УДК 519.2:541.1

АЛГОРИТМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННЫХ ЗАДАЧ

В. А. Морозов[1]

Рассмотрены вопросы эффективной реализации регуляризирующих алгоритмов при решении практических неустойчивых задач, сводящихся к проблеме численного решения систем линейных алгебраических уравнений. Особое внимание уделено выбору регуляризирующих параметров (как обоснованных теоретически, так и эвристических, но допускающих правдоподобную интерпретацию) в рамках общих представлений теории регуляризации. Обсуждается эволюция понятий "решение" и "приближенный метод" для линейных систем. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 01–01–0398).

1. Понятие "решения" задачи. Пусть A — матрица порядка $m \times n$. Рассмотрим задачу решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида

$$A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}, \tag{1}$$

где $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_m)' \in \boldsymbol{R}_m$ — заданный, а $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \ldots, u_n)' \in \boldsymbol{R}_n$ — искомый векторы. Классическое понятие решения (1) известно — это вектор $\bar{\boldsymbol{u}} \in \boldsymbol{R}_n$, такой, что $A\bar{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{f}$. При этом система (1) разрешима в классическом смысле, если $\operatorname{rank} A = \operatorname{rank}(A \vdots\ \boldsymbol{f})$, т.е. рангу расширенной матрицы. Для того чтобы система (1) имела, и при том, единственное решение, необходимо и достаточно, чтобы $m = n$, т.е. число уравнений совпадало с числом неизвестных, и $\det A \neq 0$, т.е. чтобы матрица A была невырожденной. В последнем случае говорят, что задача решения (1) *корректно* поставлена и ее решение $\bar{\boldsymbol{u}} = A^{-1}\boldsymbol{f}$, где A^{-1} — обратная к A матрица.

Известно, что для любых норм $\|\bar{\boldsymbol{u}}\| \leqslant \left\|A^{-1}\right\| \|\boldsymbol{f}\|$. Отсюда легко показать, что в рассматриваемом случае решения (1) устойчивы к малым возмущениям как правой части $\boldsymbol{f}$, так и матрицы A (последнее — в силу открытости множества невырожденных матриц).

Однако в вычислительной практике часто встречаются случаи, когда либо условие $m = n$, либо условие $\det A \neq 0$ нарушаются. Тогда задача (1) может быть либо неразрешима (для всех $\boldsymbol{f} \in \boldsymbol{R}_m$), либо иметь неединственное решение, т.е. быть некорректно поставленной. Что можно сделать в этой ситуации? Предлагается расширить понятие решения (1), а именно, ввести понятие обобщенного решения.

Рассмотрим задачу (норма в $\boldsymbol{R}_m$ — евклидова, т.е. среднеквадратическая): найти вектор $\boldsymbol{u}_f \in \boldsymbol{R}_n$, такой, что

$$\|A\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f}\|_{R_m} \to \min, \quad \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n. \tag{2}$$

Такой вектор называется *псевдорешением* или решением (1) в смысле метода наименьших квадратов. Нетрудно показать, что псевдорешение $\boldsymbol{u}_f$ является классическим решением *нормальной системы* уравнений: $A'A\boldsymbol{u} = A'\boldsymbol{f}$, разрешимой при любом векторе $\boldsymbol{f}$. Если $\det A'A \neq 0$, то псевдорешение имеет вид

$$\boldsymbol{u}_f = (A'A)^{-1} A'\boldsymbol{f} \tag{3}$$

и, следовательно,

$$\|\boldsymbol{u}_f\| \leqslant \left\|(A'A)^{-1} A'\right\| \|\boldsymbol{f}\| .$$

Отсюда следует устойчивость по $\boldsymbol{f}$ и A решений задачи (1) в смысле псевдорешений. При этом условие $\det A'A \neq 0$ является необходимым и достаточным для такой устойчивости или *корректности* (1) в смысле псевдорешений.

Замечание. В случае $\det A'A \neq 0$ псевдорешение задачи (1) можно определить просто формулой (3); при этом норма в $\boldsymbol{R}_m$ может быть произвольной.

[1] Научно-исследовательский вычислительный центр, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119992, Москва; e-mail: arush@srcc.msu.su

Если условие $\det A'A \neq 0$ нарушается, то нарушается и корректность задачи (1) в смысле псевдорешений, а именно, псевдорешения, как решения нормальной СЛАУ, являются неединственными и определяются с точностью до элементов из ядра $\ker A$ матрицы A (или решений $\boldsymbol{u}_0$ однородной системы уравнений $A\boldsymbol{u} = 0$). В рассматриваемом случае, если ${\boldsymbol{u}_f}^0$ — некоторое псевдорешение (1), то любое его псевдорешение

$$\boldsymbol{u}_f = \boldsymbol{u}_0 + {\boldsymbol{u}_f}^0,$$

где $\boldsymbol{u}_0$ — некоторый элемент из $\ker A$. Псевдорешение ${\boldsymbol{u}_f}^*$ минимальной среднеквадратичной нормы называется *нормальным псевдорешением* (1).

Нормальное псевдорешение в силу известной теоремы о перпендикуляре определяется однозначно. Очевидно, отображение $\boldsymbol{f} \to {\boldsymbol{u}_f}^*$ является линейным и задается матрицей A^+, которая называется *псевдообратной*: ${\boldsymbol{u}_f}^* = A^+ f$. Отметим, что нормальное псевдорешение существует и единственно при любом векторе $\boldsymbol{f} \in \boldsymbol{R}_m$ и любом ранге матрицы A; более того,

$$\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\| \leqslant \left\|A^+\right\| \|\boldsymbol{f}\|,$$

т.е. нормальные псевдорешения устойчивы при вариации правых частей (1). Итак, задача решения (1) в смысле нормальных псевдорешений корректно поставлена по Адамару. Однако это не устраняет ее возможной неустойчивости при произвольных вариациях матрицы A. Это легко увидеть, взяв

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{f} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда ${\boldsymbol{u}_f}^* = (0,0)'$. Если $\tilde{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$, $\tilde{\boldsymbol{f}} = (0,1)'$ (где число $\varepsilon \neq 0$) — приближения к A и $\boldsymbol{f}$ соответственно, то $\boldsymbol{u}_\varepsilon = (0, 1/\varepsilon)'$ — классическое решение системы (1) с возмущенными данными.

Следовательно,

$$\boldsymbol{u}_\varepsilon - {\boldsymbol{u}_f}^* = (0,\ 1/\varepsilon)' \not\to 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon \to 0$$

для любой нормы в $\boldsymbol{R}_2$.

