Вычислительные технологии **Том 12, № 6, 2007**

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ НЕУСТОЙЧИВЫХ ЗАДАЧ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ НА ОСНОВЕ РАСШИРЕННЫХ СИСТЕМ

А. И. Жданов, Т. Г. Парчайкина
Самарский государственный аэрокосмический университет им. акад. С.П. Королева, Россия
e-mail: `zhdanov@ssau.ru, partan2000@mail.ru`

The method of the solving of unstable least square problems by crude data is considered. This method is based on the transformation of least square problem to equivalent augmented system of linear algebraic equations with symmetric matrix.

Постановка задачи

Рассмотрим задачу наименьших квадратов в следующем виде [1]:

$$\min_{u\in\mathbb{R}^n} \|f - Au\|_2^2 + 2c^T u, \tag{1}$$

где $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $f \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$, T — знак транспонирования, $\|f\|_2$ — евклидова векторная норма.

В [1] рассмотрен случай, когда $m \geq n$ и rank $A = n$, а исходные данные $d = \{A, f, c\}$ известны точно. В данной работе такие ограничения не вводятся.

Случай $c = 0$ был рассмотрен в [2].

Информация о задаче (1) содержит приближенные данные $\tilde{d} = \{\tilde{A}, \tilde{f}, \tilde{c}\}$:

$$\|A - \tilde{A}\|_2 \leq h, \quad \|f - \tilde{f}\|_2 \leq \delta', \quad \|c - \tilde{c}\|_2 \leq \delta'', \tag{2}$$

где $h \geq 0$, $\delta' \geq 0$, $\delta'' \geq 0$ характеризуют погрешности задания приближенных данных $\tilde{d}$. В дальнейшем в качестве матричной нормы понимается спектральная матричная норма, т. е.

$$\|A - \tilde{A}\|_2 = \sup_{\|u\|_2=1} \|Au - \tilde{A}u\|_2.$$

Таким образом имеется семейство задач:

$$\min_{u\in\mathbb{R}^n} \|\tilde{f} - \tilde{A}u\|_2^2 + 2\tilde{c}^T u, \tag{3}$$

удовлетворяющих (2).

Задача (1) эквивалентна решению системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) [3]:

$$A^T A u = A^T f - c, \tag{4}$$

которая, в свою очередь, эквивалентна расширенной системе уравнений:

$$\begin{array}{rcl} v + Au &=& f, \\ A^T v &=& c \end{array} \tag{5}$$

или

$$\begin{pmatrix} I_m & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ c \end{pmatrix} \Leftrightarrow \; Gz = b, \tag{6}$$

где I_m — единичная матрица порядка m.

На основании теоремы Кронекера—Капелли система (4) совместна тогда и только тогда, когда $\mathrm{rank}(A^T A) = \mathrm{rank}\,(A^T A \vdots A^T f - c)$. В силу (5) условие совместности равносильно выполнению условия $\mathrm{rank}\ A^T = \mathrm{rank}\,(A^T \vdots c)$. Таким образом, можно сформулировать следующее утверждение.

Утверждение 1. *Задача (1) разрешима тогда и только тогда, когда выполнено условие* $\mathrm{rank}\,A^T = \mathrm{rank}(A^T \vdots c)$.

Решение задачи на основе расширенных систем

В общем случае под "решением" задачи (1) будем понимать единственное решение с минимальной нормой

$$u_* = (A^T A)^+ (A^T f - c),$$

где $(A^T A)^+$ — псевдообратная матрица, или обобщенная матрица Мура—Пенроуза.

Как отмечалось в [4], решение системы (4) по приближенным данным $\tilde{d}$ при $h > 0$ является некорректно поставленной по Адамару задачей, так как приближенное решение

$$\tilde{u}_* = (\tilde{A}^T \tilde{A})^+ (\tilde{A}^T \tilde{f} - \tilde{c}) \tag{7}$$

неустойчиво к бесконечно малым возмущениям исходных данных.

