2, \ldots, y_m], \qquad Q_2 = [x_1, x_2, \ldots, x_n].$$

a) Имеем для $i = 1, 2, \ldots, r$:

$$y_i \mu_i = Ax_i, \qquad \mu_i > 0, \qquad Ax_i \neq 0. \tag{1.12}$$

b) Имеем для $i = r+1, r+2, \ldots, m$:

$$\|Ax_i\|^2 = \lambda_i = 0 \quad \Longrightarrow \quad Ax_i = 0.$$

Поэтому в записи

$$y_i \mu_i = Ax_i \ \text{ следует считать } \ \mu_i = 0, \ i = r+1, r+2, \ldots, m. \tag{1.13}$$

Это означает, что (A.12) и (A.13) равносильны записи:

$$\underbrace{[y_1, y_2, \ldots, y_m]}_{Q_1}\underbrace{\begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{\Sigma} = A\,\underbrace{[x_1, x_2, \ldots, x_n]}_{Q_2}$$

где $D = \operatorname{diag}(\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_r)$, то есть

$$Q_1\Sigma = AQ_2 \quad \text{или} \quad Q_1\Sigma Q_2^T = A \quad \text{или} \quad \Sigma = Q_1^T A Q_2.$$

Утверждение 1 теоремы доказано.

2. Умножение на ортогональную матрицу не изменяет евклидовой нормы вектора, поэтому имеем цепочку равенств:

$$\|Ax-b\|^2 = \|Q_1\Sigma Q_2^T x-b\|^2 = \|\Sigma Q_2^T x-Q_1^T b\|^2 = \|\Sigma y-Q_1^T b\|^2 = \|\Sigma y-c\|^2.$$

Введем новый вектор

$$y = Q_2^T x = Q_2^{-1} x.$$

Для него $\|y\| = \|x\|$, так как Q_2^T — ортогональная матрица.
Из цепочки равенств можно сделать следующий вывод: отыскание нормального псевдорешения системы $Ax = b$ эквивалентно отысканию нормального псевдорешения системы $\Sigma y = c$, где $c = Q_1^T b$.
Имеем эти нормальные псевдорешения: $\bar{y}_0$ и $\bar{x}_0$. Они равны:

$$\bar{y}_0 = \Sigma^+ c,$$
$$\bar{x}_0 = A^+ b.$$

В силу связи x и y имеем:

$$\bar{y}_0 = Q_2^T \bar{x}_0 \quad \Longrightarrow \quad \bar{x}_0 = Q_2 \bar{y}_0.$$

Поэтому

$$\bar{x}_0 = Q_2\Sigma^+ c = Q_2\Sigma^+ Q_1^T b = A^+ b.$$

Но b — любой вектор в $\mathbb{R}^m$. Отсюда

$$A^+ = Q_2\Sigma^+ Q_1^T.$$

Теорема доказана. ■

Пример 1.7. Пусть $A = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix}$.

Тогда $A^T A = \begin{bmatrix} 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25 \end{bmatrix}$. Поэтому единственный собственный вектор матрицы $A^T A$ есть: $x_1 = [1]$. Это и есть матрица Q_2, $Q_2 = [1]$.

Найдем λ_1:

$$(A^T A)x_1 = \lambda_1 x_1 \quad \Longrightarrow \quad [25]\ [1] = \lambda_1 [1] \quad \Longrightarrow \quad \lambda_1 = 25.$$

Найдем μ_1:

$$\mu_1 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{25} = 5.$$

Найдем вектор y_1:

$$y_1 = \frac{A x_1}{\mu_1} = \frac{1}{5} \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix}$$

y_1 — есть первый столбец матрицы $Q_1 = [y_1, y_2]$. Второй столбец y_2 матрицы Q_1 должен быть выбран так, чтобы быть в R^2 ортогональным вектору $y_1 = \begin{bmatrix} 3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix}$.

В общем виде $y_2 = \begin{bmatrix} y_{12} \\ y_{22} \end{bmatrix}$. Из условия ортогональности $y_1^T y_2 = 0$ имеем:

$$\frac{3}{5} y_{12} + \frac{4}{5} y_{22} = 0.$$

Кроме того, y_2 должен быть ортонормирован, то есть $y_2^T y_2 = 1$. Отсюда следует:

$$y_{12}^2 + y_{22}^2 = 1.$$

Из первого условия: $y_{12} = -y_{22} 4/3$.

Подставляя значение y_{12} во второе условие получаем выражение для y_{22}:

$$y_{22}^2 (4/3)^2 + y_{22}^2 = 1 \implies y_{22}^2 [1 + (4/3)^2] = 1 \implies y_{22}^2 = \frac{1}{1 + (4/3)^2} = \frac{1}{1 + 16/9} = \frac{9}{25}.$$

Можно выбрать одно из двух значений:

(a) $y_{22} = 3/5$, либо

(b) $y_{22} = -3/5$.

Отсюда, соответственно,

(a) $y_{12} = (-3/5)(4/3) = -4/5$, либо

(b) $y_{12} = -(-3/5)(4/3) = 4/5$.

Следовательно, возможны два варианта:

Вариант (1):

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 3/5 & -4/5 \\ 4/5 & 3/5 \end{bmatrix}$$

Вариант (2):

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 3/5 & 4/5 \\ 4/5 & -3/5 \end{bmatrix}$$

В варианте (1):

$$\Sigma = Q_1^T A Q_2 = \begin{bmatrix} 3/5 & 4/5 \\ -4/5 & 3/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9/5 + 16/5 \\ -12/5 + 12/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

В варианте (2):

$$\Sigma = Q_1^T A Q_2 = \begin{bmatrix} 3/5 & 4/5 \\ 4/5 & -3/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9/5 + 16/5 \\ 12/5 - 12/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

В любом варианте $Q_1^T A Q_2 = \Sigma$, где $\Sigma = \begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix}$, что и должно быть.

Теперь найдем Σ^+ и A^+. Имеем (из примеров A.4, A.5 и A.6): $\Sigma^+ = \begin{bmatrix} 1/5 & | & 0 \end{bmatrix}$. Поэтому ищем $A^+ = Q_2 \Sigma^+ Q_1^T$.

В варианте (1):

$$A^+ = Q_2 \Sigma^+ Q_1^T = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/5 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3/5 & 4/5 \\ -4/5 & 3/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/25 & 4/25 \end{bmatrix}.$$

В варианте (2):

$$A^+ = Q_2 \Sigma^+ Q_1^T = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/5 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3/5 & 4/5 \\ 4/5 & -3/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/25 & 4/25 \end{bmatrix}.$$

Здесь также имеем:

$$A^+ A = \begin{bmatrix} 3/25 & 4/25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} = I.$$

Это из-за того, что $\operatorname{rank} A = r = n = 1$. Как мы знаем, в этом случае

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T = \left[\begin{array}{c} 25 \end{array}\right]^{-1} \left[\begin{array}{cc} 3 & 4 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc} 3/25 & 4/25 \end{array}\right].$$

Вывод из примера А.7: *весьма непросто воспользоваться сингулярным разложением* $A = Q_1 \Sigma Q_2^T$, *чтобы найти* A^+. *Для этого нужно:*

1. *найти собственные вектора* $x_1, x_2, \ldots, x_n$ *матрицы* $A^T A$. *Тогда* $Q_2 = \left[\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \ldots & x_n \end{array}\right]$,
2. *найти собственные числа* $\lambda_1 > \lambda_2 > \ldots > \lambda_n \geq 0$,
3. *оценить ранг* r *матрицы* A, *т.е. разграничить* $\{\lambda_1 > \lambda_2 > \ldots > \lambda_r > 0\}$ *и* $\{\lambda_{r+1} = \lambda_{r+2} = \ldots = \lambda_n = 0\}$ *и образовать* $\mu_i = \sqrt{\lambda_i}$, $D = \operatorname{diag}(\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_r)$,
4. *найти* $y_i = Ax_i/\mu_i$, *где* $\mu_i = \sqrt{\lambda_i}$, $i = 1, 2, \ldots, r$,
5. *доопределить каким-либо образом систему* $\{y_i\}$ *до ортонормированного базиса в* $\mathbb{R}^m$,
6. *образовать* $Q_1 = \left[\begin{array}{cccc} y_1 & y_2 & \ldots & y_m \end{array}\right]$,

Альтернативное решение для нахождения A^+ есть усеченное LU-разложение матрицы A.

Пример 1.8.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \\ 3 & 7 \end{bmatrix}, \qquad \operatorname{rank} A = 2 = n.$$

Сделаем LU-разложение:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \\ 3 & 7 \end{bmatrix} = \underbrace{\left[\begin{array}{cc|c} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 3 & 1 & 1 \end{array}\right]}_{L} \underbrace{\left[\begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right]}_{U} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}}_{\bar{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\bar{U}} = \bar{L}\bar{U}.$$

$$\operatorname{rank} \bar{L} = \operatorname{rank} \bar{U} = \operatorname{rank} A = 2.$$

В общем случае, пусть $A = LU$, тогда:

1. L — всегда квадратная с единичной диагональю, т.е. $L = L(m,m)$ и $\det L = 1$,
2. U — имеет $(m-r)$ нулевых нижних строк.

Отбросим последние $(m-r)$ строк в U и последние $(m-r)$ столбцов в L, тогда имеем:

$$A = \bar{L}\bar{U}, \qquad \bar{L} = \bar{L}(m,r), \qquad \bar{U} = \bar{U}(r,n),$$

$$\operatorname{rank}\bar{L} = r = \operatorname{rank}U = \operatorname{rank}A.$$

Свойства $\bar{L}$ и $\bar{U}$:

1° $\bar{U}$: $\quad \mathfrak{R}(\bar{U}^T) = \mathfrak{R}(A^T)$ — совпадение пространств строк,

2° $\bar{L}$: $\quad \mathfrak{R}(\bar{L}) \;= \mathfrak{R}(A)$ — совпадение пространств столбцов,

так как $A = \bar{L}\bar{U}$ и $\operatorname{rank}A = \operatorname{rank}\bar{L} = r$.

Теорема 1.14.

$$A^+ = \bar{U}^T(\bar{U}\bar{U}^T)^{-1}(\bar{L}^T\bar{L})^{-1}\bar{L}^T$$

Доказательство. Пусть b — произвольный вектор в $\mathbb{R}^m$. Рассмотрим вектор:

$$y = [\,\bar{U}^T(\bar{U}\bar{U}^T)^{-1}(\bar{L}^T\bar{L})^{-1}\bar{L}^T\,]\,b.$$

Вектор $y \in \mathfrak{R}(U^T) = \mathfrak{R}(A^T)$. Умножим y слева на $A = \bar{L}\bar{U}$:

$$Ay = \bar{L}\bar{U}\,[\,\bar{U}^T(\bar{U}\bar{U}^T)^{-1}(\bar{L}^T\bar{L})^{-1}\bar{L}^T\,]\,b = \bar{L}(\bar{L}^T\bar{L})^{-1}\bar{L}^T b.$$

Но $\bar{L}(\bar{L}^T\bar{L})^{-1}\bar{L}^T$, по определению, есть матрица проектирования на $\mathfrak{R}(\bar{L})$, т.е. на $\mathfrak{R}(A)$, поэтому

$$A\,[\,\bar{U}^T(\bar{U}\bar{U}^T)^{-1}(\bar{L}^T\bar{L})^{-1}\bar{L}^T\,]\,b = p,$$

где p — проекция b на $\mathfrak{R}(A)$.
Поэтому вектор y удовлетворяет следующим условиям:

1. $y \in (A^T)$,
2. $Ay = p$, где p — проекция любого вектора b на $\mathfrak{R}(A)$,
3. $y = [\,\bar{U}^T(\bar{U}\bar{U}^T)^{-1}(\bar{L}^T\bar{L})^{-1}\bar{L}^T\,]\,b$.

Отсюда $[\,\bar U^T(\bar U\bar U^T)^{-1}(\bar L^T\bar L)^{-1}\bar L^T\,] = A^+$. Теорема доказана. ■

Заключительные примеры для лучшего понимания структуры и свойств псевдообратной матрицы A^+ .

Пример 1.9. Если $A = A(1,1)$, то

$$A^+ = \begin{cases} 0, & \text{если } A = 0, \\ 1/A, & \text{если } A \neq 0. \end{cases}$$

Пример 1.10. Если $A = \mathrm{diag}\,(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$, то

$$A^+ = \mathrm{diag}\,(\lambda_1^+, \lambda_2^+, \ldots, \lambda_n^+), \qquad \text{где } \lambda_j^+ = \begin{cases} 0, & \text{если } \lambda_j = 0, \\ 1/\lambda_j, & \text{если } \lambda_j \neq 0. \end{cases}$$

Пример 1.11. Матрицы

$$A_1 = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 10^{-10} \end{pmatrix}$$

почти одинаковы. Однако, их псевдообратные матрицы

$$A_1^+ = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad A_2^+ = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 10^{10} \end{pmatrix}$$

сильно отличаются.

Эти примеры, имеющие общее объяснение в теореме о сингулярном разложении, говорят о том, что *операция псевдообращения — разрывная.* Действительно, функция

$$\lambda^+ = \begin{cases} 1/\lambda, & \text{если } \lambda \neq 0 \\ 0, & \text{если } \lambda = 0 \end{cases}$$

имеет разрыв в точке $\lambda = 0$.

Отсутствие непрерывности операции псевдообращения приводит к серьезным вычислительным трудностям и, возможно, к большим вычислительным ошибкам при решении задачи МНК, особенно, если $r < n$ или $r < m$.

К счастью, на практике задача МНК обычно возникает при $m > n = r$, т.е. с матрицами $A = A(m,n)$ максимального столбцового ранга для переопределенных систем $Ax = z$. В этом случае $A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$ и МНК-решение $\bar x$ единственно и равно $\bar x_0$.

