

А.С. ЛЕОНОВ

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ПЛОХО ОБУСЛОВЛЕННЫХ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ, УЛУЧШАЮЩИЕ ОБУСЛОВЛЕННОСТЬ

Аннотация. Рассматривается проблема решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с плохо обусловленной или вырожденной точной матрицей и приближенной правой частью. Предлагается и обосновывается схема решения такой задачи, позволяющая улучшить обусловленности матрицы СЛАУ и получить в результате устойчивое к погрешностям правой части приближенное решение с более высокой точностью, чем при применении ряда других методов. Схема реализуется с помощью алгоритма, использующего так называемые минимальные псевдообратные матрицы. Приводятся результаты численных экспериментов, подтверждающие теоретические положения статьи.

Ключевые слова: плохо обусловленные СЛАУ, метод минимальной псевдообратной матрицы.

УДК: 519.6: 517.988.8

DOI: 10.26907/0021-3446-2024-8-34-44

ВВЕДЕНИЕ

При математическом моделировании различных естественно-научных, технических, экономических и других процессов часто приходится решать системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) весьма большой размерности на различной вычислительной технике. Такие системы часто оказываются плохо обусловленными или вырожденными. Как следствие, классические методы линейной алгебры (см., например, [1]–[3]) при их применении для численного решения этих СЛАУ иногда оказываются мало пригодными из-за неустойчивости при накоплении ошибок округления. Частично такую проблему можно решить, используя вычисления на компьютерах с двойной, четверной и большими точностями. Однако такой подход применим не для всех систем вычислений на персональных компьютерах. Поэтому практическое решение плохо обусловленных и вырожденных СЛАУ требует применение специальных методов, «настроенных» на борьбу с численной неустойчивостью.

Разработано достаточно много таких методов с различной сложностью и областью применимости (см. [4]–[6] и др.). Особо упомянем здесь методы, имеющие отношение к последующему изложению. Так, хорошо известен метод регуляризации А.Н. Тихонова и его вариант в форме регуляризованного метода наименьших квадратов [7]. Часто используется и метод TSVD (truncated singular value decomposition) в различных его модификациях

Поступила в редакцию 28.08.2023, после доработки 28.08.2023. Принята к публикации 26.09.2023.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 23-41-00002).

(см., например, [8], [9]). Разработан также *метод минимальной псевдообратной матрицы* (МПМ) (см. [10], а также [11], [12]), который далее и будет применяться.

Отличительной особенностью данной работы является построение специальных методов решения СЛАУ, *существенно улучшающих число обусловленности* матрицы задачи (т. е. значительно уменьшающих его) и, как следствие, улучшающих точность приближенного решения. Этим предлагаемые методы отличаются от перечисленных выше, в которых уменьшение числа обусловленности не является целью, а оказывается неким «побочным продуктом».

1. О НЕКОТОРЫХ МЕТОДАХ УСТОЙЧИВОГО РЕШЕНИЯ СЛАУ

Пусть $\mathbb{R}_c^n, \mathbb{R}_c^m$ — пространства вектор-столбцов с евклидовыми нормами $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ [13]. Будем решать СЛАУ вида

$$Az = u, \quad z \in \mathbb{R}_c^n, \quad u \in \mathbb{R}_c^m \quad (1)$$

с действительной ненулевой матрицей A размера $\dim A = m \times n$ и правой частью $u \neq 0$. Так как эта система может быть не разрешимой в классическом смысле, будем рассматривать ее псевдорешения $z^* \in \mathbb{R}_c^n$, для которых

$$\|Az^* - u\| = \inf\{\|Az - u\| : z \in \mathbb{R}_c^n\}.$$

Множество всех псевдорешений для точных данных задачи $\{A, u\}$ обозначим как Z^* . Для совместной системы эти псевдорешения представляют собой обычные решения. Для всякой системы вида (1) существует единственное «нормальное псевдорешение» $\bar{z}$, т. е. такое псевдорешение, для которого

$$\|\bar{z}\| = \inf\{\|z\| : z \in Z^*\}.$$

Для разрешимой системы (1) его называют нормальным решением. Для однозначно разрешимой системы нормальное решение совпадает с классическим решением. Нашей целью является нахождение по данным $\{A, u\}$ вектора $\bar{z}$. Формальное решение этой задачи дается с помощью псевдообратной матрицы A^+ : $\bar{z} = A^+u$ (см., например, [13], [14]).

