

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
"САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С.П. КОРОЛЕВА"

А.И. ЖДАНОВ

**ВВЕДЕНИЕ В МЕТОДЫ
РЕШЕНИЯ НЕКОРРЕКТНЫХ
ЗАДАЧ
Часть 2**

*Утверждено Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного пособия*

САМАРА
Издательство СГАУ
2007

УДК 519.6(075)+512.64(075)

ББК 22.19+22.143

Ж 422

Инновационная образовательная программа "Развитие центра компетенции и подготовка специалистов мирового уровня в области аэрокосмических и геоинформационных технологий"

Рецензенты: д-р техн. наук, доц. А. Г. Х р а м о в

д-р. техн. наук, проф. А. Ю. П р и в а л о в

Жданов А.И.

Введение в методы решения некорректных задач. 2 часть: учеб. пособие / *А.И. Жданов* – Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. ун-та, 2007. – 80 с.

ISBN 978-5-7883-0527-1

В книге рассматриваются причины существенного различия между «теоретическим» и «компьютерным» алгоритмами. Изучается важнейшее понятие современной вычислительной математики – понятие устойчивости компьютерного алгоритма. Излагаются устойчивые компьютерные алгоритмы решения наиболее практически значимых задач вычислительной линейной алгебры – задач решения плохо обусловленных и неполного ранга произвольных систем линейных алгебраических уравнений.

Предназначено для студентов обучающихся по специальностям «Прикладная математика и информатика», «Прикладная математика и физика» и др., а также для специалистов, применяющих в своей деятельности компьютерные алгоритмы для решения некорректных вычислительных задач.

Оглавление

Предисловие	5
1 Арифметика с плавающей точкой	7
1.1 Ограничения компьютерного представления действительных чисел	7
1.2 Числа с плавающей точкой	8
1.3 Машинное эpsilon	9
1.4 Арифметика чисел с плавающей точкой	10
1.5 Модификация машинного эpsilon	11
1.6 Комплексная арифметика с плавающей точкой	12
1.7 Упражнения	13
2 Устойчивость компьютерных алгоритмов	15
2.1 Компьютерные алгоритмы	15
2.2 Точность алгоритмов	16
2.3 Устойчивость	17
2.4 Обратная устойчивость	18
2.5 Значение обозначения $O(\varepsilon_{\text{machine}})$	18
2.6 Зависимость от m и n , но не от A и f	19
2.7 Независимость от выбора векторных норм	21
2.8 Упражнения	21
3 Обратный анализ ошибок компьютерных алгоритмов	23
3.1 Устойчивость арифметики с плавающей точкой	23
3.2 Другие примеры	24
3.3 Неустойчивый алгоритм	26
3.4 Точность обратно устойчивого алгоритма	27
3.5 Обратный анализ ошибок	28
3.6 Упражнения	29

4	Некорректные стохастические задачи	31
4.1	Этапы развития теории некорректных задач	31
4.2	Обзор методов решения приближённых систем	36
5	Решение некорректных стохастических СЛАУ	53
5.1	Постановка задачи	53
5.2	Вычисление оценок псевдорешений	56
5.3	Регуляризация оценок псевдорешений	64
	Библиографический список	71

Предисловие

В учебном пособии изучаются существенные различия между "теоретическим" и "компьютерным" алгоритмами, выясняются причины такого различия, которые кроются в особенностях компьютерной арифметики с плавающей точкой.

В данном учебном пособии достаточно обстоятельно изучается арифметика чисел с плавающей точкой и особенности ее реализации на большинстве современных компьютеров. В последнее время эти аспекты компьютерной реализации вычислительных алгоритмов приобрели особую значимость в связи с развитием высокопроизводительных вычислительных систем.

В настоящее время наиболее универсальный подход представления действительных чисел в компьютере – IEEE-арифметика, основанная на представлении действительных чисел с плавающей точкой. В системе с плавающей точкой позиции десятичной или бинарной точки хранятся отдельно от самих цифр и промежутки между соседними представленными числами соответствуют пропорции с величинами цифр. В этом принципиальное отличие арифметики чисел с плавающей точкой от представления с фиксированной точкой, где все промежутки одинаковы.

Данное учебное пособие – подробное содержательное, но отнюдь не многословное пособие, по которому, с одной стороны, можно ознакомиться с принципами, положенными в основу устойчивых компьютерных алгоритмов вычислительной линейной алгебры, а с другой – научиться эти алгоритмы реализовывать, избегая при этом существенно искажающих результат погрешностей. Многие из этих погрешностей на первый взгляд столь незначительны, что, казалось бы, не должны оказывать никакого практического влияния на рассчитываемые величины.

В пособии подробно рассмотрены такие фундаментальные понятия компьютерных алгоритмов как, *устойчивость* и *обратная устойчивость*. Эти понятия дают возможность исследовать точность реальных

компьютерных алгоритмов.

Приведены достаточно эффективные новые вычислительные алгоритмы для решения плохо обусловленных и неполного ранга линейных задач наименьших квадратов, позволяющие их реализацию в виде конкретных устойчивых компьютерных алгоритмов.

В учебном пособии впервые с единых позиций рассмотрены задачи решения некорректных приближенных стохастических задач. Дан достаточно исчерпывающий литературный обзор методов решения данного класса задач.

Рассмотренные в книге алгоритмы вычисления регуляризованных оценок решений некорректных стохастических систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) не требуют никакой недоступной на практике экспериментатору априорной информации и поэтому могут широко использоваться при решении значительного круга проблем автоматизации научного измерительного эксперимента, связанных с необходимостью получения устойчивых решений многочисленных задач обработки, интерпретации и моделирования данных.

Практическая ценность результатов, представленных в настоящем учебном пособии, также объясняется тем бесспорным фактом, что важнейшим алгоритмом вычислительной математики, используемым в качестве блока решения большинства практических вычислительных задач, является алгоритм решения СЛАУ, при построении решений которых принципиальным фактором является наличие детерминированных или случайных погрешностей задания исходных данных.

Учебное пособие содержит достаточное число упражнений, необходимых для более полного усвоения рассмотренного теоретического материала.

Глава 1

Арифметика с плавающей точкой

Потребовалось не столь много времени после изобретения компьютера, чтобы прийти к общей точке зрения на правильный способ представления чисел в цифровой машине. Весь секрет в арифметике с плавающей точкой основан на математической записи действительного числа, реализованной на конкретном оборудовании. Перед тем как начать изучение точности алгоритмов вычислительной линейной алгебры, необходимо изучить эту главу.

1.1. Ограничения компьютерного представления действительных чисел

Так как цифровые компьютеры используют конечное число бит (разрядов) для представления действительных чисел, они могут представить только конечное подмножество действительных чисел (или комплексных чисел, вопрос о которых будет затронут в конце данной главы). Это ограничение представляет две сложности. Первая, представимые в компьютере числа не могут быть произвольно большими и малыми. Вторая, между представленными числами будут промежутки, т.е. между двумя машинными числами может не существовать ни одного машинного числа, в отличие от множества действительных чисел.

Современные компьютеры представляют числа достаточно большие и маленькие, так что первое из ограничений редко вызывает серьезные проблемы. К примеру, широко используемый в компьютерах стандарт

IEEE-арифметика с двойной точностью позволяет представлять числа такие большие как 1.79×10^{308} , и такие маленькие как 2.23×10^{-308} , в итоге диапазон более достаточный для большинства прикладных вычислительных задач. Другими словами, переполнение сверху и снизу обычно совсем несерьезная проблема (но на нее иногда стоит обратить внимание, например, когда требуется вычислить определитель).

И совсем наоборот, проблема пустых промежутков между представляемыми в компьютере числами возникает повсюду в математических вычислениях. К примеру, в арифметике IEEE-стандарта с двойной точностью интервал $[1, 2]$ представляет собой дискретное множество

$$1, 1 + 2^{-52}, 1 + 2 \times 2^{-52}, 1 + 3 \times 2^{-52}, \dots, 2. \quad (1.1)$$

Интервал $[2, 4]$ представляется теми же числами, только умноженными на 2:

$$2, 2 + 2^{-51}, 2 + 2 \times 2^{-51}, 2 + 3 \times 2^{-51}, \dots, 4,$$

и в общем интервал $[2^j, 2^{j+1}]$ представляется посредством (1.1), умноженным на 2^j . Таким образом, в IEEE-арифметике с двойной точностью промежутки между соседними числами, в смысле относительных ошибок, никогда не превышают $2^{-52} \approx 2.22 \times 10^{-16}$. И кажется, что этим можно пренебречь, и это действительно так для большинства компьютерных вычислений, если используется *устойчивый компьютерный алгоритм*, определение которого будет рассмотрено в следующей главе. Но это может принести немало неожиданных хлопот в случае, если используемый компьютерный алгоритм спроектирован достаточно халатно.

1.2. Числа с плавающей точкой

IEEE-арифметика – пример арифметики, основанной на представлении действительных чисел с плавающей точкой. Это универсальный подход для большинства современных компьютеров. В системе чисел с плавающей точкой позиция десятичной или бинарной точки хранится отдельно от самих цифр, и промежутки между соседними представленными числами соответственно пропорциональны абсолютным величинам цифр. В этом принципиальное отличие представления вещественных чисел числами с плавающей точкой от представления с *фиксированной точкой*, где все промежутки одинаковы.

Рассмотрим определение идеализированной системы с плавающей точкой. Эта система состоит из дискретного подмножества \mathbb{F} множества действительных чисел \mathbb{R} . Множество \mathbb{F} чисел с плавающей точкой характеризуется четырьмя параметрами: *основанием системы счисления* $\beta \geq 2$, *разрядностью* p и *интервалом показателей* $[\nu^-, \nu^+]$. Каждое число $x \in \mathbb{F}$ представимо в виде

$$x = \pm \left(\frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \dots + \frac{d_p}{\beta^p} \right) \beta^\nu, \quad (1.2)$$

где целые числа $\beta, \nu, d_1, \dots, d_p$ удовлетворяют неравенствам

$$0 \leq d_i \leq \beta - 1, \quad i = 1, \dots, p; \quad \nu^- \leq \nu \leq \nu^+.$$

Часто d_i называют *разрядами*, p – *длиной мантииссы*, ν – *порядком числа* (или *экспонентой*). *Мантииссой* (дробной частью) x называется число в скобках. Рассмотренное представление чисел, называемое представлением с *плавающей точкой*, используется в большинстве современных компьютеров. Основанием обычно является число $\beta = 2$ (с такими исключениями, как $\beta = 16$ для компьютеров IBM 370 и $\beta = 10$ для некоторых решающих таблиц и большинства калькуляторов). Например, $0.10101_2 \times 2^3 = 5.25_{10}$.

Число с плавающей точкой называется *нормализованным*, если старший разряд его мантииссы отличен от нуля ($d_1 \neq 0$). К примеру, число $0.10101_2 \times 2^3$ нормализовано, а число $0.010101_2 \times 2^4$ нет. Обычно числа с плавающей точкой нормализуют, что дает выигрыш в двух отношениях: всякое ненулевое число с плавающей точкой в этом случае имеет единственное представление в виде строки битов, и старший разряд двоичной мантииссы можно не хранить в явном виде (поскольку он всегда равен 1); за счет сэкономленного бита можно удлинить мантииссу.

1.3. Машинное эpsilon

Удобно считать, что *округление* – это отображение множества действительных чисел \mathbb{R} в множество \mathbb{F} чисел с плавающей точкой. Точность представления действительных чисел с использованием множества \mathbb{F} традиционно определяется числом, которое называется *машинным эpsilon* ($\varepsilon_{\text{machine}}$) и зависит от разрядности p . При традиционном способе округления чисел имеем $\varepsilon_{\text{machine}} = \frac{1}{2}\beta^{1-p}$, при округлении отбрасыванием разрядов $\varepsilon_{\text{machine}} = \beta^{1-p}$. В общем случае, для арифметики с плава-

ющей точкой, имеющей p -разрядную мантиссу и основание β , максимальная относительная ошибка представления равна $0.5 \times \beta^{1-p}$. Это число – половина расстояния самого большого промежутка между полученными числами с плавающей точкой, т.е. $\varepsilon_{\text{machine}}$ имеет следующее свойство:

$$\forall x \in \mathbb{R}, \exists x' \in \mathbb{F} \text{ такое, что } |x - x'| \leq \varepsilon_{\text{machine}} |x|. \quad (1.3)$$

Для значений β и p , стандартных для различных компьютеров, значение $\varepsilon_{\text{machine}}$ обычно лежит между 10^{-6} и 10^{-35} . В IEEE-арифметике с одинарной и двойной точностью $\varepsilon_{\text{machine}}$ принимает значения $2^{-24} \approx 5.96 \times 10^{-8}$ и $2^{-53} \approx 1.11 \times 10^{-16}$ соответственно.

Область положительных нормализованных чисел IEEE-арифметики обычной точности простирается от 2^{-126} (*порог машинного нуля*) до $2^{127} \cdot (2 - 2^{-23}) \approx 2^{128}$ (*порог переполнения*) или приблизительно от 10^{-38} до 10^{38} . Границами области положительных нормализованных IEEE-чисел двойной точности являются 2^{-1022} (*порог машинного нуля*) и $2^{1023} \cdot (2 - 2^{-52}) \approx 2^{1024}$ (*порог переполнения*), т.е., приблизительно, 10^{-308} и 10^{308} .

Удобно считать, что *округление* – это некоторое отображение множества действительных чисел \mathbb{R} в множество \mathbb{F} чисел с плавающей точкой, т.е. $\text{fl} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{F}$. Если $x \in \mathbb{R}$, а $\text{fl}(x) \in \mathbb{F}$, то в этих терминах неравенство (1.3) можно сформулировать в виде следующей аксиомы.

Аксиома 1.1. Для всех $x \in \mathbb{R}$ существует η , $|\eta| \leq \varepsilon_{\text{machine}}$, такое, что

$$\text{fl}(x) = x(1 + \eta). \quad (1.4)$$

Таким образом, относительная ошибка между действительным числом и его ближайшим приближением в системе с плавающей точкой всегда не превышает машинное эpsilon.

1.4. Арифметика чисел с плавающей точкой

Конечно, недостаточно просто представить действительные числа в цифровой машине, необходимо производить вычисления с ними. В компьютере все математические вычисления сводятся к некоторому числу элементарных арифметических операций, стандартный набор которых: $+$, $-$, \times и \div . Математически эти символы определяют операции над полем \mathbb{R} . На компьютере они имеют точные аналоги операций над \mathbb{F} .

Соответствующие операции на множестве \mathbb{F} чисел с плавающей точкой обозначаются как \oplus , \ominus , \otimes и \oslash .

Для компьютерных вычислений справедливы следующие основные принципы. Пусть x и y произвольные числа с плавающей точкой, т.е. $x, y \in \mathbb{F}$. Пусть $*$ одна из операций $+$, $-$, \times или \div , и пусть \odot её аналог в арифметике с плавающей точкой. Тогда $x \odot y$ должно в точности давать

$$\text{fl}(x * y) = x \odot y. \quad (1.5)$$

Если это свойство выполняется, тогда из (1.4) и (1.5) можно заключить, что компьютерные вычисления обладают простым и мощным свойством. Оно известно как *фундаментальная аксиома арифметики с плавающей точкой*.

Аксиома 1.2. Для всех $x, y \in \mathbb{R}$ существует η , $|\eta| \leq \varepsilon_{\text{machine}}$, такое, что

$$x \odot y = (x * y)(1 + \eta). \quad (1.6)$$

Другими словами, каждая операция в арифметике с плавающей точкой имеет относительную погрешность, не превышающую $\varepsilon_{\text{machine}}$.

1.5. Модификация машинного эпсилон

Анализ ошибок округления в этой книге основывается на (1.4) и (1.6) (аксиомах 1.1 и 1.2), но не на других деталях арифметики с плавающей точкой, описанных ранее. Это дает возможность применить рассмотренный анализ точности к компьютерным вычислениям, для которых не выполняется достаточно точно формула (1.5). Для любого компьютерного алгоритма (1.4) и (1.6) могут выполняться, если машинное эпсилон $\varepsilon_{\text{machine}}$ заменить несколько большим значением. К примеру, на компьютере, в котором действительные числа, принадлежащие промежуткам между числами с плавающей точкой, обрезаются, а не округляются, выражение (1.6) может выполняться, если машинное эпсилон $\varepsilon_{\text{machine}} = \beta^{1-p}$.

Самый простой способ предусмотреть такие проблемы, чтобы выполнялись (1.4) и (1.6), это модифицировать определение машинного эпсилон $\varepsilon_{\text{machine}}$.

С этого момента будем считать, что машинное эпсилон определяется не как в разделе 1.3, а определяется как наименьшее число, для которого (1.4) и (1.6) выполняются. Для большинства компьютеров, которые включают в себя реализацию IEEE-арифметики с плавающей точкой,

такое изменение определения машинного ε не оказывает значительного влияния на его значение.

Тем не менее случается, что неожиданно большое значение машинного ε может быть необходимо для того, чтобы (1.6) из аксиомы 1.2 выполнялось. В 1994 году процессор IntelPentium™ приобрел дурную славу, когда открылось, что по ошибке в таблице, используемой для реализации IEEE-арифметики с плавающей точкой двойной точности, его эффективная точность уменьшилась на 11 разрядов до машинного $\varepsilon_{\text{machine}} \approx 6.1 \times 10^{-5}$. (Эта ошибка была вскоре устранена). На самом деле есть компьютеры, для которых (1.6) выполняется только для машинного $\varepsilon_{\text{machine}} = 1$. К примеру, вычитание с плавающей точкой на компьютерах Cray, произведенных во второй половине 90-х годов, имело это свойство, так как операция вычитания была реализована без «сохранения цифр» (имеется в виду ее дробной части). Такие компьютеры не бесполезны, но они требуют анализа ошибок, отличного от того, который приведен в данной книге.

К счастью, положительные свойства аксиомы 1.2 и адаптация единообразных стандартов компьютерной арифметики стали широко распространенными среди производителей компьютеров в последние годы, и количество компьютеров, для которых не выполняется (1.6) с малыми значениями машинного $\varepsilon_{\text{machine}}$, стремительно уменьшается. Действительно, IEEE-арифметика сама по себе быстро стала (начиная с 1996 года) стандартом для компьютеров любых классов, включая все IBM-совместимые персональные компьютеры и рабочие станции, произведенные SUN, DEC, Hewlett-Packard и IBM.

1.6. Комплексная арифметика с плавающей точкой

Комплексные числа с плавающей точкой обычно представляются как пара действительных чисел с плавающей точкой, а элементарные операции над ними вычисляются путем их приведения к операциям над действительной и мнимой частями. Результат аксиомы 1.2 верен для комплексных чисел аналогично тому, как верен и для действительных чисел, за исключением операций \otimes и \oslash , для которых машинное $\varepsilon_{\text{machine}}$ необходимо увеличить (как следует из $\varepsilon_{\text{machine}} = \frac{1}{2}\beta^{1-p}$) на множители порядка $2^{3/2}$ и $2^{5/2}$ соответственно. Определив однажды машинное ε подобным образом, анализ ошибок округления для

комплексных чисел может быть проведен так же, как и для действительных чисел.

1.7. Упражнения

1.1. Сколко IEEE-чисел с двойной точностью содержится между парой ненулевых IEEE-чисел с обычной точностью ?

1.2. Верно ли, что всегда $\text{fl}\left(\frac{a+b}{2}\right) \in [a, b]$?

1.3. Пусть отыскивается наименьший корень уравнения

$$y^2 - 140y + 1 = 0.$$

Вычисления производятся в десятичной системе счисления, причем в мантиссе числа после округления удерживаются 4 разряда. Какая из формул

$$y = 70 - \sqrt{4899} \quad \text{или} \quad y = \frac{1}{70 + \sqrt{4899}}$$

даёт более точный результат ?

1.4. Пусть вычисляется сумма

$$S_{1\,000\,000} = \sum_{j=1}^{1\,000\,000} \frac{1}{j^2}.$$

По какому алгоритму

$$S_0 = 0, \quad S_n = S_{n-1} + \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, \dots, 1\,000\,000$$

или

$$\sum_{1\,000\,000} = 0, \quad \sum_{n-1} = \sum_n + \frac{1}{n^2}, \quad n = 1\,000\,000, \dots, 1$$

следует считать, чтобы суммарная вычислительная погрешность была меньше ?