Задача (3) эквивалентна системе

$$\tilde{A}^T \tilde{A} u = \tilde{A}^T \tilde{f} - \tilde{c} \tag{8}$$

и, в силу (6), расширенной системе уравнений

$$\begin{pmatrix} I_m & \tilde{A} \\ \tilde{A}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{v} \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{f} \\ \tilde{c} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \; \tilde{G} z = \tilde{b}. \tag{9}$$

Преобразование задачи (3) к эквивалентной задаче (9) дает возможность существенно понизить число обусловленности исходной вычислительной задачи.

Утверждение 2. *Единственное решение с минимальной нормой расширенной системы (9) находится как* $\tilde{z}_* = \tilde{G}^+ \tilde{b} = (\tilde{v}_*^T, \tilde{u}_*^T)^T$, *где* $\tilde{u}_*$ *определяется выражением (7) и* $\tilde{v}_* = \tilde{f} - \tilde{A}\tilde{u}_*$.

Для нахождения устойчивых решений задачи (3) воспользуемся методом регуляризации Тихонова [5].

Так как $\tilde{G} = \tilde{G}^T$, то $\tilde{G}^T\tilde{G} = \tilde{G}^2$. Следовательно, регуляризованное решение $\tilde{z}_\alpha$ системы (9) определяется как (единственное) решение *уравнения Эйлера*:

$$(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n})z = \tilde{G}\tilde{b}. \tag{10}$$

Возмущения в приближенной системе $\{\tilde{G}, \tilde{b}\}$ удовлетворяют неравенствам

$$\|\tilde{G} - G\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} 0 & \tilde{A} - A \\ \tilde{A}^T - A^T & 0 \end{pmatrix} \right\|_2 = \|\tilde{A} - A\|_2 \leq h,$$

$$\|\tilde{b} - b\|_2^2 = \|\tilde{f} - f\|_2^2 + \|\tilde{c} - c\|_2^2 \leq \delta'^2 + \delta''^2 \Leftrightarrow \|\tilde{b} - b\|_2 \leq \delta,$$

где $\delta = \sqrt{\delta'^2 + \delta''^2}$. Из утверждений 1 и 2, теоремы 4 в [4] непосредственно следует теорема.

Теорема 1. *Если в уравнении (10) положить $\alpha = h$, тогда ошибка уклонения*

$$\|\tilde{z}_\alpha - z_*\|_2 = O(h + \delta),$$

где $\tilde{z}_\alpha$ — решение (10).

При численном решении уравнения Эйлера (10) для расширенных систем важно исследовать числа обусловленности этой системы. В [2] показано, что спектр матрицы

$$\begin{pmatrix} I_m & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix}$$

имеет вид

$$\lambda = \begin{cases} \dfrac{1}{2} \pm \sqrt{\dfrac{1}{4} + \sigma_k^2}, & k = 1, 2, \ldots, \tau; \\ 1, & \text{имеет кратность } m - \tau; \\ 0, & \text{имеет кратность } n - \tau, \end{cases}$$

где $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_\tau > \sigma_{\tau+1} = \ldots = \sigma_n = 0$ — сингулярные числа матрицы A, т. е. $\sigma_k = \sqrt{\lambda_k(A^TA)}$, $\lambda_k(A^TA)$ — собственные числа матрицы A^TA, $k = 1, 2, \ldots, n$; $\tau = \operatorname{rank}(A)$.

Исследуем обусловленность регуляризованной системы (уравнения Эйлера) (10). Для этого оценим число обусловленности матрицы $\tilde{G}$.

Пусть матрица $\tilde{G}$ — матрица полного ранга, т. е. $\tilde{\tau} = \operatorname{rank}(\tilde{A}) = n$. Тогда, если $\tilde{\tau} = n$, минимальное сингулярное число матрицы $\tilde{A}$ $\tilde{\sigma}_n = \tilde{\sigma}_{\min}(\tilde{A}) > 0$ и

$$\operatorname{cond}_2(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n}) < \operatorname{cond}_2(\tilde{G}^2) = \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + 2\left(\frac{\tilde{\sigma}_1}{\tilde{\sigma}_n}\right)} \right)^2 \leq (\sqrt{2}\operatorname{cond}_2(\tilde{A}) + 1)^2.$$