1.7 Основные теоремы по наименьшим квадратам и псевдоинверсии

Theorem 1 *Пусть* $z \in R^m$ *и* $A = A(m,n)$ *Тогда:*

(1) Найдется $\bar{x}_0 \in R^n$ *единственный, если это вектор с минимальной нормой, минимизирующий* $\|z - Ax\|^2$ *,*

(2) вектор $\bar{x}_0$ *является единственным вектором из* $\mathcal{R}(A^T)$ *, удовлетворяющим уравнению* $A\bar{x} = \hat{z}$ *, где* $\hat{z} = p$ *— проекция вектора* z *на* $\mathcal{R}(A)$ *.*

Theorem 2 *Среди всех векторов* $\bar{x}$ *, минимизирующих* $\|z - Ax\|^2$ *, вектор* $\bar{x}_0$ *, имеющий минимальную норму, является единственным вектором вида*

$$\bar{x}_0 = A^T y,$$

удовлетворяющим уравнению

$$A^T A\bar{x}_0 = A^T z.$$

Иными словами, вектор $\bar{x}_0$ может быть получен с помощью любого вектора y_0 , удовлетворяющего уравнению

$$A^T A A^T y = A^T z,$$

по формуле $\bar{x}_0 = A^T y$.

Theorem 3 *Для всякой матрицы* $A = A(m,n)$ *существует псевдообратная матрица* $A^+ = A^+(n,m)$ *, такая что для произвольного вектора* $z \in R^m$

$$\bar{x}_0 = A^+ z$$

является вектором с минимальной нормой среди всех векторов $\bar{x}$ *, минимизирующих* $\|z - Ax\|^2$ *.*

Theorem 4 *Для любой матрицы* $A = A(m,n)$ *псевдообратная матрица* A^+ *обладает свойствами:*

(1) $A^+ = (A^TA)^+A^T$,

(2) $(A^T)^+ = (A^+)^T$,

(3) $A^+ = A^T(AA^T)^+$,

(4) $(A^+)^+ = A$,

(5) $(A^TA)^+ = A^+(A^T)^+$,

(6) $(AA^T)^+ = (A^T)^+A^+$,

(7) $AA^+A = A$,

(8) $A^+AA^+ = A^+$,

(9) $AA^+ = (AA^+)^T$,

(10) $A^+A = (A^+A)^T$.

Основное правило обращения произведения матриц, $(BA)^{-1} = A^{-1}B^{-1}$, *не выполняется для псевдообратных матриц, т.е. в общем виде*

$$(BA)^+ \neq A^+B^+.$$

Theorem 5 *Для любой симметрической матрицы* $A = A(n,n)$ *с действительными элементами предельная матрица*

$$P_A = \lim_{\delta\to 0}(A + \delta I)^{-1}A = \lim_{\delta\to 0} A(A + \delta I)^{-1}$$

существует. Она является матрицей проектирования на $\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(A^T)$, *т.е. для любого вектора* $z \in R^n$ *вектор*

$$\hat{z} = P_A z$$

является проекцией z *на* $\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(A^T)$.

Theorem 6

(1) Для произвольных $z \in R^m$ *и* $A = A(m,n)$ *вектор* $\bar{x}$ *минимизирует* $\|z - Ax\|^2$ *тогда и только тогда, когда* $\bar{x}$ *имеет вид:*

$$\bar{x} = A^+z + (I - A^+A)y$$

для некоторого $y \in R^n$.

(2) Вектор $\bar{x}$, *минимизирующий* $\|z - Ax\|^2$, *является единственным тогда и только тогда, когда* $A^+A = I$. *Последнее условие выполняется тогда и только тогда, когда только нулевой вектор составляет ядро (нуль-пространство) матрицы* A, *т.е. при* $r = n$.

(3) Уравнение $Ax = z$ *имеет решение тогда и только тогда, когда* $A^+Az = z$ *. Это выполняется в том и только том случае, когда* $z \in \mathcal{R}(A)$ *. Вектор* x *является решением уравнения* $Ax = z$ *тогда и только тогда, когда он задается в виде*

$$x = A^+z + (I - A^+A)y$$

для произвольного $y \in R^n$ *. Это решение единственно (и тогда оно равно* A^+z *) если и только если*

$$AA^+z = z \quad \text{и} \quad A^+A = I.$$

1.8 Вычисление матриц проектирования

Дана матрица A. Возьмем $B = A^T$. Имеем

$$\begin{array}{ll} \mathcal{R}(A^T) & \text{— пространство строк матрицы } A, \\ \left.\begin{array}{l}\mathcal{R}(A^T) \\ \mathcal{R}(B)\end{array}\right\} & \text{— пространство столбцов матрицы } A^T. \end{array}$$

Definition 1 *Матрица проектирования* P *на* $\mathcal{R}(B)$ *есть такая матрица, которая обладает свойстом:*

$$(b - Pb) \perp \mathcal{R}(B),$$

где $Pb = \hat{b}$ *— проекция вектора* b *на* $\mathcal{R}(B)$ *,* $(b - Pb) = \tilde{b}$ *— перпендикуляр к* $\mathcal{R}(B)$ *.*

Запишем

$$\tilde{b} = b - Pb = (I - P)b,$$

где $I - P$ — матрица проектирования на $\mathcal{R}^\perp(B) = \mathcal{N}(B^T) = \mathcal{N}(A)$.

Из определения псевдообратной матрицы (см. определение A.26) следует, что матрица проектирования P вектора b на $\mathcal{R}(A)$ в общем случае такова:

$$Pb = p, \qquad Pb = A\bar{x}_0 = AA^+b \quad \Longrightarrow \quad P = AA^+.$$

Если взять $B = A^T$ и проектировать вектор b на $\mathcal{R}(B)$, то мы должны взять матрицу проектирования в виде $P = BB^+$. Но $B^+ = (A^T)^+ = (A^+)^T$, следовательно $P = A^T(A^+)^T$.

Если $A = A(m, n)$, то P имеет размеры: $(n \times m)(n \times m)^T = (n \times m)(m \times n) = (n \times n)$. Если $B = B(n, m)$, то $B^+ = B^+(m, n)$, тогда P имеет размеры: $(n \times m)(m \times n) = (n \times n)$.

Выводы:

1. *Если ищут матрицу вида $P = I - A^T(AA^T)^{-1}A$, то это есть матрица проектирования любого вектора на ядро, т.е. на нуль-пространство $\mathcal{N}(A)$ матрицы A. Но в таком виде ее можно определить, только если $(AA^T)^{-1}$ существует, т.е. если* $\operatorname{rank} A = m$ *(A имеет полный строчный ранг).*

2. *Если* $\operatorname{rank} A = r < m$*, что возможно иногда при $m \le n$, то $(AA^T)^{-1}$ не существует. В этом случае для этой же матрицы P справедливо наиболее общее выражение, а именно: $P = I - A^T(A^+)^T$, где также можно иметь в виду, что всегда $(A^+)^T = (A^T)^+$. Это означает, что нужно уметь отыскивать A^+. Для этого есть различные, не очень простые, вычислительные методы (см. книгу [6], а также книгу [51]).*

Пример 1.12. Определение проектора $P_A = AA^+$. Дано:

$$A = A_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 2 & -2 & -1 & 3 \\ -1 & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} = A(n, m) = A(3, 4),$$
$$n = 3, \quad m = 4, \quad r = \operatorname{rank}(A) = 2 < n = 3.$$

Делаем LU-разложение:

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ -1 & 2 & 1 \end{bmatrix}}_{L} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{U}.$$

Находим усеченное LU-разложение:

$$A = \bar{L}\bar{U} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \\ 2 & 1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}}_{\bar{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}}_{\bar{U}}.$$

Отсюда следует:

$$A^+ = \bar{U}^+\bar{L}^+ = \underbrace{\bar{U}^T(\bar{U}\bar{U}^T)^{-1}}_{\bar{U}^+}\underbrace{(\bar{L}^T\bar{L})^{-1}\bar{L}^T}_{\bar{L}^+} = \frac{1}{150}\begin{bmatrix} 10 & 14 & -22 \\ -10 & -14 & 22 \\ 5 & -8 & -41 \\ 5 & 22 & 19 \end{bmatrix}.$$

Найдем матрицы проектирования как на пространство строк матрицы A, т.е. на $\mathcal{R}(A^T)$, так и на пространство столбцов матрицы A, т.е. на $\mathcal{R}(A)$.

1. Матрица проекции на $\mathcal{R}(A^T)$:

$$P_A = A^T(A^+)^T = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ -1 & -2 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} \frac{1}{150}\begin{bmatrix} 10 & -10 & 5 & 5 \\ 14 & -14 & -8 & 22 \\ -22 & 22 & -41 & 19 \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{150}\begin{bmatrix} 60 & -60 & 30 & 30 \\ -60 & 60 & -30 & -30 \\ 30 & -30 & 90 & -60 \\ 30 & -30 & -60 & 90 \end{bmatrix} = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 2 & -2 & 1 & 1 \\ -2 & 2 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 3 & -2 \\ 1 & -1 & -2 & 3 \end{bmatrix}.$$

$$I - P_A = I - A^T(A^+)^T = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 & 1 \\ -2 & 3 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 2 & -2 \\ 1 & -1 & -2 & 2 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{cases} P_A & \text{проектирует на } \mathcal{R}(A^T) \\ I - P_A & \text{проектирует на } \mathcal{N}(A) \end{cases}$$

Найдем базис пространства $\mathcal{N}(A)$. Он образован двумя векторами ($n - r = 2$):

$$b_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{и} \qquad b_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Любой вектор в $\mathcal{N}(A)$ задается в виде:

$$y_1\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + y_2\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad y_1, y_2 \ - \ \text{числа}.$$

2. В тоже время матрица проекции на $\mathcal{R}(A)$:

$$P_A = AA^+ = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 2 & -2 & -1 & 3 \\ -1 & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \frac{1}{150} \begin{bmatrix} 10 & 14 & -22 \\ -10 & -14 & 22 \\ 5 & -8 & -41 \\ 5 & 22 & 19 \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{150} \begin{bmatrix} 25 & 50 & -25 \\ 50 & 130 & 10 \\ -25 & 10 & 145 \end{bmatrix} = \frac{1}{30} \begin{bmatrix} 5 & 10 & -5 \\ 10 & 26 & 2 \\ -5 & 2 & 29 \end{bmatrix}.$$

$$I - P_A = I - AA^+ = \frac{1}{30} \begin{bmatrix} 25 & -10 & 5 \\ -10 & 4 & -2 \\ 5 & -2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Здесь

$$\begin{cases} P_A & \text{проектирует на } \mathcal{R}(A) \\ I - P_A & \text{проектирует на } \mathcal{N}(A^T) = \mathcal{R}(A)^\perp \end{cases}$$

Найдем базис пространства $\mathcal{R}(A)$:

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Эти два вектора оказались взаимно ортогональны:

$$v_1^T v_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix} = -2 + 2 = 0.$$

Найдем базис пространства $\mathcal{N}(A^T)$. Это пространство определяется как совокупность векторов y, таких что: $y^T A = 0$. Или иначе: $y^T v_1 = 0$ и $y^T v_2 = 0$. Отсюда найдем:

$$y = \begin{pmatrix} 5 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{если выбрать} \quad y_3 = 1.$$

Действительно,

$$\begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} = 0 \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix} = 0$$

Базис пространства $\mathcal{N}(A^T)$ состоит из одного вектора. Возьмем в качестве базисного вектора $v_3 = \frac{1}{2}y$, т.е. вектор

$$v_3 = \begin{pmatrix} 2.5 \\ -1 \\ 0.5 \end{pmatrix}.$$

В качестве произвольного вектора для проектирования возьмем

$$z = \begin{pmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 6 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Найдем его проекцию на $\mathcal{R}(A)$:

$$\hat{z} = P_A z = \frac{1}{30} \begin{pmatrix} 5 & 10 & -5 \\ 10 & 26 & 2 \\ -5 & 2 & 29 \end{pmatrix} 6 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} = v_1 \quad (\text{совпало с } v_1).$$

Найдем его проекцию на $\mathcal{N}(A^T)$:

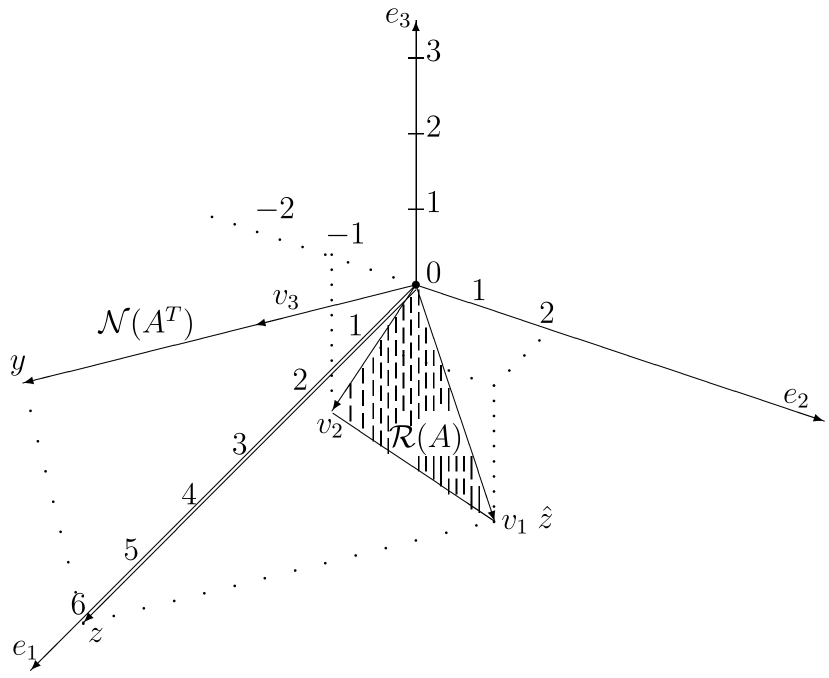
$$\tilde{z} = z - \hat{z} = \begin{pmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} = y \quad (\text{совпало с } y).$$

Пример 1.13.

$$A = A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ -1 & -2 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} = A(n,m) = A(4,3),$$
$$n = 4, \quad m = 3, \quad r = \operatorname{rank}(A) = 2 < n.$$

По сравнению с примером А.12 данная матрица совпадает с транспонированной матрицей примера А.12. Используем свойство $(A^+)^T = (A^T)^+$ для нахождения псевдообратной матрицы для нашего примера:

$$A^+ = \frac{1}{150} \begin{bmatrix} 10 & -10 & 5 & 5 \\ 14 & -14 & -8 & 22 \\ -22 & 22 & -41 & 19 \end{bmatrix}$$



e_3
3
2
1
0
-2
-1
1
2
e_2
v_3
$\mathcal{N}(A^T)$
y
1
2
3
4
5
6
v_2
$\mathcal{R}(A)$
v_1
$\hat{z}$
z
e_1

Рис. 1.3: ???????????

