

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ СИСТЕМ
УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ (ТУСУР)

Ю.Е. Воскобойников
А.А. Мицель

НЕКОРРЕКТНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Часть 1. Лекционный курс

Учебное пособие

ТОМСК 2018

УДК 519.2
ББК 22.172
В 650

Воскобойников Ю. Е., Мицель А.А.

Некорректные задачи математической физики. Часть 1. Лекционный курс: учебное пособие/ Ю. Е. Воскобойников, А.А. Мицель/ Томский гос. ун-т систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР). – Томск, 2018. – 126 с.

В учебном пособии приводится системное изложение одного из разделов прикладной математики, связанного с устойчивыми методами и алгоритмами решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при численной аппроксимации многочисленных моделей обратных задач. 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 01.04.02. направления «Прикладная математика и информатика» и аспирантов направления 09.06.01. «Информатика и вычислительная техника» (профиль «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»). Результаты будут полезны также широкому кругу студентов, магистрантов, аспирантов, исследователей, занимающихся решением задач параметрической идентификации и обработки экспериментальных данных.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	6
ГЛАВА 1. ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ	7
§ 1.1. Примеры обратных задач	7
1.1.1. Радиоактивный распад веществ	8
1.1.2. Задача химической кинетики	10
1.1.3. Ускоренное движение материальной точки	10
1.1.4. Задача об искажающем влиянии прибора	11
1.1.5. Задача лазерного газоанализа	12
1.1.6. Касательное зондирование аэрозоля верхней атмосферы	13
§ 1.2. Численная аппроксимация дифференциальных и интегральных уравнений	17
1.2.1. Аппроксимация обыкновенных дифференциальных уравнений	17
1.2.1.1 Аппроксимация задачи распада радиоактивных веществ	17
1.2.1.2 Аппроксимация задачи химической кинетики	19
1.2.1.3. Аппроксимация задачи об ускоренном движении материальной точки	23
1.2.2. Аппроксимация интегральных уравнений	24
§ 1.3. Параметрические модели динамических систем	28
1.3.1. Множественные регрессионные модели	29
1.3.2. Регрессионная модель временного ряда	31
1.2.3. Модели динамических систем в пространстве состояний	32
Вопросы для самопроверки	34
Глава 2. НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННЫЕ ЗАДАЧИ	36
§ 2.1. Корректно и некорректно поставленные задачи	36
2.1.1. Прямые и обратные задачи	36
2.1.2. Некорректно поставленные задачи	37
2.1.3. Корректность по Тихонову и множество	40

корректности	
§2.2. Вырожденные СЛАУ и нормальное решение	41
§2.3. Несовместные СЛАУ и псевдорешение	42
§2.4. Плохо обусловленные СЛАУ и число обусловленности	44
§2.5. Сингулярное разложение матрицы	46
§2.6. SVD-алгоритм построения нормального псевдорешения	48
Вопросы для самопроверки	53
Глава 3. ОПТИМАЛЬНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ	54
§3.1. Байесовский регуляризирующий алгоритм	54
§3.2. Минимаксный регуляризирующий алгоритм	59
Вопросы для самопроверки	61
Глава 4. СТАТИСТИЧЕСКИЕ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ ПРИ НЕПОЛНОЙ АПРИОРНОЙ ИНФОРМАЦИИ	62
§4.1. Неполная информация и сглаживающий функционал	62
§4.2. Гладкость решения и стабилизирующий функционал	66
§4.3. Систематическая и случайная ошибки решения φ_α	71
Вопросы для самопроверки	74
Глава 5. АЛГОРИТМЫ ВЫБОРА ПАРАМЕТРА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ	75
§5.1. Выбор параметра регуляризации на основе критерия оптимальности	75
§5.2. Алгоритм выбора параметра по статистическому варианту принципа невязки	80
§5.3. Выбор параметра методом перекрестной значимости	83
§5.4. Построение доверительных интервалов для решения $\bar{\varphi}^+$	85
§5.5. Точностные характеристики регуляризирующих алгоритмов	86

Вопросы для самопроверки	91
Глава 6. РЕКУРРЕНТНЫЕ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ	92
§6.1. Рекуррентный регуляризирующий алгоритм	92
§6.2. Точностные характеристики рекуррентного регуляризирующего алгоритма	96
Вопросы для самопроверки	100
Глава 7. ЛОКАЛЬНЫЙ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЙ АЛГОРИТМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ	102
§ 7.1. Локальный регуляризирующий алгоритм с векторным параметром регуляризации	102
§ 7.2. Построение локального регуляризирующего алгоритма	103
§ 7.3. Выбор параметра локального регуляризирующего алгоритма	108
§ 7.4. Результаты вычислительного эксперимента	109
Вопросы для самопроверки	112
Глава 8. ДЕСКРИПТИВНЫЕ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ	113
§ 8.1. Глобальный дескриптивный регуляризирующий алгоритм	113
Вопросы для самопроверки	116
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	117
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	118

ВВЕДЕНИЕ

Многие задачи 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 обратных задач 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 обратных задачах 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 трактовке и графической интерпретации излагаемых методов и алгоритмов.

Глава 1

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.

§ 1.1 Примеры обратных задач

Цель различных экспериментов состоит в изучении свойств объектов или процессов. При этом часто возникают ситуации, в которых объект или процесс либо принципиально не доступны для непосредственного наблюдения, либо это наблюдение связано с очень большими затратами. В качестве примеров можно привести астрофизические эксперименты по изучению звезд, медицинские эксперименты, направленные на исследование внутренних органов человека, эксперименты для проверки качества различных изделий (неразрушающий контроль), эксперименты по изучению внутреннего строения Земли с целью поиска полезных ископаемых, исследование газового и аэрозольного состава атмосферы Земли и многие другие. Характерной чертой задач интерпретации экспериментальных данных является то, что свойства объекта нужно определить по косвенным его проявлениям. Например, определить место и мощность произошедшего землетрясения по измерениям колебаний на поверхности земли. Таким образом, речь идет о задачах, в которых требуется определить причины, если известны полученные в результате наблюдений следствия. Задачи такого типа называют обратными, в отличие от прямых задач, в которых по известной причине ищут следствие. Решение подобных задач, состоящих в обращении причинно-следственных связей, как правило, связано с преодолением

существенных трудностей, и успех зависит как от количества и качества экспериментальных данных, так и от методов их обработки. Первый фактор представляет собой техническую проблему, решение которой целиком зависит от экспериментатора. Вторым фактором – обработка экспериментальных данных представляет собой.

Для решения обратной задачи требуется математическая модель исследуемого объекта или процесса. По экспериментальным данным вычисляют параметры математической модели. Приведем примеры постановок обратных задач [1].

1.1.1. Радиоактивный распад веществ

Процесс радиоактивного распада во времени описывается физическим законом, который заключается в том, что скорость распада пропорциональна количеству радиоактивного вещества, имеющемуся в данный момент времени. Коэффициент пропорциональности α является «паспортом» данного вещества и называется коэффициентом распада. Таким образом, математическая модель процесса распада радиоактивного вещества описывается задачей Коши для обыкновенного дифференциального уравнения

$$\begin{aligned} \frac{dm(t)}{dt} &= -\alpha m(t), \quad t \geq t_0, \\ m(t_0) &= M, \end{aligned} \tag{1.1}$$

где $m(t)$ – количество вещества в данный момент времени, M – количество радиоактивного вещества в начальный период времени. Если α и M известны, то решив задачу Коши, мы можем определять, как будет изменяться количество вещества с течением времени. Это прямая задача. Обратная задача для этого процесса состоит в следующем. Вид радиоактивного вещества, т.е. постоянная α и его первоначальное количество M

неизвестны. Из эксперимента можно определить количество вещества $m(t)$ для t из некоторого промежутка времени $t \in [a, b]$. Требуется по функции $m(t)$, заданной для $t \in [a, b]$, определить постоянные α и M . Таким образом, обратная задача заключается в определении коэффициента α в дифференциальном уравнении (1.1) и начального условия M по решению задачи Коши $m(t)$ для $t \in [a, b]$.

Проведем обобщение этой задачи. Рассмотрим процесс распада нескольких радиоактивных веществ

$$\begin{aligned} \frac{dm_i}{dt} &= -\alpha_i m_i(t), \quad t \geq t_0, \\ m_i(t_0) &= M_i, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Здесь $m_i(t)$ – количество i -го радиоактивного вещества в данный момент времени; M_i – начальное количество i -го радиоактивного вещества; α_i – коэффициент распада i -го вещества. Предположим, что величины α_i и M_i неизвестны, но из эксперимента может быть найдена функция $m(t) = \sum_{i=1}^N m_i(t)$, где $m_i(t)$ – решение задачи (1.2). Обратная задача заключается в следующем: для $t \in [a, b]$ задана функция $m(t)$, требуется определить постоянные α_i и M_i , $i = 1, \dots, N$. Обратная задача может быть в двух постановках. В первой постановке число радиоактивных веществ n известно, а во второй постановке – неизвестно. Таким образом, во второй постановке требуется определить количество веществ n , их коэффициенты распада α_i и первоначальные массы M_i , если

известна суммарная масса веществ $m(t) = \sum_{i=1}^N m_i(t)$ как

функция времени на интервале $t \in [a, b]$.

1.1.2. Задача химической кинетики

Рассмотрим процесс химической кинетики. Обозначим за $c_i(t)$ концентрацию i -го вещества, участвующего в процессе кинетики в момент времени t . Модель протекания химической реакции представляет собой задачу Коши для системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = \alpha_{i1}c_1(t) + \alpha_{i2}c_2(t) + \dots + \alpha_{iN}c_N(t), \quad (1.3)$$

$$c_i(t_0) = c_{i0}, \quad i = 1, \dots, N$$

Постоянные параметры α_{ij} характеризуют скорости изменения концентрации веществ, участвующих в реакции. Сформулируем обратную задачу. В течение некоторого интервала времени $t \in [a, b]$ измеряются концентрации веществ $c_i(t)$, $i = 1, \dots, N$ и требуется определить величины параметров α_{ij} , т.е. по решению системы дифференциальных уравнений (1.3) определить её коэффициенты. Здесь также возможны две постановки. Первая постановка – начальные условия c_{i0} известны и измеряются решения, соответствующие этим c_{i0} . Требуется определить величины α_{ij} . Во второй постановке величины c_{i0} неизвестны и требуется определить α_{ij} и c_{i0} .

1.1.3. Ускоренное движение материальной точки

Движение материальной точки по прямой в соответствии с законом Ньютона описывается дифференциальным уравнением

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(t), \quad (1.4)$$

где m – масса точки, $x(t)$ – её положение в момент времени t ; $F(t)$ – сила, действующая на точку. Начальное положение точки и её скорость известны $x(t_0) = x_0$, $x'(t_0) = v(t_0) = v_0$. Требуется определить силу $F(t)$, которая зависит от положения точки $F = F(x(t))$, по измеренным значениям положения точки $x(t)$ для различных значений массы. Таким образом, величина массы точки m является параметром, и обратная задача состоит в определении функции $F(m, t)$ по решению дифференциального уравнения (1.4) $x(t, m)$, заданному при $t \in [a, b]$ и $m \in [m_1, m_2]$.

1.1.4. Задача об искажающем влиянии прибора

Действие многих приборов, регистрирующих физические поля, описывается следующим образом. На вход прибора поступает сигнал $z(t)$, а на выходе регистрируется функция $u(t)$. Модель измерительного прибора определяется интегральным уравнением Вольтера 1 рода

$$\int_0^t K(t - \tau) z(\tau) d\tau = u(t), \quad (1.5)$$

или Фредгольма 1 рода

$$\int_a^b K(t - \tau) z(\tau) d\tau = u(t), \quad (1.6)$$

где $K(t - \tau)$ – ядро уравнения (известная функция). Обратная задача состоит в определении входного сигнала $z(t)$ по измеренному сигналу $u(t)$. Таким образом, получаем задачи

решения интегральных уравнений 1 рода, в которых функции $K(t - \tau)$ и $u(t)$ известны и требуется определить функцию $z(t)$.

1.1.5. Задача лазерного газоанализа [2].

Имеется перестраиваемый лазерный источник света, который генерирует излучение $J_0(\lambda_i)$ на n длинах волн λ_i , $i = 1, \dots, n$. Излучение проходит трассу длиной L , отражается от отражателя, возвращается назад и регистрируется приемником. Вдоль трассы имеется газовое облако размером L . Излучение при распространении вдоль трассы проходит сквозь облако и частично поглощается (см. рис.1.1) Облако включает m газов. Список газов известен. Необходимо определить содержание газов в облаке.

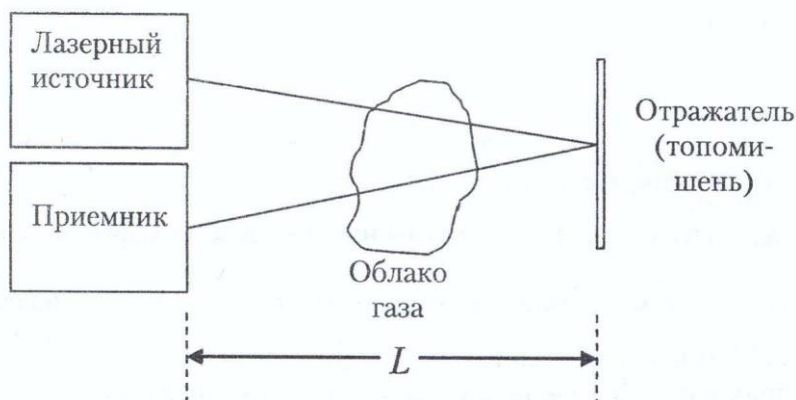


Рис. 1.1. Задача лазерного газоанализа.

Введем обозначения:

λ_i — длина волны излучения, которым облучают облако, $i = 1, \dots, n$;

x_j — концентрация j -го газа в облаке, $j = 1, \dots, m$;

k_{ij} – коэффициент поглощения на единицу концентрации j -го газа на i -ой длине волны;

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^m k_{ij} x_j \text{ – объёмный коэффициент поглощения на } i \text{-}$$

ой длине волны (определяется из эксперимента) по формуле

$$\alpha_i = -\frac{1}{2L} \ln(J(\lambda_i)/J_0(\lambda_i)), \quad (1.7)$$

где $J(\lambda_i)$, $J_0(\lambda_i)$ – интенсивность излучения на длине волны λ_i , прошедшее газовое облако и выходящее из лазерного источника соответственно.

Обратная задача состоит в следующем. По измеренным значениям интенсивности лазерного излучения $J(\lambda_i)$, $J_0(\lambda_i)$ и заданной матрице коэффициентов поглощения k_{ij} вычислить концентрации газов x_j , $j = 1, \dots, m$. Обратная задача сводится к решению системы алгебраических уравнений

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^m k_{ij} x_j, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.8)$$

1.1.6. Касательное зондирование аэрозоля верхней атмосферы [3].

На рис. 1.2 приведена геометрическая схема касательного зондирования атмосферы Земли. Здесь КА – космический аппарат, на котором установлен приемник рассеянного солнечного излучения в ультрафиолетовом диапазоне спектра; E_λ – солнечное излучение; R_\otimes – радиус Земли. Прибор измеряет рассеянное излучение Солнца в направлении l (см. рис. 1.2). Пунктирной линией показана верхняя граница атмосферы. При движении КА вокруг Земли, высота траектории

наблюдения h меняется от 0 до максимального значения, соответствующего верхней границе атмосферы (примерно 100 км). Предполагается, что атмосфера однородна.

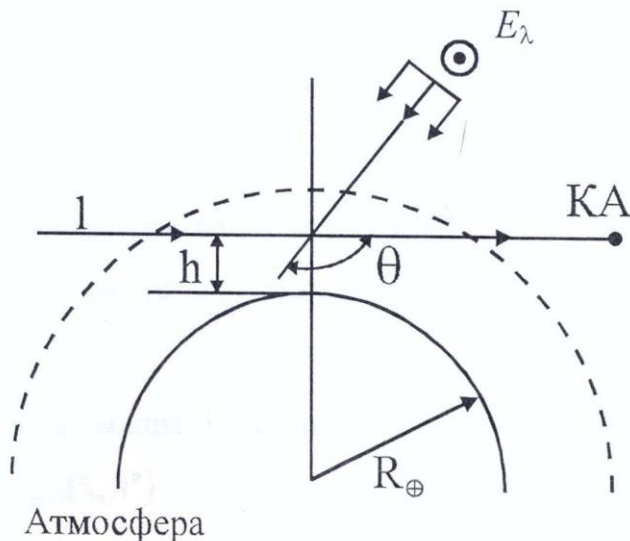


Рис. 1.2. Касательное зондирование.

Физической основой задачи дистанционного зондирования атмосферы является перенос излучения в газовых и аэрозольных средах. Математической основой для формирования обратной задачи является уравнение переноса излучения. В ультрафиолетовом диапазоне 250 – 300 нм дневное излучение атмосферы Земли определяется рэлеевским (молекулярным) рассеянием газами, поглощением озона и аэрозольным рассеянием.