1.5. Предложить наилучший способ вычисления знакопеременной суммы.

1.6. Система \mathbb{F} чисел с плавающей точкой, определяемая как (1.2), включает много чисел, но не всё множество целых чисел.

(а) Дать точную формулу для наименьшего целого n , которое не принадлежит \mathbb{F} .

(b) В частности, какое значение n из (a) соответствует для IEEE-арифметики с обычной и двойной точностью?

1.7. Пусть приближенное значение производной функции $f(x)$ определяется при $h \ll 1$ по одной из формул:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

или

$$f'(x) \approx \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h},$$

а сами значения $f(x)$ вычисляются с абсолютной погрешностью Δ . Какую погрешность можно ожидать при вычислении производной, если $|f^{(k)}| \leq M_k$, $k = 0, 1, \dots$?

1.8. Пусть вычисляется величина $S = a_1x_1 + \dots + a_nx_n$, где коэффициенты a_i заданы с погрешностью δ . Найти погрешность вычисления S при условии, что $x_1^2 + \dots + x_n^2 = 1$.

1.9. Пусть $|x| < 1$. В каком порядке лучше вычислять сумму $\sum_{k=0}^n x^k$ с точки зрения уменьшения вычислительной погрешности?

1.10. Пусть вычисления ведутся по формуле

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + h^2 f_n, \quad n = 1, 2, \dots,$$

y_0, y_1 заданы точно, $|f_n| \leq M$, $h \ll 1$. Какую вычислительную погрешность можно ожидать при вычислении y^k ? Улучшится ли ситуация, если вычисления вести по формулам

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f_n, \quad \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = z_n?$$

1.11. Вычислить постоянную Эйлера

$$C = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + 1/2 + 1/3 + \dots + 1/n - \ln n)$$

с 10 верными знаками.

Глава 2

Устойчивость компьютерных алгоритмов

Было бы просто замечательно, если бы численные алгоритмы могли обеспечить точные решения вычислительных задач. Так как в основном исходные вычислительные задачи непрерывны, в то время как цифровые компьютеры дискретны, это (точное решение исходной вычислительной задачи) в общем случае невозможно. Понятие "устойчивость" является стандартным способом описания возможности получения достаточно точного решения на основе компьютерного алгоритма в численном анализе.

2.1. Компьютерные алгоритмы

Математическая задача в общем случае может быть определена как функция (отображение) $g : X \rightarrow Y$ из нормированного векторного пространства данных X в нормированное векторное пространство решений Y .

Компьютерный алгоритм можно рассматривать как другое отображение $\tilde{g} : X \rightarrow Y$ между этими двумя пространствами. Уточним данное определение. Пусть даны фиксированные: задача g , компьютер (система вычислений с плавающей точкой которого удовлетворяет (1.6)) (но не обязательно (1.5)), алгоритм для решения g и реализация этого алгоритма в форме компьютерной программы. Пусть исходные данные $x \in X$ переведены в систему с плавающей точкой таким образом, что выполняется аксиома 1.1, и переданы на вход компьютерной программе. Результат – это числовой вектор с плавающей точкой, который принад-

лежит векторному пространству Y (так как алгоритм разработан для решения задачи g). Этот результат будет обозначаться — $\tilde{g}(x)$.

Ситуация вряд ли может быть хуже! Как минимум, $\tilde{g}(x)$ будет подвержена ошибкам округления. В зависимости от ситуации, результат может быть также подвержен другим видам ошибок и проблем, таким как плохая сходимости и даже помехам от других служб, работающих на компьютере, в случае, когда распределение вычислений между процессорами определяется в процессе самого расчета. Таким образом, "функция" $\tilde{g}(x)$ может даже принимать значения, различающиеся от одного запуска расчета к другому, т.е. может быть многозначной (на самом деле сама задача g , вполне возможно, допускает несколько решений, это разрешается в случае, когда неединственное решение допустимо, к примеру, любой из квадратных корней комплексного числа). Даже учитывая все эти осложнения, можно получить достаточно четкие утверждения относительно $\tilde{g}(x)$, таким образом, относительно точности алгоритмов вычислительной линейной алгебры, основанные только на фундаментальных аксиомах 1.1 и 1.2.

Обозначение с тильдой ($\tilde{}$) очень удобно. Так, если \tilde{g} — компьютерный (вычислительный) аналог g , то другие, вычисленные на компьютере значения в этой книге, будут также часто обозначаться со знаком тильды. К примеру, вычисленное на компьютере решение системы уравнений $Au = f$ может быть обозначено как \tilde{u} .

2.2. Точность алгоритмов

Исключая тривиальные случаи, $\tilde{g}(x)$ не может быть непрерывной. Тем не менее хорошему алгоритму должно соответствовать хорошее приближение связанной с ним задачи. Для того чтобы выразить эту идею в цифрах, можно ввести *абсолютную ошибку* вычислений $\|\tilde{g}(x) - g(x)\|$ или *относительную ошибку*

$$\frac{\|\tilde{g}(x) - g(x)\|}{\|g(x)\|}. \quad (2.1)$$

В этой книге в основном используются относительные числа и таким образом, (2.1) будет основным стандартом измерения ошибок вычисления.

Если \tilde{g} — "хороший" алгоритм, действительно можно ожидать, что относительная ошибка будет малой, т.е. порядка машинного эpsilon

$\varepsilon_{\text{machine}}$. Можно сказать, что алгоритм \tilde{g} для задачи g *точен*, если для каждого $x \in X$ выполняется

$$\frac{\|\tilde{g}(x) - g(x)\|}{\|g(x)\|} = O(\varepsilon_{\text{machine}}). \quad (2.2)$$

Проще говоря, символ $O(\varepsilon_{\text{machine}})$ в (2.2) означает "порядка машинного эпсилон". Однако $O(\varepsilon_{\text{machine}})$ имеет точное определение, которое будет приведено позже. Также необходимо уточнить, как интерпретировать формулу (2.2) в случае, если знаменатель равен нулю.

2.3. Устойчивость

Если g плохо обусловлена, цель в достижении точности, определенной в (2.2), неоправданно завышена. Округление входных данных неизбежно для цифровых компьютеров, и даже если все последующие вычисления будут выполнены идеально точно, это единственное возмущение может привести к значительному изменению результата (вычисленного на компьютере решения). Вместо постановки цели точности алгоритма в таких случаях более подходит цель в обеспечении общей *устойчивости* компьютерного алгоритма.

Компьютерный алгоритм \tilde{g} для задачи g называется *устойчивым*, если для каждого $x \in X$ выполняется

$$\frac{\|\tilde{g}(x) - g(\tilde{x})\|}{\|g(\tilde{x})\|} = O(\varepsilon_{\text{machine}}), \quad (2.3)$$

для некоторых \tilde{x} , удовлетворяющих

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} = O(\varepsilon_{\text{machine}}). \quad (2.4)$$

Другими словами, устойчивый алгоритм дает ответ, близкий к верному, для задач с входными данными близкими к точным.

Почему принято именно такое определение устойчивости компьютерного алгоритма, станет ясным в следующей главе и дальнейших приложениях, рассмотренных в этой книге.

Хотя определение устойчивости, данное здесь, используется во многих разделах вычислительной линейной алгебры, условие $O(\varepsilon_{\text{machine}})$, вероятно, излишне жесткое для всех вычислительных задач в других разделах численного анализа. Например, таких как дифференциальные уравнения.

2.4. Обратная устойчивость

Многие алгоритмы вычислительной линейной алгебры удовлетворяют условию, которое является как более сильным, так и более простым, чем рассмотренное выше условие устойчивости.

Компьютерный алгоритм \tilde{g} для задачи g называется *обратно устойчивым*, если для каждого $x \in X$ выполняется:

$$\tilde{g}(x) = g(\tilde{x}) \quad \text{для некоторых } \tilde{x} \quad \text{таких, что} \quad \frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} = O(\varepsilon_{\text{machine}}). \quad (2.5)$$

Это определение устойчивости является более жестким по отношению к предыдущему определению устойчивости, так как $O(\varepsilon_{\text{machine}})$ в (2.3) было заменено нулем.

Другими словами, компьютерный алгоритм, обладающий обратной устойчивостью, дает точный результат (решение) для приближенной задачи с исходными данными близкими к точным.

Пример подобного алгоритма приводится в следующей главе.

2.5. Значение обозначения $O(\varepsilon_{\text{machine}})$

Поясним точное значение обозначения $O(\varepsilon_{\text{machine}})$ в формулах (2.2) – (2.5).

Обозначение

$$\varphi(t) = O(\psi(t)) \quad (2.6)$$

является стандартным в математике и имеет точное определение. Это выражение означает то, что существует положительная константа C , такая, что для всех t , стремящихся к предполагаемому пределу (т.е. $t \rightarrow 0$ или $t \rightarrow \infty$),

$$|\varphi(t)| \leq C\psi(t). \quad (2.7)$$

К примеру, выражение $\sin^2 t = O(t^2)$ при $t \rightarrow 0$ означает, что существует константа C такая, которая для всех достаточно малых t удовлетворяет $|\sin^2 t| \leq Ct^2$.

Также стандартом в математике являются выражения вида

$$\varphi(s, t) = O(\psi(t)) \quad \text{равномерно по } s, \quad (2.8)$$

где φ – функция, которая зависит не только от t , но и также от другой переменной s . Слово "равномерно" показывает, что существует такая

константа C , как в (2.7), причем одна и та же для всех s . Таким образом, например,

$$(\sin^2 t)(\sin^2 s) = O(t^2)$$

выполняется равномерно для $t \rightarrow 0$, но равномерность теряется, если заменить $\sin^2 s$ на s^2 .

В этой книге символ " O " используется, следуя этим стандартным определениям. Часто результат будет представляться в виде

$$\| \text{вычисленное значение (computed quantity)} \| = O(\varepsilon_{\text{machine}}). \quad (2.9)$$

Что же здесь означает (2.9)? Во-первых, $\| \text{вычисленное значение} \|$, представляет норму некоторого числа или вектора, вычисленную компьютерным алгоритмом \tilde{g} для задачи g , в зависимости от входных данных $x \in X$ для g и $O(\varepsilon_{\text{machine}})$. В качестве примера можно привести относительную ошибку (2.1). Во-вторых, неявно указанный процесс $O(\varepsilon_{\text{machine}}) \rightarrow 0$ (т.е. $\varepsilon_{\text{machine}}$ – переменная, зависящая от t в (2.8)). Третье, обозначение " O " применяется равномерно для всех входных данных $x \in X$ (т.е. переменная x соответствует s). В дальнейшем редко будет специально подчеркиваться равномерность по $x \in X$, но это всегда подразумевается.

В любой машинной арифметике, число $\varepsilon_{\text{machine}}$ – фиксированное значение. Говоря о пределе $O(\varepsilon_{\text{machine}}) \rightarrow 0$, полагаются на идеализацию компьютера или, точнее сказать, на идеализацию семейства компьютеров (так как речь идет о пределе). В итоге уравнение (2.9) означает, что если использовать компьютерный алгоритм решения задачи, на компьютерах, удовлетворяющих аксиомам 1.1 и 1.2, для последовательности значений $\varepsilon_{\text{machine}}$, стремящейся к нулю, тогда $\| \text{вычисленное значение} \|$ гарантированно уменьшается пропорционально $\varepsilon_{\text{machine}}$ или даже скорее. И для этих "идеальных" компьютеров требуется только лишь выполнение аксиом 1.1 и 1.2, и ничего более.

2.6. Зависимость от m и n , но не от A и f

В дальнейшем больше не будет обсуждаться значение $O(\varepsilon_{\text{machine}})$ в (2.2) – (2.5). Равномерность неявной константы в " O " может быть проиллюстрирована на следующем примере. Пусть рассматривается компьютерный алгоритм для решения невырожденной $m \times m$ системы уравнений $Au = f$ относительно u , и полагаем, что результат вычислений этого

алгоритма \tilde{u} удовлетворяет

$$\frac{\|\tilde{u} - u\|}{\|u\|} = O(\kappa(A)\varepsilon_{\text{machine}}), \quad (2.10)$$

где $\kappa(A)$ – число обусловленности матрицы A , т.е. $\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$.

Это предположение означает, что ограничение

$$\frac{\|\tilde{u} - u\|}{\|u\|} \leq C\kappa(A)\varepsilon_{\text{machine}} \quad (2.11)$$

сохраняется для единственной константы C , независимо от матрицы A или правой части f , для всех достаточно малых $\varepsilon_{\text{machine}}$.

Если знаменатель в формуле (2.11) равняется нулю, то выражение (2.11) определяется в виде

$$\|\tilde{u} - u\| \leq C\kappa(A)\varepsilon_{\text{machine}}\|u\|. \quad (2.12)$$

И здесь (в (2.12)) нет разницы с (2.10), т.к. если $\|u\| = 0$, то (2.12) поясняет значение выражения (2.10), а именно означает, что $\|\tilde{u} - u\| = 0$ для всех достаточно малых $\varepsilon_{\text{machine}}$.

Хотя константа C в выражениях (2.11) и (2.12) не зависит от A и f , в общем случае она зависит от m . Формально говоря, это следует из определения вычислительной задачи $g : X \rightarrow Y$. Если размерности, такие как m и n , определяющие задачу g , изменятся, то векторные пространства X и Y могут также измениться, что в результате приведет к новой задаче g' . Таким образом, на практике эффекты ошибок округления алгоритмов вычислительной линейной алгебры в общем случае растут с увеличением m и n . Однако этот рост обычно достаточно медленный, что не очень существенно на практике. Зависимость от m и n чаще всего линейная, квадратичная или кубическая (в самых плохих случаях), благодаря взаимоуничтожению ошибок (в связи с большим количеством арифметических операций).

В принципе, ограничение (2.9) может иметь зависимость от такого фактора (зависящего от размерности), как 2^m , что может, в свою очередь, сделать это ограничение неприменимым на практике. Например, подобная ситуация имеет место для метода исключения Гаусса, где имеются любопытные примеры, предупреждающие о том, что обсуждаемый вопрос требует внимательного к нему отношения. Тем не менее, как правило, когда в данной книге приведено выражение $O(\varepsilon_{\text{machine}})$, оно означает вероятность того, что ошибка решения в реальных вычислениях на реальном компьютере может превышать $\varepsilon_{\text{machine}}$ более чем в 100 или, возможно, даже 1000 раз.

2.7. Независимость от выбора векторных норм

Все определения, включающие $O(\varepsilon_{\text{machine}})$, умеют очень удобное свойство – они независимы от выбора векторной нормы, т.к. X и Y конечномерные пространства.

Теорема 2.1. *Для задачи g и компьютерного алгоритма \tilde{g} , определенных в конечномерных векторных пространствах X и Y , свойства точности, устойчивости и обратной устойчивости сохраняются независимо от выбора векторных норм в X и Y .*

Доказательство. Широко известно (и очень просто доказывается), что в конечномерных векторных пространствах все векторные нормы эквивалентны в смысле, что если $\|\cdot\|$ и $\|\cdot\|'$ – две нормы в одном и том же пространстве, то тогда существуют такие положительные константы C_1 и C_2 , что $C_1\|x\| \leq \|x\|' \leq C_2\|x\|$ для всех x в этом пространстве. Отсюда следует, что замена нормы может повлиять на размер константы C , входящей в $O(\varepsilon_{\text{machine}})$, но никак на само существование такой константы. \square

2.8. Упражнения

2.1. Проверить справедливость следующих выражений.

(a) $\sin x = O(1)$ при $x \rightarrow \infty$.

(b) $\sin x = O(1)$ при $x \rightarrow 0$.

(c) $\log x = O(x^{1/100})$ при $x \rightarrow \infty$.

(d) $n! = O((n/e)^n)$ при $n \rightarrow \infty$.

(e) $\text{fl}(\pi) - \pi = O(\varepsilon_{\text{machine}})$. (Здесь не предполагается, что $\varepsilon_{\text{machine}} \rightarrow 0$, а подразумевается, что для всех выражений $O(\varepsilon_{\text{machine}})$ в этой книге.)

(f) $\text{fl}(\pi) - \pi = O(\varepsilon_{\text{machine}})$, равномерно для всех целых n . (Здесь $n\pi$ соответствует точному математическому значению, а не результату, полученному вычислением в арифметике с плавающей точкой.)

2.2. (a) Показать, что

$$(1 + O(\varepsilon_{\text{machine}}))(1 + O(\varepsilon_{\text{machine}})) = 1 + O(\varepsilon_{\text{machine}}).$$

Точное значение этого утверждения состоит в том, что если g – функция удовлетворяющая

$$g(\varepsilon_{\text{machine}}) = (1 + O(\varepsilon_{\text{machine}}))(1 + O(\varepsilon_{\text{machine}}))$$

при $\varepsilon_{\text{machine}} \rightarrow 0$, тогда g также удовлетворяет $g(\varepsilon_{\text{machine}}) = 1 + O(\varepsilon_{\text{machine}})$
при $\varepsilon_{\text{machine}} \rightarrow 0$.

(b) Показать, что $(1 + O(\varepsilon_{\text{machine}}))^{-1} = 1 + O(\varepsilon_{\text{machine}})$.

Глава 3

Обратный анализ ошибок компьютерных алгоритмов

В этой главе продолжается рассмотрение понятия устойчивости на конкретных примерах устойчивых и неустойчивых алгоритмов, а также обсуждается фундаментальная идея "обратного анализа ошибок", связывающая обусловленность и устойчивость, мощь которой была доказана в теоретических исследованиях, начиная с 50-х годов прошлого века.

3.1. Устойчивость арифметики с плавающей точкой

Четыре простейших вычислительных задачи – это операции: $+$, $-$, \times и \div . В них речь не идет о выборе алгоритма! Разумеется, для их реализации обычно используются операции с плавающей точкой \oplus , \ominus , \otimes и \oslash , поддерживаемые компьютером. Оказывается, что в случае выполнения аксиом 1.1 и 1.2 эти четыре канонических примера обладают свойством обратной устойчивости.

Покажем это для операции вычитания, так как только от этой элементарной операции можно ждать высокого риска неустойчивости. Рассмотрим пример, когда пространство исходных данных X – множество векторов в \mathbb{C}^2 , а пространство решений Y – множество скаляров в \mathbb{C} . По теореме 2.1 в дальнейшем не нужно указывать конкретный тип норм в этих пространствах.

Для исходных данных $x = (x_1, x_2)^* \in X$, задача вычитания соответствует функции $g(x_1, x_2) = x_1 - x_2$ и рассматриваемый компьютерный

алгоритм может быть записан как

$$\tilde{g}(x_1, x_2) = \text{fl}(x_1) \ominus \text{fl}(x_2).$$

Это выражение означает, что вначале x_1 и x_2 переводятся в значения с плавающей точкой, а затем применяется операция \ominus . И теперь, на основании аксиомы 1.1, имеем

$$\text{fl}(x_1) = x_1(1 + \varepsilon_1), \quad \text{fl}(x_2) = x_2(1 + \varepsilon_2)$$

для некоторых $|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2| \leq \varepsilon_{\text{machine}}$. Из аксиомы 1.2 следует, что

$$\text{fl}(x_1) \ominus \text{fl}(x_2) = (\text{fl}(x_1) - \text{fl}(x_2))(1 + \varepsilon_3)$$

для некоторого $|\varepsilon_3| \leq \varepsilon_{\text{machine}}$. Объединяя эти выражения, получаем

$$\begin{aligned} \text{fl}(x_1) \ominus \text{fl}(x_2) &= [x_1(1 + \varepsilon_1) - x_2(1 + \varepsilon_2)](1 + \varepsilon_3) = \\ &= x_1(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_3) - x_2(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3) = \\ &= x_1(1 + \varepsilon_4) - x_2(1 + \varepsilon_5) \end{aligned}$$

для некоторых $|\varepsilon_4|, |\varepsilon_5| \leq 2\varepsilon_{\text{machine}} + O(\varepsilon_{\text{machine}}^2)$ (см. упражнение 2.2). Другими словами, результат вычисления $\tilde{g}(x) = \text{fl}(x_1) \ominus \text{fl}(x_2)$ точно равен разности $\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2$, где \tilde{x}_1 и \tilde{x}_2 удовлетворяют

$$\frac{|\tilde{x}_1 - x_1|}{|x_1|} = O(\varepsilon_{\text{machine}}), \quad \frac{|\tilde{x}_2 - x_2|}{|x_2|} = O(\varepsilon_{\text{machine}}),$$

и любого $C > 2$ будет достаточно в качестве неявной константы в определении символа "O". Для любого выбора нормы $\|\cdot\|$ в пространстве \mathbb{C}^2 это приводит к (2.5).