Отсюда, найдем матрицу проектирования на пространство строк матрицы A, т.е. на $\mathcal{R}(A^T)$:

$$P_A = A^T(A^+)^T = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 2 & -2 & -1 & 3 \\ -1 & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \frac{1}{150} \begin{bmatrix} 10 & 14 & -22 \\ -10 & -14 & 22 \\ 5 & -8 & -41 \\ 5 & 22 & 19 \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{150} \begin{bmatrix} 25 & 50 & -25 \\ 50 & 130 & 10 \\ -25 & 10 & 145 \end{bmatrix} = \frac{1}{30} \begin{bmatrix} 5 & 10 & -5 \\ 10 & 26 & 2 \\ -5 & 2 & 29 \end{bmatrix}.$$

Следовательно,

$$I - P_A = I - A^T(A^+)^T = \frac{1}{30} \begin{bmatrix} 25 & -10 & 5 \\ -10 & 4 & -2 \\ 5 & -2 & 1 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{cases} \quad P_A & \text{проектирует на пространство строк матрицы} A, \text{ т.е. на } \mathcal{R}(A^T). \\ I - P_A & \text{проектирует на нуль-пространство матрицы} A, \text{ т.е. на } \mathcal{N}(A). \end{cases}$$

Геометрическая интерпретация: Для примера A.12 ее нельзя было построить (там $b \in R^4$), а для примера A.13 возможно (здесь $b \in R^3$). Существует связь матриц двух последних примеров, а именно: $A_1 = A_2^T$. Соответственно, имеем

$$\begin{array}{l|l} \mathcal{R}(A_1^T) = \mathcal{R}(A_2) & \mathcal{R}(A_2^T) = \mathcal{R}(A_1) \\ \mathcal{N}(A_1) = \mathcal{N}(A_2^T) & \mathcal{N}(A_2) = \mathcal{N}(A_1^T) \end{array}$$

Из примера A.12 имеем матрицу P_1, которая проектирует на $\mathcal{N}(A_1)$, и матрицу $I - P_1$, которая проектирует на $\mathcal{R}(A_1^T)$. Из примера A.13 имеем матрицу P_2, которая проектирует на $\mathcal{N}(A_1^T)$, и матрицу $I - P_2$, которая проектирует на $\mathcal{R}(A_1)$ (см. рис. A.2).

1.9 Рекурсия в задаче МНК

Постановка задачи. Дана матрица $A = A(m, n)$ и вектор $z \in R^m$. Требуется найти единственный вектор $\bar{x}_0$ с минимальной нормой, минимизирующий $\|z - Ax\|^2$.

Можно ли искать его последовательно?

1° Известно, что $A\bar{x}_0 = \hat{z}$, где $\hat{z} \in \mathcal{R}(A)$, $z - \hat{z} \perp \mathcal{R}(A)$, $\bar{x}_0 \in \mathcal{R}(A^T)$.
Нормальное псевдорешение $\bar{x}_0$ несовместной системы $Ax = z$ удовлетворяет равенству

$$\bar{x}_0 = A^+ z,$$

где A^+ — псевдообратная матрица.

2° Произвольно расщепим матрицу A на блоки, $A = \left[\frac{A_1}{A_2}\right]$ и, соответственно, вектор z на подвекторы, $z = \left[\frac{z_1}{z_2}\right]$, так чтобы $A_1 = A_1(k, n)$, $A_2 = A_2(s, n)$, $k + s = m$, $z_1 \in R^k$, $z_2 \in R^s$.

3° На первом шаге найдем нормальное псевдорешение только первой системы $Ax_1 = z_1$. Оно равно $\tilde{x}_0 = A_1^+ z_1$. Проекция вектора z_1 на $\mathcal{R}(A_1)$:

$$\hat{z}_1 = A_1 \tilde{x}_0 = (A_1 A_1^+) z_1$$

4° Рассмотрим систему

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} \hat{z}_1 \\ z_2 \end{bmatrix}, \tag{1.14}$$

которая отличается от исходной системы

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \tag{1.15}$$

тем, что вместо z_1 используется $\hat{z}_1$. Для нее нормальное псевдорешение обозначим $\hat{x}_0$. Оно равно

$$\hat{x}_0 = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}^+ \begin{bmatrix} \hat{z}_1 \\ z_2 \end{bmatrix}.$$

Вопрос: совпадает ли оно с

$$\bar{x}_0 = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}^+ \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix},$$

т.е. верно ли равенство $\hat{x}_0 = \bar{x}_0$?
Решение вопроса:

Для системы (A.14) запишем нормальные уравнения:

$$\begin{bmatrix} A_1^T & A_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} A_1^T & A_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{z}_1 \\ z_2 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} A_1^T A_1 + A_2^T A_2 \end{bmatrix} x = A_1^T \hat{z}_1 + A_2^T z_2. \tag{1.16}$$

Затем для системы (A.15) запишем нормальные уравнения:

$$\begin{bmatrix} A_1^T & A_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} A_1^T & A_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} A_1^T A_1 + A_2^T A_2 \end{bmatrix} x = A_1^T z_1 + A_2^T z_2. \tag{1.17}$$

Сравним в правой части $A_1^T \hat{z}_1$ и $A_1^T z_1$. Имеем

$$A_1^T \hat{z}_1 = A_1^T (A_1 A_1^+) z_1.$$

Более простое доказательство:

$$A^T(AA^+) = A^T(AA^+)^T = (AA^+A)^T = A^T.$$

Lemma 1 *Докажем, что*

$$A^T = A^T(AA^+)$$

Доказательство. Имеем:

$$A = \bar{L}\bar{U}, \quad A^T = \bar{U}^T \bar{L}^T, \quad A^+ = \bar{U}^+ \bar{L}^+, \quad AA^+ = \bar{L}\bar{U}\bar{U}^+\bar{L}^+,$$

$$A^T(AA^+) = \bar{U}^T \bar{L}^T \cdot \bar{L}\bar{U} \cdot \bar{U}^+ \bar{L}^+ = \bar{U}^T \bar{L}^T = A^T$$

Лемма доказана. Поэтому $A_1^T \hat{z}_1 = A_1^T z_1$

Докажем это другим способом:

$$A_1^T(\hat{z}_1) = A_1^T(z - \tilde{z}) = A_1^T z - A_1^T \tilde{z}, \quad \text{где } \tilde{z} \in \mathcal{N}(A_1^T), \quad \text{т.е. } A_1^T \tilde{z} = 0.$$

Поэтому $A_1^T \hat{z}_1 = A_1^T z_1$. Таким образом, правые части уравнений (A.16) и (A.17) совпадают. Поэтому решения уравнений (A.16) и (A.17) одинаковы, и

$$\hat{x}_0 = \bar{x}_0.$$

1.10 Основные свойства симметрических (эрмитовых) матриц

Свойства симметрических матриц, $A = A^T$, в теории МНК служат основой многих результатов. В алгебре эти свойства обобщены на случай *эрмитовых* матриц, т.е. матриц A, в которых понятие симметричности в отношении комплекснозначных элементов расширено добавлением требования комплексной сопряженности $a_{ij} = \bar{a}_{ji}$, что выражается записью $A = A^*$, где A^* — сопряженно транспонированная матрица к A.

Напомним некоторые определения, а затем приведем четыре основные свойства эрмитовых матриц.

Definition 2 *Число* λ *называется* **собственным значением** $n \times n$*-матрицы* A *с соответствующим собственным вектором* x*, если* $Ax = \lambda x$*, т.е.* λ *есть любой из* n *корней уравнения*

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Это **характеристическое уравнение** *для матрицы* A*.*

Definition 3 **Ортогональной** *называется квадратная вещественная матрица* Q*, у которой ортонормированы столбцы,* $Q^T Q = I$*.*

Упражнение 1.1. Матрица Q^T ортогональна тогда и только тогда, когда ортогональна матрица Q.

Definition 4 **Унитарной** *называется квадратная матрица* U*, у которой ортонормированы столбцы с добавлением требования комплексной сопряженности элементов столбцов,* $U^* U = I$*.*

Упражнение 1.2. Матрица U^* унитарна тогда и только тогда, когда унитарна матрица U.

Theorem 7 *Если* $A = A^*$*, то для всех комплексных векторов* x *число* $x^* A x$ *вещественно.*

Доказательство. Вычислите $(x^* A x)^*$ как эрмитову (1×1)-матрицу и примите во внимание, что в любой эрмитовой матрице диагональные элементы должны быть вещественными.

Theorem 8 *Каждое собственное значение эрмитовой матрицы вещественно.*

Доказательство. Умножьте $Ax = \lambda x$ слева на x^* и используйте предыдущую теорему 17.

Theorem 9 *Собственные векторы эрмитовой матрицы, соответствующие различным собственным значениям, взаимно ортогональны.*

Доказательство. Пусть $\lambda \neq \mu$ и $Ax = \lambda x$, $Ay = \mu y$. Возьмем $(1 \times n)$-матрицу $x^*A^* = \bar{\lambda}x^*$, сопряженно транспонированную к $Ax = \lambda x$, заменим $A^* = A$ и учтем, что $\lambda = \bar{\lambda}$ (по теореме 18), т.е. запишем $x^*A = \lambda x^*$. Умножая это равенство справа на y, а равенство $Ay = \mu y$ слева на x^*, получим

$$x^*Ay = \lambda x^*y, \qquad x^*Ay = \mu x^*y.$$

Следовательно, $\lambda x^*y = \mu x^*y$, а так как $\lambda \neq \mu$, то $x^*y = 0$, т.е. вектор x ортогонален к y.

Этот результат является основным по своей важности. Разумеется, любые кратные собственным векторам x/α и y/β, равным образом остаются собственными векторами. При выборе $\alpha = \|x\|$, $\beta = \|y\|$ и т.п. мы имеем возможность нормировать все собственные векторы к единичной длине и, таким образом, далее использовать ортонормированные собственные векторы $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ эрмитовой матрицы A. Запишем их в виде матрицы $U = [u_1 \mid u_2 \mid \dots \mid u_n]$, которая, по определению, является унитарной: $U^*U = I$. Имеем $Au_i = \lambda_i u_i$, по определению собственных значений λ_i, $i = 1, 2, \dots, n$. Эту систему уравнений перепишем в виде одного уравнений, если введем обозначение $\Lambda = \mathrm{diag}\,\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$:

$$AU = U\Lambda,$$

что равносильно соотношениям

$$U^*AU = \Lambda, \qquad A = U\Lambda U^*.$$

Тем самым приходим к следующей тоереме о *спектральном разложении* эрмитовой матрицы.

Theorem 10 *Если* $A = A^*$ *, то существует диагонализирующая матрица* T *, которая является также и унитарной,* $T^*T = I$ *, такая что*

$$T^*AT = \Lambda, \qquad A = T\Lambda T^*, \tag{1.18}$$

где $\Lambda = \operatorname{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$ *— диагональная матрица, составленная из собственных значений матрицы* A *. Если эти значения простые (среди* λ_i *нет кратных), то* $T = U$ *, где* $U = [u_1 \mid u_2 \mid \ldots \mid u_n]$ *— матрица, составленная из соответствующих собственных векторов матрицы* A *. В этом случае спектральное разложение матрицы* A *имеет вид*

$$A = U\Lambda U^* = \lambda_1 u_1 u_1^* + \lambda_2 u_2 u_2^* + \ldots + \lambda_n u_n u_n^*.$$

При наличии кратных собственных значений любая эрмитова матрица A *по-прежнему имеет полный набор ортонормированных собственных векторов и, следовательно, может быть диагонализирована с помощью некоторой унитарной матрицы* T *, т.е. (A.18) справедливо в общем случае. Каждая эрмитова матрица с* k *различными собственными значениями имеет свое "спектральное разложение"вида*

$$A = T\Lambda T^* = \lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2 + \ldots \lambda_k P_k,$$

где P_i *есть проекция матрицы* A *на собственное подпространство, соответствующее значению* λ_i *.*

Доказательство. Полное доказательство можно найти в [51] или [10].

Это очень важный результат, имеющий и "обратную"формулировку: только эрмитовы матрицы обладают одновременно и вещественными собственными значениями, и ортонормированными собственными векторами. Если $T^{-1}AT$ равняется некоторой вещественной диагональной матрице Λ и матрица T унитарна, $T^{-1} = T^*$, то матрица A обязательно является эрмитовой: $A^* = (T\Lambda T^*)^* = T\Lambda T^* = A$. Теорема 20 имеет множество применений при обработке экспериментальных данных, — не только в регрессионном анализе, но также в области так называемого многомерного анализа, когда нужно отыскать некоторую естественную структуру в множестве экспериментальных данных. Интересны примеры, когда по экспериментальной корреляционной матрице R нужно провести анализ основных компонент и факторный анализ [51].