Нетрудно видеть, что понятие псевдорешения обобщает понятие классического решения. Аналогично, понятие нормального псевдорешения обобщает как понятие псевдорешения, так и понятие классического решения. Эти обобщения приводят к снижению требований к исходным данным задачи (матрице A и правой части $\boldsymbol{f}$) и, как следствие, — к расширению круга рассматриваемых проблем.

Итак, если $m = n$, $\det A \neq 0$, то

$${\boldsymbol{u}_f}^* = \boldsymbol{u}_f = \bar{\boldsymbol{u}} = A^{-1}\boldsymbol{f};$$

если $\det A'A \neq 0$ (т.е. $\operatorname{rank} A = n$), то

$$\boldsymbol{u}_f^* = \boldsymbol{u}_f = (A'A)^{-1} A'\boldsymbol{f}.$$

В общем случае имеем

$${\boldsymbol{u}_f}^* = A^+\boldsymbol{f}.$$

Отметим, что если $\operatorname{rank} A = m < n$ (в этом случае система (1) заведомо недоопределена), можно показать, что

$${\boldsymbol{u}_f}^* = A'\boldsymbol{v}^*, \quad \boldsymbol{v}^* :\ AA'\boldsymbol{v}^* = \boldsymbol{f},$$

т.е. ${\boldsymbol{u}_f}^* = A'(AA')^{-1}\boldsymbol{f} = A^+\boldsymbol{f}$. Если, к тому же, $m \ll n$, то эта формула более предпочтительна для определения нормальных псевдорешений.

Если система (1) классически разрешима, то ее нормальное псевдорешение называется просто *нормальным решением*. Последнее понятие введено А.Н. Тихоновым. Понятие нормального псевдорешения (оно называлось просто псевдорешением) было введено автором. Очень быстро это понятие перекочевало в учебную литературу и потеряло авторство.

2. Устойчивость приближенного метода. Заметим, что при любом понятии решения задачи (1) это решение является функцией от $\{A, \boldsymbol{f}\}$, которые мы будем называть исходными данными задачи, т.е. решение имеет вид

$$\boldsymbol{u} = Rd, \tag{4}$$

где R — некоторое отображение исходных данных $d = \{A, \boldsymbol{f}\}$ в пространство решений $\boldsymbol{R}_n$. Если это отображение определено для *любых* d и непрерывно зависит от бесконечно малых вариаций d, то задача (1) называется *корректно поставленной по Адамару* (хотя сам Адамар не варьировал A; в этом заключается ограниченность классического понятия корректности по Адамару). Если задача (1) корректна по Адамару при вариациях d, не выходящих из некоторого подкласса d (например при фиксированном A), то задача (1) называется *условно корректной*, или *корректной по Тихонову*.

С точки зрения этих понятий задача отыскания (нормальных) псевдорешений в общем случае является, как отмечено выше, условно корректной. Так как, однако, при численных расчетах трудно избежать вариаций матрицы A, то естественно ввести понятие устойчивого метода решения (1) в смысле (4). Именно, пусть $\{\tilde{A}, \tilde{\boldsymbol{f}}\}$ — совокупность матрицы $\tilde{A}$ и вектора $\tilde{\boldsymbol{f}}$, однотипных с A и $\boldsymbol{f}$ соответственно, таких, что

$$\left\|\tilde{A} - A\right\| \leqslant h, \quad \left\|\tilde{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{f}\right\| \leqslant \delta,$$

где $h \geqslant 0$ и $\delta \geqslant 0$ характеризуют погрешность задания приближенных данных $\tilde{d} = \{\tilde{A}, \tilde{\boldsymbol{f}}\}$.

Алгоритм (метод) R_σ построения векторов $\tilde{\boldsymbol{u}} = R_\sigma \tilde{d}$, $\sigma \equiv (h, \delta)$, называется *устойчивым* алгоритмом (методом) решения задачи (4), если

$$\|\tilde{\boldsymbol{u}} - Rd\| \to 0, \quad \sigma \to 0.$$

Алгоритм (метод) R_α, $\alpha > 0$:

$$\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha = R_\alpha \tilde{d} \in \boldsymbol{R}_n,$$

определенный для любых данных $\tilde{d}$ и зависящий от α как от параметра, называется *регуляризующим алгоритмом* (РА), если существует зависимость $\alpha = \alpha(\sigma)$, такая, что алгоритм $R_{\alpha(\sigma)}$ является устойчивым алгоритмом решения задачи R.

3. Метод регуляризации А. Н. Тихонова

3.1. Рассмотрим задачу приближенного отыскания "обобщенных" нормальных псевдорешений уравнения (1). Определим задачу минимизации параметрического *функционала Тихонова*:

$$\Phi_\alpha\left[\tilde{A}, \tilde{\boldsymbol{f}}; \boldsymbol{u}\right] = \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|^2_{R_m} + \alpha\left\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\right\|^2_{R_n} \to \min_{\boldsymbol{u}}, \tag{5}$$

где $\{\tilde{A}, \tilde{\boldsymbol{f}}\}$ — совокупность приближенных данных, $\boldsymbol{u}^*$ — "пробный" элемент, роль которого мы определим позднее; нормы в $\boldsymbol{R}_n$ и $\boldsymbol{R}_m$ считаем среднеквадратическими; $\alpha > 0$ — *параметр регуляризации.*

Легко показать, что решение (регуляризованное) $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ задачи (5) определяется как (единственное!) решение *уравнения Эйлера*

$$\left(\tilde{A}'\tilde{A} + \alpha E\right)\boldsymbol{u} = \tilde{A}'\tilde{\boldsymbol{f}} + \alpha\boldsymbol{u}^*, \tag{6}$$

где E — единичная матрица порядка n.

Замечание 1. Если $\tilde{d} \equiv d$, $\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u}_f{}^*$, $\boldsymbol{u}_\alpha$ — соответствующее регуляризованное решение, то, используя приведенные выше определения, получаем:

$$\begin{aligned}\|A\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{f}\|^2_{R_m} + \alpha\|\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_f{}^*\|^2_{R_n} &\leqslant \|A\boldsymbol{u}_f{}^* - \boldsymbol{f}\|^2_{R_m} + \alpha\|\boldsymbol{u}_f{}^* - \boldsymbol{u}_f{}^*\|^2_{R_n} = \\ &= \|A\boldsymbol{u}_f{}^* - \boldsymbol{f}\|^2_{R_m} \leqslant \|A\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{f}\|^2_{R_m},\end{aligned}$$

т.е. $\alpha\left\|\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_f^*\right\|^2_{R_n} = 0$ и, следовательно,

$$\boldsymbol{u}_\alpha \equiv \boldsymbol{u}_f^* \quad \forall\ \alpha > 0.$$

Это весьма важное *свойство стационарности* регуляризованных решений по параметру регуляризации при специальном выборе "пробного" элемента и точных данных.