Часто такая постановка задачи модифицируется. Считается, что вместо точных данных $\{A, u\}$ в нашем распоряжении имеются их приближения $\{A_h, u_\delta\}$, $\dim A_h = \dim A$, $u_\delta \in \mathbb{R}_c^m$, и точности их задания, т. е. такие числа $\eta = (h, \delta)$, что $\|A_h - A\| \leq h$, $\|u_\delta - u\| \leq \delta$. Здесь и в дальнейшем нормы матриц считаются евклидовыми: $\|A\| = \|A\|_E$ (см. [13], с. 103). Требуется построить приближения $z_\eta \in \mathbb{R}_c^n$ к решению $\bar{z}$, которые обладают свойством устойчивости: $\|z_\eta - \bar{z}\| \rightarrow 0$ при $\eta \rightarrow 0$.

Решение этой задачи по формуле $z_\eta = A_h^+ u_\delta$ в общем случае оказывается неустойчивым, так как не гарантирована сходимость $A_h^+ \rightarrow A^+$ при $h \rightarrow 0$. Поэтому предложены другие методы. Например, решением является элемент $z_\eta = z_\eta^{\alpha(\eta)}$, который получается по методу регуляризации А.Н. Тихонова:

$$z_\eta^{\alpha(\eta)} = (\alpha(\eta)I + A_h^* A_h)^{-1} A_h^* u_\delta = T_1(A_h) u_\delta.$$

Здесь параметр $\alpha(\eta) > 0$ выбирается одним из способов, описанных в [7], [11], [12], [15]–[17] и других работах. Эти способы обеспечивают требуемую сходимость. Для реализации метода регуляризации необходимо знания погрешностей матрицы и правой части СЛАУ.

Другое решение задачи можно получить по методу TSVD. Он основан на искусственном «занулении» малых сингулярных чисел матрицы системы. Схема реализации метода такова. Находится сингулярное разложение приближенной матрицы:

$$A_h = U_h R_h V_h^T, \quad R_h = \text{diag}(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_M), \quad \rho_1 \geq \rho_2 \geq \dots \geq \rho_M \geq 0,$$

где $M = \min(m, n)$. Далее, по некоторой методике выбирается число $\varsigma \in \mathbb{N}$, играющее роль параметра регуляризации, для которого $\rho_\varsigma > 0$, и полагается, что $\rho_k = 0$ при $k = \varsigma + 1, \varsigma + 2, \dots, M$. Затем строят новую матрицу сингулярных чисел $R_\varsigma = \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_\varsigma, 0, \dots, 0)$ и по ней, а также по ортогональным матрицам U_h, V_h сингулярного разложения, находят приближенное решение СЛАУ:

$$z_\varsigma = V_h R_\varsigma^+ U_h^T u_\delta = T_2(A_h) u_\delta, \quad R_\varsigma^+ = \text{diag}(\rho_1^{-1}, \dots, \rho_\varsigma^{-1}, 0, \dots, 0).$$

Это соответствует использованию вместо матрицы A_h другой приближенной матрицы $\hat{A}_\varsigma = U_h R_\varsigma V_h^T$ и ее псевдообращению. Вопрос о том, что считать «малым» сингулярным числом, т. е. о том, каково ς , решается по-разному. Например, в статье [9] предлагается выбирать $\varsigma = \varsigma(h)$ так, что

$$(\rho_{\varsigma+1}^2 + \rho_{\varsigma+2}^2 + \dots + \rho_M^2)^{1/2} \leq h, \quad (\rho_\varsigma^2 + \rho_{\varsigma+1}^2 + \dots + \rho_M^2)^{1/2} > h.$$

Это соответствует выбору из всех матриц R_ς , удовлетворяющих условию $\|R_h - R_\varsigma\|_E \leq h$, той, которая имеет минимальный ранг. Этот метод требует знания погрешности задания матрицы, но не использует величину δ .

Оба рассмотренных метода основаны на устойчивой аппроксимации псевдообратной матрицы A^+ матрицами $T_{1,2}(A_h)$. Отметим, что метод регуляризации использует матрицу полного ранга $T_1(A_h)$, в то время как матрица $T_2(A_h)$ метода TSVD может иметь значительно меньший ранг, чем исходная матрица A_h . Ниже мы рассмотрим вопрос об улучшении числа обусловленности этой матрицы с помощью предлагаемых методов в сравнении с методами регуляризации и TSVD.