3.2. Другие примеры

Пример 3.1. Скалярное произведение. Пусть даны векторы $x, y \in \mathbb{C}^m$ и требуется вычислить их скалярное произведение $\alpha = x^*y$. Банальный алгоритм – это вычисление попарных произведений $\bar{x}_i y_i$, посредством операции \otimes и сложение их посредством \oplus . Можно показать, что этот алгоритм (вычисленный результат $\tilde{\alpha}$) обладает обратной устойчивостью.

Пример 3.2. Внешнее произведение векторов. С другой стороны, пусть требуется вычислить внешнее произведение векторов $A = xy^*$

для векторов $x \in \mathbb{C}^m$, $y \in \mathbb{C}^n$, имеющее ранг, равный 1. Банальный алгоритм – вычислить mn произведений $x_i \bar{y}_i$ посредством операции \oplus и сложить их в результирующую матрицу \tilde{A} . Этот алгоритм устойчив, но не обладает обратной устойчивостью. Объясняется это тем, что результирующая матрица \tilde{A} вряд ли будет иметь ранг, в точности равный 1, и таким образом, может быть в общем случае записана в виде $(x + \delta x)(y + \delta y)^*$. Как правило, задачи, в которых размерность пространства решений Y превышает размерность пространства исходных данных X задачи, очень редко обладают обратной устойчивостью.

Пример 3.3. Пусть используется операция \otimes для вычисления $x + 1$, где $x \in \mathbb{C}$, т.е. $\tilde{g}(x) = \text{fl}(x) \oplus 1$. Этот алгоритм устойчив, но не обладает обратной устойчивостью. Причина в том, что при $x \approx 0$ операция сложения \oplus вносит абсолютную ошибку порядка $O(\varepsilon_{\text{machine}})$. Относительно размера x эта ошибка не ограничена, и она не может быть объяснена малыми относительными возмущениями данных. Этот пример показывает, что обратная устойчивость – весьма специфическое свойство и является разумной целью далеко не во всех случаях. Если бы задача ставилась, как вычисление $x + y$ для данных x и y , тогда алгоритм мог бы обладать обратной устойчивостью.

Пример 3.4. Интересно, а что стоит ожидать от компьютерной программы или калькулятора, которые вычисляют $\sin x$ или $\cos x$? Ответ, опять же, стоит ожидать устойчивости, но не обратной устойчивости. Для $\cos x$ это следует из того, что $\cos 0 \neq 0$ аналогично предыдущему примеру. Как для $\sin x$, так и для $\cos x$ обратная устойчивость не получается из-за того, что функция имеет производную, равную нулю в нескольких точках. К примеру, пусть вычисляется $g(x) = \sin x$ на компьютере для $x = \pi/2 - \delta$, $0 < \delta \ll 1$. Пусть удалось получить при вычислениях абсолютно точный результат, округленный в системе с плавающей точкой: $\tilde{g}(x) = \text{fl}(\sin x)$. Так как $g'(x) = \cos x \approx \delta$, то $\tilde{g}(x) = g(\tilde{x})$ для некоторого \tilde{x} , такого, что $\tilde{x} - x \approx (\tilde{g}(x) - g(x))/\delta = O(\varepsilon_{\text{machine}}/\delta)$. Так как δ может быть сколь угодно малым, эта обратная ошибка вовсе не будет величиной порядка $O(\varepsilon_{\text{machine}})$.

3.3. Неустойчивый алгоритм

Это все были элементарные примеры. Вот один более солидный: использование характеристического многочлена для нахождения собственных значений матрицы.

Так как λ – собственное значение матрицы A , тогда и только тогда $p(\lambda) = 0$, где $p(\lambda)$ – характеристический многочлен $\det(\lambda E - A)$, корни которого являются собственными значениями матрицы A . Этот факт дает метод вычисления собственных значений:

1. Найти коэффициенты характеристического многочлена.
2. Найти его корни.

Этот алгоритм не обладает не только обратной устойчивостью, но и вообще устойчивостью, и поэтому его не следует использовать в вычислительной практике. Даже когда задача нахождения собственных чисел хорошо обусловлена, этот алгоритм может выдавать ответы, которые имеют относительную ошибку во много раз большую, чем $\varepsilon_{\text{machine}}$.

Неустойчивость определяется из второго этапа метода вычисления собственных значений. Как хорошо известно, задача нахождения корней многочлена с заданными коэффициентами в общем случае плохо обусловлена. Из этого следует, что малые ошибки в коэффициентах характеристического многочлена приводят к значительному искажению корней, даже если сама задача нахождения корней выполнена с идеальной точностью.

К примеру, пусть $A = E$ – единичная матрица 2-го порядка. Собственные значения матрицы A слабочувствительны к возмущениям отдельных значений матрицы, и стабильный алгоритм должен бы вычислить их с ошибкой порядка $O(\varepsilon_{\text{machine}})$. Однако алгоритм, описанный выше, привносит ошибки порядка $\sqrt{\varepsilon_{\text{machine}}}$. Для того чтобы объяснить это, заметим, что характеристический многочлен имеет вид $\lambda^2 - 2\lambda + 1$. Когда вычисляются коэффициенты характеристического многочлена, могут ожидать ошибки порядка $\varepsilon_{\text{machine}}$, что станет причиной изменения корней на значение порядка $\sqrt{\varepsilon_{\text{machine}}}$. К примеру, если $\varepsilon_{\text{machine}}$, корни вычисленного характеристического многочлена могут отклониться от истинных значений примерно, на 10^{-8} , что означает потерю восьми знаков в точности.

До того как читатель вычислит это собственными силами, необходимо учесть еще одну маленькую тонкость. Если используется алгоритм, специально разработанный для вычисления собственных значений единичной матрицы 2-го порядка, то возможно, что и вовсе не обнаружится

ошибок в вычислении, поскольку коэффициенты и корни рассматриваемого многочлена $\lambda^2 - 2\lambda + 1$ маленькие целые числа, которые будут точно представлены в компьютере. Однако, если провести эксперимент на слегка возмущенной матрице, такой как

$$A = \begin{pmatrix} 1 + 10^{-14} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

вычисленные собственные значения будут отличаться от своих истинных значений на величину ожидаемого порядка $\sqrt{\varepsilon_{\text{machine}}}$. Попробуйте!

3.4. Точность обратно устойчивого алгоритма

Предположим, имеется алгоритм \tilde{g} , обладающий обратной устойчивостью для задачи $g : X \rightarrow Y$. Насколько результаты, которые он обеспечивает, точны? Ответ зависит от числа обусловленности $\kappa = \kappa(x)$ задачи g . Если $\kappa(x)$ мало, то результат будет точен в относительном смысле, но если оно велико, точность будет падать пропорционально.

Теорема 3.1. Пусть алгоритм \tilde{g} , обладающий обратной устойчивостью, применяется для решения задачи $g : X \rightarrow Y$ с числом обусловленности κ на компьютере, удовлетворяющим аксиомам 1.1 и 1.2. Тогда относительная ошибка удовлетворяет

$$\frac{\|\tilde{g}(x) - g(x)\|}{\|g(x)\|} = O(\kappa(x)\varepsilon_{\text{machine}}). \quad (3.1)$$

Доказательство. По определению обратной устойчивости (2.5) имеем $\tilde{g}(x) = g(\tilde{x})$ для всех $\tilde{x} \in X$, удовлетворяющих

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} = O(\varepsilon_{\text{machine}}).$$

По определению числа обусловленности

$$\kappa = \kappa(x) = \sup_{\delta x} \left(\frac{\|\delta g\|}{\|g(x)\|} \Big/ \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \right)$$

(здесь δx и δg – бесконечно малые величины) это означает, что выполняется

$$\frac{\|\tilde{g}(x) - g(x)\|}{\|g(x)\|} \leq (\kappa(x) + o(1)) \frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|},$$

где $o(1)$ означает число, стремящееся к нулю, при $\varepsilon_{\text{machine}} \rightarrow 0$. Комбинируя эти выражения, получаем (3.1). \square

3.5. Обратный анализ ошибок

Процесс, который был произведен в доказательстве теоремы 3.1 – это так называемый обратный анализ ошибок. Полученная точность соответствует двум шагам. Первый шаг – изучение обусловленности задачи, второй – изучение устойчивости компьютерного алгоритма. Окончательное заключение состоит в том, что если компьютерный алгоритм устойчив, тогда его конечная точность зависит от числа обусловленности задачи.

Чисто математически, это достаточно очевидно, но это не первая мысль, которая придет в голову неподготовленному человеку, если ему будет необходимо проанализировать численный алгоритм. Первая идея, которая придет ему в голову – это *прямой анализ ошибок*, т.е. анализ, где на каждом шаге алгоритма оцениваются ошибки вычисления и, таким образом, окончательная общая ошибка суммируется от шага к шагу.

Опыт показывает, что для большинства алгоритмов вычислительной линейной алгебры прямой анализ ошибок выполнить сложнее, чем обратный. Взглянув на уже изученное, несложно объяснить, почему это так. Пусть используется хорошо зарекомендовавший себя на практике алгоритм, скажем, для решения $Au = f$ на компьютере. Установленный факт, что полученные решения будут соответственно менее точными, если A – плохо обусловлена. Но как же прямой анализ ошибок может объяснить этот феномен? Число обусловленности A – настолько глобальное свойство, что оно более-менее невидимо на уровне индивидуальной ошибки операций с плавающей точкой, производимых для решения задачи $Au = f$. Тем не менее, так или иначе прямой анализ должен обнаружить это число обусловленности, для того чтобы прийти к корректному результату.

Короче, подтвержденный факт, что самые лучшие алгоритмы для большинства задач в общем случае дают результаты, близкие к точным, но уже для задач с небольшим возмущением исходных данных (относительно исходных). Метод обратного анализа ошибок позволяет достаточно аккуратно (с математической точки зрения) формализовать этот результат.

3.6. Упражнения

3.1. Для каждой из следующих задач предполагается, что описанные компьютерные алгоритмы удовлетворяют аксиомам 1.1 и 1.2. Для каждого из приведенных компьютерных алгоритмов указать, являются ли эти алгоритмы *обратно устойчивыми, устойчивыми, но не обратно устойчивыми* или *неустойчивыми* и доказать это или привести примеры, аргументирующие эти утверждения.

(a) Дано: $x \in \mathbb{C}$. Решение: $2x$, вычисляется как $x \oplus x$.

(b) Дано: $x \in \mathbb{C}$. Решение: x^2 , вычисляется как $x \otimes x$.

(c) Дано: $x \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Решение: 1, вычисляется как $x \oslash x$. (Компьютер удовлетворяющий (1.5), будет давать точный ответ, но предполагается, что компьютерная операция с плавающей точкой удовлетворяет (1.6)).

(d) Дано: $x \in \mathbb{C}$. Решение: 0, вычисляется как $x \ominus x$. (Опять, реальный компьютер может выполнять арифметические операции с плавающей точкой точнее, чем определено в (1.6)).

(e) Дано: нет. Решение: e , вычисляется суммированием $\sum_{k=0}^{\infty} 1/k!$ слева направо с использованием операций \otimes и \oplus , останов производится когда изменение суммы $< \varepsilon_{\text{machine}}$.

(f) Дано: нет. Решение: e , вычисляется как в (e), но суммирование справа налево.

3.2. Докажите, что умножение двух матриц A и b с плавающей точкой, основанное на использовании скалярных произведений, удовлетворяет

$$\text{fl}(AB) = AB + E, \quad |E| \leq n\varepsilon_{\text{machine}}|A||B| + O(\varepsilon_{\text{machine}}^2).$$

3.3. Покажите, что если $F \in \mathbb{R}^{m \times n}$, где $m \geq n$, то $\| |F| \|_2 \leq \sqrt{n} \|F\|_2$. Этот результат полезен при выводе оценок в терминах абсолютных величин элементов.

3.4. Пусть имеется функция извлечения квадратного корня, удовлетворяющая условию $\text{fl}(\sqrt{x}) = \sqrt{x}(1 + \eta)$, где $|\eta| \leq \varepsilon_{\text{machine}}$. Приведите алгоритмы для вычисления $\|x\|_2$ и оцените ошибки округления.

3.5. Пусть A и B – верхние треугольные матрицы порядка n из чисел с плавающей точкой. Если $\hat{C} = \text{fl}(AB)$ вычислено по любому из традиционных алгоритмов, верно ли, что $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, где \hat{A} и \hat{B} близки к A и B ?

3.6. Пусть A и B – $n \times n$ -матрицы из чисел с плавающей точкой и матрица A невырожденная, причем $\| |A^{-1}| \|A\| \|_{\infty} = \nu$. Покажите, что если $\hat{C} = \text{fl}(AB)$ вычислено по любому из традиционных алгоритмов,

то существует такая \hat{B} , что $\hat{C} = A\hat{B}$ и $\|\hat{B} - B\|_\infty \leq n\varepsilon_{\text{machine}}\nu\|B\|_\infty + O(\varepsilon_{\text{machine}}^2)$.

3.7. Показать, используя результат упражнения 3.2, что

$$\|\text{fl}(AB) - AB\|_1 \leq n\varepsilon_{\text{machine}}\|A\|_1\|B\|_1 + O(\varepsilon_{\text{machine}}^2).$$

Глава 4

Некорректные стохастические задачи

Даётся формулировка некорректной стохастической задачи. Устанавливается взаимосвязь между некорректными задачами и задачами решения приближённых стохастических систем линейных алгебраических уравнений. Даётся оценка современного состояния этой проблемы.

4.1. Этапы развития теории некорректных задач

Целью настоящей книги является рассмотрение эффективных методов решения некорректных стохастических СЛАУ по приближённым данным. Однако, прежде чем подробно осветить эти вопросы, представляется разумным коротко охарактеризовать основные этапы развития теории некорректных задач, т.е. теории некорректных задач, включающей и детерминированные операторные уравнения. Это, по видимому, даст возможность лучше увидеть отличие и связь стохастической теории от детерминированной теории некорректных задач, частным случаем которой является теория приближённого решения некорректных СЛАУ (в её различных постановках).

Хорошо известно, что некорректно поставленные задачи любого вида характеризуются тем, что как угодно малые изменения исходных данных могут приводить к произвольно большим изменениям решения. Класс всех некорректно поставленных задач необычайно широк. Это - задачи решения операторных уравнений первого рода, минимизации

функционалов, суммирования рядов Фурье с приближённо заданными коэффициентами, дифференцирования неточно заданных функций, многие задачи линейной алгебры, как будет далее показано, к которым сводятся различные задачи параметрической идентификации динамических систем и т.п. Последние задачи относятся к так называемым обратным задачам, которые, в свою очередь тесно связаны с интерпретацией данных физических экспериментов.

Рассмотрим общее операторное уравнение

$$Au = f, \quad u \in U, \quad f \in F, \quad (4.1)$$

где $A : D_A \subseteq U \rightarrow F$ - оператор с непустой областью определения D_A , действующий в общем случае из метрического пространства U в метрическое пространство F . Задание пространств U и F является необходимым элементом математической постановки задачи (4.1), в тесной связи с которым находится важное определение её корректности. Условия корректности постановки математической задачи были сформулированы ещё в 1902 г. Ж. Адамаром. В соответствии с этим определением (см. также [62] - [55]) задача (4.1) называется корректной или корректно поставленной, если выполнены два условия: а) уравнение (4.1) разрешимо для любого $u \in U$ единственным образом; б) решение уравнения (4.1) устойчиво относительно возмущения правой части уравнения, т.е. оператор A^{-1} (определённый на всём U) является непрерывным. Если хотя бы одно из этих условий не выполнено, задача называется некорректной или некорректно поставленной. Оказывается, что класс некорректно поставленных задач необычайно широк. В частности, при решении задач параметрической идентификации динамических систем (как дискретных, так и непрерывных) мы приходим к необходимости решать обратные задачи, которые, как правило, являются некорректно поставленными.

Для получения устойчивых решений некорректных задач в настоящее время получили широкое применение различные методы регуляризации.

С информационной точки зрения некорректность решения означает, что той информации, которая содержится в приближённых данных, недостаточно для получения устойчивых решений. Поэтому различные методы получения корректных решений операторных уравнений $Au = f$ сводятся к наложению тех или иных ограничений на допустимое решение.

Из сказанного можно сделать следующий основной вывод: возможность определения приближённых решений некорректно поставленных задач, устойчивых к малым изменениям исходных данных, основывается на использовании дополнительной априорной информации относительно решения.

Рассмотрим основные этапы развития методов регуляризации для решения некорректных задач. Методы регуляризации можно разбить на два типа. В случае использования регуляризаторов первого типа сначала ищется решение уравнения (4.1), а затем полученное решение подвергается сглаживанию. При таком подходе число метода регуляризации зависит от различных используемых методов сглаживания. Простейшим примером такого типа регуляризации, по-видимому, является использование различных спектральных окон (Бартлетта, Тьюки, Парзена и др.) в задачах оценивания спектральных плотностей случайных процессов и временных рядов [16]. Эти методы интенсивно используются ещё с начала 50-х годов.

Вероятно, методы регуляризации этого типа можно отнести к первому этапу развития методов регуляризации для решения некорректных задач. Для этих методов (например, таких как устойчивые методы оценивания спектральных плотностей) характерно в некоторой степени неосознанное применение теории регуляризации.

Следующий этап - этап сознательного формирования регуляризующих алгоритмов связан с именами видных советских математиков А.Н. Тихонова, Г.И. Марчука, М.М. Лаврентьева, В.К. Иванова, В.А. Морозова, а также созданной ими математической школой, во многом определившей пути развития теории некорректных задач, ставшей одним из самых плодотворных направлений современной вычислительной математики. Для этого этапа характерно применение регуляризаторов второго типа, когда исходное уравнение (4.1) преобразуется таким образом, что решение нового уравнения и будет представлять собой регуляризованное решение исходного. Теоретические предпосылки развития приближённых методов этого типа для решения некорректных задач были заложены в фундаментальной работе А.Н.Тихонова [64].

А.Н. Тихонову принадлежит обобщение классического (по Адамару) понятия корректности, в основе которого лежит фундаментальная идея сужения области определения исходного оператора [64]. Эта задача (4.1) называется корректной по Тихонову (условно корректной) [54].

А.Н. Тихоновым была сформулирована топологическая теорема об устойчивости обратного оператора [64], играющая в теории методов ре-

шения некорректных задач важную роль. Впоследствии эта теорема была обобщена на метрические и топологические пространства в случае замкнутого оператора A В.К. Ивановым [42, 41], а на случай необратимого оператора – О.А. Лисковцом [49]. Локальный вариант этой теоремы рассмотрен также в [55]. Однако теорема А.Н. Тихонова об устойчивости обратного оператора, показывая принципиальную возможность устойчивого решения (4.1), ещё не определяет метода решения. Трудность заключается в том, что уравнение (4.1) может на практике оказаться неразрешимым при любой заданной приближённо правой части \tilde{f} . Следующий этап связан с разработкой методов регуляризации на основе различных видов дополнительной априорной информации о точной системе (4.1). Возможны различные типы дополнительной информации. В первой категории случаев дополнительная информация, носящая количественный характер, позволяет сузить класс возможных решений, например, до компактного множества и задача становится устойчивой к малым изменениям исходных данных. Во второй категории случаев для нахождения приближённых решений используется лишь качественная информация о решении, например, информация о характере его гладкости. М.М. Лаврентьев показал, что при определённых условиях на оператор A можно заменить задачу (4.1) на близкую, но уже разрешимую при любых $f \in F$. Однако в этом методе для нахождения устойчивого приближённого решения использовалась дополнительная информация обоих типов, т.е. необходимо знание как точности задания элемента f (оценки уклонения $\rho_f(f, \tilde{f}) \leq \delta$), так и функции корректности: $\rho_v(u, v) \leq \omega(\tau)$, где $\rho_F(Au, Av) \leq \tau$. На практике второе условие является довольно ограничительным. При аналогичных условиях задача рассматривалась также Джоном.