Для специалистов-прикладников эти примеры очень поучительны. Они показывают, как два специалиста, вводя различное число p факторов и диагональную компоненту D в разложении $R = FF^T + D$, а также любую ортогональную $(p \times p)$-матрицу Q в представлении $\tilde{F} = FQ$, могут получать совершенно различные интерпретации F и $\tilde{F}$ (матрицы факторных коэффициентов) одних и тех же экспериментальных данных. Мы эти частные вопросы не рассматриваем и за деталями отсылаем к [51] и специальной литературе по факторному анализу. Нам в дальнейшем потребуется как математический факт Теорема 20. в применении к вещественным симметрическим матрицам, когда (A.18) принимает следующий вид:

$$T^T A T = \Lambda, \qquad A = T \Lambda T^T.$$

Глава 2

Линейная задача наименьших квадратов

2.1 Модели, регрессии и оценки

Изучение объектов, явлений или процессов реального мира заключается в построении их моделей, т.е. тех или иных форм описания для выявления существенных закономерностей. Когда тип, или форма модели выбраны, требуется определить ее лучшее параметрическое наполнение. При этом критерием естественно считать лучшее соответствие между откликами объекта и модели, когда они погружены в одни и те же или одинаковые внешние условия. Иными словами, та модель будет лучше, чей отклик, по данным проведенного наблюдения, менее всего уклоняется от отклика реального объекта в разнообразных, однако одинаковых для модели и объекта, условиях.

Таким образом, оптимальная модель строится на основе опытного анализа прошлых поведений объекта, но способна предсказывать и ближайшее будущее поведение. Обращение к прошлому опыту для объяснения причин или закономерностей называют *регрессией*.

Регрессионный анализ в статистике, регрессионное моделирование, идентификация моделей и оценивание состояния объекта в теории систем — это примеры практически тождественных или тесно связанных задач, имеющих одну и ту же математическую основу, один и тот же математический метод решения. Если модель линейна по параметрам, а критерий ее качества есть квадрат расхождения (невязки) между откликами модели и объекта, этот метод и есть знаменитый линейный Метод Наименьших Квадратов (МНК). [1] При отказе от линейности модели по ее параметрам получаем нелинейную задачу о наименьших квадратах [23]. В этой книге мы ограничиваемся линейной задачей НК. Она хорошо разработана и обобщена в различных направлениях: возмущения в матрице регрессоров [19], неоднородность ошибок в исходных данных [?], и улучшение вычислительных схем [11].

Вычислительные схемы МНК имеют важнейшее значение для приложений. Неиспользование эффективных, т.е. численно устойчивых и экономичных алгоритмов может увести исследователя в сторону надуманных проблем. И, наоборот, — некоторые затруднения могут быть с успехом преодолены, если знать и умело использовать эффективные схемы вычислений. Кроме того, как и любое знание, наука вычислений несет с собой важные, плодотворные идеи, которые полезны сами по себе. Применительно к задаче НК, эти базовые идеи следующие: рекурсия, факторизация и взаимная инверсия (двойственность форм) вычислительных алгоритмов.

2.2 Линейная задача наименьших квадратов

Во многих приложениях, связанных с обработкой экспериментальных данных, необходимо отыскивать такой вектор $x \in R^n$, линейные комбинации компонент которого, Ax, где $A = A(m, n)$ — матрица размера $m \times n$, как можно более близки или, еще лучше, равны данным значениям, образующим вектор $z \in R^m$. Если мерой близости двух векторов считать квадрат евклидовой нормы разностного вектора, в данном случае, вектора $(z - Ax)$, то указанная задача есть линейная задача о наименьших квадратах.

Вектор ошибок $v = z - Ax$ может быть сделан равным нулю тогда и только тогда, когда $z \in \mathcal{R}(A)$, где $\mathcal{R}(A)$ — пространство столбцов матрицы A. В этом случае имеем совместную систему уравнений $Ax = z$. Однако, для z — вектор наблюдений, то есть экспериментальных значений и A — матрица, которую в различных приложениях называют

[1] Историческую справку о МНК можно найти в [14]. Возникновение МНК связывается с работами Гаусса и Лежандра в начале 19 века.

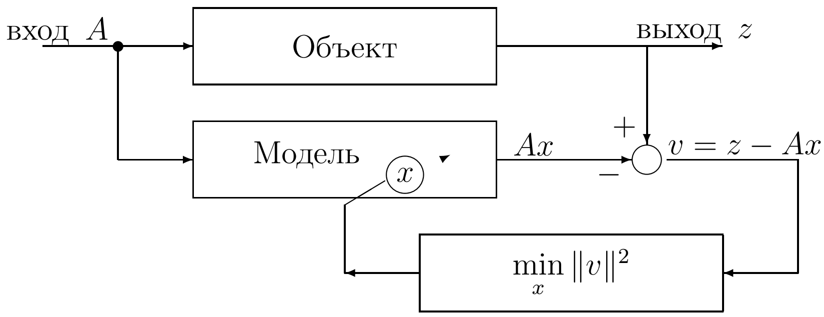


Рис. 2.1: Линейная задача наименьших квадратов

матрицей регрессоров, матрицей наблюдений или матрицей плана эксперимента, совсем не обязательно выполнение условия $z \in \mathcal{R}(A)$ хотя бы, например, из-за случайных ошибок при регистрации экспериментальных данных. Тогда

$$z = Ax + v, \tag{2.1}$$

и решение по методу наименьших квадратов (для краткости, МНК-решение) есть вектор $\bar{x}$, доставляющий минимум функционалу качества (см. рис. 2.1):

$$J(x) = (z - Ax)^T(z - Ax) = \sum_{j=1}^{m} v(j)^2 = v^T v. \tag{2.2}$$

Из этого критерия для искомого $\bar{x}$ получаем так называемые *нормальные уравнения* (см. гл. **??**):

$$A^T A\bar{x} = A^T z. \tag{2.3}$$

Их решение всегда существует (обе части равенства (2.3) принадлежат одному и тому же пространству $\mathcal{R}(A^T)$ столбцов матрицы A^T), но может быть не единственным (если $\operatorname{rank} A < n$). В последнем случае из всех $\bar{x}$ выбирают то единственное, $\bar{x}_0$, которое имеет минимальную норму $\|\bar{x}_0\|$. Этот вектор называют *нормальным псевдорешением*. Известно (см. гл. **??**), что

$$\bar{x}_0 = A^+ z, \tag{2.4}$$

где A^+ — псевдообратная матрица к A. Как уже отмечалось, в качестве определения A^+ применяют различные формулировки. Здесь для этого используем геометрический подход: A^+ есть такая матрица в выражении (2.4), что для любого $z \in R^m$ вектор $\bar{x}_0 \in R^n$ удовлетворяет двум условиям:

$$A\bar{x}_0 = p, \quad p \in \mathcal{R}(A), \quad z - p \perp \mathcal{R}(A). \tag{2.5a}$$

$$\bar{x}_0 \in \mathcal{R}(A^T). \tag{2.5b}$$

Условие (2.5a) требует, чтобы $\bar{x}_0$ отвечал совместной системе $A\bar{x}_0 = p$, где p — проекция вектора z на $\mathcal{R}(A)$, а условие (2.5b) требует, чтобы этот $\bar{x}_0$ был взят из пространства $\mathcal{R}(A^T)$ строк матрицы A. Условие (2.5a), таким образом, выбирает $\bar{x}_0 = \bar{x}$, чтобы минимизировать функционал (2.2), а условие (2.5b) среди всех таких $\bar{x}$ выбирает единственный $\bar{x}_0$ с минимальной нормой.

Часто матрицу A выбирают так, чтобы она имела полный столбцовый ранг, $\operatorname{rank} A = n$. В этом случае $m \geq n$, $\bar{x}$ единственно и равно $\bar{x}_0$, $A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$ и

$$\bar{x}_0 = (A^TA)^{-1}A^Tz. \tag{2.6}$$

Однако иногда такое условие не выполняется, и тогда $\bar{x}_0 = A^+z$.

2.3 Статистическая интерпретация

Предположим, что вектор ошибок v в уравнении (2.1) образован из случайных величин с нулевым средним и известной матрицей ковариации

$$(v) = 0, \qquad (vv^T) = R,$$

где $(\cdot)$ — оператор математического ожидания (среднего от $\cdot$), и P_v — положительно определенная (ПО) матрица. Найдем квадратно-корневое разложение $R = SS^T$ (например, разложение Холесского). Если теперь умножить вектор z (2.1) на S^{-1}, то данные $\bar{z} = S^{-1}z$ получают представление

$$\bar{z} = \bar{A}x + \bar{v} \tag{2.7}$$

с матрицей $\bar{A} = S^{-1}A$ и ошибками $\bar{v} = S^{-1}v$. Этот вектор ошибок всегда имеет единичную ковариацию:

$$E(\bar{v}\bar{v}^T) = E(S^{-1}vv^TS^{-T}) = S^{-1}E(vv^T)S^{-T} = S^{-1}RS^{-T} = S^{-1}SS^TS^{-T} = I_m,$$

где I_m — единичная матрица размера $m \times m$. Вследствие этогоданные $\bar{z}$ называют нормализованными экспериментальными данными. Значение представления (2.7) заключается в том, что оно демонстрирует, как сконструировать вектор некоррелированных между собой измерений с единичной дисперсией из вектора, элементы которого произвольно взаимно коррелированы. Ниже предполагаем, что данные (2.7) уже нормализованы, так что

$$E(v) = 0, \qquad E(vv^T) = R = I_m, \tag{2.8}$$

где I_m — единичная матрица размера $m \times m$. При этом из (2.3) находим

$$A^T A\bar{x} = A^T z = A^T Ax + A^T v,$$

$$A^T A(\bar{x} - x) = A^T v.$$

Отсюда, если $\det(A^T A) \neq 0$, имеем

$$E(\bar{x}) = x, \tag{2.9}$$

$$(A^T A)E[(\bar{x} - x)(\bar{x} - x)^T](A^T A) = A^T E(vv^T)A. \tag{2.10}$$

Соотношение (2.9) выражает собой свойство несмещенности решения (оценки) $\bar{x}$ относительно неизвестного (постоянного) вектора x, измеряемого в виде экспериментальных данных z, (2.1) или (2.7). Соотношение (2.10) дает выражение для ковариации оценки $\bar{x}$ в виде

$$P_{\bar{x}} = E[(\bar{x} - x)(\bar{x} - x)^T] = (A^T A)^{-1}. \tag{2.11}$$

при определении $\bar{x}$ по нормализованным экспериментальным данным.

Обратная матрица $P_{\bar{x}}^{-1}$ от ковариации $P_{\bar{x}}$ называется *информационной матрицей*. Ее обозначение будет $\Lambda_{\bar{x}}$ или просто Λ. При использовании нормализованных данных она равна $A^T A$, а в общем случае $\Lambda = A^T R^{-1} A$.

2.4 Включение априорных статистических данных

Предположим, что в добавление к линейной системе (2.1) мы имеем априорную несмещенную оценку неизвестного вектора x в виде $\tilde{x}$ и соответствующую априорную информационную матрицу $\tilde{\Lambda}$. Это означает, что $E(\tilde{x}) = x$ и

$$\tilde{\Lambda}^{-1} = E[(\bar{x} - x)(\bar{x} - x)^T] = \tilde{P}, \tag{2.12}$$

где $\tilde{P}$ — ковариация оценки $\tilde{x}$. Найдем какой-нибудь квадратный корень $\tilde{\Lambda}^{1/2}$ из матрицы $\tilde{\Lambda}$, например, по одному из разложений Холесского (см. гл. **??**):

$$\tilde{\Lambda} = \tilde{\Lambda}^{1/2}\tilde{\Lambda}^{T/2} = \tilde{R}^T\tilde{R},$$

где $\tilde{\Lambda}^{1/2} = \tilde{R}^T$. Образуем вектор $\tilde{v} = (\tilde{\Lambda}^{1/2})^T(\tilde{x} - x) = \tilde{R}(\tilde{x} - x)$. Этот вектор имеет смысл нормализованной ошибки для априорной оценки $\tilde{x}$ вектора x. Действительно, его ковариация равна единичной матрице размера $n \times n$:

$$E(\tilde{v}\tilde{v}^T) = \tilde{R}E[(\tilde{x} - x)(\tilde{x} - x)^T]\tilde{R}^T = \tilde{\Lambda}^{T/2}\tilde{\Lambda}^{-1}\tilde{\Lambda}^{1/2} = I_n.$$

Поскольку о векторе x, кроме экспериментальных данных z, (2.1), известна априорная оценка $\tilde{x}$ с ковариацией $\tilde{P} = \tilde{\Lambda}^{-1}$, эту информацию целесообразно включить в контекст задачи о наименьших квадратах, рассматривая, вместо (2.2), модифицированный функционал качества $J_1(x) = \tilde{v}^T\tilde{v} + v^Tv$. Он соединяет в себе квадрат нормы нормализованной ошибки (невязки) априорной оценки

$$\tilde{v} = \tilde{R}(\tilde{x} - x) = \tilde{\Lambda}^{T/2}(\tilde{x} - x),$$

с квадратом нормы нормализованной ошибки (невязки) экспериментальных данных $v = z - Ax$. Так как

$$\begin{array}{rcl} J_1(x) & = & (\tilde{x} - x)^T\tilde{\Lambda}(\tilde{x} - x) + (z - Ax)^T(z - Ax) = \\ & = & (\tilde{z} - \tilde{R}x)^T(\tilde{z} - \tilde{R}x) + (z - Ax)^T(z - Ax), \end{array} \qquad (2.13)$$

где $\tilde{z} = \tilde{R}\tilde{x}$, то $J_1(x)$ может быть интерпретирован просто как критерий качества метода наименьших квадратов применительно к расширенной системе (рис. 2.2).

$$\begin{bmatrix} \tilde{z} \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ A \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} \tilde{v} \\ v \end{bmatrix}, \qquad (2.14)$$

включающей, помимо текущих экспериментальных данных z, "дополнительные"экспериментальные данные $\tilde{z}$, соответствующие априорной информации $\tilde{x}$, $\tilde{\Lambda}$.

