

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ СИСТЕМ
УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ (ТУСУР)

Ю.Е. Воскобойников
А.А. Мицель

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

Часть 1. Лекционный курс

Учебное пособие

ТОМСК 2016

УДК 519.2
ББК 22.172
В 650

Воскобойников Ю. Е., Мицель А.А.

Современные проблемы прикладной математики. Часть 1. Лекционный курс: учебное пособие/ Ю. Е. Воскобойников, А.А. Мицель/ Томский гос. ун-т систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР). – Томск, 2016. – 136 с.

В учебном пособии в первой части приводится системное изложение одного из разделов прикладной математики, связанного с устойчивыми методами и алгоритмами решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при параметрической идентификации моделей. Основное внимание уделяется построению решений с минимальной ошибкой или с требуемыми точностными характеристиками, а также учету имеющейся априорной информации об искомом решении. Во второй части приводится описание лабораторных работ по созданию алгоритмов построения нормального псевдорешения и регуляризованных решений.

Учебное пособие предназначено для магистрантов направления «Прикладная математика и информатика». Результаты будут полезны также широкому кругу студентов, магистрантов, аспирантов, исследователей, занимающихся решением задач параметрической идентификации и обработки экспериментальных данных.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	6
-----------------------	---

ГЛАВА 1. НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННЫЕ ЗАДАЧИ И ЗАДАЧИ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ	8
§ 1.1. Корректно и некорректно поставленные задачи ...	8
1.1.1. Прямые и обратные задачи.....	8
1.1.2. Некорректно поставленные задачи.....	9
1.1.3. Корректность по Тихонову и множество корректности.....	12
§ 1.2. Параметрические модели динамических систем ...	13
1.2.1. Множественные регрессионные модели.....	13
1.2.2. Регрессионная модель временного ряда.....	15
1.2.3. Модели динамических систем в пространстве состояний.....	17
Вопросы для самопроверки.....	18

ГЛАВА 2. УСТОЙЧИВЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ АЛГОРИТМЫ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ	20
§ 2.1. Вырожденные, несовместные, плохо обусловленные СЛАУ и их сингулярный анализ	20
2.1.1. Вырожденные СЛАУ и нормальное решение.....	20
2.1.2. Несовместные СЛАУ и псевдорешение.....	21
2.1.3. Плохо обусловленные СЛАУ и число обусловленности.....	23
2.1.4. Сингулярное разложение матрицы.....	25
2.1.5. SVD-алгоритм построения нормального псевдорешения.....	28
2.1.6. Построение нормального псевдорешения в Mathcad.....	32
§ 2.2. Оптимальные статистические регуляризирующие алгоритмы решения СЛАУ	37
2.2.1. Байесовский регуляризирующий алгоритм.....	37
2.2.2. Минимаксный регуляризирующие алгоритм.....	42

2.2.3. Оптимальный регуляризирующий SVD-алгоритм.....	44
§ 2.3. Статистические регулярирующие алгоритмы решения СЛАУ при неполной априорной информации	52
2.3.1. Неполная информация и сглаживающий функционал.....	52
2.3.2. Гладкость решения и стабилизирующий функционал.....	56
2.3.3. Регуляризирующий SVD-алгоритм.....	61
2.3.4. Систематическая и случайная ошибки решения φ_α	64
§ 2.4. Алгоритмы выбора параметра регуляризации	67
2.4.1. Выбор параметра регуляризации на основе критерия оптимальности.....	68
2.4.2. Алгоритм выбора параметра по критерию оптимальности	70
2.4.3. Алгоритм выбора параметра по статистическому варианту принципа невязки.....	75
2.4.4. Выбор параметра методом перекрестной значимости.....	78
2.4.5. Сравнение различных алгоритмов выбора параметра регуляризации.....	81
§ 2.5. Точностные характеристики и синтез регуляризирующих алгоритмов решения СЛАУ	87
2.5.1. Вычисление числовых характеристик ошибок регуляризованного решения....	87
2.5.2. Построение доверительных интервалов для решения $\bar{\varphi}^+$	91
2.5.3. Точностные характеристики регуляризирующих алгоритмов.....	92
§ 2.6. Синтез регуляризирующих алгоритмов по заданным точностным характеристикам	96
§ 2.7. Построение регуляризованных решений СЛАУ в Mathcad	98
Вопросы для самопроверки.....	103

ГЛАВА 3. ЛОКАЛЬНЫЙ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЙ АЛГОРИТМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ	105
§ 3.1. Локальный регуляризирующий алгоритм с векторным параметром регуляризации	105
§ 3.2. Построение локального регуляризирующего алгоритма	107
§ 3.3. Выбор параметра локального регуляризирующего алгоритма	112
§ 3.4. Результаты вычислительного эксперимента.....	113
Вопросы для самопроверки.....	115
ГЛАВА 4. ДЕСКРИПТИВНЫЕ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ	116
§ 4.1. Глобальный дескриптивный регуляризирующий алгоритм	116
§ 4.2. Локальный дескриптивный регуляризирующий алгоритм	121
§ 4.3. Исследования дескриптивных регуляризирующих алгоритмов	126
Вопросы для самопроверки.....	128
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	129
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	130

ВВЕДЕНИЕ

Многие задачи идентификации, дающие необходимую информацию при решении задач физики, экономики, проектирования и расчетов конструкций и сооружений и др. , сводятся к решению систем линейных алгебраических уравнений и с точки зрения причинно-следственной связи являются обратными задачами. Эта особенность делает большинство задач идентификации некорректно поставленными. При этом могут быть нарушены все три условия корректности по Адамару (но чаще всего, условия существования и устойчивости решения).

В последние три десятилетия предложены методы регуляризации решения некорректно поставленных задач. Однако в существенной части работ используются детерминированные методы введения априорной информации как о самом решении, так и о погрешностях исходных данных задачи. Необоснованно малое внимание уделяется выбору оптимальных значений параметров алгоритмов, что позволило бы получать решения с наименьшей ошибкой, а также построению алгоритмов с заданными точностными характеристиками. Отсутствуют эффективные алгоритмы, позволяющие учитывать имеющуюся априорную информацию об искомом решении (например, о диапазоне возможных значений коэффициента идентифицируемой модели). Отсутствие программного обеспечения, разработанного в среде универсального математического пакета (например, Mathcad) создает существенные затруднения у инженеров и экспериментаторов (не являющихся программистами) в использовании регуляризирующих алгоритмов на практике.

В данном учебном пособии рассмотрены регуляризирующие методы и алгоритмы, позволяющие строить устойчивые решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), возникающих в задачах параметрической идентификации и позволяющие достаточно полно использовать имеющуюся априорную информацию об искомом решении. Изложение результатов ведется в ясной, доступной для инженеров форме и, по возможности, с опусканием громоздких математических доказательств и выводов. Большое внимание уделяется содержательной трактов-

ке и графической интерпретации излагаемых методов и алгоритмов.

Вычислительной основой предлагаемых регуляризирующих алгоритмов является *сингулярное разложение* (*singular value decomposition, SVD*) матрицы решаемой СЛАУ. Использование сингулярного разложения (в дальнейшем именуемого *SVD-разложением*) позволяет существенно уменьшить вычислительные затраты на построение регуляризированных решений, выбор параметра регуляризации, а также дает возможность достаточно просто проанализировать особенности (несовместность, вырожденность, плохую обусловленность) решаемой СЛАУ.

Для ряда алгоритмов приводится их программная реализация в виде разработанных в пакете Mathcad подпрограмм-функций с решением конкретных задач. Это позволит читателю либо использовать эти программные разработки для решения собственных задач, либо на основе этих программных модулей создать (с минимальными затратами времени) «свое» программное обеспечение.

Все это позволяет надеяться на востребованность изложенных в работе алгоритмов для решения практических задач параметрической идентификации.

Глава 1

НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННЫЕ ЗАДАЧИ И ЗАДАЧИ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ

В этой главе рассмотрены задачи идентификации математических моделей различных систем. Сформулированы задачи вычислительной математики, к которой приводят задачи идентификации моделей. При рассмотрении задач идентификации большое внимание уделяется влиянию погрешности исходных данных на точность решения соответствующих задач.

§ 1.1. Корректно и некорректно поставленные задачи

В этом параграфе дается определение корректно поставленных математических задач и приводится пример некорректно поставленной задачи.

1.1.1. Прямые и обратные задачи

В математической физике принято деление задач на прямые и обратные в зависимости от их ориентации относительно причинно-следственной связи.

В прямых задачах необходимо по причине определить следствие, в обратных задачах, наоборот, – по следствию нужно восстановить причину.

Поясим это на примере системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида:

$$\begin{aligned} k_{11}\varphi_1 + k_{12}\varphi_2 + \dots + k_{1M}\varphi_M &= f_1, \\ k_{21}\varphi_1 + k_{22}\varphi_2 + \dots + k_{2M}\varphi_M &= f_2, \\ \vdots & \\ k_{N1}\varphi_1 + k_{N2}\varphi_2 + \dots + k_{NM}\varphi_M &= f_N, \end{aligned} \tag{1.1.1}$$

или в матричном виде

$$K\varphi = f, \tag{1.1.2}$$

где K – матрица размером $N \times M$ (N строк и M столбцов), φ – вектор размерности M (содержит M проекций), f – вектор размерности N .

Для этой системы уравнений прямая задача заключается в вычислении правой части f по заданной матрице K и вектору φ . Обратная задача – по заданным K, f определить вектор φ , т.е. решить систему (1.1.2) относительно вектора решений φ . Из «житейского опыта» и курса линейной алгебры можно ожидать, что решение обратной задачи окажется более сложным, чем решение прямой задачи. Это действительно так.

Более компактной записью соотношений (1.1.1) является операторная (матричная) форма вида:

$$K\varphi = f, \quad (1.1.3)$$

которую в дальнейшем будем называть операторным уравнением. Оператор K отображает элемент φ пространства Φ в элемент f пространства F . Для (1.1.1) оператор K является матрицей, а Φ, F – векторными пространствами E^M, E^N размерности M и N соответственно.

1.1.2. Некорректно поставленные задачи

Основная трудность решения обратных задач связана с нарушением требований корректности по Адамару. Французский математик Ж. Адамар в 1932 г. [84] определил задачу решения уравнения (1.1.3) *корректно поставленной*, если для каждой правой части $f \in F$ решение φ :

- 1) существует;
- 2) единственно (однозначно определяется в пространстве Φ);
- 3) устойчиво в пространстве Φ , т.е. непрерывно зависит от правой части f .

Если первые два условия понятны, то третье необходимо пояснить. Для этого воспользуемся нормами соответствующих про-

странств. Условие устойчивости предполагает, что для любого $\varepsilon > 0$ можно указать такое $\delta(\varepsilon) > 0$, что из неравенства

$$\|\tilde{f} - f\| \leq \delta(\varepsilon) \text{ следует } \|\tilde{\varphi} - \varphi\| \leq \varepsilon, \quad (1.1.4)$$

где $\tilde{\varphi}$ – решение уравнения (1.1.3), соответствующее правой части \tilde{f} . Словами это означает, что малым ошибкам задания правой части соответствуют малые ошибки построенного решения.

Задачи, не удовлетворяющие всем перечисленным выше требованиям 1)–3) являются, по Адамару, *некорректно поставленными*. К таким задачам относится большинство обратных задач, в том числе и задачи идентификации.

В качестве такого примера рассмотрим *решение плохо обусловленной СЛАУ*. Дана система из двух уравнений

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 10^{-5} \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 10^{-5} \end{vmatrix}. \quad (1.1.5)$$

Очевидно, что решением системы является вектор $\bar{\varphi} = |1, 1|^T$, где T – символ транспонирования. «Искажем» точную правую часть $\bar{f} = |1, 10^{-5}|^T$ шумом $\eta = |0.01, -0.01|^T$, среднее значение проекций которого равно 0. Близость векторов $\bar{f}, \tilde{f} = \bar{f} + \eta = |1.01, -0.00999|^T$ будем определять евклидовой нор-

мой $\|\tilde{f} - \bar{f}\| = \left(\sum_{i=1}^2 (\tilde{f}_i - \bar{f}_i)^2 \right)^{1/2} = 0.014$. Решение

$\tilde{\varphi} = |1.01, -999|^T$, найденное по вектору \tilde{f} , существенно отличается от точного решения φ : $\|\bar{\varphi} - \tilde{\varphi}\| = \left(\sum_{i=1}^2 (\bar{\varphi}_i - \tilde{\varphi}_i)^2 \right)^{1/2} = 1000$.

Такая большая ошибка решения обусловлена неустойчивостью проекции $\tilde{\varphi}_2 = \tilde{f}_2 / 10^{-5}$ к шуму η_2 . Низкая устойчивость вектора решения к погрешностям исходных данных (в том числе к погрешностям задания элементов матрицы K) является отличии-

тельным признаком так называемых *плохо обусловленных* СЛАУ (подробнее см. п. 2.1.3).

Вопрос: можно ли повысить устойчивость решения плохо обусловленной СЛАУ?

Ответ: да, *если имеется априорная информация об искомом решении φ* . Например, в виде ограниченности нормы

$$\|\varphi\|^2 \leq C_\varphi. \quad (1.1.6)$$

Очевидно, что C_φ должно быть выбрано таким, чтобы искомое решение φ удовлетворяло условию (1.1.6). Для нашего примера полагаем $C_\varphi = 2$. Тогда приближенное решение $\tilde{\varphi}_c$, удовлетворяющее (1.1.6), имеет проекции $|1.01, -0.99|$ и ошибку $\|\tilde{\varphi} - \tilde{\varphi}_c\| = 1.99$, что существенно меньше ошибки решения $\tilde{\varphi} = |1.01, -0.99|^T$. Взяв $C_\varphi = 5$, получаем решение с проекциями $|1.01, -1.99|$ и ошибкой $\|\tilde{\varphi} - \tilde{\varphi}_c\| = 3$. Видно, что априорная достоверность в задании C_φ существенно сказывается на точности получаемых приближенных решений.

Подведем неожиданный итог: несмотря на предсказываемые сложности решения некорректных задач, удалось получить устойчивые (правда, приближенные) решения СЛАУ (1.1.5). *Однако этого удалось достигнуть только благодаря «сужению» множества возможных решений на основе априорной информации об искомом решении.* Сознательно или интуитивно введение априорной информации (в той или иной форме) в алгоритм решения позволило многим практикам получить разумные результаты, не подозревая о том, что они решают некорректно поставленную задачу. Достоверность используемой априорной информации (в нашем примере – предельное значение нормы C_φ) существенно влияет на точность получаемых приближенных решений.

1.1.3. Корректность по Тихонову и множество корректности

Идея поиска решения φ на некотором множестве, являющемся «сужением» исходного пространства Φ , легло в основу определения корректности по Тихонову¹.

Задача решения операторного уравнения (1.1.3) называется корректно поставленной по Тихонову, если выполнены следующие условия [44; 69; 70]:

1. Априори известно, что решение задачи существует и принадлежит некоторому множеству Φ_K пространства решений Φ , т.е. $\varphi \in \Phi_K \subset \Phi$.

2. Решение единственно на множестве Φ_K , т.е. для любой правой части $f \in F_K$ существует единственный элемент $\varphi \in \Phi_K$. Множество F_K состоит из элементов $K\varphi$, где $\varphi \in \Phi_K$. В операторном виде множество F_K можно определить соотношением $F_K = K\Phi_K$.

3. Если вариации правой части не выводят ее за пределы множества F_K (следовательно, соответствующие φ принадлежат Φ_K), то существует непрерывная зависимость решения от правой части и обратный оператор K^{-1} существует и он непрерывен, а следовательно, и ограничен.

Множество Φ_K , на образе которого F_K оператор K^{-1} существует и непрерывен, называется *множеством корректности*.

Сравнивая условия корректности по Адамару и Тихонову, видим, что корректность по Тихонову может быть достигнута за счет сужения исходного пространства Φ до множества корректности Φ_K . Поэтому задачу корректную по Тихонову (которая,

¹ Тихонов Андрей Николаевич – академик РАН, выдающийся советский математик, пионерские работы которого явились теоретической основой для разработки методов и алгоритмов решения некорректно поставленных задач.

возможно, некорректна по Адамару) часто называют *условно корректной задачей* [46; 69].

Общие принципы построения множества корректности и выбора из него подходящего (по определенным критериям) решения рассматриваются в так называемых *методах регуляризации некорректно поставленных задач* [4; 44; 54; 56; 66; 67; 69; 71; 74; 75]. Эти методы используются в последующих главах для решения рассматриваемых задач идентификации.

§ 1.2. Параметрические модели динамических систем

В этом параграфе рассмотрены модели различных систем, в которых необходимо оценить несколько параметров. Такие модели называются параметрическими. Показывается, что задачи оценивания параметров сводятся к решению систем линейных алгебраических уравнений.

1.2.1. Множественные регрессионные модели

В эконометрическом моделировании в качестве модели выступает множественная регрессия, используемая в решении проблем спроса, доходности акций, при изучении функций издержек производства и целого ряда других вопросов эконометрики. Регрессионные модели возникают также при исследовании технологических процессов и идентификации динамических систем [39].

Часто в качестве регрессионной модели принимают линейную множественную регрессию вида:

$$\tilde{Y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon, \quad (1.2.1)$$

где \tilde{Y} – зависимая переменная, где $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$ – коэффициенты регрессионной модели, ε – случайное слагаемое, называемое возмущением. Обозначим i -е наблюдение зависимой переменной как \tilde{y}_i , а наблюдаемые значения объясняющих переменных – $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ik}$, т.е. в обозначении x_{ij} первый индекс i определяет номер измерения, а второй j – номер переменной. Тогда имеет место следующая модель наблюдений:

$$\tilde{y}_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik} + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.2.2)$$

Запишем модель (1.2.2) в матричном виде. Для этого введем вектор y (матрицу-столбец), состоящий из n проекций, и матрицу X размером $n \times (k+1)$, состоящую из n строк и $k+1$ столбцов:

$$\tilde{y}_{n \times 1} = \begin{pmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{pmatrix}; \quad X_{n \times (k+1)} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{pmatrix},$$

а также векторы:

$$\beta_{(k+1) \times 1} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix} \text{ – вектор параметров; } \quad \varepsilon_{n \times 1} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix} \text{ – случайный вектор}$$

возмущений, где нижние индексы в обозначениях указывают размеры векторов и матриц. В дальнейшем матрицы обозначаются прописными буквами, а векторы – строчными.

Тогда в матричном виде модель наблюдений (1.2.2) примет вид

$$\tilde{y} = X\beta + \varepsilon. \quad (1.2.3)$$

Обычно относительно модели (1.2.3) делают следующие предположения (которые часто называют условия Гаусса – Маркова):

P1. Матрица X – неслучайная матрица, а ε – случайный вектор.

P2. Математическое ожидание

$$M(\varepsilon) = 0_n, \quad (1.2.4)$$

где 0_n – вектор, n проекций которого равны нулю (т.е. нулевой вектор).

P3. Матрица ковариации

$$V_\varepsilon = M[\varepsilon\varepsilon^T] = \sigma^2 I, \quad (1.2.5)$$

размера $n \times n$; I – единичная матрица размера $n \times n$. Напомним, что i, i -й элемент ковариационной матрицы V_ε определяет дисперсию i -й проекции вектора ε , а i, j -й элемент равен корреляционному моменту $\mu_{i,j} = M(\varepsilon_i \cdot \varepsilon_j)$. Если проекции ε_i и ε_j статистически независимы, то $\mu_{i,j} = 0$ и матрица V_ε является диагональной.

P4. Случайный вектор ε подчиняется n -мерному нормальному распределению $N(0_n, \sigma^2 I)$.

P5. Ранг $\text{rank}(X)$ матрицы X удовлетворяет условию

$$\text{rank}(X) = k + 1 \leq n. \quad (1.2.6)$$

Таким образом, построение оценок для коэффициентов β регрессионной модели сводится к решению системы уравнений (1.2.3). При этом система (1.2.3) может быть несовместной (т.е. не иметь решения), иметь не единственное решение, а матрица X может быть плохо обусловленной. Следовательно, задача оценивания вектора параметров β будет являться некорректно поставленной.

1.2.2. Регрессионная модель временного ряда

Во многих технических и экономических явлениях наблюдаемый процесс $\tilde{Y}(\tau)$ может быть представлен моделью

$$\tilde{Y}(\tau) = t(\tau) + \varepsilon(\tau), \quad (1.2.7)$$

где τ – чаще всего время. Функция $t(\tau)$ называется трендовой составляющей, и ее знание позволяет осуществлять долгосрочное прогнозирование поведения исследуемого процесса. Функция $\varepsilon(\tau)$ является случайной составляющей, называемой возмущением модели.

В качестве функции $t(\tau)$ часто принимают полином k -го порядка:

$$t(\tau) = \beta_0 + \beta_1 \tau + \beta_2 \tau^2 + \dots + \beta_k \tau^k. \quad (1.2.8)$$

Наблюдаемый процесс измеряется в дискретные моменты времени τ_i , $i = 1, \dots, n$, и тогда приходим к следующей модели измерений:

$$\tilde{y}_i = \beta_0 + \beta_1 \tau_i + \beta_2 \tau_i^2 + \dots + \beta_k \tau_i^k + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.2.9)$$

где $\tilde{y}_i = Y(\tau_i)$, $\varepsilon_i = \varepsilon(\tau_i)$. Измерения (1.2.9) часто называют временным рядом.

Возникает задача выделения трендовой составляющей временного ряда, т.е. необходимо оценить коэффициенты $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$ по данным $\{x_i, \tilde{y}_i\}$, $i = 1, 2, \dots, n$. По аналогии с (1.2.2) введем в рассмотрение векторы:

$$\tilde{y}_{n \times 1} = \begin{pmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{pmatrix}; \quad \beta_{(k+1) \times 1} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix}; \quad \varepsilon_{n \times 1} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 \\ \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

и матрицу

$$T_{n \times (k+1)} = \begin{pmatrix} 1 & \tau_1 & \tau_1^2 & \dots & \tau_1^k \\ 1 & \tau_2 & \tau_2^2 & \dots & \tau_2^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & \tau_n & \tau_n^2 & \dots & \tau_n^k \end{pmatrix}. \quad (1.2.10)$$

Тогда модель наблюдений (1.2.9) можно записать в матричном виде:

$$\tilde{y} = T\beta + \varepsilon \quad (1.2.11)$$

Таким образом, вновь оценивание коэффициентов функции тренда сводится к решению системы алгебраических уравнений (1.2.11). Следует заметить, что матрица T с элементами (1.2.10)

имеет плохую обусловленность (числа обусловленности могут достигать $\sim 10^{10}$ и больших значений). Кроме этого возможны случаи, когда нарушается предположение **P3**: ковариационная матрица перестанет быть диагональной в силу наличия статистической связи между проекциями ε_i и ε_j , $i \neq j$.

1.2.3. Модели динамических систем в пространстве состояний

Пространство состояний часто используется для описания поведения динамических систем [28; 50; 63]. Предположим, что состояние системы характеризуется m -мерным вектором $\beta = |\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m|^T$. Информация об этом векторе получается из косвенных измерений

$$\tilde{y}_i = k_i \beta + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots \quad (1.2.12)$$

где k_i – вектор строки с элементами $k_i = |k_{i1}, k_{i2}, \dots, k_{im}|$, ε_i – погрешности i -го измерения. Характерной особенностью модели (1.2.12) является то, что измерения \tilde{y}_i выполняются последовательно. Очевидно, что, «накопив» n измерений, можно сформировать систему алгебраических уравнений

$$\tilde{y} = K \beta + \varepsilon, \quad (1.2.13)$$

где K – матрица размером $n \times m$ следующей структуры:

$$K_{n \times m} = \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ \vdots \\ k_n \end{pmatrix}.$$

Тогда оценивание вектора состояния β сводится к решению системы (1.2.13). Однако такой подход к оцениванию вектора состояния неудобен: при поступлении нового измерения \tilde{y}_{n+1} необходимо формировать новую матрицу размером $(n+1) \times m$ и решать новую систему уравнений. Поэтому следует использовать

рекуррентные алгоритмы оценивания вектора β (или, иначе, рекуррентные алгоритмы решения СЛАУ, матрица которых, как правило, плохо обусловлена). В таких алгоритмах при поступлении нового $n+1$ измерения приближенное решение, соответствующее n -му измерению, корректируется в соответствии с новым измерением \tilde{y}_{n+1} .

Если заданы априорное распределение случайного вектора β и числовые характеристики помехи ε_i , то для оценивания вектора β используются рекуррентные алгоритмы, получившие название *фильтра Калмана* [50; 63]. Если вектор β не является случайным, то можно использовать рекуррентный регуляризирующий алгоритм, рассмотренный в работах [26; 28]. Таким образом, при оценивании вектора состояния вновь необходимо решать систему алгебраических уравнений вида (1.2.13), но с использованием рекуррентных алгоритмов. Как правило, получаемая при этом матрица K имеет плохую обусловленность (большое число обусловленности), а сама система уравнений является несовместной. Эти обстоятельства делают задачу оценивания вектора состояния динамической системы некорректно поставленной.

Обобщая содержание этого параграфа, делаем вывод: *идентификация параметров распространенных параметрических моделей связаны с решением систем алгебраических уравнений при нарушении условий корректности Адамара.*

Подробно эти моменты обсуждаются в § 2.1 данной работы.

Вопросы для самопроверки

1. Какие задачи называют прямыми, а какие – обратными?
2. Назовите условия корректности задачи по Адамару
3. Дайте определение корректности по Тихонову и укажите множество корректности

4. Запишите множественную регрессионную модель
5. Запишите регрессионную модель временного ряда
6. Запишите модель динамических систем в пространстве состояний

Глава 2

УСТОЙЧИВЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ АЛГОРИТМЫ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ

В этой главе обсуждаются трудности решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), возникающих при параметрической идентификации (см. § 1.2). Строятся регуляризирующие алгоритмы решения таких систем при различной априорной информации, и оценивается точность получаемых регуляризированных решений. Особое внимание уделяется алгоритмам выбора параметра регуляризации (как из условия минимума среднеквадратической ошибки решения, так и по заданным точностным характеристикам). Предлагается рекуррентный алгоритм построения регуляризированного решения СЛАУ.

§ 2.1. Вырожденные, несовместные, плохо обусловленные СЛАУ и их сингулярный анализ

В этом параграфе рассматриваются трудности, возникающие при решении СЛАУ, вводится понятие нормального псевдорешения СЛАУ и, используя сингулярное разложение матрицы системы, исследуются причины неустойчивости этого решения [10; 19; 40].

2.1.1. Вырожденные СЛАУ и нормальное решение

Напомним: что: а) матрица K является вырожденной, если ее определитель равен 0, т.е. $\det(K) = 0$, и наоборот, если $\det(K) \neq 0$, то матрица K является невырожденной; б) матрица K не вырождена тогда и только тогда, когда ее строки (столбцы) линейно независимы; в) система уравнений $K\varphi = f$ с квадратной матрицей K имеет единственное решение тогда и только тогда, когда K не вырождена и решение определяется формулой $\varphi = K^{-1}f$.

Возникает вопрос: как определить для вырожденной системы единственное решение. Из-за наличия множества решений у вырожденной системы для отбора единственного решения необходимо ввести некоторое правило или критерий отбора. Таким критерием может служить требование минимальной длины вектора решения.

Нормальным решением вырожденной системы называется вектор φ_H , имеющий минимальную норму $\|\varphi\|$ среди всех решений системы $K\varphi = f$. Если матрица K не вырождена, то нормальное решение совпадает с обычным решением системы. Обобщенным нормальным решением является вектор, минимизирующий функционал $\|\varphi - \omega_\varphi\|^2$ среди всех решений системы, где ω_φ – вектор, названный «пробным» решением.

2.1.2. Несовместные СЛАУ и псевдорешение

Система алгебраических уравнений называется несовместной, если для заданной правой части не существует вектора φ , обращающего СЛАУ в тождество, т.е. не выполняется первое условие корректной постановки задачи. Несовместность может быть вызвана неточностью задания правой части или неточностью задания элементов матрицы системы. Следует заметить, что несовместными могут быть СЛАУ с хорошо обусловленными матрицами. Возникает вопрос: как определить решение для несовместных СЛАУ? Аналогичный вопрос возникает для СЛАУ с прямоугольными матрицами, для которых не определена обратная матрица K^{-1} . Во всех этих ситуациях обращаются к методу наименьших квадратов (МНК).

Предположим, что матрица K имеет размеры $N \times M$. Вектор φ_{HK} размерностью M называют псевдорешением (или решением МНК), если он доставляет минимум следующему функционалу

$$\Psi_{HK}(\varphi) = \|f - K\varphi\|^2 = (f - K\varphi)^T (f - K\varphi) \quad (2.1.1)$$

среди всех векторов евклидова пространства E^M . Используя правила векторного дифференцирования, получаем необходимое и достаточное условие минимума:

$$\frac{d}{d\varphi} [(f - K\varphi)^T (f - K\varphi)] = K^T (f - K\varphi) = 0_M, \quad (2.1.2)$$

из которого следует система уравнений (называемая системой нормальных уравнений) вида:

$$K^T K \varphi_{HK} = K^T f. \quad (2.1.3)$$

В отличие от исходной системы $K\varphi = f$ эта система всегда разрешима, т.е. для любой правой части f существует псевдорешение φ_{HK} . Если матрица K имеет ранг, равный M , то

$$\varphi_{HK} = (K^T K)^{-1} K^T f. \quad (2.1.4)$$

В случае вырожденной матрицы K для получения единственного решения обращаемся к «старому» правилу, а именно: за решение принимается вектор φ^+ , называемый нормальным псевдорешением, имеющий минимальную норму среди всех решений φ_{HK} .

Возникает вопрос: существует ли матрица (обозначаемая K^+) размером $M \times N$, однозначно определяемая матрицей K и такая, что

$$\varphi^+ = K^+ f. \quad (2.1.5)$$

Такая матрица действительно существует, и она называется псевдообратной матрицей для матрицы K . Если K имеет полный ранг, то

$$K^+ = \begin{cases} (K^T K)^{-1} K^T, & \text{если } N \geq M; \\ K^T (K K^T)^{-1}, & \text{если } N < M. \end{cases}$$

Псевдообратная матрица удовлетворяет следующим условиям:

$$\begin{aligned} KK^+K &= K, \quad K^+KK^+ = K^+; \\ (KK^+)^T &= KK^+; \quad (K^+K)^T = K^TK. \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

Построение псевдообратной матрицы на основе сингулярного разложения будет рассмотрено позже, а здесь заметим, что псевдообратная матрица – полезное математическое понятие (как и понятие обратной матрицы), но при нахождении φ^+ ее, как правило, не вычисляют.

Казалось бы, используя введенное понятие нормального псевдорешения φ^+ , можно построить решение для вырожденной или несовместной СЛАУ. К сожалению, алгоритм построения φ^+ является неустойчивым по отношению к погрешностям исходных данных, что является следствием плохой обусловленности решаемых СЛАУ.