Для касательной схемы зондирования энергетическая спектральная яркость атмосферы $I_\lambda(h)$ определяется выражением

$$I_\lambda(h) = E_\lambda \int_{L(h)} \left(\beta_{r,\theta}(\lambda, h^*) + \beta_{a,\theta}(\lambda, h^*) \right) \cdot e^{-\tau_E(\lambda, l) - \tau_{KA}(\lambda, l)} dl, \quad (1.9)$$

где интегрирование ведется вдоль луча визирования $l(h)$; h – высота луча визирования над поверхностью Земли; l – положение точки на луче; dl – элемент длины луча; E_λ – спектральная плотность потока солнечного излучения на длине волны λ , падающего на верхнюю границу атмосферы; $\beta_{r,\theta}(\lambda, h^*)$ и $\beta_{a,\theta}(\lambda, h^*)$ – объемные коэффициенты направленного молекулярного и аэрозольного светорассеяния; h^* – высота над поверхностью Земли в точке l на луче зрения; θ – угол рассеяния; $\tau_E(\lambda, l)$, $\tau_{KA}(\lambda, l)$ – оптические толщи атмосферы от верхней границы атмосферы H_{up} до точки l по солнечному лучу и от точки l до космического аппарата (КА) по линии визирования, соответственно:

$$\tau_E(\lambda, l) = \int_l^{H_{up}} (\beta_r(\lambda, h^*(l')) + \beta_a(\lambda, h^*(l')) + \alpha_o(\lambda, h^*(l'))) dl', \quad (1.10)$$

$$\tau_E(\lambda, l) = \int_l^{H_{ka}} (\beta_r(\lambda, h^*(l')) + \beta_a(\lambda, h^*(l')) + \alpha_o(\lambda, h^*(l'))) dl' \cdot 1.11$$

Коэффициенты направленного молекулярного и аэрозольного светорассеяния определяются выражениями

$$\beta_{r,\theta}(\lambda, h^*) = \beta_r(\lambda, h^*) \cdot g_r(\theta) / 4\pi,$$

$$\beta_{a,\theta}(\lambda, h^*) = \beta_a(\lambda, h^*) \cdot g_a(\theta) / 4\pi,$$

где $g_r(\theta)$ и $g_a(\theta)$ – индикатрисы молекулярного и аэрозольного светорассеяния, соответственно. Объемный коэффициент поглощения озона $\alpha_o(\lambda, h^*) = \sigma(\lambda) \cdot \rho(h^*)$, где $\sigma(\lambda)$ – сечение поглощения озона на длине волны λ ; $\rho(h^*)$ – концентрация озона на высоте h^* . Известными функциями в этой задаче считаются следующие: $\beta_{r,\theta}(\lambda, h^*)$ –

объемные коэффициенты направленного молекулярного светорассеяния; E_λ – спектральная плотность потока солнечного излучения на длине волны λ ; энергетическая спектральная яркость атмосферы $I_\lambda(h)$ (экспериментальные данные). Рассмотрим несколько вариантов обратной задачи.

1. По измеренным на разных высотах h энергетической спектральной яркости атмосферы $I_\lambda(h)$ на длине волны λ необходимо восстановить высотный профиль объёмного коэффициента аэрозольного рассеяния $\beta_a(\lambda, h)$. При этом известными считаются объёмный коэффициент поглощения озона $\alpha_o(\lambda, h^*)$ и индикатриса аэрозольного рассеяния $g_a(\theta)$.
2. По измеренным на разных высотах h энергетической спектральной яркости атмосферы $I_\lambda(h)$ на длине волны λ при различных углах падения солнечного излучения φ (УГОЛ $\theta = 90 + \varphi$) необходимо восстановить высотный профиль объёмного коэффициента направленного аэрозольного светорассеяния $\beta_{a,\theta}(\lambda, h^*)$. При этом известными считаются оптические толщи $\tau_E(\lambda, l)$, $\tau_{KA}(\lambda, l)$.
3. По измеренным на разных высотах h энергетической спектральной яркости атмосферы $I_\lambda(h)$ на разных длинах волны λ_i необходимо восстановить высотный профиль объёмного коэффициента аэрозольного рассеяния $\beta_a(\lambda_i, h)$. При этом известными считаются объёмный коэффициент поглощения озона $\alpha_o(\lambda_i, h^*)$ и индикатриса аэрозольного рассеяния $g_a(\theta)$.

§ 1.2. Численная аппроксимация дифференциальных и интегральных уравнений

1.2.1. Аппроксимация обыкновенных дифференциальных уравнений

1.2.1.1 Аппроксимация задачи распада радиоактивных веществ

Рассмотрим обратную задачу (1.1). Из эксперимента мы определяем количество радиоактивного вещества $m(t)$.

Аналитическое решение задачи имеет вид $m(t) = M \cdot e^{-\alpha t}$.

Введем сетку на интервале $[a, b]$: $t_i = a + i \cdot h$; $i = 0, 1, \dots, n$,

где $h = \frac{b-a}{n}$ – шаг сетки. Введем составной вектор

$z = \begin{pmatrix} M \\ \alpha \end{pmatrix}$, матрицу $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ -t_0 & -t_1 & -t_2 & \dots & -t_n \end{pmatrix}^T$, вектор

$u = (\ln(m(t_0)) \quad \ln(m(t_1)) \quad \dots \quad \ln(m(t_n)))^T$. Здесь

$M = \ln M$. Тогда обратную задачу можно представить в виде системы линейных алгебраических уравнений вида

$$A \cdot z = u. \quad (1.12)$$

Для задачи (1.2) получим нелинейную систему уравнений относительно неизвестных M_j и α_j

$$m(t_i) = \sum_{j=1}^N M_j e^{-\alpha_j t_i}; \quad i = 0, 1, \dots, n; \quad n \geq 2N; \quad (1.13)$$

$$t_i = a + i \cdot h, \quad i = 0, 1, \dots, n; \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

Линеаризуем систему (1.13). Пусть заданы начальные приближения переменных M_j^0 и α_j^0 , $j = 1, \dots, N$. Разложим в ряд правую часть (1.13) и ограничимся линейным приближением. В результате получим систему уравнений относительно поправок ΔM_j и $\Delta \alpha_j$

$$m(t_i) - m^0(t_i) = \sum_{j=1}^N \left(\Delta M_j e^{-\alpha_j^0 t_i} - M_j^0 e^{-\alpha_j^0 t_i} \Delta \alpha_j t_i \right). \quad (1.14)$$

Решив систему (1.14) получим окончательное решение

$$M_j = M_j^0 + \Delta M_j, \quad \alpha_j = \alpha_j^0 + \Delta \alpha_j, \quad j = 1, \dots, N.$$

Введем следующие обозначения:

$$u = \left(m(t_0) - m^0(t_0) \quad m(t_1) - m^0(t_1) \quad \dots \quad m(t_n) - m^0(t_n) \right)^T;$$

составной вектор

$$z = \left(\Delta M_1 \quad \dots \quad \Delta M_N \quad \Delta \alpha_1 \quad \dots \quad \Delta \alpha_N \right)^T;$$

матрицу A с элементами

$$A_{ij} = \begin{cases} e^{-\alpha_j^0 t_i}, & j = 1, \dots, N; \quad i = 0, 1, \dots, n; \\ -M_j^0 e^{-\alpha_j^0 t_i} t_i, & j = N+1, N+2, \dots, 2N; \quad i = 0, 1, \dots, n. \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
u1^{(1)} &= \left(\frac{c_1(t_1) - c_1(t_0)}{h} \quad \frac{c_1(t_2) - c_1(t_1)}{h} \quad \dots \quad \frac{c_1(t_n) - c_1(t_{n-1})}{h} \right)^T, \\
u1^{(2)} &= \left(\frac{c_2(t_1) - c_2(t_0)}{h} \quad \frac{c_2(t_2) - c_2(t_1)}{h} \quad \dots \quad \frac{c_2(t_n) - c_2(t_{n-1})}{h} \right)^T, \\
&\dots\dots\dots \\
u1^{(N)} &= \left(\frac{c_N(t_1) - c_N(t_0)}{h} \quad \frac{c_N(t_2) - c_N(t_1)}{h} \quad \dots \quad \frac{c_N(t_n) - c_N(t_{n-1})}{h} \right)^T,
\end{aligned} \tag{1.18}$$

вектора z_i с элементами

$$\begin{aligned}
z^{(1)} &= (\alpha_{11} \quad \alpha_{12} \quad \dots \quad \alpha_{1N})^T, \\
z^{(2)} &= (\alpha_{21} \quad \alpha_{22} \quad \dots \quad \alpha_{2N})^T, \\
&\dots\dots\dots \\
z^{(N)} &= (\alpha_{N1} \quad \alpha_{N2} \quad \dots \quad \alpha_{NN})^T,
\end{aligned} \tag{1.19}$$

и матрицу $A1$ с элементами

$$A1_{ij} = c_j(t_i), \quad j = 1, \dots, N; \quad i = 0, 1, \dots, n-1$$

В результате система (1.17) преобразуется в N систем вида

$$A1 \cdot z^{(j)} = u1^{(j)}, \quad j = 1, \dots, N. \tag{1.20}$$

б) *Схема Рунге – Кутты второго порядка.*

Для системы (1.16) получим

$$y_j^{i+1} = y_j^i + \frac{1}{2} \left[k_{j1}^i + k_{j2}^i \right], \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

где $y_j^{i+1} = y_j^i + \frac{1}{2} [k_{j1}^i + k_{j2}^i], \quad j = 1, 2, \dots, n,$

$$k_{j2}^i = h \cdot f_j(x_i + h, y_1^i + k_{11}^i, \dots, y_n^i + k_{n1}^i), \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Применим схему Рунге – Кутты второго порядка к нашей задаче (1.3)

$$c_1(t_{i+1}) = c_1(t_i) + \frac{h}{2} \cdot \left(\sum_{k=1}^N \alpha_{1k} c_k(t_i) + \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \left(c_k(t_i) + h \sum_{r=1}^N \alpha_{kr} c_r(t_i) \right) \right),$$

$$c_2(t_{i+1}) = c_2(t_i) + \frac{h}{2} \cdot \left(\sum_{k=1}^N \alpha_{2k} c_k(t_i) + \sum_{k=1}^N \alpha_{2k} \left(c_k(t_i) + h \sum_{r=1}^N \alpha_{kr} c_r(t_i) \right) \right),$$

.....

$$c_N(t_{i+1}) = c_N(t_i) + \frac{h}{2} \cdot \left(\sum_{k=1}^N \alpha_{Nk} c_k(t_i) + \sum_{k=1}^N \alpha_{Nk} \left(c_k(t_i) + h \sum_{r=1}^N \alpha_{kr} c_r(t_i) \right) \right)$$

Обозначим $u2^{(j)} = 2 \cdot u1^{(j)}, \quad j = 1, \dots, N,$ где компоненты векторов $u1^{(j)}$ определяются формулами (1.32).

Введем составной вектор $U = \begin{pmatrix} u2^{(1)} \\ u2^{(2)} \\ \dots \\ u2^{(N)} \end{pmatrix}$ размерности $(n \cdot N \times 1),$

составной вектор $Z = \begin{pmatrix} z^{(1)} \\ z^{(2)} \\ \dots \\ z^{(N)} \end{pmatrix}$ размерности $(N^2 \times 1),$ а также

составную матрицу $A2$ размерности $(n \cdot N \times N^2)$ с элементами

$$A2 = \begin{pmatrix} (1+h) \cdot A1 & h \cdot A1 & h \cdot A1 & \dots & h \cdot A1 \\ h \cdot A1 & (1+h) \cdot A1 & h \cdot A1 & \dots & h \cdot A1 \\ h \cdot A1 & h \cdot A1 & (1+h) \cdot A1 & \dots & h \cdot A1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ h \cdot A1 & h \cdot A1 & h \cdot A1 & h \cdot A1 & (1+h) \cdot A1 \end{pmatrix}.$$

В результате приходим к следующей системе линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных α_{ij} , $i, j = 1, \dots, N$

$$A2 \cdot Z = U. \quad (1.21)$$

1.2.1.3. Аппроксимация задачи об ускоренном движении материальной точки

Пусть время наблюдения изменяется в пределах $t \in [a, b]$.

Введем сетку $t = a + i \cdot h$; $i = 0, 1, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$. Из

эксперимента мы имеем значения $x(t_i)$ на сетке $\{t_i\}$ для различных значений массы m_j , $j = 1, \dots, p$. Используя численную аппроксимацию для второй производной 2-го порядка точности по параметру h получим следующее выражение для вычисления $F(m_j, t_i)$

$$m_j \frac{x(t_{i+1}) - 2x(t_i) + x(t_{i-1}))}{h^2} = F(m_j, t_i), \quad i = 1, \dots, n-1; \quad (1.23)$$

$$j = 1, \dots, p$$

Применим схему 4-го порядка точности к уравнению (1.4), получим формулу для вычисления действующей силы

$$F(m_j, t_i)$$

$$m_j \frac{-x(t_{i+2}) + 16x(t_{i+1}) - 30x(t_i) + 16x(t_{i-1}) - x(t_{i-2}))}{12h^2} = F(m_j, t_i); \quad (1.24)$$

$$i = 2, \dots, n-2; \quad j = 1, \dots, p.$$

1.2.2. Аппроксимация интегральных уравнений

Для численного решения интегральных уравнений необходимо интеграл заменить квадратурной суммой вида

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i y_i \quad (1.25)$$

где A_i – коэффициенты квадратурной формулы; y_i – значения подынтегральной функции в узлах сетки x_i ; n – количество узлов сетки. Очевидно, что точность аппроксимации интеграла квадратурной суммой зависит от количества узлов и от структуры сетки.

Рассмотрим несколько квадратур, начиная с простейшей [5].

а) *Формула прямоугольников.* Это самая простая квадратурная формула вычисления интеграла

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{i=1}^n f(\xi_i),$$

где $\xi_i = \xi_0 + i \cdot h$; $i = 1, 2, \dots, n$; $\xi_0 = a - \frac{h}{2}$ – узлы

сетки; h – шаг сетки.

Геометрически формула прямоугольников может быть представлена следующим рисунком:

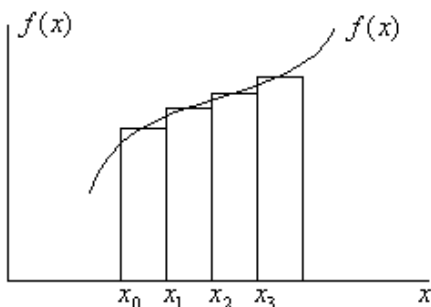


Рис. 1.3. Геометрическая интерпретация формулы
прямоугольников

Если функция $f(x)$ задана таблично, то используют либо формулу *левых прямоугольников*

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{i=0}^{n-1} y_i,$$

либо *правых прямоугольников*

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{i=1}^n y_i.$$

Рассмотрим интегральное уравнение (1.6). Пусть функция $u(t)$ измерена на сетке $t_i = a + (i - 1) \cdot h$, $i = 1, 2, \dots, n$, где

$h = \frac{b - a}{n}$. Введем сетку по переменной τ

$\tau_i = a + (i - 1) \cdot h$, $i = 1, \dots, n$. Тогда численная

аппроксимация уравнения (1.6) примет вид

$$\sum_{j=1}^n K(t_i - \tau_j) \cdot z(\tau_j) = u(t_i), \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.26)$$

где $K(t_i - \tau_j) = h \cdot K(t_i - \tau_j)$, $i, j = 1, \dots, n$. Таким образом,

мы пришли к системе линейных алгебраических уравнений.

б) *Формула трапеций*. Использование формулы трапеций приводит к следующему результату

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} [y_0 + 2(y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1}) + y_n].$$

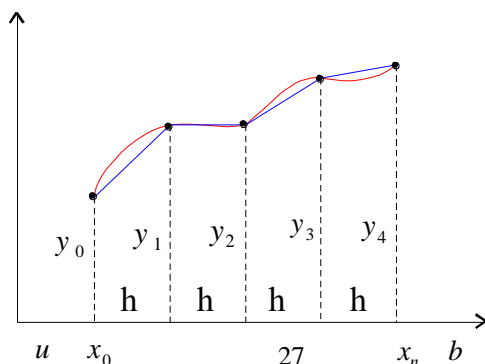


Рис. 1.4. Геометрическая интерпретация формулы трапеций.

Применим эту квадратуру к нашему интегральному уравнению

(1.6). Пусть функция $u(t)$ измерена на сетке

$t_i = a + i \cdot h, i = 0, 2, \dots, n$, где $h = \frac{b-a}{n}$. Введем сетку по

переменной $\tau \tau_i = a + i \cdot h, i = 0, 1, \dots, n$. Тогда численная

аппроксимация уравнения (1.6) примет вид

$$\sum_{j=0}^n K(t_i - \tau_j) \cdot z(\tau_j) = u(t_i), i = 0, \dots, n, \quad (1.27)$$

где

$$K(t_i - \tau_j) = h \cdot K(t_i - \tau_j), j = 1, \dots, n-1; i = 0, 1, \dots, n;$$

$$K(t_i - \tau_j) = \frac{h}{2} \cdot K(t_i - \tau_j), j = 0, n; i = 0, 1, \dots, n$$

Таким образом, мы опять пришли к системе линейных алгебраических уравнений.