Избавиться от этого недостатка даёт возможность метод В.К. Иванова, который, используя некоторые идеи математического программирования, продвинулся дальше. В работах [43] он избавился, при приближённом решении (4.1), от задания функции корректности $\omega(\tau)$. Не требуется также и знания δ , характеризующего точность задания правой части (4.1). Однако метод В.К. Иванова требует задания компактного множества M , т.е. множества корректности задачи (4.1), в котором содержится искомое множество решений уравнения (4.1).

Приближённые решения, названные В.К. Ивановым квазирешениями, определяются как элементы $u \in M$, на которых

$$\rho_F(Au, \tilde{f}) = \min_{v \in M} \rho_F(Av, \tilde{f}).$$

Метод квазирешений В. К. Иванова позволяет решать многие практически важные задачи, в том числе и некорректные СЛАУ. Однако в тех случаях, когда отсутствует априорная информация о компактном множестве M , этот метод неприменим. Преодолеть эти серьёзные недостатки позволил метод регуляризации А.Н. Тихонова [65, 66], который способствовал существенному продвижению теории некорректных задач. Метод регуляризации Тихонова основан на радикальной идее о стабилизации минимума уклонения значений Au от заданной правой части \tilde{f} при помощи некоторого вспомогательного неотрицательного (сглаживающего или стабилизирующего) функционала $\Omega(u)$.

В соответствии с методом Тихонова приближённое решение находится из решения задачи минимизации по $u \in U_0 \subseteq D_A$ параметрического функционала Тихонова:

$$R_\alpha[u, \tilde{f}] \equiv \rho_F^2(Au, \tilde{f}) + \alpha\Omega^2(u), \quad \alpha > 0.$$

Решение этой задачи \tilde{u}_α , при определённом выборе параметра регуляризации $\alpha = \alpha(\delta)$, принимается за приближённое к искомому решению u .

Главное достоинство метода регуляризации А.Н. Тихонова состоит в том, что он оказался необременительным на практике, так как не требует фактического задания компакта M , в котором содержится искомое решение уравнения (4.1).

Основная трудность применения метода регуляризации заключается в формулировке алгоритмических принципов выбора параметра регуляризации α . Наиболее эффективным способом выбора параметра регуляризации является принцип невязки, предложенный и обоснованный в [47]. Целесообразность применения этого принципа отмечалась также в работе [47]. Принцип невязки является перенесением широко используемого на практике критерия точности приближённых решений на некорректные задачи. Обзор современного состояния этого вопроса, а также достаточно полная библиография по этому вопросу содержатся в работах [54, 55, 63]. В заключении этого параграфа стоит отметить ещё один тип методов регуляризации, связанный с тем, что многие практические задачи наилучшего приближения, идентификации, анализа данных и другие оптимизационные задачи относятся к так называемым критериальным задачам [62]. В связи с этим в последнее время также интенсивно развивались методы регуляризации неустойчивых критериальных задач [62].

4.2. Обзор методов решения приближённых систем

Задачи нахождения устойчивых приближённых решений вырожденных и плохо обусловленных СЛАУ являются частным случаем задач решения некорректных операторных уравнений. Однако первые задачи имеют достаточно особенностей, чтобы заслуживать отдельного рассмотрения.

Вначале обратимся к классической постановке задачи о решении приближённой СЛАУ, данной А.Н. Тихоновым [67]–[70].

Рассмотрим СЛАУ

$$Au = f, \quad u \in \mathbb{R}^m, \quad f \in \mathbb{R}^n, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times m}, \quad (4.2)$$

заданную с помощью расширенной матрицы (A, f) , где $\mathbb{R}^{n \times m}$ – пространство вещественных $n \times m$ – матриц.

Если вместо точной системы (A, f) задана приближённая система (\tilde{A}, \tilde{f}) , то при любой точности задания \tilde{A} и \tilde{f} , как правило, она неразрешима. В [69, 70] показано, что индивидуальная приближённая система (\tilde{A}, \tilde{f}) даже при как угодно большой точности содержит недостаточную информацию для получения устойчивого приближённого решения исходной задачи. Постановка задачи о решении приближённой СЛАУ зависит от доступной информации. Чаще всего на практике информация даётся в виде индивидуальной приближённой системы $\tilde{A}u = \tilde{f}$, т.е. расширенной приближённой матрицы (\tilde{A}, \tilde{f}) . Однако этой информации, как отмечалось в [69, 70], недостаточно. Поэтому для нахождения устойчивых решений приближённые системы должны задаваться с помощью индивидуальной системы (\tilde{A}, \tilde{f}) и класса систем (A, f) , эквивалентных по точности. Если $\tilde{U} = \{A\}$, $\tilde{F} = \{f\}$ – классы матриц и правых частей, эквивалентных (\tilde{A}, \tilde{f}) по точности, то приближённая система $\Sigma = \{(A, f)\}$ задаётся, как совокупность систем (A, f) :

$$Au = f, \quad A \in \tilde{U}, \quad f \in \tilde{F}, \quad (A, f) \in \Sigma. \quad (4.3)$$

Если классы \tilde{U} и \tilde{F} задаются при помощи квадратичных норм с точностью μ и δ , т.е.

$$\tilde{U} = \tilde{U}_\mu = \{A : \|A - \tilde{A}\| \leq \mu\}, \quad \tilde{F} = \tilde{F}_\delta = \{f : \|f - \tilde{f}\| \leq \delta\},$$

где $\|\cdot\|$ – евклидова норма вектора, а

$$\|A\|^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2,$$

сферическая матричная норма, то в этом случае приближённая система задаётся, как приближённая индивидуальная система (\tilde{A}, \tilde{f}) и класс $\Sigma_{\mu\delta} = \{(A, f)\}$ систем, эквивалентных ей по точности:

$$Au = f, A \in \tilde{U}_\mu = \{A : \|A - \tilde{A}\| \leq \mu\}, f \in \tilde{F}_\delta = \{f : \|f - \tilde{f}\| \leq \delta\}. \quad (4.4)$$

При этом разрешимость системы (\tilde{A}, \tilde{f}) априори не предполагается.

В соответствии с определением А.Н. Тихонова, если элемент $u \in \mathbb{R}^m$ является решением уравнения $Au = f$, где $(A, u) \in \Sigma$, то u называется допустимым решением Σ , а приближённая система Σ - совместной.

Нормальным решением приближённой системы Σ называется [69, 70] элемент \bar{u}_Σ , минимизирующий функционал сложности $\Omega(u) = \|u - u_0\|$ на множестве допустимых решений U_Σ :

$$\|\bar{u}_\Sigma\| = \eta_\Sigma = \inf \|u\|, \quad \text{на } u \in U_\Sigma,$$

где $U_\Sigma = \{u\}$ - совокупность всех допустимых решений Σ .

В [69, 70] показано, что задача определения нормального решения системы по приближённым данным сводится к задаче: найти такое \bar{u}_Σ , что

$$\|\bar{u}_\Sigma\| = \inf \|u\| \quad \text{на } U_{\mu\delta} = \{u : \|\tilde{f} - \tilde{A}u\| - \mu\|u\| = \delta\}. \quad (4.5)$$

На основании принципа взаимности [71] в [69, 70] также формулируются другие эквивалентные (4.3) задачи, и рассматриваются вытекающие из этих результатов устойчивые методы их решения. Соответствующие численные алгоритмы также излагаются подробно в [54].

Эффективный алгоритм, основанный на методе последовательных приближений, решения задачи (4.3) недавно предложен в работе [57]. Этот алгоритм, так же как и алгоритмы предложенные в [54, 11], основан на сингулярном разложении матрицы $A = P_1 \Lambda P_2$, но в отличие от них не требует вычисления производных ρ'_α вспомогательной функции,

$$\rho(\alpha) = \|Au_\alpha - f\|, \quad (4.6)$$

что является основным неудобством методов, рассмотренных в [54, 11].

Изложенная постановка задачи А.Н. Тихонова о решении приближённой СЛАУ с детерминированными возмущениями будет во второй главе в определённой мере обобщена на класс приближённых стохастических СЛАУ. Значительно менее разработанными оказались методы решения некорректных СЛАУ со случайными возмущениями, в особенности, когда возмущения содержатся как в правой части, так и в

матрице системы. Вначале будут рассмотрены более простые задачи со случайными возмущениями лишь в правой части СЛАУ.

Вероятно первым подходом, который стал использоваться для решения приближённых стохастических СЛАУ такого вида, является метод гребневой регрессии (ридж - регрессии). Он возник для решения плохо обусловленных и вырожденных задач линейного регрессионного анализа, которые, как известно, сводятся к задачам решения СЛАУ с приближённо заданной правой частью. В соответствии с этим методом регуляризованные оценки решений u_α определяются из уравнения Эйлера

$$(\alpha E_m + A^T A)u_\alpha = A^T \tilde{f}, \quad \alpha > 0, \quad (4.7)$$

где α - параметр регуляризации, T - знак транспонирования.

Формально оценки решений, полученные из уравнения (4.4), совпадают с оценками решений, полученными методом регуляризации А.Н. Тихонова, однако этот результат появился независимо в работе Хёрла и Кеннарда [82] и в дальнейшем был назван гребневой регрессией (ридж - регрессией). Однако ещё раз следует подчеркнуть, что в работах А.Н. Тихонова рассматривался лишь случай детерминированных возмущений, а метод гребневой регрессии был специально разработан для случая стохастических возмущений. Это отличие двух рассмотренных подходов является принципиальным, так как для случая стохастических возмущений нельзя уже формально использовать принцип невязки, обоснованный для детерминированных возмущений, хотя это иногда пытаются делать, основываясь на некоторых эвристических соображениях.

Регуляризованные оценки u_α со статистической точки зрения уже относятся к классу смещённых оценок в отличие от оценок метода наименьших квадратов (МНК). При определённом выборе параметра, регуляризации (см., например, [14, 7]) α среднеквадратичные ошибки регуляризованных оценок меньше соответствующих ошибок МНК-оценок, т.е.

$$\mathbf{M}\|u_\alpha - u_*\|^2 < \mathbf{M}\|\hat{u} - u_*\|^2, \quad (4.8)$$

где u_* - нормальное решение точной (совместной) СЛАУ (A, f) , а \hat{u} - МНК-решение приближённой СЛАУ (A, \tilde{f}) , т.е.

$$\hat{u} = A^+ \tilde{f}. \quad (4.9)$$

Однако для выполнения последнего условия необходима априорная информация о дисперсии случайных возмущений в правой части, а так-

же необходима определённая информация о неизвестном векторе нормального решения

$$u_* = A^+ f$$

точной СЛАУ (A, f) . В связи с этим мнения разных авторов о полезности регуляризованных оценок (4.4) при решении приближённых СЛАУ весьма противоречивы. Они варьируются от восторженно положительных до резко критических [70]. Главная причина положения кроется в том, что оптимальный выбор параметра регуляризации соответствует величине [54, 7] $\alpha_* = \sigma^2 / \|u_*\|^2$ и, таким образом, его практическое определение весьма затруднено в силу зависимости α_* от величины $\|u_*\|^2$. С позиций теории регуляризации намного более оправданным является предположение, что априори известна лишь дисперсия σ^2 , которая является вероятностным аналогом величины, характеризующей погрешности задания правой части приближённой СЛАУ (A, \tilde{f}) .

Формально метод гребневой регрессии можно рассматривать как метод вычисления устойчивых решений совместной системы (A, f) по приближённым данным (A, \tilde{f}) , когда вектор возмущений правой части $\Delta f = \tilde{f} - f$ удовлетворяет условиям

$$\mathbf{M}(\Delta f) = 0, \quad \mathbf{D}(\Delta f) = \sigma^2 E_n. \quad (4.10)$$

На аналогию метода гребневой регрессии с идеями регуляризации указывалось неоднократно (см., например, [40]). Используя терминологию А.Н. Тихонова, приведённую в начале этого параграфа, можно сказать, что приближённая система в этом случае задаётся как индивидуальная система (A, \tilde{f}) , дисперсия σ^2 и условия (4.5), характеризующие определённую статистическую регулярность возмущений Δf .

Однако до настоящего времени не известно [70] метода выбора параметра регуляризации α на основе лишь величины σ^2 , который бы гарантировал улучшение статистических свойств (на конечной выборке) регуляризованных оценок решений по сравнению с оценками МНК при решении вырожденных или плохо обусловленных СЛАУ. Достаточно полная библиография по вопросам гребневой регрессии содержится в работах [14, 7], а примеры применения методов гребневой регрессии для решения обратных задач математической физики содержатся в [73, 39].

Другим подходом, применяемым для решения плохо обусловленных СЛАУ с приближённой (случайной) правой частью, является подход основанный на идее сокращения длины вектора МНК-оценок [14, 7]. Этот метод был предложен Стейном и Джеймсом (см., например, [7, с.131])

и получил название сжатых оценок Стейна-Джеймса. На практике в большинстве задач этот метод даёт незначительное улучшение свойств оценок перед обычными МНК-оценками. Можно также показать, что метод сжатых оценок Стейна – Джеймса является частным случаем регуляризованных оценок (риджд-оценок) [7, с.131].

Многие некорректные задачи (стохастические и детерминированные) линейной алгебры формулируются следующим образом: решить СЛАУ (совместную) $Au = f$ с матрицей ранга $\text{rank } A \leq \min(n, m)$ на основе априорной информации $Au_0 = f$, $u_0^T C u_0 \leq 1$, где C - заданная симметричная положительно определённая матрица, а u_0 - априори неизвестный фиксированный вектор. В этом случае вектор u_0 , вообще говоря, точно восстановить невозможно. Однако можно указать вектор \hat{u} , аппроксимирующий u_0 в минимаксном смысле [13]:

$$\hat{u} = [E_m - (GCG)^+ CG] A^+ f, \quad (4.11)$$

где $G = E_m - A^+ A$.

Интересный подход содержится в работе [52], представляющий собой попытку применения аппарата регрессионного анализа к методу регуляризации решения плохо обусловленных или вырожденных СЛАУ с неточно заданной случайной правой частью и интегральных уравнений первого рода и, наоборот, метода регуляризации в регрессионном анализе с последующей оценкой дисперсии решения и проверкой нуль-гипотезы по критериям Стьюдента и Фишера – Снедекора. Сущность этого подхода состоит в том, что дополнительная априорная информация здесь выступает в виде вспомогательного эксперимента или, иначе говоря, вспомогательной СЛАУ, которая в отличие от исходной СЛАУ уже не является некорректной. Однако такая информация далеко не всегда доступна экспериментатору на практике. Но главный недостаток этого подхода состоит в том, что погрешности предполагаются лишь в правой части и что они имеют гауссовский закон распределения. Последнее, как известно, является очень сильным ограничением при практическом использовании этого подхода, так как реальные законы распределения возмущений всегда отличаются от нормального. В случае если законы распределения возмущений далеки от нормального, применение стандартных методов, основанных на нормальном законе распределения, может привести к существенному искажению полученных результатов. Однако малый объём информации в большинстве случаев не позволяет достаточно надёжно установить вид закона распределения возмущений. Поэтому возникает проблема разработки таких методов

решения некорректных стохастических СЛАУ, которые были бы менее чувствительны к виду закона её распределения и, в частности, не так сильно реагировали бы на отдельные большие случайные отклонения. Для решения такого класса задач созданы специальные методы, у истоков которых стояли американский статистик Д. Тьюкки и швейцарский математик П. Хьюбер. Их усилиями, а также работами их последователей, в настоящее время создано целое направление в математической статистике, занимающееся построением и изучением устойчивых процедур – теория робастного оценивания [85] – [75]. В работах Я.З. Цыпкина и Б.Т. Поляка эти методы были развиты для решения задач регрессионного анализа в задачах параметрической идентификации систем [58] – [76].

Недавно в работе [2] был предложен робастный метод решения некорректных стохастических СЛАУ с неточно заданной правой частью и некорректных задач типа интегральных уравнений первого рода. Рассмотрим этот метод применительно к решению только некорректных стохастических СЛАУ. В соответствии с этим методом предполагается, что вместо точной правой части задана её случайная реализация – вектор \tilde{f} , компоненты которого представимы в виде

$$\tilde{f}_i = f_i + \sigma \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, r \quad n \geq r > n/2, \quad (4.12)$$

где ε_i – случайные величины с нулевым математическим ожиданием и дисперсией, не превышающей 1, σ – величина, характеризующая статистическую погрешность реализаций компонент вектора приближённой правой части с номерами $i = 1, 2, \dots, r$. Остальные реализации компонент вектора могут иметь сколь угодно большую дисперсию.

В этом случае в [2] предлагается вычислять оценки решений некорректных стохастических СЛАУ на основе метода робастной регуляризации. В соответствии с этим методом оценки решений определяются из условия минимума сглаживающего функционала вида

$$T_\alpha(u) = \sum_{i=1}^n \rho_\delta \left(\sum_{j=1}^m a_{ij} u_j - \tilde{f}_i \right) + \alpha(Bu, u), \quad (4.13)$$

где $\alpha \geq 0$ – параметр регуляризации, B – симметричная положительно определенная матрица, $A = \{a_{ij}\}$, ρ_δ – функция Хьюбера [67]: $\rho_\delta(s) = s^2/2k$ при $|s| \leq k$; $\rho_\delta(s) = k/2$ при $|s| > k$; k – параметр согласованный с σ : $0 < k \leq c\sigma$, c – константа. В [65] параметр k в функции Хьюбера

рекомендуется выбирать равным среднеквадратической ошибке незасоленной части измерений, т.е. $= \sigma$. Для численной минимизации функционала (4.6) в [2] предложен специальный эффективный алгоритм.

Существенным недостатком предложенного в [2] метода робастной регуляризации является то, что для оценок решений не изучены никакие статистические свойства, а имеются только результаты численного моделирования этого метода на ЭВМ, показывающие его эффективность на некоторых модельных задачах. В случае дискриптивной регуляризации $\alpha = 0$ этот метод соответствует обычному методу робастного оценивания, используемому в задачах регрессионного анализа [77].

Далее будут рассмотрены методы решения более сложных некорректных систем с приближенно заданными как правыми частями, так и матрицей.

Значительный вклад в решение этих проблем несомненно принадлежит Е.Л. Жуковскому [53], [33] – [38]. В этих работах развивается метод статистической регуляризации вырожденных и плохо обусловленных СЛАУ на основе последовательной байесовской процедуры. Для удобства варьирования по матрице A , а также для задания плотности априорной меры на ней, в [33] – [36] используя свойства кронекеровского произведения для матриц, система (4.2) представляется в виде

$$Au \equiv (u \otimes E_n)A^{(v)} = f, \quad (4.14)$$

где $C \otimes D$ - кронекеровское произведение матриц C и D . Для матрицы $A = \|a_1: \dots : a_m\|$, состоящей из m столбцов a_i (размер каждого $n \times 1$), вводится столбец $A^{(v)} = \text{col}(a_1, \dots, a_m)$, который получается, если каждый последующий столбец расположить ниже предыдущих, E_n - единичная матрица порядка n .

Такая запись уравнения (4.2) позволяет рассматривать его как функцию от двух независимых равноправных переменных u и A , связанных мультипликативной зависимостью, и считать решением не только u , но и A , что важно для задач с приближенно известной матрицей A .

Для применения байесовского подхода [54] необходимо сделать следующие предположения относительно неизвестных величин u и A .

1. Имеется случайная реализация \tilde{f} правой части уравнения (4.2), которая обладает условным средним

$$\mathbf{M}(\tilde{f}|A, u) = f \quad (4.15)$$

и условной плотностью распределения

$$p(\tilde{f}|A, u) = C_\varphi \exp\{-\varphi(\Phi_f(\tilde{f} - Au))\}, \quad (4.16)$$

где C_φ – нормирующий множитель; $\varphi(\tilde{f})$ – функция, выполняющая роль метрики, например нормы; Φ_f – весовая невырожденная матрица, обратная к дисперсионной, $\Phi_f \in fR^{n \times n}$.

2. Задана случайная матрица \tilde{A} , реализующая истинную матрицу A и статистически не зависящая от f .