2.1.3. Плохо обусловленные СЛАУ и число обусловленности

Число обусловленности $cond(K)$ является важной характеристикой матрицы K . Если матрица K имеет K^{-1} , то

$$cond(K) = \|K\| \cdot \|K^{-1}\|, \quad (2.1.7)$$

где $\|K\|$ – согласованная норма матрицы. Так, для евклидовой нормы вектора существует несколько согласованных норм матриц [3]:

– евклидова норма $\|K\|_E$, определяемая как

$$\|K\|_E = \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M k_{ij}^2 \right)^{1/2}; \quad (2.1.8)$$

– спектральная норма $\|K\|_S$, определяется как

$$\|K\|_S = \mu_{\max}^{1/2}, \quad (2.1.9)$$

где μ_{\max} – максимальное собственное число K^TK .

Для последней нормы (2.1.10) имеем

$$cond(K) = (\mu_{\max} / \mu_{\min})^{1/2} \quad (2.1.10)$$

Основные свойства числа обусловленности вполне очевидны:

1) $cond(K) \geq 1$, $cond(I) = 1$, где I – единичная матрица;

2) $cond(cK) = cond(K)$, где $c \neq 0$ – константа;

3) $cond(K) = \max_i |k_{ii}| / \min_i |k_{ii}|$, где k_{ii} – диагональные

элементы матрицы K ;

4) $cond(K) = cond(K^{-1})$;

5) для евклидовой и спектральной норм число обусловленности не меняется от умножения матрицы K слева и справа на любые ортогональные матрицы.

Число обусловленности входит в следующее неравенство:

$$\frac{\|\tilde{\varphi} - \bar{\varphi}\|}{\|\bar{\varphi}\|} \leq cond(K) \frac{\|\tilde{f} - \bar{f}\|}{\|\bar{f}\|}, \quad (2.1.11)$$

где $\bar{\varphi}, \tilde{\varphi}$ – решения системы $K\varphi = f$, построенные при правых \bar{f}, \tilde{f} соответственно. Видно, что чем меньше число обусловленности, тем с меньшим «коэффициентом усиления» относительная погрешность задания правой части передается в относительную погрешность найденного решения.

Таким образом, число обусловленности характеризует устойчивость решения к погрешностям задания правой части f . При больших значениях $cond(K)$ решение системы $\tilde{K}\tilde{\varphi} = \tilde{f}$ может существенно отличаться от точного решения $\bar{\varphi}$ системы $K\bar{\varphi} = \bar{f}$, хотя норма $\|\tilde{f} - \bar{f}\|$ будет маленькой. Следовательно, для СЛАУ с большим числом обусловленности из малости нормы $\|\tilde{f} - \bar{f}\|$ нельзя делать вывод о малости нормы $\|\tilde{\varphi} - \bar{\varphi}\|$ полученных решений.

Величина числа обусловленности позволяет дать следующую классификацию матриц (систем): матрица K называется хорошо обусловленной, если $cond(K)$ относительно мало; матрица K является плохо обусловленной, если $cond(K)$ относительно

велико. Уточнить понятия «относительно мало» или «относительно велико» можно, рассматривая условия конкретной задачи решения СЛАУ. Если при заданном относительном уровне погрешности $\delta_f = \|\tilde{f} - \bar{f}\| / \|\bar{f}\|$ выполняется неравенство $cond(K) \cdot \delta_f \leq \varepsilon$, где ε – максимальное значение относительной ошибки решения $\|\tilde{\varphi} - \bar{\varphi}\| / \|\bar{\varphi}\|$, то можно говорить о хорошо обусловленной матрице K ; в противном случае матрицу K можно считать плохо обусловленной. На практике считают матрицу хорошо обусловленной, если $cond(K) < 100$.

Вернемся к системе нормальных уравнений (2.1.4), решение которой дает φ^+ . К сожалению, очень часто матрица этой системы имеет плохую обусловленность, а сама задача построения нормального псевдорешения является неустойчивой по отношению к погрешностям задания правой части (или элементов матрицы системы). Излагаемый ниже SVD-анализ СЛАУ позволяет более глубоко выяснить причину такой неустойчивости.

2.1.4. Сингулярное разложение матрицы

Сингулярным разложением прямоугольной $N \times M$ матрицы K (коротко: SVD-разложением) называется представление [3; 70]:

$$K = U \Lambda V^T, \quad (2.1.12)$$

где U – ортогональная ($N \times N$)-матрица, V – ортогональная ($M \times M$)-матрица, Λ – ($N \times M$)-матрица вида

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_M \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.1.13)$$

в которой последние $N - M$ строки содержат только нулевые элементы. Величины $\lambda_j \geq 0, j = 1, \dots, M$, называются *сингулярными числами* матрицы K , и в дальнейшем полагаем, что λ_j упорядочены по убыванию, т.е. $\lambda_j \geq \lambda_{j+1}$. Напомним, что матрица B называется *ортогональной*, если имеет место тождество $B^T B = B B^T = I$. Очевидно, что линейные преобразования вектора, выполненные с помощью ортогональной матрицы, сохраняют его норму. Пусть $z = Bx$, тогда

$$\|z\|^2 = (Bx)^T \cdot (Bx) = x^T B^T B x = x^T x = \|x\|^2.$$

Если матрица K имеет SVD-разложение (2.1.13), то имеют место следующие свойства:

1) столбцы $u_j, j = 1, 2, \dots, N$, матрицы U называются левыми сингулярными векторами и образуют ортонормированный базис из собственных векторов матрицы KK^T , т.е.

$$KK^T u_j = \gamma_j u_j, \quad \langle u_j, u_i \rangle = \begin{cases} 1, & k = j; \\ 0, & k \neq j, \end{cases} \quad (2.1.14)$$

где γ_j – собственные числа матрицы KK^T ;

2) столбцы $v_i, i = 1, 2, \dots, M$, матрицы V называются правыми сингулярными векторами и образуют ортонормированный базис из собственных векторов матрицы $K^T K$, т.е.

$$K^T K v_i = \beta_i v_i, \quad \langle v_j, v_i \rangle = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (2.1.15)$$

где β_i – собственные числа матрицы $K^T K$;

3) если ранг матрицы K равен p , то

$$\lambda_j > 0, \quad j = 1, 2, \dots, p; \quad \lambda_{p+1} = \lambda_{p+2} = \dots = \lambda_M = 0 \quad (2.1.16)$$

и наоборот: *ранг матрицы равен количеству ненулевых сингулярных чисел*;

4) между сингулярными векторами матрицы K существует связь

$$Kv_i = \begin{cases} \lambda_i u_i, & i \leq p; \\ 0, & i > p, \end{cases} \quad K^T u_i = \begin{cases} \lambda_i v_i, & i \leq p; \\ 0, & i > p. \end{cases}$$

5) для ненулевых собственных чисел $\mu_j(K^T K)$, $\mu_j(KK^T)$ матриц $K^T K$, KK^T имеет место равенство

$$\mu_j(K^T K) = \mu_j(KK^T) = \lambda_j^2, \quad j = 1, 2, \dots, p,$$

где p – ранг матрицы K . Возвращаясь к (2.1.15), (2.1.16) получаем $\gamma_i = \beta_i = \lambda_i^2$, $i = 1, 2, \dots, p$;

6) число обусловленности матрицы K полного ранга определяется соотношением

$$\text{cond}(K) = \lambda_{\max} / \lambda_{\min}; \quad (2.1.17)$$

7) норма матрицы K выражается как

$$\|K\| = \lambda_{\max};$$

8) имеет место следующее представление:

$$K = \lambda_1 u_1 v_1^T + \lambda_2 u_2 v_2^T + \dots + \lambda_M u_M v_M^T = \sum_{j=1}^M \lambda_j u_j v_j^T. \quad (2.1.18)$$

На рис. 2.1 приведены значения λ_j для матрицы K размером 100×80 с числом обусловленности $3.4 \cdot 10^{12}$, а на рис. 2.2 – проекции сингулярных векторов v_1 (кривая 1), v_{20} (кривая 2), v_{40} (кривая 3). Видно, что с увеличением номера j частота осцилляций проекции векторов v_j увеличивается.

Перечисленные свойства сингулярного разложения позволяют построить простой алгоритм вычисления нормального псевдорешения и псевдообратной матрицы [3; 82].

2.1.5. SVD-алгоритм построения нормального псевдорешения

Введем векторы

$$y = U^T f, \quad x = V^T \varphi \quad (2.1.19)$$

размерностью N и M соответственно. Тогда с учетом (2.1.13) систему $K\varphi = f$ можно преобразовать к эквивалентной системе:

$$\begin{aligned} \lambda_j x_j &= y_j, & j &= 1, \dots, M; \\ 0 &= y_j, & j &= M+1, \dots, N, \end{aligned} \quad (2.1.20)$$

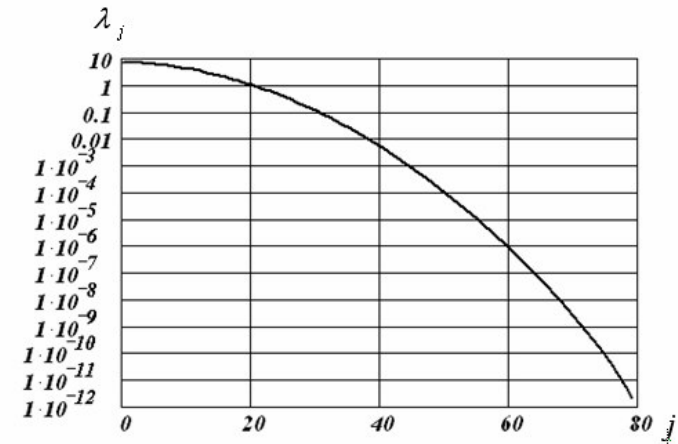


Рис. 2.1. Сингулярные числа матрицы K

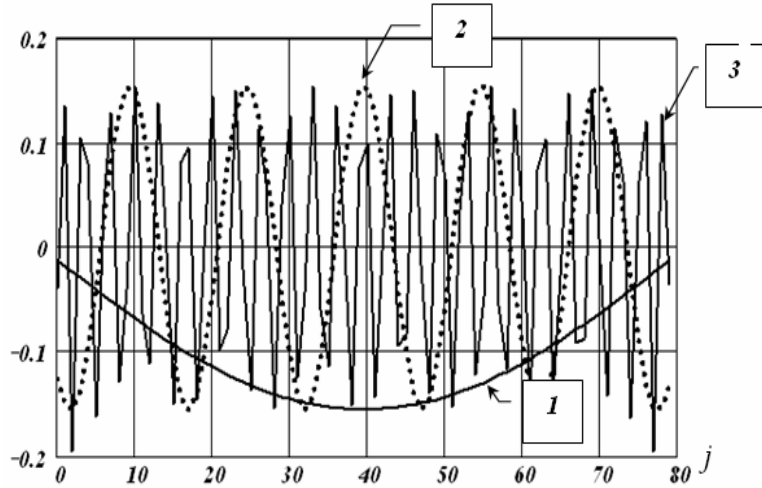


Рис. 2.2. Сингулярные векторы матрицы K

которая хорошо характеризует «информативность» правой части: чем меньше сингулярное число λ_j , тем с меньшим весом проекция x_j входит в правую часть. Предельный случай $\lambda_j = 0$, $p+1 \leq j \leq M$, говорит о вырожденности K . Очевидно, что невыполнение условия $\sum_{j=M+1}^N |y_j| = 0$ говорит о несовместности исходной системы.

С учетом ортогональности матриц U , V и соотношений (2.1.19) функционал (2.1.2) можно записать в виде

$$\Psi_{HK}(\varphi) = \Psi_{HK}(x) = \sum_{j=1}^p (y_j - \lambda_j x_j)^2 + \sum_{j=p+1}^M (y_j - 0 \cdot x_j)^2 + \sum_{j=M+1}^N y_j^2.$$

Третье слагаемое обусловлено несовместностью исходной системы, и не зависит от x . Второе слагаемое отражает вырожденность системы, и, следуя определению нормального псевдорешения, проекции x_j , входящие во второе слагаемое, следует при-

нять равным 0. Тогда минимум функционала достигается на векторе x^+ размерности p с элементами

$$x_j^+ = \frac{y_j}{\lambda_j}, \quad j=1, \dots, p, \quad (2.1.21)$$

а нормальное псевдорешение φ^+ выражается как

$$\varphi^+ = \sum_{j=1}^p x_j^+ \cdot v_j. \quad (2.1.22)$$

Напомним, что $\lambda_j > 0$, $j=1, \dots, p$, где p – ранг матрицы K .

Введем в рассмотрение матрицу Λ^+ размером $M \times N$ с элементами

$$\{\Lambda^+\}_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_j}, & \text{если } i = j, \quad 1 \leq j \leq p; \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (2.1.23)$$

Тогда псевдорешение $\bar{\varphi}^+$ при точной правой части \bar{f} представимо в виде

$$\bar{\varphi}^+ = V \Lambda^+ U^T \bar{f}, \quad (2.1.24)$$

а матрица

$$K^+ = V \Lambda^+ U^T \quad (2.1.25)$$

размером $M \times N$ является псевдообратной матрицей.

Сделаем обобщение понятия нормального псевдорешения. Назовем обобщенным нормальным решением вектор φ_o^+ , являющийся решением вариационной задачи [53; 54]:

$$\inf_{\varphi \in \Phi_{HK}} \|\varphi\|_{W\varphi}^2, \quad (2.1.26)$$

где Φ_{HK} – множество решений вариационной задачи

$$\inf \|f - K\varphi\|_{W_f}^2,$$

а W_φ, W_f – невырожденные симметричные матрицы. Здесь и ниже запись $\|z\|_z^2$ означает квадратичную форму вида $z^T V_z z$. Построим алгоритм вычисления обобщенного нормального решения. Для этого введем сингулярное разложение.

$$W_\varphi^{-1/2} K W_f^{1/2} = U \Lambda V^T. \quad (2.1.27)$$

Следуя работе [53], можно доказать

Утверждение 2.1.1. Решение вариационной задачи (2.1.27) допускает представление

$$\varphi_o^+ = W_\varphi^{-1/2} \cdot V \cdot \Lambda^+ \cdot U^T \cdot W_f^{1/2} \cdot f = K_o^+ \cdot f, \quad (2.1.28)$$

а обобщенная псевдообратная матрица имеет вид

$$K_o^+ = W_\varphi^{-1/2} \cdot V \cdot \Lambda^+ \cdot U^T \cdot W_f^{1/2}, \quad (2.1.29)$$

где Λ^+ определена (2.1.22). ♣

Хотя нормальное псевдорешение и обобщенное нормальное псевдорешение существуют для любой матрицы K и правой части f , но они очень «чувствительны» к погрешностям задания правой части из-за наличия малых сингулярных чисел (признак плохой обусловленности матрицы K). Покажем это в случае, когда вместо вектора \bar{f} «точной» правой части системы $K\varphi = f$ задан «зашумленный» вектор $\tilde{f} = \bar{f} + \eta$, где η – вектор погрешностей. Тогда нормальное псевдорешение можно представить в виде (см. (2.1.20), (2.1.21)):

$$\tilde{\varphi}^+ = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\langle u_j, \tilde{f} \rangle}{\lambda_j} + \frac{\langle u_j, \eta \rangle}{\lambda_j} \right] \cdot v_j = \sum_{j=1}^p \left[\bar{x}_j^+ + \frac{\langle u_j, \eta \rangle}{\lambda_j} \right] \cdot v_j. \quad (2.1.30)$$

Если первое слагаемое в этом представлении соответствует проекциям искомого «точного» псевдорешения, то второе слагаемое характеризует ошибку, которая может принимать большие зна-

чения при делении на малые сингулярные числа λ_j . Причем эта ошибка имеет *осциллирующий характер (типичный признак неустойчивости решений)*, обусловленный осциллирующим поведением проекций векторов v_j , соответствующих малым λ_j (см. рис. 2.1.2, кривые 2 и 3).

Как устранить такую неустойчивость? Простейшим устойчивым алгоритмом является построение «усеченного» нормального псевдорешения в виде:

$$\varphi_\gamma^+ = \sum_{j=1}^p \left[F(\lambda_j) \cdot \frac{\langle u_j, \tilde{f} \rangle}{\lambda_j} \right] \cdot v_j, \quad (2.1.31)$$

где $F(\lambda)$ называется фильтрующей функцией, она задается как:

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{если } \lambda > \gamma_0; \\ 0, & \text{если } \lambda \leq \gamma_0. \end{cases} \quad (2.1.32)$$

Введение такой функции в алгоритм построения псевдорешения можно рассматривать как элементарный способ регуляризации неустойчивой задачи вычисления нормального псевдорешения.

2.1.6. Построение нормального псевдорешения в Mathcad

Первоначально рассмотрим две функции Mathcad, которые потребуются для построения нормального псевдорешения $\tilde{\varphi}^+$, определяемого выражением

$$\tilde{\varphi}^+ = \sum_{j=1}^{p_\Pi} \frac{\langle \tilde{f}, u_j \rangle}{\lambda_j} \cdot v_j, \quad (2.1.33)$$

где практический ранг p_Π матрицы K определяется количеством сингулярных чисел λ_j , удовлетворяющих условию:

$$\frac{\lambda_j}{\lambda_{\max}} \geq \gamma_0, \quad (2.1.34)$$

где γ_0 – достаточно малая величина ($10^{-10} \div 10^{-8}$).

Функция svds. Обращение имеет вид $svds(K)$. Вычисляет вектор размерности M , состоящий из сингулярных чисел λ_j матрицы K , которые расположены в убывающем порядке.

Функция svd. Обращение имеет вид $svd(K)$. Вычисляет матрицу UV размером $(N+M) \times M$. Первые N строк этой матрицы соответствуют матрице \underline{U} размером $N \times M$, которая определяет первые M столбцов матрицы U , т.е.

$$U = [\underline{U} : u_{M+1} : \dots : u_N]. \quad (2.1.35)$$

Последние M строк матрицы UV содержат матрицу V размером $M \times M$.

Заметим, что отсутствие в матрице \underline{U} последних $N-M$ столбцов матрицы U обусловлено тем, что эти столбцы не участвуют в вычислении нормального псевдорешения и поэтому во многих программных реализациях SVD-разложения эти столбцы не вычисляются.

Функция submatrix. Обращение имеет вид $submatrix(K, i1, i2, j1, j2)$. Формирует новую матрицу из элементов матрицы K , стоящих с $i1$ по $i2$ строках и с $j1$ по $j2$ столбцах матрицы K .

Пример 2.1.1. Дана матрица K размером 6×3 . Необходимо вычислить сингулярные числа и матрицы \underline{U}, V .

Решение. На рис. 2.3 показан фрагмент документа Mathcad, выполняющий требуемые вычисления. Здесь же приведены вычисление числа обусловленности (формула (2.1.16)) и проверка ортогональности столбцов матриц \underline{U}, V .

Перейдем к подпрограмме-функции (П-Ф) Ps_Solve , осуществляющей построение нормального псевдорешения СЛГАУ по формуле (2.1.33). Обращение к П-Ф имеет вид:

$$Ps_Solve(K, f, \gamma_0). \quad (2.1.36)$$

Формальные параметры: K – матрица системы размером $N \times M$, f – правая часть системы, γ_0 – переменная вещественного типа, входящая в условие (2.1.34).

На рис. 2.4 приведен фрагмент документа Mathcad с текстом П-Ф Ps_Solve .

Замечание 2.1.1. При обработке матриц в пакете Mathcad часто используется операция формирования вектора из определенного столбца матрицы. Для этого надо ввести имя матрицы, затем нажать клавиши [Ctrl+6] и в появившихся вверху угловых скобках задать нужный номер столбца. Например, в П-Ф Ps_Solve стоят операции $U^{(i)}, V^{(i)}$.

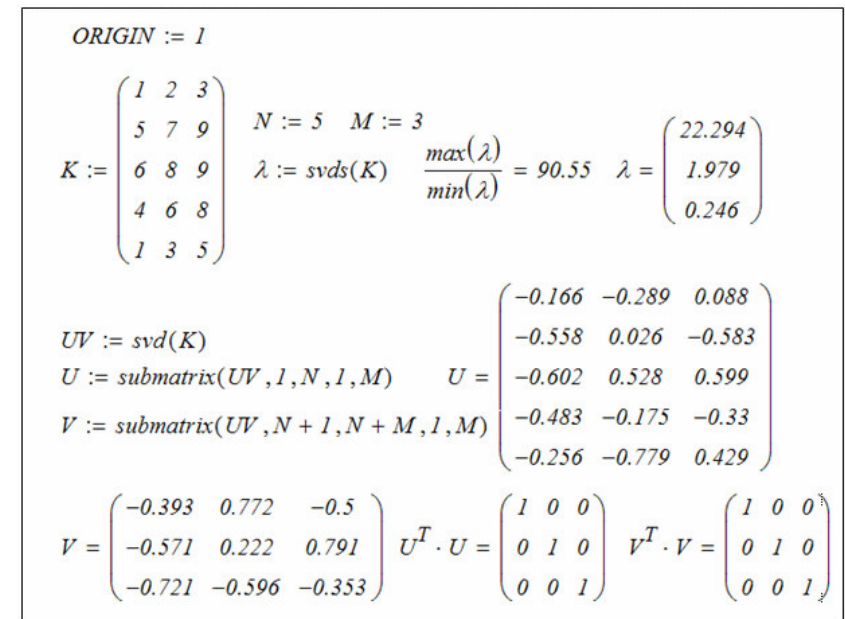


Рис. 2.3. Сингулярное разложение матрицы K

```

Ps_Solve(K, f, γ₀) :=
  N ← rows(K)
  M ← cols(K)
  λ ← svds(K)
  UV ← svd(K)
  U ← submatrix(UV, 1, N, 1, M)
  V ← submatrix(UV, N + 1, N + M, 1, M)
  λ_max ← max(λ)
  φ_ps ← ∑_{j=1}^M if [ (λ_j / λ_max) ≥ γ₀, (f · U^{(j)}) · V^{(j)}, 0 · V^{(j)} ]

```

Рис. 2.4. Текст подпрограммы-функции *Ps_Solve*

Пример 2.1.2. Матрица K размером 5×3 формируется с использованием П-Ф *Form_K* (фрагмент документа показан на рис. 2.5). Число обусловленности $1.426 \cdot 10^6$. Для заданного вектора ϕ вычислены два вектора: вектор «точной» правой части f и вектор «зашумленной» правой части f_η с относительной погрешностью $3.232 \cdot 10^{-3}$ (см. рис. 2.5). По этим двум векторам

```

ORIGIN := 1
Form_K(N, M, σ) :=
  for i ∈ 1..N
  for j ∈ 1..M
    K_{i,j} ← exp [ - (j - M/N · i)² / σ² ]
  K

```

$K := Form_K(5, 3, 30)$ $Cond(K) := \begin{cases} k \leftarrow \frac{\max(svds(K))}{\min(svds(K))} \\ k \end{cases}$
 $Cond(K) = 1.426 \times 10^6$

$\phi := \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 6 \end{pmatrix}$ $f := K \cdot \phi$ $f = \begin{pmatrix} 9.955 \\ 9.976 \\ 9.99 \\ 9.995 \\ 9.992 \end{pmatrix}$ $f_\eta := \begin{pmatrix} 10.01 \\ 9.96 \\ 10.03 \\ 9.98 \\ 10.00 \end{pmatrix}$
 $\frac{|f - f_\eta|}{|f|} = 3.232 \times 10^{-3}$

$\phi_{1ps} := Ps_Solve(K, f, 10^{-10})$ $\phi_{2ps} := Ps_Solve(K, f_\eta, 10^{-10})$
 $\frac{|\phi - \phi_{1ps}|}{|\phi|} = 7.045 \times 10^{-11}$ $\frac{|\phi - \phi_{2ps}|}{|\phi|} = 1.102 \times 10^{-3}$

Рис. 2.5. Построение нормальных псевдорешений

необходимо построить нормальные псевдорешения с использованием П-Ф *Ps_Solve*.

Решение. Два обращения к *Ps_Solve* показаны на рис. 2.5. Здесь вычислены относительные ошибки двух псевдорешений: псевдорешение ϕ_{1ps} , построенное по точной правой части, и псевдорешение ϕ_{2ps} , построенное по искаженной правой части

f_η . Несмотря на маленькую погрешность исходных данных, относительная ошибка решения $\varphi_{2_{ps}}$ достигает большой величины $1.102 \cdot 10^3$, и эта ошибка удовлетворяет неравенству (2.1.12). Действительно

$$1.103 \cdot 10^3 \leq \text{cond}(K) \cdot 3.232 \cdot 10^{-3} = 4.609 \cdot 10^3. \bullet$$

В заключении этого параграфа заметим следующее: *хотя рассмотренные алгоритмы (2.1.22), (2.1.33) позволяют построить нормальное псевдорешение для любой СЛАУ, однако это решение в случае плохо обусловленной матрицы имеет низкую устойчивость к погрешностям задания правой части. Это наглядно демонстрирует пример 2.1.2. Для получения устойчивых решений используют специальные регуляризирующие алгоритмы, рассмотренные в последующих параграфах.*

§ 2.2. Оптимальные статистические регуляризирующие алгоритмы решения СЛАУ

В этом параграфе рассматриваются два устойчивых алгоритма построения нормального псевдорешения СЛАУ при статистической модели измерений и различных способах задания априорной информации об искомом решении. Алгоритмы минимизируют величину введенных функционалов от ошибки решения и поэтому называются оптимальными.

2.2.1. Байесовский регуляризирующий алгоритм

Пусть дана система линейных алгоритмических уравнений вида

$$K\varphi = f \quad (2.2.1)$$

и вместо точной правой части \bar{f} дан «зашумленный» вектор

$$\tilde{f} = \bar{f} + \eta, \quad (2.2.2)$$

где η – случайный вектор шума измерений. Задачу построения решения системы (2.2.1) по этому вектору можно формально свести к построению матричного отображения (алгоритма)

$T(\tilde{f}): E^N \rightarrow E^M$, где E^N, E^M – евклидовы векторные пространства размерности N, M соответственно. Тогда полученное таким образом решение φ_T допускает запись $\varphi_T = T(\tilde{f})$. Возникает вопрос: как определить отображение $T(\tilde{f})$, т.е. алгоритм вычисления решения по заданной правой части \tilde{f} . Очевидно, что для этого необходимо ввести в рассмотрение определенные критерии, позволяющие судить о качестве того или иного алгоритма. Эти критерии и используемые методы математической статистики определяют сущность статистических подходов к построению алгоритма $T(\tilde{f})$.

Байесовский подход к построению регуляризирующих алгоритмов рассматривался в большом числе публикации (например, [42; 43; 52; 57; 72]). Поэтому здесь приведем только основные соотношения, уделяя внимание априорной информации, необходимой для построения алгоритма и точности такого алгоритма.

Исходной информацией являются:

- априорное распределение $p(\bar{\varphi})$ искомого вектора решения $\bar{\varphi}$;
- условное распределение $p(\tilde{f}|\bar{\varphi})$, характеризующее распределение вектора измерений \tilde{f} при фиксированном векторе $\bar{\varphi}$;
- функция потерь $\Pi(\varphi_T, \bar{\varphi})$ – чаще всего квадратичная:

$$\Pi(\varphi_T, \bar{\varphi}) = \|\varphi_T - \bar{\varphi}\|^2. \quad (2.2.3)$$

Используя эту информацию, можно вычислить *средний риск* алгоритма T , определяемого формулой

$$\Delta_{cp}(T) = M_{\bar{\varphi}} \left[M_{\tilde{f}|\bar{\varphi}} \left[\Pi(T(\tilde{f}), \bar{\varphi}) \right] \right]. \quad (2.2.4)$$

Нижние символы у операторов математических ожиданий $M[\]$ указывают, для каких случайных векторов они вычисляются. Использование двух операторов «усреднение» – по распределению вектора η при фиксированном $\bar{\varphi}$ (условное математическое ожидание $M_{\tilde{f}|\bar{\varphi}}[\]$) и по распределению вектора $\bar{\varphi}$ (математическое ожидание $M_{\bar{\varphi}}[\]$) – делает зависимость величины среднего риска только от оператора T .

Байесовским регуляризирующим алгоритмом T_B назовем матричный оператор T , доставляющий минимум величине среднего риска (2.2.4).

К сожалению, конечные соотношения для построения байесовского регуляризирующего алгоритма T_B , можно получить только в одном случае, когда распределения $p(\bar{\varphi})$, $p(\tilde{f}|\bar{\varphi})$ являются нормальными:

$$p(\bar{\varphi}) = N(m_{\bar{\varphi}}, V_{\bar{\varphi}}); \quad p(\tilde{f}|\bar{\varphi}) = N(K\bar{\varphi}, V_{\eta}). \quad (2.2.5)$$

При этом предполагается, что вектор шума η также имеет нормальное распределение $N(0_N, V_{\eta})$, где 0_N – нулевой вектор с N проекциями. Запись $N(m_z, V_z)$ означает, что N -мерный случайный вектор z имеет нормальное распределение с вектором ожидания m_z и ковариационной матрицей V_z , а сама плотность распределения имеет вид:

$$p(z) = const \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\|z - m_z\|_{V_z^{-1}}^2\right),$$

где запись $\|z - m_z\|_{V_z^{-1}}^2$ означает $\|z - m_z\|_{V_z^{-1}}^2 = (z - m_z)^T V_z^{-1} (z - m_z)$.

Для распределений (2.2.5) байесовское регуляризованное решение $\varphi_B = T_B(\tilde{f})$ находится из системы линейных алгебраических уравнений

$$(K^T V_{\eta}^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1}) \varphi_B = K^T V_{\eta}^{-1} \tilde{f} + V_{\bar{\varphi}}^{-1} m_{\bar{\varphi}}. \quad (2.2.6)$$

Заметим, что вектор φ_B для квадратичной функции потерь (2.2.3) и распределений (2.2.5) максимизирует значения апостериорной плотности распределения $p(\varphi | \tilde{f})$, которая имеет вид

$$p(\varphi | \tilde{f}) = const \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2}\|\tilde{f} - K\varphi\|_{V_{\eta}^{-1}}^2 - \frac{1}{2}\|\varphi - m_{\bar{\varphi}}\|_{V_{\bar{\varphi}}^{-1}}^2\right\},$$

а, следовательно, доставляет минимум функционалу

$$F_B[\varphi] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{V_{\eta}^{-1}}^2 + \|\varphi - m_{\bar{\varphi}}\|_{V_{\bar{\varphi}}^{-1}}^2. \quad (2.2.7)$$

Рассмотрим точность построенного байесовского регуляризованного решения при следующих предположениях:

$$M[\eta] = 0_N; \quad M[\varphi\eta] = 0_{M \times N}. \quad (2.2.8)$$

Последнее условие означает, что проекция φ_j и η_i не коррелированы между собой. Определим вектор ошибки решения как

$$\varepsilon_B = \varphi_B - \bar{\varphi}. \quad (2.2.9)$$

Для дальнейшего будет полезной следующая запись ошибки:

$$\begin{aligned} \varepsilon_B &= (K^T V_{\eta}^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1})^{-1} (K^T V_{\eta}^{-1} (K\bar{\varphi} + \eta) + V_{\bar{\varphi}}^{-1} m_{\bar{\varphi}}) - \bar{\varphi} = \\ &= (K^T V_{\eta}^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1})^{-1} \cdot [K^T V_{\eta}^{-1} \eta + V_{\bar{\varphi}}^{-1} (m_{\bar{\varphi}} - \bar{\varphi})]. \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

Утверждение 2.2.1. Математическое ожидание $M[\varepsilon_B]$ определяется выражением

$$M[\varepsilon_B] = b_B = (K^T V_{\eta}^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1})^{-1} V_{\bar{\varphi}}^{-1} (m_{\bar{\varphi}} - M_{\varphi}[\bar{\varphi}]), \quad (2.2.11)$$

где $m_{\bar{\varphi}}$, $V_{\bar{\varphi}}$ – математическое ожидание и ковариационная матрица задаваемого априорного распределения $p(\bar{\varphi}) = N(m_{\bar{\varphi}}, V_{\bar{\varphi}})$.