б) *Формула Симпсона.*

Пусть $m = 2p$ есть четное число узлов сетки

$$\{x_i\}, x_i = a + ih, i = 0, \dots, n, h = \frac{b-a}{m} = \frac{b-a}{2p}$$

и $y_i = f(x_i)$.

Интеграл, вычисленный по формуле Симпсона, равен

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_m} f(x) dx = \frac{2h}{6} \sum_{k=1}^p [y_{2k-2} + 4y_{2k-1} + y_{2k}]$$

Применим этот результат к интегральному уравнению (1.6)

$$\sum_{j=1}^n K(t_i - \tau_j) \cdot z(\tau_j) = u(t_i), i = 0, \dots, n, \quad (1.28)$$

где

$$K(t_i - \tau_0) = \frac{h}{3} \cdot K(t_i - \tau_0), i = 0, 1, \dots, n;$$

$$K(t_i - \tau_j) = \frac{4h}{3} \cdot K(t_i - \tau_j), j = 1, 3, \dots, n-1; i = 0, 1, \dots, n;$$

$$K(t_i - \tau_{2k}) = \frac{2h}{3} \cdot K(t_i - \tau_j), k = 2, 4, \dots, n-2; i = 0, 1, \dots, n;$$

$$K(t_i - \tau_n) = \frac{h}{3} \cdot K(t_i - \tau_n), i = 0, 1, \dots, n.$$

При одном и том же количестве узлов точность квадратурных формул (1.26) - (1.28) повышается при переходе от формулы прямоугольников к формуле трапеций и далее к формуле Симпсона. Выбор количества узлов определяется возможностью измерительного прибора.

§ 1.3. 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.

1.3.1. 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 [43].

Часто в качестве регрессионной модели принимают линейную множественную регрессию вида:

$$\tilde{Y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon, \quad (1.29)$$

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:

$$\tilde{y}_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik} + \varepsilon_i, \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (1.30)$$

Запишем модель (1.30) 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:

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

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 (2.8) примет вид

$$\tilde{y} = X\beta + \varepsilon. \quad (1.31)$$

Обычно относительно модели (1.31) делают следующие предположения (которые часто называют условия Гаусса – Маркова):

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

P2. Математическое ожидание

$$M(\varepsilon) = 0_n, \quad (1.32)$$

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

P3. Матрица ковариации

$$V_\varepsilon = M[\varepsilon\varepsilon^T] = \sigma^2 I, \quad (1.33)$$

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

$$\text{rank}(X) = k + 1 \leq n. \quad (1.34)$$

Таким образом, построение оценок для коэффициентов β регрессионной модели сводится к решению системы уравнений (1.31). При этом система (1.31) 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.

1.3.2. Регрессионная модель временного ряда

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

$$\tilde{Y}(\tau) = t(\tau) + \varepsilon(\tau), \quad (1.35)$$

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:

$$t(\tau) = \beta_0 + \beta_1 \tau + \beta_2 \tau^2 + \dots + \beta_k \tau^k. \quad (1.36)$$

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

$$\tilde{y}_i = \beta_0 + \beta_1 \tau_i + \beta_2 \tau_i^2 + \dots + \beta_k \tau_i^k + \varepsilon_i, \quad i=1, \dots, n, \quad (1.37)$$

где $\tilde{y}_i = Y(\tau_i)$, $\varepsilon_i = \varepsilon(\tau_i)$. Измерения (1.37) 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 (1.30) 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

$$T_{n \times (k+1)} = \begin{pmatrix} 1 & \tau_1 & \tau_1^2 & \dots & \tau_1^k \\ 1 & \tau_2 & \tau_2^2 & \dots & \tau_2^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & \tau_n & \tau_n^2 & \dots & \tau_n^k \end{pmatrix}. \quad (1.38)$$

Тогда модель наблюдений (1.35) можно записать в матричном виде:

$$\tilde{y} = T\beta + \varepsilon \quad (1.39)$$

Таким образом, вновь оценивание коэффициентов функции тренда сводится к решению системы алгебраических уравнений (1.39). Следует заметить, что матрица T с элементами (1.38) имеет плохую обусловленность (числа обусловленности могут достигать $\sim 10^{10}$ и больших значений). Кроме этого возможны случаи, когда нарушается предположение **Р3**: ковариационная

матрица перестанет быть диагональной в силу наличия статистической связи между проекциями ε_i и ε_j , $i \neq j$.

1.3.3. Модели динамических систем в пространстве состояний

Пространство состояний часто используется для описания поведения динамических систем [36; 58; 71]. 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

$$\tilde{y}_i = k_i \beta + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots \quad (1.40)$$

где k_i – вектор строка с элементами $k_i = |k_{i1}, k_{i2}, \dots, k_{im}|$, ε_i – погрешности i -го измерения. Характерной особенностью модели (1.40) является то, что измерения \tilde{y}_i выполняются последовательно. Очевидно, что, «накопив» n измерений, можно сформировать систему алгебраических уравнений

$$\tilde{y} = K \beta + \varepsilon, \quad (1.41)$$

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

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

Тогда оценивание вектора состояния β сводится к решению системы (1.41). 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* [58; 71]. Если вектор β не является случайным, то можно использовать рекуррентный регуляризирующий алгоритм, рассмотренный в работах [34; 36]. Таким образом, при оценивании вектора состояния вновь необходимо решать систему алгебраических уравнений вида (1.39), 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 следующей главе.

Вопросы для самопроверки

1. Что понимают в математической физике под прямыми и обратными задачами?
2. Какими уравнениями описывается радиоактивный распад веществ?
3. В чем заключается обратная задача радиоактивного распада веществ?
4. Какими уравнениями описываются химическая реакция веществ?

5. Приведите постановки обратных задач химической кинетики.
6. Запишите модель ускоренного движения материальной частицы под действием силы.
7. В чем заключается обратная задача ускоренного движения частицы под действием силы
8. Запишите модель измерительной задачи.
9. В чем заключается обратная задача об искажающем влиянии прибора?
10. Запишите модель касательного зондирования аэрозоля верхней атмосферы
11. Какие постановки обратных задачи касательного зондирования аэрозоля верхней атмосферы вам известны?
12. Запишите численную аппроксимацию задачи радиоактивного распада одного вещества.
13. Запишите численную аппроксимацию задачи радиоактивного распада нескольких веществ.
14. Запишите численную аппроксимацию задачи химической кинетики с использованием схемы Рунге Кутты первого порядка
15. Запишите численную аппроксимацию задачи химической кинетики с использованием схемы Рунге Кутты второго порядка
16. Запишите численную аппроксимацию задачи об ускоренном движении материальной точки
17. Запишите численную аппроксимацию интегрального уравнения с использованием формулы прямоугольников.
18. Запишите численную аппроксимацию интегрального уравнения с использованием формулы трапеций.
19. Запишите численную аппроксимацию интегрального уравнения с использованием формулы Симпсона.
20. Запишите множественную регрессионную модель
21. Запишите регрессионную модель временного ряда

22. Запишите модель динамических систем в пространстве состояний

Глава 2

НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННЫЕ ЗАДАЧИ

В предыдущем разделе мы рассмотрели задачи, дающие необходимую информацию при решении задач физики, экономики геофизики и др.. Эти задачи 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).

Здесь будут 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.

§ 2.1. Корректно и некорректно поставленные задачи

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

2.1.1. Прямые и обратные задачи

Как уже указывалось в главе 1, в математической физике принято деление задач на прямые и обратные в зависимости от их ориентации относительно причинно-следственной связи.

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

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

$$\|\tilde{f} - f\| \leq \delta(\varepsilon) \text{ следует } \|\tilde{\varphi} - \varphi\| \leq \varepsilon, \quad (2.4)$$

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

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 10^{-5} \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 10^{-5} \end{vmatrix}. \quad (2.5)$$

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

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

$$\|\varphi\|^2 \leq C_\varphi. \quad (2.6)$$

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 (2.6), имеет проекции $|1.01, -0.99|$ и ошибку $\|\bar{\varphi} - \tilde{\varphi}_c\| = 1.99$, что существенно меньше ошибки решения $\tilde{\varphi} = |1.01, -999|^T$. Взяв $C_\varphi = 5$, получаем решение с проекциями $|1.01, -1.99|$ и ошибкой $\|\bar{\varphi} - \tilde{\varphi}_c\| = 3$. 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 (2.5). *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.

2.1.3. 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 (2.3) называется корректно поставленной по Тихонову, если выполнены следующие условия [48; 73; 74]:

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

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

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, возможно, некорректна по Адамару) часто называют *условно корректной задачей* [50; 73].

Общие принципы построения множества корректности и выбора из него подходящего (по определенным критериям) решения рассматриваются в так называемых *методах регуляризации некорректно поставленных задач* [8; 48; 58; 60; 70; 71; 73; 75; 78; 79]. Эти методы используются в последующих главах для решения рассматриваемых задач идентификации.

§2.2. 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.

§2.3. 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

$$\Psi_{HK}(\varphi) = \|f - K\varphi\|^2 = (f - K\varphi)^T (f - K\varphi) \quad (2.7)$$

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

$$\frac{d}{d\varphi} [(f - K\varphi)^T (f - K\varphi)] = K^T (f - K\varphi) = 0_M, \quad (2.8)$$

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

$$K^T K \varphi_{HK} = K^T f . \quad (2.9)$$

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

$$\varphi_{HK} = (K^T K)^{-1} K^T f . \quad (2.10)$$

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

$$\varphi^+ = K^+ f . \quad (2.11)$$

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:

$$\begin{aligned} K K^+ K &= K, \quad K^+ K K^+ = K^+; \\ (K K^+)^T &= K K^+; \quad (K^+ K)^T = K^+ K. \end{aligned} \quad (2.12)$$

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.

§2.4. Плохо обусловленные СЛАУ и число обусловленности

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

$$cond(K) = \|K\| \cdot \|K^{-1}\|, \quad (2.13)$$

где $\|K\|$ – согласованная норма матрицы. Так, для евклидовой нормы вектора существует несколько согласованных норм матриц [7]:

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

$$\|K\|_E = \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M k_{ij}^2 \right)^{1/2}; \quad (2.14)$$

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

$$\|K\|_S = \mu_{\max}^{1/2}, \quad (2.15)$$

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

Для последней нормы (2.15) имеем

$$cond(K) = (\mu_{\max} / \mu_{\min})^{1/2} \quad (2.16)$$

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:

$$\frac{\|\tilde{\varphi} - \bar{\varphi}\|}{\|\bar{\varphi}\|} \leq cond(K) \frac{\|\tilde{f} - \bar{f}\|}{\|\bar{f}\|}, \quad (2.17)$$

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 $K\tilde{\varphi} = \tilde{f}$ 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.

§2.5. Сингулярное разложение матрицы

Сингулярным разложением прямоугольной $N \times M$ матрицы K (коротко: SVD-разложением) называется представление [7; 74]:

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

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

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_M \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

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 (2.19), 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.

$$KK^T u_j = \gamma_j u_j, \quad \langle u_j, u_i \rangle = \begin{cases} 1, & k = j; \\ 0, & k \neq j, \end{cases} \quad (2.20)$$

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.

$$K^T K v_i = \beta_i v_i, \quad \langle v_j, v_i \rangle = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (2.21)$$

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

3) если ранг матрицы K равен p , то

$$\lambda_j > 0, \quad j = 1, 2, \dots, p; \quad \lambda_{p+1} = \lambda_{p+2} = \dots = \lambda_M = 0 \quad (2.22)$$

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 (2.21), (2.22) получаем $\gamma_i = \beta_i = \lambda_i^2$, $i = 1, 2, \dots, p$;

6) число обусловленности матрицы K полного ранга определяется соотношением

$$\text{cond}(K) = \lambda_{\max} / \lambda_{\min}; \quad (2.23)$$

7) норма матрицы K выражается как

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

8) имеет место следующее представление:

$$K = \lambda_1 u_1 v_1^T + \lambda_2 u_2 v_2^T + \dots + \lambda_M u_M v_M^T = \sum_{j=1}^M \lambda_j u_j v_j^T. \quad (2.24)$$

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 [7; 86].

§2.6. SVD-алгоритм построения нормального псевдорешения

Введем векторы

$$y = U^T f, \quad x = V^T \varphi \quad (2.25)$$

размерностью N и M соответственно. Тогда с учетом (2.19) систему $K\varphi = f$ можно преобразовать к эквивалентной системе:

$$\begin{aligned} \lambda_j x_j &= y_j, & j &= 1, \dots, M; \\ 0 &= y_j, & j &= M+1, \dots, N, \end{aligned} \quad (2.26)$$

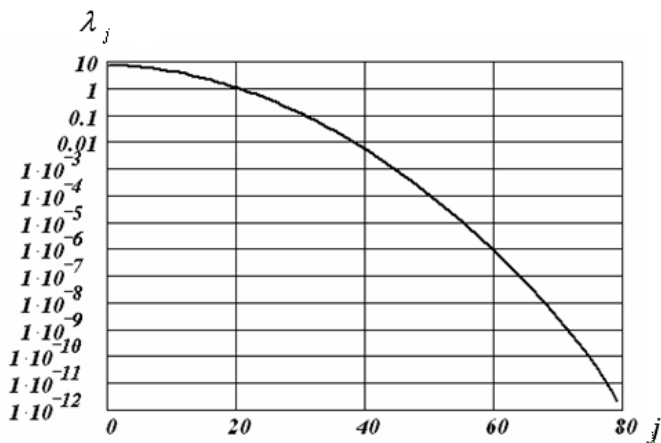


Рис. 2.1. Сингулярные числа матрицы K

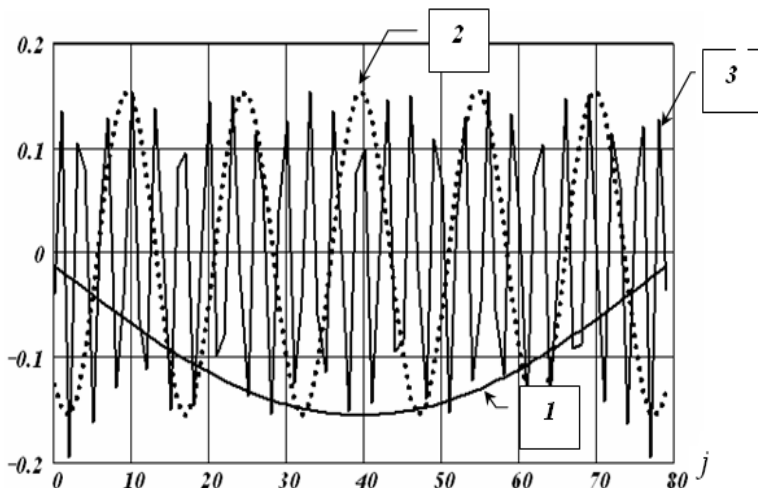


Рис. 2.2. Сингулярные векторы матрицы K

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 (2.25) функционал (2.7) можно записать в виде

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

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

$$x_j^+ = \frac{y_j}{\lambda_j}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (2.27)$$

а нормальное псевдорешение φ^+ выражается как

$$\varphi^+ = \sum_{j=1}^p x_j^+ \cdot v_j. \quad (2.28)$$

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

$$\{\Lambda^+\}_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_j}, & \text{если } i = j, \quad 1 \leq j \leq p; \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (2.29)$$

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

$$\bar{\varphi}^+ = V\Lambda^+U^T\bar{f}, \quad (2.30)$$

а матрица

$$K^+ = V\Lambda^+U^T \quad (2.31)$$

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]:

$$\inf_{\varphi \in \Phi_{HK}} \|\varphi\|_{W\varphi}^2, \quad (2.32)$$

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 $\|z\|_{V_z}^2$ означает квадратичную форму вида $z^T V_z z$. Построим алгоритм вычисления обобщенного нормального решения. Для этого введем сингулярное разложение.

$$W_\varphi^{-1/2} K W_f^{1/2} = U \Lambda V^T. \quad (2.33)$$

Следуя работе [57], можно доказать

Утверждение 2.1.1. Решение вариационной задачи (2.27) допускает представление

$$\varphi_o^+ = W_\varphi^{-1/2} \cdot V \cdot \Lambda^+ \cdot U^T \cdot W_f^{1/2} \cdot f = K_o^+ \cdot f, \quad (2.34)$$

а обобщенная псевдообратная матрица имеет вид

$$K_o^+ = W_\varphi^{-1/2} \cdot V \cdot \Lambda^+ \cdot U^T \cdot W_f^{1/2}, \quad (2.35)$$

где Λ^+ определена (2.29). ♣

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. (2.26), (2.27)):

$$\tilde{\varphi}^+ = \sum_{j=1}^p \left[\frac{\langle u_j, \bar{f} \rangle}{\lambda_j} + \frac{\langle u_j, \eta \rangle}{\lambda_j} \right] \cdot v_j = \sum_{j=1}^p \left[\bar{x}_j^+ + \frac{\langle u_j, \eta \rangle}{\lambda_j} \right] \cdot v_j. \quad (2.36)$$

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

большие значения 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. 2.2., кривые 2 и 3).