Случаю $\boldsymbol{u}^* = 0$ соответствует *каноническая* форма метода регуляризации. Если $\boldsymbol{u}^* \neq 0$, то, полагая $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*$ и проводя необходимые преобразования, приходим к канонической форме.

3.2. Итак, пусть вектор $\boldsymbol{u}^* = 0$. Справедлива

Теорема 1. *Пусть параметр $\alpha = \alpha(h, \delta) > 0$ выбран так, что выполнено условие согласования*

$$\lim(\delta + h)/\alpha = 0, \quad \delta,\ h \to 0.$$

Тогда

$$\left\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n} \to 0, \quad \delta,\ h \to 0.$$

Таким образом, метод регуляризации при указанном выборе параметра доставляет устойчивый алгоритм вычисления приближений к нормальному псевдорешению $\boldsymbol{u}_f^*$.

Доказательство. Отметим, что для любого вектора $\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n$ имеем

$$\|A\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f}\|_{R_m} \leqslant \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} + h\,\|\boldsymbol{u}\|_{R_n} + \delta,$$
$$\left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} \leqslant \|A\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f}\|_{R_m} + h\,\|\boldsymbol{u}\|_{R_n} + \delta$$

и, следовательно,

$$\Big|\, \|A\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f}\| - \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\| \,\Big| \leqslant h\,\|\boldsymbol{u}\|_{R_n} + \delta \quad \forall\ \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n.$$

Далее, используя экстремальное свойство векторов $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$, получаем

$$\begin{aligned} \left\|\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|^2_{R_m} + \alpha\,\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|^2_{R_n} &\leqslant \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u}_f^* - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|^2 + \alpha\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|^2_{R_n} \leqslant \\ &\leqslant \left(\mu + h\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n} + \delta\right)^2 + \alpha\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|^2_{R_n}, \quad \mu = \left\|A\boldsymbol{u}_f^* - \boldsymbol{f}\right\|_{R_n}. \end{aligned} \tag{$*$}$$

Таким образом,

$$\tilde{\mu}_\alpha = \left\|\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} \leqslant \mu + h\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\| + \delta + \sqrt{\alpha}\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n} \equiv \mu + \varepsilon_1,$$

где $\varepsilon_1 \to 0$, $h, \delta \to 0$.

Так как $\mu \leqslant \|A\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \boldsymbol{f}\|_{R_m} \leqslant \tilde{\mu}_\alpha + h\,\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} + \delta$, то из $(*)$ получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_\alpha^2 + \alpha\,\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|^2_{R_n} &\leqslant \left(\tilde{\mu}_\alpha + h\,\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} + \delta + h\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n} + \delta\right)^2 + \alpha\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|^2_{R_n} = \\ &= \tilde{\mu}_\alpha^2 + 2\tilde{\mu}_\alpha\left(h\,\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} + \delta + h\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n} + \delta\right) + \left(h\,\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} + h\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n} + 2\delta\right)^2 + \alpha\left\|u_f^*\right\|^2_{R_n}. \end{aligned}$$

Принимая во внимание условие согласования, получаем

$$\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} \leqslant \left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n} + \varepsilon_2, \quad \varepsilon_2 \to 0, \quad \delta,\ h \to 0.$$

Таким образом, семейство $\boldsymbol{u}_\sigma \equiv \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ равномерно ограничено при достаточно малых h, δ и, следовательно,

$$|\tilde{\mu}_\alpha - \mu| \to 0, \quad \|A\boldsymbol{u}_\sigma - \boldsymbol{f}\|_{R_m} \to \mu, \quad \delta,\ h \to 0.$$

Согласно теореме Больцано–Вейерштрасса выделим любое сходящееся подсемейство $\{\boldsymbol{u}_{\sigma'}\} \subseteq \{\boldsymbol{u}_\sigma\}$, $\sigma' \to 0$. Пусть $\lim \boldsymbol{u}_{\sigma'} = \hat{\boldsymbol{u}}$, $\sigma' \to 0$. Тогда имеем из предыдущих соотношений:

$$\lim_{\sigma' \to 0} \|A\boldsymbol{u}_{\sigma'} - \boldsymbol{f}\|_{R_m} = \|A\hat{\boldsymbol{u}} - \boldsymbol{f}\|_{R_m} = \mu,$$
$$\lim_{\sigma' \to 0} \|\boldsymbol{u}_{\sigma'}\|_{R_n} = \|\hat{\boldsymbol{u}}\|_{R_n} \leqslant \left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n},$$

т.е. $\hat{\boldsymbol{u}}$ — нормальное псевдорешение. В силу его единственности имеем $\hat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{u}_f^*$, а в силу произвольности выбора семейства $\{\boldsymbol{u}_{\sigma'}\}$ имеем $\lim\limits_{\sigma \to 0} \boldsymbol{u}_\sigma = \boldsymbol{u}_f^*$, $\sigma = (h, \delta)$.

Теорема доказана.

Замечание 2. Величина $\mu = \inf\limits_{\boldsymbol{u} \in R_n} \|A\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f}\|_{R_m} = \left\|A\boldsymbol{u}_f^* - \boldsymbol{f}\right\|_{R_n}$ называется *мерой несовместности* уравнения (1). Так как (в условиях теоремы 1)

$$\tilde{\mu}_\alpha \equiv \left\|\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \boldsymbol{f}\right\|_{R_m} \to \mu, \quad \sigma \to 0,$$

то мы получаем устойчивый способ вычисления меры несовместности, характеризующей *меру адекватности* модели (1) по "реальным" данным $\{\tilde{A}, \tilde{\boldsymbol{f}}\}$.

Замечание 3. Если $\mu = 0$, т.е. система (1) совместна ($\boldsymbol{u}_f^*$ в этом случае — ее нормальное решение), то теорема 1 допускает усиление. Именно, справедлива

Теорема 2. *Пусть $\mu = 0$, параметр $\alpha = \alpha(h,\delta) > 0$ выбран так, что выполнено условие согласования*

$$\lim_{\delta,h\to 0} (\delta + h)/\sqrt{\alpha} = 0.$$

Тогда, если $\boldsymbol{u}_\sigma \equiv \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$, то

$$\left\|\boldsymbol{u}_\sigma - \boldsymbol{u}^*_f\right\|_{R_n} \to 0, \quad \sigma \to 0.$$

3.3. Реализация условий согласования в теоремах 1 и 2 на практике весьма обременительна в силу их асимптотического характера.