Для доказательства этого утверждения достаточно с учетом (2.2.5) вычислить математическое ожидание $M[\varepsilon_B] = M_\varphi[M_\eta[\varphi_B - \bar{\varphi}]]$ от левой части (2.2.10).

Неслучайный вектор b_B характеризует систематическую ошибку байесовского решения, и его можно назвать смещением оценки φ_B относительно искомого решения $\bar{\varphi}$. Если заданное математическое ожидание $m_{\bar{\varphi}}$ априорного распределения не равно «истинному» $M_\varphi[\bar{\varphi}]$, то $M[\varepsilon_B] \neq 0_M$ и решение φ_B будет являться смещенной оценкой для φ . ♣

Введем вектор $\xi_B = \varepsilon_B - M[\varepsilon_B]$, который представим в виде:

$$\xi_B = (K^T V_\eta^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1})^{-1} \cdot K^T V_\eta^{-1} \eta.$$

Непосредственно из этого представления (с учетом предположений (2.2.8)) следует

Утверждение 2.2.2. Вектор ξ_B является случайным вектором с математическим ожиданием $M[\xi_B] = 0_M$ и ковариационной матрицей $V_{\xi_B} = M[\xi_B \xi_B^T]$, которая определяется выражением:

$$V_{\xi_B} = (K^T V_\eta^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1})^{-1} K^T V_\eta^{-1} K (K^T V_\eta^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1})^{-1}. \clubsuit \quad (2.2.12)$$

Следовательно, вектор ξ_B можно назвать случайной ошибкой решения φ_B , а вектор «полной» ошибки (2.2.9) байесовского решения записать в виде:

$$\varepsilon_B = b_B + \xi_B. \quad (2.2.13)$$

Обобщая изложенное, можно сказать, что байесовский регуляризирующий алгоритм позволяет построить по заданной правой части \tilde{f} решение с наименьшей среднеквадратической ошибкой (СКО), определяемой (2.2.4), на классах векторов $\bar{\varphi}$ и

η , имеющих распределения $p(\bar{\varphi}) = N(m_{\bar{\varphi}}, V_{\bar{\varphi}})$ и $p(\eta) = N(0_N, V_\eta)$ соответственно.

К недостаткам байесовского подхода к построению регуляризованного решения СЛАУ следует отнести:

- необходимость задания плотностей $p(\tilde{f}|\bar{\varphi})$, $p(\bar{\varphi})$, причем существенные трудности возникают с заданием $p(\bar{\varphi})$ из-за отсутствия априорной статистической информации в векторе $\bar{\varphi}$;
- допущение о статистической природе искомого решения.

Если допущение о случайности вектора погрешностей η в большинстве случаев оправдано и позволяет учесть специфику различных измерительных схем, то допущение о статистической природе φ часто не соответствует действительности. Для того чтобы использовать байесовский регуляризирующий алгоритм и в этом случае используют несколько способов:

– метод рандомизации [11; 42; 43], преобразующий детерминированные ограничения вида:

$$\varphi_{\min_i} \leq \bar{\varphi}_i \leq \varphi_{\max_i}, \quad i = 1, 2, \dots, M,$$

в параметры $m_{\bar{\varphi}}$, $V_{\bar{\varphi}}$ априорного распределения $p(\bar{\varphi}) = N(m_{\bar{\varphi}}, V_{\bar{\varphi}})$;

– введение фидуциального априорного распределения [72], которое в отличие от «частотного» распределения $p(\bar{\varphi})$ отражает степень нашего доверия тому или иному вектору решения φ .

Эти способы подробно рассмотрены в § 2.3.

2.2.2. Минимаксный регуляризирующий алгоритм

Откажемся от статистической природы вектора $\bar{\varphi}$ (т.е. не будем использовать априорное распределение $p(\bar{\varphi})$), но допустим, что решение $\bar{\varphi}$ принадлежит некоторому множеству Φ M -мерного векторного пространства E^M .

Тогда алгоритм построения оптимального оператора $T(\tilde{f})$ может быть основан на минимаксном критерии качества [45]. Математически это означает нахождение оператора $T_{omn}(\tilde{f})$, являющегося решением следующей минимаксной задачи:

$$\inf_T \sup_{\bar{\varphi} \in M} M_\eta \left[\left\| T(\tilde{f}) - \bar{\varphi} \right\|^2 \right]. \quad (2.2.14)$$

Матричный оператор $T_{omn}(\tilde{f})$, являющийся решением этой задачи, назовем минимаксным регуляризирующим алгоритмом, а вектор $\varphi_{MM} = T_{omn}(\tilde{f})$ – минимаксным решением СЛАУ.

Для получения конкретных алгоритмов построения φ_{MM} рассмотрим два множества Φ , задаваемые следующими соотношениями:

$$\Phi_1 = \left\{ \varphi : \langle \varphi, W_\varphi \cdot \varphi \rangle \leq \alpha \right\}; \quad (2.2.15)$$

$$\Phi_2 = \left\{ \varphi : \langle \varphi, e_j \rangle^2 \leq \lambda_j, j = 1, 2, \dots, M \right\}, \quad (2.2.16)$$

где e_j – ортонормированный базис собственных векторов симметричной положительно определенной матрицы W_φ ; λ_j – соответствующий набор собственных чисел. Представим вектор φ в виде: $\varphi = \sum_{i=1}^M \varphi_i e_i$. Тогда $\langle \varphi, e_j \rangle^2 = \left\langle \sum_{i=1}^M \varphi_i e_i, e_j \right\rangle^2 = \varphi_j^2$ и множество (2.2.16) представляет собой параллелепипед $\Phi_2 = \left\{ \varphi : |\varphi_j|^2 \leq \lambda_j, j = 1, 2, \dots, M \right\}$.

Можно показать [45], что решение φ_{MM} задачи (2.2.14) на множестве Φ_1 (2.2.15) находится из системы уравнений:

$$\left(\alpha^{-1} W_\varphi + K^T V_\eta^{-1} K \right) \varphi_{MM} = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f}, \quad (2.2.17)$$

а решение задачи (2.2.14) на множестве Φ_2 (2.2.16) определяется СЛАУ:

$$\left(W_\varphi^{-1} + K^T V_\eta^{-1} K \right) \varphi_{MM} = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f}. \quad (2.2.18)$$

Существенным недостатком минимаксного решения является то, что для конкретного вектора $\bar{\varphi} \in \Phi$ вектор φ_{MM} может иметь СКО $M_\eta \left[\left\| T(\tilde{f}) - \bar{\varphi} \right\|^2 \right]$ большее по сравнению с другим линейным решением. Это объясняется тем, что регуляризирующий алгоритм строится из условия минимума наибольшей ошибки регуляризованного решения на «допустимом» множестве решений Φ . Такой проигрыш по точности будет возрастать с «расширением» множества Φ . Это обстоятельство требует определенной осторожности при задании множества Φ , что эквивалентно введению априорной информации об искомом решении в специфической форме.

В работах [74; 75] был предложен подход к построению регуляризирующих алгоритмов на основе математического аппарата решающих процедур, широко используемого для оценивания параметров. Однако требуемый «объем» априорной информации такой же, как и в случае байесовского регуляризирующего алгоритма.

Заметим, что характерной особенностью рассмотренных в этом пункте РА является то, что их построение осуществляется из условия минимума функционала ошибки регуляризованного решения при условии, что искомое решение принадлежит определенному классу решений, задаваемому либо статистическими (плотности распределения), либо детерминированными (ограничения типа (2.2.15), (2.2.16)) средствами. Поэтому рассмотренные регуляризирующие алгоритмы можно назвать оптимальными на классах (множествах) решений.

2.2.3. Оптимальный регуляризирующий SVD-алгоритм

Используя сингулярное разложение, построим статистический регуляризирующий алгоритм, минимизирующий средне-

квадратическую ошибку нахождения нормального псевдорешения СЛАУ $\bar{\varphi}^+$ (без предположения о принадлежности вектора $\bar{\varphi}^+$ какому-либо классу).

Предположим, что:

- система линейных алгебраических уравнений

$$K\varphi = f \quad (2.2.19)$$

при «точной» правой части \bar{f} имеет «точное» нормальное псевдорешение $\bar{\varphi}^+$;

- вместо точной правой части \bar{f} дан вектор

$$\tilde{f} = \bar{f} + \eta, \quad (2.2.20)$$

где η – случайный вектор погрешностей задания правой части;

- вектор η имеет $M[\eta] = 0_N$ и ковариационную матрицу $V_\eta = M[\eta\eta^T]$, допускающую представление

$$V_\eta = \sigma_\eta^2 \cdot C_\eta. \quad (2.2.21)$$

где σ_η^2 – дисперсия, а элементы матрицы C_η характеризуют относительные величины дисперсий или корреляционные связи между проекциями вектора η .

Так как это представление будет часто использоваться в дальнейшем, рассмотрим структуры ковариационных матриц V_η , допускающих представление (2.2.21).

Некоррелированные погрешности с одинаковой дисперсией имеют ковариационную $(N \times N)$ -матрицу вида

$$V_\eta = \text{diag}\{\sigma_\eta^2, \dots, \sigma_\eta^2\} = \begin{pmatrix} \sigma_\eta^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_\eta^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.22)$$

В этом случае $C_\eta = I$ – единичная $(N \times N)$ -матрица.

Некоррелированные погрешности с разной дисперсией имеют ковариационную $(N \times N)$ -матрицу вида

$$V_\eta = \text{diag}\{\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_N^2\}. \quad (2.2.23)$$

В этом случае $\sigma_\eta^2 = \max \sigma_i^2$, а

$$C_\eta = \text{diag}\left\{\frac{\sigma_1^2}{\sigma_\eta^2}, \frac{\sigma_2^2}{\sigma_\eta^2}, \dots, \frac{\sigma_N^2}{\sigma_\eta^2}\right\}.$$

Коррелированные погрешности с одинаковой дисперсией имеют ковариационную матрицу

$$V_\eta = \begin{pmatrix} \sigma_\eta^2 & \mu_{12} & \dots & \mu_{1N} \\ \mu_{21} & \sigma_\eta^2 & \dots & \mu_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{N1} & \mu_{N2} & \dots & \sigma_\eta^2 \end{pmatrix}, \quad (2.2.24)$$

где $\mu_{i,j}$ – ковариационные моменты, характеризующие статистическую связь проекций η_i, η_j . В этом случае

$$\{C_\eta\}_{i,j} = \frac{1}{\sigma_\eta^2} \{V_\eta\}_{i,j}.$$

Коррелированные погрешности с разной дисперсией имеют ковариационную матрицу

$$V_\eta = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \mu_{12} & \dots & \mu_{1N} \\ \mu_{21} & \sigma_2^2 & \dots & \mu_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{N1} & \mu_{N2} & \dots & \sigma_N^2 \end{pmatrix}. \quad (2.2.25)$$

В этом случае $\sigma_\eta^2 = \max \sigma_i^2$, а

$$\{C_\eta\}_{i,j} = \frac{1}{\sigma_\eta^2} \{V_\eta\}_{i,j}.$$

Введем сингулярное разложение (подробнее см. § 2.1):

$$C_n^{-1/2} \cdot K = U \Lambda V^T, \quad (2.2.26)$$

где матрица Λ размером $N \times M$ имеет структуру (2.1.14), а сингулярные числа λ_j , $j=1, \dots, M$, упорядочены по убыванию, т.е. $\lambda_j \geq \lambda_{j+1}$. Тогда регуляризованное решение запишем в виде

$$\varphi_R = VRU^T C_n^{-1/2} \tilde{f}, \quad (2.2.27)$$

где матрица R размером $M \times N$ имеет следующую структуру:

$$R = \begin{pmatrix} r_1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & r_2 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & r_M & \cdot & \cdot & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2.28)$$

$$r_j = \frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + q_j}, \quad j=1, 2, \dots, M. \quad (2.2.29)$$

Величины q_j назовем регуляризирующими множителями.

Очевидно, от величины регуляризирующих множителей зависит СКО решения φ_R , которую определим функционалом

$$\Delta(R) = M_\eta \left[\left\| \varphi_R - \bar{\varphi}^+ \right\|^2 \right], \quad (2.2.30)$$

где усреднение проводится только по плотности $p(\eta)$.

Утверждение 2.2.3. Можно показать, что при сделанных предположениях (2.2.20)–(2.2.21) СКО решения φ_R определяется выражением

$$\Delta(R) = \sum_{j=1}^p \left(\frac{q_j}{\lambda_j^2 + q_j} \right)^2 \cdot (\bar{x}_j^+)^2 + \sigma_\eta^2 \cdot \sum_{j=1}^p \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + q_j} \right)^2, \quad (2.2.31)$$

где

$$\bar{x}_j^+ = \langle v_j, \bar{\varphi}^+ \rangle, \quad (2.2.32)$$

v_j – j -й столбец матрицы V ; p – ранг матрицы K .

Для доказательства этого утверждения запишем N -мерный вектор $U^T C_n^{-1/2} \tilde{f}$ в виде:

$$\begin{aligned} U^T C_n^{-1/2} (K \bar{\varphi} + \eta) &= U^T C_n^{-1/2} K \bar{\varphi} + U^T C_n^{-1/2} \eta = \\ &= U^T U \Lambda V^T \bar{\varphi} + U^T n = \Lambda V^T \bar{\varphi} + U^T n. \end{aligned} \quad (2.2.33)$$

Случайный вектор $n = C_n^{-1/2} \eta$ имеет $M[n] = C_n^{-1/2} M[\eta] = 0$ и ковариационную матрицу

$$V_n = M[nn^T] = C_n^{-1/2} M[nn^T] C_n^{-1/2} = \sigma_\eta^2 \cdot I_{N \times N}.$$

Вектор $\Lambda V^T \bar{\varphi}$ имеет N проекций, первые M которых равны $\lambda_j \bar{x}_j^+$, а последние $N - M$ нулевые. Более того, для матрицы ранга p ($\lambda_j = 0, j = p + 1, \dots, M$) только первые p проекций вектора $\Lambda V^T \bar{\varphi}$ отличны от нуля, и эти проекции составляют искомое нормальное псевдорешение $\bar{\varphi}^+$. Поэтому в (2.2.31) верхним пределом суммирования является величина ранга p .

Тогда решение φ_R можно представить в виде:

$$\varphi_R = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j^2}{\lambda_j^2 + q_j} \bar{x}_j^+ + \frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + q_j} \cdot \langle u_j, n \rangle \right] v_j, \quad (2.2.34)$$

где v_j , u_j – столбцы матриц V и U соответственно. Определим вектор $\varepsilon_R = \varphi_R - \bar{\varphi}^+$ ошибки решения φ_R . Этот вектор допускает представление

$$\varepsilon_R = \sum_{j=1}^p \left[-\frac{q_j}{\lambda_j^2 + q_j} \bar{x}_j^+ + \frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + q_j} \cdot \langle u_j, n \rangle \right] v_j. \quad (2.2.35)$$

Учитывая ортогональность матриц U , V , возведя ε_R в квадрат и взяв математическое ожидание, приходим к доказываемому соотношению (2.2.31). ♣

Замечание 2.2.1. Если ранг p матрицы K неизвестен, то в качестве его можно использовать практический ранг матрицы, равный количеству сингулярных чисел λ_j , удовлетворяющих условию (2.1.34). Сингулярные числа, не удовлетворяющие этому условию, считаются нулевыми и не принимают участие в построении псевдорешения (см. (2.1.31)). ♦

Определим элементы матрицы R построенного алгоритма путем нахождения величин q_j , $j=1,2,\dots,p$, из условия минимума функционала $\Delta(R)$. Дифференцируя (2.2.31) по q_j и приравнявая производную нулю, получаем оптимальное значение

$$q_{onm_j} = \frac{\sigma_\eta^2}{(\bar{x}_j^+)^2}, \quad j=1,2,\dots,p. \quad (2.2.36)$$

Тогда соответствующий множитель r_{onm_j} можно представить соотношением:

$$r_{onm_j} = \begin{cases} \frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 (1 + S_j)}, & \text{если } \lambda_j \neq 0; \\ 0, & \text{если } \lambda_j = 0. \end{cases} \quad (2.2.37)$$

Величину

$$S_j = \sigma_\eta^2 / (\lambda_j \bar{x}_j^+)^2, \quad j=1,2,\dots,p, \quad (2.2.38)$$

можно трактовать как отношение «шум/сигнал» правой части, соответствующее ненулевому сингулярному числу λ_j .

Оптимальное решение φ_{onm} , построенное при $q_j = q_{onm_j}$ имеет следующее SVD-представление:

$$\varphi_{onm} = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + q_{onm_j}} \cdot \langle u_j, C_\eta^{-1/2} \tilde{f} \rangle \right] v_j, \quad (2.2.39)$$

или в матричном виде:

$$\varphi_{onm} = V_p R_{ponm} U_p^T C_\eta^{-1/2} \tilde{f} = T_{onm} \cdot \tilde{f}, \quad (2.2.40)$$

где V_p – матрица размера $M \times p$, составленная из p первых столбцов матрицы V ; U_p – матрица размера $N \times p$, составленная из p первых столбцов матрицы U ; R_{ponm} – диагональная матрица размера $p \times p$ следующей структуры:

$$R_{ponm} = \begin{vmatrix} \frac{\lambda_1}{\lambda_1^2 + q_{onm_1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{\lambda_1}{\lambda_2^2 + q_{onm_2}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\lambda_p}{\lambda_p^2 + q_{onm_p}} \end{vmatrix}. \quad (2.2.41)$$

Утверждение 2.2.4. Вектор φ_{onm} , определяемый (2.2.39) или (2.2.40), является решением системы уравнений

$$(K^T V_\eta^{-1} K + W_\varphi) \varphi_{onm} = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f}, \quad (2.2.42)$$

где матрица W_φ определяется выражением

$$W_{\bar{\varphi}} = V_p \operatorname{diag} \left\{ \frac{1}{(\bar{x}_1^+)^2}, \frac{1}{(\bar{x}_2^+)^2}, \dots, \frac{1}{(\bar{x}_p^+)^2} \right\} V_p^T. \quad (2.2.43)$$

Рассмотрим точность построенного алгоритма T_{onn} (2.2.40).

Представим вектор ошибки $\varepsilon_{onn} = \varphi_{onn} - \bar{\varphi}^+$ оптимального решения φ_{onn} в виде следующей суммы векторов:

$$\varepsilon_{onn} = \varphi_{onn} - \bar{\varphi}_{onn} + \bar{\varphi}_{onn} - \bar{\varphi}^+ = \xi_{onn} + b_{onn}. \quad (2.2.44)$$

Вектор $b_{onn} = \bar{\varphi}_{onn} - \bar{\varphi}^+$ определяет систематическую ошибку решения φ_{onn} . При этом $b_{onn} = M_{\eta}[\varepsilon_{onn}]$ и поэтому вектор b_{onn} можно назвать смещением решения φ_{onn} . Вектор $\xi_{onn} = \varphi_{onn} - \bar{\varphi}_{onn}$ является случайным вектором с нулевым средним $M[\xi_{onn}] = 0_M$ и характеризует случайную ошибку решения φ_{onn} . Заменяя в (2.2.31) q_j на q_{onn} , получаем следующие выражения:

$$\|b_{onn}\|^2 = \sigma_{\eta}^4 \cdot \sum_{j=1}^p \frac{(x_j^+)^2}{\left[(\lambda_j \cdot \bar{x}_j^+)^2 + \sigma_{\eta}^2 \right]^2}; \quad (2.2.45)$$

$$M\left[\|\xi_{onn}\|^2\right] = \sigma_{\eta}^2 \cdot \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j (\bar{x}_j^+)^2}{(\lambda_j \cdot \bar{x}_j^+)^2 + \sigma_{\eta}^2} \right]^2, \quad (2.2.46)$$

а «полная» среднеквадратическая ошибка решения φ_{onn}

$$\Delta_{onn} = \Delta(T_{onn}) = M_{\eta} \left[\|T_{onn} \cdot \tilde{f} - \bar{\varphi}^+\|^2 \right] \quad (2.2.47)$$

определяется выражением

$$\begin{aligned} \Delta_{onn} &= \|b_{onn}\|^2 + M\left[\|\xi_{onn}\|^2\right] = \\ &= \sigma_{\eta}^4 \cdot \sum_{j=1}^p \frac{(x_j^+)^2}{\left[(\lambda_j \bar{x}_j^+)^2 + \sigma_{\eta}^2 \right]^2} + \sigma_{\eta}^2 \cdot \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j (\bar{x}_j^+)^2}{(\lambda_j \bar{x}_j^+)^2 + \sigma_{\eta}^2} \right]^2. \end{aligned} \quad (2.2.48)$$

§ 2.3. Статистические регуляризирующие алгоритмы решения СЛАУ при неполной априорной информации

В этом параграфе рассматривается построения регуляризирующих алгоритмов решения СЛАУ в ситуациях, когда отсутствует «полная» априорная информация об искомом решении или о множестве, которому принадлежит искомое решение (необходимая для построения оптимальных алгоритмов, изложенных в § 2.2).

2.3.1. Неполная информация и сглаживающий функционал

Обратимся к функционалу (2.2.7):

$$F_B(\varphi) = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{V_{\tilde{\eta}}^{-1}}^2 + \|\varphi - m_{\bar{\varphi}}\|_{V_{\bar{\varphi}}^{-1}}^2, \quad (2.3.1)$$

точка минимума которого являлась байесовским решением СЛАУ, и дадим интерпретацию слагаемых этого функционала. Чем меньше величина первого слагаемого, тем больше вероятность события, что зарегистрированный вектор \tilde{f} соответствует вектору φ . Следовательно, первое слагаемое функционала (2.3.1) позволяет выделить в пространство векторов φ множество векторов, статистических адекватных заданному вектору \tilde{f} . Меньшее значение второго слагаемого соответствует большей вероятности события, что вектор φ является выборкой из совокупности векторов, распределенных по нормальному закону $N(m_{\bar{\varphi}}, V_{\bar{\varphi}})$, где $m_{\bar{\varphi}}$ – вектор математического ожидания, $V_{\bar{\varphi}}$ – ковариационная матрица (в общем случае не диагональная). Следовательно, второе слагаемое позволяет выделить множество векторов, «гладкость» которых адекватна ковариационной матрице $V_{\bar{\varphi}}$.

В ситуациях, когда отсутствует априорная информация о числовых характеристиках решения и шума, целесообразно ввести

функционал, слагаемые которого выполнили те же функции, что и в функционале (2.3.1). Такой функционал имеет вид

$$F_\alpha[\varphi] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{W_f}^2 + \alpha \|\varphi - \omega_\varphi\|_{W_\varphi}^2 \quad (2.3.2)$$

и является обобщением сглаживающего функционала А.Н. Тихонова [76; 77; 79]. Можно показать, что вектор φ_α , доставляющий минимум функционалу (2.3.2), является решением системы

$$(K^T W_f K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T W_f \tilde{f} + \alpha W_\varphi \omega_\varphi, \quad (2.3.3)$$

состоящей из M уравнений относительно M неизвестных. При $\alpha > 0$ система имеет единственное решение.

В общем случае матрицы W_f , W_φ являются не отрицательно определенными и методы их определения зависят от формы задания имеющейся априорной информации. Рассмотрим некоторые из часто используемых методов по мере уменьшения требуемого ими «объема» априорной информации.

Метод рандомизации. Допустим, что априори известно о принадлежности искомого решения $\bar{\varphi}$ гиперпрямоугольнику, определяемому неравенствами

$$\varphi_{\min_j} \leq \bar{\varphi}_j \leq \varphi_{\max_j}, \quad j = 1, \dots, M, \quad (2.3.4)$$

являющимися детерминированными ограничениями. Метод рандомизации [42; 43] позволяет интерпретировать детерминированные ограничения в терминах числовых характеристик некоторых вероятностных распределений (чаще всего нормального распределения). Первые два момента \hat{m}_φ , \hat{V}_φ нормального распределения $N(\hat{m}_\varphi, \hat{V}_\varphi)$ определяется таким образом, чтобы случайный вектор, подчиняющийся этому распределению с вероятностью β попадал в гиперпрямоугольник (2.3.4). Математическое ожидание \hat{m}_φ такого вектора определяется как

$$\hat{m}_\varphi = \left| \frac{\varphi_{\min_1} + \varphi_{\max_1}}{2}, \frac{\varphi_{\min_2} + \varphi_{\max_2}}{2}, \dots, \frac{\varphi_{\min_M} + \varphi_{\max_M}}{2} \right|^T, \quad (2.3.5)$$

а корреляционная матрица \hat{V}_φ является диагональной и вычисляется по формуле

$$\hat{V}_\varphi = \text{diag} \left\{ \frac{(\varphi_{\max_1} - \varphi_{\min_1})^2}{4\mu_\beta}, \dots, \frac{(\varphi_{\max_M} - \varphi_{\min_M})^2}{4\mu_\beta} \right\}. \quad (2.3.6)$$

где μ_β является корнем нелинейного уравнения

$$\Phi(\mu_\beta) = \frac{M\sqrt{\beta}}{2}. \quad (2.3.7)$$

Здесь $\Phi(x)$ – функция Лапласа.

Для размерности $M \in [8, 60]$ можно принять $\mu_\beta = \text{const} = 3.0$.

Если матрица V_η задана, то, подставляя вычисленные описанным образом \hat{m}_φ , \hat{V}_φ в систему уравнений (2.2.6), получаем матричную запись алгоритма нахождения «рандомизированного» регуляризованного решения φ_p :

$$(K^T V_\eta^{-1} K + \hat{V}_\varphi^{-1}) \varphi_p = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f} + \hat{V}_\varphi^{-1} \hat{m}_\varphi. \quad (2.3.8)$$

Если информация о шуме измерения задана в виде системы неравенств

$$|\tilde{f}_i - f_i| \leq \delta_i, \quad 1 \leq i \leq N, \quad (2.3.9)$$

то вновь обращаемся к методу рандомизации и вычисляем корреляционную матрицу \hat{V}_η по формуле

$$\hat{V}_\eta = \text{diag} \left\{ \frac{\delta_1^2}{4\mu_\beta}, \frac{\delta_2^2}{4\mu_\beta}, \dots, \frac{\delta_N^2}{4\mu_\beta} \right\} \quad (2.3.10)$$

и используем ее в алгоритме (2.3.8). Величина μ_β также определяется из уравнения (2.3.7), в числителе которого стоит корень N степени. Очевидно, что (2.3.8) является частным случаем системы (2.3.2) при следующих заменах:

$$W_f = V_\eta^{-1}; \quad W_\varphi = \widehat{V}_\varphi^{-1}; \quad \omega_\varphi = \widehat{m}_\varphi; \quad \alpha = 1. \quad (2.3.11)$$

Замечание 2.3.1. Априорная информация об искомом решении, задаваемая в виде неравенств (2.3.4), должна удовлетворять условию «несмещенности»: а именно, середина интервала $[\varphi_{\min_i}, \varphi_{\max_i}]$ должна совпадать с i -й проекцией точного решения $\bar{\varphi}_i$, а в целом $\widehat{m}_\varphi = \bar{\varphi}^+$. Невыполнение этого условия приводит к появлению вектора смещения, определяемого по формуле

$$b_p = M_\eta [\varphi_p - \bar{\varphi}^+] = -(K^T V_\eta^{-1} K + \widehat{V}_\varphi^{-1})^{-1} \widehat{V}_\varphi^{-1} (\bar{\varphi}^+ - \widehat{m}_\varphi). \quad (2.3.12)$$

Здесь предполагается, что искомое решение является детерминированным вектором, и усреднение случайного вектора φ_α осуществляется только по ансамблю вектора шума η . ♦

Замечание 2.3.2. Значения $\bar{\varphi}_i$ должны попасть в интервал $[\varphi_{\min_i}, \varphi_{\max_i}]$, и для этого длину интервала необходимо увеличивать. Однако это приводит к увеличению диагональных элементов матрицы \widehat{V}_φ (см. (2.3.6)), а это в свою очередь вызывает возрастание случайной ошибки решения φ_p . Поэтому для компенсации априорной неопределенности относительно границ интервалов (2.3.4) можно ввести параметр $\alpha \neq 1$, который вычисляются рассмотренными ниже алгоритмами выбора параметра регуляризации. ♦

Вывод: метод рандомизации следует применить при наличии достоверной априорной информации о возможных значениях проекций искомого решения, которую можно представить в виде системы неравенств (2.3.4).

2.3.2. Гладкость решения и стабилизирующий функционал

Следующим шагом в сторону уменьшения «объема» априорной информации об искомом решении является введение только требования «гладкости», характеризующее изменение амплитуды соседних проекций. Например, шесть проекций, приведенных на рис. 2.6 а) соответствуют «гладкому» решению, а на рис. 2.6 б) – «негладкому» вектору φ .

В качестве меры гладкости того или иного вектора φ выступает квадратичная форма

$$\varphi^T W_\varphi \varphi = \|\varphi\|_{W_\varphi}^2, \quad (2.3.13)$$

которую назовем стабилизирующим функционалом. Неотрицательно определенная матрица W_φ находится из условия: чем

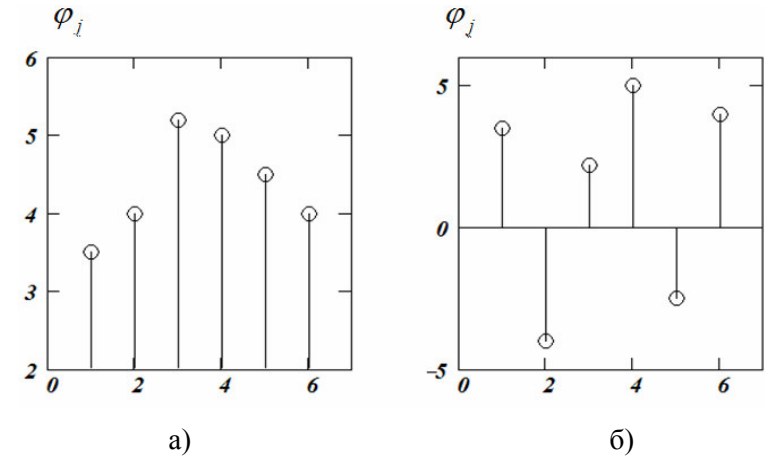


Рис. 2.6. К определению «гладкого» и «негладкого» вектора φ

«гладже» вектор φ , тем меньшее значение принимает функционал (2.3.13). Исходя из этого условия, часто матрицу W_φ формируют как

$$W_\varphi = D_p^T D_p, \quad (2.3.14)$$

где D_p – матрица, являющаяся дискретным аналогом оператора дифференцирования p -го порядка (и тогда говорят о регуляризации p -го порядка). Так, при $p=0$ матрица W_φ является единичной размер $M \times M$:

$$W_\varphi = \begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ 0 & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.3.15)$$

то функционал (2.3.13) «чувствует» только амплитуду проекций вектора φ . На рис. 2.7 приведены проекции двух векторов, имеющих различную гладкость, но тем не менее одно и то же значение функционала (2.3.13) с матрицей (2.3.15).