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

$$\varphi_\gamma^+ = \sum_{j=1}^p \left[F(\lambda_j) \cdot \frac{\langle u_j, \tilde{f} \rangle}{\lambda_j} \right] \cdot v_j, \quad (2.37)$$

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

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{если } \lambda > \gamma_0; \\ 0, & \text{если } \lambda \leq \gamma_0. \end{cases} \quad (2.38)$$

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

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. Что понимают под вырожденной системой линейных алгебраических уравнений?
5. Что понимают под нормальным решением?
6. Какая система называется несовместной?
7. Что является решением несовместной системы?
8. Дайте определение псевдообратной матрицы

9. Как определяют число обусловленности матрицы?
10. Приведите свойства числа обусловленности матрицы
11. Какие системы называют плохо обусловленными?
12. Как выполняется сингулярное разложение матрицы?
13. Какими свойствами обладает сингулярное разложение матрицы?
14. Приведите SVD-алгоритм построения нормального псевдорешения.
15. Запишите псевдорешение в терминах SVD-разложения

Глава 3

ОПТИМАЛЬНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ

В этой главе 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.

§3.1. Байесовский регуляризирующий алгоритм

Пусть дана система линейных алгоритмических уравнений вида

$$K\varphi = f \quad (3.1)$$

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

$$\tilde{f} = \bar{f} + \eta, \quad (3.2)$$

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, [46; 47; 58; 61; 76]). 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:

$$\Pi(\varphi_T, \bar{\varphi}) = \|\varphi_T - \bar{\varphi}\|^2. \quad (3.3)$$

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

$$\Delta_{cp}(T) = M_{\bar{\varphi}} \left[M_{\tilde{f}|\bar{\varphi}} \left[\Pi(T(\tilde{f}), \bar{\varphi}) \right] \right]. \quad (3.4)$$

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 (3.4).

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:

$$p(\bar{\varphi}) = N(m_{\bar{\varphi}}, V_{\bar{\varphi}}); \quad p(\tilde{f}|\bar{\varphi}) = N(K\bar{\varphi}, V_{\eta}). \quad (3.5)$$

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:

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

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

$$(K^T V_{\eta}^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1}) \varphi_B = K^T V_{\eta}^{-1} \tilde{f} + V_{\bar{\varphi}}^{-1} m_{\bar{\varphi}}. \quad (3.6)$$

Заметим, что вектор φ_B для квадратичной функции потерь (2.2.3) и распределений (3.5) максимизирует значения апостериорной плотности распределения $p(\varphi | \tilde{f})$, которая имеет вид

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

а, следовательно, доставляет минимум функционалу

$$F_B[\varphi] = \left\| \tilde{f} - K\varphi \right\|_{V_\eta^{-1}}^2 + \left\| \varphi - m_{\bar{\varphi}} \right\|_{V_{\bar{\varphi}}^{-1}}^2. \quad (3.7)$$

Рассмотрим точность построенного байесовского регуляризованного решения при следующих предположениях:

$$M[\eta] = 0_N; \quad M[\varphi\eta] = 0_{M \times N}. \quad (3.8)$$

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

$$\varepsilon_B = \varphi_B - \bar{\varphi}. \quad (3.9)$$

Для дальнейшего будет полезной следующая запись ошибки:

$$\begin{aligned} \varepsilon_B &= \left(K^T V_\eta^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1} \right)^{-1} \left(K^T V_\eta^{-1} (K\bar{\varphi} + \eta) + V_{\bar{\varphi}}^{-1} m_{\bar{\varphi}} \right) - \bar{\varphi} = \\ &= \left(K^T V_\eta^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1} \right)^{-1} \cdot \left[K^T V_\eta^{-1} \eta + V_{\bar{\varphi}}^{-1} (m_{\bar{\varphi}} - \bar{\varphi}) \right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Утверждение 3.1. Математическое ожидание $M[\varepsilon_B]$ определяется выражением

$$M[\varepsilon_B] = b_B = \left(K^T V_\eta^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1} \right)^{-1} V_{\bar{\varphi}}^{-1} (m_{\bar{\varphi}} - M_\varphi[\bar{\varphi}]), \quad (3.11)$$

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 (3.5) вычислить математическое ожидание $M[\varepsilon_B] = M_\varphi[M_\eta[\varphi_B - \bar{\varphi}]]$ от левой части (3.10).

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 3.2. 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:

$$V_{\xi_B} = (K^T V_{\eta}^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1})^{-1} K^T V_{\eta}^{-1} K (K^T V_{\eta}^{-1} K + V_{\bar{\varphi}}^{-1})^{-1}. \clubsuit \quad (3.12)$$

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

$$\varepsilon_B = b_B + \xi_B. \quad (3.13)$$

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 [15; 46; 47], 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 [76], которое в отличие от «частотного» распределения $p(\bar{\varphi})$ отражает степень нашего доверия тому или иному вектору решения φ .

Эти способы подробно рассмотрены в главе 3.

§3.2. 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 минимаксной критерии качества [45].

Математически это означает нахождение оператора $T_{onn}(\tilde{f})$, являющегося решением следующей минимаксной задачи:

$$\inf_T \sup_{\bar{\varphi} \in M} M_\eta \left[\left\| T(\tilde{f}) - \bar{\varphi} \right\|^2 \right]. \quad (3.14)$$

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

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

$$\Phi_1 = \left\{ \varphi : \langle \varphi, W_\varphi \cdot \varphi \rangle \leq \alpha \right\}; \quad (3.15)$$

$$\Phi_2 = \left\{ \varphi : \langle \varphi, e_j \rangle^2 \leq \lambda_j, j = 1, 2, \dots, M \right\}, \quad (3.16)$$

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:

$$\left(\alpha^{-1} W_\varphi + K^T V_\eta^{-1} K \right) \varphi_{MM} = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f}, \quad (3.17)$$

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

$$(W_\varphi^{-1} + K^T V_\eta^{-1} K) \varphi_{MM} = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f}. \quad (3.18)$$

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 [76; 79] 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 (3.15), (3.16)) средствами. Поэтому рассмотренные регуляризирующие алгоритмы можно назвать оптимальными на классах (множествах) решений.

Вопросы для самопроверки

1. Опишите Байесовский регуляризирующий алгоритм построения нормального псевдорешения СЛАУ.

2. Запишите ошибку решения, полученного Байесовским регуляризирующим алгоритмом.
3. Опишите минимаксный регуляризирующий алгоритм построения нормального псевдорешения СЛАУ.

Глава 4

СТАТИСТИЧЕСКИЕ РЕГУЛЯРИЗУЮЩИЕ 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 главе 3).

§4.1. Неполная информация и сглаживающий функционал

Обратимся к функционалу (3.7):

$$F_B(\varphi) = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{V_\eta^{-1}}^2 + \|\varphi - m_{\tilde{\varphi}}\|_{V_{\tilde{\varphi}}^{-1}}^2, \quad (4.1)$$

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 (4.1) 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 $N(m_{\tilde{\varphi}}, V_{\tilde{\varphi}})$, где $m_{\tilde{\varphi}}$ – вектор математического ожидания, $V_{\tilde{\varphi}}$ – ковариационная матрица (в общем случае не диагональная). Следовательно, второе слагаемое позволяет выделить множество векторов, «гладкость» которых адекватна ковариационной матрице $V_{\tilde{\varphi}}$.

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 (4.1). Такой функционал имеет вид

$$F_{\alpha}[\varphi] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{W_f}^2 + \alpha \|\varphi - \omega_{\varphi}\|_{W_{\varphi}}^2 \quad (4.2)$$

и является обобщением сглаживающего функционала А.Н. Тихонова [80; 81; 83]. Можно показать, что вектор φ_{α} , доставляющий минимум функционалу (2.3.2), является решением системы

$$(K^T W_f K + \alpha W_{\varphi}) \varphi_{\alpha} = K^T W_f \tilde{f} + \alpha W_{\varphi} \omega_{\varphi}, \quad (4.3)$$

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

$$\varphi_{\min_j} \leq \bar{\varphi}_j \leq \varphi_{\max_j}, \quad j = 1, \dots, M, \quad (4.4)$$

являющимися детерминированными ограничениями. Метод рандомизации [46; 47] 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 (4.4). Математическое ожидание \widehat{m}_φ такого вектора определяется как

$$\widehat{m}_\varphi = \left| \frac{\varphi_{\min_1} + \varphi_{\max_1}}{2}, \frac{\varphi_{\min_2} + \varphi_{\max_2}}{2}, \dots, \frac{\varphi_{\min_M} + \varphi_{\max_M}}{2} \right|^T, \quad (3.5)$$

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

$$\widehat{V}_\varphi = \text{diag} \left\{ \frac{(\varphi_{\max_1} - \varphi_{\min_1})^2}{4\mu_\beta}, \dots, \frac{(\varphi_{\max_M} - \varphi_{\min_M})^2}{4\mu_\beta} \right\}. \quad (3.6)$$

где μ_β является корнем нелинейного уравнения

$$\Phi(\mu_\beta) = \frac{\sqrt[M]{\beta}}{2}. \quad (3.7)$$

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 \widehat{m}_φ , \widehat{V}_φ в систему уравнений (3.6), получаем матричную запись алгоритма нахождения «рандомизированного» регуляризованного решения φ_p :

$$(K^T V_\eta^{-1} K + \widehat{V}_\varphi^{-1}) \varphi_p = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f} + \widehat{V}_\varphi^{-1} \widehat{m}_\varphi. \quad (3.8)$$

Если информация о шуме измерения задана в виде системы неравенств

$$|\tilde{f}_i - f_i| \leq \delta_i, \quad 1 \leq i \leq N, \quad (3.9)$$

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

$$\widehat{V}_\eta = \text{diag} \left\{ \frac{\delta_1^2}{4\mu_\beta}, \frac{\delta_2^2}{4\mu_\beta}, \dots, \frac{\delta_N^2}{4\mu_\beta} \right\} \quad (3.10)$$

и используем ее в алгоритме (3.8). Величина μ_β также определяется из уравнения (3.7), в числителе которого стоит корень N степени. Очевидно, что (3.8) является частным случаем системы (3.2) при следующих заменах:

$$W_f = V_\eta^{-1}; \quad W_\varphi = \widehat{V}_\varphi^{-1}; \quad \omega_\varphi = \widehat{m}_\varphi; \quad \alpha = 1. \quad (3.11)$$

Замечание 4.1. Априорная информация об искомом решении, задаваемая в виде неравенств (4.4), 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

$$b_p = M_\eta [\varphi_p - \bar{\varphi}^+] = -(K^T V_\eta^{-1} K + \widehat{V}_\varphi^{-1})^{-1} \widehat{V}_\varphi^{-1} (\bar{\varphi}^+ - \widehat{m}_\varphi). \quad (4.12)$$

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

Замечание 4.2. 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. (4.6)), а это в свою очередь вызывает возрастание случайной ошибки решения φ_p . Поэтому для компенсации априорной неопределенности относительно границ интервалов (4.4) можно ввести параметр $\alpha \neq 1$, который вычисляют 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 4.4).

§4.2. 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

$$\varphi^T W_\varphi \varphi = \|\varphi\|_{W_\varphi}^2, \quad (4.13)$$

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

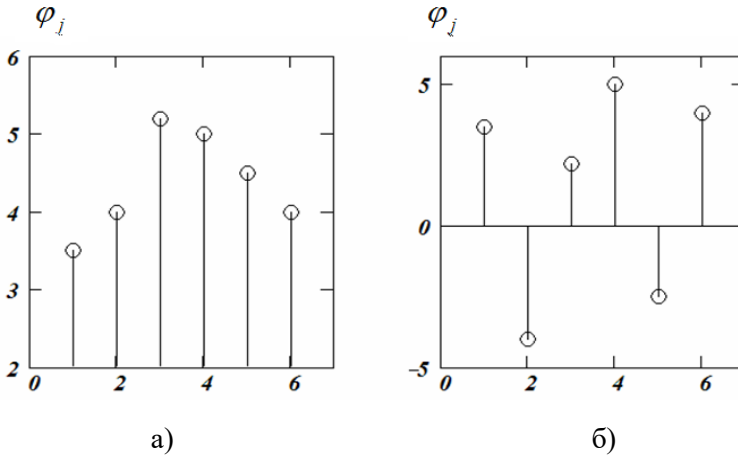


Рис. 4.1. К определению «гладкого» и «негладкого» вектора φ

«глаже» вектор φ , тем меньшее значение принимает функционал (4.13). Исходя из этого условия, часто матрицу W_φ формируют как

$$W_\varphi = D_p^T D_p, \quad (4.14)$$

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 размером $M \times M$:

$$W_\varphi = \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \\ 0 & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

то функционал (4.13) «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 (4.13) с матрицей (4.15).

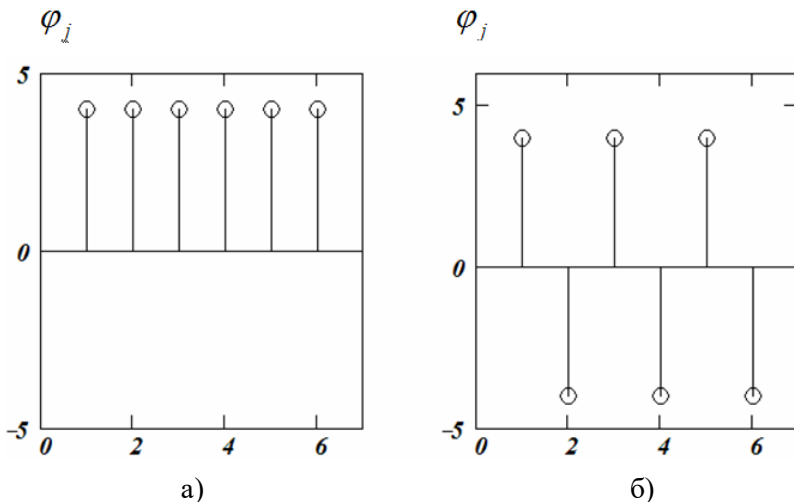


Рис. 4.2. Векторы φ различной гладкости

Для $p=1$ матрица W_φ имеет вид:

$$W_\varphi = \begin{vmatrix} 1 & -1 & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & -1 & 1 \end{vmatrix}, \quad (4.16)$$

и тогда значение квадратичной формы (4.13) для векторов с одинаковыми проекциями будет нулевым (рис. 4.2 а) и строго положительным для других векторов (например, для вектора на рис. 4.2 б). Следовательно, матрица W_φ , определяемая (4.16), 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 (4.15). 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 [103]. Возвращаясь к матрице \widehat{V}_φ (2.3.6), можно принять $W_\varphi = \widehat{V}_\varphi^{-1}$, и это будет соответствовать регуляризации нулевого порядка.

Статистическую трактовку введенной квадратичной формы (4.13) можно дать, используя понятие фидуциального распределения [87]. Плотность такого распределения запишем в виде

$$p_\phi(\varphi) = C_\alpha \exp\left(-\alpha \|\varphi\|_{W_\varphi}^2\right), \quad (4.17)$$

где C_α – нормализующий множитель, определяемый из условия

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

при некотором заданном параметре α . Вектор φ , имеющий меньшее значение квадратичной формы $\|\varphi\|_{W_\varphi}^2$, имеет большее значение плотности $p_\phi(\varphi)$. Однако в отличие от «частотной» плотности распределения вероятности (обычно используемой в теории вероятности и математической статистике) значение фидуциальной плотности распределения определяет степень нашего доверия к тому или иному вектору. Используя распределение (4.17), 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 (4.2) и названному «пробным» решением. При наличии априорной информации вида (4.4) его можно задать как $\omega_\varphi = \widehat{m}_\varphi$, где \widehat{m}_φ определяется выражением (4.5). При отсутствии такой

информации традиционным заданием является $\omega_\varphi = 0_M$, и решение φ_α , доставляющее минимум функционалу

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

находится из следующей системы уравнений:

$$(K^T W_f K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T W_f \tilde{f}. \quad (4.18)$$

К сожалению, задание $\omega_\varphi = 0_M$ может привести к увеличению систематической ошибки (см. замечание 4.1). 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.

$$W_f = C_f V_\eta^{-1}, \quad (4.19)$$

где константа $C_f > 0$. При наличии информации вида (2.3.9) матрицу V_η можно определить соотношением (4.10). 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.

$$W_f = I_{N \times N}; \quad W_\varphi = I_{M \times M}, \quad (4.20)$$

и приходим к простейшему варианту функционалу А.Н. Тихонова [70; 71]:

$$F_\alpha[\varphi] = \|\tilde{f} - K\varphi\|^2 + \alpha\|\varphi\|^2, \quad (4.21)$$

точка минимума которого φ_α находится из СЛАУ вида

$$(K^T K + \alpha I)\varphi_\alpha = K^T \tilde{f}. \quad (4.22)$$

§4.3. Систематическая и случайная ошибки решения φ_α

Определим ошибку решения φ_α

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

где $\bar{\varphi}^+$ – нормальное псевдорешение системы (3.1) при точной правой части \bar{f} . Как и прежде, вектор ε_α представим суммой векторов случайной ξ_α и систематической b_α ошибок:

$$\varepsilon_\alpha = \varphi_\alpha - \bar{\varphi}_\alpha^+ + \bar{\varphi}_\alpha^+ - \bar{\varphi}^+ = \xi_\alpha + b_\alpha. \quad (4.23)$$

Вектор $b_\alpha = M_\eta[\varepsilon_\alpha]$ можно назвать смещением решения φ_α . Для вектора φ_α , определяемого системой уравнений (4.18), систематическая ошибка b_α имеет вид

$$b_\alpha = -\alpha(K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} W_\varphi \bar{\varphi}^+, \quad (4.24)$$

а для вектора φ_α , определяемого системой уравнений (4.3), –

$$b_\alpha = \alpha(K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} W_\varphi (\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+). \quad (4.25)$$

Для доказательства (4.25) представим решение $\bar{\varphi}_\alpha$ в виде:

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

Тогда из определения $b_\alpha = \bar{\varphi}_\alpha - \bar{\varphi}^+$ следует (4.25). Выражение (4.24) получается из (4.34) заменой $\omega_\varphi = 0_M$.