Пусть матрица $\tilde{G}$ — матрица неполного ранга, т. е. $\tilde{\tau} = \operatorname{rank}(\tilde{A}) < n$. Тогда получаем

$$\lambda_{\max}(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n}) = \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \tilde{\sigma}_1^2} \right)^2 + \alpha \leq 1 + \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_1^2 + \alpha.$$

При $\alpha = h$ для максимального собственного значения матрицы $\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n}$ имеет место оценка

$$\lambda_{\max}(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n}) \leq 1 + \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_1^2 + h.$$

Очевидно, что при $\tilde{\tau} < n$ $\lambda_{\min}(\tilde{G}) = 0$ и, следовательно, $\lambda_{\min}(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n}) = \alpha$.

Таким образом, при $\alpha = h$, $\tilde{\tau} < n$

$$\operatorname{cond}_2(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n}) \leq 1 + \frac{1 + \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_1^2}{h}.$$

Регуляризация систем на основе мнимого сдвига спектра

Используя свойство симметричности матрицы $\tilde{G}$, можно понизить число обусловленности регуляризованной задачи (10). Для этого воспользуемся методом мнимого сдвига спектра (В.Н. Фаддеевой).

В соответствии с этим методом вместо уравнения (10) рассмотрим уравнение

$$(\tilde{G} + i\sqrt{\alpha} I_{m+n})z = \tilde{b}, \tag{11}$$

где i — мнимая единица, $i^2 = -1$.

Пусть $z = x + iy$. Тогда (11) можно записать в виде расширенной вещественной СЛАУ:

$$\begin{pmatrix} \tilde{G} & -\sqrt{\alpha} I_{m+n} \\ \sqrt{\alpha} I_{m+n} & \tilde{G} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{b} \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Из (12) непосредственно следует, что $x = \operatorname{Re} z$ является решением уравнения

$$(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n})x = \tilde{G}\tilde{b}.$$

Таким образом, задачу решения СЛАУ (10) можно заменить на задачу решения СЛАУ (11) с мнимым сдвигом спектра.

Исследуем число обусловленности матрицы $W = \tilde{G} + i\sqrt{\alpha} I_{m+n}$. Собственные значения $\lambda_k(W)$ матрицы W равны

$$\lambda_k(W) = \tilde{\lambda}_k + i\sqrt{\alpha}, \quad k = 1, 2, \ldots, m+n,$$

где $\tilde{\lambda}_k = \tilde{\lambda}_k(\tilde{G})$ — собственные значения матрицы $\tilde{G}$.

Тогда сингулярные числа $\sigma_k(W)$ матрицы W определяются как

$$\sigma_k(W) = \sqrt{\lambda_k(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n})} = \sqrt{\tilde{\lambda}_k^2 + \alpha}.$$

Следовательно,

$$\operatorname{cond}_2(\tilde{G}^2 + \alpha I_{m+n}) = \operatorname{cond}_2^2(\tilde{G} + i\sqrt{\alpha} I_{m+n})$$

и при $\tilde{\tau} = n$

$$\operatorname{cond}_2(\tilde{G} + i\sqrt{\alpha} I_{m+n}) < \operatorname{cond}_2(\tilde{G}) \leq \sqrt{2}\operatorname{cond}_2(\tilde{A}) + 1.$$

Аналогично, если $\tilde{A}$ неполного ранга, а $\alpha = h$, то

$$\mathrm{cond}_2(\tilde{G} + i\sqrt{\alpha} I_{m+n}) \le \sqrt{1 + \frac{\tilde{\sigma}_1^2 + \tilde{\sigma}_1 + 1}{h}}.$$

Таким образом, из последних двух неравенств видно, что для плохо обусловленных матриц $\tilde{A}$ $(\mathrm{cond}_2(\tilde{A}) \gg 1)$ вычисление регуляризованных решений $\tilde{z}_\alpha$ на основе СЛАУ (11) с мнимым сдвигом спектра существенно эффективнее, чем на основе СЛАУ (10).