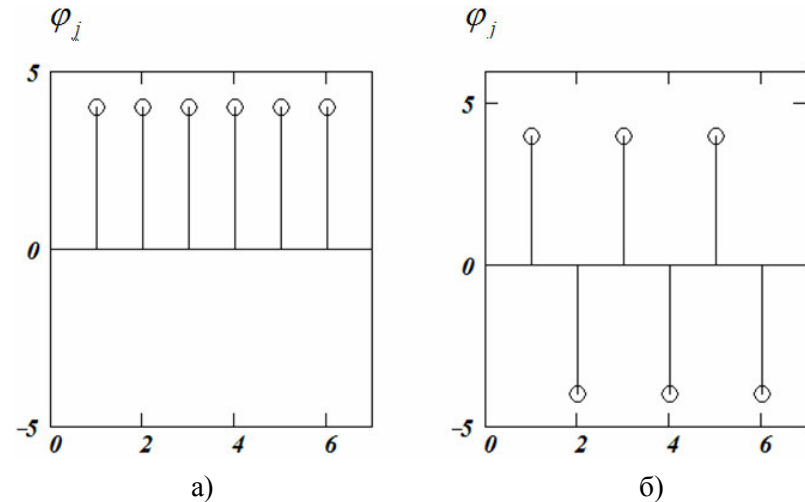


Рис. 2.7. Векторы φ различной гладкости

Для $p=1$ матрица W_φ имеет вид:

$$W_\varphi = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.3.16)$$

и тогда значение квадратичной формы (2.3.13) для векторов с одинаковыми проекциями будет нулевым (рис. 2.9 а) и строго положительным для других векторов (например, для вектора на рис. 2.9 б). Следовательно, матрица W_φ , определяемая (2.3.16), имеет ранг $M-1$.

Вопрос: какую матрицу W_φ следует выбирать? Если решение ищется на множестве векторов с ограниченной нормой, для которых отсутствует взаимосвязь между «соседними» проекциями, то целесообразно использовать матрицу (2.3.15). Примером может служить идентификация коэффициентов уравнения регрессии, рассмотренного в § 1.2. При наличии взаимосвязи между соседними проекциями можно использовать матрицу (2.3.16). Например, при идентификации импульсной функции динамической системы, в которой отсутствуют резкие изменения значений соседних проекций.

Возможно и другие способы формирования W_φ [99]. Возвращаясь к матрице \hat{V}_φ (2.3.6), можно принять $W_\varphi = \hat{V}_\varphi^{-1}$, и это будет соответствовать регуляризации нулевого порядка.

Статистическую трактовку введенной квадратичной формы (2.3.13) можно дать, используя понятие фидуциального распределения [83]. Плотность такого распределения запишем в виде

$$p_\varphi(\varphi) = C_\alpha \exp\left(-\alpha \|\varphi\|_{W_\varphi}^2\right), \quad (2.3.17)$$

где C_α – нормализующий множитель, определяемый из условия

$$\int p_\phi(\varphi) d\varphi = 1$$

при некотором заданном параметре α . Вектор $\hat{\varphi}$, имеющий меньшее значение квадратичной формы $\|\varphi\|_{W_\phi}^2$, имеет большее значение плотности $p_\phi(\varphi)$. Однако в отличие от «частотной» плотности распределения вероятности (обычно используемой в теории вероятности и математической статистике) значение функции плотности распределения определяет степень нашего доверия к тому или иному вектору. Используя распределение (2.3.17), можно построить байесовское решение, однако при этом необходимо задать параметр $\alpha > 0$, выбор которого является трудной на практике проблемой.

Вернемся к вектору ω_ϕ , входящему в функционал (2.3.2) и названному «пробным» решением. При наличии априорной информации вида (2.3.4) его можно задать как $\omega_\phi = \hat{m}_\phi$, где \hat{m}_ϕ определяется выражением (2.3.5). При отсутствии такой информации традиционным заданием является $\omega_\phi = 0_M$, и решение φ_α , доставляющее минимум функционалу

$$F_\alpha[\varphi] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{W_f}^2 + \alpha \|\varphi\|_{W_\phi}^2,$$

находится из следующей системы уравнений:

$$(K^T W_f K + \alpha W_\phi) \varphi_\alpha = K^T W_f \tilde{f}. \quad (2.3.18)$$

К сожалению, задание $\omega_\phi = 0_M$ может привести к увеличению систематической ошибки (см. замечание 2.3.1). Ниже для уменьшения этой ошибки приведена итерационная процедура апостериорного уточнения вектора пробного решения ω_ϕ .

Матрицу W_f рекомендуется задавать с точностью до константы равной обратной матрице V_η^{-1} , т.е.

$$W_f = C_f V_\eta^{-1}, \quad (2.3.19)$$

где константа $C_f > 0$. При наличии информации вида (2.3.9) матрицу V_η можно определить соотношением (2.3.10). При отсутствии информации о числовых характеристиках погрешностей η_i матрицу W_f можно задать диагональной. Ненулевые элементы такой матрицы интерпретируются как *весовые множители, определяющие значимость (или информативность) соответствующих проекций вектора правой части \tilde{f}* .

В предельном случае (соответствующем отсутствию информации об искомом решении и шуме измерения) матрицы W_f и W_ϕ задаются единичными, т.е.

$$W_f = I_{N \times N}; \quad W_\phi = I_{M \times M}, \quad (2.3.20)$$

и приходим к простейшему варианту функционалу А.Н. Тихонова [66; 67]:

$$F_\alpha[\varphi] = \|\tilde{f} - K\varphi\|^2 + \alpha \|\varphi\|^2, \quad (2.3.21)$$

точка минимума которого φ_α находится из СЛАУ вида

$$(K^T K + \alpha I) \varphi_\alpha = K^T \tilde{f}. \quad (2.3.22)$$

2.3.3. Регуляризирующий SVD-алгоритм

Обратимся к системе уравнений (2.3.18) и вычислим решение этой системы, используя сингулярное разложение.

Предположим, что матрица W_f неотрицательно определена, симметрична и допускает представление

$$W_f = W_f^{1/2} \cdot W_f^{1/2}. \quad (2.3.23)$$

Тогда, используя сингулярное разложение

$$W_f^{1/2} K = U \Lambda V^T, \quad (2.3.24)$$

вектор φ_α регуляризованного решения СЛАУ можно представить как

$$\varphi_\alpha = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \cdot \langle u_j, W_f^{1/2} \tilde{f} \rangle \right] v_j, \quad (2.3.25)$$

где v_j , u_j – j -е столбцы матриц V , U соответственно: p – ранг (или практический ранг) матрицы K . Из (2.3.25) непосредственно следует матричное представление решения φ_α :

$$\varphi_\alpha = V_p R_{p\alpha} U_p^T W_f^{1/2} \tilde{f}, \quad (2.3.26)$$

где V_p – матрица размера $M \times p$, составленная из p первых столбцов матрицы V ; U_p – матрица размера $N \times p$, составленная из p первых столбцов матрицы U ; $R_{p\alpha}$ – диагональная матрица размера $p \times p$ следующей структуры:

$$R_{p\alpha} = \begin{vmatrix} \frac{\lambda_1}{\lambda_1^2 + \alpha m(\lambda_1)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{\lambda_2}{\lambda_2^2 + \alpha m(\lambda_2)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{\lambda_p}{\lambda_p^2 + \alpha m(\lambda_p)} \end{vmatrix}. \quad (2.3.27)$$

Функция $m(\lambda)$ является невозрастающей функцией, например

$$m(\lambda) = \frac{1}{\lambda^\gamma}, \quad (2.3.28)$$

где $\gamma \geq 0$. Если $\gamma = 0$, то $W_\varphi = I$, что соответствует регуляризации нулевого порядка. Чем больше значение γ , тем в большей степени проекции вектора φ_α взаимосвязаны между собой. Это

обусловлено тем, что векторы v_j , соответствующие малым λ_j и имеющие осциллирующие проекции (см. рис. 2.2), не войдут в решение φ_α из-за пренебрежимо малого значения множителя $\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)}$.

Возникает вопрос: какой системе уравнений соответствует решение φ_α , допускающее представление (2.3.25)?

Утверждение 2.3.1. Вектор φ_α , имеющий представление (2.3.25) или (2.3.26), является решением системы (2.3.18), в которой матрица W_φ является симметричной и определяется как

$$W_\varphi = V_p \text{diag} \{m(\lambda_1), \dots, m(\lambda_p)\} V_p^T. \quad (2.3.29)$$

♣

Используя разложение (2.3.24), вектор φ_α , являющийся решением системы (2.3.3), можно записать в матричном виде

$$\varphi_\alpha = V_p R_{p\alpha} \left(U_p^T W_f^{1/2} \tilde{f} + \alpha V_p \text{diag} \left\{ \frac{m(\lambda_1)}{\lambda_1}, \dots, \frac{m(\lambda_p)}{\lambda_p} \right\} V_p^T \omega_\varphi \right), \quad (2.3.30)$$

или

$$\varphi_\alpha = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j \cdot \langle u_j, W_f^{1/2} \tilde{f} \rangle}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} + \frac{\alpha m(\lambda_j) \cdot \langle v_j, \omega_\varphi \rangle}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \right] v_j = \sum_{j=1}^p x_{\alpha j} \cdot v_j. \quad (2.3.31)$$

Нетрудно видеть, что для малых сингулярных чисел λ_j первое слагаемое становится пренебрежимо малым, а второе слагаемое будет равно $\langle v_j, \omega_\varphi \rangle$. Следовательно, проекции $x_{\alpha j}$ для таких λ_j будут равны проекциям пробного решения $\langle v_j, \omega_\varphi \rangle$. Таким образом, пробное решение формирует проекции $x_{\alpha j}$, соответствующие очень малым λ_j . Очевидно, что при нулевом векторе $\omega_\varphi = 0_M$ эти проекции $x_{\alpha j}$ также будут равны нулю.

Имеет место следующее

Утверждение 2.3.2. Вектор φ_α , имеющий представление (2.3.30) или (2.3.31), является решением системы (2.3.3), в которой матрица W_φ является симметричной и определяется выражением (2.3.29). ♣

2.3.4. Систематическая и случайная ошибки решения φ_α

Как и ранее определим ошибку решения φ_α , определяемым вектором (2.3.25)

$$\varepsilon_\alpha = \varphi_\alpha - \bar{\varphi}^+,$$

где $\bar{\varphi}^+$ – нормальное псевдорешение системы (2.2.1) при точной правой части \bar{f} . Как и прежде, вектор ε_α представим суммой векторов случайной ξ_α и систематической b_α ошибок:

$$\varepsilon_\alpha = \varphi_\alpha - \bar{\varphi}_\alpha^+ + \bar{\varphi}_\alpha^+ - \bar{\varphi}^+ = \xi_\alpha + b_\alpha. \quad (2.3.32)$$

Вектор $b_\alpha = M_\eta[\varepsilon_\alpha]$ можно назвать смещением решения φ_α . Для вектора φ_α , определяемого системой уравнений (2.3.18), систематическая ошибка b_α имеет вид

$$b_\alpha = -\alpha(K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} W_\varphi \bar{\varphi}^+, \quad (2.3.33)$$

а для вектора φ_α , определяемого системой уравнений (2.3.3), –

$$b_\alpha = \alpha(K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} W_\varphi (\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+). \quad (2.3.34)$$

Для доказательства (2.3.34) представим решение $\bar{\varphi}_\alpha$ в виде:

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_\alpha &= (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} (K^T W_f \bar{f} + \alpha W_\varphi \omega_\varphi) = \\ &= (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} (K^T W_f K \bar{\varphi}^+ + \alpha W_\varphi \omega_\varphi + \alpha W_\varphi \bar{\varphi}^+ - \alpha W_\varphi \bar{\varphi}^+) = \\ &= (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} ((K^T W_f K + \alpha W_\varphi) \bar{\varphi}^+ + \alpha W_\varphi (\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+)) = \end{aligned}$$

$$= \bar{\varphi}^+ + \alpha(K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} W_\varphi (\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+).$$

Тогда из определения $b_\alpha = \bar{\varphi}_\alpha - \bar{\varphi}^+$ следует (2.3.34). Выражение (2.3.33) получается из (2.3.34) заменой $\omega_\varphi = 0_M$.

Вектор

$$\xi_\alpha = \varepsilon_\alpha - M_\eta[\varepsilon_\alpha] = \varepsilon_\alpha - b_\alpha \quad (2.3.35)$$

является случайным вектором с нулевым средним и определяется выражением

$$\xi_\alpha = (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T W_f \eta. \quad (2.3.36)$$

Ковариационная матрица $V_{\xi_\alpha} = M[\xi_\alpha \xi_\alpha^T]$ этого вектора определяется выражением:

$$V_{\xi_\alpha} = (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T W_f V_\eta W_f K (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1}, \quad (2.3.37)$$

где V_η – ковариационная матрица вектора погрешностей η .

Среднеквадратическую ошибку решения φ_α определим функционалом

$$\Delta(\alpha) = M_\eta[\|\varphi_\alpha - \bar{\varphi}^+\|^2], \quad (2.3.38)$$

и ее можно записать (с учетом $M[\xi_\alpha] = 0_N$) в виде:

$$\Delta(\alpha) = \|b_\alpha\|^2 + M[\|\xi_\alpha\|^2] = \|b_\alpha\|^2 + Sp[V_{\xi_\alpha}], \quad (2.3.39)$$

где $Sp[V_{\xi_\alpha}]$ – след ковариационной матрицы V_{ξ_α} .

Из соотношений (2.3.33)–(2.3.34), (2.3.37) следует основное противоречие регуляризирующих алгоритмов: *при уменьшении параметра регуляризации α систематическая ошибка b_α уменьшается, но увеличивается случайная ошибка ξ_α . При увеличении α происходит обратное.* Следовательно, существует такое значение α_{opt} (оптимальный параметр регуляризации), при котором $\Delta(\alpha)$ достигает минимального значения. Для графиче-

ской иллюстрации этого противоречия на рис. 2.8 приведены графики зависимостей

$$\frac{\|b_\alpha\|^2}{\|\varphi\|^2} - \text{кривая 1}; \quad \frac{M[\|\xi_\alpha\|^2]}{\|\varphi\|^2} - \text{кривая 2}; \quad \frac{\Delta(\alpha)}{\|\varphi\|^2} - \text{кривая 3}$$

от параметра регуляризации α . Регуляризованное решение (2.3.25) строилось для СЛАУ, матрица которой имела размеры 100×30 и число обусловленности $3 \cdot 10^{10}$, а дисперсия погрешностей задания правой части соответствовала относительному уровню шума $(M[\|\eta\|^2])^{1/2} / \|f\| = 0.05$. Из рисунка видно, что $\alpha_{opt} \approx 3$.

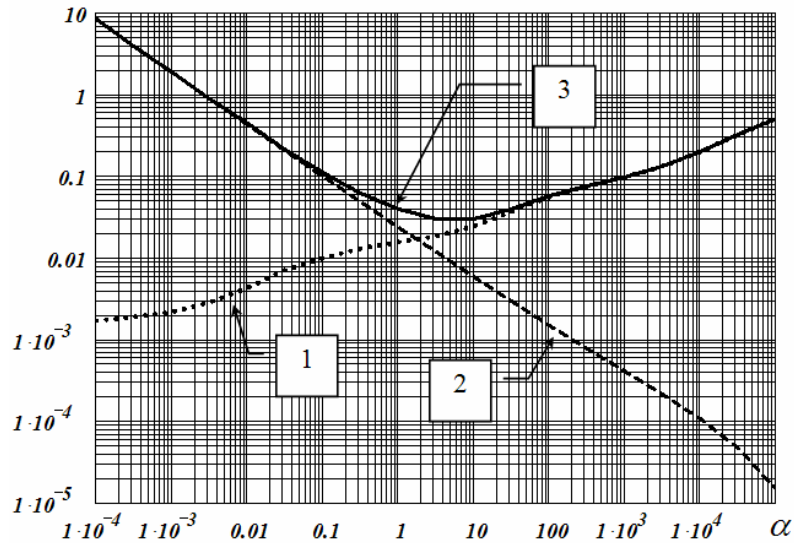


Рис. 2.8. Зависимости составляющих ошибки решения от α

Значение α_{opt} зависит от вектора $\bar{\varphi}^+$ и ковариационной матрицы V_η . Для установления такой зависимости предположим, что $V_\eta = \sigma_\eta^2 C_\eta$, $W_f = V_\eta^{-1}$, $\bar{\varphi}^+ = V \bar{x}^+$. Сравнивая (2.2.39) и (2.3.25), видим, что оптимальность алгоритма (2.3.25) имеет место, если

$$\alpha_{opt} m_{opt}(\lambda_j) = q_{opt j} = \frac{\sigma_\eta^2}{(\bar{x}_j^+)^2}. \quad (2.3.40)$$

Величина $m_{opt}(\lambda_j)$ зависит от \bar{x}_j^+ и не зависит от σ_η^2 . Поэтому справедлива зависимость

$$\alpha_{opt} = C_\alpha \sigma_\eta^2, \quad (2.3.41)$$

где C_α – константа, не зависящая от σ_η^2 , т.е. оптимальный параметр регуляризации имеет порядок σ_η^2 .

Из-за незнания $\bar{\varphi}^+$ (или \bar{x}^+) невозможно точно вычислить α_{opt} , как решение вариационной задачи на минимум $\Delta(\alpha)$. Если невозможно «точно» вычислить значение α_{opt} , то возникает важный для практических применений регуляризирующих алгоритмов вопрос: *можно ли оценить (с приемлемой точностью) оптимальный параметр регуляризации, используя для этого доступную при построении регуляризирующего алгоритма информацию?*

Ответ на этот вопрос дается в следующем параграфе.

§ 2.4. Алгоритмы выбора параметра регуляризации

Выбор величины параметра регуляризации является основной проблемой при использовании регуляризирующих алгоритмов решения СЛАУ на практике. Поэтому в данном параграфе рассматриваются несколько алгоритмов, позволяющих оценить (более или менее удачно) значение оптимального параметра регуляризации α_{opt} при различной априорной информации о погрешностях правой части СЛАУ. Приведенные результаты численных исследований этих алгоритмов выбора позволяют дать рекомендации по применению алгоритмов.

2.4.1. Выбор параметра регуляризации на основе критерия оптимальности

Введем оператор невязки $E(\alpha) = I - KT(\alpha)$, позволяющий представить вектор невязки $e_\alpha = \tilde{f} - K\varphi_\alpha$ в виде $e_\alpha = E(\alpha)\tilde{f}$. Здесь $T(\alpha)$ – матричный оператор, который будет определен ниже. Вектор невязки является случайным, и поэтому определим матрицу вторых моментов $V_e(T) = M[e_T e_T^T]$.

Имеет место следующее утверждение:

Утверждение 2.4.1. Необходимым и достаточным условие оптимальности оператора $T(\alpha)$, строящего решение $\varphi_\alpha = T(\alpha)\tilde{f}$, где $\tilde{f} = K\varphi + \eta$, является матричное тождество:

$$V_e(\alpha) = V_\eta E^T(\alpha), \quad (2.4.1)$$

где V_η – ковариационная матрица вектора погрешностей η . ♣

В качестве α_{opt} берется такое значение α_w , при котором принимается основная статистическая гипотеза:

$$H_0: V_e(\alpha) = V_\eta E^T(\alpha). \quad (2.4.2)$$

Эта гипотеза будет отвергаться в пользу альтернативной гипотезы

$$H_1: V_e(\alpha) \neq V_\eta E^T(\alpha), \quad (2.4.3)$$

если невыполнение тождества (2.4.2) обусловлено не случайными ошибками, возникающими из-за оценивания $V_e(\alpha)$ по одной реализации, а систематическими, обусловленными не оптимальностью параметра регуляризации. Таким образом, значение α_w можно рассматривать как оценку оптимального параметра регуляризации α_{opt} .

Для проверки гипотезы (2.4.2) введем статистику [11; 19; 93]

$$\rho_w(\alpha) = e_\alpha^T [V_\eta E^T(\alpha)]^{-1} e_\alpha, \quad (2.4.4)$$

Существование матрицы $[E^T(\alpha)]^{-1}$ позволяет переписать $\rho_w(\alpha)$ в виде

$$\rho_w(\alpha) = \tilde{f}^T V_\eta^{-1} e_\alpha. \quad (2.4.5)$$

Для исследования свойств статистики $\rho_w(\alpha)$ конкретизируем структуру оператора невязки $E(\alpha)$. Предположим, что решение φ_α определяется из системы уравнений

$$(K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f}. \quad (2.4.6)$$

Тогда соответствующий оператор невязки примет вид:

$$E(\alpha) = I - K(K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T V_\eta^{-1}, \quad (2.4.7)$$

и его можно записать как [19]:

$$E(\alpha) = V_\eta (V_\eta + \alpha^{-1} K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1}. \quad (2.4.8)$$

Тогда статистика $\rho_w(\alpha)$ определяется выражением

$$\rho_w(\alpha) = \tilde{f}^T (V_\eta + \alpha^{-1} K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1} \tilde{f}. \quad (2.4.9)$$

Утверждение 2.4.2. Если матрица V_η не вырождена, то:

а) для любого $\alpha > 0$ статистика $\rho_w(\alpha)$ есть сумма квадратов N случайных величин;

б) для значений α_w , при которых принимается гипотеза (2.4.2), математическое ожидание $M[\rho_w(\alpha)] = N$.

Первое свойство $\rho_w(\alpha)$ непосредственно следует из (2.4.9). Для доказательства второго используем выражение

$$M[\rho_w(\alpha)] = Sp \left[(V_\eta E^T(\alpha))^{-1} M[e(\alpha) e^T(\alpha)] \right],$$

справедливое для любого $\alpha > 0$. Для $\alpha = \alpha_w$ имеем

$$M[\rho_w(\alpha)] = Sp\left[\left(V_\eta E^T(\alpha)\right)^{-1} \left(V_\eta E^T(\alpha)\right)\right] = Sp[I_N] = N,$$

где I_N – единичная матрица размера $N \times N$. ♣

Доказанные свойства статистики $\rho_w(\alpha)$ позволяют аппроксимировать распределение $\rho_w(\alpha)$ при $\alpha = \alpha_w$ χ^2 -распределением с N степенями свободы. Тогда проверка гипотезы (2.4.2) сводится к проверке предположения: *подчиняется ли величина $\rho_w(\alpha)$ χ^2 -распределению с N степенями свободы*. Для этого построим интервал

$$\Theta_N(\beta) = [\mathcal{G}_N(\beta/2), \mathcal{G}_N(1-\beta/2)], \quad (2.4.10)$$

где $\mathcal{G}_N(\beta/2)$ – квантиль χ^2 -распределения уровня $\beta/2$. Если $\rho_w(\alpha)$ попадает в интервал (2.4.10), т.е. выполняется неравенство

$$\mathcal{G}_N(\beta/2) \leq \rho_w(\alpha) \leq \mathcal{G}_N(1-\beta/2), \quad (2.4.11)$$

то гипотеза (2.4.2) может быть принята с вероятностью ошибки первого рода, равной β . Следовательно, значение α_w , при котором выполняется (2.4.11), является оценкой для α_{opt} .

Возникает вопрос: «Как вычислить значение α_w ?». Ниже приводится эффективный алгоритм вычисления α_w , использующий сингулярное разложение матрицы системы. Алгоритм нахождения α_w без сингулярного разложения приведен в работе [11, с. 166–167].

2.4.2. Алгоритм выбора параметра по критерию оптимальности

Предположим, что:

- ковариационная матрица V_η допускает представление

$V_\eta = \sigma_\eta^2 C_\eta$ (см. (2.2.21)), и определим сингулярное разложение

$$C_\eta^{-1/2} K = U \Lambda V^T, \quad (2.4.12)$$

допуская при этом, что сингулярные числа λ_j упорядочены по убыванию, т.е. $\lambda_j \geq \lambda_{j+1}$ и $\lambda_j = 0, j = p+1, \dots, M$, где p – ранг (или практический ранг) матрицы системы;

- регуляризованное решение φ_α представимо в виде:

$$\varphi_\alpha = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \cdot \langle u_j, C_\eta^{-1/2} \tilde{f} \rangle \right] v_j, \quad (2.4.13)$$

где $m(\lambda)$ невозрастающая функция (см. например, (2.3.28)).

Это представление следует из (2.3.25) при $W_f = C_\eta^{-1}$.

Нетрудно показать, что вектор φ_α является решением системы

$$(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T C_\eta^{-1} \tilde{f}, \quad (2.4.14)$$

в которой матрица W_φ выражается соотношением:

$$W_\varphi = V_p \text{diag}\{m(\lambda_1), m(\lambda_2), \dots, m(\lambda_M)\} V_p^T,$$

где V_p – матрица размера $M \times p$, составленная из p первых столбцов матрицы V , входящей в разложение (2.4.12).

С учетом (2.2.21) статистику $\rho_w(\alpha)$ можно записать в виде

$$\rho_w(\alpha) = \frac{1}{\sigma_\eta^2} \left(C_\eta^{-1/2} \tilde{f} \right)^T \left(C_\eta^{-1/2} e_\alpha \right), \quad (2.4.15)$$

где векторы $C_\eta^{-1/2} \tilde{f}$, $C_\eta^{-1/2} e_\alpha$ допускают представление:

$$C_\eta^{-1/2} \tilde{f} = \sum_{j=1}^N \langle u_j, C_\eta^{-1/2} \tilde{f} \rangle \cdot u_j = \sum_{j=1}^N \tilde{y}_j u_j, \quad (2.4.16)$$

$$C_\eta^{-1/2} e_\alpha = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \tilde{y}_j \right] u_j + \sum_{j=p+1}^N \tilde{y}_j u_j \quad (2.4.17)$$

где $\tilde{y}_j = \langle u_j, C_\eta^{-1/2} \tilde{f} \rangle$. Тогда

$$\rho_w(\alpha) = \frac{1}{\sigma_\eta^2} \left[\sum_{j=1}^p \frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \tilde{y}_j^2 + \sum_{j=p+1}^N \tilde{y}_j^2 \right]. \quad (2.4.18)$$

Видно, что от параметра регуляризации α зависит только первая сумма в (2.4.18). Используя свойство ортогональности матрицы U и (2.4.16), можно показать справедливость выражения:

$$M[\rho_w(\alpha)] = M \left[\frac{1}{\sigma_\eta^2} \sum_{j=1}^p \frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \tilde{y}_j^2 \right] + N - p. \quad (2.4.19)$$

Введем $\gamma = 1/\alpha$ и функции

$$R_w(\gamma) = \frac{1}{\sigma_\eta^2} \cdot \sum_{j=1}^p \frac{m(\lambda_j)}{\gamma \lambda_j^2 + m(\lambda_j)} \cdot \tilde{y}_j^2, \quad (2.4.20)$$

$$R'_w(\gamma) = \frac{\partial R_w(\gamma)}{\partial \gamma} = -\frac{1}{\sigma_\eta^2} \cdot \sum_{j=1}^p \frac{\lambda_j^2 m(\lambda_j)}{[\gamma \lambda_j^2 + m(\lambda_j)]^2} \cdot \tilde{y}_j^2. \quad (2.4.21)$$

Тогда значение α_w , при котором принимается гипотеза (2.4.2) (гипотеза об оптимальности параметра регуляризации), вычисляется как

$$\alpha_w = 1/\gamma_w, \quad (2.4.22)$$

где γ_w удовлетворяет условию:

$$\mathcal{G}_p(\beta/2) \leq R_w(\gamma) \leq \mathcal{G}_p(1-\beta/2), \quad (2.4.23)$$

а $\mathcal{G}_p(\beta/2)$, $\mathcal{G}_p(1-\beta/2)$ – квантили χ^2 -распределения с p степенями свободы уровней $\beta/2$, $1-\beta/2$ соответственно.

Для вычисления γ_w используем итерационную процедуру ньютоновского типа:

$$\gamma^{(n)} = \gamma^{(n-1)} - \frac{R_w(\gamma^{(n-1)}) - p}{R'_w(\gamma^{(n-1)})}, \quad n=1,2,\dots, \quad (2.4.24)$$

с начальным значением $\gamma^{(0)} \sim 10^{-15}$. В качестве γ_w принимается значение $\gamma^{(n)}$, удовлетворяющее (2.4.23). Заметим, что эта процедура решает нелинейное уравнение $R_w(\gamma) = p$, но момент останова определяется условием (2.4.23).

Утверждение 2.4.3. Если выполняется условие

$$\frac{1}{\sigma_\eta^2} \sum_{j=1}^p \tilde{y}_j^2 > \mathcal{G}_p(1-\beta/2), \quad (2.4.25)$$

то существует $\gamma_w > 0$, удовлетворяющее условию (2.4.23) и вычисляемое процедурой (2.4.24).

Сходимость процедуры (2.4.24) следует из очевидных свойств функций $R_w(\gamma)$, $R'_w(\gamma)$ (см. (2.4.20), (2.4.21)) $R_w(\gamma) > 0$, $R'_w(\gamma) < 0$ для любых $\gamma > 0$. Условие (2.4.25) гарантирует существование значения γ , удовлетворяющее (2.4.23). ♣

Замечание 2.4.1. Условие (2.4.25) может быть заменено условием

$$\tilde{f}^T V_\eta^{-1} \tilde{f} > \mathcal{G}_N(1-\beta/2), \quad (2.4.26)$$

сформулированным для исходного вектора \tilde{f} правой части решаемой СЛАУ. ♦

Замечание 2.4.2. Невыполнение условий (2.4.25) или (2.4.26) означает, что правая часть содержит только погрешности η_i и, следовательно, с вероятностью β ошибки первого рода можно принять гипотезу о том, что решение φ равно нулевому вектору (т.е. $\gamma_w = 0$, $\alpha_w = \infty$). ♦

В качестве иллюстрации на рис. 2.9 показан график функции $R_w(\gamma)$ (кривая 1), относительной ошибки $\|\varphi_{1/\gamma} - \bar{\varphi}^+\|^2 / \|\bar{\varphi}^+\|^2$ (кривая 2), а также границы $\mathcal{G}_{24}(0.05)$, $\mathcal{G}_{24}(0.95)$, вычисленные по формулам (2.4.26) (кривые 3, 4 соответственно). В этом вы-

числителем эксперименте размер матрицы K равен 100×30 , число обусловленности $3 \cdot 10^{10}$, относительный уровень погрешности правой части $\delta_f = \|\eta\|/\|f\| = 0.05$. В качестве p использовался практический ранг $p_{\Pi} = 24$. Видим, что все значения γ_w (для которых значения $R_w(\gamma)$ попадают в интервал (2.4.23)) находятся в области минимума относительной ошибки регуляризованного решения.