Вектор

$$\xi_\alpha = \varepsilon_\alpha - M_\eta [\varepsilon_\alpha] = \varepsilon_\alpha - b_\alpha \quad (4.26)$$

является случайным вектором с нулевым средним и определяется выражением

$$\xi_\alpha = (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T W_f \eta. \quad (4.27)$$

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

$$V_{\xi_\alpha} = (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T W_f V_\eta W_f K (K^T W_f K + \alpha W_\varphi)^{-1}, \quad (4.28)$$

где V_η – ковариационная матрица вектора погрешностей η .

Среднеквадратическую ошибку решения φ_α определим функционалом

$$\Delta(\alpha) = M_\eta \left[\|\varphi_\alpha - \bar{\varphi}^+\|^2 \right], \quad (4.29)$$

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

$$\Delta(\alpha) = \|b_\alpha\|^2 + M \left[\|\xi_\alpha\|^2 \right] = \|b_\alpha\|^2 + Sp \left[V_{\xi_\alpha} \right], \quad (2.3.30)$$

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

Из соотношений (4.24)–(4.25), (4.28) 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

графической иллюстрации этого противоречия на рис. 4.3 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 (4.18) 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 $\alpha_{opt} \approx 3$.

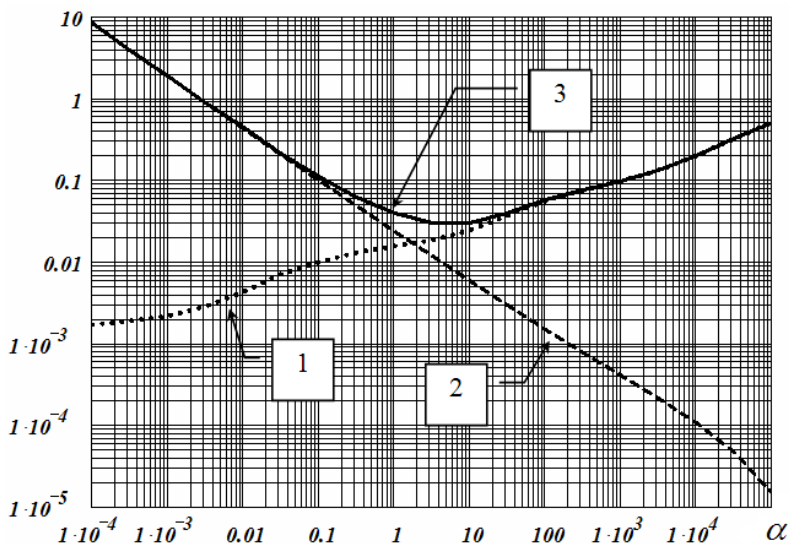


Рис. 4.3. Зависимости составляющих ошибки решения от α

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 следующей теме.

Вопросы для самопроверки

1. Неполная информация и сглаживающий функционал.
2. В чем суть метода рандомизации построения решения СЛАУ.
3. Гладкость решения и стабилизирующий функционал
4. Как вычисляются систематическая ошибка регуляризованного решения φ_α ?
5. Как вычисляются случайная ошибка регуляризованного решения φ_α ?

Глава 5

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.

§5.1. Выбор параметра регуляризации на основе критерия оптимальности

Введем оператор невязки $E(\alpha) = I - K T(\alpha)$, позволяющий представить вектор невязки $e_\alpha = f - K\varphi_\alpha$ 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 5.1. 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:

$$V_e(\alpha) = V_\eta E^T(\alpha), \quad (5.1)$$

где V_η – ковариационная матрица вектора погрешностей η . ♣

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

$$H_0 : V_e(\alpha) = V_\eta E^T(\alpha). \quad (5.2)$$

Эта гипотеза будет отвергаться в пользу альтернативной гипотезы

$$H_1 : V_e(\alpha) \neq V_\eta E^T(\alpha), \quad (5.3)$$

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 (5.2) введем статистику [15; 23; 97]

$$\rho_w(\alpha) = e_\alpha^T [V_\eta E^T(\alpha)]^{-1} e_\alpha, \quad (5.4)$$

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

$$\rho_w(\alpha) = \tilde{f} V_\eta^{-1} e_\alpha. \quad (5.5)$$

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

$$(K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f}. \quad (5.6)$$

Тогда соответствующий оператор невязки примет вид:

$$E(\alpha) = I - K (K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T V_\eta^{-1}, \quad (5.7)$$

и его можно записать как [23]:

$$E(\alpha) = V_\eta (V_\eta + \alpha^{-1} K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1}. \quad (5.8)$$

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

$$\rho_w(\alpha) = \tilde{f} (V_\eta + \alpha^{-1} K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1} \tilde{f}. \quad (5.9)$$

Утверждение 5.2. 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 (5.2), математическое ожидание $M[\rho_w(\alpha)] = N$.

Первое свойство $\rho_w(\alpha)$ непосредственно следует из (5.9). 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

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

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 (5.2) сводится к проверке предположения: *подчиняется ли величина $\rho_w(\alpha)$ χ^2 -распределению с N степенями свободы.* Для этого построим интервал

$$\Theta_N(\beta) = [\mathcal{G}_N(\beta/2), \mathcal{G}_N(1 - \beta/2)], \quad (5.10)$$

где $\mathcal{G}_N(\beta/2)$ – квантиль χ^2 -распределения уровня $\beta/2$. Если $\rho_w(\alpha)$ попадает в интервал (5.10), т.е. выполняется неравенство

$$\mathcal{G}_N(\beta/2) \leq \rho_W(\alpha) \leq \mathcal{G}_N(1-\beta/2), \quad (5.11)$$

то гипотеза (5.2) может быть принята с вероятностью ошибки первого рода, равной β . Следовательно, значение α_W , при котором выполняется (5.11), является оценкой для α_{opt} .

Введем $\gamma = 1/\alpha$ и функцию

$$R_W(\gamma) = \tilde{f}^T (V_\eta + \gamma KW_\phi^{-1} K^T)^{-1} \tilde{f},$$

Тогда γ_W удовлетворяет условию:

$$\mathcal{G}_p(\beta/2) \leq R_W(\gamma) \leq \mathcal{G}_p(1-\beta/2), \quad (5.12)$$

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:

$$\gamma^{(n)} = \gamma^{(n-1)} - \frac{R_W(\gamma^{(n-1)}) - p}{R'_W(\gamma^{(n-1)})}, \quad n=1,2,\dots, \quad (5.13)$$

с начальным значением $\gamma^{(0)} \square 10^{-15}$. Здесь

$$R'_W(\gamma) = -f^T (KW_\phi^{-1} K^T) (V_\eta + \gamma KW_\phi^{-1} K^T)^{-2} f$$

В качестве γ_W принимается значение $\gamma^{(n)}$, удовлетворяющее (5.12). Заметим, что эта процедура решает нелинейное уравнение $R_W(\gamma) = N$, но момент останова определяется условием (5.12).

Утверждение 5.1. Если выполняется условие

$$\tilde{f}^T V_\eta^{-1} \tilde{f} > \mathcal{G}_N(1-\beta/2) \quad (5.14)$$

то существует $\gamma_W > 0$, удовлетворяющее условию (5.12) и вычисляемое процедурой (5.13).

Сходимость процедуры (5.13) следует из очевидных свойств функций $R_W(\gamma) > 0$, $R'_W(\gamma) < 0$ для любых $\gamma > 0$. Условие (5.14)

гарантирует существование значения γ , удовлетворяющее (5.12). ♣

Замечание 5.1. Невыполнение условий (5.14) 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. $\gamma_w = 0$, $\alpha_w = \infty$). ♦

Скажем несколько слов о вычислении граничных точек интервала $\Theta_N(\beta)$ – квантилей $\mathcal{G}_N(\beta/2)$, $\mathcal{G}_N(1-\beta/2)$. Для определенности примем $\beta = 0.1$. Если $N \leq 10$, то значения квантилей можно взять из табл. 5.1.

Таблица 5.1

N	4	5	6	7	8	9	10
$\mathcal{G}_N(0.05)$	0.71	1.14	1.64	2.17	2.73	3.32	3.94
$\mathcal{G}_N(0.95)$	9.49	11.0	12.6	14.1	15.5	16.9	18.3

Если $N > 10$, то квантили достаточно точно могут аппроксимироваться следующими выражениями:

$$\mathcal{G}_N(0.05) \approx N - 1.64\sqrt{2N}; \quad \mathcal{G}_N(0.95) \approx N + 1.64\sqrt{2N}. \quad (5.15)$$

В качестве иллюстрации на рис. 5.1 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 (5.14) (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 $\delta_f = \|\eta\|/\|f\| = 0.05$. Видим, что все

значения γ_w (для которых значения $R_w(\gamma)$ попадают в интервал (5.10)) находятся в области минимума относительной ошибки регуляризованного решения.

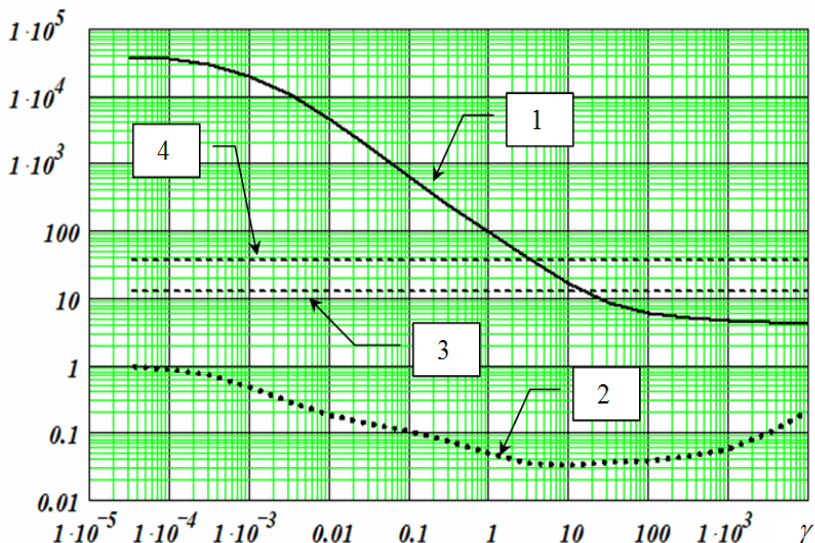


Рис. 5.1. Графики $R_w(\gamma)$ и относительной ошибки решения

Показано, что параметр регуляризации пропорционален погрешности правой части $\alpha \propto \sigma^2$.

§5.2. Алгоритм выбора параметра по статистическому варианту принципа невязки

Принцип невязки был предложен В.А. Морозовым [55], а затем широко использовался для выбора параметра регуляризации [43; 57; 84; 92; 94; 95], в том числе и при неточно заданном операторе задачи (*принцип обобщенной невязки* [41; 42; 75; 81; 82]). Статистический вариант этого принципа основывается на следующих рассуждениях. При завышенном значении параметра регуляризации α вектор невязки e_α имеет значительную неслучайную 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

$$H_0 : V_e(\alpha) = V_\eta \quad (5.16)$$

и введем статистику

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

Здесь $e_\alpha = f - K\varphi_\alpha$ - вектор невязки. Учитывая, что $\varphi_\alpha = (K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T V_\eta^{-1} \tilde{f}$, получим:

$$\begin{aligned} e_\alpha &= f - K\varphi_\alpha = \tilde{f} - K(K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} K^T V_\eta^{-1} \tilde{f} = \\ &= V_\eta (V_\eta + \alpha^{-1} K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1} f \end{aligned} \quad (5.17)$$

Тогда выражение для статистики примет вид:

$$\begin{aligned} \rho_V(\alpha) &= e_\alpha^T V_\eta^{-1} e_\alpha = \\ &= f^T (V_\eta + \alpha^{-1} K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1} V_\eta (V_\eta + \alpha^{-1} K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1} f \end{aligned}$$

Введем $\gamma = 1/\alpha$, получим

$$\rho_V(\gamma) = f^T (V_\eta + \gamma K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1} V_\eta (V_\eta + \gamma K W_\varphi^{-1} K^T)^{-1} f. \quad (5.18)$$

Вычислим производную по γ . Представим $\rho_V(\gamma)$ в виде

$$\rho_V(\gamma) = g^T V_\eta g, \quad (5.19)$$

где

$$g = (V_\eta + \gamma K W_\phi^{-1} K^T)^{-1} f. \quad (5.20)$$

Тогда производная от $\rho_V(\gamma)$ равна

$$(\rho_V(\gamma))' = 2g^T V_\eta g', \quad (5.21)$$

где

$$\begin{aligned} g' &= - (K W_\phi^{-1} K^T) (V_\eta + \gamma K W_\phi^{-1} K^T)^{-2} f = \\ &= - (K W_\phi^{-1} K^T) (V_\eta + \gamma K W_\phi^{-1} K^T)^{-1} g \end{aligned} \quad (5.22)$$

Вычисление g' по формуле (5.22) эквивалентно решению системы уравнений

$$(V_\eta + \gamma K W_\phi^{-1} K^T) (K W_\phi^{-1} K^T)^{-1} g' = -g. \quad (5.23)$$

Для вычисления γ_V используем итерационную процедуру ньютоновского типа:

$$\gamma^{(n)} = \gamma^{(n-1)} - \frac{\rho_V(\gamma^{(n-1)}) - N}{\rho_V'(\gamma^{(n-1)})}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (5.24)$$

с начальным условием $\gamma^{(0)} \square 10^{-15}$.

Итерационный процесс завершаем при выполнении условия

$$\mathcal{G}_N(\beta/2) \leq \rho_V(\gamma) \leq \mathcal{G}_N(1 - \beta/2). \quad (5.25)$$

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

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

Рассмотренные два алгоритма оценивания α_{opt} имеют существенный недостаток: требуется задание дисперсии σ_η^2 , которая часто неизвестна на практике. Рассмотрим алгоритм выбора α , не требующий задания σ_η^2 .

§5.3. 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

$$(K^T K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T \tilde{f}. \quad (5.26)$$

Эта система получается из системы (4.18) при $W_f = I_N$ (или $V_\eta = I_N$). Для выбора параметра α , входящего в (5.26), обратимся к методу перекрестной значимости (cross-validation method, в дальнейшем обозначаемый как CV-метод). Выбор параметра в CV-методе осуществляется из условия минимума функционала

$$U(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{i \in I_u} \left(\tilde{f}_i - \{K \varphi_\alpha^{(i)}\}_i \right)^2, \quad (5.27)$$

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 поэтому 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:

$$U_G(\alpha) = \frac{\frac{1}{N} \sum (\tilde{f}_i - \{K\varphi_\alpha^{(i)}\}_i)^2}{\left[\frac{1}{N} Sp(I - A(\alpha)) \right]^2}, \quad (5.28)$$

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 (5.27), 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 .

В качестве иллюстрации на рис. 5.2 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 $\alpha_U \ll 0.1$ (точка минимума функционала (5.27)) 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 $\varphi_{\alpha_{opt}}$.