Условное среднее этой матрицы равно

$$\mathbf{M}(\tilde{A}|A, u) = A, \quad (4.17)$$

а её условная плотность распределения

$$p(\tilde{A}^{(v)}|A, u) = C_\psi \exp\{-\psi(\Phi_A(\tilde{A}^{(v)} - A^{(v)}))\}. \quad (4.18)$$

3. Относительно решения u известно, что оно реализуется в виде u_0 с условным средним

$$\mathbf{M}(u_0|A, u) = u \quad (4.19)$$

и условной плотностью

$$p(u_0|A, u) = C_q \exp\{-q(\Phi_u(u - u_0))\}, \quad (4.20)$$

статистически не зависящей от \tilde{f} и \tilde{A} и известной из дополнительных вспомогательных исследований.

Тогда использование правила Байеса [54] для апостериорного оценивания величин u и A в уравнении (4.2), когда вектор f и матрица A имеют большие по амплитуде, но с известными законами распределения погрешности, позволяет определять статистические регуляризованные решения, как показано в [34, 35] из условия минимума устойчивого интерпретирующего функционала

$$T(u, A) = \varphi(\Phi_f(f - Au)) + q(\Phi_u(u - u_0)) + \psi(\Phi_A(A - A_0)) \quad (4.21)$$

или, что эквивалентно, из решения системы уравнений Эйлера

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_u T \equiv A^\top \Phi_f \partial_{\tilde{f}} \varphi(\Phi_f(f - Au)) + \Phi_u \partial_u q(\Phi_u(u - u_0)), \\ 0 &= \partial_A T \equiv (U \otimes \Phi_f) \partial_{\tilde{f}} \varphi(\Phi_f(f - Au)) + \Phi_u \partial_A \psi(A - A_0), \end{aligned}$$

где $\partial_u f(\xi)$ - субдифференциал функции $f(u)$ по u в точке ξ . В этих уравнениях функции φ, q, ψ выполняют роль метрики, например нормы, которая и будет определять конкретный метод решения. Часто в задачах обработки, интерпретации и оценивания используется: МНК, метод минимальной гёльдеровой нормы, метод наименьших модулей и метод минимакса [54]. Наибольшее практическое применение получил МНК, который соответствует евклидовой норме и случаю гауссовских помех в параметрах f, u и A . Для МНК функционал $T(u, A)$ имеет вид

$$T(u, A) = (\Phi_f(f - Au), f - Au) + (\Phi_u(u - u_0), u - u_0) \\ + (\Phi_A(A^{(v)} - A_0^{(v)}), A^{(v)} - A_0^{(v)}),$$

а соответствующие ему уравнения Эйлера принимают вид

$$A^T \Phi_f A u - A^T \Phi_f f + \Phi_u(u - u_0) = 0, \\ (\Phi_u A u u^T)^{(v)} - (\Phi_f f u^T)^{(v)} + \Phi_A(A^{(v)} - A_0^{(v)}) = 0,$$

где

$$\mathbf{D}(f|u, A) = \Phi_f^{-1}, \quad \mathbf{D}(u) = \Phi_u^{-1}, \quad \mathbf{D}(A^{(v)}) = \Phi_A^{-1}.$$

В случае, когда A - детерминированная матрица, общее байесовское решение имеет вид [72]

$$u = \Phi_u^{-1/2} (\Phi_f^{1/2} A \Phi_u^{1/2})^+ \Phi_f^{-1/2} \\ + \Phi_u^{1/2} [E_m - (\Phi_f^{1/2} A \Phi_u^{-1/2})^+ (\Phi_f^{1/2} A \Phi_u^{-1/2})] \Phi_u^{-1/2} u_0,$$

где $(\cdot)^+$ - псевдообратная матрица Мура - Пенроуза.

Байесовский подход также используется для решения определённого класса операторных уравнений со случайными ошибками в данных [74]. Однако байесовский подход обладает рядом существенных недостатков.

Наиболее слабое место этого подхода - необходимость задания априорного вероятностного распределения искомого решения. В большинстве известных автору работ, использующих формулу Байеса, априорное вероятностное распределение постулируется в виде гауссовского распределения с заданным эллипсоидом распределения [33, 34]. Однако такое постулирование априорного распределения, как известно, заслуживает серьёзной критики.

Для численной реализации рассмотренных методов при конечных объёмах экспериментальной выборки можно эффективно использовать алгоритмы Воеводина, основанные на сингулярных разложениях (см.,

например, [54]) или рекуррентные алгоритмы Жуковского – Липщера. Алгоритмы Жуковского – Липщера основаны на использовании уравнений оптимальной фильтрации [83] и представляют рекуррентные процедуры нахождения псевдорешений, требующие псевдообращения матрицы A .

Численным методам регуляризации А.Н. Тихонова с применением сингулярного разложения посвящена недавно вышедшая работа Хенсона [81]. В этой работе регуляризация Тихонова анализируется в общей форме с позиций обобщённого SVD – разложения.

Решению некорректных стохастических СЛАУ с приближенно заданными как правой частью, так и матричным оператором в последнее время посвящен ряд новых работ [50] – [44].

В работах В.И. Мелешко [50, 51] дано несколько постановок задач вычисления решений стохастических уравнений, отличающихся различным уровнем информативности о случайных возмущениях.

Постановка 1. Предполагается, что реализации $\tilde{f}_i, i = 1, 2, \dots, n$, являющиеся координатами вектора $\tilde{f} \in \mathbb{R}^n$, статистически независимы, а их среднее и дисперсия суть соответственно

$$\mathbf{M}(\tilde{f}_i|A) = a_i u, \quad \mathbf{D}(\tilde{f}_i|A) = \sigma_{f_i}^2 > 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.22)$$

где a_i – строки матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$.

Вместо истинных значений строк a_i матрицы A заданы зашумлённые \tilde{a}_i случайной матрицы $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, которые статистически независимы и для которых выполняется

$$\mathbf{M}(\tilde{a}_i|A) = a_i, \quad \mathbf{D}(\tilde{a}_i|A) = \sigma_{a_i}^2 K, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (4.23)$$

где $\sigma_{a_i}^2 > 0$, K – симметричная положительно определенная матрица размерности $m \times m$.

Также предполагается, что реализации \tilde{f} , \tilde{A} взаимно независимы и для их средних выполняются первые соотношения, указанные в (4.7), (4.8).

Таким образом \tilde{f} , \tilde{A} со свойствами (4.7), (4.8) определяют стохастическое алгебраическое уравнение, у которого вероятностные характеристики зашумлённых правой части \tilde{f} и матрицы \tilde{A} описываются только первыми двумя моментами.

Постановка 2. Предполагается, что известна более полная, чем в предыдущем случае, характеристика помех, точнее, для статистических независимых, одинаково распределённых ошибок

$$\varepsilon_i = \tilde{f}_i - \mathbf{M}(\tilde{f}_i|A), \quad \delta_i = \tilde{a}_i - \mathbf{M}(\tilde{a}_i|A)$$

указаны соответствующие плотности распределения $p_1(\varepsilon)$, $p_2(\delta)$.

Реализации \tilde{f} , \tilde{A} и плотности p_j , $j = 1, 2$, аддитивных шумов ε_i , δ_i при данной постановке и задают стохастическое алгебраическое уравнение.

Постановка 3. Будем считать, что в условиях предыдущей постановки плотности $p_1(\varepsilon)$, $p_2(\delta)$ точно не заданы, а известно, что они принадлежат множествам P_1 , P_2 соответственно. Возникающее в этих условиях стохастическое алгебраическое уравнение обладает априорной неопределённостью вероятностных свойств помех.

Постановка 4. В условиях предыдущей постановки дополнительно задано статистически не зависящее от \tilde{f} , \tilde{A} априорное случайное значение u_0 искомого решения u стохастического уравнения. При этом плотность распределения $p_0(\psi)$ ошибки $\psi = u_0 - u$ принадлежит классу P_0 . Стохастическое уравнение здесь доопределено априорной информацией о его решении.

В [50, 51] строятся оценки рассматриваемых задач двумя подходами в рамках каждой из приведённых постановок.

В рамках постановки 1 эти подходы формулируются следующим образом.

В соответствии с первым подходом вводится обобщённая ошибка $\Delta\rho = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \delta \end{pmatrix}$, которая при сделанных в постановке 1 предположениях имеет нулевое среднее и дисперсионную матрицу

$$\mathbf{D}(\Delta\rho|A) = K_\rho = \text{diag} \{K_f, K_\delta\},$$

$$K_f = \text{diag}\{\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2\}, \quad K_\delta = (\Lambda \otimes K),$$

$$\Lambda = \text{diag}\{\sigma_{\alpha 1}^2, \dots, \sigma_{\alpha n}^2\}.$$

Как и в [34], в этом случае решается более общая задача одновременной оценки неизвестных u и A . Тогда в качестве МНК – оценки искомого решения стохастического алгебраического уравнения берутся \tilde{u} , \tilde{A} , определяемые из условия минимума функционала:

$$\begin{aligned} f(u, A) \equiv (K_\rho^{-1}\Delta\rho, \Delta\rho) &= (K_f^{-1}(\tilde{f} - Au), \tilde{f} - Au) + \\ &+ \text{tr}\Lambda^{-1}(\tilde{A} - A)K^{-1}(\tilde{A} - A)^\top, \end{aligned} \quad (4.24)$$

где tr – след матрицы.

В соответствии со вторым подходом вводится другая обобщённая ошибка $\xi = \tilde{f} - \tilde{A}u$, которая в условиях постановки 1 обладает нулевым

средним и дисперсионной матрицей:

$$K(u) = K_f + (Ku, u)\Lambda.$$

Оценка МНК \hat{u} определяется из минимума функции

$$\varphi(u) = (K^{-1}(u)(\tilde{f} - \tilde{A}u), \tilde{f} - \tilde{A}u). \quad (4.25)$$

В [51] показано, что оценки \check{u} , \hat{u} стохастических алгебраических уравнений, вычисляемые из (4.9), (4.10) соответственно, совпадают и тем самым являются эквивалентными. Для этих оценок выполняются свойства состоятельности и асимптотической нормальности.

В условиях второй постановки в соответствии с первым подходом оценки решений \check{u} , \check{A} определяются из условия максимума функций правдоподобия:

$$p_\rho(u, A) = \prod_{i=1}^n p_1(\tilde{f}_i - a_i u) p_2(\tilde{a}_i - a_i).$$

Этот подход в математической статистике известен как конфлюэнтный анализ [12].

При втором подходе оценки \hat{u} решений стохастических СЛАУ определяются как

$$\hat{u} = \operatorname{argsup}_{u \in \mathbb{R}^m} p(\xi, u), \quad \xi = \tilde{f} - \tilde{A}u,$$

где

$$p(\xi, u) = u_1^{-n} \prod_{i=1}^n \int_{\mathbb{R}} p_1(\tau) \int_{\mathbb{R}^{m-1}} p_2 \left(\begin{array}{c} u_1^{-1}(\tilde{f}_i - \tilde{a}_i u + \tau - u^* z) \\ z \end{array} \right) d\tau dz,$$

$$u^* = (u_2, \dots, u_m).$$

Таким образом в условиях постановки 2 оценки решений стохастических СЛАУ вычисляются на основе метода максимального правдоподобия (ММП).

В условиях постановки 3 применяется метод помехоустойчивых оценок, предложенный в [78].

В соответствии с первым подходом для нахождения устойчивых оценок решений применяется ММП к плотности:

$$p_*(\Delta\rho, u, A) = \prod_{i=1}^n p_{1*}(\tilde{f}_i - a_i u) p_{2*}(\tilde{a}_i - a_i),$$

где $p_{1*}(\tau)$, $p_{2*}(\tau)$ – наиболее неблагоприятные плотности на классах P_1 , P_2 соответственно.

В соответствии со вторым подходом помехоустойчивые оценки максимального правдоподобия

$$\hat{u} = \operatorname{argsup}_{u \in \mathbb{R}^m} p_*(\tilde{f} - \tilde{A}u, u),$$

где $p_*(\xi, u)$ – самая неблагоприятная плотность распределения на классе

$$P = \{p(\xi, u) | \xi = \varepsilon - (E_m \otimes u^\top)\delta, \quad p_1(\varepsilon) \in P_1, \quad p_2(\delta) \in P_2\}.$$

В условиях постановки 4 в соответствии с первым подходом оценка \hat{u} вычисляется путём минимизации по u и A функции

$$T(u, A) \equiv \ln p_*(\Delta\rho, \psi, u, A) = \ln p_*(\Delta\rho, u, A) + \ln p_{0*}(u_0 - u),$$

а во втором подходе \hat{u} определяется путём минимизации по u функции

$$T(u) \equiv \ln p_*(\xi, u) = \ln p_{0*}(\xi, u) + \ln p_{0*}(u_0 - u),$$

где $p_{0*}(\psi)$ – наиболее неблагоприятная плотность распределения на классе P_0 .

В методах [50, 51] стохастическая регуляризация понимается лишь с точки зрения теории оценивания параметров, т.е. под стохастически регуляризованными решениями в работах [50, 51] понимаются решения, которые обладают свойствами состоятельности и асимптотической эффективности. Однако эти свойства носят асимптотический характер и не дают ответа на вопрос при конечных, особенно малых, объёмах экспериментальной выборки, кроме того, не обсуждаются вопросы численной устойчивости алгоритмов, их реализующих.

В [88] для решения СЛАУ по приближённой матрице $\tilde{A} = A_\top + \Delta A$ и вектору правой части $\tilde{f} = f_\top + \Delta f$, где элементы Δa_{ij} , Δf_i матрицы ΔA и вектора Δf – независимые нормально распределённые случайные величины и $\mathbf{M}[\Delta a_{ij}] = \mathbf{M}[\Delta f_i] = 0$, $\mathbf{D}[\Delta a_{ij}] = \sigma_a^2$, $\mathbf{D}[\Delta f_i] = \sigma_f^2$, $i = 1, 2, \dots, n$, $j = 1, 2, \dots, m$; предлагается использовать TLS – метод (в [46] данный метод называется методом ортогональных проекций).

На основании TLS – метода оценки неизвестных решений определяются из условия

$$\inf_{u \in \mathbb{R}^m} \frac{\|\tilde{A}u - \tilde{f}\|^2}{\sigma_a^2 \|u\|^2 + \sigma_f^2}.$$

Используя результаты работы [45], в [46] показано, что нахождение оценок TLS – метода эквивалентно нахождению оценок согласно ММП. TLS – метод позволяет также определить не только оценку вектора решения \hat{u} , но и вычислять оценки матрицы A_T и вектора f_T , которые можно записать в виде [46]

$$\hat{A}_T = \tilde{A} + \sigma_f^2 \frac{\tilde{\rho}(\hat{u} \times \hat{u})}{\sigma_f^2 + \sigma_a^2 \|\hat{u}\|^2}, \quad \hat{f}_T = \tilde{f} - \sigma_f^2 \frac{\tilde{\rho}(\hat{u})}{\sigma_f^2 + \sigma_a^2 \|\hat{u}\|^2},$$

где $\tilde{\rho}(u) = \tilde{f} - \tilde{A}u$, \hat{u} – оценка TLS – метода.

Однако на конечной выборке оценки TLS – метода могут оказаться неустойчивыми. Для регуляризации оценок TLS – метода на конечной выборке в [46] предлагается регуляризованный TLS – метод, согласно которому оценки определяются из решения задачи

$$\inf_{\|u\| \leq K_u} \frac{\|\tilde{A}u - \tilde{f}\|^2}{\sigma_f^2 + \sigma_a^2 \|u\|^2}. \quad (4.26)$$

Можно сказать, что регуляризованный TLS – метод является в определённой мере стохастической формой метода квазирешений В.К. Иванова. Здесь предполагается, что априорная информация о приближённой СЛАУ задаётся в виде $\|u\| \leq K_u$, где K_u – положительная константа. Однако информация такого вида редко бывает известна на практике. Экспериментатор чаще располагает информацией о дисперсиях σ_a^2 , σ_f^2 погрешностей возмущений. Как показано в [46], вектор, дающий решение задачи (4.11) с ограничением, является решением уравнения Эйлера:

$$\tilde{A}^T \tilde{A}u_\gamma + \gamma u_\gamma = \tilde{A}^T \tilde{f}, \quad (4.27)$$

где

$$\gamma = \eta \frac{\sigma_f^2 + \sigma_a^2 \|u_\gamma\|^2}{K_u^2} - \sigma_a^2 \frac{\|\tilde{A}u_\gamma - \tilde{f}\|^2}{\sigma_f^2 + \sigma_a^2 \|u_\gamma\|^2}, \quad (4.28)$$

$\eta > 0$ – множитель Лагранжа.

Если K_u априори неизвестно, то для определения параметра регуляризации γ в [46] предлагается использовать равенство

$$\|\tilde{A}u_\gamma - \tilde{f}\|^2 - \mu^2 \|u_\gamma\|^2 = \delta^2. \quad (4.29)$$

Равенство (4.14) по существу представляет собой уравнение невязки. Однако вывод этого уравнения в работе [46] по существу необоснован,

так как оно получено из формулы вычисления оценки дисперсии по TLS – методу, и точное равенство (1.14) имеет место лишь в асимптотике, т.е. при $n \rightarrow \infty$. Кроме того в [45, с. 517] показано, что состоятельной оценкой σ_a^2 является оценка $[n(m+1)/(n-m)]^{-1}\hat{\sigma}_a^2$, где $\hat{\sigma}_a^2$ – оценка TLS – метода σ_a^2 . Поэтому μ^2 , δ^2 следует брать согласно равенствам: $\mu^2 = \sigma_a^2(n-m)$ и $\delta^2 = \sigma_f^2(n-m)$ (предполагается, что $n > m$), а не как показано в работе [46] $\mu^2 = \sigma_a^2 n(m+1)$ и $\delta^2 = \sigma_f^2 n(m+1)$. Из (4.13) также следует, что параметр регуляризации γ может принимать как положительные, так и отрицательные значения, в зависимости от соотношения σ_a^2 и σ_f^2 , что приводит к нарушению условия устойчивости оператора $(\tilde{A}^T \tilde{A} + \gamma E_m)^{-1}$ и, как следствие, неоднозначности решения, определяемого уравнениями (4.12), (4.14). Однако несмотря на это, в работе [46] не рассмотрены условия существования и единственности решения, определяемого формулами (4.12), (4.14), а также не рассмотрены вопросы численной реализации предложенного TLS – метода. В [46] отмечается, что из формул (4.12), (4.14), определяющих решение согласно регуляризованному TLS – методу, следует их полное соответствие формулам, определяющим решение согласно регуляризованному методу наименьших квадратов А.Н. Тихонова, рассмотренному в начале этого параграфа.

Существенными недостатками регуляризованного TLS–метода, предложенного в [46], также являются предположения о гауссовости возмущений и неизученность статистических свойств оценок, особенно на конечной выборке.

Дальнейшее развитие регуляризованного TLS–метода [46] дано в работе [46]. Функция правдоподобия, предложенная в [44], отличается от соответствующей функции в [44], так как включает полную информацию, накопленную на этапе обучения системы. Использование этой функции правдоподобия приводит к задаче на безусловный экстремум

$$l(\tilde{f}, u) = \frac{\|\tilde{f} - \tilde{A}u\|^2}{\sigma_f^2 + \sigma_a^2 \|u\|^2} + n \ln(\sigma_f^2 + \sigma_u^2 \|u\|^2) \rightarrow \inf_u, \quad (4.30)$$

которая при $\sigma_f^2 \gg \sigma_a^2 \|u\|^2$ совпадает [44] с задачей (4.11) на условный экстремум на компакте [3, 46]. В [44] показано, что оценка регуляризованного TLS – метода, определяемая из (4.15), является асимптотически оптимальной и асимптотически нормальной.

К недостаткам этого метода также относятся предположение о гауссовости возмущений и отсутствие каких-либо оптимальных свойств оценок на конечных выборках.

В работе [6] также предпринята попытка перенести основные результаты и алгоритм Тихонова на случай вероятностного задания погрешности в СЛАУ с ошибками в матрице и правой части. Однако там не изучаются никакие статистические свойства полученных оценок, что не даёт возможности сравнивать их с другими типами оценок.

На основании приведённого в этой главе обзора методов решения некорректных стохастических СЛАУ можно сделать следующие основные выводы.