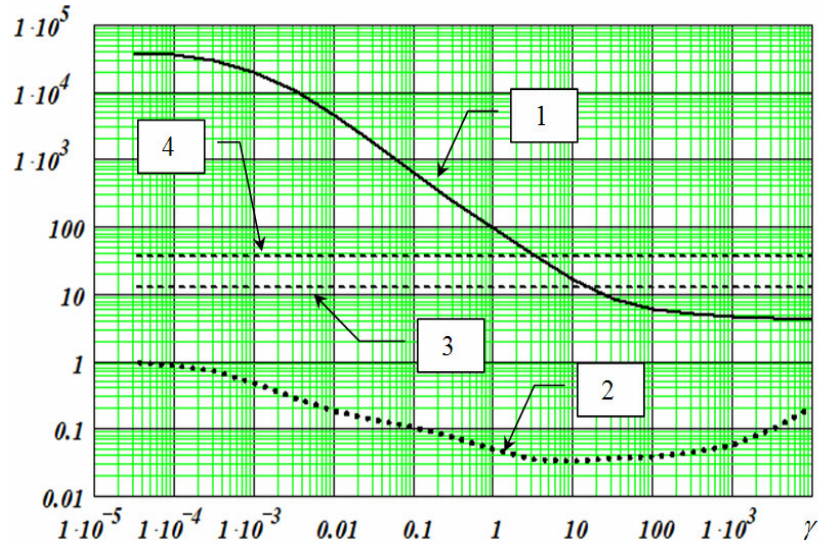


Рис. 2.9. Графики $R_w(\gamma)$ и относительной ошибки решения

Рассмотрим сходимость решения φ_{α_w} , построенного при $\alpha = \alpha_w$. Для этого введем функцию:

$$\rho_{p_w}(\alpha) = R_w(1/\alpha) = \frac{\alpha}{\sigma_{\eta}^2} \cdot \sum_{j=1}^p \frac{m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \cdot \tilde{y}_j^2. \quad (2.4.27)$$

Заметим, что граничные точки $\mathcal{G}_p(\beta/2)$, $\mathcal{G}_p(1-\beta/2)$ не зависят от дисперсии σ_{η}^2 , а зависят от вероятности β ошибки первого рода и ранга p матрицы системы (или практического ранга

p_{Π}). Поэтому для попадания величин $\rho_{p_w}(\alpha)$, $R_w(1/\alpha)$ в интервал $[\mathcal{G}_p(\beta/2), \mathcal{G}_p(1-\beta/2)]$ необходимо, чтобы α изменялось с такой же скоростью, как уменьшается дисперсия σ_{η}^2 , т.е. $\alpha_w \sim \sigma_{\eta}^2$ (см. 2.4.27). Тогда из выражения (2.3.41) следует, что α_w имеет тот же порядок изменения, как и α_{opt} . Следовательно, скорость сходимости решения φ_{α_w} будет такой же, как у решения φ_{α} , построенного при оптимальном параметре регуляризации α_{opt} .

2.4.3. Алгоритм выбора параметра по статистическому варианту принципа невязки

Принцип невязки был предложен В.А. Морозовым [51], а затем широко использовался для выбора параметра регуляризации [39; 54; 80; 88; 90; 91], в том числе и при неточно заданном операторе задачи (принцип обобщенной невязки [37; 38; 71; 77; 78]). Статистический вариант этого принципа основывается на следующих рассуждениях. При завышенном значении параметра регуляризации α вектор невязки e_{α} имеет значительную случайную составляющую, из-за которой ковариационная матрица невязки $V_e(\alpha)$ больше матрицы ковариационной матрицы V_{η} вектора погрешностей η . Уменьшая α , нужно достигнуть такого значения, при котором статические свойства вектора невязки «совпадали» со свойствами вектора η . Статические свойства вектора будем определять его ковариационной матрицей. Для вычисления такого значения (которое обозначим как α_V) вновь обратимся к проверке статической гипотезы

$$H_0 : V_e(\alpha) = V_{\eta} \quad (2.4.28)$$

и введем статистику

$$\rho_V(\alpha) = e_{\alpha}^T V_{\eta}^{-1} e_{\alpha}.$$

В качестве α_V принимает такое значение α , при котором $\rho_V(\alpha)$ подчиняется χ^2 -распределению с N степенями свободы. По аналогии с вычислением α_W введем $\gamma = 1/\alpha$ и функции

$$R_V(\gamma) = \frac{1}{\sigma_\eta^2} \cdot \sum_{j=1}^p \left[\frac{m(\lambda_j)}{\gamma \lambda_j^2 + m(\lambda_j)} \right]^2 \cdot \tilde{y}_j^2$$

$$R'_V(\gamma) = \frac{\partial R_V(\gamma)}{\partial \gamma} = -\frac{2}{\sigma_\eta^2} \cdot \sum_{j=1}^p \frac{\lambda_j^2 m^2(\lambda_j)}{[\gamma \lambda_j^2 + m(\lambda_j)]^3} \cdot \tilde{y}_j^2.$$

Тогда значение α_V , при котором принимается гипотеза (2.4.28), вычисляется как

$$\alpha_V = 1/\gamma_V,$$

где γ_V удовлетворяет условию

$$\mathcal{G}_p(\beta/2) \leq R_V(\gamma_V) \leq \mathcal{G}_p(1-\beta/2), \quad (2.4.29)$$

а $\mathcal{G}_p(\beta/2)$, $\mathcal{G}_p(1-\beta/2)$ – квантили χ^2 -распределения с p степенями свободы уровней $\beta/2$, $1-\beta/2$ соответственно.

Для вычисления γ_V вновь используем итерационную процедуру ньютоновского типа:

$$\gamma^{(n)} = \gamma^{(n-1)} - \frac{R_V(\gamma^{(n-1)}) - p}{R'_V(\gamma^{(n-1)})}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.4.30)$$

с начальным значением $\gamma^{(0)} \sim 10^{-15}$. В качестве γ_V принимается значение $\gamma^{(n)}$, удовлетворяющее (2.4.29). По аналогии с утверждением 2.4.3 доказываем

Утверждение 2.4.4. Если выполняется условие

$$\frac{1}{\sigma_\eta^2} \sum_{j=1}^p \tilde{y}_j^2 > \mathcal{G}_p(1-\beta/2),$$

то существует $\gamma_V > 0$, удовлетворяющее условию (2.4.30) и вычисляемое процедурой (2.4.31).

Рассмотрим сходимость решения φ_{α_V} , построенного при $\alpha = \alpha_V$. Для этого введем функцию:

$$\rho_{pV}(\alpha) = R_V(1/\alpha) = \frac{\alpha^2}{\sigma_\eta^2} \cdot \sum_{j=1}^p \left[\frac{m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \right]^2 \cdot \tilde{y}_j^2. \quad (2.4.31)$$

Заметим, что граничные точки $\mathcal{G}_p(\beta/2)$, $\mathcal{G}_p(1-\beta/2)$ не зависят от дисперсии σ_η^2 , а зависят от вероятности β ошибки первого рода и ранга p матрицы системы (или практического ранга p_Π). Поэтому для попадания величин $\rho_{pV}(\alpha)$, $R_V(1/\alpha)$ в интервал $[\mathcal{G}_p(\beta/2), \mathcal{G}_p(1-\beta/2)]$ необходимо (это следует из (2.4.31)), чтобы α^2 изменялось с такой же скоростью, как уменьшается дисперсия σ_η^2 , т.е. $\alpha_V \sim \sigma_\eta$. Это отличается от скорости изменения оптимального параметра регуляризации $\alpha_{opt} \sim \sigma_\eta^2$ (см. (2.3.41)).

Следует заметить, что выбор параметра по принципу невязки приводит к завышенным (по сравнению с α_{opt}) значениям.

Для иллюстрации этого на рис. 2.10 показаны графики функции

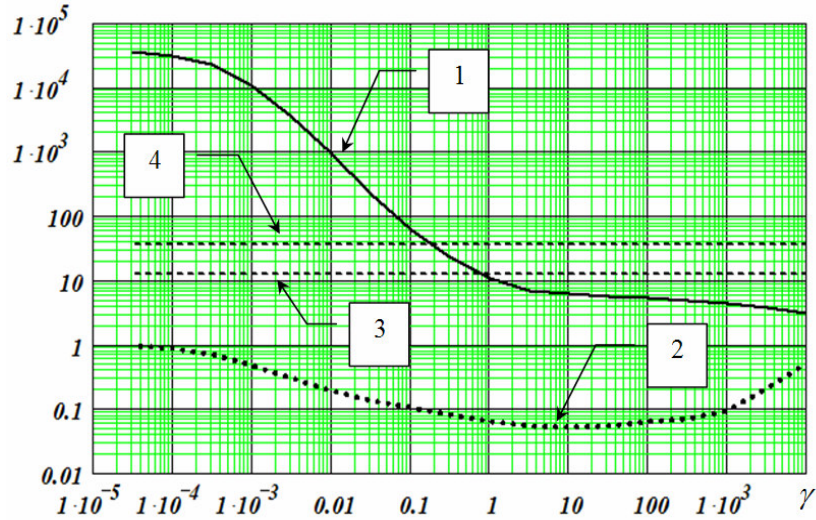


Рис. 2.10. Графики $R_V(\gamma)$ и относительной ошибки решения

$R_V(\gamma)$ (кривая 1), относительной ошибки $\|\varphi_{1/\gamma} - \bar{\varphi}^+\|^2 / \|\bar{\varphi}^+\|^2$ (кривая 2), а также границы $\mathcal{G}_{24}(0.05)$, $\mathcal{G}_{24}(0.95)$, вычисленные по формулам (2.4.31) (кривые 3, 4 соответственно). В этом вычислительном эксперименте размер матрицы K равен 100×30 , число обусловленности $3 \cdot 10^{10}$, относительный уровень погрешности правой части $\delta_f = \|\eta\|/\|f\| = 0.05$. В качестве p использовался практический ранг $p_{\Pi} = 24$. Видим, что все значения γ_V (для которых значения $R_V(\gamma)$ попадают в интервал (2.4.28)) смещены влево от области минимума относительной ошибки регуляризованного решения, а это соответствует завышенным (по сравнению с α_{opt}) значениям параметра регуляризации.

Рассмотренные два алгоритма оценивания α_{opt} имеют существенный недостаток: требуется задание дисперсии σ_{η}^2 , которая часто неизвестна на практике. Хотя ниже и будут предложены

две несмещенные оценки для дисперсии σ_{η}^2 , сейчас рассмотрим алгоритм выбора α , не требующий задания σ_{η}^2 .

2.4.4. Выбор параметра методом перекрестной значимости

Предположим, что корреляционная матрица шума измерений V_{η} неизвестна, но соседние проекции шума не коррелированы между собой, так что матрица V_{η} является диагональной. В этом случае регуляризованное решение φ_{α} определяется из системы уравнений

$$(K^T K + \alpha W_{\varphi}) \varphi_{\alpha} = K^T \tilde{f}. \quad (2.4.32)$$

Эта система получается из системы (2.3.18) при $W_f = I_N$ (или $V_{\eta} = I_N$). Для выбора параметра α , входящего в (2.4.33), обратимся к методу перекрестной значимости (cross-validation method, в дальнейшем обозначаемый как CV-метод). Этот метод получил широкое применение при построении сглаживающих сплайнов [83; 99], при решении интегральных уравнений I рода с разностным ядром [10; 30], а также при решении плохо обусловленных СЛАУ [20; 81]. Выбор параметра в CV-методе осуществляется из условия минимума функционала

$$U(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{i \in I_U} \left(\tilde{f}_i - \left\{ K \varphi_{\alpha}^{(i)} \right\}_i \right)^2, \quad (2.4.33)$$

где $\varphi_{\alpha}^{(i)}$ – решение, построенное по вектору $\tilde{f}^{(i)}$, полученному из вектора \tilde{f} путем удаления проекции \tilde{f}_i ; I_U – множество индексов, состоящее из значений $\{1, 2, \dots, N\}$. Величина α_U , доставляющая минимум $U(\alpha)$, применяется в качестве параметра регуляризации, выбранного по методу перекрестной значимости.

Заметим, что функцию $U(\alpha)$ можно рассматривать как ошибку предсказания проекций правой части по регуляризованному решению, построенному без учета этих проекций, и по-

этому CV-метод используется для выбора α при точно заданной матрице решений СЛАУ.

Минимизация $U(\alpha)$ требует многократных построений регуляризованных решений $\varphi_\alpha^{(i)}$, $i \in I_U$, для каждого значения α . Для преодоления этого недостатка был предложен обобщенный метод перекрестной значимости (GCV-метод), в котором ошибки предсказания суммируются с некоторыми весами и при специальном выборе этих весов минимизируемый функционал можно записать в виде:

$$U_G(\alpha) = \frac{\frac{1}{N} \sum (\tilde{f}_i - \{K\varphi_\alpha^{(i)}\}_i)^2}{\left[\frac{1}{N} Sp(I - A(\alpha)) \right]^2}, \quad (2.4.34)$$

где $Sp[\cdot]$ – след матрицы, а матрица $A(\alpha)$ размером $N \times N$ осуществляет отображение вектора \tilde{f} в вектор $K\varphi_\alpha$: $A(\alpha) = K(K^T K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T$. Значение α_U , доставляющее минимум функционалу (2.4.35), принимается в качестве параметра регуляризации, выбранному по обобщенному методу перекрестной значимости.

К недостаткам GCV-метода следует отнести большие вычислительные затраты, обусловленные необходимостью вычисления матрицы $A(\alpha)$ для каждого текущего значения α . Для преодоления этого недостатка используем сингулярное разложение для вычисления $U_G(\alpha)$. Как и прежде, регуляризованные решения будем находить в виде:

$$\varphi_\alpha = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \cdot \langle u_j, \tilde{f} \rangle \right] v_j^T, \quad (2.4.35)$$

где v_j , u_j – j -е столбцы матриц V , U , входящие в сингулярное разложение $K = U \Lambda V^T$. Тогда функционал (2.4.34) можно представить в виде [20]:

$$U_G(\alpha) = \frac{\frac{1}{N} \left\{ \sum_{j=1}^p \left[\frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \tilde{y}_j \right]^2 + \sum_{j=p+1}^N \tilde{y}_j^2 \right\}}{\left[\frac{1}{N} \sum_{j=1}^p \frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} + \frac{N-p}{N} \right]^2}, \quad (2.4.36)$$

где \tilde{y}_j – проекции вектора $\tilde{y} = U^T \tilde{f}$. Это представление функционала $U_G(\alpha)$ не требует обращения матрицы и для нахождения минимума позволяет использовать известные алгоритмы минимизации первого порядка, что существенно уменьшает вычислительные затраты для нахождения α_U .

В качестве иллюстрации на рис. 2.11 показаны графики зависимостей $U_G(\alpha)$ (кривая 1) и относительная ошибка $\|\varphi_{\alpha_U} - \bar{\varphi}^+\|^2 / \|\bar{\varphi}^+\|^2$ (кривая 2). Видим, что значение $\alpha_U \sim 0.1$ (точка минимума функционала (2.4.34)) находится в области минимума относительной ошибки. Однако из рисунка видно, что левая ветвь функционала имеет пологий характер, что затрудняет поиск точки минимума численными методами.

Численные исследования точности регуляризованных решений, построенных при $\alpha = \alpha_U$ проводятся ниже. Сразу же отметим, что в случае коррелированных проекций η_i (коэффициент корреляции по модулю больше 0.2) вычисляемые значения α_U на два и более порядков меньше α_{opt} . Это обуславливает существенное понижение точности решения φ_{α_U} по сравнению с оптимальным решением $\varphi_{\alpha_{opt}}$.

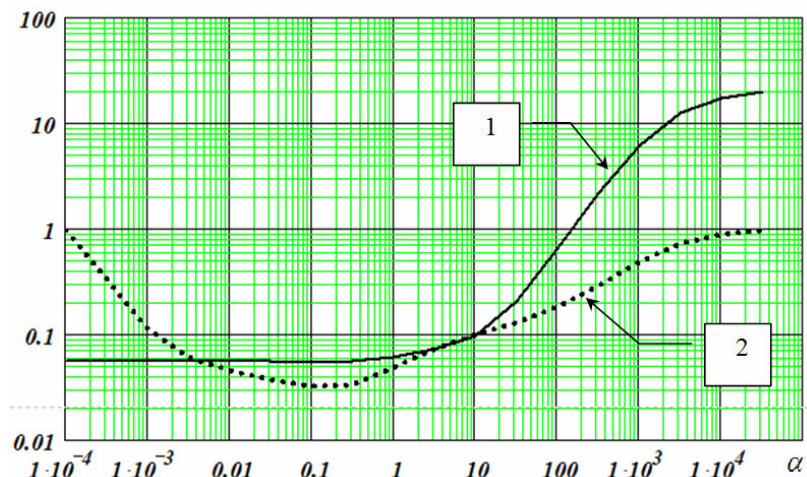


Рис. 2.11. Графики $U_G(\alpha)$ и относительной ошибки решения

2.4.5. Сравнение различных алгоритмов выбора параметра регуляризации

Для изучения рассмотренных алгоритмов выбора параметра регуляризации был проведен обширный вычислительный эксперимент с матрицами разного размера и с разными числами обусловленности. Из-за ограниченности места остановимся на результатах вычислительного эксперимента с матрицей K размером 100×30 и числом обусловленности $cond(K) = 3.0 \cdot 10^{10}$.

В качестве точного решения $\bar{\varphi}$ брались два вектора: вектор φ , соответствующий «гладкому» решению (рис. 2.12, кривая 1) и вектор φ , соответствующий «импульсному» решению (кривая 2). Проекции η_i вектора погрешностей правой части моделировались нормально распределенными случайными числами с нулевым средним и дисперсией, вычисляемой по формуле:

$$\sigma_{\eta}^2 = \left[\frac{\delta_f \cdot \max |f_i|}{2} \right]^2, \quad (2.4.37)$$

где $\delta_f = \|\eta\|/\|\bar{f}\|$ – задаваемый относительный уровень погрешностей. Коэффициент корреляции «соседних» проекций η_i задавался двумя значениями: 0 и 0.2.

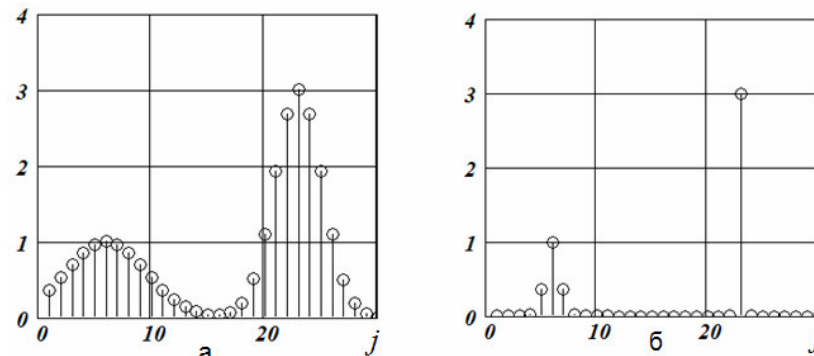


Рис. 2.12. Проекции векторов $\bar{\varphi}^+$

Для исследования точности регуляризованного решения φ_{α_A} (построенного при некотором $\alpha = \alpha_A$) введем коэффициент эффективности E_A этого параметра, определяемого соотношением [33; 36; 38]:

$$E_A = \frac{\|\varphi_{\hat{\alpha}_{opt}} - \bar{\varphi}\|}{\|\varphi_{\alpha_A} - \bar{\varphi}\|}, \quad (2.4.38)$$

где $\varphi_{\hat{\alpha}_{opt}}$ – решение, построенное при параметре регуляризации $\hat{\alpha}_{opt}$. Так как в вычислительном эксперименте искомое решение СЛАУ задается (известен вектор $\bar{\varphi}$), то $\hat{\alpha}_{opt}$ находится из условия минимума величины $\|\varphi_{\alpha} - \bar{\varphi}\|$. «Крышечка» над α указывает на отличие от параметра α_{opt} , минимизирующего СКО, определяемую функционалом $\Delta(\alpha) = M_{\eta} \left[\|\varphi_{\alpha} - \bar{\varphi}^+\|^2 \right]$. Поэтому при

решении СЛАУ только с одной реализацией правой части значения $\hat{\alpha}_{opt}$ является предпочтительным по сравнению с α_{opt} .

Так как решения φ_{α_A} , $\varphi_{\hat{\alpha}_{opt}}$, построенные по случайному вектору \tilde{f} , также являются случайными векторами, то величина E_A является случайной, а ее значения находятся в интервале $[0,1]$. Значения E_A , близкие к 1, говорят о незначительном проигрыше по точности решения φ_{α_A} по сравнению с оптимальным решением $\varphi_{\alpha_{opt}}$. Значения E_A меньше 0.3 говорят о существенном ухудшении точности решения φ_{α_A} .

По выборке $\{E_A^{(n)}\}$ объемом $N_{SAM} = 50$ вычислялись следующие числовые характеристики случайной величины E_A :

- минимальное значение \min_E ;
- среднее значение m_E ,

а также строилась гистограмма частот $\omega_\ell = n_\ell / N_{SAM}$, где n_ℓ — число значений величины E_A , попавших в ℓ -й интервал гистограммы. Выборка $\{E_A^{(n)}\}$ формировалась из значений E_A , вычисленных по формуле (2.4.38) для решений $\varphi_{\alpha_A}^{(n)}$, $\varphi_{\hat{\alpha}_{opt}}^{(n)}$, построенных по n -й реализации правой части $\tilde{f}^{(n)} = \bar{f} + \eta^{(n)}$. Случайные векторы $\eta^{(n)}$ имели нулевое среднее и одинаковые дисперсии проекций.

Первоначально проведем сравнение изложенных алгоритмов выбора параметра регуляризации по величине коэффициента эффективности. В табл. 2.2 приведены значения \min_E , m_E (затемненные ячейки) для четырех уровней погрешностей 0.001, 0.01, 0.05, 0.10 и разной гладкости решения $\bar{\varphi}$ (проекции η_i не коррелированы между собой). Для гладкого решения $m(\lambda) = 1/\lambda$, для импульсного $m(\lambda) = 1$. Ранг p задавался равным 24.

Таблица 2.2

		Параметр регуляризации		
		α_w	α_v	α_U
Гладкое решение	$\delta_f = 0.001$	0.438	0.074	0.012
		0.811	0.733	0.686
	$\delta_f = 0.01$	0.536	0.303	0.084
		0.833	0.783	0.639
	$\delta_f = 0.05$	0.524	0.404	0.081
		0.886	0.791	0.644
	$\delta_f = 0.10$	0.639	0.334	0.021
		0.894	0.815	0.579
Импульсное решение	$\delta_f = 0.001$	0.811	0.747	0.001
		0.962	0.911	0.742
	$\delta_f = 0.01$	0.872	0.827	0.001
		0.954	0.905	0.791
	$\delta_f = 0.05$	0.838	0.807	0.002
		0.977	0.902	0.887
	$\delta_f = 0.10$	0.847	0.819	0.008
		0.973	0.902	0.86

Анализ таблицы показывает:

- При построении φ_α для импульсного решения параметр α_w имеет лучшие (хотя и ненамного) характеристики по сравнению с α_v . Для гладкого решения преимущества параметра α_w становятся более заметными (особенно по характеристике \min_E).
- Параметр регуляризации α_U имеет числовые характеристики, которые существенно хуже числовых характеристик параметров α_w , α_v . Так, характеристика \min_E для этого пара-

метра может достигать порядка несколько тысячных. Это обусловлено тем, что α_U на 3–4 порядка меньше α_{opt} . Такие заниженные значения в свою очередь вызваны левой «пологой» ветвью функционала $U(\alpha)$ (см. рис. 2.13), по которой точка минимума может существенно «перемещаться» влево от значения α_{opt} .

На рис. 2.13 приведены гистограммы частот ω_i для коэффициента эффективности E_{α_W} (рис. 2.13 а) и коэффициента эффективности E_{α_U} (рис. 2.13 б), вычисленных для импульсного решения и $\delta_f = 0.05$. По второй гистограмме видно появление очень малых значений E_{α_U} , что является хорошей иллюстрацией к смещению α_U в сторону малых значений параметра регуляризации.

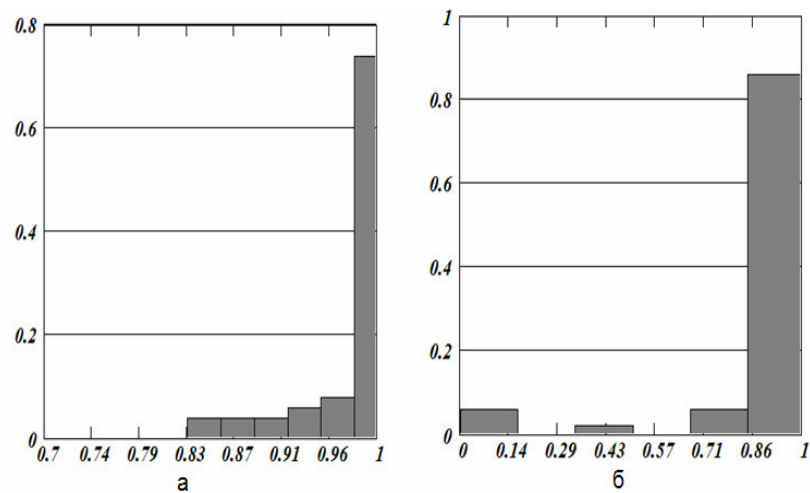


Рис. 2.13. Гистограммы величин E_{α_W} , E_{α_U}

В случае коррелированных проекций η_i (коэффициент корреляции 0.2) числовые характеристики параметров α_W , α_V , α_L

практически не меняются, хотя сами величины ошибок решения (в том числе и при $\alpha = \alpha_{opt}$) немного возрастают.

Для параметра α_U характерно существенное уменьшение среднего значения m_E . Это объясняется тем, что корреляция проекций шума правой части воспринимается как «низкочастотная» компонента искомого вектора (которую нужно «оставить» в решении) и приводит к смещению α_U в сторону меньших значений (в среднем на 2–3 порядка по сравнению с α_{opt}).

Обобщая результаты рассмотренного вычислительного эксперимента и результаты других вычислительных экспериментов, можно сделать вывод о предпочтительности выбора параметра регуляризации на основе критерия оптимальности (т.е. построении регуляризованного решения СЛАУ при $\alpha = \alpha_W$). Однако этот алгоритм требует задания дисперсии σ_η^2 , входящей в ковариационную матрицу $V_\eta = \sigma_\eta^2 \cdot C_\eta$ погрешностей задания правой части.

Требование задания дисперсии или уровня погрешности (т.е. нормы $\|\tilde{f} - \bar{f}\|$) присуще и другим алгоритмам выбора (например, принцип невязки и обобщенный принцип невязки), а также многим способам построения регуляризованных решений (метод невязки, байесовский регуляризирующий алгоритм и др.). Однако в большинстве случаев достоверная априорная информация об этих числовых характеристиках погрешностей задания правой части отсутствует. Для преодоления данного затруднения построим две оценки для дисперсии σ_η^2 , входящей в представление $V_\eta = \sigma_\eta^2 \cdot C_\eta$.

§ 2.5. Точностные характеристики и синтез регуляризирующих алгоритмов решения СЛАУ

В этом параграфе приводятся SVD-соотношения для вычисления числовых характеристик систематической и случайных ошибок, рассматриваются методы уменьшения систематической

ошибки. Вводятся точностные характеристики регуляризирующих алгоритмов и предлагаются процедуры синтеза регуляризирующих алгоритмов с заданными точностными характеристиками.

2.5.1. Вычисление числовых характеристик ошибок регуляризованного решения

Вновь обратимся к СЛАУ вида

$$K\varphi = f, \quad (2.5.1)$$

когда вместо точной правой части \bar{f} дан вектор $\tilde{f} = \bar{f} + \eta$, где η – случайный вектор погрешностей с характеристиками: средним $M[\eta] = 0_N$ и ковариационной матрицей $V_\eta = M[\eta\eta^T]$.

Предположим, что ковариационная матрица V_η допускает представление (см. п. 2.2.2):

$$V_\eta = \sigma_\eta^2 \cdot C_\eta, \quad (2.5.2)$$

и рассмотрим два регуляризованных решения:

$$1) \varphi_\alpha = (K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} [K^T C_\eta^{-1} \tilde{f} + \alpha W_\varphi \omega_\varphi]; \quad (2.5.3)$$

$$2) \varphi_\alpha = (K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T C_\eta^{-1} \tilde{f}. \quad (2.5.4)$$

Используя сингулярное разложение

$$C_\eta^{-1/2} K = U \Lambda V^T,$$

эти решения можно записать в виде (см. (2.3.31), (2.3.25)):

$$\varphi_\alpha = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j \langle u_j, C_\eta^{-1/2} \tilde{f} \rangle + \alpha m(\lambda_j) \langle v_j, \omega_\varphi \rangle}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \right] v_j; \quad (2.5.5)$$

$$\varphi_\alpha = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \langle u_j, C_\eta^{-1/2} \tilde{f} \rangle \right] v_j \quad (2.5.6)$$

при

$$W_\varphi = V_p \text{diag} \{m(\lambda_1), \dots, m(\lambda_p)\} V_p^T, \quad (2.5.7)$$

где p – ранг матрицы системы; u_j, v_j – соответствующие столбцы матриц U, V ; V_p – матрица, сформированная из p первых столбцов матрицы V .

Как и ранее (см. п. 2.3.4), ошибку этих решений $\varepsilon_\alpha = \varphi_\alpha - \bar{\varphi}^+$ представим суммой $\varepsilon_\alpha = b_\alpha + \xi_\alpha$ систематической $b_\alpha = \bar{\varphi}_\alpha - \bar{\varphi}^+$ и случайной $\xi_\alpha = \varphi_\alpha - \bar{\varphi}_\alpha$ ошибок, где $\bar{\varphi}_\alpha$ – регуляризованное решение, построенное по «точной» правой части \bar{f} .

Получим SVD-соотношения для вычисления характеристик этих ошибок, предполагая, что параметр регуляризации либо выбран (см. § 2.4), либо задан.

Утверждение 2.5.1. Вектор b_α и его числовая характеристика $\|b_\alpha\|^2$ определяются следующими соотношениями:

- для регуляризованного решения (2.5.5):

$$b_\alpha = \sum_{j=1}^M \left[\frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \cdot \langle v_j, \omega_\varphi - \bar{\varphi}^+ \rangle \right] v_j; \quad (2.5.8)$$

$$\|b_\alpha\|^2 = \sum_{j=1}^M \left[\frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \right]^2 \cdot \langle v_j, \omega_\varphi - \bar{\varphi}^+ \rangle^2; \quad (2.5.9)$$

- для регуляризованного решения (2.5.6):

$$b_\alpha = - \sum_{j=1}^M \left[\frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \cdot \langle v_j, \bar{\varphi}^+ \rangle \right] v_j; \quad (2.5.10)$$

$$\|b_\alpha\|^2 = \sum_{j=1}^M \left[\frac{\alpha m(\lambda_j)}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \right]^2 \cdot \langle v_j, \bar{\varphi}^+ \rangle^2. \quad (2.5.11)$$

Соотношения (2.5.8), (2.5.10) получаются из (2.3.34), (2.3.33) с учетом замены $W_f = C_\eta^{-1}$. Из ортонормированности векторов $\{v_j\}$ следуют выражения (2.5.9), (2.5.11). ♣

Вектор случайной ошибки ξ_α имеет SVD-представление:

$$\xi_\alpha = \sum_{j=1}^M \left[\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \langle u_j, C_\eta^{-1/2} \eta \rangle \right] v_j. \quad (2.5.12)$$

Утверждение 2.5.2. Элементы ковариационной матрицы $V_\xi(\alpha) = M[\xi_\alpha \xi_\alpha^T]$ определяются выражением

$$\{V_\xi(\alpha)\}_{km} = \sigma_\eta^2 \cdot \sum_{j=1}^p \frac{\lambda_j^2 \cdot v_{kj} \cdot v_{mj}}{[\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)]^2}, \quad (2.5.13)$$

а числовая характеристика $M[\|\xi_\alpha\|^2]$:

$$M[\|\xi_\alpha\|^2] = \sigma_\eta^2 \cdot \sum_{j=1}^p \frac{\lambda_j^2}{[\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)]^2}, \quad (2.5.14)$$

где v_{kj} – элемент матрицы V с индексами k, j .