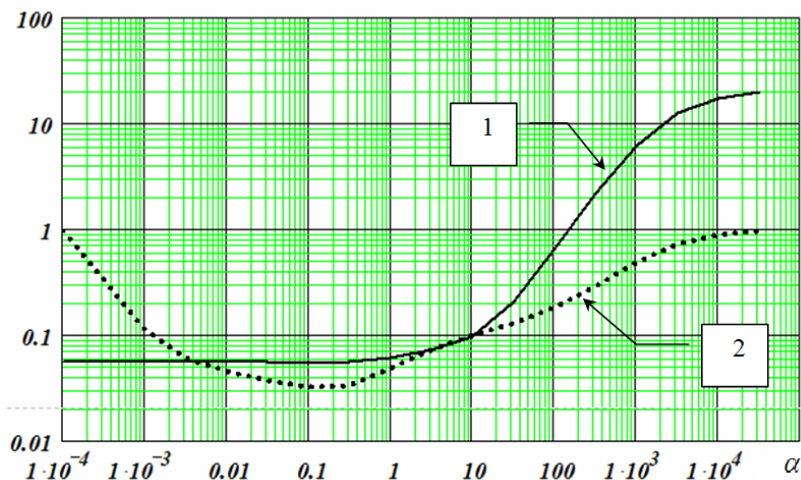


Рис. 5.2. Графики $U_G(\alpha)$ и относительной ошибки решения

§5.4. 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

$$\ddot{\varphi}_\alpha = \varphi_\alpha - b_\alpha, \quad (5.29)$$

который можно назвать несмещенным регуляризованным решением. Действительно:

$$M[\ddot{\varphi}_\alpha] - \bar{\varphi}^+ = M[\varphi_\alpha] - \bar{\varphi}^+ - b_\alpha = b_\alpha - b_\alpha = 0_M. \quad (5.30)$$

Здесь b_α – вектор смещения, определяемый одной из формул (4.24), (4.25). Тогда отклонение $\ddot{\varphi}_\alpha$ от $\bar{\varphi}^+$ обусловлено только вектором случайной ошибки с корреляционной матрицей $V_\xi(\alpha)$, элементы которой определяются соотношением (4.28). Если проекции η_i распределены по нормальному закону, то с вероятностью 0.95 выполняется неравенство (правило «двух сигм»):

$$\ddot{\varphi}_{\alpha_j} - 1.96 \cdot \{V_\xi(\alpha)\}_{j,j} \leq \bar{\varphi}_j^+ \leq \ddot{\varphi}_{\alpha_j} + 1.96 \cdot \{V_\xi(\alpha)\}_{j,j}, \quad (5.30)$$

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

$$I_j = \left[\ddot{\varphi}_{\alpha_j} - 1.96 \cdot \{V_\xi(\alpha)\}_{j,j}, \ddot{\varphi}_{\alpha_j} + 1.96 \cdot \{V_\xi(\alpha)\}_{j,j} \right] \quad (5.31)$$

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 (5.31) вместо множителя 1.96 можно использовать 3.0 (закон «трех сигм»), что соответствует доверительной вероятности 0.9997 такого интервала.

§5.5. Точностные характеристики регуляризирующих

алгоритмов

Вновь рассмотрим регуляризованное решение φ_α , определяемое из системы уравнений:

$$\left(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi\right) \varphi_\alpha = K^T C_\eta^{-1} \tilde{f} + \alpha W_\varphi \omega_\varphi, \quad (5.32)$$

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

$$b_\alpha = \alpha \left(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi\right)^{-1} W_\varphi \left(\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+\right). \quad (5.33)$$

Введем матрицу

$$B(\alpha) = \alpha \left(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi\right)^{-1} W_\varphi, \quad (5.34)$$

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

$$b_\alpha = B_\alpha \left(\omega_\varphi - \bar{\varphi}^+\right) = B(\alpha) \cdot b^{(0)}, \quad (5.35)$$

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 $U_b(\alpha)$ [64]:

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

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

$$U_b(\alpha) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left(\sum_{j=1}^M \{B(\alpha)\}_{i,j} \right)^2. \quad (5.36)$$

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.

$$\|b_\alpha\|^2 \approx U_b(\alpha) \|b^{(0)}\|^2. \quad (5.37)$$

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

Можно показать справедливость пределов

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

В качестве характеристики случайной ошибки

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

примем ковариационную матрицу $V_\xi(\alpha) = M \begin{bmatrix} \xi \\ \xi_\alpha \xi_\alpha^T \end{bmatrix}$, определяемую выражением

$$V_\xi(\alpha) = \sigma_\eta^2 \left(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi \right)^{-1} K^T C_\eta^{-1} K \left(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi \right)^{-1}. \quad (5.38)$$

Введем величину $U_\xi(\alpha)$ как характеристику устойчивости регуляризирующего алгоритма к шуму исходных данных [74]:

$$U_\xi(\alpha) = \frac{Sp[V_\xi(\alpha)]}{\sigma_\eta^2} = \quad (5.39)$$

$$= Sp\left[\left(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi\right)^{-1} K^T C_\eta^{-1} K \left(K^T C_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi\right)^{-1}\right].$$

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

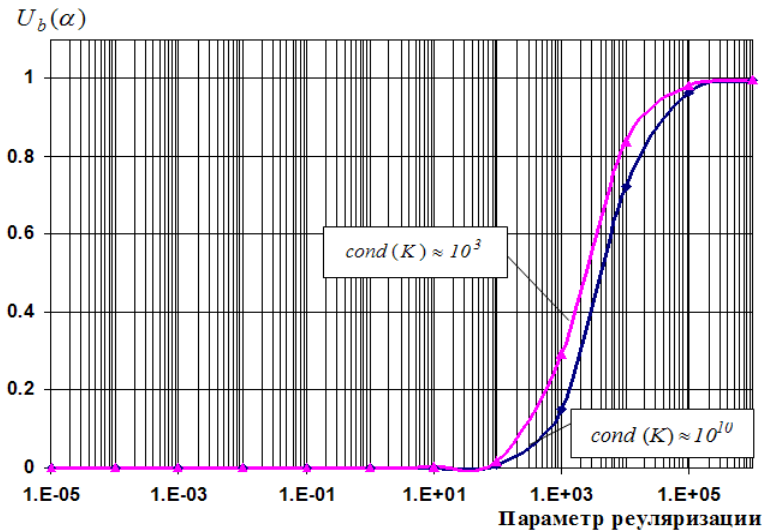


Рис. 5.3. Зависимость $U_b(\alpha)$ от параметра регуляризации

На рис. 5.4 приведены зависимости $U_\xi(\alpha)$ для различных чисел обусловленности.

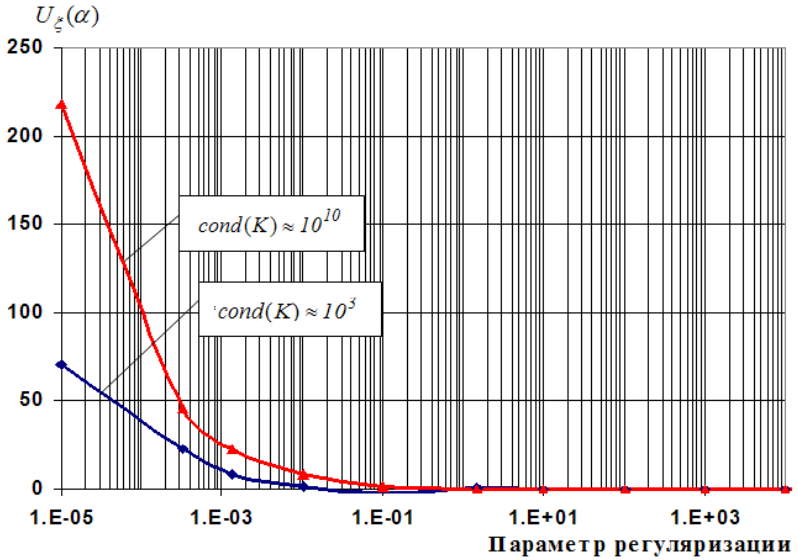


Рис. 5.4. Зависимость $U_\xi(\alpha)$ от параметра регуляризации

Анализ рис. 5.3 и 5.4 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:

$$\Delta(\alpha) = \|b_\alpha\|^2 + M \left[\|\xi_\alpha\|^2 \right] \approx U_b(\alpha) \cdot \|b^{(0)}\|^2 + U_\xi(\alpha) \cdot \sigma_\eta^2. \quad (5.40)$$

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.

Вопросы для самопроверки

1. Как связан параметр регуляризации с погрешностью правой части?
2. В чем состоит суть метода выбора параметра регуляризации по критерию оптимальности?
3. Запишите статистику критерия оптимальности.
4. В чем суть метода выбора параметра регуляризации по статистическому варианту принципа невязки?
5. В чем состоит суть метода перекрестной значимости выбора параметра регуляризации?
6. Как вычисляются числовые характеристики ошибок регуляризованного решения?
7. Как построить доверительные интервалы для решения $\bar{\varphi}^+$?
8. Точностные характеристики регуляризирующих алгоритмов

Глава 6

РЕКУРРЕНТНЫЕ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ

В этой главе строятся рекуррентные процедуры, эффективные при вычислении регуляризованного решения в режиме реального времени, когда в вектор правой части добавляются новые проекции.

§6.1. Рекуррентный регуляризирующий алгоритм

Рассмотрим решение СЛАУ в случае, когда вектор погрешностей η задания правой части имеет числовые характеристики:

$$M[\eta] = 0_N; V_\eta = M[\eta\eta^T] = \text{diag}\{\sigma_1^2, \dots, \sigma_N^2\}, \quad (6.1)$$

т.е. проекция η_i имеют разную дисперсию (случай «неравноточных измерений») и не коррелированы между собой, а также вектор η не коррелирован с искомым решением φ .

Утверждение 6.1. Пусть вектор погрешностей η имеет числовые характеристики (6.1). Тогда вектор $\varphi^{(n)}$, определяемый рекуррентными соотношениями:

$$\varphi^{(n)} = \varphi^{(n-1)} + \frac{P^{(n)}}{\sigma_n^2} \left[\tilde{f}_n - K_n \varphi^{(n-1)} \right]; \quad (6.2)$$

$$P^{(n)} = P^{(n-1)} - \frac{P^{(n-1)} k_n^T k_n P^{(n-1)}}{\sigma_n^2 + k_n P^{(n-1)} k_n^T} \quad (6.3)$$

с точкой «старта»

$$\varphi^{(0)} = \omega_\varphi; P^{(0)} = (\alpha W_\varphi)^{-1}, \quad (6.4)$$

совпадает с вектором регуляризованного решения $\varphi_{n\alpha}$, определяемого системой уравнений:

$$\left[K_n^T V_{n\eta}^{-1} K_n + \alpha W_\varphi \right] \varphi_{n\alpha} = K_n^T V_{n\eta}^{-1} \tilde{f}_n + \alpha W_\varphi \omega_\varphi, \quad (6.5)$$

где K_n – матрица размером $n \times M$, сформированная из первых n строк исходной матрицы K ; $V_{n\eta}$ – ковариационная матрица вектора η_n , состоящего из n первых проекций вектора η ;

\tilde{f}_n – вектор состоящий из n первых проекций вектора правой части \tilde{f} ; k_n – n -я строка матрицы K . ♣

Сущность утверждения заключается в том, что алгоритм (6.2)–(6.4) строит регуляризованное решение для «неполной» системы линейных алгебраических уравнений, полученных из первых n строк исходной СЛАУ. При этом решение системы из $n+1$ уравнения выражается через решение «предыдущей» системы, составленной из n уравнений исходной системы. Поэтому описанный алгоритм следует назвать рекуррентным регуляризирующим алгоритмом.

Очевидно, что при $n = N$ получаем

$$\varphi^{(n)} = \varphi_N = \varphi_\alpha, \quad (6.6)$$

где φ_α – регуляризованное решение исходной СЛАУ, определяемое из системы уравнений:

$$\left[K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi \right] \varphi_\alpha = K^T V_\eta^{-1} \tilde{f} + \alpha W_\varphi \omega_\varphi. \quad (6.7)$$

Возникает вопрос о преимуществах рекуррентного алгоритма по сравнению с «обычным» регуляризирующим алгоритмом, заключающимся в решении системы (6.7).

Во-первых, рекуррентные соотношения (6.2)–(6.4) дают эффективный алгоритм вычисления регуляризованного

решения $\varphi_\alpha = \varphi_{N\alpha}$, не требующего решения системы (6.7) (возможно большой размерности) обычными алгоритмами линейной алгебры.

Во-вторых, во многих практических задачах проекции \tilde{f}_i правой части формируются из измерений, поступающих через определенные промежутки времени. Поэтому желательно (а иногда необходимо) получить устойчивое решение «расширяющейся» системы уравнений в темпе поступления измерений, не дожидаясь формирования «полного» вектора правой части. Это может быть вызвано вопросом о продолжении эксперимента или выработкой управляющего воздействия по найденному решению системы. В этой ситуации единственным приемлемым алгоритмом является рекуррентный регуляризирующий алгоритм.

В-третьих, для получения регуляризованного решения с наименьшей ошибкой нет необходимости (в силу плохой обусловленности матрицы системы) вычислять регуляризованное решение по «полной» правой части. Достаточно ограничиться определенным числом n_{opt} первых

n_{opt} проекций \tilde{f}_i . Для подтверждения этого тезиса приведем результаты вычислительного эксперимента по решению СЛАУ с матрицей размером 100×20 (число обусловленности $3 \cdot 10^{10}$) рекуррентным алгоритмом (6.2)–(6.4). На рис. 6.1 показаны проекции вектора точного решения (кривая 1), проекции вектора $\varphi^{(n)}$ при $n = 5$ (кривая 2) и $n = 20$ (кривая 3). На рис. 6.2 показаны графики зависимости $\|\varphi^{(n)} - \bar{\varphi}\|^2 / \|\bar{\varphi}\|^2$ от номера итерации n для двух «стартовых» точек:

- кривая 1 – $\varphi^{(0)} = \mathbf{0}$;
- $$P(0) = 10 \cdot I_{M \times M} \left(\alpha = 10^{-1}, W_\varphi = I_{M \times M} \right);$$

- кривая 2 – $\varphi^{(0)} = 0$;
- $$P(0) = 10^8 \cdot I_{M \times M} (\alpha = 10^{-8}, W_\varphi = I_{M \times M}).$$

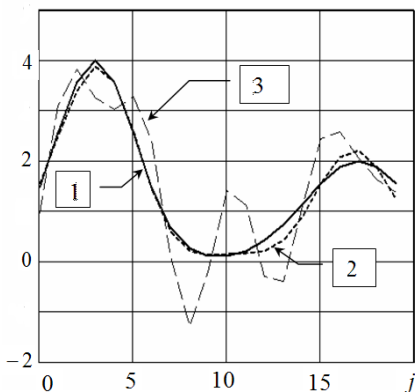


Рис. 6.1. Проекция решений

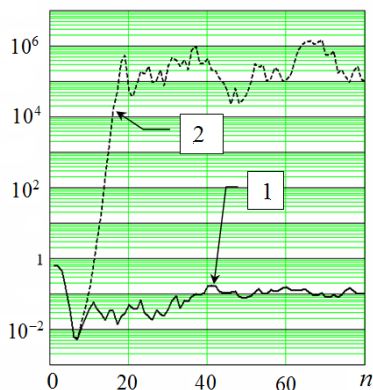


Рис. 6.2. Зависимость ошибки от номера итерации

Из последнего рисунка видно, что и положение, и величина минимумов, соответствующих различным стартовым точкам, совпадают, но затем после точки минимума относительные ошибки решения увеличиваются (особенно для $\alpha = 10^{-8}$ – кривая 2). Следовательно, для получения «оптимального» регуляризованного решения не обязательно использовать все имеющиеся измерения (в нашем случае это 100 измерений). К сожалению, этот момент у пользователей регуляризирующих алгоритмов для решения СЛАУ остается без внимания. Более того, неудачный выбор параметра регуляризации можно «компенсировать» выбором номера шага останова рекуррентной процедуры.

Возникает вопрос о выборе критерия останова рекуррентной процедуры. Для ответа на этот вопрос введем точностные характеристики.

§6.2. Точностные характеристики рекуррентного регуляризирующего алгоритма

Ошибку решения $\varphi^{(n)}$ определим вектором $\varepsilon^{(n)} = \varphi^{(n)} - \bar{\varphi}^+$ и представим ее суммой $\varepsilon^{(n)} = b^{(n)} + \xi^{(n)}$ систематической $b^{(n)} = \bar{\varphi}^{(n)} - \bar{\varphi}^+$ и случайной $\xi^{(n)} = \varphi^{(n)} - \bar{\varphi}^{(n)}$ ошибок, где $\bar{\varphi}^{(n)}$ – вектор, вычисленной процедурой (6.2)–(6.4) по точным проекциям \bar{f}_i правой части. Систематическую ошибку $b^{(n)}$ можно представить в виде (ср. (5.71))

$$b^{(n)} = B^{(n)} \cdot b^{(0)}, \quad (6.8)$$

где $b^{(0)} = \varphi^{(0)} - \bar{\varphi}^+$ – вектор «начального» смещения (систематическая ошибка решения в «точке старта» $\varphi^{(0)}$). Матрицу $B^{(n)}$ в дальнейшем будем называть матрицей смещения.

