Пример: взвешивание

Приведем еще более простую интерпретацию обратной задачи, связанной с обработкой результатов какого-либо эксперимента, например, взвешивания предметов двух типов (для простоты и определенности, совершенно одинаковых яблок и одинаковых груш). Если, согласно постановке задачи, на весы можно положить любое количество предметов любого типа, то модель каждого акта взвешивания представится линейным уравнением, двумя неизвестными в которых будет масса яблока y_1 и масса груши y_2.

Случай 1. Шум отсутствует (σ=0)

Для определения неизвестного вектора **y** надо провести два акта взвешивания, например:

$$\begin{aligned} y_1 + 2y_2 &= 350 \\ 3y_1 + 4y_2 &= 850 \end{aligned} , \qquad (7)$$

что даст решение $y_1=150$, $y_2=100$.

Согласно (7), в первый раз на весы кладется одно яблоко и две груши, во второй – три яблока и четыре груши. Соответственно, матрица **A**, описывающая модель измерений, и вектор правых частей **b** имеют вид:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} , \quad b = \begin{pmatrix} 350 \\ 850 \end{pmatrix} . \qquad (8)$$

Конечно, поставленную задачу следует рассматривать либо в предположении об идентичности груш и идентичности яблок, либо, считая неизвестные y_1 и y_2 средними массами яблок и груш.

Авторы заранее просят у читателя прощения за такой, на первый взгляд, примитивный пример, но, как мы увидим впоследствии, он позволит нам в дальнейшем разобраться с довольно сложными алгоритмами.

Случай 2. Шум присутствует (σ≠0, матрица A – квадратная)

Если учесть, что каждый акт взвешивания сопровождается погрешностью измерений, то мы получим, скорее всего, несовместную систему уравнений, например:

$$\begin{aligned} y_1 + 2y_2 &= 347 \\ 3y_1 + 4y_2 &= 856 \end{aligned} \quad . \tag{9}$$

Точного решения системы (9) просто не существует, поэтому для получения оценки вектора **y** следует использовать специальные способы, например, метод наименьших квадратов, который выдаст значения y_1 и y_2 с минимальной невязкой системы уравнений (9).

Случай 3. Переопределенная СЛАУ (σ≠0, матрица A – прямоугольная)

Очевидно, что чем больше взвешиваний мы проведем, тем точнее (в условиях присутствующей в эксперименте погрешности измерений) сможем определить искомые величины. Пусть, вдобавок к измерениям (9), мы используем третий акт взвешивания, например, пяти яблок и шести груш.

$$\begin{aligned} y_1 + 2y_2 &= 347 \\ 3y_1 + 4y_2 &= 856 \\ 5y_1 + 6y_2 &= 1342 \end{aligned} \quad . \tag{10}$$

Поскольку мы имеем N=2 неизвестных и M=3 измерений, то матрица **A** теперь имеет размер MxN=3x2. Векторы правых частей **b** и шума имеют размер **σ** – 3x1, а неизвестный вектор **y** – соответственно 2x1. Таким образом, СЛАУ (10) эквивалентно системе (5) со следующими обозначениями:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix} \quad , \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} \quad , \quad b = \begin{pmatrix} 347 \\ 856 \\ 1342 \end{pmatrix} \quad . \tag{11}$$

Опять-таки, система (11) почти всегда является несовместной (за редким исключением, когда, по воле случая, ей удовлетворяет некоторое точное решение). Подчеркнем, что про шум мы, в лучшем случае, знаем, по какому закону он распределен, чему равно его математическое ожидание, дисперсия и функция корреляции (а иногда мы не знаем и этого).

Решать СЛАУ (11) принято, как и (9), методом наименьших квадратов.

Случай 4. Недоопределенная СЛАУ (матрица А – прямоугольная)

В некоторых экспериментах имеет место обратная ситуация – измерений меньше, чем неизвестных, т.е. в наших обозначениях, $M<N$. При таком дефиците измерений решение возможно получить только, если имеется дополнительная *априорная информация* о неизвестном векторе **y**. Ее, как правило, можно извлечь из физического смысла задачи.

Например, имея единственное измерение

$$y_1+2y_2=350 \quad , \tag{12}$$

и привлекая априорную информацию о том, что типичное яблоко в среднем в полтора раза больше груши (это можно определить «на глаз»), мы получим вполне разумное решение $y_1=150$, $y_2=100$.

Описанный случай соответствует $N=2$, $M=1$ и размерам матрицы **A**: 1x2, вектора правых частей **b** и шума **σ** – 1x1 и неизвестного вектора **y** – 2x1.

Случай 5. Плохо обусловленная СЛАУ (матрица А – сингулярная)

В предыдущих примерах матрица **A** была хорошо обусловленной. Вместе с тем, довольно типична обратная ситуация, когда матрица **A** является сингулярной (или «почти сингулярной», что с вычислительной точки зрения почти всегда одно и то же).

Например, можно провести два одинаковых взвешивания, что, в условиях погрешностей эксперимента, скорее всего, приведет к разным результатам:

$$\begin{aligned} y_1+2y_2&=347 \\ y_1+2y_2&=351 \end{aligned} \quad . \tag{13}$$

Определитель матрицы СЛАУ (13) равен нулю, т.е. матрица – сингулярная. Однако, примерно теми же свойствами обладают и несингулярные, но плохо обусловленные СЛАУ.

Методы решения плохо обусловленных и сингулярных СЛАУ аналогичны рассмотренному случаю недоопределенных систем, т.к. плохая обусловленность, фактически, создает дефицит измерений. Поэтому для их решения приходится привлекать дополнительную априорную информацию.

Случай 6. Нелинейная модель (А – оператор)

Предыдущие примеры реализовывали линейную модель измерений и поэтому приводили к системе линейных уравнений. Между тем, часто математическая модель эксперимента является нелинейной. В нашем примере со взвешиванием нелинейность может проявляться в зависимости показаний весов от массы взвешиваемого груза. Например, по мере увеличения массы, результат взвешивания может регулярным образом уменьшаться по сравнению с истинной массой. Иными словами, надо ввести в рассмотрение некоторую поправку:

$$m=m_0\cdot(1-\alpha\cdot y), \tag{14}$$

где α – малый поправочный коэффициент, m_0 – фактическая масса груза, а m – математическое ожидание показаний весов.

В этом случае оператор **A** становится нелинейным, и его уже нельзя представить в виде матрицы. Как следует из (14), «хорошую» (в смысле обусловленности) пару измерений (9) придется переписать в виде системы двух квадратичных уравнений:

$$\begin{aligned}(y_1+2y_2)-\alpha(y_1+2y_2)^2&=347\\(3y_1+4y_2)-\alpha(3y_1+4y_2)^2&=795\end{aligned}\;. \tag{15}$$

В общем случае, система (15) имеет четыре различных решения. Поэтому, даже решив ее, следует выбрать из полученных ответов правильный, что может оказаться нетривиальным. Конечно, в задаче о яблоках и грушах смело можно отбросить комплексные, и даже отрицательные, корни. Но, в случае большего числа уравнений, решений оказывается гораздо больше, что значительно усложняет ситуацию. Поэтому для решения нелинейных обратных задач неприменимы многие методы, которые разработаны для задач линейных.