В.А.Морозов

АЛГОРИТМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННЫХ ЗАДАЧ[1]

Abstract

Ниже излагается текст лекций, прочитанных автором в рамках работы Первой международной научной школы “Обратные задачи в технике и естествознании: идентификация, диагностика, проектирование и оптимальное планирование” (Россия, Москва–Санкт-Петербург, 30.05–5.06, 1998 г.). Автор выражает глубокую благодарность организаторам школы за приглашение принять участие в ее работе, особенно — Председателю Школы, профессору О. М. Алифанову.

1. Понятие “решения” задачи

Пусть A — матрица порядка $m \times n$. Рассмотрим задачу решения системы линейных уравнений вида

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

где $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_m)' \in \boldsymbol{R}_m$ — заданный, $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \ldots, u_n)' \in \boldsymbol{R}_n$ — искомый вектор. 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 $\operatorname{rang} A = \operatorname{rang}(A \vdots \boldsymbol{f})$, т.е. рангу расширенной матрицы. Для того чтобы (1) имело 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. 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.

[1]Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 98–01–00345), ФНП “Университеты России — фундаментальные исследования” (проект № 4–5584) и гранта РФФИ–“Кубань”(проект № 98–01–03628).

Известно, что для любых норм

$$\|\bar{\boldsymbol{u}}\| \leq \left\|A^{-1}\right\| \|\boldsymbol{f}\| .$$

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. является 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, очевидно, псевдорешение

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

и, следовательно,

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

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.

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:

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

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,

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

при любой норме 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. $\operatorname{rang} A = n$), то

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

В общем случае:

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

Отметим, что если $\operatorname{rang} A = m$ (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. $\boldsymbol{u}_f{}^* = A'\left(AA'\right)^{-1}\boldsymbol{f} = A^+\boldsymbol{f}$. Если $m \ll n$, 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

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

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 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

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

где $h \geq 0$ и $\delta \geq 0$ 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 R (4), если

$$\left\|\tilde{\boldsymbol{u}} - R\tilde{d}\right\| \to 0, \quad \sigma \to 0.$$

Алгоритм (метод) R_α, $\alpha > 0$:

$$\tilde{v}u_\alpha = R_\alpha \tilde{d} \in \boldsymbol{R}_n,$$

определенный для любых данных $\tilde{d}$, зависящий от α как от параметра, называется *регуляризующим* (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:

$$\left\|A\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{f}\right\|^2_{R_m} + \alpha\left\|\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{u}_f{}^*\right\|^2_{R_n} \le \left\|A\boldsymbol{u}_f{}^* - \boldsymbol{f}\right\|^2_{R_m} + \alpha\left\|\boldsymbol{u}_f{}^* - \boldsymbol{u}_f{}^*\right\|^2_{R_n} =$$
$$= \left\|A\boldsymbol{u}_f{}^* - \boldsymbol{f}\right\|^2_{R_m} \le \left\|A\boldsymbol{u}_\alpha - \boldsymbol{f}\right\|^2_{R_m},$$

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

$$\boldsymbol{u}_\alpha \equiv \boldsymbol{u}_f^* \quad \forall\, \alpha > 0. \tag{6}$$

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 $\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n$, очевидно, имеем:

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

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

и, следовательно,

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

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

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

Таким образом

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

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

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

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

Принимая во внимание условия согласование, отсюда получаем:

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

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:

$$\lim_{\sigma' \to 0} \|A\boldsymbol{u}_{\sigma'} - \boldsymbol{f}\|_{R_m} = \|A\hat{\boldsymbol{u}} - \boldsymbol{f}\|_{R_m} = \mu,$$

$$\lim_{\sigma' \to 0} \|\boldsymbol{u}_{\sigma'}\|_{R_n} = \|\hat{\boldsymbol{u}}\|_{R_n} \le \left\|\boldsymbol{u}_f^*\right\|_{R_n},$$

т.е. $\hat{\boldsymbol{u}}$ — нормальное псевдорешение. В силу его единственности имеем: $\hat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{u}_f^*$, а в силу произвольности выбора семейства $\{\boldsymbol{u}_{\delta'}\}$ 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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

т.е. к задаче:

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

Заметим, что $\boldsymbol{u}_\alpha^{(2)}$ можно и не вычислять, так как в силу уравнения Эйлера имеем для $\frac{d\boldsymbol{u}_\alpha^{(1)}}{d\alpha}$ уравнение:

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

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

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

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

Способ определения параметра регуляризации из условия

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

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 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 к определению приближенных решений. И. И. Кочетов предложил следующий эвристический алгоритм выбора параметра регуляризации. Пусть известна еще одна реализация $\tilde{\tilde{\boldsymbol{f}}}$ правой части (1). Тогда α:

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

Если ошибки измерений в $\tilde{\boldsymbol{f}}$ и $\tilde{\tilde{\boldsymbol{f}}}$ 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 h и δ, характеризующих погрешность матрицы A и вектора f соответственно.

Справедлива следующая

Теорема 3. Пусть известна величина $\hat{\mu} : \hat{\mu} \geq \mu$, $\hat{\mu} \to \mu$. 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:

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

т.е.