Утверждение 6.2. Матрица $B^{(n)}$ для рекуррентного алгоритма (6.2)–(6.4) определяется выражением:

$$B^{(n+1)} = \prod_{j=0}^n \left[I - \frac{P^{(j)} k_{j+1}^T k_{j+1}}{\sigma_{j+1}^2 + k_{j+1} P^{(j)} k_{j+1}^T} \right] \quad (6.9)$$

и допускает рекуррентное вычисление:

$$B^{(n+1)} = \left[I - \frac{P^{(n)} k_{n+1}^T k_{n+1}}{\sigma_{n+1}^2 + k_{n+1} P^{(n)} k_{n+1}^T} \right] \cdot B^{(n)}, \quad (6.10)$$

где $n = 0, 1, \dots$; $B^{(0)} = I$; k_n – n -я строка матрицы K системы; σ_n^2 – дисперсия проекции \tilde{f}_n . ♣

В качестве характеристики случайной ошибки $\xi^{(\ell)}$ примем ковариационную матрицу $V_\xi^{(n)} = M \left[\xi^{(n)} \left(\xi^{(n)} \right)^T \right]$. Справедливо следующее

Утверждение 6.3. Если погрешности η_i задания правой части имеют следующие числовые характеристики:

$$M[\eta_i] = 0; \quad M[\eta_i^2] = \sigma_i^2,$$

то ковариационная матрица $V_\xi^{(n)}$ определяется рекуррентном соотношением

$$V_\xi^{(n+1)} = (I - g_{n+1} h_{n+1}) V_\xi^{(n)} (I - g_{n+1} h_{n+1})^T + \sigma_{n+1}^2 g_{n+1} g_{n+1}^T, \quad (6.11)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$; $V_\xi^{(0)} = 0 \cdot I_{M \times M}$; g_{n+1} – вектор, определяемый выражением

$$g_{n+1} = \frac{P^{(n)} h_{n+1}^T}{\sigma_{n+1}^2 + h_{n+1} P^{(n)} h_{n+1}^T}. \quad (6.12)$$

♣

Несмотря на информативность характеристик $b^{(n)}$ и $V_\xi^{(n)}$, для анализа и синтеза рекуррентных регуляризирующих алгоритмов желательно иметь набор скалярных величин, характеризующих точность оценивания и имеющих простой физический смысл. Такие величины в дальнейшем будем называть *точностными* характеристиками. В этой главе вводятся точностные характеристики рекуррентных регуляризирующих алгоритмов, аналогичные характеристикам, введенным в теме 5.

Первоначально определим скалярную величину [22]

$$U_b^{(n)} = \frac{\|b_{[1]}^{(n)}\|^2}{\|1_M\|^2}, \quad (6.13)$$

где $b_{[1]}^{(n)}$ – вектор смещения, обусловленный единичным вектором 1_M «начального» смещения. Можно показать, что

$$U_b^{(n)} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left(\sum_{j=1}^M \{B^{(n)}\}_{i,j} \right)^2. \quad (6.14)$$

Величина $U_b^{(n)}$ характеризует разрешающую способность рекуррентного алгоритма, и ее можно рассматривать как коэффициент передачи квадрата нормы вектора начального смещения $b^{(0)}$ в квадрат нормы вектора смещения $b^{(n)}$ решения $\varphi^{(n)}$, т.е.

$$\|b^{(n)}\|^2 \approx U_b^{(n)} \cdot \|b^{(0)}\|^2. \quad (6.15)$$

Справедливы следующие пределы:

$$\lim_{n \rightarrow 0} U_b^{(n)} = 1; \quad \lim_{n \rightarrow \infty} U_b^{(n)} = 0,$$

а сама функция $U_b^{(n)}$ является монотонно убывающей от номера шага n . Введем величину

$$U_\xi^{(n)} = \frac{Sp[V_\xi^{(n)}]}{\sigma_n^2}, \quad (6.16)$$

которую можно трактовать как коэффициент передачи дисперсии шума в величину $M \left[\|\xi^{(n)}\|^2 \right] = Sp \left[V_\xi^{(n)} \right]$. Из выражения (6.11) следует алгоритм вычисления $U_\xi^{(n)}$:

$$U_\xi^{(n)} = \frac{1}{\sigma_n^2} Sp \left[(I - g_n h_n) V_\xi^{(n-1)} (I - g_n h_n) \right] + Sp \left[g_n g_n^T \right]. \quad (6.17)$$

Используя введенные величины $U_b^{(n)}$ и $U_\xi^{(n)}$, среднеквадратическую ошибку решения $\varphi^{(n)}$ можно аппроксимировать выражением

$$\Delta(n) \approx U_b^{(n)} \cdot \|b^{(0)}\|^2 + U_\xi^{(n)} \cdot \sigma_n^2. \quad (6.18)$$

Напомним, что знак приближенного равенства обусловлен аппроксимацией величины $\|b^{(n)}\|^2$ первым слагаемым $U_b^{(n)} \cdot \|b^{(0)}\|^2$ (хотя относительная погрешность такой аппроксимации пренебрежительно мала: $< 10^{-3}$). Используя выражение (6.18), можно провести анализ рекуррентного регуляризирующего алгоритма (6.2), (6.3).

Для иллюстрации поведения точностных характеристик на рис. 6.3 показаны графики $U_b^{(n)}$, вычисленные для матрицы 100×20 (число обусловленности $\square 10^{10}$) и «стартовых» точек:

- кривая 1 – $\varphi^{(0)} = 0$;
- $P(0) = 10 \cdot I_{M \times M} \left(\alpha = 10^{-1}, W_\varphi = I_{M \times M} \right)$;
- кривая 2 – $\varphi^{(0)} = 0$;
- $P(0) = 10^8 \cdot I_{M \times M} \left(\alpha = 10^{-8}, W_\varphi = I_{M \times M} \right)$.

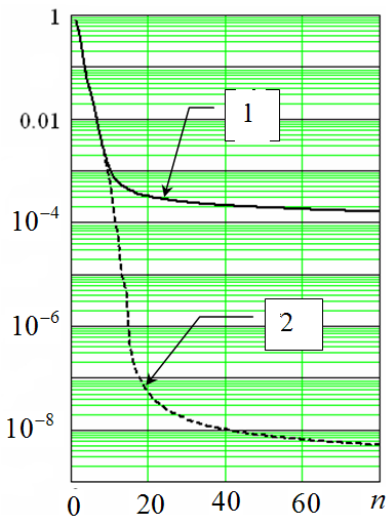


Рис. 6.3. Графики $U_b^{(n)}$

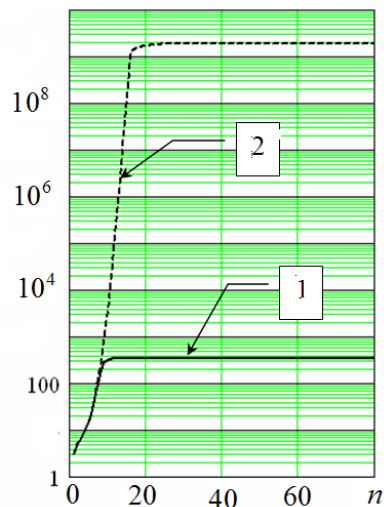


Рис. 6.4. Графики $U_\xi^{(n)}$

На рис. 6.4 приведены графики характеристики $U_\xi^{(n)}$, вычисленной при тех же данных.

Поведение $U_b^{(n)}$, $U_\xi^{(n)}$ еще раз подчеркивает известное противоречие между разрешающей способностью алгоритма (чем меньше $U_b^{(n)}$, тем меньше систематическая ошибка и выше разрешающая способность) и устойчивостью (чем больше $U_\xi^{(n)}$, тем хуже устойчивость) рекуррентного регуляризирующего алгоритма.

Вопросы для самопроверки

1. В чем преимущество рекуррентного алгоритма?
2. Приведите рекуррентные соотношения для вычисления регуляризованного решения
3. Что характеризует величина $U_b^{(n)}$?

4. Что характеризует величина $U_{\xi}^{(n)}$?

В чем заключается противоречие между $U_b^{(n)}$ и $U_{\xi}^{(n)}$?

Глава 7

ЛОКАЛЬНЫЙ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЙ 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.

§ 7.1. Локальный регуляризирующий алгоритм с векторным параметром регуляризации

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

$$K\varphi = f, \quad (7.1)$$

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:

$$M[\eta] = 0_N; V_\eta = M[\eta\eta^T]. \quad (7.2)$$

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

$$F_\alpha(\varphi) = \|f - K\varphi\|_{W_f}^2 + \alpha \|\varphi\|_{W_\varphi}^2, \quad (7.3)$$

где α – параметр регуляризации. Показано (см. главу 4), что минимум функционала (7.3) достигается на решении системы уравнений

$$(K^T W_f K + \alpha W_\varphi) \varphi_\alpha = K^T W_f \tilde{f}. \quad (7.4)$$

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. главу 5). 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. главу 3). 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 [68], а также в [5]). Эти алгоритмы проигрывают по точности байесовскому алгоритму, но имеют более высокую точность по сравнению с алгоритмами глобальной регуляризации.

§ 7.2. Построение локального регуляризирующего алгоритма с векторным параметром регуляризации

Ранее говорилось, что глобальное регуляризованное решение φ_α является точкой минимума квадратичного функционала (7.3). Обычно для получения гладкого решения в качестве W_φ принимают трехдиагональную матрицу (размером $M \times M$) вида

$$W_\varphi = \begin{vmatrix} 1 & -1 & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & -1 & 1 \end{vmatrix} \quad (7.5)$$

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*

$$\mu = \{\mu_2, \mu_3, \dots, \mu_M\}. \quad (7.6)$$

Тогда имеем новый сглаживающий функционал:

$$F[\varphi, \mu] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{W_f}^2 + \sum_{j=2}^M \mu_j^2 (\varphi_j - \varphi_{j-1})^2. \quad (7.7)$$

Определив матрицу:

$$M(\mu) = \begin{vmatrix} \mu_2^2 & -\mu_2^2 & & 0 \\ -\mu_2^2 & (\mu_2^2 + \mu_3^2) & -\mu_3^2 & \\ 0 & -\mu_3^2 & (\mu_3^2 + \mu_4^2) & -\mu_4^2 \\ & & \ddots & \ddots \\ 0 & & -\mu_M^2 & \mu_M^2 \end{vmatrix}, \quad (7.8)$$

функционал (7.7) можно переписать в виде:

$$F[\varphi, \mu] = \|\tilde{f} - K\varphi\|_{W_f}^2 + \|\varphi\|_{M(\mu)}^2. \quad (7.9)$$

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

$$\tilde{A}[\mu] = \gamma_1^2 \cdot \sum_{j=2}^M (\mu_j - \gamma_0)^2 + \gamma_2^2 \cdot \sum_{j=3}^M (\mu_j - \mu_{j-1})^2 \quad (7.10)$$

и ограничения $0 \leq \mu_j \leq \gamma_0$, $j = 2, \dots, M$. Очевидно, что при $\mu_j \rightarrow \gamma_0$ уменьшается величина функционала $\Gamma[\mu]$ (7.10), но увеличивается слагаемое $\|\varphi\|_{\dot{I}(\mu)}^2$ функционала (7.9). Учитывая такую взаимосвязь, введем новый сглаживающий функционал (назовем его *локальным сглаживающим функционалом*)

$$\Phi[\varphi, \mu] = F[\varphi, \mu] + \Gamma[\mu] \quad (7.11)$$

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

$$\frac{\partial \Phi[\varphi, \mu]}{\partial \varphi_j} = 0, \quad j = 1, \dots, M; \quad (7.12)$$

$$\frac{\partial \Phi[\varphi, \mu]}{\partial \mu_j} = 0, \quad j = 2, \dots, M. \quad (7.13)$$

Вектор φ_μ , удовлетворяющий (7.12) при заданном векторе μ , является решением системы линейных уравнений

$$(K^T W_f K + M(\mu)) \varphi_\mu = K^T W_f \tilde{f}, \quad (7.14)$$

где матрица $\dot{I}(\mu)$ определяется соотношением (7.8). Условия (7.13) приводят к следующей системе уравнений, состоящей из $(M-1)$ уравнений относительно $(M-1)$ величин $\mu_2, \mu_3, \dots, \mu_M$:

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

Перепишем эту систему в матричном виде

$$\dot{A}(\varphi)\mu = \gamma, \quad (7.15)$$

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 (7.12), (7.13), для нахождения точки минимума (φ^*, μ^*) функционала $\Phi[\varphi, \mu]$ используем процедуру вида

$$\begin{aligned} \varphi_\mu^{(l)} &= [K^T W_f K + M(\mu^{(l)})]^{-1} K^T W_f \tilde{f}; \\ \mu^{(l+1)} &= A^{-1}(\varphi_\mu^{(l)})\gamma, \quad l=0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (7.16)$$

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

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

$$\mu_i^{(0)} = \frac{\sqrt{\hat{\alpha}}}{2}, \quad i=2, \dots, M, \quad (7.17)$$

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. главу 5).

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 (7.12) (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:

$$\mu_i^{(0)} = \frac{\sqrt{\alpha_w}}{2}, i = 2, \dots, M; \varphi_\mu^{(0)} = \varphi_{\alpha_w}; \quad (7.18)$$

$$\gamma_0 = \sqrt{\alpha_w}, \quad (7.19)$$

то последовательность $(\varphi_\mu^{(\ell)}, \mu^{(\ell)})$, порождаемая процедурой (7.16), сходится к точке минимума (φ_μ^*, μ^*) функционала (7.11), а вектор φ_μ^* является регуляризованным решением системы (7.1), т.е. существует для любой правой части \tilde{f} и имеет место сходимость $M \left[\left\| \varphi_\mu^* - \bar{\varphi}^+ \right\|^2 \right] \rightarrow 0$ 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 (7.14), существует при любой правой части \tilde{f} ;
- при выполнении (7.18) 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 $\varphi_{\bar{\mu}} \rightarrow \bar{\varphi}^+$ при стремлении уровня шума к нулю. ♣

Возникает вопрос о влиянии точности задания γ_0 (см. (7.19)) 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 %).

§ 7.3. 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. главу 5). Введем билинейную форму:

$$\rho_w(\gamma_1, \gamma_2) = \sum_{i=1}^N \frac{e_i(\gamma_1, \gamma_2) \cdot \tilde{f}_i}{\sigma_i^2}, \quad (7.20)$$

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

$$\mathcal{G}_N(\beta/2) \leq \rho_W(\gamma_1, \gamma_2) \leq \mathcal{G}_N(1 - \beta/2), \quad (7.21)$$

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

$$\rho_W(\gamma_1, \gamma_2) = N, \quad (7.22)$$

который прекращается, как только выполнится условие (7.21).

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 $\gamma_{W1} = 5, \gamma_{W2} = 0.5$.

§ 7.4. 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. 7.1 (кривая 1).

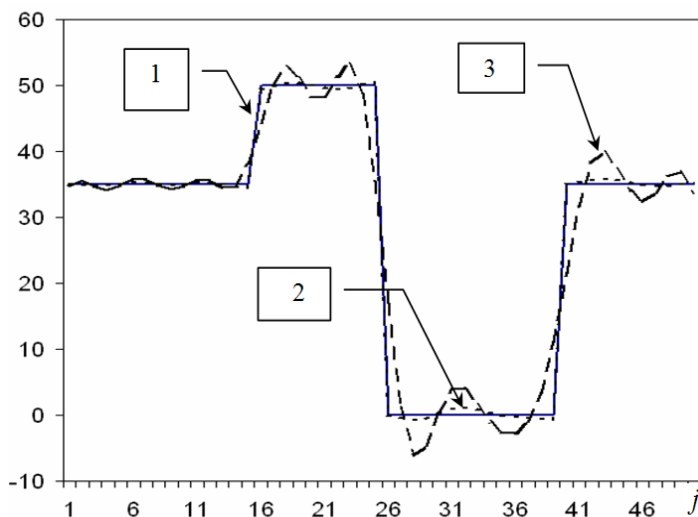


Рис. 7.1. Проекции различных решений

Проекции точной правой части СЛАУ $f = K\varphi$ искажались нормально распределенными псевдослучайными числами с нулевым средним и дисперсией σ_η^2 , которая задавалась по отношению к 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. 7.1 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. 7.2 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].

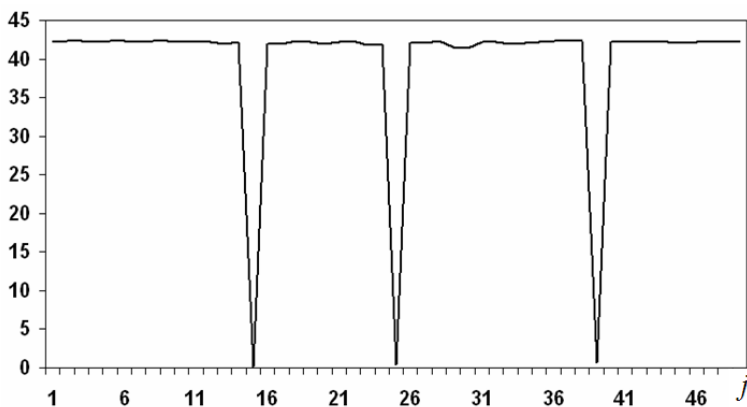


Рис. 7.2. Проекция μ_j векторного параметра регуляризации

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?

Глава 8

ДЕСКРИПТИВНЫЕ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩИЕ 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, трапециевидальную и т.д.), регуляризованные решения, построенные методами невязки, квазирешений 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.).