Положим в (5) $\boldsymbol{u}^* = 0$. Регуляризованные решения $\boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha$ при этом выборе $\boldsymbol{u}^*$ назовем первичным регуляризованным семейством решений. Пусть в (5) $\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha$; обозначим $\boldsymbol{u}^{(2)}_\alpha$ решение (5); это вторичное регуляризованное семейство решений. Этот процесс можно и продолжить, но мы на этом остановимся. Используя уравнение Эйлера (6), имеем:

$$\boldsymbol{u}^{(2)}_\alpha = \left(\alpha E + \tilde{A}'\tilde{A}\right)^{-1} \tilde{A}'\tilde{\boldsymbol{f}} + \alpha\left(\alpha E + \tilde{A}'\tilde{A}\right)^{-1} \boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha = \boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha + \left(\alpha E + \tilde{A}'\tilde{A}\right)^{-1}\left(\alpha E + \tilde{A}'\tilde{A}\right)^{-1} \tilde{A}'\boldsymbol{f},$$

т.е. имеем следующую простую связь вторичного и первичного регуляризованных семейств решений:

$$\boldsymbol{u}^{(2)}_\alpha = \boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha - \alpha\,\frac{d\boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha}{d\alpha}. \tag{7}$$

Если $\beta = \tau\alpha$, $\tau \simeq 1$, то

$$\alpha\,\frac{d\boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha}{d\alpha} \simeq \alpha\,\frac{\boldsymbol{u}^{(1)}_\beta - \boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha}{\beta - \alpha} = \frac{\boldsymbol{u}^{(1)}_{\tau\alpha} - \boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha}{\tau - 1}.$$

Одним из первых алгоритмических способов выбора параметра регуляризации был предложенный А. Н. Тихоновым и В. Б. Гласко алгоритм выбора так называемых *квазиоптимальных* значений параметра регуляризации, при которых достигается минимум уклонения соседних регуляризованных решений на "геометрической" сетке узлов:

$$\|\boldsymbol{u}_{\tau\alpha} - \boldsymbol{u}_\alpha\| \to \min_\alpha. \tag{8}$$

Нетрудно видеть, что в непрерывной форме аналог этого метода, предложенный автором, сводится к задаче:

$$\left\|\alpha\,\frac{d\boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha}{d\alpha}\right\| \to \min_\alpha, \tag{9}$$

т.е. к задаче:

$$\left\|\boldsymbol{u}^{(2)}_\alpha - \boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha\right\| \to \min_\alpha. \tag{10}$$

Заметим, что $\boldsymbol{u}^{(2)}_\alpha$ можно вычислить непосредственно согласно (7), так как в силу уравнения Эйлера для $\dfrac{d\boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha}{d\alpha}$ имеем соотношение

$$\left(\alpha E + \tilde{A}'\tilde{A}\right)\frac{d\boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha}{d\alpha} = -\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha.$$

Алгоритм выбора квазиоптимальных значений параметра регуляризации теоретически не обоснован. Он базируется на идее существования "пучка" регуляризованных решений вблизи искомого решения и относится к эвристическим (или прагматическим [10]) способам выбора параметра регуляризации.

3.4. Положим $\boldsymbol{f}^{(1)}_\alpha \equiv A\boldsymbol{u}^{(1)}_\alpha$, $\boldsymbol{f}^{(2)}_\alpha \equiv A\boldsymbol{u}^{(2)}_\alpha$. Из (7) вытекает аналогичное выражение, связывающее $\boldsymbol{f}^{(2)}_\alpha$ и $\boldsymbol{f}^{(1)}_\alpha$, а именно:

$$\boldsymbol{f}^{(2)}_\alpha = \boldsymbol{f}^{(1)}_\alpha - \alpha\,\frac{d\boldsymbol{f}^{(1)}_\alpha}{d\alpha}. \tag{7$'$}$$

Способ определения параметра регуляризации из условия

$$\left\|\alpha\,\frac{d\boldsymbol{f}^{(1)}_\alpha}{d\alpha}\right\| \to \min_\alpha \tag{9$'$}$$

или его дискретного аналога приводит к *модифицированному* алгоритму выбора квазиоптимальных значений параметра регуляризации. Модификация была предложена автором и В. В. Бадевой. Из интуитивных соображений можно сделать вывод, что алгоритм (9′) будет хорошо "работать", если $\tilde{\boldsymbol{f}}$ содержит значительные высокочастотные погрешности, а матрица $\tilde{A}$ аппроксимирует (моделирует) некоторый сильно сглаживающий оператор. Алгоритмы (9), (9′) опробованы в вычислительной практике и дали хорошие результаты.

3.5. Если произвольно устремить α к нулю, то регуляризованные решения $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ могут, вообще говоря, не аппроксимировать нормальное псевдорешение $\boldsymbol{u}_f^*$, хотя невязка $\tilde{\varepsilon}_\alpha = \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}}$ (в случае совместной системы (1), т.е. при $\mu = 0$) может быть как угодно малой. Эта особенность неустойчивых задач заставляет осторожно отнестись к классическим подходам определения приближенных решений. И. И. Кочетов предложил следующий эвристический алгоритм выбора параметра регуляризации. Пусть известна еще одна "реализация" $\approx\!\!\boldsymbol{f}$ правой части (1). Тогда α выбирается из условия

$$\left\| \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \overset{\approx}{\boldsymbol{f}} \right\| \to \min . \tag{11}$$

Если ошибки измерений в $\tilde{\boldsymbol{f}}$ и $\overset{\approx}{\boldsymbol{f}}$ не коррелируют и модулируются "белым" шумом, то алгоритм Кочетова, вероятно, может дать неплохие численные результаты.

3.6. В литературе известны и другие эвристические способы выбора параметра регуляризации. Среди них широкое распространение получил метод "перекрестной проверки" и сравнительно недавно предложенный метод L-кривой. Эти методы либо не обоснованы, либо обоснованы при очень жестких предположениях, так как они рассчитаны на случаи, когда исследователю ничего неизвестно относительно величин h и δ, характеризующих погрешность матрицы A и вектора f соответственно.