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

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:

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

Вместе с тем,

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

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 и $\hat{\mu} = 0$. 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. Пусть система (1) совместна: $\mu = 0$. Тогда 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:

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

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

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

Таким образом, множество векторов

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

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

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

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, очевидно, вектор $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$, определенный теоремой 3, содержится в $\widetilde{\boldsymbol{U}}$, то $\tilde{\nu} \le \|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|$. С другой стороны, в силу экстремального свойства $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha$ имеем (для любого $\tilde{\boldsymbol{u}} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}$):

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

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

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

Отсюда легко вытекает, после простых алгебраических преобразований:

$$\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} \le \|\tilde{\boldsymbol{u}}\|_{R_n} \quad \forall \tilde{\boldsymbol{u}} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}$$

и, следовательно, $\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} \le \inf\limits_{\boldsymbol{u} \in \widetilde{\boldsymbol{U}}} \|u\|_{R_n}$, т.е. $\|\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha\|_{R_n} = \tilde{\nu}$. Так как $\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha \in \widetilde{\boldsymbol{U}}$, т.е. 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 $\boldsymbol{u}_f^*: \ \|\boldsymbol{u}_f^*\|_{R_n} \le R < +\infty$, R — известная величина. Тогда

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

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

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

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

Задача (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

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

и, следовательно,

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

т.е.

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

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:

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

$$\boldsymbol{U}_R = \left\{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n : \ \left\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\right\|_{R_n} \le R\right\}.$$

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* $\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}^*\|^2_{R_m} \equiv \Omega^2(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}^*)$ часто используется функционал $\Omega^2(L\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}^*)$, 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 $A=A' \geq 0$, т.е. симметричная и неотрицательно определена: $(A\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})_{R_n} \geq 0 \ \forall \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}_n$. Если $\tilde{A}=\tilde{A}'$, 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 только выполнено условие аппроксимации: $\left\|\tilde{A}\boldsymbol{u}-A\boldsymbol{u}\right\|_{R_m} \leq h\left\|u\right\|_{R_n}$, то, полагая

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

имеем:

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

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

Итак, всегда можно считать, если выполнено условие аппроксимации, что аппроксимирующая матрица $\tilde{A}=\tilde{A}' \geq 0$.

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 $\frac{d\tilde{\boldsymbol{u}}_\alpha}{d\alpha}$, очевидно, 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 α:

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

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 (($\tilde{A} = \tilde{A}'$)

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

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 $\Omega^2\left(L\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\right) \equiv \|L\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*\|^2_{R_n}$, L^{-1} — обратная матрица к L, то можно сделать замену переменных $\boldsymbol{y} = L\boldsymbol{u}$. Тогда (знак "$\sim$" опускаем для простоты):

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

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 либо к верхней (нижней) двухдиагональной матрице D (или к “диагональной” сингулярным разложениям B); тогда $PAQ = D$, где P и Q — ортогональные матрицы. Тогда, в силу инвариантности среднеквадратической нормы относительно ортогональных преобразований, имеем:

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

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

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

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

Если мы имеем r значений параметра регуляризации, то 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 читателей 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

$$C\boldsymbol{u} = \boldsymbol{F},$$

где

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

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

$$C'C\boldsymbol{u} = C'\boldsymbol{F},$$

а функционал Тихонова $\Phi_\alpha \equiv \|C\boldsymbol{u} - \boldsymbol{F}\|^2_{R_m \times R_n}$.

Таким образом, задача регуляризации по Тихонову эквивалентна общему методу наименьших квадратов

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

6.4. В ряде практических задач матрицы A и $\tilde{A}$ явно неизвестны, 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

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

т.е.

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

Пусть $\alpha > \beta \ge \beta_0 > 0$. Записывая уравнение Эйлера для $\boldsymbol{u}_\alpha$ и $\boldsymbol{u}_\beta$ и вычитая их, получаем:

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

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

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

и, следовательно

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

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

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

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

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

т.е. регуляризованные решения “равномерно” близки в углах “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 $\boldsymbol{u}_{\bar{\alpha}}$; затем в узле $\alpha_2 = \alpha_1/\tau$ — приближение к $\boldsymbol{u}_{\alpha_1}$ и т.д. Можно надеяться, 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:

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

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

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

В дискретной форме искомое решение (1) $\boldsymbol{u} = B\boldsymbol{z}$, 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 $\begin{pmatrix} \boldsymbol{u} \\ \cdots \\ \boldsymbol{z} \end{pmatrix}$ 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: $\boldsymbol{u} \geq 0$, $\boldsymbol{z} \geq 0$ или $\|\boldsymbol{z}\| \leq R$ и т.п. В общем случае можно решать задачу минимизации типа

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

где D — некоторое непустое множество ограничений. Наш опыт показывает, что для решения такого типа задач весьма эффективно 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, по-видимому, 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 подтверждается практически) и тогда метод проекции сопряженных градиентов ведет также, 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 также выражает искреннюю благодарность О. Б. Арушаняну и М. В. Морозову за помощь в подготовке статьи к печати.

Литература

[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 Acad. Publ., 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. Pitman Research Notes in Math. № 327. Longman, Harlow, 1996.

[10] **Hansen P. Ch.** Rank–deficient and Discrete Ill–posed Problems. Doct. Diss. UNI–C, Lingby, Denmark, 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. Springer Verlag. N.–Y., 1996.