Для доказательства используется SVD-представление k -й проекции вектора ξ_α :

$$\xi_{\alpha_k} = \sum_{j=1}^M \left[\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \langle u_j, C_\eta^{-1/2} \eta \rangle \right] v_{kj}, \quad (2.5.15)$$

которое следует из записи (2.5.12). Тогда

$$\begin{aligned} \{V_\xi(\alpha)\}_{k,m} &= M[\xi_{\alpha_k} \cdot \xi_{\alpha_m}] = \\ &= \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \frac{\lambda_j \cdot v_{kj}}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \cdot \frac{\lambda_i \cdot v_{mi}}{\lambda_i^2 + \alpha m(\lambda_i)} \langle u_i, C_\eta^{-1/2} M[\eta \eta^T] C_\eta^{1/2} u_j \rangle. \end{aligned} \quad (2.5.16)$$

Учитывая ортонормальность вектора u_i, u_j , а также (2.5.2), имеем:

$$\langle u_i, R_\eta^{-1/2} M[\eta \eta^T] R_\eta^{1/2} u_j \rangle = \begin{cases} \sigma_\eta^2, & \text{если } i = j; \\ 0, & \text{если } i \neq j. \end{cases} \quad (2.5.17)$$

Подставляя (2.5.17) в (2.5.16), приходим к доказываемому соотношению (2.5.13). Для доказательства (2.5.15) воспользуемся очевидным соотношением

$$M[\|\xi_\alpha\|^2] = Sp[V_\xi(\alpha)] = \sum_{k=1}^M \{V_\xi(\alpha)\}_{k,k}. \quad (2.5.18)$$

Тогда из (2.5.13) при $k = m$ имеем:

$$M[\|\xi_\alpha\|^2] = \sigma_\eta^2 \cdot \sum_{j=1}^p \frac{\lambda_j^2}{[\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)]^2} \cdot \sum_{k=1}^p v_{kj}^2.$$

Из ортонормальности столбцов матрицы V_p следует

$$\sum_{k=1}^p v_{kj}^2 = 1$$

и получаем доказываемое выражение (2.5.14).

2.5.2. Построение доверительных интервалов для решения $\bar{\varphi}^+$

Числовые характеристики ошибок регуляризованного решения (определенные в предыдущем пункте) позволяют построить доверительные интервалы для проекций вектора $\bar{\varphi}^+$.

Для этого рассмотрим вектор

$$\bar{\varphi}_\alpha = \varphi_\alpha - b_\alpha, \quad (2.5.19)$$

который можно назвать несмещенным регуляризованным решением. Действительно:

$$M[\ddot{\varphi}_\alpha] - \bar{\varphi}^+ = M[\varphi_\alpha] - \bar{\varphi}^+ - b_\alpha = b_\alpha - b_\alpha = 0_M. \quad (2.5.20)$$

Тогда отклонение $\ddot{\varphi}_\alpha$ от $\bar{\varphi}^+$ обусловлено только вектором случайной ошибки с корреляционной матрицей $V_\xi(\alpha)$, элементы которой определяются соотношением (2.5.13). Если проекции η_i распределены по нормальному закону, то с вероятностью 0.95 выполняется неравенство (правило «двух сигм»):

$$\ddot{\varphi}_{\alpha_j} - 1.96 \cdot \{V_\xi(\alpha)\}_{j,j} \leq \bar{\varphi}_j^+ \leq \ddot{\varphi}_{\alpha_j} + 1.96 \cdot \{V_\xi(\alpha)\}_{j,j}, \quad (2.5.21)$$

где $\{V_\xi(\alpha)\}_{j,j}$ означает элемент матрицы $V_\xi(\alpha)$ с индексами j, j . Таким образом, интервал

$$I_j = \left[\ddot{\varphi}_{\alpha_j} - 1.96 \cdot \{V_\xi(\alpha)\}_{j,j}, \ddot{\varphi}_{\alpha_j} + 1.96 \cdot \{V_\xi(\alpha)\}_{j,j} \right] \quad (2.5.22)$$

является доверительным интервалом (интервальной оценкой) для $\bar{\varphi}_j^+$ с доверительной вероятностью (надежностью) $\gamma = 0.95$.

Доверительное множество I_φ для вектора $\bar{\varphi}^+$ получается операцией пересечения интервалов I_j , т.е. $I_\varphi = \prod_{j=1}^M I_j$, и доверительная вероятность такого множества равна произведению вероятностей интервалов I_j . Поэтому для вектора $\bar{\varphi}^+$ размерности больше 10 в формуле (2.5.22) вместо множителя 1.96 можно использовать 3.0 (закон «трех сигм»), что соответствует доверительной вероятности 0.9997 такого интервала.

2.5.3. Точностные характеристики регуляризирующих алгоритмов

Вновь рассмотрим регуляризованное решение φ_α , определяемое из системы уравнений:

$$(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T C_\eta^{-1} \tilde{f} + \alpha W_\varphi \omega_\varphi, \quad (2.5.23)$$

где матрица C_η входит в представление:

$$V_\eta = \sigma_\eta^2 \cdot C_\eta.$$

Было показано, что вектор систематической ошибки b_α этого решения равен

$$b_\alpha = \alpha (K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} W_\varphi (\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+). \quad (2.5.24)$$

Введем матрицу

$$B(\alpha) = \alpha (K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} W_\varphi, \quad (2.5.25)$$

которую назовем *матрицей смещения*. Эта матрица позволяет записать вектор смещения b_α в виде:

$$b_\alpha = B_\alpha (\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+) = B(\alpha) \cdot b^{(0)}, \quad (2.5.26)$$

где $b^{(0)} = \omega_\varphi - \bar{\varphi}^+$ – «начальное смещение» вектора ω_φ относительно $\bar{\varphi}^+$. Как отмечалось ранее, вычисление на практике b_α невозможно из-за незнания «начального смещения» – вектора $b^{(0)}$, поэтому введем скалярную величину $U_b(\alpha)$ [60]:

$$U_b(\alpha) = \frac{\|b_\alpha^{[1]}\|^2}{\|1_M\|^2},$$

где 1_M – единичный вектор размерности M , задающий «начальное смещение»; $b_\alpha^{[1]}$ – вектор смещения, обусловленный вектором 1_M . Можно показать, что

$$U_b(\alpha) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left(\sum_{j=1}^M \{B(\alpha)\}_{i,j} \right)^2. \quad (2.5.27)$$

Величина $U_b(\alpha)$ характеризует *разрешающую способность* регуляризирующего алгоритма, и ее можно рассматривать как *коэффициент передачи квадрата нормы вектора «начального»*

смещения $b^{(0)}$ в квадрат нормы вектора смещения b_α регуляризованного решения, т.е.

$$\|b_\alpha\|^2 \approx U_b(\alpha) \|b^{(0)}\|^2. \quad (2.5.28)$$

Проведенный вычислительный эксперимент показал, что в области значимых значений величины $U_b(\alpha)$ (от 10^{-4} до 1) разница между $U_b(\alpha)$ и отношением $\|b_\alpha\|^2 / \|b^{(0)}\|^2$ («истинный» коэффициент передачи вектора начального смещения) составляет несколько процентов.

На рис. 2.14 показано характерное поведение $U_b(\alpha)$ как функции параметра регуляризации для матриц различной обусловленности.

Можно показать справедливость пределов

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} U_b(\alpha) = 0; \quad \lim_{\alpha \rightarrow \infty} U_b(\alpha) = 1. \quad (2.5.29)$$

В качестве характеристики случайной ошибки

$$\xi_\alpha = (K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T C_\eta^{-1} \eta$$

примем ковариационную матрицу $V_\xi(\alpha) = M[\xi_\alpha \xi_\alpha^T]$, определяемую выражением

$$V_\xi(\alpha) = \sigma_\eta^2 (K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T C_\eta^{-1} K (K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1}. \quad (2.5.30)$$

Введем величину $U_\xi(\alpha)$ как характеристику устойчивости регуляризирующего алгоритма к шуму исходных данных [70]:

$$\begin{aligned} U_\xi(\alpha) &= \frac{Sp[V_\xi(\alpha)]}{\sigma_\eta^2} = \\ &= Sp\left[(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T C_\eta^{-1} K (K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (2.5.31)$$

Величину $U_\xi(\alpha)$ можно трактовать как коэффициент передачи дисперсии шума в характеристику $M[\|\xi_\alpha\|^2] = Sp[V_\xi(\alpha)]$.

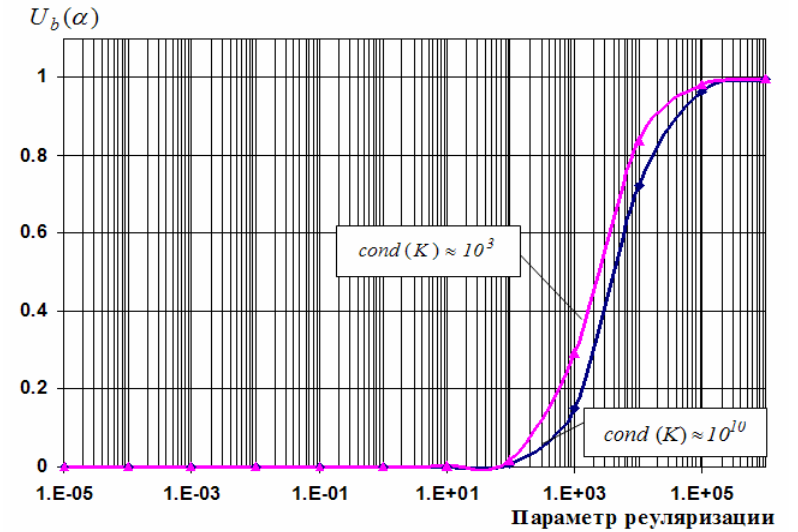


Рис. 2.14. Зависимость $U_b(\alpha)$ от параметра регуляризации

На рис. 2.15 приведены зависимости $U_\xi(\alpha)$ для различных чисел обусловленности.

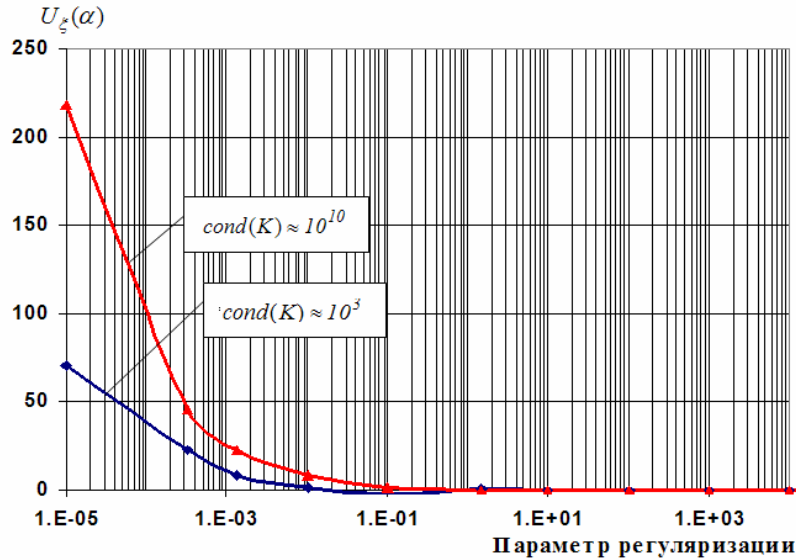


Рис. 2.15. Зависимость $U_\xi(\alpha)$ от параметра регуляризации

Анализ рис. 2.14 и 2.15 подтверждает известное *противоречие между разрешающей способностью (величина $U_b(\alpha)$) и устойчивостью (величина $U_\xi(\alpha)$)* регуляризирующего алгоритма.

С учетом введенных величин $U_b(\alpha)$ и $U_\xi(\alpha)$ среднеквадратическую ошибку алгоритма регуляризации можно представить в виде:

$$\Delta(\alpha) = \|b_\alpha\|^2 + M \left[\|\xi_\alpha\|^2 \right] \approx U_b(\alpha) \cdot \|b^{(0)}\|^2 + U_\xi(\alpha) \cdot \sigma_\eta^2. \quad (2.5.32)$$

Таким образом, величины $U_b(\alpha)$ и $U_\xi(\alpha)$ достаточно полно характеризуют систематическую и случайную ошибки регуляризирующего алгоритма и их можно назвать его *точностными характеристиками* регуляризирующего алгоритма решения СЛАУ.

В заключение этого пункта приведем SVD-соотношения для вычисления введенных точностных характеристик. Характеристика $U_\xi(\alpha)$ определяется выражением:

$$U_\xi(\alpha) = \sum_{j=1}^p \frac{\lambda_j^2}{[\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)]^2} \quad (2.5.33)$$

Для вычисления $U_b(\alpha)$ первоначально определяем матрицу $B(\alpha)$ (см. (2.5.30)):

$$B(\alpha) = \alpha V_p \cdot \text{diag} \left\{ \frac{m(\lambda_1)}{\lambda_1^2 + \alpha m(\lambda_1)}, \dots, \frac{m(\lambda_p)}{\lambda_p^2 + \alpha m(\lambda_p)} \right\} \cdot V_p^T, \quad (2.5.34)$$

где V_p – матрица размером $M \times p$, составленная из первых p столбцов матрицы V ; p – ранг матрицы K . Затем по формуле (2.5.32) находим характеристику $U_b(\alpha)$.

§ 2.6. Синтез регуляризирующих алгоритмов по заданным точностным характеристикам

Используя введенные точностные характеристики, можно для каждого значения α оценить среднеквадратическую ошибку решения, используя для этого формулу (2.5.32) и *подставляя вместо неизвестной величины $\|b^{(0)}\|^2$ некоторую оценку $\hat{b}^{(0)}$* . Тогда определим величину

$$\hat{\Delta}(\alpha) = U_b(\alpha) \cdot \|\hat{b}^{(0)}\|^2 + U_\xi(\alpha) \cdot \sigma_\eta^2, \quad (2.6.1)$$

которую можно использовать для анализа регуляризирующего алгоритма решения СЛАУ.

Важным свойством характеристик $\hat{\Delta}(\alpha)$, $U_b(\alpha)$ и $U_\xi(\alpha)$ является возможность «априорного» их вычисления, т.е. до выполнения самого регуляризирующего алгоритма, так как вектор правой части \tilde{f} в расчетах точностных характеристик не ис-

пользуется. Это обстоятельство позволяет определить величину параметра регуляризации, исходя из требуемых значений точностных характеристик, т.е. провести *синтез регуляризирующего алгоритма*. Для интегральных уравнений I рода подобный синтез был предложен в работах [15; 36].

Учитывая известное противоречие между систематической и случайной ошибками, сформулируем следующие *вариационные задачи синтеза регуляризирующего алгоритма* [62; 98]:

Задача А:

$$\min_{\alpha > 0} U_b(\alpha) \text{ при } U_\xi(\alpha) \leq U_\xi^{\max}. \quad (2.6.2)$$

Задача В:

$$\min_{\alpha > 0} U_\xi(\alpha) \text{ при } U_b(\alpha) \leq U_b^{\max}. \quad (2.6.3)$$

Задача С:

$$\min_{\alpha > 0} [U_b(\alpha) \cdot B_{\max}^2 + U_\xi(\alpha) \cdot \sigma_{\max}^2]. \quad (2.6.4)$$

где B_{\max}^2 , σ_{\max}^2 являются характеристиками классов решения и погрешностей:

$$\|\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+\|^2 \leq B_{\max}^2; \quad \sigma_\eta^2 \leq \sigma_{\max}^2. \quad (2.6.5)$$

Решение задачи А (величина α_A) минимизирует систематическую ошибку при гарантированной устойчивости решения к шуму измерения.

Решение задачи В (величина α_B) минимизирует норму случайной ошибки решения при требуемой разрешающей способности алгоритма.

Можно показать, что:

- функция $U_b(\alpha)$ является монотонно возрастающей функцией параметра α (см. (2.5.34));
- функция $U_\xi(\alpha)$ является монотонно убывающей функцией параметра α (см. (2.5.33)).

Тогда решение задачи А определяется как

$$U_\xi(\alpha_A) = U_\xi^{\max}, \quad (2.6.4)$$

а задачи В:

$$U_b(\alpha_B) = U_b^{\max}. \quad (2.6.5)$$

Решением задачи С (обозначим α_C) является оценкой оптимального параметра регуляризации для классов решений и погрешностей, определяемых условиями (2.6.5). Значение α_C вычисляется с использованием известных методов одномерной минимизации [2].

Решения задач А, В и С наполняют процедуру выбора параметра регуляризации содержательным смыслом.

Таким образом, введенные в этом параграфе точностные характеристики и сформулированные вариационные задачи определяют новый подход к выбору параметра регуляризации, а именно: *синтез регуляризирующих алгоритмов по заданным точностным характеристикам*.

§ 2.7. Построение регуляризованных решений СЛАУ в Mathcad

Приведем описание подпрограммы-функции (П-Ф) Mathcad, осуществляющей построение регуляризованного решения φ_α при следующих предположениях:

- ковариационная матрица V_η допускает представление

$V_\eta = \sigma_\eta^2 C_\eta$ (см. (2.2.21)) и определено сингулярное разложение

$$C_\eta^{-1/2} K = U \Lambda V^T;$$

- сингулярные числа λ_j упорядочены по убыванию, т.е. $\lambda_j \geq \lambda_{j+1}$ и $\lambda_j = 0, j = p+1, \dots, M$, где p – ранг матрицы системы;
- регуляризованное решение φ_α представимо в виде:

$$\varphi_\alpha = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)} \cdot \langle u_j, C_n^{-1/2} \tilde{f} \rangle \right] v_j, \quad (2.7.1)$$

где $m(\lambda)$ – невозрастающая функция (см. например, (2.3.28)); u_j, v_j – столбцы матриц U, V соответственно.

В качестве параметра регуляризации принимается величина $\alpha = \alpha_W$, являющаяся приемлемой оценкой для оптимального параметра регуляризации α_{opt} .

Построение регуляризованного решения осуществляет П-Ф $Calc_reg_sol_alpha_W$, обращение к которой имеет вид:

$$Calc_reg_sol_alpha_W(K, f, \gamma_0, m).$$

Текст П-Ф $Calc_reg_sol_alpha_W$ приведен на рис. 2.16.

Формальные параметры:

- K – матрица решаемой СЛАУ размером $N \times M$ ($N \geq M$);
- f – вектор правой части решаемой СЛАУ размерностью N ;
- γ_0 – величина, входящая в условие (2.1.40), определяющее практический ранг матрицы K ;
- m – имя функции $m(\lambda)$, которую можно задать как (2.3.28).

$$m(\lambda) := \frac{1}{\lambda}$$

$$Calc_reg_sol_alpha_W(K, f, \gamma_0, m) := \left| \begin{array}{l} M \leftarrow cols(K) \\ N \leftarrow rows(K) \\ S \leftarrow svd(K) \\ U \leftarrow submatrix(S, 1, N, 1, M) \\ V \leftarrow submatrix(S, N+1, N+M, 1, M) \\ \lambda \leftarrow svds(K) \\ p \leftarrow Calc_rank(M, \lambda, \gamma_0) \\ \sigma_2 \leftarrow Cals_sigma_2(f, U, p) \\ \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \leftarrow Calc_interval(p, \Theta) \\ \alpha_W \leftarrow Calc_alpha_W(f, U, \lambda, p, m, \sigma_2, v_1, v_2) \\ \phi_\alpha \leftarrow \sum_{j=1}^p \frac{\lambda_j \cdot (U^{(j)} \cdot f)}{(\lambda_j)^2 + \alpha_W \cdot m(\lambda_j)} \cdot V^{(j)} \\ \phi_\alpha \end{array} \right.$$

Рис. 2.16. Текст П-Ф построения регуляризованного решения

Результатом выполнения П-Ф является вектор φ_α , определяемый выражением (2.7.1).

Ограничение: $N \geq M \geq 4$.

При выполнении П-Ф возможны следующие сообщения о возникших ошибках:

1. $rank\ p < 4$ – вычисленный практический ранг матрицы меньше 4. Причиной может служить неправильное задание величины γ_0 (рекомендуется задавать $\gamma_0 \sim 10^{-8}$) или невыполнение ограничения $M \geq 4$.

2. *Error on choise α* – вычисление α_W потребовало больше 100 итераций процедуры (2.4.24). Обычно это вызвано заниженной (по сравнению с истинной) дисперсией σ_η^2 .

Отличительной чертой описанной П-Ф является то, что пользователь не задает при обращении ни ранг матрицы, ни дисперсию погрешностей σ_η^2 , ни параметр регуляризации. Все это вычисляется внутри П-Ф с использованием подпрограмм-функций, приведенных на рис. 2.17, 2.18. Назначение этих программных модулей поясняется комментариями, расположенными слева от тела соответствующего модуля.

Вычисление значения α_W - оценки для α_{opt}	$Calc_alpha_W(f, U, \lambda, p, m, \sigma_2, \nu_1, \nu_2) :=$ $y \leftarrow U^T \cdot f$ $\gamma \leftarrow 10^{-15}$ $for\ k \in 1..100$ $RW \leftarrow \frac{1}{\sigma_2} \cdot \sum_{j=1}^p \frac{m(\lambda_j) \cdot (y_j)^2}{\gamma \cdot (\lambda_j)^2 + m(\lambda_j)}$ $if\ \nu_1 \leq RW \leq \nu_2$ $\quad \alpha_W \leftarrow \frac{1}{\gamma}$ $\quad break$ $dRW \leftarrow \frac{-1}{\sigma_2} \cdot \sum_{j=1}^p \frac{(\lambda_j)^2 \cdot m(\lambda_j) \cdot (y_j)^2}{[\gamma \cdot (\lambda_j)^2 + m(\lambda_j)]^2}$ $\gamma \leftarrow \gamma - \frac{RW - p}{dRW}$ $error("Error on choise a")\ if\ k = 100$ α_W
--	--

Рис. 2.17. Текст П-Ф, вычисляющей параметр α_W

Вычисление практического ранга	$ORIGIN := 1$ $Calc_rank(M, \lambda, \gamma_0) :=$ $\lambda_{max} \leftarrow \max(\lambda)$ $p \leftarrow \sum_{j=1}^M if \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_{max}} \geq \gamma_0, 1, 0 \right)$ p
Вычисление оценки дисперсии σ_η^2	$Cals_sigma_2(f, U, p) :=$ $N \leftarrow rows(U)$ $y \leftarrow U^T \cdot f$ $\sigma_2 \leftarrow \frac{(f)^2 - \sum_{i=1}^p (y_i)^2}{N - p}$ σ_2
Вычисление границ интервала для вычисления параметра α_W	$\Theta := \begin{pmatrix} 0.71 & 1.14 & 1.64 & 2.17 & 2.73 & 3.32 & 3.94 \\ 9.49 & 11.0 & 12.6 & 14.1 & 15.5 & 16.9 & 18.3 \end{pmatrix}$ $Calc_interval(p, \Theta) :=$ $error("rank p < 4")\ if\ p < 4$ $if\ 4 \leq p \leq 10$ $\quad \nu_1 \leftarrow \Theta_{1, p-3}$ $\quad \nu_2 \leftarrow \Theta_{2, p-3}$ $if\ p > 10$ $\quad \nu_1 \leftarrow p - 1.64 \cdot \sqrt{2 \cdot p}$ $\quad \nu_2 \leftarrow p + 1.64 \cdot \sqrt{2 \cdot p}$ $\begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix}$

Рис. 2.18. Тексты П-Ф, вызываемые в $Calc_reg_sol_alpha_W$

Вопросы для самопроверки

1. Что понимают под вырожденной системой линейных алгебраических уравнений?
2. Что понимают под нормальным решением?
3. Какая система называется несовместной?
4. Что является решением несовместной системы?
5. Дайте определение псевдообратной матрицы
6. Как определяют число обусловленности матрицы?
7. Приведите свойства числа обусловленности матрицы
8. Какие системы называют плохо обусловленными?
9. Как выполняется сингулярное разложение матрицы?
10. Какими свойствами обладает сингулярное разложение матрицы?
11. Приведите SVD-алгоритм построения нормального псевдорешения.
12. Запишите псевдорешение в терминах в терминах SVD-разложения
13. Опишите Байесовский регуляризирующий алгоритм построения нормального псевдорешения СЛАУ.
14. Запишите ошибку решения, полученного Байесовским регуляризирующим алгоритмом.
15. Опишите минимаксный регуляризирующий алгоритм построения нормального псевдорешения СЛАУ.
16. Опишите оптимальный регуляризирующий SVD-алгоритм построения нормального псевдорешения СЛАУ.
17. Запишите среднеквадратичную ошибку решения, полученного регуляризирующим SVD-алгоритм.
18. Неполная информация и сглаживающий функционал.
19. В чем суть метода рандомизации построения решения СЛАУ.
20. Гладкость решения и стабилизирующий функционал
21. Опишите регуляризирующий SVD-алгоритм.
22. Как вычисляются систематическая и случайная ошибки регуляризованного решения φ_α ?
23. Как связан параметр регуляризации с погрешностью правой части?
24. В чем состоит суть метода выбора параметра регуляризации по критерию оптимальности?
25. Запишите статистику критерия оптимальности.
26. Опишите алгоритм выбора параметра регуляризации по критерию оптимальности в терминах SVD-разложения.
27. В чем суть метода выбора параметра регуляризации по статистическому варианту принципа невязки?
28. В чем состоит суть метода перекрестной значимости выбора параметра регуляризации?
29. Как вычисляются числовые характеристики ошибок регуляризованного решения?
30. Как построить доверительные интервалы для решения $\bar{\varphi}^+$?
31. Точностные характеристики регуляризирующих алгоритмов
32. Как определить величину параметра регуляризации, исходя из требуемых значений точностных характеристик?

Глава 3

ЛОКАЛЬНЫЙ РЕГУЛЯРИЗУЮЩИЙ АЛГОРИТМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ

В этой главе предлагается локальный регуляризирующий алгоритм, в котором вместо одного параметра регуляризации вводится набор параметров (названный векторным параметром регуляризации), что позволяет получить регуляризованное решение с меньшей ошибкой.

§ 3.1. Локальный регуляризирующий алгоритм с векторным параметром регуляризации

Вновь вернемся к задаче построения устойчивого приближения к нормальному псевдорешению $\bar{\varphi}^+$ системы линейных алгебраических уравнений вида

$$K\varphi = f, \quad (3.1.1)$$

когда вместо точной правой части \bar{f} (которой соответствует $\bar{\varphi}^+$) дан вектор $\tilde{f} = \bar{f} + \eta$, где η – вектор случайных погрешностей с характеристиками:

$$M[\eta] = 0_N; \quad V_\eta = M[\eta\eta^T]. \quad (3.1.2)$$

В методах регуляризации в качестве такого приближения принимают регуляризованное решение φ_α , доставляющее минимум функционалу

$$F_\alpha(\varphi) = \|f - K\varphi\|_{W_f}^2 + \alpha \|\varphi\|_{W_\varphi}^2, \quad (3.1.3)$$

где α – параметр регуляризации. Показано (см. § 2.3), что минимум функционала (3.1.3) достигается на решении системы уравнений

$$(K^T W_f K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T W_f \tilde{f}. \quad (3.1.4)$$

Как правило, матрицы W_φ , W_f при построении регуляризованного решения считаются заданными и получение приемлемой точности регуляризованного решения φ_α достигается подбором параметра регуляризации α (см. § 2.4). Такую регуляризацию (с помощью одного «управляющего» параметра α) можно назвать «глобальной». Естественно, что глобальная регуляризация имеет меньшую точность по сравнению с «локальной» регуляризацией, осуществляемой соответствующим подбором всех элементов матрицы W_φ . Примером *локальной оптимальной регуляризации* является байесовское решение (см. § 2.2). Проигрыш по точности глобальных регуляризирующих алгоритмов особенно проявляется, если вектор искомого решения содержит проекции, значения которых меняются «ступенькой». Такие вектора в дальнейшем будем называть *ступенчатыми*.

К сожалению, априорная информация, необходимая для построения локального оптимального алгоритма, на практике отсутствует. Поэтому предложены различные подходы к построению локальных регуляризирующих алгоритмов для решения *интегральных уравнений первого рода* (краткий обзор которых приведен в работе [64], а также в [1]). Эти алгоритмы проигрывают по точности байесовскому алгоритму, но имеют более высокую точность по сравнению с алгоритмами глобальной регуляризации.

Локальные регуляризирующие алгоритмы, основанные на концепции винеровской фильтрации, улучшают точность решения, однако неизбежный переход из «частотной» области (в которой происходит вычисление отношений «шум/сигнал») в «пространственную» (в которой строится решение) *ухудшает качество восстановления контрастных сигналов и изображений*. Это в полной мере относится к локальному регуляризирующему алгоритму решения СЛАУ, построенному в работах [21; 22; 25; 59; 94], а также к локальному алгоритму Фурье-фильтрации [35].

Поэтому изложим вариационный подход к построению нового класса локальных регуляризирующих алгоритмов [23; 95]. В этих алгоритмах присутствует *векторный параметр регуляриза-*

ции, позволяющий «локально» управлять гладкостью регуляризованного решения.