Обозначим через $\hat{x}$ МНК-решение расширенной системы (2.14), доставляющей минимум функционалу (2.13). Из этого критерия для $\hat{x}$ получаем аналогично (2.3), нормальные уравнения

$$(\tilde{\Lambda} + A^TA)\hat{x} = \tilde{\Lambda}\tilde{x} + A^Tz. \qquad (2.15)$$

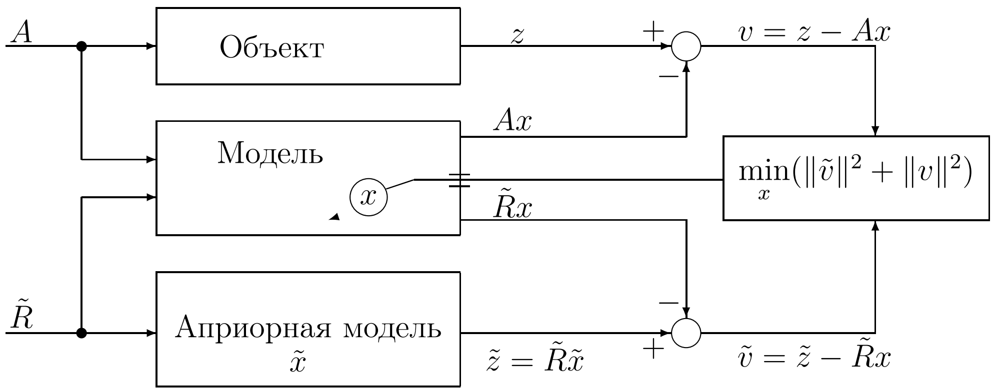


Рис. 2.2: Включение априорных данных в линейную задачу НК

Простая модификация данной в п. **??** статистической интерпретации приводит к выражению

$$\hat{\Lambda}(\hat{x} - x) = \tilde{\Lambda}(\tilde{x} - x) + A^T v. \tag{2.16}$$

Так как $E(\tilde{x} - x) = 0$ и $E(v) = 0$, то и $E(\hat{x} - x) = 0$, то есть $\hat{x}$ есть также несмещенная оценка: $E(\hat{x}) = x$. Если ошибка априорной оценки и ошибка измерения взаимно некоррелированы, $E[(\tilde{x} - x)v^T] = 0$, то после "возведения в квадрат"обеих частей (2.16) и осреднения получим ковариацию

$$P_{\hat{x}} = E[(\hat{x} - x)(\hat{x} - x)^T] = (\tilde{\Lambda} + A^T A)^{-1} = \hat{\Lambda}^{-1}, \tag{2.17}$$

где через $\hat{\Lambda}$ обозначена информационная матрица *апостериорной* оценки $\hat{x}$, $\hat{\Lambda} = \tilde{\Lambda} + A^T A$.

Remark 1 *Матрица $\tilde{\Lambda}$ не обязана быть невырожденной, хотя в (2.12) это формально предполагалось. В действительности, априорное знание некоторых (или всех) компонент вектора x может быть исчезающе мало, так что соответствующие строки и столбцы в информационной матрице $\tilde{\Lambda}$ заполняются исчезающе малыми числами или даже нулями. При этом соотношение (2.12) сохраняет силу в пределе, в том смысле, что в ковариационной матрице $\tilde{P}$ соответствующие диагональные элементы стремятся к $+\infty$ в то время как другие остаются ограниченными. Заметьте, что (2.15) как условие минимума функционала (2.13) получается при произвольной неотрицательно определенной* *матрице $\tilde{\Lambda}$. Если $\tilde{\Lambda} = 0$, то (2.15) сводится к (2.3) и (2.17) сводится к (2.11). Таким образом, информационная и ковариационная матрицы взаимно обратны не только формально в силу определения (2.12), но и по существу как меры достоверности/недостоверности априорной оценки $\tilde{x}$ вектора x.*

2.5 Включение предшествующего МНК-решения

Расширенная система (2.14) показала, что априорные статистические сведения о векторе x, поступающие в виде несмещенной оценки $\tilde{x}$ и ее ковариации $\tilde{P}$, могут быть интерпретированы как добавочные результаты $\tilde{z} = \tilde{R}\tilde{x}$ некоего эксперимента. Это наводит на мысль, что и чисто алгебраическую задачу отыскания МНК-решения системы уравнений можно решать последовательно (см. п. **??**): предварительно найти $\tilde{x}$ как МНК-решение части системы, а затем включить это $\tilde{x}$ в полную систему, чтобы найти ее МНК-решение $\hat{x}$.

Пусть система уравнений произвольно разделена на подсистемы, то есть имеет вид:

$$\begin{bmatrix} f \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ A \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix}. \tag{2.18}$$

Ее МНК-решение $\hat{x}$, доставляющее минимум функционалу $J_1(x) = w^T w + v^T v$, есть решение нормальных уранений

$$\left[\ \tilde{R}^T \;\middle|\; A^T\ \right] \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ A \end{bmatrix} \hat{x} = \left[\ \tilde{R}^T \;\middle|\; A^T\ \right] \begin{bmatrix} f \\ z \end{bmatrix}. \tag{2.19}$$

Допусти, найдено МНК-решение $\tilde{x}$ для подсистемы $f = \tilde{R}x + w$ из критерия минимума функционала $J(x) = w^T w$. Как отмечено в (2.5), оно удовлетворяет двум условиям:

$$\tilde{R}\tilde{x} = \tilde{z}, \quad \tilde{z} \in \mathcal{R}(\tilde{R}), \quad f - \tilde{z} \perp \mathcal{R}(\tilde{R}),$$

$$\tilde{x} \in \mathcal{R}(\tilde{R}^T).$$

Разностный вектор $r = f - \tilde{z}$ ортогонален пространству столбцов $\mathcal{R}(\tilde{R})$ матрицы $\tilde{R}$ и, следовательно, лежит в левом нуль-пространстве $\mathcal{N}(\tilde{R}^T)$, определяемом как все векторы y, удовлетворяющие уравнению $\tilde{R}^T y = 0$. Поэтому

$$\tilde{R}^T f = \tilde{R}^T(\tilde{z} + r) = \tilde{R}^T \tilde{z} + \tilde{R}^T r = \tilde{R}^T \tilde{z}.$$

Следовательно, уравнения (2.19) совпадают с уравнениями

$$\left[\ \tilde{R}^T \mid A^T\ \right] \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ A \end{bmatrix} \hat{x} = \left[\ \tilde{R}^T \mid A^T\ \right] \begin{bmatrix} \tilde{z} \\ z \end{bmatrix},$$

которые, в свою очередь совпадают с уранениями (2.15), так как $\tilde{R}^T \tilde{R} = \tilde{\Lambda}$. Тем самым доказано, что МНК-решение $\hat{x}$ данной системы (2.18) совпадает с МНК-решением системы (2.14), отличающейся от (2.18) тем, что в нее вместо f включен вектор $\tilde{z}$, равный проекции f на $\mathcal{R}(\tilde{R})$, $\tilde{z} = \tilde{R}\tilde{x}$, где $\tilde{x}$ — МНК-решение левой подсистемы в (2.18).

2.6 Рекурсия для МНК в стандартной информационной форме

Интерпретация априорных статистических данных как дополнительных наблюдений и, что равносильно, учет МНК-решения подсистемы после добавления в систему новой порции уравнений, является краеугольным камнем рекурсии для МНК. Это дает возможность обрабатывать экспериментальные данные по мере их поступления, то есть решать задачу о наименьших квадратах по мере поступления новых уравнений.

Результаты при статистической интерпретации рекурсивны потому, что текущие оценка $\hat{x}$ и ковариация $P_{\hat{x}}$ становятся априорными и комбинируются с новыми данными, чтобы образовать обновленные оценку и ковариацию. При этом существенно, что результаты (2.15) и (2.17) не зависят (теоретически) от того, какой квадратный корень $\tilde{R}$ в разложении $\tilde{\Lambda} = \tilde{R}^T \tilde{R}$ использован. Эта свобода позволяет выбирать $\tilde{R}$ из соображений большей вычислительной точности. Кроме того, если только лишь окончательная оценка (МНК-решение) необходима, то лучше не находить промежуточных оценок, а просто накапливать информационную матрицу, $\sum A_j^T A_j$, и сумму $\sum A_j^T z_j$ и лишь в нужный момент, например, в самом конце найти решение.

Информационную форму последовательного МНК запишем вводя матрицу $(\Lambda \mid d)$.

I. *Инициализация.* (начальные значения x_0, Λ_0):

$$d_0 = \Lambda_0 x_0, \qquad \left(\, \Lambda \,\middle|\, d \,\right) := \left(\, \Lambda_0 \,\middle|\, d_0 \,\right)$$

Эти начальные значения берутся из априорных данных: $x_0 = \tilde{x}$, $\Lambda_0 = \tilde{\Lambda}$.

II. *Обработка наблюдений.* (очередная порция наблюдений $z = Ax + v$):

$$\left(\, \Lambda \,\middle|\, d \,\right) := \left(\, \Lambda \,\middle|\, d \,\right) + A^T \left(\, A \,\middle|\, z \,\right) \tag{2.20}$$

В общем случае ненормализованных статистических данных z вместо (2.20) используют алгоритм:

$$\left(\, \Lambda \,\middle|\, d \,\right) := \left(\, \Lambda \,\middle|\, d \,\right) + A^T R^{-1} \left(\, A \,\middle|\, z \,\right) \tag{2.21}$$

III. *Выдача результата.* (после последовательной обработки всех порций наблюдений или в нужный момент, когда Λ^{-1} существует):

$$\hat{x} = \Lambda^{-1} d, \qquad P_{\hat{x}} = \Lambda^{-1}.$$

2.7 Рекурсия для МНК в стандартной ковариационной форме

Пусть априорная и апостериорная оценки, $\tilde{x}$ и $\hat{x}$, характеризуются невырожденными информационными матрицами $\tilde{\Lambda}$ и $\hat{\Lambda}$ соответственно. Тогда существуют обратные к ним ковариационные матрицы, (2.12) и (2.17). Разрешим (2.15) относительно $\hat{x}$:

$$\hat{x} = (\tilde{\Lambda} + A^T A)^{-1} \tilde{\Lambda} \tilde{x} + (\tilde{\Lambda} + A^T A)^{-1} A^T z.$$

Обозначим

$$L = (\tilde{\Lambda} + A^T A)^{-1} \tilde{\Lambda}, \qquad K = (\tilde{\Lambda} + A^T A)^{-1} A^T \tag{2.22}$$

и преобразуем:

$$\hat{x} = L\tilde{x} + Kz - KA\tilde{x} + KA\tilde{x} = \tilde{x} + K(z - A\tilde{x}),$$

так как $L + KA = I_n$. Для определения K воспользуемся в (2.22) следующей важной леммой.

Lemma 2

$$(\Lambda_1 - \Lambda_{12}\Lambda_2^{-1}\Lambda_{21})^{-1} = \Lambda_1^{-1} + \Lambda_1^{-1}\Lambda_{12}(\Lambda_2 - \Lambda_{21}\Lambda_1^{-1}\Lambda_{12})^{-1}\Lambda_{21}\Lambda_1^{-1}, \quad (2.23)$$

где предполагается, что все матрицы согласованы по размерам и трабуемые обращения матрицы существуют.

Упражнение 2.1. Докажите лемму 2, рассматривая блочные матрицы

$$\begin{bmatrix} \Lambda_1 & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_2 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} P_1 & P_{12} \\ P_{21} & P_2 \end{bmatrix},$$

и выписывая поблочно равенства $\Lambda P = I$ и $P\Lambda = I$.

Применим лемму 2 при: $\Lambda_1 = \tilde{\Lambda}$, $\Lambda_{12} = A^T$, $\Lambda_{21} = \Lambda_{12}^T = A$, $\Lambda_2^{-1} = -I$. Получим

$$(\tilde{\Lambda} + A^T A)^{-1} = \tilde{\Lambda}^{-1} - \tilde{\Lambda}^{-1}A^T(A\tilde{\Lambda}^{-1}A^T + I)^{-1}A\tilde{\Lambda}^{-1}.$$

Обозначим: $\tilde{P} = \tilde{\Lambda}^{-1}$, $\hat{P} = \hat{\Lambda}^{-1}$. Имеем из п. **??**, выражение (2.20): $\hat{\Lambda} = \tilde{\Lambda} + A^T A$. Следовательно, $\hat{P} = \tilde{P} - \tilde{P}A^T(A\tilde{P}A^T + I)^{-1}A\tilde{P}$. Так как $K = \hat{P}A^T$, то

$$\begin{aligned} K &= \tilde{P}A^T - \tilde{P}A^T(A\tilde{P}A^T + I)^{-1}A\tilde{P}A^T = \\ &= \tilde{P}A^T(A\tilde{P}A^T + I)^{-1}[A\tilde{P}A^T + I - A\tilde{P}A^T] = \tilde{P}A^T(A\tilde{P}A^T + I)^{-1}. \end{aligned}$$

Таким образом, при статистической интерпретации (см. п. **??**) получаем возможность уточнять априорную несмещенную оценку $\tilde{x}$ и уменьшать ее ковариацию $\tilde{P}$ за счет включения в процесс обработки поступивших результатов наблюдений $z = Ax + v$, применяя следующий алгоритм, известный как стандартный алгоритм Калмана (рис. 2.3).