§ 8.1. Глобальный дескриптивный регуляризирующий алгоритм

Предположим, априори известно о том, что вектор решения $\bar{\varphi}$ принадлежит выпуклому множеству Φ , задаваемому системой линейных неравенств:

$$A\varphi \leq b, \quad (8.1)$$

где A – матрица ограничений размером $L \times M$; b – вектор размерности L . Ограничения (8.1) определяют допустимое множество векторов φ , из которых должен находиться вектор регуляризованного решения. Этому требованию удовлетворяет вектор φ_α^* , являющийся решением следующей задачи квадратичного программирования [6]:

$$\inf \left[\|\tilde{f} - K\varphi\|_{V_q^{-1}}^2 + \alpha \|\varphi\|_{W_\varphi}^2 \right], \quad (8.2)$$

$$A\varphi \leq b$$

Покажем, какой вид примут условия (8.1) 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 (8.1) преобразуется к виду

$$-I_{M \times M} \cdot \varphi \leq 0_M, \quad (8.3)$$

здесь $I_{M \times M}$ – единичная матрица; 0_M – нулевой вектор. Условия монотонности, накладываемые на решение φ , примут вид:

$$S\varphi \leq g, \quad (8.4)$$

где S – двухдиагональная матрица, вектор $g \geq 0$.

Аналогичным образом может быть представлена в матричной форме и другая априорная информация о решении.

Рассмотрим задачу квадратичного программирования (8.2). Перепишем её в форме

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \varphi^T H \varphi + d^T \varphi \rightarrow \min, \\ A\varphi \leq b, \end{cases} \quad (8.3)$$

где $H = 2(K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)$, $d = -2K^T V_\eta^{-1} f$. В (8.3) убрана константа $f^T V_\eta^{-1} f$. Так как H - симметричная положительно определенная матрица, то целевая функция строго выпукла.

Двойственная задача, по Лагранжу, состоит в максимизации функции $\Theta(\mu)$ при $\mu \geq 0$, где $\Theta(\mu)$ равна:

$$\Theta(\mu) = \inf \left\{ \frac{1}{2} \varphi^T H \varphi + d^T \varphi + \mu^T (A\varphi - b) : \varphi \in E_n \right\}. \quad (8.4)$$

При фиксированном μ функция $\Theta(\mu, \varphi)$ строго выпуклая и достигает своего минимума по φ в точке

$$H\varphi + A^T \mu + d = 0.$$

Найдем из этого уравнения φ :

$$\varphi = -H^{-1} (d + A^T \mu). \quad (8.5)$$

Подставим это выражение в (8.4), получим:

$$\Theta(\mu) = \frac{1}{2} \mu^T D \mu + \mu^T c - \frac{1}{2} d^T H^{-1} d,$$

где $D = -AH^{-1}A^T$; $c = -(b + AH^{-1}d)$.

Таким образом, задача (8.4) может быть записана следующим образом (опуская $const = -\frac{1}{2} d^T H^{-1} d$):

$$\left\{ \begin{array}{l} \Theta(\mu) = \frac{1}{2} \mu^T D \mu + \mu^T c \rightarrow \max, \\ \mu \geq 0. \end{array} \right. \quad (8.6)$$

Решение задачи (8.6) можно осуществить используя известные алгоритмы квадратичного программирования.

Вычислив μ^* , подставим его в (8.5), получим решение φ_α^*

$$\varphi_\alpha^* = \varphi_\alpha - \frac{1}{2} (K^T V_\eta^{-1} K + \alpha W_\varphi)^{-1} A^T \mu^* \quad (8.7)$$

и состоит из двух слагаемых: регуляризованного решения φ_α , полученного безусловной минимизацией функционала (8.2), и вектора, зависящего от решения μ^* двойственной задачи (8.6).

Очевидно, что если $\mu^* = 0$, то $\varphi_\alpha^* = \varphi_\alpha$.

Утверждение 8.1. Если искомое нормальное псевдорешение $\bar{\varphi}^+$ удовлетворяет системе ограничений (8.1), то вектор φ_α^* , определяемый (8.7), является дескриптивным регуляризованным решением, т.е. существует для любой правой части, удовлетворяет ограничением (8.1) и

$$M \left[\left\| \varphi_\alpha^* - \varphi^+ \right\|^2 \right] \rightarrow 0 \text{ при } M \left[\left\| \tilde{f} - f \right\|^2 \right] \rightarrow 0. \quad (8.8)$$

Доказательство основано на сходимости регуляризованного решения φ_α и выполнении ограничений (8.1) для вектора φ_α^* при любом параметре регуляризации $\alpha > 0$.



Вопросы для самопроверки

1. В чем суть глобального дескриптивного регуляризирующего алгоритма?
2. Сформулируйте задачу квадратичного программирования для поиска глобального дескриптивного решения
3. Сформулируйте эквивалентную двойственную задачу квадратичного программирования для поиска глобального дескриптивного решения
4. Запишите глобальное дескриптивное регуляризованное решение

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные в работе регуляризирующие алгоритмы позволяют строить устойчивые решения обратных задач при самой различной информации о векторе параметров исследуемой модели: начиная от требований на «гладкость» искомого решения и заканчивая информацией о значениях или знаках проекций вектора решения.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Денисов А.М.* Введение в теорию обратных задач. Учебное пособие. – М.: Изд-во МГУ, 1994. – 208с.
2. *Мицель А.А., Шелестов А.А., Романенко В.В., Клыков В.В.* Методы оптимизации. Лабораторный практикум. Учебное пособие. – Томск: Изд-во ТУСУР, 2004. – 80с.
3. *Черемисин А.А., Границкий Л.В., Мясников В.М., Ветчинкин Н.В.* Дистанционное зондирование в ультрафиолетовом диапазоне аэрозольного слоя в окрестности стратосферы с борта космической астрофизической станции «Астрон» // Оптика атмосферы и океана. – 1998, Т.11, №10. – С.1111-1117.
4. *Мицель А.А.* Вычислительные методы. Учебное пособие. – Томск: В-Спектр, 2010.– 264с.
5. *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.
6. *Базара М.* Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы / М. Базара, К. Шетти ; пер. с англ. – М. : Мир, 1982. – 584 с.
7. *Воеводин В. В.* Матрицы и вычисления / В. В. Воеводин, Ю. А. Кузнецов. – М. : Наука, 1984. – 320 с.
8. *Васин В. В.* Методы решения неустойчивых задач / В. В. Васин. – Екатеринбург : Наука, 1989. – 248 с.
9. *Васин В. В.* Методы решения операторных уравнений с априорной информацией / В. В. Васин // Численные методы и оптимизация. – Таллин, 1988. – С. 70–80.
10. *Васин В. В.* Некорректные задачи с априорной информацией / В. В. Васин, А. Л. Агеев. – Екатеринбург : Наука, 1993. – 264 с.
11. *Воскобойников Ю. Е.* Выбор параметра регуляризации и ошибки восстановления входного сигнала в методе статистической регуляризации / Ю. Е. Воскобойников // Автометрия. – 1975. – № 4. – С. 10–18.
12. *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.
13. *Воскобойников Ю. Е.* Регуляризирующий алгоритм обращения уравнения Абеля / Ю. Е. Воскобойников // Инженерно-физический журнал. – 1980. – Т. 34, № 2. – С. 270–274.

14. *Воскобойников Ю. Е.* Выбор параметра регуляризации при решении обратных измерительных задач / Ю. Е. Воскобойников, Н. Г. Преображенский // *Автометрия*. – 1984. – № 2. – С. 31–38.
15. *Воскобойников Ю. Е.* Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике / Ю. Е. Воскобойников, Н. Г. Преображенский, А. И. Седельников. – Новосибирск : Наука, 1984. – 238 с.
16. *Воскобойников Ю. Е.* Проблема редукции 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.
17. *Воскобойников Ю. Е.* Нелинейный регуляризирующий алгоритм редукции к идеальному прибору / Ю. Е. Воскобойников, Н. Г. Преображенский // *Оптика и спектроскопия*. – 1988. – Т. 64. – № 2. – С. 61–69.
18. *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.
19. *Воскобойников Ю. Е.* Решение обратных измерительных задач с заданными точностными характеристиками / Ю. Е. Воскобойников // *Автометрия*. – 1988. – № 2. – С. 13–21.
20. *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.
21. *Воскобойников Ю. Е.* Решение обратных измерительных задач на выпуклых множествах / Ю. Е. Воскобойников // *Автометрия*. – 1990. – № 1. – С. 21–28.
22. *Воскобойников Ю. Е.* Нелинейный регуляризирующий алгоритм восстановления импульсных сигналов / Ю. Е. Воскобойников // *Автометрия*. – 1993. – № 6. – С. 35–42.
23. *Воскобойников Ю. Е.* Оценивание оптимального параметра регуляризирующего алгоритма восстановления изображений / Ю. Е. Воскобойников // *Автометрия*. – 1995. – № 3. – С. 64–72.
24. *Воскобойников Ю. Е.* Методы решения некорректных задач параметрической идентификации : учеб пособие / Ю. Е. Воскобойников. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 1996. – 90 с.
25. *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.
26. *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.
27. *Воскобойников Ю. Е.* Локальный регуляризирующий алгоритм восстановления контрастных сигналов и изображений / Ю. Е. Воскобойников, И. Н. Мухина // Автометрия. – 2000. – № 3. – С. 45–53.
28. *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.
29. *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.
30. *Воскобойников Ю. Е.* Синтез рекуррентных алгоритмов идентификации параметров динамических систем / Ю. Е. Воскобойников // Научный вестник НГТУ. – 2001. – № 2 (90). – С. 23–32.
31. *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.
32. *Воскобойников Ю. Е.* Рекуррентное оценивание в динамических системах : учеб. пособие / Ю. Е. Воскобойников. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2002. – 92 с.
33. *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.
34. *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).
35. *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.
 36. *Воскобойников Ю. Е.* Квазиоптимальный алгоритм Фурье-фильтрации изображений / Ю. Е. Воскобойников, А. М. Кузнецов // *Доклад АН ВШ РФ*. – 2006. – № 2 (7). – С. 53–63.
 37. *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.
 38. *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.
 39. *Воскобойников Ю. Е.* Устойчивый алгоритм восстановления изображения при неточно заданной аппаратной функции / Ю. Е. Воскобойников, В. А. Литасов // *Автометрия*. – 2006. – № 6. – С. 13–22.
 40. *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.
 41. *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.
 42. *Гончарский А. В.* Обобщенный принцип невязки / А. В. Гончарский, А. С. Леонов и др. // *ЖВМиМФ*. – 1973. – Т. 13, № 2. – С. 294–302.
 43. *Гордонова В. И.* Численные алгоритмы выбора параметра регуляризации / В. И. Гордонова, В. А. Морозов // *ЖВМиМФ*. – 1973. – Т. 13, № 3. –
 44. *Дейч А. М.* Методы идентификации динамических систем / А. М. Дейч. – М. : Энергия, 1979. – 240 с.

45. Жуковский Е. Л. Метод наименьших квадратов для вырожденных и плохо обусловленные систем линейных алгебраических уравнений / Е. Л. Жуковский // ЖВМиМФ. – 1977. – Т. 17, № 4. – С. 814–827.
46. Жуковский Е. Л. Статистическая регуляризация алгебраических систем уравнений / Е. Л. Жуковский // ЖВМиМФ. – 1972. – Т. 12, № 1. – С. 185–191.
47. 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.
48. Иванов В. К. Теория линейных некорректных задач и ее приложения / В. К. Иванов, В. В. Васин, В. П. Танана. – М. : Наука, 1978. – 206 с.
49. Кукс Я. П. Минимаксная линейная оценка коэффициентов регрессии / Я. П. Кукс, В. Ольман // Известия АН ЭССР. – 1972. – Т. 21, № 1. – С. 66–72.
50. Лаврентьев М. М. Линейные операторы и некорректные задачи / М. М. Лаврентьев, Л. Я. Савельев. – М. : Наука, 1991. – 331 с.
51. 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.
52. 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.
53. 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.
54. Медич Д. Ж. Статистические оптимальные линейные оценки и управление / Д. Ж. Медич. – М. : Энергия, 1973. – 248 с.
55. Морозов В. А. О принципе невязки при решении операторных уравнений методом регуляризации / В. А. Морозов // ЖВМиМФ. – 1968. – Т. 8, № 2. – С. 295–309.
56. Морозов В. А. Об оптимальной регуляризации операторных уравнений / В. А. Морозов // ЖВМиМФ. – 1970. – Т. 10, № 4. – С. 818–829.
57. Морозов В. А. Об эффективном численном алгоритме построения псевдорешения / В. А. Морозов // ЖВМиМФ. – 1971. – Т. 11, № 1. – С. 38–44.

58. *Морозов В. А.* Регулярные методы решения некорректно поставленных задач / В. А. Морозов. – М. : Наука. 1987. – 240 с.
59. *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.
60. *Морозов В. А.* Методы решения некорректно поставленных задач: алгоритмический аспект / В. А. Морозов, А. И. Гребенников. – М. : Изд-во МГУ, 1992. – 319 с.
61. *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.
62. *Мухина И. Н.* Дескриптивный регулярирующий алгоритм решения плохо обусловленных систем уравнений / И. Н. Мухина // Труды НГАСУ. – Новосибирск : Изд-во НГАСУ, 1999. – Т. 2, № 1 (4). – С. 11–16.
63. *Мухина И. Н.* Нелинейный регулярирующий алгоритм решения плохо обусловленных систем алгебраических уравнений / И. Н. Мухина // Труды НГАСУ. – Новосибирск : Изд-во НГАСУ, 1998. – Т. 1, № 1 (1). – С. 119–122.
64. *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.
65. *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.
66. *Мухина И. Н.* Синтез регуляризирующих алгоритмов параметрической идентификации / И. Н. Мухина // Тезисы докл. Всероссийской научн. конф. ААНЗ-2001. – Екатеринбург : Урал, 2001. – С. 296–297.
67. *Сейдж Э.* Теория оценивания и ее применение в связи и управлении / Сейдж Э., Дж. Мелс. – М. : Связь, 1976. – 428 с.
68. *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.

69. *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.
70. *Тихонов А. Н.* О регуляризации некорректно поставленных задач / А. Н. Тихонов // Доклады АН СССР. – 1963. – Т. 153, № 1. – С. 49–52.
71. *Тихонов А. Н.* О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации / А. Н. Тихонов // Доклады АН СССР. – 1963. – Т. 151, № 3. – С. 501–504.
72. *Тихонов А. Н.* Об устойчивости обратных задач / А. Н. Тихонов // Докл. АН СССР. – 1943. – Т. 39, № 5. – С. 195–198.
73. *Тихонов А. Н.* Методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. – М. : Наука, 1986. – 285 с.
74. *Тихонов А. Н.* Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация / А. Н. Тихонов, А. В. Гончарский, В. В. Степанов и др. – М. : Наука, 1988. – 198 с.
75. *Тихонов А. Н.* Численные методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, А. В. Гончарский, В. В. Степанов и др. – М. : Наука, 1990. – 231 с.
76. *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.
77. *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.
78. *Федотов А. М.* Линейные некорректные задачи со случайными ошибками в данных / А. М. Федотов. – Новосибирск : Наука, 1982. – 189 с.
79. *Федотов А. М.* Некорректные задачи со случайными ошибками в данных / А. М. Федотов. – Новосибирск : Наука, 1990. – 279 с.
80. *Форсайт Дж.* Машинные методы математических вычислений / Дж. Форсайт, М. Макольм, К. Моулер ; пер. с англ. – М. : Мир, 1980. – 278 с.
81. *Ягола А. Г.* Некорректно поставленные задачи с приближенно заданным оператором / А. Г. Ягола // Сб. под ред. А. Н. Тихонова. – Новосибирск : Наука. – 1982.

82. Ягола А. Г. О выборе параметра регуляризации по обобщенному принципу невязки / А. Г. Ягола // ДАН. – 1979. – Т. 245, № 1. – С. 37–39.
83. 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.
84. 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.
85. 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.
86. Golub G. H. Singular value decomposition and least squares solution / G. H. Golub, C. Reinsch. – Heidelberg : Springer, 1971. – V. 2. – P. 138–147.
87. 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.
88. Hadamard J. Le probleme de Cauchy et les equations aux derives partielles lineaires hyperbolique / J. Hadamard. – Paris : Hermann, 1932.
89. 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.
90. Hemmerle W. J. An explicit solution for generalized ridge regression / W. J. Hemmerle // Technometrics. – 1975. – V. 17, № 3. – P. 309.
91. 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.
92. 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.
93. 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.
94. 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.
95. *Reginska T.* A regularization parameter in discrete ill-posed problems / T. Reginska // *SIAM J. Sci. Comput.* – 1996. – V. 17, № 6. – P. 740–749.
 96. *Vogel C. R.* Non-convergence of L-curve regularization parameter selection method / C. R. Vogel // *Inverse Problems*. – 1996. – V. 12, № 4. – P. 535–547.
 97. *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.
 98. *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.
 99. *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.
 100. *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.
 101. *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.
 102. *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.
 103. *Wahba G.* Smoothing noisy data with spline functions / G. Wahba. – *Numer. Math.* 1975. – v. 24, № 2. – P. 383–393.
 104. *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.