Справедлива следующая

Теорема 3. *Пусть известна величина* $\hat{\mu} : \hat{\mu} \geqslant \mu$, $\hat{\mu} \to \mu$. *Если параметр регуляризации выбран согласно принципу невязки, а именно,*

$$\alpha : \ \tilde{\rho}(\alpha) = \hat{\mu} + h\tilde{\gamma}(\alpha) + \delta,$$

где

$$\tilde{\rho}(\alpha) \equiv \left\| \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m}, \quad \tilde{\gamma}(\alpha) \equiv \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n},$$

то

$$\lim_{\delta, h \to 0} \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n} = 0.$$

Действительно, в силу экстремальных свойств $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ и $\boldsymbol{u}_f^*$ имеем

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m}^2 + \alpha \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n}^2 &= \left(\hat{\mu} + h \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n} + \delta\right)^2 + \alpha \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|^2 \leqslant \\ &\leqslant \left\| \tilde{A}\boldsymbol{u}_f^* - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m}^2 + \alpha \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n}^2 \leqslant \left(\hat{\mu} + h \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\| + \delta\right)^2 + \alpha \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n}^2, \end{aligned}$$

т.е.

$$\begin{aligned} &2\hat{\mu}\left(h \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n} + \delta\right) + \left(h \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n} + \delta\right)^2 + \alpha \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n}^2 \leqslant \\ &\qquad \leqslant 2\hat{\mu}\left(h \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n} + \delta\right) + \left(h \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\| + \delta\right)^2 + \alpha \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n}^2 . \end{aligned}$$

Выделяя полный квадрат по $\left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n}$ и $\left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n}$ слева и справа соответственно, получаем

$$\left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n} \leqslant \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n}. \tag{12}$$

Вместе с тем,

$$\begin{aligned} \left\| A\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \boldsymbol{f} \right\|_{R_m} &\leqslant \left\| \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m} + h \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n} + \delta \leqslant \\ &\leqslant \hat{\mu} + h \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n} + \delta + h \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n} + \delta \to \mu, \end{aligned} \tag{13}$$

когда $\sigma \to 0$, $\hat{\mu} \to \mu$.

Из соотношений (12), (13), как и в теореме 1, устанавливается факт: $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \to \boldsymbol{u}_f^*$, если $\sigma \to 0$, $\hat{\mu} \to \mu$.

Замечание 4. Если система (1) совместна, т.е. $\mu = 0$, то $\hat{\mu} = 0$. В общем случае можно положить

$$\hat{\mu} = \inf_{\boldsymbol{u}} \left\{ \left\| \tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m} + h \left\| \boldsymbol{u} \right\|_{R_n} + \delta \right\}.$$

3.7. Имеет место

Теорема 4. *Пусть* $\mu = 0$. *Положим* $\alpha = h$. *Тогда ошибка уклонения*

$$\left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n} = O(h + \delta).$$

Эта замечательная теорема была установлена автором и С. Ф. Гилязовым. Она замечательна по следующим причинам. Во-первых, снята проблема выбора параметра регуляризации вообще. Во-вторых, погрешность решения систем (1) даже в вырожденном случае (неполного ранга) методом регуляризации такая же по порядку h и δ, как для невырожденных. В третьих, согласование параметра регуляризации необходимо только с h, т.е. с мерой погрешности матрицы A; согласование с величиной δ отсутствует! К сожалению, эти факты имеют место в силу конечной размерности задачи. Они допускают распространение и на класс уравнений с нормально разрешимым оператором.

Для несовместных уравнений ($\mu > 0$) автор и С. Ф. Гилязов предложили двухэтапный алгоритм, суть которого заключается в следующем. Сперва $\tilde{\boldsymbol{f}}$ “проецируется” на образ матрицы A с погрешностью $O(h+\delta)$, а затем применяется описанный алгоритм регуляризации для задачи с “подправленной” правой частью.

4. Методы невязки и квазирешений

4.1. Метод невязки. По неравенству треугольника для норм имеем

$$\left\| \tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m} \leqslant \left\| A\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f} \right\|_{R_m} + h \left\| \boldsymbol{u} \right\|_{R_m} + \delta \quad \forall \boldsymbol{u} \in R_n.$$

Если $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_f^*$, то

$$\left\| \tilde{A}\boldsymbol{u}_f^* - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m} \leqslant \mu + h \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n} + \delta \leqslant \hat{\mu} + h \left\| \boldsymbol{u}_f^* \right\|_{R_n} + \delta, \quad \hat{\mu} \geqslant \mu.$$

Таким образом, множество векторов

$$\boldsymbol{u} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}: \quad \left\| \tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m} \leqslant \hat{\mu} + h \left\| \boldsymbol{u} \right\|_{R_n} + \delta$$

формальных решений задачи (1) заведомо непусто: $\boldsymbol{u}_f^* \in \widetilde{\boldsymbol{U}}$. Чтобы минимизировать невязку возможного решения, поставим вариационную задачу: найти $\tilde{\boldsymbol{u}} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}$, для которого

$$\left\| \boldsymbol{u} \right\|_{R_n} \to \min, \quad \boldsymbol{u} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}. \tag{14}$$

В этом суть *метода невязки* в вариационной форме, предложенного автором и В.К. Ивановым в несколько различных формах.

Теорема 5. *Пусть вектор* $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ *— регуляризованное решение, определенное в теореме* 3. *Тогда* $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ *— решение задачи* (14), *т.е. метод невязки разрешим и его решение может быть получено методом регуляризации Тихонова.*

В самом деле, пусть $\tilde{\nu} = \min\limits_{\boldsymbol{u} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}} \|\boldsymbol{u}\|$. Так как вектор $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$, определенный теоремой 3, содержится в $\widetilde{\boldsymbol{U}}$, то $\tilde{\nu} \leqslant \|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|$. С другой стороны, в силу экстремального свойства $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ имеем (для любого $\tilde{\boldsymbol{u}} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}$)

$$\left\| \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m}^2 + \alpha \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n}^2 \leqslant \left\| \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}} - \tilde{\boldsymbol{f}} \right\|_{R_m}^2 + \alpha \left\| \tilde{\boldsymbol{u}} \right\|_{R_n}^2,$$

т.е. $\forall \tilde{\boldsymbol{u}} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}$ выполнено

$$\left(\hat{\mu} + h \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n} + \delta\right)^2 + \alpha \left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n}^2 \leqslant \left(\hat{\mu} + h \left\| \tilde{\boldsymbol{u}} \right\|_{R_n} + \delta\right)^2 + \alpha \left\| \tilde{\boldsymbol{u}} \right\|_{R_n}^2.$$

После простых алгебраических преобразований отсюда получим

$$\left\| \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \right\|_{R_n} \leqslant \left\| \tilde{\boldsymbol{u}} \right\|_{R_n} \quad \forall \tilde{\boldsymbol{u}} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}.$$

Следовательно, $\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} \leqslant \inf\limits_{\boldsymbol{u}\in\widetilde{\boldsymbol{U}}} \|u\|_{R_n}$, т.е. $\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} = \tilde{\nu}$. Так как $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \in \widetilde{\boldsymbol{U}}$, т.е. $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ — допустимый элемент метода невязки, то $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ — решение задачи (14).