I. *Инициализация.* (начальные значения x_0, P_0):

$$\tilde{x} := x_0, \qquad \tilde{P} := P_0. \quad (2.24)$$

II. *Обработка наблюдений.* (очередная порция наблюдений $z = Ax + v$):

$$\begin{aligned} K &= \tilde{P}A^T(A\tilde{P}A^T + I)^{-1} \\ \hat{P} &= \tilde{P} - KA\tilde{P} \\ \hat{x} &= \tilde{x} + K(z - A\tilde{x}) \end{aligned} \quad (2.25)$$

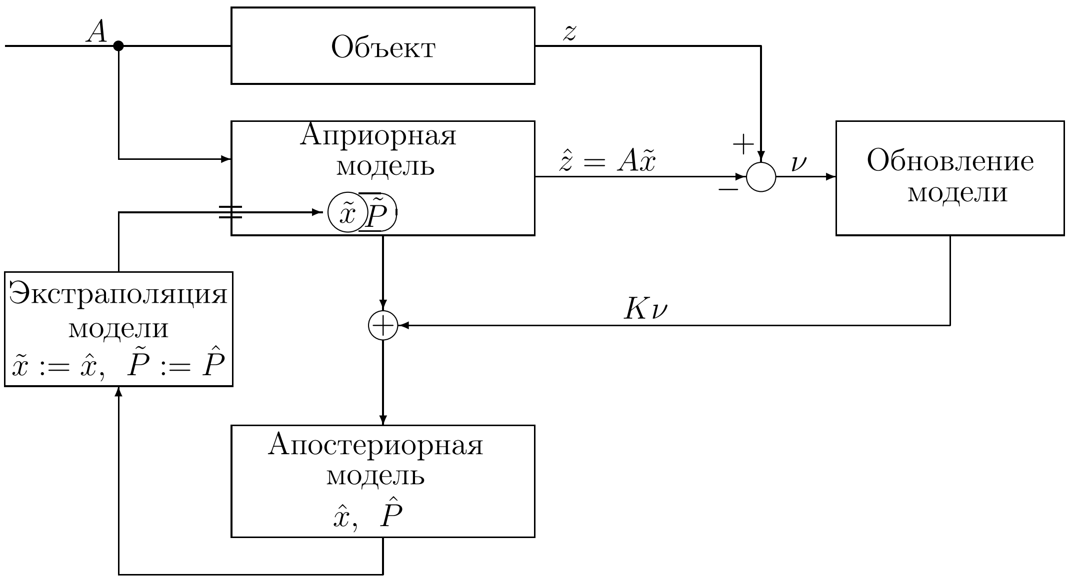


Рис. 2.3: Обновление модели по наблюдениям и экстраполяция модели между наблюдениями (схема Калмана): $\hat{z}$ имеет смысл предсказания для отклика z, произведенного априорной моделью; ν имеет смысл обновляющего процесса; K — весовая матрица для обновления модели объекта.

III. *Экстраполяция.* (распространение оценки $\hat{x}$ и ее ковариации $\hat{P}$ между наблюдениями, т.е. к моменту повторения этапа II со следующей порцией наблюдений):

$$\tilde{P} := \hat{P}, \qquad \tilde{x} := \hat{x}. \tag{2.26}$$

Равным образом, данный алгоритм пригоден и без статистической интерпретации (см. п. **??**), когда алгебраическая задача отыскания МНК-решения переопределенной системы решается последовательно. Такое решение может стартовать с условно "пустой"системы уравнений. Практически, это должно отвечать условию $\tilde{\Lambda} = 0$, которое легко реализовать в информационной форме (п. **??**). В ковариационной форме данное условие можно реализовать лишь приближенно, например, полагая $P_0 = \epsilon^{-2} I$, где $\epsilon \to 0$. При таком выборе величина x_0 практически не имеет влияния на дальнейший процесс, так что она может быть взята равной нулевому вектору, $x_0 = 0$. После такой инициализации уравнения исходной переопределенной системы могут вводиться в этап обработки измерений последовательными порциями, и в порциях может содержаться любое, не обязательно одно и то же, число уранений, выражаемое в числе строк матрицы A.

Как следует из п. **??**, от указанного числа МНК-решение всей алгебраической системы уравнений не зависит. В связи с этим, с вычислительной точки зрения, удобным оказывается добавление в очередной порции лишь по одному уравнению. Тогда матрица A содержит всего одну строку, которую теперь обозначим как транспонированный вектор-столбец a, $a^T = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$. В этом случае

$$z = a^T x + v, \tag{2.27}$$

и обработка наблюдений (2.25) принимает особенно простой вид:

$$\alpha = a^T \tilde{P} a + 1, \quad K = \tilde{P} a / \alpha, \quad \hat{P} = \tilde{P} - K a^T \tilde{P}, \quad \hat{x} = \tilde{x} + K(z - a^T \tilde{x}). \tag{2.28}$$

Это алгоритм скалярной (последовательной) обработки. В нем умножение на обратную матрицу $(A\tilde{P}A^T + I)^{-1}$ заменяется делением на скалярную величину α.

Упражнение 2.2. С применением леммы 2 к выражению (2.21) докажите, что в общем случае ненормализованных экспериментальных данных (2.1) при их статистической интерпретации с ковариацией ошибок

v, равной R, матрица Калмана K в алгоритме (2.25) определяется выражением

$$K = \tilde{P}A^T(A\tilde{P}A^T + R)^{-1}. \tag{2.29}$$

Упражнение 2.3. Статистическая интерпретация алгоритма (2.28) дана в п. **??** для случая, когда экспериментальные данные (2.1) нормализованы, то есть характеризуются математическими ожиданиями (2.8). Это выражается добавлением "$+1$" в выражении для α, (2.28), причем эта "$+1$" есть не что иное как $E\{vv^T\} = 1$ для ошибки v в (2.27). Докажите, что в более общем случае, когда матрица R в (2.29) является диагональной,

$$R = \mathrm{diag}\ (r_1, r_2, \ldots, r_m), \tag{2.30}$$

и только в этом случае, матричный алгоритм (2.25) с матрицей K из (2.29) эквивалентен m-кратному повторению скалярного алгоритма вида (2.28) с $\alpha = a^T\tilde{P}a + r$, где: a^T — i-я строка матрицы A, $r = r_i$ и z — i-й элемент вектора z, (2.1), при $i = 1, 2, \ldots, m$.

Таким образом, для алгоритма (2.28) справедливо более общее представление:

$$\alpha = a^T\tilde{P}a + r, \quad K = \tilde{P}a/\alpha, \quad \hat{P} = \tilde{P} - Ka^T\tilde{P}, \quad \hat{x} = \tilde{x} + K(z - a^T\tilde{x}), \tag{2.31}$$

если наблюдения (2.1) в их статистической интерпретациии составлены из m отдельных, независимых друг от друга, скалярных данных вида (2.27), каждое с ковариацией $r = r_i$, $i = 1, 2, \ldots, m$.

Еще раз отметим, что в применении к решению переопределенной системы алгебраических уравнений в (2.31) следует считать $r = 1$, то есть использовать (2.28).

Remark 2 *Условие (2.30) не является ни в коей мере ограничительным для использования (2.31). Используя разложение Холесского без квадратных корней (см. гл.* **??***), любую $R > 0$ можно представить в виде $R = UDU^T$ или $R = LDL^T$ и затем перейти к измерениям $\bar{z} = U^{-1}z$ или $\bar{z} = L^{-1}z$, чтобы диагонализировать матрицу ковариаций ошибок наблюдений.*

Упражнение 2.4. Докажите, что в алгоритме (2.25) с определением K по выражению (2.29) вычисление $\hat{P}$ может быть представлено в так называемой симметричной форме Джозефа:

$$\hat{P} = (I - KA)\tilde{P}(I - KA)^T + KRK^T,$$

которую иначе называют стабилизированным алгоритмом Калмана, так как она предотвращает возможную потерю положительной определенности матрицы $\hat{P}$, присущую стандартному алгоритму (2.25) с $\hat{P} = \tilde{P} - KAP$. При скалярной обработке наблюдений в алгоритме (2.31) выражение для $\hat{P}$, соответственно, заменяется на

$$\hat{P} = (I - K\alpha^T)\tilde{P}(I - \alpha K^T) + rKK^T.$$

2.8 Факторизованный алгоритм Поттера для ковариационной формы МНК

Вместо матриц $\tilde{P}$ и $\hat{P}$, по своей природе положительно определенных, далее оперируем с квадратными корнями из них, соответственно, $\tilde{S}$ и $\hat{S}$, отвечающими равенствам $\tilde{S}\tilde{S}^T$ и $\hat{S}\hat{S}^T$, перепишем выражение для $\hat{P}$ в (2.31) в виде

$$\hat{S}\hat{S}^T = \tilde{S}(I_n - ff^T/\alpha)\tilde{S}^T, \quad f = \tilde{S}^T a, \quad \alpha = r + f^T f,$$

где $n = \dim \hat{x} = \dim \tilde{x}$, и потребуем так выбрать число β, чтобы обеспечить справедливость следующего разложения:

$$I_n - ff^T/\alpha = (I_n - \beta ff^T)(I_n - \beta ff^T).$$

Отсюда для β получаем квадратное уравнение и из двух его решений выбираем

$$\beta = (1/\alpha)/(1 + \sqrt{r/\alpha}),$$

поскольку выбор знака "+" обеспечивает меньший уровень относительных ошибок при этих вычислениях. Обозначим

$$\gamma = 1/(1 + \sqrt{r/\alpha}),$$

тогда $\beta = \gamma/\alpha$. В результате вместо (2.31) получаем следующую последовательность вычислений

$$\begin{array}{rcllll} f &=& \tilde{S}^T a, & \alpha = f^T f + r, & \gamma = 1/(1 + \sqrt{r/\alpha}), & \\ K &=& \tilde{S} f/\alpha, & \hat{S} = \tilde{S} - \gamma K f^T, & & (2.32) \\ \hat{x} &=& \tilde{x} + K(z - a^T \tilde{x}), & & & \end{array}$$

которая и составляет алгоритм Поттера. Он численно более устойчив, чем стандартный ковариационный алгоритм Калмана (2.31), но ему эквивалентен. В целом, для него характерно следующее.

Вычисление $\hat{S}$ в (2.32) равносильно счету с двойной точностью матрицы $\hat{P}$ в (2.31) при использовании той же разрядности чисел в компьютере, или, иначе, равносильная точность вычислений матрицы $\hat{P}$ может быть достигнута значительно быстрее. Для матрицы $\hat{P}$ теперь отсутствует опасность потери положительной определенности, присущая операции вычитания в (2.31), поскольку здесь вычисляют $\hat{S}$, а $\hat{P} = \hat{S}\hat{S}^T$ и $\hat{P} > 0$, когда $\det(\hat{S}) \neq 0$. Недостатком алгоритма (2.32) является наличие операции извлечения квадратного корня, отдельной для каждого скалярного наблюдения $z = a^T x + v$, и возможная потеря специального (желательно, треугольного) вида матрицы $\hat{S}$ в общем случае. Действительно, для экономии памяти и объема вычислений обычно стремятся иметь матрицы $\hat{S}$ и $\tilde{S}$ в виде треугольных матриц (обе — нижнетреугольные или обе — верхнетреугольные), что соответствует разложениям Холесского: $\hat{P} = \hat{S}\hat{S}^T$ и $\tilde{P} = \tilde{S}\tilde{S}^T$. Однако, если стартовать с матрицы $\tilde{S}$ треугольного вида, выполняя инициализацию в соответствии с (2.24), то из-за вычитания в (2.32) матрица $\hat{S}$ в общем случае не остается треугольной. Например, пусть для $\hat{S}$ и $\tilde{S}$ выбрана верхняя треугольная форма. Тогда только при $a = \lambda(1, 0, \ldots, 0)^T$, где λ — скаляр, для $\hat{S}$ в (2.32) будет сохранена та же, верхняя треугольная форма, благодаря чему выполнение этапа экстраполяции, согласно (2.26), сводится к простому присваиванию: $\tilde{S} := \hat{S}$. Если же выбранная для $\tilde{S}$ треугольная форма будет утрачена, то этап экстраполяции матрицы потребует предварительной триангуляризации матрицы $\hat{S}$, то есть операции $\tilde{S} := \text{triang}\,(\hat{S})$. Триангуляризация $\text{triang}\,(\cdot)$ должна быть выполнена ортогональным преобразованием матрицы $(\cdot)$, например, преобразованиями Хаусхолдера, Гивенса или же Грама-Шмидта, которые расматриваются ниже в отдельной главе (гл. **??**).

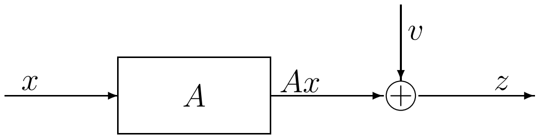


Рис. 2.4: Представление текущих экспериментальных данных z как результата измерения неизвестного вектора x с помощью матрицы A при наличии случайных ошибок v.

2.9 Полная статистическая интерпретация рекурсии в методе наименьших квадратов

Простая статистическая интерпретация МНК-решения, данная в п. **??**, позволила объяснить в п. **??** идею включения априорных данных в процесс решения задачи о наименьших квадратах. Она была "простой"в том смысле, что предполагала случайную природу лишь для ошибки v в экспериментальных данных z, (2.1), (рис. 2.4) при необходимости найти апостериорную оценку $\hat{x}$ для некоторого (постоянного) неизвестного вектора x, с учетом некоторой имеющейся (априорной) оценки $\tilde{x}$. Для этой интерпретации было достаточно использовать первые два момента случайной ошибки v: математическое ожидание $E\{v\} = 0$ и ковариацию $E\{vv^T\} = P_v$. Ниже, при описании случайных векторов, мы также ограничимся первыми двумя моментами распределения вероятностей, то есть фактически принимаем гипотезу о *нормальном* (гауссовом) распределении, однако вводим статистическое описание не только для v, но и для x. При этом надо иметь в виду, что такое описание для x должно всегда рассматриваться как *условное* распределение. Именно это обстоятельство делает приводимую ниже статистическую интерпретацию полной, т.е. учитывающей рекурсию: переход от одного (априорного) условного распределения к следующему (апостериорному) условному распределению вероятностей для оцениваемого вектора x.

Предположим, что ошибка наблюдения v в уравнении (2.1) есть случайный гауссов вектор. Мы предполагаем, что это уравнение нормализовано, т.е. записано по типу уравнения (2.7), поэтому

$$E(v) = 0, \quad E(vv^T) = I_m, \tag{2.33}$$

где $E(\cdot)$ — оператор математического ожидания, 0 — нулевой m-вектор, I_m — единичная матрица $(m \times m)$-матрица.