Примеры

Рассмотрим задачу (1), если

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 18 \\ 27 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} 18 \\ -9 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Так как $\mathrm{rank}\, A^T = \mathrm{rank}\,(A^T \vdots c) = 2$, то решение задачи (1) существует и имеет вид

$$u_* = (A^T A)^+ (A^T f - c) = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

В элемент матрицы a_{13} введем возмущение такое, что $|a_{13} - \tilde{a}_{13}| = 0.0001$. Очевидно, погрешности приближенных данных определяются величинами

$$\|A - \tilde{A}\|_2 \le 0.0001.$$

Приближенная система уравнений (8), которая определяет нерегуляризованную задачу:

$$\begin{pmatrix} 5 & -3 & -0.9998 \\ -3 & 3 & 2.9999 \\ -0.9998 & 2.9999 & 5.00000001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -9 \\ 9 \\ 9.0018 \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Система (13) невырожденная: $\det \tilde{A}^T \tilde{A} = 0.00000001 \neq 0$. Любым классическим (машинным) методом найдем ее решение:

$$\tilde{u}_* \approx \begin{pmatrix} -1.26 \cdot 10^6 \\ -2.52 \cdot 10^6 \\ 1.26 \cdot 10^6 \end{pmatrix}.$$

Регуляризованные решения $\tilde{u}_\alpha$ определялись из СЛАУ (12). На основании теоремы параметр регуляризации α был выбран $\alpha = h$. Решая систему (12) любым классическим методом, получаем регуляризованное решение:

$$\tilde{u}_\alpha \approx \begin{pmatrix} -0.99999 \\ 0.99963 \\ 1.0006 \end{pmatrix}.$$

h	10^{-3}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}
$\|\tilde{u}_\alpha - u_*\|_2$	$6 \cdot 10^{-2}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-7}$	$6 \cdot 10^{-8}$	$6 \cdot 10^{-9}$
$\|\tilde{u}_* - u_*\|_2$	$3 \cdot 10^{5}$	$1.7 \cdot 10^{6}$	$1.7 \cdot 10^{7}$	$1.7 \cdot 10^{8}$	$1.5 \cdot 10^{9}$	$1.5 \cdot 10^{8}$	$1.5 \cdot 10^{7}$

Сравнивая регуляризованное решение $\tilde{u}_\alpha$ с точным решением u_*, получаем

$$\|\tilde{u}_\alpha - u_*\|_2 < 6 \cdot 10^{-3},$$

что соответствует полученным в работе теоретическим результатам.

Приведем результаты исследования данного метода при различных h (см. таблицу).

Метод регуляризации на основе эквивалентных расширенных систем, предлагаемый в настоящей работе, позволяет решать (с гарантированной точностью) неустойчивые задачи наименьших квадратов по приближенным данным (3). Отметим, что за счет симметричности матрицы $\tilde{G}$ удается понизить число обусловленности регуляризованной вычислительной задачи, при этом вычислительная трудоемкость решения СЛАУ (12) не намного выше трудоемкости решения СЛАУ (10). На основании теоремы, приведенной в данной работе, параметр регуляризации выбирается $\alpha = h$. Таким образом, не требуется специальных правил выбора параметра регуляризации, которые существенно усложняют решение исходных некорректных задач.

Список литературы

[1] Björk Å. Pivoting and stability in Augmented System Method // Proceedings of the 14th Dundee Conference. 1991. P. 1–16.

[2] Жданов А.И. Регуляризация неустойчивых конечномерных линейных задач на основе расширенных систем // Журн. вычисл. матем. и математической физ. 2005. Т. 45, № 11. С. 1918–1926.

[3] Björk Å. Numerical stability of methods for solving augmented system // Contemporary Math. 1997. Vol. 204. P. 51–60.

[4] Морозов В.А. Алгоритмические основы методов решения некорректных задач // Вычисл. методы и программирование. 2003. Т. 45. С. 130–141.

[5] Тихонов А.Н. О приближенных системах линейных алгебраических уравнений // Журн. вычисл. матем. и математической физ. 1980. Т. 20, № 6. С. 1373–1383.

Поступила в редакцию 29 марта 2007 г.,
в переработанном виде — 28 сентября 2007 г.