1. Стохастическая модель возмущений представляет, по существу, некоторую дополнительную априорную информацию о приближённой СЛАУ, использование которой даёт возможность улучшить статистические свойства оценок решений.
2. Нахождение оценок решений приближенных стохастических СЛАУ должно быть основано на едином принципе отбора приближённого решения из исходной информации о модели.
3. Практически все методы, приведённые в обзоре, рассматривают задачу стохастической регуляризации СЛАУ лишь с точки зрения математической статистики, т.е. стохастическая регуляризация СЛАУ рассматривается лишь как блок статобработки. При этом основное внимание, как это и принято в математической статистике, уделяется асимптотическим свойствам (состоятельности, асимптотической эффективности и нормальности) оценок решений. В результате такой подход приводит к раздельному применению методов математической статистики и вычислительных методов к органически нераздельной на эти составные части проблемы решения некорректных стохастических СЛАУ [53].
4. Рассмотренные методы стохастической регуляризации СЛАУ или совсем не используют принцип невязки, играющий основополагающую роль при решении некорректных СЛАУ с детерминированными погрешностями [69, 70], или его применение не обосновано, как в работах [40, 46]. Это говорит о необходимости восстановления основополагающей роли принципа невязки при решении задач стохастической регуляризации СЛАУ.
5. Является актуальной проблема разработки методов стохастической регуляризации СЛАУ, в которых блок статобработки был бы органически связан с вычислительным блоком, т.е. методов, в

которых бы существовала органически неразрывная связь между статистической устойчивостью оценок и численной устойчивостью алгоритмов, их реализующих.

Глава 5

Решение некорректных стохастических СЛАУ

Рассматривается задача решения некорректных стохастических систем с неточно заданной правой частью и неточно заданной (частично или полностью) матрицей коэффициентов [18] – [29]. Получены условия существования и однозначной разрешимости указанной задачи на основе статистической формы обобщённого принципа невязки. Исследовано влияние априорной информации о возмущениях на статистические свойства оценок решений. Предложены эффективные вычислительные алгоритмы и различные способы выбора уровня невязки в зависимости от характера априорной информации.

5.1. Постановка задачи

Рассмотрим СЛАУ

$$Au = f, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times m}, \quad u \in \mathbb{R}^m, \quad f \in \mathbb{R}^n. \quad (5.1)$$

Элементы вектора правой части f и элементы (или их часть) матрицы A известны с ошибками, т.е. вместо точных f_{\top} , A_{\top} даны их случайные реализации $\tilde{f} = f_{\top} + \Delta f$, $\tilde{A} = (A'_{\top}; A''_{\top} + \Delta A)$, где $A'_{\top} \in \mathbb{R}^{n \times (m-s)}$, а A''_{\top} , $\Delta A \in \mathbb{R}^{n \times s}$ – матрицы. Если $s = m$, то все элементы матрицы возмущены, что соответствует задаче, когда возмущены все элементы матрицы системы.

Предполагается, что элементы матрицы возмущений ΔA и вектора возмущений Δf являются случайными величинами и удовлетворяют следующим двум условиям (п.н. – почти наверное).

Условие 1. $\mathbf{M}(\Delta b_i | \mathcal{F}_{i-1}) = 0$ п.н.

Условие 2. $\mathbf{D}(\Delta b_i | \mathcal{F}_{i-1}) = \text{diag}(\sigma_{a_1}^2, \dots, \sigma_{a_m}^2, \sigma_f^2)$ п.н.

Здесь $\Delta b_i = (\Delta a_{i1}, \dots, \Delta a_{im}, \Delta f_i)^\top$; \mathcal{F}_i – σ -алгебра, $\mathcal{F}_i = \sigma\{\Delta b_1, \dots, \Delta b_i\}$, индуцированная случайными величинами, указанными в скобках, $i = 1, 2, \dots, n$, и $\mathcal{F}_0 = \emptyset$; $\sigma_{a_j}^2 = 0$ для всех $j = 1, 2, \dots, m - s$, $0 < \sigma_{a_j}^2 < \infty$, для всех $j = m - s + 1, \dots, m$ и $\sigma_f^2 \neq 0$.

Замечание 1. Ниже без потери общности предполагается, что $\sigma^2 = \sigma_{a_j}^2 = \sigma_f^2 > 0$ для всех $j = 1, 2, \dots, s$. В противном случае, если априори известны дисперсии $\sigma_{a_1}^2, \dots, \sigma_{a_s}^2, \sigma_f^2$ или их отношения, всегда можно произвести нормализацию исходной СЛАУ (5.1) к виду

$$\tilde{A}_H u_H \cong f, \quad (5.2)$$

где $\tilde{A}_H = A D_\sigma$, $D_\sigma = \text{diag}\{1, \dots, 1, \kappa_1, \dots, \kappa_s\} \in \mathbb{R}^{m \times m}$. Тогда между решениями исходной СЛАУ (5.1) и нормализованной (5.2) существует линейная взаимосвязь

$$u = D_\sigma^{-1} u_H.$$

Здесь, в отличие от [46], уже не предполагается независимость и нормальность элементов последовательности $(\Delta b_i)_{i \geq 1}$ векторов возмущений. Условие 1 означает, что последовательность $(\Delta b_i, \mathcal{F}_{i-1})_{i \geq 1}$ является мартингал-разностью [79]. Как известно, это условие менее жёстко, чем условие независимости последовательности случайных величин, и не требуется выполнения условия одинаковой распределённости элементов последовательности, что очень важно при решении многих практических задач. В детерминистской постановке задачи А.Н.Тихонова [70, 70] класс систем, эквивалентных по точности некоторой индивидуальной системе, задаётся при помощи квадратичных норм. Такая метрика не подходит для задания точности стохастических систем и необходимо заменить её на какую-либо вероятностную метрику. Естественно использовать для задания точности приближённой стохастической системы усреднённую относительно некоторой вероятностной меры квадратичную норму (среднеквадратичную норму), т.е. дисперсию σ^2 погрешностей задания элементов матрицы и вектора правой части.

В свою очередь, точная система

$$A_T u = f_T \quad (5.3)$$

может быть детерминированной или стохастической. Точная детерминированная система (5.3) может быть, вообще говоря, неразрешимой, т.е.

$$\mu_A = \|A_T u - f_T\| \geq 0.$$

Величина μ_A очевидно является мерой несовместности точной системы (5.3). Тогда нормальное псевдорешение \bar{u} определяется как

$$\bar{u} = \operatorname{arginf}_{u \in U} \|u\|,$$

где U - множество псевдорешений системы (5.3).

В случае стохастической системы (5.4) будем предполагать, что

$$\mathbf{M}(f_i|A_T) = a_i u, \quad \mathbf{D}(f_i|A_T) = \sigma_0^2, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (5.4)$$

где $f_i, i = 1, 2, \dots, n$, - координаты вектора $f_T \in \mathbb{R}^n$, а a_i - строки матрицы $A_T \in \mathbb{R}^{n \times m}$.

В этом случае нормальное псевдорешение стохастической системы (5.3) естественно определить как

$$\hat{u} = \operatorname{arginf}_{u \in \tilde{U}} \|u\|,$$

где \tilde{U} - множество псевдорешений системы

$$A_T u = \mathbf{M}(f_T|A_T).$$

Если дополнительно предположить, что совокупности случайных величин $\{A_T, f_T\}$, $\{\Delta A\}$ и Δf статистически независимы между собой, то приближённую систему с точной стохастической системой, удовлетворяющей условиям (5.4), можно рассматривать формально как приближённую стохастическую систему с точной детерминированной системой

$$A_T u = f'_T,$$

где $f'_T = \mathbf{M}(f_T|A_T)$, $\sigma_{f'}^2 = \mathbf{D}(\tilde{f}_i|A_T) = \sigma_0^2 + \sigma_f^2, i = 1, 2, \dots, n$,

$$\mu'_A = \|A_T u - f'_T\| = 0.$$

Очевидно, с вычислительной точки зрения задача решения приближённой системы с точной стохастической системой является частным случаем задачи решения приближённой стохастической системы с детерминированной точной системой при условии $\mu_A \geq 0$. Поэтому в дальнейшем будет рассматривать именно этот тип приближённых стохастических систем.

Таким образом, используя терминологию А.Н. Тихонова [70, 70], будем считать, что приближённая стохастическая система задаётся при

помощи индивидуальной системы (\tilde{A}, \tilde{f}) меры несовместности μ_A и дисперсии σ^2 , характеризующей точность задания приближённой системы, а также условий 1 и 2, характеризующих определённую статистическую регулярность возмущений.

В дальнейшем вначале будет рассматриваться случай когда $s = m$, что соответствует случаю с неточно заданными всеми элементами матрицы системы, а лишь потом случай $s < m$, т.е. когда матрица системы частично задана с помехами, а частично – без помех. Такая ситуация возникает во многих практических задачах, например, в задаче идентификации параметров дискретных передаточных функций [30]. В последнем случае задача имеет достаточно особенностей, в отличие от задачи, когда $s = m$, чтобы заслуживать отдельного рассмотрения. Кроме того, в таком виде задача является более общей, чем задача с $s = m$. Однако в дальнейшем представляется более логичным вначале рассматривать случай приближённых систем с $s = m$ и лишь затем общий случай с $s \leq m$.

5.2. Вычисление оценок псевдорешений

В этом параграфе будет предполагаться, что имеется k экспериментальных (возмущённых) наблюдений каждой строки расширенной матрицы $B_T = (A_T, -f_T)$. Таким образом, приближённая матрица \tilde{A} имеет размеры $kn \times m$, а вектор \tilde{f} – размерность, равную kn , где k – число экспериментальных наблюдений элементов исходной системы уравнений.

Рассмотрим задачу вычисления состоятельных оценок нормальных псевдорешений \bar{u} приближённых стохастических систем уравнений (в общем случае несовместных, т.е. когда $\mu_A > 0$ при $k \rightarrow \infty$). Следует отметить, что в задачах регрессионного анализа обычно $k = 1$ и $\mu_A = 0$ под состоятельными оценками решений понимаются решения, когда $n \rightarrow \infty$. Однако в задачах математической физики (при решении интегральных уравнений первого рода) обычно имеется несколько реализаций правой части и оператора уравнения, и к тому же все результаты, соответствующие случаю $k \rightarrow \infty$ остаются справедливыми и при $k = 1$ и $n \rightarrow \infty$.

Так как в данной работе рассматриваются стохастически возмущённые системы (\tilde{A}, \tilde{f}) , то состоятельность оценок нормальных псевдорешений будет пониматься как сходимость в каком-либо вероятностном смысле последовательности оценок к \bar{u} при $k \rightarrow \infty$ (или $n \rightarrow \infty$). В

дальнейшем будет рассматриваться сильная состоятельность, т.е. сходимость с вероятностью 1.

Вначале рассмотрим случай, когда $s = m$ и $k = 1$, а также $\mu_A = 0$. В этом случае для вычисления состоятельных оценок решений будет использоваться TLS-метод. В соответствии с TLS-методом, оценки нормальных псевдорешений \bar{u} будем вычислять из решения экстремальной задачи

$$\inf_{u \in \mathbb{R}^m} J(u), \quad (5.5)$$

где

$$J(u) = \frac{\|\tilde{A}u - \tilde{f}\|^2}{\|u\|^2 + 1}.$$

Рассмотрим условия существования и единственности экстремальной задачи (5.5) без ограничений.

Лемма 5.1. *Верно соотношение*

$$\inf_{u \in \mathbb{R}^m} J(u) = \bar{\lambda}_{\min}, \quad (5.6)$$

где $\bar{\lambda}_{\min}$ – минимальное собственное значение матрицы $\tilde{B}^\top \tilde{B}$, т.е. $\bar{\lambda}_{\min} = \lambda_{\min}(\tilde{B}^\top \tilde{B})$.

Доказательство. Пусть v^* ($\|v^*\| = 1$) – собственный вектор матрицы $\tilde{B}^\top \tilde{B}$, соответствующий наименьшему собственному значению $\bar{\lambda}_{\min}$, и y – число, $y \in (0, \infty)$.

Если $v_{m+1}^* \neq 0$, $v^* = (v_1^*, \dots, v_{m+1}^*)^\top \in \mathbb{R}^{m+1}$, то, используя экстремальные свойства отношения Релея [5], получаем

$$\bar{\lambda}_{\min} = \frac{(v^*)^\top \tilde{B}^\top \tilde{B} v^*}{\|v^*\|^2} = J(\hat{u}), \quad (5.7)$$

где $\hat{u} = (v_1^*, \dots, v_m^*)^\top / v_{m+1}^* \in \mathbb{R}^m$.

Так как

$$\inf_{u \in \mathbb{R}^m} J(u) \geq \inf_{v \in \mathbb{R}^{m+1} \setminus \{0\}} \frac{v^\top \tilde{B}^\top \tilde{B} v}{\|v\|^2}, \quad (5.8)$$

то из (5.8) при $v_{m+1}^* \neq 0$ следует справедливость равенства (5.6).

Рассмотрим случай, когда $v_{m+1}^* = 0$. Для этого введём вектор $u^* = (v_1^*, \dots, v_m^*)^\top \in \mathbb{R}^m$ и рассмотрим функционал

$$\begin{aligned} J(yu^*) &= \frac{\|y\tilde{A}u^* - \tilde{f}\|^2}{y^2\|u^*\|^2 + 1} = \frac{(u^*)^\top \tilde{A}^\top \tilde{A} u^* y^2 - 2y\tilde{f}^\top \tilde{A} u^* + \|\tilde{f}\|^2}{y^2\|u^*\|^2 + 1} = \\ &= \frac{(u^*)^\top \tilde{A}^\top \tilde{A} u^* - 2y^{-1}\tilde{f}^\top \tilde{A} u^* + y^{-2}\|\tilde{f}\|^2}{\|u^*\|^2 + y^{-2}}. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\lim_{y \rightarrow \infty} J(yu^*) = \frac{(v^*)^\top \tilde{B}^\top \tilde{B} v^*}{\|v^*\|^2} = \tilde{\lambda}_{\min}. \quad (5.9)$$

Тогда из неравенства (5.8) и равенства (5.9) и при $v_{m+1}^* = 0$ также следует справедливость утверждения леммы. \square

Теорема 5.1. *Решение экстремальной задачи (5.5) без ограничений имеет единственное решение тогда и только тогда, когда $\bar{\lambda}_{\min} < \lambda_{\min}$; это решение равно*

$$u_0 = (\tilde{A}^\top \tilde{A} - \bar{\lambda}_{\min} E_m)^{-1} \tilde{A}^\top \tilde{f} \quad (5.10)$$

и $J(u_0) = \bar{\lambda}_{\min}$.

Доказательство. В [88] показано, что \bar{u} , удовлетворяющее (5.5), – решение уравнения Эйлера

$$\tilde{A}^\top \tilde{A} u - \gamma_{\min} u = \tilde{A}^\top \tilde{f}, \quad \gamma_{\min} = \inf_{u \in \mathbb{R}^m} J(u) \geq 0.$$

По лемме 5.1 получаем, что $\gamma_{\min} = \bar{\lambda}_{\min}$. Так как λ_{\min} есть минимальное собственное число от сужения матрицы $\tilde{B}^\top \tilde{B}$, минимальное собственное число которой есть $\bar{\lambda}_{\min}$, на подпространство $\{v_{m+1} = 0\}$, то $\bar{\lambda}_{\min} \leq \lambda_{\min}$. Тогда, если $\bar{\lambda}_{\min} < \lambda_{\min}$, то

$$\det(\tilde{A}^\top \tilde{A} - \bar{\lambda}_{\min} E_m) > 0$$

и тем самым существует единственное решение (5.5), определяемое выражением (5.10). Если $\bar{\lambda}_{\min} = \lambda_{\min}$, то

$$\det(\tilde{A}^\top \tilde{A} - \bar{\lambda}_{\min} E_m) = 0$$

и решение (5.5) не является единственным. \square

Следствие 5.1. *Если $\bar{\lambda}_{\min} < \lambda_{\min}$, то $\|u_\gamma\| > \|u_0\|$ для всех $\gamma \in (\lambda_{\min}, -\bar{\lambda}_{\min})$, где*

$$u_\gamma = (\tilde{A}^\top \tilde{A} - \gamma E_m)^{-1} \tilde{A}^\top \tilde{f}.$$

Для вычисления состоятельных оценок решений в общем случае, т.е. когда $s \leq m$ и $\mu_A \geq 0$, будет использоваться модификация TLS-метода (5.5), которую в дальнейшем будем называть MTLs-методом.

В соответствии с MTLs-методом, оценки нормальных псевдорешений \bar{u} будут вычисляться из решения экстремальной задачи

$$\inf_{u \in \mathbb{R}^m} \bar{J}(u), \quad (5.11)$$

где

$$\bar{J}(u) = \frac{k^{-1} \|\tilde{A}_\mu u - \tilde{f}_0\|^2}{u^\top D u + 1},$$

$$D = \text{diag} \left\{ \underbrace{0, \dots, 0}_{m-s}, \underbrace{1, \dots, 1}_s \right\}, \quad \tilde{f}_0 = (\tilde{f}^\top, \underbrace{0, \dots, 0}_s)^\top,$$

$$\tilde{A}_\mu = \begin{pmatrix} \tilde{A} \\ \dots \dots \dots \\ O_{s \times (m-s)} \vdots k^{1/2} \mu_A E_s \end{pmatrix},$$

$O_{s \times (m-s)}$ – нулевая матрица размера $[s \times (m-s)]$.

Основное существенное отличие экстремальной задачи (5.11), соответствующей MTLs, от экстремальной задачи (5.5), соответствующей TLS, состоит в том, что функция $u^\top D u$ не является строго положительно определённой и, как следствие, решение задачи (5.11) не может быть сведено к решению экстремальной задачи соответствующего отношения Релея.

Сформулируем условия существования и единственности решения экстремальной задачи (5.11) без ограничений.

Лемма 5.2. *Верно соотношение*

$$\lambda_* = \inf_{u \in \mathbb{R}^m} \bar{J}(u) = \begin{cases} k^{-1} \lambda_{\max}^{-1} [(B_\mu^\top B_\mu)^{-1} D_*], & \text{если } \lambda_{\min}(B_\mu^\top B_\mu) > 0, \\ 0, & \text{если } \lambda_{\min}(B_\mu^\top B_\mu) = 0, \end{cases}$$

где $B_\mu = (\tilde{A}_\mu, -\tilde{f}_0)$ – расширенная матрица,

$$D_* = \text{diag} \left(\underbrace{0, \dots, 0}_{m-s}, \underbrace{1, \dots, 1}_{s+1} \right).$$

Доказательство. Введём вспомогательную функцию

$$\nu(v) = \frac{(B_\mu v, B_\mu v)}{(D_* v, v)}, \quad v \in \mathbb{R}^{m+1}.$$

Очевидно, что доказательство равенства $\lambda_* = \bar{\lambda}$, где

$$\bar{\lambda} = k^{-1} \inf_{v \in \mathbb{R}^{m+1} \setminus \{0\}} \nu(v),$$

совершенно аналогично доказательству леммы 5.1.

Таким образом, для доказательства настоящей леммы необходимо исследовать $\bar{\lambda}$.

Если $\lambda_{\min}(B_\mu^\top B_\mu)$, то пучок квадратичных форм

$$(B_\mu^\top B_\mu v, v) - \lambda(D_* v, v)$$

является регулярным [8] и, следовательно, $\bar{\lambda}$ - наименьший корень уравнения:

$$\det(k^{-1} B_\mu^\top B_\mu - \lambda D_*) = 0. \quad (5.12)$$

Очевидно, что в этом случае

$$\lambda_* = \bar{\lambda} = k^{-1} \lambda_{\max}^{-1}[(B_\mu^\top B_\mu)^{-1} D_*].$$

Если $\lambda_{\min}(B_\mu^\top B_\mu) = 0$, то возможны два случая. В первом случае пучок матриц

$$B_\mu^\top B_\mu - \lambda D_*$$

является регулярным [8], т.е.

$$\det(B_\mu^\top B_\mu - \lambda D_*) \neq 0.$$

Тогда минимальный корень уравнения (5.12) равен нулю, а для соответствующего ему характеристического вектора v_* выполняется свойство $(D_* v_*, v_*) > 0$. А поскольку

$$(B_\mu v_*, B_\mu v_*) = 0,$$

то, следовательно, $\bar{\lambda} = 0$.