Remark 3 *Предположение о предварительной нормализации не нарушает общности и введено только для упрощения записей. В любой момент оно может быть отозвано путем умножения нормализованных данных на корень квадратный L из матрицы R, где $LL^T = R$ (см. п. **??**) и R — положительно определенная матрица ($R > 0$). Последнее, т.е. $R > 0$, означает, что не найдется такого невырожденного преобразования вектора наблюдений z, (2.1), после которого результат содержал бы элементы, свободные от случайных ошибок (все экспериментальные данные содержат ошибки).*

Таким образом, согласно (2.33) плотность распределения вероятностей вектора v определена выражением

$$f_v(\rho) = [(2\pi)^m |R|]^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}\rho^T R^{-1}\rho\right\}, \tag{2.34}$$

где согласно (2.33), $R = E(vv^T) = I_m$.

Вместе с этим, еще до проведения эксперимента по схеме

$$z = Ax + v \tag{2.35}$$

и независимо от него вы располагаете априорной информацией о неизвестном векторе x. Это предварительное знание, явившееся результатом ваших предыдущих экспериментов либо просто кем-то другим полученное и вам сообщенное, выражается величиной $\tilde{x}$. Сама по себе величина $\tilde{x}$ тоже может быть не вполне надежной, то есть вам следует ее рассматривать как случайную, а то конкретное ее значение, которое вам сообщено, вы обозначаете $\tilde{\xi}$. Это $\tilde{\xi}$ имеет смысл реализованного значения случайного вектора $\tilde{x}$. Кроме этого $\tilde{\xi}$, которое вы принимаете за центр распределения вектора $\tilde{x}$, вам нужно иметь сведения о разбросе величины $\tilde{x}$ относительно центра, т.е. нужна ковариация $\tilde{P}$. Имея эту информацию и продолжая работать лишь с нормальными распределениями, вы выражаете ее следующей условной (априорно принятой) плотностью для вектора x:

$$f_{x|\tilde{x}}(\xi|\tilde{\xi}) = \left[(2\pi)^n |\tilde{P}|\right]^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\xi - \tilde{\xi})^T \tilde{P}^{-1}(\xi - \tilde{\xi})\right\}. \tag{2.36}$$

Здесь вы формально предполагаете, что $\tilde{P}$ обратима (т.е. $\tilde{P} > 0$), чтобы иметь возможность записать это выражение.

Теперь вы проводите свое наблюдение по схеме (2.35) и получаете конкретный его результат ζ, — реализованное значение для случайного вектора z. Вы хотите использовать результат ζ, чтобы выработать наилучшую оценку $\hat{x}$ для вектора x. Как для этого скомбинировать априорное знание $(\tilde{\xi}, \tilde{P})$ с полученным результатом ζ ? Ответ на этот вопрос кроется в апостериорном распределении, т.е. в плотности $f_{x|z,\tilde{x}}(\xi|\zeta,\tilde{\xi})$ распределения вероятностей неизвестного вектора x при условии, что известны: (1) результат ζ для вектора наблюдений z и (2) сообщенное значение $\tilde{\xi}$ априорного вектора $\tilde{x}$ с ковариацией $\tilde{P}$, что отражено принятием априорной плотности (2.36). Если удастся найти эту $f_{x|z,\tilde{x}}(\xi|\zeta,\tilde{\xi})$, то по ней можно будет принять решение, поскольку именно плотность рапределения для любой случайной величины служит наиболее полной характеристикой.

Найдем $f_{x|z,\tilde{x}}(\xi|\zeta,\tilde{\xi})$. По формуле Байеса для условных плотностей имеем:

$$f_{x|z,\tilde{x}}(\xi|\zeta,\tilde{\xi}) = \frac{f_{x,z,\tilde{x}}(\xi,\zeta,\tilde{\xi})}{f_{z,\tilde{x}}(\zeta,\tilde{\xi})} \tag{2.37}$$

Преобразуем (2.37) по известным из теории вероятностей законам, опуская, для простоты промежуточных записей, аргументы:

$$f_{x|z,\tilde{x}}(\xi|\zeta,\tilde{\xi}) = \frac{f_{z|x,\tilde{x}} \cdot f_{x|\tilde{x}} \cdot f_{\tilde{x}}}{f_{z|\tilde{x}} \cdot f_{\tilde{x}}} = \frac{f_{z|x,\tilde{x}}(\zeta|\xi,\tilde{\xi}) f_{x|\tilde{x}}(\xi|\tilde{\xi})}{f_{z|\tilde{x}}(\zeta|\tilde{\xi})} \tag{2.38}$$

Здесь плотность $f_{x|\tilde{x}}(\xi|\tilde{\xi})$ известна как априорная и задана выражением (2.36). Остается найти другие две. Для их нахождения опираемся на (2.35). Имеем

$$z = Ax + v \Bigg|_{\substack{x=\xi \\ \tilde{x}=\tilde{\xi}}} = A\xi + v \Bigg|_{\tilde{x}=\tilde{\xi}} = A\xi + v$$

так как v от $\tilde{\xi}$ не зависит. Отсюда и из (2.34) получаем

$$f_{z|x,\tilde{x}}(\zeta|\xi,\tilde{\xi}) = [(2\pi)^m |R|]^{-1/2} \exp\left\{ -\frac{1}{2}(\zeta - A\xi)^T R^{-1}(\zeta - A\xi) \right\}, \tag{2.39}$$

Для другой плотности, в знаменателе (2.38), снова рассматриваем выражение (2.35), но теперь при условии $\tilde{x} = \tilde{\xi}$. Найдем совместную плотность векторов x и v при этом условии:

$$f_{x,v|\tilde{x}}(\xi,\rho|\tilde{\xi}) = \frac{f_{x,v,\tilde{x}}(\xi,\rho,\tilde{\xi})}{f_{\tilde{x}}(\tilde{\xi})} = \frac{f_{v|x,\tilde{x}}(\rho|\xi,\tilde{\xi})\cdot f_{x|\tilde{x}}(\xi|\tilde{\xi})\cdot f_{\tilde{x}}(\tilde{\xi})}{f_{\tilde{x}}(\tilde{\xi})} = f_v(\rho)\cdot f_{x|\tilde{x}}(\xi|\tilde{\xi}) \tag{2.40}$$

Последнее равенство получено вследствие принятого свойства ошибок v в эксперименте (2.35): они не зависят ни от x, ни от $\tilde{x}$. В выражении (2.40) перемножаются две гауссовых плотности: (2.34) и (2.36), поэтому результат — тоже гауссова плотность. Вектор z, (2.35), образован как взвешенная сумма двух векторов, x и v, совместная плотность которых гауссова. Поэтому плотность в знаменателе (2.38) — гауссова. Чтобы ее записать, достаточно найти по (2.35) первые два условные момента. Первый момент, с учетом (2.36), равен

$$E(z|\tilde{x}=\tilde{\xi}) = HE(x|\tilde{x}=\tilde{\xi}) + 0 = A\tilde{\xi},$$

так как $E(v|\tilde{x}=\tilde{\xi}) = 0$. Находим второй момент используя (2.36) и (2.34):

$$E\left[(z-A\tilde{\xi})(z-A\tilde{\xi})^T\middle|\tilde{x}=\tilde{\xi}\right] = A\tilde{P}A^T + R, \quad R = I_m$$

(последнее — в силу нормализации, см. замечание 3). Теперь имеем возможность записать:

$$f_{z|\tilde{x}}(\zeta|\tilde{\xi}) = \left[(2\pi)^m|A\tilde{P}A^T + I_m|\right]^{-1/2}\exp\{\cdot\}, \tag{2.41}$$

где $\{\cdot\} = \left\{-\frac{1}{2}(\zeta - A\tilde{\xi})^T(A\tilde{P}A^T+I_m)^{-1}(\zeta - A\tilde{\xi})\right\}$.
Все три плотности для (2.38) найдены: (2.39), (2.36) и (2.41). Подставляя их в (2.38), получаем

$$f_{x|z,\tilde{x}}(\xi|\zeta,\tilde{\xi}) = \left[(2\pi)^n\frac{|R|\cdot|\tilde{P}|}{|A\tilde{P}A^T+R|}\right]^{-1/2}\exp\left\{-\frac{1}{2}(\alpha+\beta-\gamma)\right\}, \tag{2.42}$$

$$\left.\begin{array}{lcl}
\alpha &=& (\zeta - A\xi)^T R^{-1}(\zeta - A\xi)\\
\beta &=& \left(\xi-\tilde{\xi}\right)^T\tilde{P}^{-1}\left(\xi-\tilde{\xi}\right)\\
\gamma &=& \left(\zeta - A\tilde{\xi}\right)^T\left(A\tilde{P}A^T+R\right)^{-1}\left(\zeta - A\tilde{\xi}\right)
\end{array}\right\} \tag{2.43}$$

Remark 4 *Здесь и далее для удобства (прослеживания местоположения матрицы ковариаций ошибки* v *) вместо* I_m *, (2.33), сохранено более общее обозначение* R *, как и в (2.34), которое в любой момент можно заменить на* I_m *, если будет принято предположение о нормализации наблюдений.*

Очевидно, (2.42), (2.43) определяют нормальную плотность распределения, однако ее явное определение требует двух действий: (1) приведение суммы трех квадратичных форм (2.43) к одной квадратичной форме и (2) приведение отношения трех определителей к одному определителю. Проведем эти преобразования При первом действии активно используем лемму 2 (см. п. **??**), беря ее в виде:

$$\left(\tilde{P}^{-1} + A^T R^{-1} H\right)^{-1} = \tilde{P} - \tilde{P} A^T \left(A \tilde{P} H^T + R\right)^{-1} A \tilde{P} \tag{2.44}$$

с обозначением $\tilde{\Lambda} = \tilde{P}^{-1}$ для априорной информационной матрицы. Перепишем (2.44) в нескольких эквивалентных формах. Имеем

$$\left(\tilde{P}^{-1} + A^T R^{-1} A\right)^{-1} A^T = \tilde{P} A^T - \tilde{P} A^T \left(A \tilde{P} A^T + R\right)^{-1} A \tilde{P} A^T =$$
$$= \tilde{P} A^T \left(A \tilde{P} A^T + R\right)^{-1} \left[\left(A \tilde{P} A^T + R\right) - A \tilde{P} A^T\right] = \tilde{P} A^T \left(A \tilde{P} A^T + R\right)^{-1} R.$$

Отсюда

$$\tilde{P}^{-1} \left(\tilde{P}^{-1} + A^T R^{-1} A\right)^{-1} A^T R^{-1} = A^T \left(A \tilde{P} A^T + R\right)^{-1}. \tag{2.45}$$

Умножая (2.44) слева и справа на $\tilde{P}^{-1}$, получаем

$$\tilde{P}^{-1} \left(\tilde{P}^{-1} + A^T R^{-1} A\right)^{-1} \tilde{P}^{-1} = \tilde{P}^{-1} - A^T \left(A \tilde{P} A^T + R\right)^{-1} A. \tag{2.46}$$

Умножая (2.44) слева на A и справа на A^T и обозначая $C = A \tilde{P} A^T + R$, находим

$$A \left(\tilde{P}^{-1} + A^T R^{-1} A\right)^{-1} A^T = A \tilde{P} A^T - A \tilde{P} A^T C^{-1} A \tilde{P} A^T =$$
$$= (C - R) - (C - R) C^{-1} (C - R) = R - R \left(A \tilde{P} A^T + R\right)^{-1} R.$$

Отсюда

$$R^{-1} A \left(\tilde{P}^{-1} + A^T R^{-1} A\right)^{-1} A^T R^{-1} = R^{-1} - \left(A \tilde{P} A^T + R\right)^{-1}. \tag{2.47}$$

Вычисляя квадратичную форму в (2.42) как $(\alpha+\beta-\gamma)$, введем промежуточные обозначения:

$$\begin{array}{rcl} \hat{P} & = & \left(\tilde{P}^{-1}+A^T R^{-1} A\right)^{-1} \\ a & = & A^T R^{-1}\zeta \\ b & = & \tilde{P}^{-1}\tilde{\xi} \\ c & = & a+b \end{array} \tag{2.48}$$

Тогда, после раскрытия скобок в (2.43), приведения подобных членов в $(\alpha+\beta-\gamma)$ и при подстановках (2.45), (2.46) и (2.47), получим

$$\alpha+\beta-\gamma=\xi^T\hat{P}^{-1}\xi-2\xi^T c+c^T\hat{P}c=\left(\xi-\hat{P}c\right)^T\hat{P}^{-1}\left(\xi-\hat{P}c\right). \tag{2.49}$$

Кроме того,

$$\begin{array}{rcl} \hat{P}c & = & \hat{P}\left(A^T R^{-1}\zeta+\tilde{P}^{-1}\tilde{\xi}\right)= \\ & = & \hat{P}\left(A^T R^{-1}\zeta+\tilde{P}^{-1}\tilde{\xi}+A^T R^{-1}A\tilde{\xi}-A^T R^{-1}A\tilde{\xi}\right)= \\ & = & \hat{P}\left[\left(\tilde{P}^{-1}+A^T R^{-1}A\right)\tilde{\xi}+A^T R^{-1}\left(\zeta-A\tilde{\xi}\right)\right]= \\ & = & \tilde{\xi}+\hat{P}A^T R^{-1}\left(\zeta-A\tilde{\xi}\right). \end{array} \tag{2.50}$$