Теорема доказана.

4.2. Метод квазирешений В. К. Иванова. Пусть априори известно, что $\boldsymbol{u}_f^*$: $\left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n} \leqslant R < +\infty$, R — известная величина. Тогда

$$\left\|\tilde{A}\boldsymbol{u}_f^* - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} \leqslant \mu + hR + \delta.$$

Определим множество $\boldsymbol{U}_R = \{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n : \ \|\boldsymbol{u}\|_{R_n} \leqslant R\}$. Оно не пусто, так как заведомо $\boldsymbol{u}_f^* \in \boldsymbol{U}_R$.

Сформулируем вариационную задачу минимизации невязки на множестве $\boldsymbol{U}_R$:

$$\left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} \to \min, \quad \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{U}_R. \tag{15}$$

Решение задачи (15) составляет суть *метода квазирешений* В. К. Иванова.

Теорема 6. *Пусть регуляризованное решение $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ (при $\boldsymbol{u}^* = 0$) таково, что $\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} = R$. Тогда $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ — решение задачи* (15), *т.е. метод квазирешений разрешим и его решение может быть определено на базе метода регуляризации.*

Действительно, пусть

$$\tilde{\rho} = \min_{\boldsymbol{u}} \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m}, \quad \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{U}_R.$$

Тогда

$$\left\|\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m}^2 + \alpha\,\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n}^2 \leqslant \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m}^2 + \alpha\,\|\boldsymbol{u}\|_{R_n}^2 \quad \forall\ \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{U}_R$$

и, следовательно,

$$\left\|\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m}^2 + \alpha R^2 \leqslant \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m}^2 + \alpha R^2 \quad \forall\ \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{U}_R,$$

т.е.

$$\left\|\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} \leqslant \min_{\boldsymbol{u}\in\boldsymbol{U}_R} \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} = \tilde{\rho}.$$

Так как $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \in \boldsymbol{U}_R$ в силу выбора α, то отсюда следует, что $\left\|\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} = \tilde{\rho}$, т.е. $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ — решение задачи (15), что и утверждалось.

Замечание 5. Если в методе регуляризации пробный вектор $\boldsymbol{u}^* \neq 0$, то множества $\widetilde{\boldsymbol{U}}$ и $\boldsymbol{U}_R$ модифицируются следующим образом:

$$\widetilde{\boldsymbol{U}} = \left\{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n : \ \left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - \tilde{\boldsymbol{f}}\right\|_{R_m} \leqslant \hat{\mu} + h\,\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\|_{R_n} + \delta^*, \ \ \delta^* = h\,\|\boldsymbol{u}^*\|_{R_n} + \delta \right\},$$
$$\boldsymbol{U}_R = \left\{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n : \ \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\|_{R_n} \leqslant R\right\}.$$

Путем замены $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*$ эти случаи сводятся к рассмотренным.

Замечание 6. При наличии "корреляционных" связей между компонентами вектора $\boldsymbol{u}$ вместо *сглаживающего функционала* $\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\|_{R_m}^2 \equiv \Omega^2\left(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\right)$ часто используется функционал $\Omega^2\left(L\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\right)$, где L — некоторая матрица порядка $s \times n$. Если L обратима, то последовательными заменами: $\boldsymbol{y} = L\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{u}^*$ задача регуляризации сводится к канонической.

5. Упрощенная регуляризация. Если матрица A системы (1) обладает некоторыми специфическими свойствами, то метод регуляризации может принимать и другие формы.

5.1. Метод М. М. Лаврентьева. Пусть матрица $A = A' \geqslant 0$, т.е. матрица A симметрична и неотрицательно определена: $(A\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u})_{R_n} \geqslant 0$ $\forall \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n$. Если $\tilde{A} = \tilde{A}' \geqslant 0$, то регуляризованные решения можно отыскивать, решая систему уравнений (в случае $\mu = 0$):

$$\left(\alpha E + \tilde{A}\right)\boldsymbol{u} = \tilde{\boldsymbol{f}}. \tag{16}$$

Если выполнено только условие аппроксимации $\left\|\tilde{A}\boldsymbol{u} - A\boldsymbol{u}\right\|_{R_m} \leqslant h\,\|u\|_{R_n}$, то, полагая

$$\hat{A} = \frac{\tilde{A} + \tilde{A}'}{2} + hE,$$

имеем

$$\hat{A} = \hat{A}', \quad \left\| \hat{A}\boldsymbol{u} - A\boldsymbol{u} \right\|_{R_n} \leqslant 2h \left\| \boldsymbol{u} \right\|_{R_n},$$

т.е. матрица $\hat{A}$ аппроксимирует A. Легко показать, что $\hat{A} \geqslant 0$. Тогда в (16) можно вместо $\tilde{A}$ положить $\hat{A}$.

Таким образом, если выполнено условие аппроксимации, то всегда можно считать, что аппроксимирующая матрица $\tilde{A} = \tilde{A}' \geqslant 0$.

Если $\mu > 0$, т.е. система (1) несовместна, регуляризация (16) несостоятельна. Однако если положить

$$\tilde{\boldsymbol{v}}_\alpha = \tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha + \alpha \frac{d\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha}{d\alpha},$$

где $\dfrac{d\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha}{d\alpha}$ удовлетворяет системе уравнений

$$\left(\alpha E + \tilde{A} \right) \frac{d\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha}{d\alpha} = -\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha,$$

то можно показать, что $\tilde{\boldsymbol{v}}_\alpha \to \boldsymbol{u}^*_f$ при таком α, что

$$h/\alpha \to 0, \quad h, \delta, \alpha \to 0.$$

5.2. Мнимый сдвиг спектра. Условие неотрицательности A не всегда проверяется легко, в то время как ее симметрия иногда просто очевидна.

Пусть $\tilde{A} = \tilde{A}'$. Условие неотрицательности A не предполагается. Тогда вместо (16) можно рассмотреть регуляризацию типа

$$\left(i\alpha E + \tilde{A} \right) \boldsymbol{u} = \tilde{\boldsymbol{f}}, \tag{17}$$

где $i = \sqrt{-1}$ — мнимая единица. В вычислительном плане решение системы (17) ничуть не тяжелее решения системы (16).

Алгоритмы типа (16) и (17) называют еще методами сдвига спектра (В. Н. Фаддеева). Другие аспекты этой проблемы рассмотрены автором и А. Б. Назимовым.