В случае, когда пучок матриц $B_\mu^\top B_\mu - \lambda D_*$ является сингулярным [8], т.е.

$$\det(B_\mu^\top B_\mu - \lambda D_*) \equiv 0,$$

минимальный корень уравнения (5.12) также равен нулю, но

$$(D_* v_*, v_*) = 0$$

и $\nu(v_*)$ представляет собой неопределённость.

Разобьём матрицу $B_\mu^\top B_\mu$ на блоки:

$$B_\mu^\top B_\mu = \begin{pmatrix} Z_1 \vdots Z_3 \\ \dots\dots\dots \\ Z_3^\top \vdots Z_2 \end{pmatrix},$$

где Z_1 есть $(s \times s)$ – матрица, а Z_2 есть $[(m - s + 1) \times (m - s + 1)]$ – матрица.

Из сингулярности пучка матриц $B_\mu^\top B_\mu - \lambda D_*$ следует, что

$$\det Z_2 = 0.$$

Введём вектор $v' = (0, \dots, 0, p^\top) \in \mathbb{R}^{m+1}$, где $p \in \mathbb{R}^s \setminus \{0\}$ – собственный вектор матрицы Z_2 , соответствующий нулевому собственному значению, т.е. $Z_2 p = 0$. Тогда

$$\nu(v') = \frac{(Z_2 p, p)}{(p, p)}.$$

Следовательно, и в этом случае $\lambda_* = \bar{\lambda}$. □

Следствие 5.2. Если $s = m$, то $D_* = E_{m+1}$ и

$$\lambda_* = \begin{cases} 0, & \text{если } \det(B_\mu^\top B_\mu) = 0, \\ k^{-1} \lambda_{\max}^{-1} [(B_\mu^\top B_\mu)^{-1}], & \text{если } \det(B_\mu^\top B_\mu) \neq 0, \end{cases}$$

или

$$\lambda_* = k^{-1} \lambda_{\min}(B_\mu^\top B_\mu).$$

Решение экстремальной задачи (5.11) может быть неединственным, и поэтому необходимо рассмотреть вопрос о единственности решения.

Лемма 5.3. Решение экстремальной задачи (5.11) имеет единственное решение тогда и только тогда, когда $\lambda_* < \tilde{\lambda}_*$, и это решение равно

$$u_0 = (\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - k \lambda_* D)^{-1} \tilde{A}_\mu^\top \tilde{f}_0$$

и $J(u_0) = \lambda_*$, где

$$\tilde{\lambda}_* = \begin{cases} k^{-1} \lambda_{\max}^{-1} [(\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu)^{-1} D], & \text{если } \lambda_{\min}(\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu) > 0, \\ 0, & \text{если } \lambda_{\min}(\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu) = 0. \end{cases}$$

Доказательство. Из определения функционала $\bar{J}(u)$ непосредственно получаем, что

$$\text{grad } \bar{J}(u) = \frac{2k^{-1}}{u^\top Du + 1} (\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - \tilde{A}_\mu^\top \tilde{f}_0 - k\bar{J}(u)Du).$$

Отсюда следует, что u , минимизирующее $\bar{J}(u)$, является решением уравнения Эйлера:

$$\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - \gamma_{\min} Du = \tilde{A}_\mu^\top \tilde{f}_0, \quad \gamma_{\min} = k \inf_{u \in \mathbb{R}^m} \bar{J}(u) \geq 0. \quad (5.13)$$

Из леммы 5.3 следует, что $\gamma_{\min} = k\lambda_*$. Из доказательства леммы 5.3 также следует, что

$$\tilde{\lambda}_* = \inf_{x \in \mathbb{R}^m \setminus \{0\}} \frac{k^{-1}(\tilde{A}_\mu x, \tilde{A}_\mu x)}{(x, Dx)}, \quad \lambda_* = \inf_{x \in \mathbb{R}^{m+1} \setminus \{0\}} \frac{k^{-1}(\tilde{B}_\mu x, \tilde{B}_\mu x)}{(x, D_* x)}.$$

Рассматривая вариацию по множеству $(m+1)$ -мерных векторов с x с $(m+1)$ -й компонентой, равной нулю, получаем, что $\lambda_* \leq \tilde{\lambda}_*$. Тогда если $\lambda_* < \tilde{\lambda}_*$, то

$$\det(\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - k\lambda_* D) > 0$$

и, следовательно, существует единственное решение уравнения Эйлера (5.13) и задачи (5.11). Если $\lambda_* = \tilde{\lambda}_*$, то

$$\det(\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - k\lambda_* D) = 0$$

и, следовательно, решение задачи (5.11) не является единственным. \square

Теперь можно сформулировать теорему, позволяющую вычислять состоятельные оценки нормальных псевдорешений \bar{u} системы (5.3).

Теорема 5.2. Пусть последовательность векторов возмущений $(\Delta b_i)_{i=1}^\infty$ расширенной матрицы (\tilde{A}, \tilde{f}) удовлетворяет условиям 1, 2. Тогда если $\sigma_j^2 = \sigma_{\alpha_j}^2 = \sigma > 0$, $j = m - s + 1, \dots, m$ и априори известна величина μ_A , то оценки, определяемые выражением

$$\hat{u}_k = (\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - k\lambda_* D)^+ \tilde{A}_\mu^\top \tilde{f}_0, \quad (5.14)$$

будут сильно состоятельными оценками нормальных псевдорешений \bar{u} , т.е. $\hat{u}_k \rightarrow \bar{u}$ п.н. при $k \rightarrow \infty$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Из леммы 5.3 видно, что λ_* является минимальным корнем уравнения

$$\det(k^{-1}B_\mu^\top B_\mu - \lambda D_*) = 0.$$

Из условий 1, 2 последовательности $(\Delta b_i)_{i=1}^\infty$ на основании усиленного закона больших чисел для некоррелированных случайных величин [109, с. 146] следует, что

$$\lim_{k \rightarrow \infty} [k^{-1}B_\mu^\top B_\mu] = \bar{B}_\mu^\top \bar{B}_\mu + n\sigma^2 D_* \equiv \Omega_\mu \quad \text{п.н.},$$

где

$$\bar{B}_\mu = (\bar{A}_\mu, -\bar{f}_0), \quad \bar{f}_0 = (f_\top^\top, \underbrace{0, \dots, 0}_s)^\top,$$

$$\bar{A}_\mu = \begin{pmatrix} A_\top \\ \dots\dots\dots \\ O_{s \times (m-s)} \vdots \mu_A E_s \end{pmatrix}.$$

Так как

$$\bar{A}_\mu^\top \bar{A}_\mu = A_\top^\top A_\top + \mu_A^2 D \quad \text{и} \quad \bar{A}_\mu^\top \bar{f}_0 = A_\top^\top f_\top,$$

то, следовательно,

$$\bar{B}_\mu^\top \bar{B}_\mu = B_\top^\top B_\top + \mu_A^2 D_*$$

и наименьший корень характеристического уравнения

$$\det(\Omega_\mu - \lambda D_*) = 0$$

имеет вид

$$\lambda_{\min} = \mu_A^2 + n\sigma^2.$$

Учитывая, что собственные значения являются непрерывной функцией элементов матрицы, получаем

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_* = \lambda_{\min} \quad \text{п.н.}$$

Из этого факта следует, что

$$\lim_{k \rightarrow \infty} [k^{-1}f_k(u)] = \bar{f}(u) = 0 \quad \text{п.н.},$$

где

$$\begin{aligned} f_k(u) &= (\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - k\lambda_* D)u - \tilde{A}_\mu^\top \tilde{f}_0, \\ \bar{f}(u) &= (\Omega_\mu - \lambda_{\min} D)u - A_\mu^\top f_\top. \end{aligned}$$

Таким образом, для каждого заданного ε

$$\lim_{k' \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left\{ \sup_{k \geq k'} \|f_k(\hat{u}_k) - f_k(\bar{u})\| < \varepsilon \right\} = 1.$$

Тогда из единственности решений с минимальной нормой уравнений $f_k(u) = 0$ и $\bar{f}(u) = 0$ следует, что $\hat{u}_k \rightarrow \bar{u}$ п.н. при $k \rightarrow \infty$, где \hat{u}_k и \bar{u} – решения с минимальной нормой соответственно уравнений $f_k(u) = 0$ и $\bar{f}(u) = 0$. \square

Следствие 5.3. Если $\lambda_* < \tilde{\lambda}_*$, то оценки, определяемые из решения экстремальной задачи (5.11), равны

$$\hat{u}_k = \left(\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - k\lambda_* D \right)^{-1} \tilde{A}_\mu^\top \tilde{f}_0 \quad (5.15)$$

и являются сильно состоятельными оценками нормальных псевдорешений \bar{u} .

Доказательство этого результата непосредственно следует из теоремы 5.1 и леммы 5.3.

Несмотря на свойство состоятельности, которое характеризует асимптотическое поведение оценок \hat{u}_k , определяемых выражением (5.14), влияние параметра $\lambda_* \geq 0$ приводит к сильному ухудшению обусловленности матрицы

$$\Phi_\lambda = \tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu - k\lambda_* E_m,$$

так как её число обусловленности равно

$$\text{cond } \Phi_\lambda = \frac{\lambda_{\max}(\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu) - k\lambda_*}{\lambda_{\min}(\tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu) - k\lambda_*},$$

и, как следствие, неустойчивости с вычислительной точки зрения оценок при конечных (особенно малых) значениях k . Этот факт делает актуальной проблему регуляризации состоятельных оценок, определяемых из решения экстремальной задачи (5.11), при помощи использования некоторой дополнительной априорной информации о решении.

5.3 Регуляризация оценок псевдорешений

В начале этого параграфа будут рассмотрены приближённые СЛАУ с $\mu_A = 0$, $s = m$ и $k = 1$.

Введём дополнительное ограничение $\|u\| \leq K$ в (2.5), означающее регуляризацию плохо обусловленной или вырожденной задачи, и рассмотрим двойственную задачу: при фиксированном значении функционала $J(u)$, равном μ^2 , минимизировать K . Таким образом, регуляризованные оценки решений определяются из решения задачи $K = \inf \|u\|$ на

$$u \in U_\mu = \{u : \|\tilde{A}u - \tilde{f}\|^2 - \mu^2(1 + \|u\|^2) = 0\}.$$

Известно [62], что последняя может быть решена методом неопределённых множителей Лагранжа и это решение определяется из уравнения Эйлера

$$(\gamma E_m + \tilde{A}^\top \tilde{A})u_\gamma = \tilde{A}^\top \tilde{f}, \quad (5.16)$$

где значение γ получается из равенства

$$\|\tilde{A}u_\gamma - \tilde{f}\|^2 - \mu^2\|u_\gamma\|^2 = \mu^2. \quad (5.17)$$

Формулы (2.16) и (2.17) определяют регуляризованные оценки нормальных псевдорешений \bar{u} по неточным данным (\tilde{A}, \tilde{f}) , где априорная информация об \bar{u} задаётся с помощью параметра μ^2 . Эти формулы полностью соответствуют формулам, определяющим решение согласно регуляризованному методу наименьших квадратов Тихонова [69, 70].

Рассмотрим вычислительные аспекты совместного решения уравнений (5.16), (5.17) в предположении, что μ^2 – свободный параметр.

Из формулировки двойственной задачи следует, что зависимость $K = K(\mu)$, устанавливаемая формулами (5.16), (5.17), должна быть взаимно однозначной. Однако оператор

$$Q^{-1}(\gamma) = (\gamma E_m + \tilde{A}^\top \tilde{A})^{-1}$$

не является непрерывным для всех $\gamma \in (-\infty, \infty)$, что приводит к неоднозначности зависимости $K = K(\mu^2)$, а также делает невозможным применение хорошо разработанных вычислительных схем определения параметра регуляризации методом невязки [62]. Таким образом, необходимо получить области изменения параметров γ и μ^2 , для которых зависимость $K = K(\mu^2)$, определяемая формулами (5.16), (5.17), взаимно однозначна и, следовательно, регуляризованное решение, определяемое этими формулами, существует и единственно.

Из лемм 5.1, 5.2 и равенства (5.17) непосредственно следует:

Теорема 5.3. *Если $\mu^2 < \bar{\lambda}_{\min}$, то система уравнений (5.16) (5.17) не имеет решений. Если $\mu^2 = \bar{\lambda}_{\min}$, то система уравнений (5.16), (5.17)*

имеет единственное решение тогда и только тогда, когда $\bar{\lambda}_{\min} < \lambda_{\min}$, и оно совпадает с решением экстремальной задачи (5.5) без ограничений, т.е. однозначно определяется формулой (5.15).

Остаётся рассмотреть наиболее интересный случай, т.е. когда $\gamma \in (-\bar{\lambda}_{\min}, \infty)$.

Для этого представим параметр γ в виде

$$\gamma = -\bar{\lambda}_{\min} + \alpha, \quad \alpha \in (0, \infty). \quad (5.18)$$

Подставляя γ из (5.18) в (5.16), (5.17), получаем

$$\begin{aligned} \tilde{A}^T \tilde{A} u_\alpha - (\bar{\lambda}_{\min} - \alpha) u_\alpha &= \tilde{A}^T \tilde{f}, \quad \alpha > 0, \\ \|\tilde{A}^T \tilde{A} - \tilde{f}\|^2 - \mu^2 \|u_\alpha\|^2 &= \mu^2. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Из уравнения Эйлера (5.19) получаем

$$u_\alpha = [\tilde{A}^T \tilde{A} - (\bar{\lambda}_{\min}) E_m]^{-1} \tilde{A}^T \tilde{f}, \quad \alpha > 0. \quad (5.20)$$

Рассмотрим функцию

$$\varphi(\alpha) = \|\tilde{A} u_\alpha - \tilde{f}\|^2 - \mu^2 (\|u_\alpha\|^2 + 1). \quad (5.21)$$

Теорема 5.4. Если $\bar{\lambda}_{\min} < \mu^2 < \|\tilde{f}\|^2$ и $\|\tilde{A}^T \tilde{f}\| > 0$, то для всех $\alpha \in (0, \infty)$ функция $\varphi(\alpha)$ непрерывная, строго монотонно возрастающая и уравнение $\varphi(\alpha) = 0$ имеет единственное решение на интервале $(0, \infty)$.

Замечание 2. Если $\tilde{A}^T \tilde{f} = 0$, то $\hat{u} = 0$.

Доказательство. Представим $\varphi(\alpha)$ в виде

$$\begin{aligned} \varphi(\alpha) &= [\|\tilde{A} u_\alpha - \tilde{f}\|^2 - (\bar{\lambda}_{\min} - \alpha) \|u_\alpha\|^2] + (\bar{\lambda}_{\min} - \mu^2 - \alpha) \|u_\alpha\|^2 - \\ &- \mu^2 = \|\tilde{f}\|^2 - \mu^2 + u_\alpha^T [\tilde{A}^T \tilde{A} - (\bar{\lambda}_{\min} - \alpha) E_m] u_\alpha - \\ &- 2\tilde{f}^T \tilde{A} u_\alpha + (\bar{\lambda}_{\min} - \mu^2 - \alpha) \|u_\alpha\|^2. \end{aligned}$$

Подставляя u_α из (5.20) в (5.21), получаем

$$\begin{aligned} \varphi(\alpha) &= \|\tilde{f}\|^2 - \mu^2 - \tilde{f}^T \tilde{A} [\tilde{A}^T - \tilde{A} - (\bar{\lambda}_{\min} - \alpha) E_m]^{-1} \tilde{A}^T \tilde{f} + \\ &+ (\bar{\lambda}_{\min} - \mu^2 - \alpha) \tilde{f}^T \tilde{A} [\tilde{A}^T \tilde{A} - (\bar{\lambda}_{\min} - \alpha) E_m]^{-2} \tilde{A}^T \tilde{f}. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Из (5.22) следует, что $\varphi(\alpha)$ непрерывна на интервале $(0, \infty)$. Из (5.20) и (5.22) также следует, что

$$\varphi(\alpha) = \|\tilde{f}\|^2 - \mu^2 - \tilde{f}^T \tilde{A} u_\alpha + (\bar{\lambda}_{\min} - \mu^2 - \alpha) \|u_\alpha\|^2. \quad (5.23)$$

Поскольку

$$u'_\alpha = -[\tilde{A}^2 \tilde{A} - (\bar{\lambda}_{\min} - \alpha)E_m]u_\alpha,$$

производная функции $\varphi(\alpha)$ равна

$$\begin{aligned} \varphi'(\alpha) &= -2(\bar{\lambda}_{\min} - \mu^2 - \alpha)\tilde{f}^\top \tilde{A}[\tilde{A}^\top \tilde{A} - (\bar{\lambda}_{\min} - \alpha)E_m]^{-3} \times \\ &\times \tilde{A}^\top \tilde{f} = 2(\bar{\lambda}_{\min} - \mu^2 - \alpha)u_\alpha^\top u'_\alpha > 0. \end{aligned}$$

Из последнего неравенства и из выражения (5.23) следует, что $\varphi(\alpha)$ на интервале $(0, \infty)$ строго монотонно возрастает и исчерпывает интервал $((1 + \|u_0\|^2)(\bar{\lambda}_{\min}\mu^2), \|\tilde{f}\|^2 - \mu^2)$.

Так как по условию теоремы $\bar{\lambda}_{\min} < \mu^2 < \|\tilde{f}\|^2$, то следовательно, уравнение $\varphi(\alpha) = 0$ имеет единственное решение на интервале $(0, \infty)$. \square

Рассмотрим регуляризацию оценок решений задачи полных наименьших квадратов, т.е. когда $s \leq m$, а также $\mu_A \geq 0$ и $k \geq 1$.

Вместо экстремальной задачи (5.11) в дальнейшем удобнее рассматривать экстремальную задачу

$$\inf_{u \in \mathbb{R}^m} F(u), \quad (5.24)$$

где

$$F(u) = \frac{k^{-1}\|\tilde{W}u - \tilde{g}\|^2}{\|u\|^2 + 1},$$

$$\tilde{W} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_\mu \\ \dots\dots\dots \\ (k\lambda_*)^{1/2}E_{m-s} \vdots O_{s \times (m-s)} \end{pmatrix}, \quad \tilde{g} = (\tilde{f}_0^\top, \underbrace{0, \dots, 0}_{m-s})^\top.$$

Лемма 5.4. *Экстремальная задача (5.11) эквивалентна экстремальной задаче (5.24).*

Доказательство. Так как $\tilde{W}^\top \tilde{W} = \tilde{A}_\mu^\top \tilde{A}_\mu + k\lambda_* \bar{D}$, $\tilde{W}^\top \tilde{g} = \tilde{A}_\mu^\top \tilde{f}_0 = \tilde{A}^\top \tilde{f}$ и $\|\tilde{g}\|^2 = \|\tilde{f}_0\|^2 = \|\tilde{f}\|^2$, где

$$\bar{D} = \text{diag} \{ \underbrace{1, \dots, 1}_{m-s}, \underbrace{0, \dots, 0}_s \},$$

то, следовательно, решения задач

$$\det(B_\mu^\top B_\mu - \lambda D_*) = 0$$

и

$$\det \left[\begin{pmatrix} \tilde{W}^\top \tilde{W} & : & -\tilde{W}^\top \tilde{g} \\ \dots & & \dots \\ -\tilde{g}^\top \tilde{W} & : & \tilde{g}^\top \tilde{g} \end{pmatrix} - \lambda E_{m+1} \right] = 0 \quad (5.25)$$

эквивалентны. Тогда из леммы 5.3 следует справедливость данной леммы. \square

В отличие от задачи (5.11), задача (5.24) точно соответствует TLS и, следовательно, для её регуляризации можно использовать результаты, полученные выше.

Так же, как и для случая регуляризации решений TLS, введём дополнительное ограничение $\|u\| \leq K$ в (5.24), означающее регуляризацию плохо обусловленной или вырожденной задачи, и рассмотрим двойственную задачу: при фиксированном значении функционала $F(u)$, равном μ^2 , минимизировать K . Таким образом, регуляризованные оценки решений определяются из решения задачи

$$K = \inf \|u\|$$

на $u \in U_\mu = \{u : k^{-1} \|\tilde{W}u - \tilde{g}\|^2 - \mu^2(1 + \|u\|^2) = 0\}$.