Из (2.45) и (2.48) видно, что

$$\hat{P}A^T R^{-1}=K=\tilde{P}A^T\left(A\tilde{P}A^T+R\right)^{-1} \tag{2.51}$$

есть матрица Калмана, определенная выражением (2.29) (см. п. **??**). В свою очередь, величина (2.50), входящая в квадратичную форму (2.49) плотности распределения (2.42), есть не что иное как среднее значение вектора x, обусловленное двумя событиями: $z=\zeta$ и $\tilde{x}=\tilde{\xi}$ (первое — результатом ζ измерения и второе — результатом $\tilde{\xi}$ априорной оценки). Обозначим это условное среднее как $\hat{x}$, тогда (2.50) перепишется в виде:

$$\hat{x}=\tilde{\xi}+K(\zeta-A\tilde{\xi}). \tag{2.52}$$

Кроме того, из (2.49) видно, что матрица (2.48) есть ковариация апостериорного распределения (2.42), и по лемме (2.44) она дается выражением

$$\hat{P}=\tilde{P}-\tilde{P}\left(A\tilde{P}A^T+R\right)^{-1}A\tilde{P}=\tilde{P}-KA\tilde{P}. \tag{2.53}$$

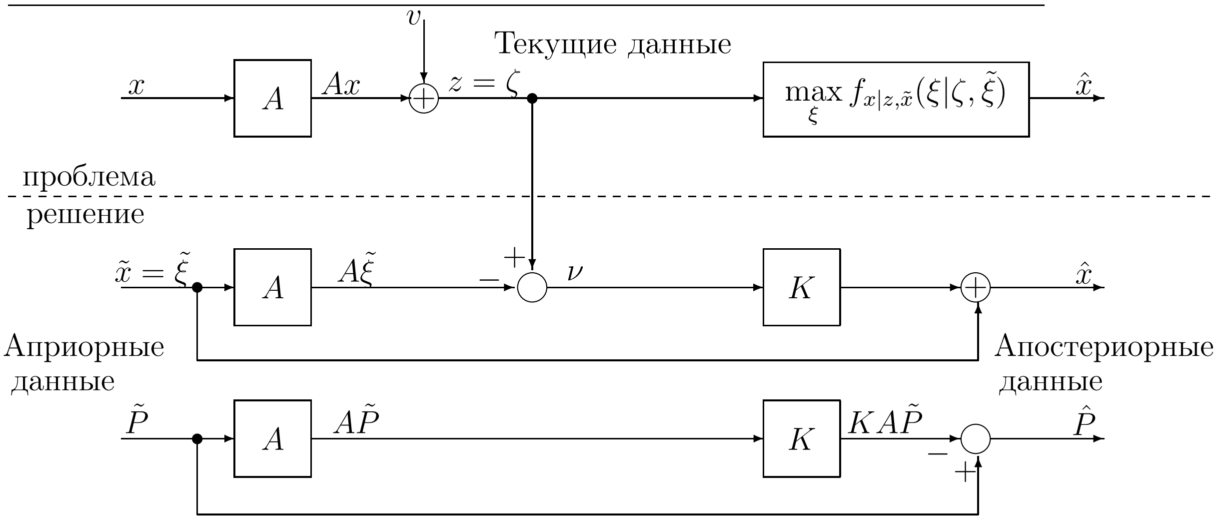


Рис. 2.5: Статистическая проблема получения оценки $\hat{x}$ по критерию МАВ и ее решение (полная статистическая интерпретация МНК-решения). Между моментами получения текущих данных апостериорные данные занимают место априорных данных, и процесс решения повторяется.

Сравнивая (2.51), (2.52) и (2.53) с п. **??**, убеждаемся в том, что исходя из другой — чисто статистической задачи оценивания вектора x по зашумленным наблюдениям его компонент через матрицу A (см. рис. 2.4), мы получим полное алгебраическое совпадение с рекурсией для МНК в стандартной ковариационной форме, если при этом принято во внимание, что $z = \zeta$ и $\tilde{x} = \tilde{\xi}$, а в качестве искомой наилучшей оценки $\hat{x}$ для вектора x мы приняли апостериорное среднее значение (2.52), что соответствует критерию максимума апостериорной вероятности (МАВ) (2.37), (2.38), (2.42).

Таким образом, при нормальных законах распределения и независимых ошибках наблюдения v, МНК-решение $\hat{x}$ интерпретируется как МАВ-оценка вектора x (рис. 2.5). Именно МАВ-оценка отвечает на поставленный выше вопрос (см. между (2.36) и (2.37)): как наилучшим образом скомбинировать априорные данные $(\tilde{\xi}, \tilde{P})$ с текущими данными ζ.

Для решения этой проблемы, как видно из изложенного, пришлось вычислить апостериорную плотность (2.38) и затем найти максимизирующий ее аргумент ξ, — он оказался равен (2.52). Однако, потребовались сложные вычисления, которые пока еще не коснулись отмеченного выше приведения отношения определителей в (2.42) к одному определителю. Очевидно из условия нормировки плотности, он должен оказаться равен $|\hat{P}|$, но это еще предстоит доказать. Отложим это доказательство на окончание этого п. **??** и сейчас рассмотрим, что будет, если изменить критерий, то есть ради простоты максимизировать по ξ не (2.38), а только одну из плотностей в числителе (2.38), — именно, (2.39), что означает критерий максимального правдоподобия, МП. Очевидно, такое решение получается моментально: максимум (2.39) по ξ совпадает с минимумом квадратичной формы в показателе экспоненты. При $R = I$ (что уже обсуждалось как принятое неограничительное условие нормализации зашумленных наблюдений), имеем

$$\hat{x} = \arg\min_{\xi}(\zeta - A\xi)^T(\zeta - A\xi),$$

то есть $\hat{x}$ есть МНК-решение, $\hat{x}$, системы (2.1), переписанной здесь в виде $\zeta = A\xi + v$, и одновременно, это $\hat{x}$ есть оценка максимума правдоподобия, $\hat{x}$.

Тем самым, получена полная статистическая интерпретация МНК-решения с точки зрения теории оценок:

1. Если в МНК-решении учтена априорная информация, то полученное решение совпадает с оценкой МАВ, $\hat{x}$ (2.52).

2. Если в МНК-решении не учтена априорная информация, то полученное решение имеет смысл оценки МП, $\hat{x}$.

3. Если априорная информация крайне недостоверна, что выражается большим ростом диагональных элементов матрицы $\tilde{P}$ по сравнению с внедиагональными элементами, или иначе $\tilde{P}^{-1} \to 0$ при $\tilde{P}^{-1} = \epsilon^2 I$, $\epsilon \to 0$, то $\hat{P}^{-1} \to A^T A$, что формально видно из (2.48) при $R = I$. Иными словами, в этом случае

$$\hat{x} \to \left(A^T A\right)^{-1} A^T \zeta = \hat{x} \tag{2.54}$$

что следует из преобразований выражения (2.50) для (2.52) при использовании (2.48) в пределе при $\tilde{P}^{-1} \to 0$ (и с неограничительным условием нормализации наблюдений $R = I$), — если, конечно, матрица $\left(A^T A\right)$ обратима. Если же нет, тогда вместо (2.54) предельное соотношение записывается в виде

$$\hat{x} \to A^+\zeta + \left(I - A^+A\right)\tilde{\xi} \tag{2.55}$$

что вытекает из теоремы **??** (см. п. **??**) и означает сходимость $\hat{x}$ к общему решению нормальных уравнений МНК.

Remark 5 *В (2.55) первое слагаемое есть нормальное псевдорешение при минимизации* $\|z - Ax\|^2$ *, где* $z = \zeta$ *, а второе — проекция любого* $\tilde{\xi}$ *на* $\mathcal{N}(A)$ *.*

Теперь, в завершение необходимых действий по приведению (2.42) к стандартному виду плотности для нормального закона распределения, кроме (2.49), докажем, что

$$\frac{|R| \cdot |\tilde{P}|}{|A\tilde{P}A^T + R|} = |\hat{P}| \tag{2.56}$$

где $\hat{P}$ определено формулой (2.53). Для этого введем вспомогательную матрицу

$$P^* = \left[\begin{array}{c|c} \tilde{P} & \tilde{P}A^T \\ A\tilde{P} & A\tilde{P}A^T + R \end{array}\right].$$

Выполним ее блочное UL-разложение, где U — верхнетреугольная матрица с положительно определенными блоками на диагонали, а L — нижнетреугольная матрица с единичной диагональю. Получаем

$$P^* = \left[\begin{array}{cc} \tilde{P} - KA\tilde{P} & \tilde{P}A^T \\ 0 & A\tilde{P}A^T + R \end{array}\right] \left[\begin{array}{cc} I & 0 \\ K^T & I \end{array}\right].$$

Это позволяет найти определитель для P^* как произведение определителей диагональных блоков. С учетом (2.53), имеем

$$|P^*| = |\hat{P}| \cdot |A\tilde{P}A^T + R|. \tag{2.57}$$

С другой стороны, воспользуемся следующей леммой обращения симметричной положительно определенной матрицы.

Lemma 3 *При симметричных* $X_1 > 0$, $X_2 > 0$ *и произвольной* $X_{21} = X_{21}^T$ *справедливо*

$$\begin{bmatrix} X_1 & X_{12} \\ X_{21} & X_2 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I & -X_1^{-1}X_{12} \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1^{-1} & 0 \\ 0 & \left(X_2 - X_{12}^T X_1^{-1} X_{12}\right)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 \\ -X_{12}^T X_1^{-1} & I \end{bmatrix}.$$

Доказательство. Проведите самостоятельно прямой проверкой

Беря определитель в этом выражении, получаем

$$\begin{vmatrix} X_1 & X_{12} \\ X_{12}^T & X_2 \end{vmatrix}^{-1} = |X_1|^{-1} \cdot \left|X_2 - X_{12}^T X_1^{-1} X_{12}\right|^{-1}.$$

Применим этот результат к P^*, обозначая $X_1 = \tilde{P}$, $X_2 = A\tilde{P}A^T + R$, $X_{12} = \tilde{P}A$. Находим

$$|P^*| = |\tilde{P}| \cdot |R|. \tag{2.58}$$

Сопоставляя (2.57) и (2.58), получаем (2.56), что и требовалось доказать.

2.10 Основные результаты

1. Критерий наименьших квадратов

   $$\min_x (z - Ax)^T (z - Ax) \tag{2.59}$$

   для решения алгебраических линейных систем общего вида

   $$z = Ax + v \tag{2.60}$$

   не является статистическим критерием. Решение $\bar{x}$, отвечающее этому критерию, дается нормальными уравнениями

   $$\left(A^T A\right) \bar{x} = A^T z \tag{2.61}$$

   и имеет вид суммы взаимоортогональных векторов:

   $$\bar{x} = A^+ z + \left(I - A^+ A\right) y \tag{2.62}$$

   для некоторого y. Это решение единственно тогда и только тогда, когда $A^+ A = I$, что означает, что только нулевой вектор составляет ядро $\mathcal{N}(A)$ матрицы A (т.е. A имеет полный столбцовый ранг). Нормальное псевдорешение $\bar{x}_0$ есть единственный вектор из (2.62), имеющий минимальную норму, т.е. $\bar{x}_0 = A^+ z$.

2. Статистическая интерпретация задачи (2.59) означает следующее:

   (а) x есть постоянный вектор (случайный или нет), который необходимо оценить по результатам наблюдения z в виде (2.60);

   (б) A есть матрица наблюдений, которая показывает, какие линейные комбинации элементов вектора x включены в вектор наблюдения z;

   (в) v есть случайная ошибка наблюдения, ковариация которой R задана как положительно определенная матрица, но если интерпретация чисто алгебраическая, задача (2.59), (2.60), то $R = I$;

   (г) При статистической интерпретации, матрица $\left(A^T A\right)$ в (2.61) называется информационной матрицей Λ. Она обратима только и только при полном столбцовом ранге матрицы A, $\operatorname{rank} A = n$. Обратная к Λ называется ковариационной матрицей ошибки вектора x, $P = \Lambda^{-1}$, и она характеризует степень неопределенности в решении задачи оценки.

3. Статистическая задача оценки, указанная в предыдущем пункте, приводит к таким же (алгебраически эквивалентным) результатам, как решение алгебраической задачи (2.59), (2.60).

4. Решение задачи (2.59), (2.60), так же как и ее статистического эквивалента, может быть получено в рекуррентной форме, удобной с вычислительной точки зрения. Возможны две базовые эквивалентные рекуррентные формы (взаимно инверсные): информационная (неявная относительно апостериорной оценки $\hat{x}$) и ковариационная (явная относительно $\hat{x}$).

5. Оценка максимального правдоподобия, $\hat{x}$, выбирается так, чтобы максимизировать функцию правдоподобия (2.39). При гауссовых независимых ошибках она является решением тех же нормальных уравнений
$$A^T R^{-1} A\bar{x} = A^T R^{-1}\zeta \tag{2.63}$$
которые отвечают критерию взвешенных наименьших квадратов
$$\min_x (z - Ax)^T R^{-1}(z - Ax), \quad z = \zeta. \tag{2.64}$$

По смыслу, $\hat{x}$ это значение неизвестного вектора x, которое с наибольшей вероятностью обеспечивает то событие, что при случайном наблюдении (2.60) результат окажется равным ζ ($\hat{x}$ обеспечивает наибольшую вероятность события $z = \zeta$). Эта оценка не учитывает никакой априорной информации о векторе x.

6. Оценка максимума апостериорной вероятности, $\hat{x}$, в отличие от $\hat{x}$, является в принципе рекуррентной, т.е. учитывает априорную информацию, и наилучшим образом комбинирует эту информацию с текущими наблюдениями. Она вычисляется в явном виде в алгоритме Калмана (2.51), (2.52), (2.53) (см. п. **??**) или в неявном виде в информационном алгоритме (см. п. **??**). При недостаточной (т.е. крайне неопределенной) априорной информации, оценка $\hat{x}$ будет такой же, как $\hat{x}$, или, что то же самое, $\hat{x}$ в задаче (2.64) с решением из нормальной системы (2.63).

7. Рекурсия (рекуррентная схема вычислений) в алгоритмах МНК и оптимального оценивания является краеугольным камнем теории эффективных вычислительных алгоритмов.