6. Численные методы регуляризации

6.1. Общий случай. Мы уже говорили, что если стабилизующий функционал имеет вид $\Omega^2 \left(L\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^* \right) \equiv \left\| L\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^* \right\|^2_{R_n}$, L^{-1} — обратная матрица к L, то можно сделать замену переменных $\boldsymbol{y} = L\boldsymbol{u}$. Тогда (знак "$\sim$" опускаем для простоты)

$$\Phi_\alpha[A, \boldsymbol{f}; \boldsymbol{u}] \equiv \left\| B\boldsymbol{y} - \boldsymbol{f} \right\|^2_{R_m} + \alpha \left\| \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^* \right\|^2_{R_n},$$

где матрица $B = AL^{-1}$ является решением матричного уравнения: $BL = A$. Часто L — верхняя (или нижняя) треугольная матрица, так что решение этого уравнения осуществляется достаточно просто. Далее ортогональными преобразованиями матрица B приводится к верхней (нижней) двухдиагональной матрице D (или к "диагональной" сингулярным разложением B); тогда $PAQ = D$, где P и Q — ортогональные матрицы. В силу инвариантности среднеквадратической нормы относительно ортогональных преобразований, имеем

$$\Phi_\alpha[A, \boldsymbol{f}; \boldsymbol{u}] \equiv \left\| D\boldsymbol{z} - \boldsymbol{g} \right\|^2_{R_m} + \alpha \left\| \boldsymbol{z} - \boldsymbol{z}^* \right\|^2_{R_n}, \quad \boldsymbol{z} \in \boldsymbol{R}_n,$$

где $Q\boldsymbol{y} = \boldsymbol{z}$, $g = P'\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{z}^* = Q'\boldsymbol{u}^*$. Уравнение Эйлера полученного функционала имеет вид

$$D'D\boldsymbol{z} + \alpha \left(\boldsymbol{z} - \boldsymbol{z}^* \right) = D'\boldsymbol{g}.$$

Матрица $D'D$ здесь или трехдиагональна, или диагональна и соответствующая система уравнений решается за порядка n арифметических операций.

Пусть имеется r значений параметра регуляризации. Тогда после выполнения указанных предварительных преобразований общее число операций равно $O\left(n^2m + rn^2\right)$, если каждый раз восстанавливать регуляризованные решения $\boldsymbol{u}_\alpha$ ($\alpha := \alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_r$), либо $O\left(n^2m + n^2 + rn\right)$, если регуляризованное решение восстанавливается только один раз. Таким образом, если $r \ll n$, то общее количество операций (по порядку) *такое же*, как и для невырожденной задачи (1).

6.2. Если матрица A теплицева либо циркулянтная, либо обладает другими специфическими свойствами, то возможно еще более экономное решение регуляризованной задачи. Иногда целесообразно переписать регуляризованное уравнение Эйлера (6) в блочном виде

$$\begin{cases} A\boldsymbol{u} - \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{f}, \\ \alpha\boldsymbol{u} + A'\boldsymbol{\xi} = \alpha\boldsymbol{u}^*, \end{cases}$$

где $\boldsymbol{\xi}$ — неизвестный вектор из $\boldsymbol{R}_m$.

6.3. Обратим внимание также на следующую интерпретацию метода регуляризации. Именно, запишем "взвешенную" систему уравнений

$$\begin{cases} A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}, \\ \sqrt{\alpha}L\boldsymbol{u} = \sqrt{\alpha}\boldsymbol{u}^* \end{cases}$$

в виде

$$C_\alpha\boldsymbol{u} = \boldsymbol{F},$$

где

$$C_\alpha = \begin{pmatrix} A \\ \cdots \\ \sqrt{\alpha}\,L \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{F} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{f} \\ \cdots \\ \sqrt{\alpha}\,\boldsymbol{u}^* \end{pmatrix}.$$

Нетрудно видеть, что уравнение Эйлера (6) эквивалентно нормальной системе уравнений

$$C'_\alpha C_\alpha\boldsymbol{u} = C'_\alpha\boldsymbol{F},$$

а функционал Тихонова имеет вид

$$\Phi_\alpha \equiv \|C_\alpha\boldsymbol{u} - \boldsymbol{F}\|^2_{R_m\times R_n}.$$

Таким образом, задача регуляризации по Тихонову эквивалентна обобщенному (параметрическому) методу наименьших квадратов

$$\|C_\alpha\boldsymbol{u} - \boldsymbol{F}\|^2 \to \min_{\boldsymbol{u}}.$$

6.4. В ряде практических задач матрицы A и $\tilde{A}$ явно не известны, однако достаточно эффективно вычисляются векторы $\boldsymbol{y} = \tilde{A}\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{z} = \tilde{A}'\boldsymbol{v}$. В этом случае для минимизации функционала Тихонова (5) весьма целесообразно применение различных итерационных методов, в том числе градиентных или метода сопряженных градиентов. При этом можно считать $\alpha = 0$, так как роль параметра регуляризации в рассматриваемом случае играет номер итерации.

Подробную информацию об итерационных методах регуляризации можно получить в монографиях Ф.П. Васильева, С.Ф. Гилязова, О.М. Алифанова.

6.5. Пусть $h = \delta = 0$ и $\boldsymbol{u}_\alpha$ — решение задачи

$$\Phi_\alpha[A, \boldsymbol{f}; \boldsymbol{u}] \to \min_{\boldsymbol{u}}.$$

Тогда имеем

$$\|A\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{f}\|^2_{R_m} + \alpha\,\|\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}^*\|^2_{R_n} \leqslant \|A\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{f}\|^2_{R_m} \equiv \Delta^2,$$

т.е.

$$\|\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}^*\|_{R_n} \leqslant \frac{\Delta}{\sqrt{\alpha}}, \quad \alpha > 0. \tag{18}$$

Пусть $\alpha > \beta \geqslant \beta_0 > 0$. Записывая уравнение Эйлера для $\boldsymbol{u}_\alpha$ и $\boldsymbol{u}_\beta$ и вычитая полученные уравнения, приходим к записи

$$\alpha\left(\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_\beta\right) + A'A\left(\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_\beta\right) = (\alpha - \beta)\left(\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{u}_\beta\right).$$

Умножим скалярно это соотношение на $\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_\beta$ и применим неравенство Коши–Буняковского; имеем

$$\alpha\,\|\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_\beta\|^2_{R_n} + \|A(\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_\beta\|^2_{R_m} \leqslant (\alpha - \beta)\,\|\boldsymbol{u}_\beta - \boldsymbol{u}^*\|_{R_n}\ \|\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_\beta\|_{R_n}$$