Последняя задача также может быть решена методом неопределённых множителей Лагранжа и это решение определяется из уравнения Эйлера

$$(k\gamma E_m + \tilde{W}^\top \tilde{W}) u_\gamma = \tilde{W}^\top \tilde{g}, \quad (5.26)$$

где значение γ получается из равенства

$$k^{-1} \left\| \tilde{W}u_\gamma - \tilde{g} \right\|^2 - \mu^2 \|u_\gamma\|^2 = \mu^2. \quad (5.27)$$

Формулы (5.26) и (5.27) определяют регуляризованные TLS-оценки нормальных псевдорешений \tilde{u} по неточным данным (\tilde{A}, \tilde{f}) , где априорная информация об \tilde{u} задаётся с помощью параметра μ^2 .

Рассмотрим вычислительные аспекты совместного решения уравнений (5.26), (5.27) в предположении, что μ^2 – свободный параметр.

В этой задаче оператор

$$\tilde{Q}^{-1}(\gamma) = (k\gamma E_m + \tilde{W}^\top \tilde{W})^{-1}$$

также не является непрерывным для всех $\gamma \in (-\infty, \infty)$, что приводит к неоднозначности зависимости $K = K(\mu^2)$, а также делает невозможным

применение хорошо разработанных вычислительных схем определения параметра регуляризации методом невязки. Таким образом, для этой задачи также необходимо получить области изменения параметров γ и μ^2 , для которых зависимость $K = K(\mu^2)$, определяемая формулами (5.26), (5.27), взаимно однозначна и, следовательно, регуляризованное решение, определяемое этими формулами, существует и единственно.

Из лемм 5.3 и 5.4 следует аналог теоремы 5.2 для задачи, определяемой формулами (5.26), (5.27).

Теорема 5.5. *Если $\mu^2 < \lambda_*$, то система уравнений (5.26), (5.27) не имеет решений. Если $\mu^2 = \lambda_*$, то система уравнений (5.26), (5.27) имеет единственное решение тогда и только тогда, когда $\lambda_* < \tilde{\lambda}_*$, и оно совпадает с решением экстремальных задач (5.11) и (5.24) без ограничений, т.е. однозначно определяется формулой (5.15).*

Для случая, когда $\gamma \in (-\lambda_*, \infty)$, представим, как и ранее, параметр γ в виде

$$\gamma = -\lambda_* + \alpha, \quad \alpha \in (0, \infty).$$

Подставляя это значение в формулы (5.26), (5.27), получаем

$$\tilde{W}^T \tilde{W} u_\alpha - (k\lambda_* - \alpha) u_\alpha = \tilde{W}^T \tilde{g}, \quad \alpha > 0$$

или

$$u_\alpha = \left[\tilde{W}^T \tilde{W} - (k\lambda_* - \alpha) E_m \right]^{-1}, \quad \alpha > 0,$$

$$k^{-1} \|\tilde{W} u_\alpha - \tilde{g}\|^2 - \mu^2 \|u_\alpha\|^2 = \mu^2.$$

Рассмотрим функцию

$$\varphi(\alpha) = k^{-1} \|\tilde{W} u_\alpha - \tilde{g}\|^2 - \mu^2 (1 + \|u_\alpha\|^2).$$

Теорема 5.6. *Если $\lambda_* < \mu^2 < k^{-1} \|\tilde{f}\|^2$ и $\|\tilde{A}^T \tilde{f}\| > 0$, то для всех $\alpha \in (0, \infty)$ функция $\varphi(\alpha)$ непрерывная, строго монотонно возрастающая и уравнение $\varphi(\alpha) = 0$ имеет единственное решение на интервале $(0, \infty)$.*

Замечание 3. Если $\tilde{A}^T \tilde{f} = 0$, то $\hat{u} = 0$.

Доказательство этой теоремы совершенно аналогично доказательству теоремы 5.3, так как минимальный корень уравнения (5.25) равен $k\lambda_*$ и $\|\tilde{W}^T \tilde{g}\| = \|\tilde{A}^T \tilde{f}\|$.

В заключение этого параграфа следует отдельно рассмотреть случай, когда $s = 0$ и, следовательно, $\tilde{A} = A_T$. В этом случае критерий

(5.11), соответствующий TLS, превращается в обычный критерий наименьших квадратов, т.е.

$$\inf_{u \in \mathbb{R}^m} S(u),$$

где

$$S(u) = \|\tilde{A}u - \tilde{f}\|^2.$$

Тогда можно считать, что $k = 1$ и $\mu_A = 0$ и, следовательно, уравнения (5.26), (5.27) принимают вид

$$\tilde{A}_\top^\top A_\top u_\gamma + \gamma u_\gamma = A_\top^\top \tilde{f}, \quad (5.28)$$

$$\|A_\top u_\gamma - \tilde{f}\|^2 = \mu^2. \quad (5.29)$$

Условия существования и единственности решения системы (5.28), (5.29) хорошо известны [62, 63]: $\varrho_{\min}^2 \leq \mu^2 < \|\tilde{f}\|^2$, где

$$\varrho_{\min}^2 = \inf_{u \in \mathbb{R}^m} \|A_\top u - \tilde{f}\|^2.$$

Библиографический список

- [1] *Алберт А.* Регрессия, псевдоинверсия и рекуррентное оценивание: Пер. с англ. – М.: Наука, 1977. – 224 с.
- [2] *Арсенин В. Я., Крянев А. В., Цупко-Ситников М. В.* Применение робастных методов при решении некорректных задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1989. – Т. 29. – № 5. – С. 653–661.
- [3] *Арсенин В. Я., Крянев А. В.* Применение статистических методов решения некорректных задач для обработки результатов физических экспериментов // Автоматизация научн. иссл. в эксперим. физ. М.: Атомиздат, 1987. С. 3–18.
- [4] *Бакушинский А.Б., Гончарский А.В.* Некорректные задачи. Численные методы и приложения. – М.: МГУ, 1989.
- [5] *Беллман Р.* Введение в теорию матриц: Пер с англ. – М.: Наука, 1969. – 368 с.
- [6] *Винокуров В. А., Репников Н. Ф.* Решение систем алгебраических уравнений со случайной ошибкой в матрице системы // Докл. АН СССР. – 1989. – Т. 305. – № 2. – С. 271–273.
- [7] *Вучков И., Бояджиева Л., Солаков Е.* Прикладной линейный регрессионный анализ. – М.: Финансы и статистика, 1987. – 239 с.
- [8] *Гантмахер Ф. Р.* Теория матриц. – М.: Наука, 1966. – 576 с.
- [9] *Гилязов С.Ф., Морозов В.А.* О регуляризации некорректно поставленных задач с нормально разрешимыми операторами // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1997. – Т. 37. – № 2. – С. 139–144.
- [10] *Голуб Дж., Ван Лоун Ч.* Матричные вычисления: Пер. с англ. – М.: Мир, 1999. – 548 с.

- [11] *Гордонова В. И., Морозов В. А.* Численные алгоритмы выбора параметра в методе регуляризации//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1973.–Т. 13.–№ 3.–С. 539–545.
- [12] *Грешинлов А.А.* Анализ и синтез стохастических систем. Параметрические модели и конфлюентный анализ. – М.: Радио и связь, 1990. – 320 с.
- [13] *Гулинский О. В.* О численном решении некоторых некорректных задач теории управления//Автоматика и телемеханика.–1976.–№ 8.– С. 66–80.
- [14] *Демиденко Е. З.* Линейная и нелинейная регрессии. – М.: Финансы и статистика, 1981. – 302 с.
- [15] *Деммель Дж.* Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения: Пер. с англ. – М.: Мир, 2001. – 430 с.
- [16] *Дженкинс Г., Ваттс Д.* Спектральный анализ и его приложения. Выпуск 2: Пер. с англ. – М.: Мир, 1972. – 288 с.
- [17] *Дуб Дж.* Вероятностные процессы: Пер с англ. – М.: Изд-во иностр. лит., 1953. – 1053 с.
- [18] *Жданов А. И.* Решение некорректных стохастических линейных алгебраических уравнений регуляризованным методом максимального правдоподобия// Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1988.–Т. 28.–№ 9.– С. 1420–1425.
- [19] *Жданов А. И.* Вычисление решений некорректных стохастических, алгебраических уравнений регуляризованным методом наименьших квадратов//Докл. АН СССР.–1989.–Т. 306.–№ 2.–С. 324–327.
- [20] *Жданов А. И.* О приближённых стохастических системах линейных алгебраических уравнений//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1989.– Т. 29.–№ 12.–С. 1776–1787.
- [21] *Жданов А. И.* Оптимальная регуляризация решений приближённых стохастических систем линейных алгебраических уравнений//Ж. вычисл. матем. и матем.–физ.–1990.–Т. 30.–№ 10.– С. 1588–1593.

- [22] *Жданов А. И.* Рекуррентное оценивание минимальных собственных значений информационных матриц//Автоматика и телемеханика.–1987.–№ 4.–С. 26–34.
- [23] *Жданов А. И.* Вычисление регуляризованных оценок наименьших квадратов коэффициентов авторегрессии по неточным данным//Автоматика и телемеханика.–1990.–№ 3.–С. 110–117.
- [24] *Жданов А. И., Кацуба О. А.* Особенности применения метода наименьших квадратов для оценивания параметров линейных разностных операторов в задачах идентификации объектов управления //Автоматика и телемеханика.–1979.–№ 8.–С. 86–96.
- [25] *Жданов А. И., Кацуба О. А.* О состоятельных оценках решений некорректных стохастических алгебраических уравнений при идентификации параметров линейных разностных операторов//Изв. АН СССР. Техн. кибернетика.–1981.–№ 5.–С. 165–172.
- [26] *Жданов А. И., Кацуба О. А.* Идентификация по методу наименьших квадратов параметров уравнений авторегрессии при аддитивных ошибках измерений//Автоматика и телемеханика.–1982.–№ 2.–С. 29–38.
- [27] *Жданов А. И., Кацуба О. А.* О состоятельности оценок наименьших квадратов параметров разностных уравнений при автокоррелированных помехах//Кибернетика.–1983.–№ 5.–С. 102–107.
- [28] *Жданов А. И., Кацуба О. А.* Рекуррентное оценивание параметров стохастических линейных динамических систем с ошибками по выходу и входу//Изв. АН СССР. Техн. кибернетика.–1986.–№ 3.–С. 191–194.
- [29] *Жданов А. И.* О вычислении псевдорешений некорректных стохастических линейных алгебраических уравнений//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1991.–Т. 31.–№ 10.–С. 1572–1575.
- [30] *Жданов А. И., Шамаров П.А.* Прямой проекционный метод в задаче полных наименьших квадратов//Автоматика и телемеханика.–2000.–№ 4.–С. 77–87.
- [31] *Жданов А. И.* Прямой последовательный метод решения систем линейных алгебраических уравнений//Докл. РАН.–1997.–Т. 356.–№ 4.–С. 442–444.

- [32] *Жданов А. И.* Регуляризация неустойчивых конечномерных линейных задач на основе расширенных систем//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–2005.–Т. 45.–№ 11.–С. 1918–1926.
- [33] *Жуковский Е. Л.* Статистическая регуляризация систем алгебраических уравнений//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1972.–Т. 12.–№ 1.–С. 185–191.
- [34] *Жуковский Е. Л.* Метод наименьших квадратов для вырожденных и плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1977.–Т. 17.–№ 4.–С. 814–827.
- [35] *Жуковский Е. Л.* Об обобщённом решении систем линейных алгебраических уравнений//Докл. АН СССР.–1977.–Т. 232.–№ 2.–С. 269–272.
- [36] *Жуковский Е. Л., Мелешко В. И.* О помехоустойчивых решениях в линейной условной алгебре//Докл. АН СССР.–1978.–Т. 241.–№ 5.–С. 1009–1012.
- [37] *Жуковский Е. Л.* Неэнтропийный принцип и регуляризация линейных систем//Докл. АН СССР. 1979.–Т. 246.–№ 3.–С. 1041–1045.
- [38] *Жуковский Е. Л., Плискин С. Ю.* Принцип неопределенности и регуляризация линейных систем алгебраических уравнений//Докл. АН СССР.–1982.–Т. 262.–№ 6.–С. 1301–1304.
- [39] *Ермаков С. М., Жиглявский А. А.* Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
- [40] *Ермаков С. М., Понкратьев Ю. Д.* Смещенные оценки и метод регуляризации//Вестник ленингр. ун-та. Сер. мат., мех.–1976.–№ 7.–С. 27–30.
- [41] *Иванов В. К.* Некорректные задачи в топологических пространствах//Сиб. мат. ж.–1969.–Т. 10.–№ 5.–С. 1065–1074.
- [42] *Иванов В. К.* Об одном типе некорректных линейных уравнений в векторных топологических пространствах//Сиб. мат. ж.–1965.–Т. 6.–№ 4.–С. 33–541.

- [43] *Иванов В. К.* Интегральные уравнения первого рода и приближенное решение задачи потенциала//Докл. АН СССР.–1962.–Т. 142.–№ 5.–С. 997–1000.
- [44] *Исламов И. М.* Асимптотическая регуляризация некорректной задачи идентификации//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1988.–Т. 28.–№ 6.–С. 815–824.
- [45] *Кендалл Дж., Стьюарт А.* Статистические выводы и связи. – М.: Наука, 1973. – 900 с.
- [46] *Крянев А. В.* Статистическая форма регуляризованного метода наименьших квадратов А. Н. Тихонова//Докл. АН СССР.–1986.–Т. 291.–№ 4.–С. 780–785.
- [47] *Левин А. М.* О регуляризации критериальных задач метода наименьших квадратов//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1989.–Т. 29.–№ 9.–С. 1408–1413.
- [48] *Линник Ю. В.* Метод наименьших квадратов и основы математико – статистической теории обработки информации. – М.: Физматгиз, 1958. – 333 с.
- [49] *Лисковец О. А.* Регуляризация уравнений с замкнутым линейным оператором//Дифф. уравнения.–1970.–Т. 1.–№ 7.–С. 205–215.
- [50] *Мелешко В. И.* Решение некорректных стохастических алгебраических уравнений//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1980.–Т. 20.–№ 1.–С. 11–26.
- [51] *Мелешко В. И.* Об оценках решений некорректных стохастических алгебраических уравнений//ДАН СССР.–1980.–Т. 250.–№ 2.–С. 280–284.
- [52] *Меченов А. С.* Метод регуляризации и задачи линейной регрессии//Методы матем. моделир., автоматизации обработки наблюдений и их применения; под. ред. А.Н. Тихонова, А.А. Самарского. – М.: Изд-во МГУ, 1986.–С. 88–92.
- [53] *Молчанов И. Н.* О некоторых проблемах математических моделей научно-технических задач//Кибернетика.–1982.–№ 5.–С. 33–40.

- [54] *Морозов В. А.* Регулярные методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1987. – 240 с.
- [55] *Морозов В. А.* Методы регуляризации неустойчивых задач. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 216 с.
- [56] *Морозов В.А.* Алгоритмические основы методов решения некорректных задач // Вычисл. методы и программир.–2003.–Т. 45.–С. 130–141.
- [57] *Полужетов А. В.* Метод последовательных приближений выбора параметра регуляризации при численном решении некорректных задач//Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1989.–Т. 29.–№ 11.–С. 1734–1737.
- [58] *Поляк Б. Т., Цыпкин Я. З.* Стабильное оценивание в условиях неполной информации// Вопр. кибернетики. Адаптивные системы управления; под ред. Я. З. Цыпкина. – М.: ВИНТИ, 1977. – С. 6–15.
- [59] *Райс Дж.* Матричные вычисления и математическое обеспечение. – М.: Мир, 1984. – 264 с.
- [60] *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы математической физики. – М.: Научный мир, 2000. – 316 с.
- [61] *Смоляк С. А., Титаренко Б. Е.* Устойчивые методы оценивания. – М.: Статистика, 1980. – 208 с.
- [62] *Тихонов А. Е., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979. – 228 с.
- [63] *Тихонов А. Е., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г.* Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. – М.: Наука, 1983. – 200 с.
- [64] *Тихонов А. Н.* Об устойчивости обратных задач//Докл. АН СССР.–1943.–Т. 39.–№ 5.–С. 195–198.
- [65] *Тихонов А. Н.* О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации//Докл. АН СССР.–1963.–Т. 151.–№ 3.–С. 501–504.

- [66] *Тихонов А. Н.* О регуляризации некорректно поставленных задач // Докл. АН СССР.–1963.–Т. 153.–№ 1.–С. 49–52.
- [67] *Тихонов А. Н.* О некорректных задачах линейной алгебры и устойчивых методах их решения // Докл. АН СССР.–1965.–Т. 163.–№ 3.–С. 591–594.
- [68] *Тихонов А. Н.* Об устойчивости алгоритмов для решения вырожденных систем линейных алгебраических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1965.–Т. 5.–№ 4.–С. 718–722.
- [69] *Тихонов А. Н.* О нормальных решениях приближённых систем линейных алгебраических уравнений // Докл. АН СССР.–1980.–Т. 254.–№ 3.–С. 549–554.
- [70] *Тихонов А. Н.* О приближённых системах линейных алгебраических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1980.–Т. 20.–№ 6.–С. 1373–1383.
- [71] *Тихонов А. Н.* Об одном принципе взаимности // Докл. АН СССР.–1980.–Т. 253.–№ 2.–С. 305–308.
- [72] *Турчин В. Ф.* Решение уравнения Фредгольма первого рода в статистическом ансамбле гладких функций // Ж. вычисл. матем. и матем. физ.–1967.–Т. 7.–№ 6.–С. 1270–1285.
- [73] *Успенский А. Б.* Обратные задачи математической физики // Анализ и планирование эксперимента. – Новосибирск: Наука, 1981. С. 199–249.
- [74] *Федотов А. М.* Линейные некорректные задачи со случайными ошибками в данных. – Новосибирск: Наука, 1982. – 190 с.
- [75] *Хубер П.* Робастность в статистике; пер. с англ. – М.: Мир, 1984. – 295 с.
- [76] *Цыпкин Я Э.* Стабилизация и регуляризация оценок оптимальных решений при наличии неопределённости // Докл. АН СССР.–1977.–Т. 236.–№ 2.–С. 304–307.
- [77] *Цыпкин Я Э.* Основы информационной теории идентификации. – М.: Наука, 1984. – 320 с.

- [78] *Цыпкин Я.З., Поляк Б.Т.* Огрубленный метод максимального правдоподобия//Динамика систем.–1977.–Вып. 12.–С. 22–46.
- [79] *Шуряев А. Н.* Вероятность. – М.: Наука, 1980. – 576 с.
- [80] *Björk Å.* Numerical Stability of Methods for Solving Augmented Systems // Contemporary Mathematics. 1997. V. 204. P. 51–60.
- [81] *Hansen P. Ch.* Regularization, GSVD and Truncated GSVD // BIT. 1989. V. 29. No. 3. P. 491–504.
- [82] *Hoerl A., Kennard R.* Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems//Technometrics. 1970. V. 12. № 1. P. 55–67.
- [83] *Huber P. J.* Robust estimation of a location parameters//Ann. Math. Statist. 1964. V. 35. No. 1. P. 73–101.
- [84] *Trefethen L.N., Bau D.* Numerical Linear Algebra. – SIAM, Philadelphia, 1997. – 373 p.
- [85] *Tukey J. W.* The future of data analysis//Ann. Math. Statist. 1962. V. 33. № 1. P. 1–67.
- [86] *Zhdanov A.I., Katsyuba O. A.* Strong consistency of estimates made by the method of orthogonal projections//Int. J. Syst. Sci. 1990. V. 21, No. 8. P. 1463–1471.

Учебное издание

Жданов Александр Иванович

**ВВЕДЕНИЕ В МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕКОРРЕКТНЫХ
ЗАДАЧ. Часть 2**

Учебное пособие

Редакторская обработка Т.К. Кретинина

Компьютерная верстка А.И. Жданов

Доверстка

Подписано в печать 21.08.07 г.

Самарский государственный
аэрокосмический университет.
443086, Самара, Московское шоссе, 34