§ 3.2. Построение локального регуляризирующего алгоритма с векторным параметром регуляризации

Ранее говорилось, что глобальное регуляризованное решение φ_α является точкой минимума квадратичного функционала (3.1.3). Обычно для получения гладкого решения в качестве W_φ принимают трехдиагональную матрицу (размером $M \times M$) вида

$$W_\varphi = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.2.1)$$

и тогда функционал $F_\alpha[\varphi]$ можно записать в виде:

$$F_\alpha[\varphi] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{W_f}^2 + \alpha \cdot \sum_{j=2}^M (\varphi_j - \varphi_{j-1})^2.$$

Вместо скалярного параметра регуляризации введем во второе слагаемое этого функционала *векторный параметр регуляризации*

$$\mu = \{\mu_2, \mu_3, \dots, \mu_M\}. \quad (3.2.2)$$

Тогда имеем новый сглаживающий функционал:

$$F[\varphi, \mu] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{W_f}^2 + \sum_{j=2}^M \mu_j^2 (\varphi_j - \varphi_{j-1})^2. \quad (3.2.3)$$

Определив матрицу:

$$M(\mu) = \begin{pmatrix} \mu_2^2 & -\mu_2^2 & & & 0 \\ -\mu_2^2 & (\mu_2^2 + \mu_3^2) & -\mu_3^2 & & \\ 0 & -\mu_3^2 & (\mu_3^2 + \mu_4^2) & -\mu_4^2 & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & -\mu_M^2 & \mu_M^2 \end{pmatrix}, \quad (3.2.4)$$

функционал (3.2.3) можно переписать в виде:

$$F[\varphi, \mu] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{W_f}^2 + \|\varphi\|_{M(\mu)}^2. \quad (3.2.5)$$

Возникает вопрос: как задать проекции μ_j векторного параметра регуляризации? Для этого введем функционал

$$\Gamma[\mu] = \gamma_1^2 \cdot \sum_{j=2}^M (\mu_j - \gamma_0)^2 + \gamma_2^2 \cdot \sum_{j=3}^M (\mu_j - \mu_{j-1})^2 \quad (3.2.6)$$

и ограничения $0 \leq \mu_j \leq \gamma_0, j = 2, \dots, M$. Очевидно, что при $\mu_j \rightarrow \gamma_0$ уменьшается величина функционала $\Gamma[\mu]$ (3.2.6), но увеличивается слагаемое $\|\varphi\|_{M(\mu)}^2$ функционала (3.2.5). Учитывая такую взаимосвязь, введем новый сглаживающий функционал (назовем его *локальным сглаживающим функционалом*)

$$\Phi[\varphi, \mu] = F[\varphi, \mu] + \Gamma[\mu] \quad (3.2.7)$$

и определим точку его минимума (φ_μ^*, μ^*) из условий:

$$\frac{\partial \Phi[\varphi, \mu]}{\partial \varphi_j} = 0, \quad j = 1, \dots, M; \quad (3.2.8)$$

$$\frac{\partial \Phi[\varphi, \mu]}{\partial \mu_j} = 0, \quad j = 2, \dots, M. \quad (3.2.9)$$

Вектор φ_μ , удовлетворяющий (3.2.8) при заданном векторе μ , является решением системы линейных уравнений

$$(K^T W_f K + M(\mu)) \varphi_\mu = K^T W_f \tilde{f}, \quad (3.2.10)$$

где матрица $M(\mu)$ определяется соотношением (3.2.4). Условия (3.2.9) приводят к следующей системе уравнений, состоящей из $(M-1)$ уравнений относительно $(M-1)$ величин $\mu_2, \mu_3, \dots, \mu_M$:

$$\begin{aligned} & \left[(\varphi_2 - \varphi_1)^2 + \gamma_1^2 + 2\gamma_2^2 \right] \cdot \mu_2 - \gamma_2^2 \cdot \mu_3 = \gamma_1^2 \gamma_0; \\ -\gamma_2^2 \cdot \mu_{i-1} + & \left[(\varphi_i - \varphi_{i-1})^2 + \gamma_1^2 + 2\gamma_2^2 \right] \cdot \mu_i - \gamma_2^2 \cdot \mu_{i+1} = \gamma_1^2 \gamma_0, i = 3, \dots, M-1; \\ -\gamma_2^2 \cdot \mu_{M-1} + & \left[(\varphi_M - \varphi_{M-1})^2 + \gamma_1^2 + 2\gamma_2^2 \right] \cdot \mu_M = \gamma_1^2 \gamma_0. \end{aligned}$$

Перепишем эту систему в матричном виде

$$A(\varphi) \mu = \gamma, \quad (3.2.11)$$

где γ – вектор с элементами

$$\gamma_i = \gamma_1^2 \gamma_0, \quad i=1, \dots, M-1.$$

Матрица $A(\varphi)$ трехдиагональная размером $(M-1) \times (M-1)$ и для любого вектора φ имеет диагональное преобладание. Следовательно, система (3.2.11) всегда имеет единственное решение. Учитывая структуру систем (3.2.8), (3.2.9), для нахождения точки минимума (φ^*, μ^*) функционала $\Phi[\varphi, \mu]$ используем процедуру вида

$$\begin{aligned} \varphi_\mu^{(l)} &= \left[K^T W_f K + M(\mu^{(l)}) \right]^{-1} K^T W_f \tilde{f}; \\ \mu^{(l+1)} &= A^{-1}(\varphi_\mu^{(l)}) \gamma, \quad l = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

$$\mu_i^{(l+1)} = \begin{cases} \mu_i^{(l+1)}, & \text{если } 0 \leq \mu_i^{(l+1)} \leq \gamma_0; \\ 0, & \text{если } \mu_i^{(l+1)} < 0; \\ \gamma_0, & \text{если } \mu_i^{(l+1)} > \gamma_0. \end{cases}$$

Условием прекращения итераций является одновременное выполнение условий:

$$\frac{\|\mu^{(l)} - \mu^{(l-1)}\|}{\|\mu^{(l)}\|} \leq \varepsilon; \quad \frac{\|\varphi_\mu^{(l)} - \varphi_\mu^{(l-1)}\|}{\|\varphi_\mu^{(l)}\|} \leq \varepsilon,$$

где ε – достаточно малая величина – порядка $10^{-4} \div 10^{-3}$. В качестве начального значения $\mu^{(0)}$ примем вектор с проекциями

$$\mu_i^{(0)} = \frac{\sqrt{\hat{\alpha}}}{2}, \quad i=2, \dots, M, \quad (3.2.13)$$

где $\hat{\alpha}$ – некоторое значение параметра регуляризации, гарантирующее сходимость регуляризованного решения (при заданной матрице W_φ) к искомому псевдорешению $\bar{\varphi}^+$. В дальнейшем в качестве $\hat{\alpha}$ принимается α_W – оценка α_{opt} по критерию оптимальности (см. п. 2.4.2).

Вычислительный эксперимент, проведенный для матрицы K различных размеров, чисел обусловленности ($10^3, 10^6, 10^{12}$) и при различных векторах φ , показал, что:

- число итераций, необходимых для завершения процесса (3.2.8) (величина $\varepsilon = 10^{-3}$), не превышало 10 (число итераций увеличивается при ухудшении обусловленности матрицы СЛАУ);
- «типичное» число необходимых итераций равнялось 4–7.

Утверждение 3.1. Если начальная точка $\varphi_\mu^{(0)}, \mu^{(0)}$ определяется соотношениями:

$$\mu_i^{(0)} = \frac{\sqrt{\alpha_W}}{2}, \quad i = 2, \dots, M; \quad \varphi_\mu^{(0)} = \varphi_{\alpha_W}; \quad (3.2.14)$$

$$\gamma_0 = \sqrt{\alpha_W}, \quad (3.2.15)$$

то последовательность $(\varphi_\mu^{(l)}, \mu^{(l)})$, порождаемая процедурой (3.2.12), сходится к точке минимума (φ_μ^*, μ^*) функционала (3.2.7), а вектор φ_μ^* является регуляризованным решением сис-

темы (3.1.1), т.е. существует для любой правой части \tilde{f} и имеет

$$M \left[\left\| \varphi_{\mu}^* - \bar{\varphi}^+ \right\|^2 \right] \rightarrow 0 \quad \text{при}$$

$$M \left[\left\| \tilde{f} - f \right\|^2 \right] \rightarrow 0.$$

Доказательство этого утверждения опирается на следующие факты:

- вектор φ_{μ}^* , как решение системы (3.2.10), существует при любой правой части \tilde{f} ;
- при выполнении (3.2.14) μ_j^* удовлетворяет условию $0 \leq \mu_j^* \leq \gamma_0$;
- из сходимости глобального регуляризованного решения φ_{α} , построенного при $\alpha = \alpha_w$ (при этом $\alpha_w \rightarrow 0$) и условия (3.2.14) следуют сходимости $\gamma_0 \rightarrow 0$, $\mu_j^* \rightarrow 0$ и сходимость решения $\varphi_{\mu}^* \rightarrow \bar{\varphi}^+$ при стремлении уровня шума к нулю. ♣

Возникает вопрос о влиянии точности задания γ_0 (см. (3.2.15)) на точность регуляризованных решений φ_{μ}^* . Был проведен вычислительный эксперимент по определению чувствительности СКО предложенного алгоритма к заданию величины $\gamma_0 = \sqrt{\hat{\alpha}}$. Анализ показал:

- при занижении $\hat{\alpha}$ на порядок по сравнению с α_w СКО решения φ_{μ}^* также возрастает на порядок (хотя по-прежнему принимает маленькие значения);
- при завышении $\hat{\alpha}$ на порядок по сравнению с α_w СКО решения φ_{μ}^* также возрастает, но незначительно (примерно на 30–40 %).

§ 3.3. Выбор параметров локального регуляризирующего алгоритма

Функционал $\Gamma[\mu]$ содержит два параметра γ_1, γ_2 . Очевидно, что от значений этих параметров зависит точность регуляризованного решения φ_{μ}^* . Для выбора γ_1, γ_2 обратимся к критерию оптимальности, используемому при оценивании оптимального значения α_{opt} параметра регуляризации (см. § 2.4). Введем билинейную форму:

$$\rho_w(\gamma_1, \gamma_2) = \sum_{i=1}^N \frac{e_i(\gamma_1, \gamma_2) \cdot \tilde{f}_i}{\sigma_i^2}, \quad (3.3.1)$$

где $e_i(\gamma_1, \gamma_2)$ – i -я проекция вектора невязки:

$$e(\gamma_1, \gamma_2) = \tilde{f} - K\varphi_{\mu}^*,$$

φ_{μ}^* – решение, вычисленное при заданных величинах γ_1, γ_2 .

В качестве γ_1, γ_2 будем брать значения γ_{w1}, γ_{w2} , для которых имеет место неравенство

$$\mathcal{G}_N(\beta/2) \leq \rho_w(\gamma_1, \gamma_2) \leq \mathcal{G}_N(1 - \beta/2), \quad (3.3.2)$$

где $v_N(\beta/2)$ – квантиль χ^2 -распределения с N степенями свободы уровня $\beta/2$, $\beta = 0.10$. Для вычисления γ_{w1}, γ_{w2} используется любой итерационный алгоритм решения нелинейного уравнения

$$\rho_w(\gamma_1, \gamma_2) = N, \quad (3.3.3)$$

который прекращается, как только выполнится условие (3.3.2).

Многочисленные вычислительные эксперименты с различными векторами φ показали, что величина γ_{w1} изменяется в пределах $1 \div 10$, γ_{w2} – в пределах $0.1 \div 1.0$. Так как вычисление γ_{w1}, γ_{w2} требует значительного объема вычислений, то можно рекомендовать априорное задание величин $\gamma_{w1} = 5, \gamma_{w2} = 0.5$.

§ 3.4. Результаты вычислительного эксперимента

Рассмотрим результаты одного из вычислительных экспериментов по построению регуляризованного решения СЛАУ описанным локальным регуляризирующим алгоритмом.

Матрица K имела размер 80×50 и число обусловленности $\approx 10^{12}$. Проекция вектора φ изображены на рис. 3.1 (кривая 1).

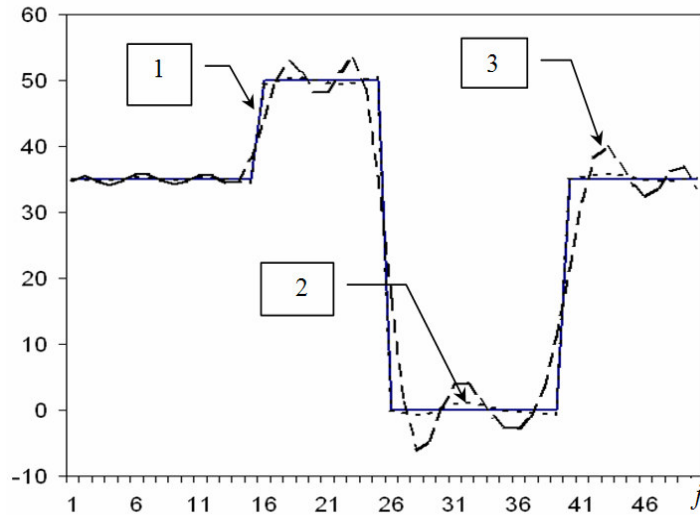


Рис. 3.1. Проекция различных решений

Проекция точной правой части СЛАУ $f = K\varphi$ искажалась нормально распределенными псевдослучайными числами с нулевым средним и дисперсией σ_η^2 , которая задавалась по относительному уровню шума $\delta_f = \|\tilde{f} - f\| / \|f\|$. В качестве меры точности была принята относительная среднеквадратическая ошибка

$$\delta(\varphi_\mu^*) = \frac{\left(M \left[\|\varphi_\mu^* - \bar{\varphi}\|^2 \right] \right)^{1/2}}{\|\bar{\varphi}\|},$$

при вычислении которой оператор математического ожидания

по ансамблю случайных векторов φ_μ^* заменялся усреднением по 20 реализациям этих векторов.

На рис. 3.1 кривая 3 отображает проекции «глобального» регуляризованного решения φ_{α_w} ($\alpha_w = 1793$), кривая 2 — «локальное» регуляризованное решение φ_μ^* ($\gamma_0 = \sqrt{1793}$, $\gamma_{w1} = 1$, $\gamma_{w2} = 0.1$), построенные по той же правой части (относительный уровень шума $\delta_f = 0.01$). Очевидно, что решение φ_μ^* существенно точнее решения φ_α . Это подтверждают величины $\delta(\varphi_\alpha) = 0.0217$, $\delta(\varphi_\mu^*) = 0.0004$.

На рис. 3.2 приведены проекции векторного параметра регуляризации μ^* , имеющие специфический характер изменения. В точках «скачка» амплитуды проекций вектора проекции μ_j принимают значения, близкие к нулю, а на «плоских» участках — $\mu_j \approx \sqrt{\alpha_w}$, что обуславливает максимальное сглаживание случайной ошибки решения. Эксперименты показали, что даже при высоком уровне шума (например, $\delta_f = 0.1$) регуляризованное решение φ_μ^* ($\gamma_{w1} = 4.64$, $\gamma_{w2} = 0.8$) имело существенно меньшую ошибку решения $\delta(\varphi_\mu^*) = 0.00052$ по сравнению с «глобальным» решением φ_{α_w} , для которого $\delta(\varphi_{\alpha_w}) = 0.0302$.

Заметим, что описанный подход к построению локальных регуляризирующих алгоритмов был успешно адаптирован для построения локальных алгоритмов сглаживания с векторным параметром сглаживания, показав высокую эффективность при обработке «ступенчатых» сигналов [29; 61].

Глава 4

ДЕСКРИПТИВНЫЕ РЕГУЛЯРИЗУЮЩИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ

В некоторых случаях у пользователя имеется априорная информация о форме и качественных характеристиках искомого решения – таких, как знакоопределенность, выпуклость, монотонность, наличие экстремумов в определенных точках и др. Очевидно, что учет такой априорной информации при построении регуляризирующих алгоритмов может повысить точность решения. Поскольку основным моментом при этом являются определение и математическое описание важнейших качественных характеристик искомого решения, то сами методы такой регуляризации названы *дескриптивными* [55].

Необходимость использования дескриптивной регуляризации вызвана также следующим. В случаях, когда решение имеет негладкую форму (прямоугольную, трапецидальную и т.д.), регуляризованные решения, построенные методами невязки, квази-решений или по методу Тихонова, даже при малом уровне шума содержат осцилляции и принимают, таким образом, нефизические отрицательные значения [79]. Кроме того, происходит сглаживание «импульсных» составляющих решения. Применение дескриптивных методов позволяет устранить эти недостатки.

Построение алгоритмов дескриптивной регуляризации основано на методах выпуклого программирования [13; 16; 17; 18; 25; 100], математического программирования (например, на методе сопряженных градиентов [31; 55; 56; 70; 73; 97], методе штрафных функций [5; 6] и т.д.).

В этом параграфе строятся два дескриптивных регуляризирующих алгоритма на основе сингулярного разложения матрицы системы. Алгоритмы, учитывающие априорную информацию при таком способе построения регуляризованного решения, в научной литературе не рассматривались.

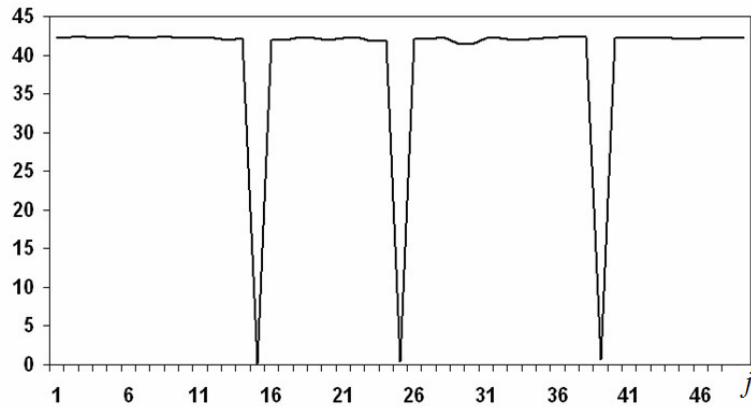


Рис. 3.2. Проекция μ_j векторного параметра регуляризации

Обобщая свойства приведенных в этой главе алгоритмов, можно сделать следующие выводы.

Алгоритмы локальной регуляризации являются нелинейными, и это обуславливает появление «внутри алгоритмов» дополнительных (по сравнению с линейными алгоритмами) итерационных процедур. Однако использование сингулярного разложения и высокая скорость сходимости итерационных процедур незначительно увеличивает вычислительные затраты на построение регуляризованных решений.

Вопросы для самопроверки

1. В чем состоит суть глобальной и локальной регуляризации?
2. Запишите локальный регуляризирующий алгоритм с векторным параметром регуляризации?
3. Как осуществляется выбор параметров локального регуляризирующего алгоритма?

§ 4.1. Глобальный дескриптивный регуляризирующий алгоритм

Предположим, априори известно о том, что вектор решения $\bar{\varphi}$ принадлежит выпуклому множеству Φ , задаваемому системой линейных неравенств:

$$G\varphi \leq g, \quad (4.1.1)$$

где G – матрица ограничений размером $L \times M$; g – вектор размерности L . Ограничения (4.1.1) определяют допустимое множество векторов φ , из которых должен находиться вектор регуляризованного решения. Этому требованию удовлетворяет вектор φ_α^* , являющийся решением следующей задачи квадратичного программирования [2]:

$$\inf \left[\|\tilde{f} - K\varphi\|_{C_\eta^{-1}}^2 + \alpha \|\varphi\|_{W_\varphi}^2 \right] \quad (4.1.2)$$

при ограничениях

$$G\varphi \leq g.$$

Покажем, какой вид примут условия (4.1.1) для распространенных случаев, когда решение φ неотрицательно либо монотонно. Для выполнения условия неотрицательности проекций вектора φ ($\varphi_i \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, M$) система неравенств (4.1.1) преобразуется к виду

$$-I_{M \times M} \cdot \varphi \leq 0_M, \quad (4.1.3)$$

здесь $I_{M \times M}$ – единичная матрица; 0_M – нулевой вектор. Условия монотонности, накладываемые на решение φ , примут вид:

$$S\varphi \leq g, \quad (4.1.4)$$

где S – двухдиагональная матрица, вектор $g \geq 0$.

Аналогичным образом может быть представлена в матричной форме и другая априорная информация о решении.

Трудность использования такой информации обусловлена тем, что в случае сингулярного разложения регуляризованное

решение определяется в «частотной» области через вектор x_α , при построении которого трудно учесть ограничения (4.1.1). Покажем, как эффективно преодолеть эту трудность, когда множество Φ задается системой неравенств (4.1.1) [27; 58; 97].

Для приведения исходной задачи к двойственной вновь запишем диагональную матрицу $R_{p\alpha}$ (2.3.27):

$$R_{p\alpha} = \text{diag}\{r_1(\alpha), r_2(\alpha), \dots, r_p(\alpha)\} \quad (4.1.5)$$

размером $p \times p$ с элементами

$$r_j(\alpha) = \frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \alpha m(\lambda_j)}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (4.1.6)$$

где p – ранг матрицы, и введем вектор $z_p = |y_1, y_2, \dots, y_p|^T$, составленный из первых p проекций вектора $y = U^T C_\eta^{-1/2} \tilde{f}$. Напомним, что ковариационная матрица V_η вектора η допускает представление (см. (2.2.21)) $V_\eta = \sigma_\eta^2 C_\eta$, λ_j – сингулярные числа, U, V – ортогональные матрицы, входящие в сингулярное разложение

$$C_\eta^{-1/2} K = U \Lambda V^T. \quad (4.1.7)$$

Тогда регуляризованное решение φ_α , доставляющее минимум функционалу (4.1.2) с матрицей

$$W_\varphi = V_p \text{diag}\{m(\lambda_1), \dots, m(\lambda_p)\} V_p^T,$$

определяется как $\varphi_\alpha = V_p x_\alpha$, где V_p – матрица размером $M \times p$, составленная из p первых столбцов матрицы V . Вектор

$$x_\alpha = R_{p\alpha} z_p, \quad (4.1.8)$$

состоящий из p проекций, доставляет минимум функционалу:

$$F_\alpha(x) = x^T R_{p\alpha}^{-1} x - 2x^T z_p + const. \quad (4.1.9)$$

Введя обозначения $D_{p\alpha} = 2R_{p\alpha}^{-1}$, $d_p = -2z_p$, с учетом $\varphi_\alpha = V_p x_\alpha$ и ограничений (4.1.1), приходим к задаче квадратичного программирования, а именно:

Задача А. Найти вектор x_α^* размерности M , доставляющий минимум функционалу

$$F_\alpha(x) = \frac{1}{2} x^T D_{p\alpha} x + x^T d_p + const \quad (4.1.10)$$

при ограничении

$$GV_p x \leq g. \quad (4.1.11)$$

Двойственная по Лагранжу задача [2] состоит в максимизации функционала

$$\psi_\alpha(\mu) = \inf_x \left\{ \frac{1}{2} x^T D_{p\alpha} x + x^T d_p + \mu^T (GV_p x - g) \right\}, \quad (4.1.12)$$

при ограничении

$$\mu \geq 0_L, \quad (4.1.13)$$

где μ – вектор множителей Лагранжа размерности L ; 0_L – нулевой вектор той же размерности. При $\alpha > 0$ матрица $D_{p\alpha}$ – симметричная, положительно определенная, так что $x^T D_{p\alpha} x > 0$ для любого ненулевого вектора x . Поэтому при фиксированном векторе μ целевая функция $\frac{1}{2} x^T D_{p\alpha} x + x^T d_p + \mu^T (GV_p x - g)$ строго выпукла и достигает минимума по x в точке, удовлетворяющей равенству:

$$D_{p\alpha} x + V_p^T G^T \mu + d_p = 0.$$

Для положительно определенной матрицы $D_{p\alpha}$ существует обратная матрица $D_{p\alpha}^{-1} = \frac{1}{2} R_{p\alpha}$, и тогда решение этого уравнения примет вид (см. (4.1.8)):

$$x = -\frac{1}{2} R_{p\alpha} (-2z_p + V_p^T G^T \mu) = x_\alpha - \frac{1}{2} R_{p\alpha} V_p^T G^T \mu. \quad (4.1.14)$$

Подставляя это решение в (4.1.12) и выполнив некоторые преобразования, двойственную по Лагранжу задачу можно сформулировать следующим образом:

Задача В. Найти вектор μ^* размерности L , доставляющий минимум функционалу

$$\tilde{\psi}_\alpha(\mu) = \frac{1}{4} \mu^T GV_p R_{p\alpha} V_p^T G^T \mu - \mu^T (-g + GV_p x_\alpha) + const \quad (4.1.15)$$

при ограничении

$$\mu \geq 0_L \quad (4.1.16)$$

Решение задачи В можно осуществить используя известные алгоритмы квадратичного программирования.

После вычисления μ^* решение x_α^* задачи А находится из выражения

$$x_\alpha^* = x_\alpha - \frac{1}{2} R_{p\alpha} V_p^T G^T \mu^* \quad (4.1.17)$$

и состоит из двух слагаемых: регуляризованного решения x_α (4.1.8), полученного безусловной минимизацией функционала (4.1.10), и вектора, зависящего от решения μ^* двойственной задачи В. Очевидно, что если $\mu^* = 0$, то $x_\alpha^* = x_\alpha$.

Введем вектор $q = GV_p x_\alpha - g$, проекции которого $q_i \leq 0$, если удовлетворяется i -е ограничение системы (4.1.1). Покажем, что если $q_i < 0$, то $\mu_i^* = 0$. Предположим обратное, т.е. $\mu_i^* > 0$. Тогда $(\mu_i^* q_i) > 0$ и, уменьшая μ_i^* , можно уменьшить величину

функционала $\tilde{\psi}_\alpha(\mu)$, т.е. μ_i^* уже не будет являться решением задачи B . При $q_i = 0$ $\mu_i^* \geq 0$ и, если $q_i > 0$ (i -е ограничение не выполняется), то $\mu_i^* > 0$.

Окончательно вектор дескриптивного решения находится как

$$\varphi_\alpha^* = V_p x_\alpha^*. \quad (4.1.18)$$

Таким образом, построение дескриптивного решения φ_α^* можно представить следующими шагами:

- выполнение сингулярного разложения (4.1.7);
- вычисление вектора x_α из условия минимума функционала $F_\alpha(x)$ (см. (4.1.8)), т.е.

$$x_\alpha = \text{diag} \left\{ \frac{\lambda_1}{\lambda_1^2 + \alpha m(\lambda_1)}, \dots, \frac{\lambda_p}{\lambda_p^2 + \alpha m(\lambda_p)} \right\} \cdot z_p, \quad (4.1.19)$$

где p – ранг матрицы системы. При этом вектор α осуществляется одним из способов, описанных в § 2.4 или по заданным точностным характеристикам (см. § 2.5);

- решение вариационной задачи B ;
- формирование вектора x_α^* , определяемого выражением (4.1.17);
- вычисление вектора дескриптивного решения (4.1.18).

Утверждение 4.1. Если искомое нормальное псевдорешение $\bar{\varphi}^+$ удовлетворяет системе ограничений (4.1.1), то вектор φ_α^* , определяемый (4.1.18), является дескриптивным регуляризованным решением, т.е. существует для любой правой части, удовлетворяет ограничением (4.1.1) и

$$M \left[\|\varphi_\alpha^* - \bar{\varphi}^+\|^2 \right] \rightarrow 0 \text{ при } M \left[\|\tilde{f} - f\|^2 \right] \rightarrow 0. \quad (4.1.20)$$

Доказательство основано на сходимости регуляризованного решения $\varphi_\alpha = V_p x_\alpha$ и выполнении ограничений (4.1.1) для вектора φ_α^* при любом параметре регуляризации $\alpha > 0$. ♣

§ 4.2. Локальный дескриптивный регулярирующий алгоритм

Отличие этого дескриптивного алгоритма от предыдущего глобального дескриптивного заключается в определении матрицы регуляризирующих множителей – матрицы $R_{p\alpha}$. В § 2.2 было показано, что оптимальное решение φ_{onm} , минимизирующее СКО (2.2.30), допускает представление

$$\varphi_{onm} = V_p R_{p\ onm} z_p = V_p x_{onm}, \quad (4.2.1)$$

где диагональная матрица $R_{p\ onm}$ (см. (2.2.41))

$$R_{p\ onm} = \text{diag} \{ r_{onm_1}, r_{onm_2}, \dots, r_{onm_p} \} \quad (4.2.2)$$

размером $p \times p$ имеет элементы

$$r_{onm_j} = \frac{1}{\lambda_j (1 + S_j)}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (4.2.3)$$

а вектор $z_p = |y_1, y_2, \dots, y_p|^T$ составлен из первых p проекций вектора $y = U^T C_\eta^{-1/2} \tilde{f}$. Величину

$$S_j = \frac{\sigma_\eta^2}{(\lambda_j \bar{x}_j^+)^2}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (4.2.4)$$

можно трактовать как отношение «шум/сигнал» правой части, соответствующее ненулевому сингулярному числу. Алгоритм (4.2.1) также можно назвать *локальным оптимальным регуляризирующим алгоритмом* [28; 89], так как в нем для каждого сингулярного числа происходит *вычисление «своего» регуляризирующего множителя из условия минимума СКО регуляризованного решения*. К сожалению, вычисление r_{onm_j} на практике

не реализуемо из-за незнания вектора $\bar{x}^+ = V_p^T \bar{\varphi}^+$, проекции которого входят в формулу (4.2.4). Поэтому в работах [21; 22; 25] была предложена итерационная процедура оценивания локального отношения «шум/сигнал» и были найдены выражения для

предельных точек этой процедуры. Доказана сходимость построенных (при этих оценках отношения «шум/сигнал») регуляризованных решений и показаны их точностные преимущества по сравнению с глобальными регуляризирующими алгоритмами. Не повторяя построений этих работ, приведем только некоторые выражения, необходимые для построения локального дескриптивного алгоритма.

Введем величины

$$\tilde{S}_j = \sigma_\eta^2 / \tilde{y}_j^2, \quad S_j^{(l)} = \sigma_\eta^2 / (\lambda_j x_j^{(l)})^2, \quad j = 1, \dots, p, \quad (4.2.5)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

где $x_j^{(l)}$ – проекции вектора $x^{(l)} = V_p^T \varphi^{(l)}$. В качестве «стартового» решения $\varphi^{(0)}$ может быть принято любое решение СЛАУ, которое сходится к $\bar{\varphi}^+$ при $\sigma_\eta^2 \rightarrow 0$. В частности, таким решением может быть регуляризованное решение φ_α , построенное при $\alpha = \alpha_w$, или приближенное нормальное псевдорешение $\tilde{\varphi}^+ = K^+ \tilde{f}$ (см. (2.1.25)).

Для каждого номера j рассмотрим квадратное уравнение

$$(S_j^{*(l)})^2 + \left(2 - \frac{1}{\tilde{S}_j}\right) S_j^{*(l)} + 1 = 0, \quad (4.2.6)$$

корни которого обозначим, как $S_{j,1}^{*(l)}$ и $S_{j,2}^{*(l)}$, $S_{j,1}^{*(l)} \leq S_{j,2}^{*(l)}$.