и, следовательно,

$$\|\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_\beta\|_{R_n} \leqslant \frac{\alpha - \beta}{\alpha}\,\|\boldsymbol{u}_\beta - \boldsymbol{u}^*\|_{R_n} \leqslant \frac{\alpha - \beta}{\alpha}\,\frac{\Delta}{\sqrt{\beta_0}}.$$

Если $\alpha = \tau\beta$, $\tau \gtrsim 1$, то

$$\|\boldsymbol{u}_{\tau\beta} - \boldsymbol{u}_{\beta}\|_{R_n} \leqslant \frac{\tau - 1}{\tau}\,\frac{\Delta}{\sqrt{\beta_0}}\,. \tag{19}$$

Из соотношений (18), (19) следует очень важный результат, полученный автором еще в 60-х годах: пусть параметр регуляризации $\alpha:\ 0 < \underline{\alpha} \leqslant \alpha \leqslant \bar{\alpha}$. Тогда, согласно (18), можно для наперед заданного $\varepsilon > 0$ выбрать достаточно большое $\bar{\alpha}$ и $\tau \gtrsim 1$ так, чтобы

$$\|\boldsymbol{u}_{\bar{\alpha}} - \boldsymbol{u}^*\|_{R_n} < \varepsilon, \quad \|\boldsymbol{u}_{\tau\alpha} - \boldsymbol{u}_{\alpha}\|_{R_n} < \varepsilon \quad \forall\ \alpha : \underline{\alpha} \leqslant \alpha \leqslant \bar{\alpha},$$

т.е. регуляризованные решения "равномерно" близки в узлах "геометрической" сетки. Это означает, что выбрав некоторый способ минимизации, в качестве начального приближения к регуляризованному решению $\boldsymbol{u}_{\bar{\alpha}}$ можно взять $\boldsymbol{u}^*$; затем в узле $\alpha_1 = \bar{\alpha}/\tau$ — полученное приближение к $\boldsymbol{u}_{\bar{\alpha}}$, а в узле $\alpha_2 = \alpha_1/\tau$ — приближение к $\boldsymbol{u}_{\alpha_1}$ и т.д. Можно ожидать, что уточняющих итераций будет не так уж много, т.е. мы приходим к значительной экономии вычислительных ресурсов.

Следует отметить, что факт "равномерности" регуляризованных решений имеет место и при *нелинейном* операторе A, что очень важно для эффективного решения так называемых обратных задач, как правило, нелинейных [3].

6.6. При решении неустойчивых задач важную роль имеет априорная информация как качественного, так и количественного характера. Например, пусть известно, что вектор $\boldsymbol{u}$ — это дискретизация гладкой функции $u(x)$, т.е. хотя бы один раз дифференцируемой. Как это использовать в расчетах? Имеем

$$u(x) = u(t) + \int_t^x u'(\xi)\,d\xi, \quad x, t \in [a, b].$$

Умножим это соотношение на dt и проинтегрируем от a до b. Получаем интегральное представление гладкой функции

$$u(x) = \frac{1}{b-a}\int_a^b u(t)\,dt + \frac{1}{b-a}\int_a^b\int_t^x v(\xi)\,d\xi dt, \quad v \equiv u'.$$

В дискретной форме искомое решение (1) имеет вид $\boldsymbol{u} = B\boldsymbol{z}$, где B — некоторая матрица, $\boldsymbol{z}$ — некоторый вектор. Тогда, полагая $\boldsymbol{u} = B\boldsymbol{z}$ в (1), получаем новую систему относительно вектора $\boldsymbol{z}$, найдя который получаем приближение к $\boldsymbol{u}$. Это самый очевидный путь. Не менее очевидным является и следующий прием: запишем *новую* систему уравнений

$$\begin{cases} A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}, \\ \boldsymbol{u} - B\boldsymbol{z} = 0 \end{cases}$$

относительно вектора $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{z})^T$ и решаем ее согласно обсужденной ранее методике. Эта система сохраняет все особенности матриц A и B, что позволяет построить эффективный алгоритм ее решения.

Относительно $\boldsymbol{u}$ и $\boldsymbol{z}$ может быть известна и другая, количественная информация типа $\boldsymbol{u} \geqslant 0$, $\boldsymbol{z} \geqslant 0$ или $\|\boldsymbol{z}\| \leqslant R$ и т.п. В общем случае можно решать задачу минимизации вида

$$\|A\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f}\| \to \min_{\boldsymbol{u}}, \quad \boldsymbol{u} \in D, \tag{20}$$

где D — некоторое непустое множество ограничений. Наш опыт показывает, что для решения такого типа задач весьма эффективным может оказаться применение метода проекции сопряженных градиентов. Заметим, что в последнее время вообще сильно возрос интерес к этому методу. По-видимому, впервые численная эффективность метода была показана в работах автора, М. К. Самарина, Н. Л. Гольдман, В. А. Малышева.

Суть эффективности метода проекции сопряженных градиентов состоит в следующем. Известно, что если A — матрица небольшего ранга $r \ll n$, то число итераций метода сопряженных градиентов не более чем r. При наличии ограничений на $\boldsymbol{u}$ (типа монотонности, выпуклости и т.п.) *практический ранг* задачи (20) также может оказаться незначительным (это часто подтверждается в численных экспериментах) и тогда метод проекции сопряженных градиентов ведет себя так же, как при решении СЛАУ с небольшим рангом. Известная в теории метода его численная неустойчивость либо не успевает проявиться, либо ее влияние не оказывается катастрофическим ввиду наличия более значительных погрешностей в исходных данных.

Автор выражает искреннюю благодарность О.Б. Арушаняну и М.В. Морозову за помощь в подготовке статьи к печати.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
2. *Алифанов О.М., Артюхин Е.А., Румянцев С.В.* Экстремальные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1988.
3. *Engl H.W., Hanke M., Neubauer A.* Regularization of inverse problems. Kluwer: Dordrecht, 1996.
4. *Морозов В.А.* Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука, 1987.
5. *Морозов В.А.* Методы регуляризации неустойчивых задач. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
6. *Морозов В.А., Гребенников А.И.* Методы решения некорректно поставленных задач. Алгоритмический аспект. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1992.
7. *Морозов В.А., Малышев В.А.* Линейные полугруппы и дифференциальные неравенства. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1995.
8. *Гилязов С.Ф.* Методы решения линейных некорректных задач. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
9. *Hanke M.* Conjugate gradient type methods for ill–posed problems. Longman: Harlow, 1996.
10. *Hansen P.Ch.* Rank-deficient and discrete ill-posed problems. Lingby, 1996.
11. *Васильев Ф.П.* Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1988.
12. *Kersch A.* An introduction to the mathematical theory of inverse problems. New York: Springer Verlag, 1996.

Поступила в редакцию
06.03.2003