Для построения дескриптивного регуляризирующего алгоритма на основе локального алгоритма с уточнением отношений «шум/сигнал» вместо вектора x_α (см. (4.1.8)) рассмотрим вектор x_S размерности p , допускающий следующее представление:

$$x_S^{(l)} = R_{pS}^{(l)} z_p, \quad (4.2.7)$$

где диагональная матрица R_{pS} размером $p \times p$ имеет элементы:

$$r_{S_j}^{(l)} = \frac{1}{\lambda_j (1 + \tilde{S}_j^{(l)})}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (4.2.8)$$

а вектор $z_p = |y_1, y_2, \dots, y_p|^T$ составлен из первых p проекций вектора $y = U^T C_\eta^{-1/2} \tilde{f}$. Величины $\tilde{S}_j^{(l)}$ являются предельными точками итерационной процедуры уточнения «шум/сигнал» и поэтому их можно рассматривать как оценки для «точных» отношений «шум/сигнал» S_j . Оценки $\tilde{S}_j^{(l)}$ определяются следующим выражением:

$$\tilde{S}_j^{(l+1)} = \begin{cases} S_{j,1}^{*(l)}, & \text{если } \tilde{S}_j \leq 1/4 \text{ и } 0 \leq S_j^{(l)} < S_{j,2}^{*(l)}; \\ S_{j,2}^{*(l)}, & \text{если } \tilde{S}_j \leq 1/4 \text{ и } S_j^{(l)} = S_{j,2}^{*(l)}; \\ 0, & \text{если } \tilde{S}_j \leq 1/4 \text{ и } S_j^{(l)} > S_{j,2}^{*(l)}; \\ 0, & \text{если } \tilde{S}_j > 1/4. \end{cases} \quad (4.2.9)$$

Условием прекращения итераций является одновременное выполнение условий:

$$\frac{\|\tilde{S}^{(l)} - \tilde{S}^{(l-1)}\|}{\|\tilde{S}^{(l)}\|} \leq \varepsilon; \quad \frac{\|x_S^{(l)} - x_S^{(l-1)}\|}{\|x_S^{(l)}\|} \leq \varepsilon, \quad (4.2.10)$$

где ε – достаточно малая величина – порядка $10^{-4} \div 10^{-3}$.

Тогда, введя обозначения $d_p = -2z_p$, $D_{pS} = 2R_{pS}^{-1}$ и с учетом $\varphi_S = V_p x_S$, приходим к следующей задаче квадратичного программирования:

Задача А. Найти вектор x_S^* размерности p , доставляющий минимум функционалу

$$F_S(x) = \frac{1}{2} x^T D_{pS} x + x^T d_p + const \quad (4.2.11)$$

при ограничении

$$GV_p^T x_S \leq g. \quad (4.2.12)$$

Для данной прямой задачи сформулируем двойственную по Лагранжу задачу:

Задача В. Найти вектор μ^* размерности L , доставляющий минимум

$$\tilde{\psi}_S(\mu) = \frac{1}{4} \mu^T GV_p R_{pS} V_p^T G^T \mu - \mu^T (-g + GV_p x_S) + const \quad (4.2.13)$$

при ограничении

$$\mu \geq 0_L. \quad (4.2.14)$$

Решая данную задачу методами математического программирования, находим вектор μ^* и вектор

$$x_S^* = x_S - \frac{1}{2} R_{pS} V_p^T G^T \mu, \quad (4.2.15)$$

состоящий из двух слагаемых: вектора x_S , допускающего представление (4.2.7), и вектора, зависящего от решения μ^* двойственной задачи (4.2.13), (4.2.14). Очевидно, что если $\mu^* = 0$, то $x_S^* = x_S$.

Таким образом, построение дескриптивного локального регуляризованного решения φ_S^* , удовлетворяющего ограничениям $G\varphi \leq g$, можно представить следующими этапами:

- вычисляется вектор x_S локального регуляризованного решения (см. (4.2.7)), удовлетворяющего ограничениям (4.2.10);
- проверяются ограничения $GV_p x_S \leq g$;
- если эти ограничения выполняются, то $x_S^* = x_S$;
- если ограничения нарушаются, то находится решение μ^* двойственной задачи (4.2.13), (4.2.14) и вычисляется вектор x_S^* по формуле (4.2.15);
- строится вектор решения

$$\varphi_S^* = V_p x_S^*. \quad (4.2.16)$$

Учет априорной информации, задаваемой системой неравенств (4.2.12), делает описанный алгоритм построения φ_S^* нелинейным и обуславливает более высокую точность полученных решений по сравнению с локальным линейным регуляризирующим алгоритмом. Результаты вычислительного эксперимента подтверждают это.

Утверждение 4.2. Если искомое нормальное псевдорешение $\bar{\varphi}^+$, удовлетворяет системе неравенств (4.1.1), то вектор φ_S^* , определяемый (4.2.15), (4.2.16) является дескриптивным регуляризованным решением, т.е. существует для любой правой части \tilde{f} , удовлетворяет ограничением (4.1.1) и имеет среднеквадратическую сходимость

$$M \left[\|\varphi_S^* - \bar{\varphi}^+\|^2 \right] \rightarrow 0 \text{ при } M \left[\|\tilde{f} - f\|^2 \right] \rightarrow 0. \quad (4.2.17)$$

Доказательство основано на сходимости решения $\varphi_S = V_p x_S$ и выполнении ограничений (4.1.1) для вектора φ_S^* . ♣

§ 4.3. Исследования дескриптивных регуляризирующих алгоритмов

Для проверки работоспособности предложенных дескриптивных регуляризирующих алгоритмов был проведен обширный вычислительный эксперимент. Рассмотрим результаты двух из этих экспериментов.

В первом эксперименте вектор $\bar{\varphi}^+$ имел импульсную форму (рис. 4.1, кривая 1). Матрица системы имела размеры 100×30 , число обусловленности равно $3 \cdot 10^{10}$, относительный уровень погрешности $\delta_f = 0.05$. На рис. 4.1 а показана регуляризованное решение φ_α (кривая 2), построенное при $\alpha = \alpha_W = 0.5$ и $m(\lambda) = 1$ (нулевой порядок регуляризации) и имеющее относительную ошибку $\delta_{\varphi_\alpha} = \frac{\|\varphi_\alpha - \varphi\|}{\|\varphi\|} = 0.266$. Глобальное дескрип-

тивное решение φ_α^* (см. (4.1.18)) строилось при $\alpha = \alpha_w = 0.5$ с учетом ограничений $\varphi_j \geq 0$ (рис. 4.1 а, кривая 3). Это решение не имеет отрицательных проекций и имеет более высокую точность

$$\delta_{\varphi_\alpha^*} = \frac{\|\varphi_\alpha^* - \varphi\|}{\|\varphi\|} = 0.177.$$

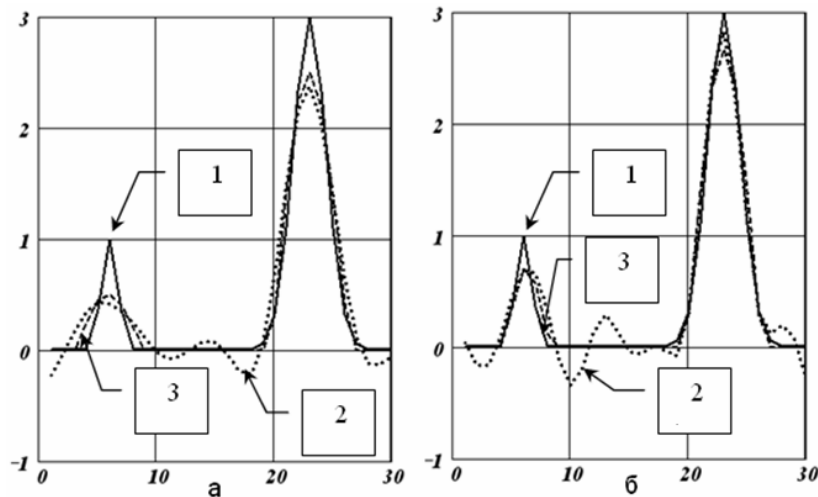


Рис. 4.1. Deskриптивные решения СЛАУ

Отсутствие в deskриптивном решении отрицательных компонент можно рассматривать как дополнительную стабилизацию регуляризованного решения. Поэтому предлагается *строить deskриптивное решение при значениях α_D на порядок меньших значений α_w* . На рис. 4.1 б показаны регуляризованные решения, построенные при $\alpha_D = 0.1 \cdot \alpha_w = 0.05$. Относительные ошибки этих решений равны:

$$\delta_{\varphi_\alpha} = \frac{\|\varphi_\alpha - \varphi\|}{\|\varphi\|} = 0.301, \quad \delta_{\varphi_\alpha^*} = \frac{\|\varphi_\alpha^* - \varphi\|}{\|\varphi\|} = 0.128.$$

Как видим, точность deskриптивного решения повышается.

Во втором эксперименте для тех же матрицы и вектора решений строился локальный deskриптивный алгоритм, в котором отношение «шум/сигнал» оценивалось выражением (4.2.9). Наблюдалось уменьшение СКО deskриптивного решения φ_S^* , однако это уменьшение в проведенных вычислительных экспериментах (относительный уровень погрешностей $\delta_f = 0.05-0.10$) составляло 5–10 %. При более низком уровне погрешностей выигрыш по точности возрастал.

В заключение этого параграфа отметим, что построенные deskриптивные алгоритмы позволяют учитывать априорную информацию об искомом решении, которую можно представить в виде системы неравенств (4.1.1) Приведенные примеры показывают, что *учет даже такой тривиальной информации о неотрицательности проекции решений существенно увеличивает точность регуляризованных решений СЛАУ*.

Вопросы для самопроверки

1. В чем суть глобального deskриптивного регуляризирующего алгоритма?
2. Сформулируйте задачу квадратичного программирования для поиска глобального deskриптивного решения
3. Сформулируйте эквивалентную двойственную задачу квадратичного программирования для поиска глобального deskриптивного решения
4. Запишите глобальное deskриптивное регуляризованное решение
5. Сформулируйте задачу квадратичного программирования для поиска локального deskриптивного решения
6. Сформулируйте эквивалентную двойственную задачу квадратичного программирования для поиска локального deskриптивного решения
7. Запишите локальное deskриптивное регуляризованное решение

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные в работе регуляризирующие алгоритмы позволяют строить устойчивые решения параметрических задач идентификации при самой различной информации о векторе параметров идентифицируемой модели: начиная от требований на «гладкость» искомого решения и заканчивая информацией о значениях или знаках проекций вектора решения. Использование сингулярного разложения как при построении регуляризованного решения, так и при выборе параметров регуляризирующих алгоритмов обуславливает высокую вычислительную эффективность приведенных алгоритмов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Арсенин В. Я.* Метод локальной регуляризации линейных операторных уравнений I рода и его приложения / В. Я. Арсенин, Ю. А. Криксин, А. А. Тимонов // ЖВМиМФ. – 1988. – Т. 28, № 6. – С. 793–802.
2. *Базара М.* Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы / М. Базара, К. Шетти ; пер. с англ. – М. : Мир, 1982. – 584 с.
3. *Воеводин В. В.* Матрицы и вычисления / В. В. Воеводин, Ю. А. Кузнецов. – М. : Наука, 1984. – 320 с.
4. *Васин В. В.* Методы решения неустойчивых задач / В. В. Васин. – Екатеринбург : Наука, 1989. – 248 с.
5. *Васин В. В.* Методы решения операторных уравнений с априорной информацией / В. В. Васин // Численные методы и оптимизация. – Таллин, 1988. – С. 70–80.
6. *Васин В. В.* Некорректные задачи с априорной информацией / В. В. Васин, А. Л. Агеев. – Екатеринбург : Наука, 1993. – 264 с.
7. *Воскобойников Ю. Е.* Выбор параметра регуляризации и ошибки восстановления входного сигнала в методе статистической регуляризации / Ю. Е. Воскобойников // Автометрия. – 1975. – № 4. – С. 10–18.
8. *Воскобойников Ю. Е.* Восстановление сигналов на входе измерительного преобразователя методом статистической регуляризации / Ю. Е. Воскобойников, А. Я. Колп // Ученые записки ЦАГИ. – 1976. – № 4. – С. 38–45.
9. *Воскобойников Ю. Е.* Регуляризирующий алгоритм обращения уравнения Абеля / Ю. Е. Воскобойников // Инженерно-физический журнал. – 1980. – Т. 34, № 2. – С. 270–274.
10. *Воскобойников Ю. Е.* Выбор параметра регуляризации при решении обратных измерительных задач / Ю. Е. Воскобойников, Н. Г. Преображенский // Автометрия. – 1984. – № 2. – С. 31–38.
11. *Воскобойников Ю. Е.* Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике / Ю. Е. Воскобойников, Н. Г. Преображенский, А. И. Седельников. – Новосибирск : Наука, 1984. – 238 с.
12. *Воскобойников Ю. Е.* Проблема редукиции к «идеальной трубе» в экспериментально аэродинамике / Ю. Е. Воскобойников, Н. Г. Преображенский, Н. Н. Яненко // Доклады АН СССР. – 1984. – Т. 274, № 6. – С. 1261–1264.
13. *Воскобойников Ю. Е.* Нелинейный регуляризирующий алгоритм редукиции к идеальному прибору / Ю. Е. Воскобойников,

- Н. Г. Преображенский // Оптика и спектроскопия. – 1988. – Т. 64. – № 2. – С. 61–69.
14. *Воскобойников Ю. Е.* Эффективный алгоритм решения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений при интерпретации экспериментальных данных / Ю. Е. Воскобойников // Автометрия. – 1988. – № 5. – С. 104–110.
 15. *Воскобойников Ю. Е.* Решение обратных измерительных задач с заданными точностными характеристиками / Ю. Е. Воскобойников // Автометрия. – 1988. – № 2. – С. 13–21.
 16. *Воскобойников Ю. Е.* Нелинейный регуляризирующий алгоритм решения одного класса обратных задач теплопроводности / Ю. Е. Воскобойников // Инженерно-физический журнал. – 1989. – Т. 56. – № 3. – С. 29–35.
 17. *Воскобойников Ю. Е.* Решение обратных измерительных задач на выпуклых множествах / Ю. Е. Воскобойников // Автометрия. – 1990. – № 1. – С. 21–28.
 18. *Воскобойников Ю. Е.* Нелинейный регуляризирующий алгоритм восстановления импульсных сигналов / Ю. Е. Воскобойников // Автометрия. – 1993. – № 6. – С. 35–42.
 19. *Воскобойников Ю. Е.* Оценивание оптимального параметра регуляризирующего алгоритма восстановления изображений / Ю. Е. Воскобойников // Автометрия. – 1995. – № 3. – С. 64–72.
 20. *Воскобойников Ю. Е.* Методы решения некорректных задач параметрической идентификации : учеб пособие / Ю. Е. Воскобойников. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 1996. – 90 с.
 21. *Воскобойников Ю. Е.* Асимптотическая локальная регуляризация плохо обусловленных систем алгебраических уравнений / Ю. Е. Воскобойников, И. Н. Мухина // Труды XI Байкальской междунар. школы-семинара. – Иркутск : Изд-во ИСЭМ СО РАН, 1998. – Т. 4. – С. 86–89.
 22. *Воскобойников Ю. Е.* Регуляризирующий алгоритм восстановления изображений с уточнением локальных отношений шум/сигнал / Ю. Е. Воскобойников, И. Н. Мухина // Автометрия. – 1999. – № 4. – С. 71–83.
 23. *Воскобойников Ю. Е.* Локальный регуляризирующий алгоритм восстановления контрастных сигналов и изображений / Ю. Е. Воскобойников, И. Н. Мухина // Автометрия. – 2000. – № 3. – С. 45–53.
 24. *Воскобойников Ю. Е.* Эффективный регуляризирующий алгоритм с векторным параметром регуляризации / Ю. Е. Воскобойников,

- И. Н. Мухина // Тезисы докл. IV Сибирского конгресса ИНПРИМ-2000. – Новосибирск : Изд-во Института математики СО РАН, 2000. – Ч. II. – С. 79–80.
25. *Воскобойников Ю. Е.* Локальные регуляризирующие алгоритмы решения систем линейных алгебраических уравнений. Препринт № 1(1) / Ю. Е. Воскобойников, И. Н. Мухина. – Новосибирск : Изд-во НГАСУ, 2001. – 36 с.
 26. *Воскобойников Ю. Е.* Синтез рекуррентных алгоритмов идентификации параметров динамических систем / Ю. Е. Воскобойников // Научный вестник НГТУ. – 2001. – № 2 (90). – С. 23–32.
 27. *Воскобойников Ю. Е.* Дескриптивный локальный регуляризирующий алгоритм решения плохо обусловленных систем алгебраических уравнений / Ю. Е. Воскобойников, И. Н. Мухина // Доклады Сибирского отделения Академии наук высшей школы. – 2002. – № 2 (6). – С. 11–19.
 28. *Воскобойников Ю. Е.* Рекуррентное оценивание в динамических системах : учеб. пособие / Ю. Е. Воскобойников. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2002. – 92 с.
 29. *Воскобойников Ю. Е.* Алгоритм фильтрации контрастных сигналов с векторным параметром сглаживания / Ю. Е. Воскобойников, И. Н. Мухина // Доклады Академии наук высшей школы России. – 2004. – № 2 (3). – С. 25–33.
 30. *Воскобойников Ю. Е.* Численная реализация и сравнение четырех способов выбора параметра регуляризации в устойчивых алгоритмах деконволюции / Ю. Е. Воскобойников // Научный вестник НГТУ. – 2004. – № 2 (17). – С. 27–44 (электронная версия: www.ngasu.nsk.su/prikl/deconv04.html).
 31. *Воскобойников Ю. Е.* Дескриптивный алгоритм восстановления входных сигналов оптических систем / Ю. Е. Воскобойников, К. А. Втюрин, В. А. Литасов // Автометрия. – 2005. – Т. 41, № 3. – С. 3–10.
 32. *Воскобойников Ю. Е.* Квазиоптимальный алгоритм Фурье-фильтрации изображений / Ю. Е. Воскобойников, А. М. Кузнецов // Доклад АН ВШ РФ. – 2006. – № 2 (7). – С. 53–63.
 33. *Воскобойников Ю. Е.* Регуляризирующий алгоритм непараметрической идентификации при неточных исходных данных / Ю. Е. Воскобойников, В. А. Литасов // Научный вестник НГТУ. – 2005. – № 2 (20). – С. 33–45.
 34. *Воскобойников Ю. Е.* Устойчивый алгоритм идентификации параметров эквивалентной схемы замещения электрического разряда /

- Ю. Е. Воскобойников, В. А. Литасов // Научный вестник НГТУ. – 2006. – № 4 (25). – С. 3–16.
35. *Воскобойников Ю. Е.* Устойчивый алгоритм восстановления изображения при неточно заданной аппаратной функции / Ю. Е. Воскобойников, В. А. Литасов // Автометрия. – 2006. – № 6. – С. 13–22.
36. *Воскобойников Ю. Е.* Частотно-пространственный устойчивый алгоритм восстановления контрастных изображений / Ю. Е. Воскобойников, В. А. Литасов // Научный вестник НГТУ. – 2006. – № 1 (22). – С. 3–14.
37. *Гончарский А. В.* О регуляризации некорректных задач с приближенно заданным оператором / А. В. Гончарский, А. С. Леонов и др. // ЖВМиМФ. – 1974. – Т. 14, № 4. – С. 1022–1027.
38. *Гончарский А. В.* Обобщенный принцип невязки / А. В. Гончарский, А. С. Леонов и др. // ЖВМиМФ. – 1973. – Т. 13, № 2. – С. 294–302.
39. *Гордонова В. И.* Численные алгоритмы выбора параметра регуляризации / В. И. Гордонова, В. А. Морозов // ЖВМиМФ. – 1973. – Т. 13, № 3.
40. *Дейч А. М.* Методы идентификации динамических систем / А. М. Дейч. – М. : Энергия, 1979. – 240 с.
41. *Жуковский Е. Л.* Метод наименьших квадратов для вырожденных и плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений / Е. Л. Жуковский // ЖВМиМФ. – 1977. – Т. 17, № 4. – С. 814–827.
42. *Жуковский Е. Л.* Статистическая регуляризация алгебраических систем уравнений / Е. Л. Жуковский // ЖВМиМФ. – 1972. – Т. 12, № 1. – С. 185–191.
43. *Жуковский Е. Л.* О численных статистических алгоритмах нахождения квазирешения условных линейных систем алгебраических уравнений / Е. Л. Жуковский, П. Н. Заикин // ЖВМиМФ. – 1975. – Т. 15, № 3. – С. 559–572.
44. *Иванов В. К.* Теория линейных некорректных задач и ее приложения / В. К. Иванов, В. В. Васин, В. П. Танана. – М. : Наука, 1978. – 206 с.
45. *Кукс Я. П.* Минимаксная линейная оценка коэффициентов регрессии / Я. П. Кукс, В. Ольман // Известия АН ЭССР. – 1972. – Т. 21, № 1. – С. 66–72.
46. *Лаврентьев М. М.* Линейные операторы и некорректные задачи / М. М. Лаврентьев, Л. Я. Савельев. – М. : Наука, 1991. – 331 с.
47. *Леонов А. С.* О критериях выбора параметра регуляризации при решении некорректных задач / А. С. Леонов // Сб. под ред. А. Н. Тихонова. – Новосибирск : Наука, 1982. – С. 77–84.
48. *Леонов А. С.* Метод L-кривой всегда дает неустранимую систематическую ошибку / А. С. Леонов, А. Г. Ягола // Вестник МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия. – 1997. – № 6. – С. 17–19.
49. *Леонов А. С.* Можно ли решить некорректно поставленную задачу без знания погрешностей данных? / А. С. Леонов, А. Г. Ягола // Вестник МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия. – 1995. – № 4. – С. 28–32.
50. *Медич Д. Ж.* Статистические оптимальные линейные оценки и управление / Д. Ж. Медич. – М. : Энергия, 1973. – 248 с.
51. *Морозов В. А.* О принципе невязки при решении операторных уравнений методом регуляризации / В. А. Морозов // ЖВМиМФ. – 1968. – Т. 8, № 2. – С. 295–309.
52. *Морозов В. А.* Об оптимальной регуляризации операторных уравнений / В. А. Морозов // ЖВМиМФ. – 1970. – Т. 10, № 4. – С. 818–829.
53. *Морозов В. А.* Об эффективном численном алгоритме построения псевдорешения / В. А. Морозов // ЖВМиМФ. – 1971. – Т. 11, № 1. – С. 38–44.
54. *Морозов В. А.* Регулярные методы решения некорректно поставленных задач / В. А. Морозов. – М. : Наука, 1987. – 240 с.
55. *Морозов В. А.* Об алгоритмах дескриптивной регуляризации решений интегральных уравнений Фредгольма I рода / В. А. Морозов, Н. Л. Гольдман. – М. : Изд-во МГУ, 1976. – С. 52–72.
56. *Морозов В. А.* Методы решения некорректно поставленных задач: алгоритмический аспект / В. А. Морозов, А. И. Гребенников. – М. : Изд-во МГУ, 1992. – 319 с.
57. *Муравьев М. В.* Об оптимальных и предельных свойствах байесовского решения системы линейных алгебраических уравнений / М. В. Муравьев // ЖВМиМФ. – 1973. – Т. 13, № 4. – С. 819–828.
58. *Мухина И. Н.* Дескриптивный регуляризирующий алгоритм решения плохо обусловленных систем уравнений / И. Н. Мухина // Труды НГАСУ. – Новосибирск : Изд-во НГАСУ, 1999. – Т. 2, № 1 (4). – С. 11–16.
59. *Мухина И. Н.* Нелинейный регуляризирующий алгоритм решения плохо обусловленных систем алгебраических уравнений / И. Н. Мухина // Труды НГАСУ. – Новосибирск : Изд-во НГАСУ, 1998. – Т. 1, № 1 (1). – С. 119–122.

60. Мухина И. Н. Точностные характеристики алгоритма решения систем линейных уравнений / И. Н. Мухина // Сб. науч. тр. НГТУ. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2000. – № 5 (22). – С. 39–44.
61. Мухина И. Н. Локальный алгоритм фильтрации контрастных сигналов / И. Н. Мухина // Тезисы докл. IV Сибирского конгресса ИНПРИМ-2000. – Новосибирск : Изд-во Ин-та математики, 2000. – Ч. IV. – С. 36.
62. Мухина И. Н. Синтез регуляризирующих алгоритмов параметрической идентификации / И. Н. Мухина // Тезисы докл. Всероссийской научн. конф. ААНЗ-2001. – Екатеринбург : Урал, 2001. – С. 296–297.
63. Сейдж Э. Теория оценивания и ее применение в связи и управлении / Сейдж Э., Дж. Мелс. – М. : Связь, 1976. – 428 с.
64. Сизиков В. С. Анализ методов локальной регуляризации и формулировка методов субоптимальной фильтрации решения уравнений I рода / В. С. Сизиков // ЖВМиМФ. – 1999. – Т. 39, № 5. – С. 718–733.
65. Титаренко В. Н. Применение метода GVC для корректных и некорректных задач / В. Н. Титаренко, А. Г. Ягола // Вестник МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия. – 2000. – № 4. – С. 15–18.
66. Тихонов А. Н. О регуляризации некорректно поставленных задач / А. Н. Тихонов // Доклады АН СССР. – 1963. – Т. 153, № 1. – С. 49–52.
67. Тихонов А. Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации / А. Н. Тихонов // Доклады АН СССР. – 1963. – Т. 151, № 3. – С. 501–504.
68. Тихонов А. Н. Об устойчивости обратных задач / А. Н. Тихонов // Докл. АН СССР. – 1943. – Т. 39, № 5. – С. 195–198.
69. Тихонов А. Н. Методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. – М. : Наука, 1986. – 285 с.
70. Тихонов А. Н. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация / А. Н. Тихонов, А. В. Гончарский, В. В. Степанов и др. – М. : Наука, 1988. – 198 с.
71. Тихонов А. Н. Численные методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, А. В. Гончарский, В. В. Степанов и др. – М. : Наука, 1990. – 231 с.
72. Турчин В. Ф. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач / В. Ф. Турчин, В. П. Козлов и др. // Успехи физических наук. – 1970. – Т. 102, № 3. – С. 345–386.
73. Турчин В. Ф. Восстановление оптических спектров и других неотрицательных функций по методу статистической регуляризации / В. Ф. Турчин, Л. С. Туровцева // Оптика и спектроскопия. – 1974. – Т. 36, № 2. – С. 280–287.
74. Федотов А. М. Линейные некорректные задачи со случайными ошибками в данных / А. М. Федотов. – Новосибирск : Наука, 1982. – 189 с.
75. Федотов А. М. Некорректные задачи со случайными ошибками в данных / А. М. Федотов. – Новосибирск : Наука, 1990. – 279 с.
76. Форсайт Дж. Машинные методы математических вычислений / Дж. Форсайт, М. Макольм, К. Моулер ; пер. с англ. – М. : Мир, 1980. – 278 с.
77. Ягола А. Г. Некорректно поставленные задачи с приближенно заданным оператором / А. Г. Ягола // Сб. под ред. А. Н. Тихонова. – Новосибирск : Наука. – 1982.
78. Ягола А. Г. О выборе параметра регуляризации по обобщенному принципу невязки / А. Г. Ягола // ДАН. – 1979. – Т. 245, № 1. – С. 37–39.
79. Bertero M. Regularized and positive-constrained inverse methods in the problem of object restoration / M. Bertero, V. Dovi // Opt. Act. – 1981. – V. 28, № 12. – P. 1635–1649.
80. Engl H. W. A posteriori parameter choice methods for general methods for solving linear ill-posed problems / H. W. Engl, H. Gfrerer // Appl. Numer. Math. – 1988. – № 4. – P. 395–417.
81. Golub G. H. Generalized cross validation as a method for choosing a good ridge parameter / G. H. Golub, M. Heath, G. Wahba // Technometrics. – 1979. – V. 21. – P. 215–222.
82. Golub G. H. Singular value decomposition and least squares solution / G. H. Golub, C. Reinsch. – Heidelberg : Springer, 1971. – V. 2. – P. 138–147.
83. Graven C. Smoothing noisy data with spline functions: estimating the correct degree of smoothing by the method of generalized cross validation / C. Graven, G. Wahba // Numer. Math. – 1979. – V. 31, № 3. – P. 377–403.
84. Hadamard J. Le probleme de Cauchy et les equations aux derives partielles lineaires hyperbolique / J. Hadamard. – Paris : Hermann, 1932.
85. Hansen P. C. The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems / P. C. Hansen, D. P. O’Leary // SIAM J. Sci. Comput. – 1993. – V. 14. – № 8. – P. 1487–1503.

86. *Hemmerle W. J.* An explicit solution for generalized ridge regression / W. J. Hemmerle // *Tecnometrics*. – 1975. – V. 17, № 3. – P. 309.
87. *Karajiannis N. B.* Regularization theory in image restoration – the stabilizing functional approach / N. B. Karajiannis, A. N. Venetsanopoulos // *IEEE Trans. on Acoust. Speech and Sign. Proces.* – 1990. – V. 38, № 7. – P. 1155.
88. *Lukas M. A.* Comparison of parameter choice methods for regularization with discrete noisy data / M. A. Lukas // *Inverse Problem*. – V. 14, № 2. – P. 161–184.
89. *Mukhina I. N.* A descriptive local regularizing algorithm for the linear algebraic equations sets solving / I. N. Mukhina // *Proc. of 12-th Baikal International Conference*. – Irkutsk : IES SB RAS, 2001. – V. 4. – P. 148–151.
90. *Reeves S. J.* Optimal estimation of the regularization parameter and stabilizing functional for regularized image restoration / S. J. Reeves, R. M. Mersereau // *Optical Engineering*. – 1990. – V. 29, № 5. – P. 446–457.
91. *Reginska T.* A regularization parameter in discrete ill-posed problems / T. Reginska // *SIAM J. Sci. Comput.* – 1996. – V. 17, № 6. – P. 740–749.
92. *Vogel C. R.* Non-convergence of L-curve regularization parameter selection method / C. R. Vogel // *Inverse Problems*. – 1996. – V. 12, № 4. – P. 535–547.
93. *Voskoboynikov Yu. E.* Estimating the optimal parameter of regularizing algorithms for image restoration / Yu. E. Voskoboynikov // *Optoelectronics, Instrumentations and Data Processing*. – 1995. – № 3. – P. 64.
94. *Voskoboynikov Yu. E.* Regularizing algorithm of signals and images restoration with specification of the local relations noise/signal / Yu. E. Voskoboynikov, I. N. Mukhina // *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. – 1999. – № 4. – P. 71–82.
95. *Voskoboynikov Yu. E.* Local regularizing algorithm for high-contrast image and signal restoration / Yu. E. Voskoboynikov, I. N. Mukhina // *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. – 2000. – № 3. – P. 41–48.
96. *Voskoboynikov Yu. E.* Choice of the regularization parameter at unknown noise level / Yu. E. Voskoboynikov // *Proceedings of the International Conference «Ill-posed and Inverse Problems»*. – Novosibirsk : Изд-во Института математики СО РАН, 2003. – С. 32–35.
97. *Voskoboynikov Yu. E.* Descriptive restoration algorithm of the input signals of optical systems / Yu. E. Voskoboynikov, V. A. Litusov // *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. 2005. – V. 41, № 3. – P. 3–11.
98. *Voskoboynikov Yu. E.* Parametric identification regularization algorithms : accuracy characteristics / Yu. E. Voskoboynikov, K. A. Vtyurin // *Труды 3-й Междунар. науч. конф. «Обратные задачи: идентификация, проектирование и управление»*. – М : Изд-во МАИ. 2003. – С. 30–36.
99. *Wahba G.* Smoothing noisy data with spline functions / G. Wahba. – *Numer. Math.* 1975. – v. 24, № 2. – P. 383–393.
100. *Youla D. C.* Image restoration by the method of convex projections / D. C. Youla, H. Webb // *IEEE Trans. On Medical Imaging*. – 1982. – V. 1, № 2. – P. 81–103.