В работах [10]–[12] был предложен и исследован метод минимальной псевдообратной матрицы, не только позволяющий устойчиво вычислять A^+ , но и обладающий при этом рядом оптимальных свойств. Кратко опишем этот метод. Введем пространство $\mathcal{A}$, состоящие из матриц размера $m \times n$ с евклидовыми нормами. Пусть $\bar{A} \in \mathcal{A}$ — неизвестная точная матрица, для которой нужно найти псевдообратную. Приближенными данными для этого служат известные величины $A_h \in \mathcal{A}$ и h такие, что $\|A_h - \bar{A}\| \leq h$. Определим множество матриц $\mathcal{A}_h = \{A \in \mathcal{A} : \|A_h - A\| \leq h\}$, сопоставимых с матрицей A_h по точности. Ясно, что $\bar{A} \in \mathcal{A}_h$. Рассмотрим следующую экстремальную задачу: найти такую матрицу $\tilde{A}_h \in \mathcal{A}$, для которой выполнено равенство

$$\|\tilde{A}_h^+\| = \inf \{\|A^+\| : A \in \mathcal{A}_h\}. \quad (2)$$

Решение задачи (2) называется *матрицей метода МПМ*, а соответствующая псевдообратная матрица $\tilde{A}_h^+$ — *минимальной псевдообратной матрицей*. Доказано, что эти матрицы существуют, и при $h \rightarrow 0$ справедлива оценка точности $\|\tilde{A}_h^+ - \bar{A}^+\| \sim 2h \|\bar{A}^+\|^2$, причем эта оценка асимптотически неулучшаема. Это означает, что метод МПМ дает оптимальный порядок точности приближения к псевдообратной матрице $\bar{A}^+$.

Метод МПМ легко реализуется численно. Соответствующий алгоритм состоит из следующих шагов ([10], [11], гл. 5).

1. Нахождение сингулярного разложения заданной матрицы A_h : $A_h = U_h R_h V_h^T$, где $R_h = \text{diag}(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_M)$, $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \dots \geq \rho_M \geq 0$, $M = \min(m, n)$, а U_h, V_h — ортогональные матрицы размера $m \times m$ и $n \times n$.

2. а) Нахождение величин $\lambda_k = \frac{27}{16} \rho_k^4$ и вычисление для $\lambda \geq 0$ функций

$$\rho_k(\lambda) = \{\rho_k x_k(\lambda), 0 < \lambda \leq \lambda_k; 0, \lambda \geq \lambda_k\}; \quad \rho_k(0) = \rho_k, \quad k = 1, 2, \dots, M.$$

Здесь $x_k(\lambda)$ — решение уравнения $x^4 - x^3 = \lambda \rho_k^{-4}$, лежащее на отрезке $\left[1, \frac{3}{2}\right]$.

б) вычисление функции

$$\beta(\lambda) = \sum_{k=1}^M [\rho_k(\lambda) - \rho_k]^2, \quad \lambda \geq 0.$$

3. Численное нахождение решения $\lambda(h) > 0$ уравнения $\beta(\lambda) = h^2$. Действительно, в этом пункте многократно используются пп. 2 а), б).

4. Нахождение регуляризованной матрицы сингулярных чисел

$$\tilde{R}_h = \text{diag}(\rho_1[\lambda(h)], \rho_2[\lambda(h)], \dots, \rho_M[\lambda(h)])$$

и псевдообратной к ней

$$\tilde{R}_h^+ = \text{diag}\{\theta[\rho_1[\lambda(h)]], \theta[\rho_2[\lambda(h)]], \dots, \theta[\rho_M[\lambda(h)]]\},$$

где $\theta(\rho) = \{\rho^{-1}, \rho > 0; 0, \rho = 0\}$.

5. Окончательное вычисление минимальной псевдообратной матрицы $\tilde{A}_h^+ = V_h \tilde{R}_h^+ U_h^T$ и, если это необходимо, вычисление матрицы метода МПМ $\tilde{A}_h = U_h \tilde{R}_h V_h^T$.

В качестве комментария к алгоритму, заметим, что функция $\beta(\lambda)$ монотонно возрастает, имея своими точками разрыва числа λ_k . В этих точках нарушается однозначность функции $\beta(\lambda)$, и она принимает в них значения $\beta(\lambda_k - 0)$ и $\beta(\lambda_k + 0)$. Поэтому, говоря о решении уравнения $\beta(\lambda) = h^2$, мы имеем в виду нахождение обобщенного решения, т. е. или точки скачка функции $\beta(\lambda)$ через значение h^2 , или обычного корня. Более детально вопросы реализации этого алгоритма, а также вопрос о влиянии точности приближенного вычисления сингулярных чисел исходной матрицы на алгоритм рассмотрены в [10], [11]. Следует также отметить, что метод МПМ дает оптимальную по порядку числа обусловленности матрицу $\tilde{A}_h$. Метод не требует знания точности задания правой части СЛАУ. Мы будем использовать ниже минимальные псевдообратные матрицы в новом алгоритме решения СЛАУ, гарантирующем улучшение числа обусловленности матрицы системы.

2. ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ УТВЕРЖДЕНИЯ

В этом разделе считаем, что для «точной» матрицы $\bar{A} \in \mathcal{A}$, $\bar{A} \neq 0$, при каждом $h \geq 0$ задано семейство «приближенных» матриц $\tilde{A}_h \in \mathcal{A}$, для которых выполнено условие аппроксимации $\|\tilde{A}_h - \bar{A}\| \leq h$.

Лемма. Пусть для указанных матриц $\tilde{A}_h$ выполнено соотношение $\|\tilde{A}_h^+\| \leq \|\bar{A}^+\| \quad \forall h, 0 \leq h < \|\bar{A}^+\|^{-1}$. Тогда а) $\text{Rg} \tilde{A}_h = \text{Rg} \bar{A}$; б) $\|\tilde{A}_h^+ - \bar{A}^+\| \leq h \|\bar{A}^+\|^2 (1 - h \|\bar{A}^+\|)^{-3}$.

Доказательство. Обозначим, как $\bar{\rho}_k, \tilde{\rho}_k$, $1 \leq k \leq M$, сингулярные числа матриц $\bar{A}, \tilde{A}_h$. Тогда (см. [13], [10]) выполнены соотношения

$$\sum_{k=1}^M (\tilde{\rho}_k - \bar{\rho}_k)^2 \leq \|\tilde{A}_h - \bar{A}\|^2 \leq h^2, \quad \|\tilde{A}_h^+\|^2 = \sum_{k=1}^{r_h} \tilde{\rho}_k^{-2}, \quad \|\bar{A}^+\|^2 = \sum_{k=1}^r \bar{\rho}_k^{-2}, \quad (3)$$

где $r_h = \text{Rg} \tilde{A}_h$, $r = \text{Rg} \bar{A}$. Докажем а), т. е. равенство $r_h = r$ при $0 \leq h < \|\bar{A}^+\|^{-1}$. Предположим, что $r_h < r$. Тогда $\tilde{\rho}_k = 0$ при $k > r$, поэтому с учетом (3) получим

$$\bar{\rho}_r \leq \sum_{k=1}^{r-1} (\tilde{\rho}_k - \bar{\rho}_k)^2 + \sum_{k=r}^M \tilde{\rho}_k^2 = \sum_{k=1}^M (\tilde{\rho}_k - \bar{\rho}_k)^2 \leq h^2, \quad \bar{\rho}_r^{-2} \leq \|\bar{A}^+\|^2.$$

Отсюда следует $h^2 \geq \|\bar{A}^+\|^2$, а это противоречит условию на h .

Если же предположить, что $r_h > r$, то $\bar{\rho}_{r_h} = 0$, и аналогично получим

$$\tilde{\rho}_{r_h}^2 = (\tilde{\rho}_{r_h} - \bar{\rho}_{r_h})^2 \leq \sum_{k=1}^M (\tilde{\rho}_k - \bar{\rho}_k)^2 \leq h^2, \quad \tilde{\rho}_{r_h}^{-2} \leq \sum_{k=1}^{r_h} \tilde{\rho}_k^{-2} = \|\tilde{A}_h^+\|^2 \leq \|\bar{A}^+\|^2.$$

Отсюда снова следует неравенство $h^2 \geq \|\bar{A}^+\|^2$, противоречащее условиям. В результате получаем $r = \text{Rg} \bar{A} = r_h = \text{Rg} \tilde{A}_h$.

Доказательство части b) основано на применении установленной в [10] оценки

$$\|A^+ - B^+\| \leq \|A - B\| \|A^+\|^2 / (1 - \|A - B\| \|A^+\|)^3$$

для матриц с условиями $\dim A = \dim B$, $\text{Rg} A = \text{Rg} B$. Положив в этой оценке $A = \bar{A}$, $B = \tilde{A}_h$, с учетом доказанной части a) леммы получим требуемое неравенство. $\square$

Следствие 1. Если $\tilde{A}_h \rightarrow \bar{A}$ и $\|\tilde{A}_h^+\| \leq \|\bar{A}^+\|$ при $h \rightarrow 0$, то $\tilde{A}_h^+ \rightarrow \bar{A}^+$.

Отсюда получается

Следствие 2. Пусть $\delta \rightarrow 0$, и для некоторой функции $h(\delta) \rightarrow 0$ найдена такая матрица $A_{h(\delta)}$, что

$$\|A_{h(\delta)} - A\| \rightarrow 0, \quad \|A_{h(\delta)}^+\| \leq \|A^+\|.$$

Тогда $A_{h(\delta)}^+ \rightarrow A^+$ при $\delta \rightarrow 0$, поэтому $z_\delta = A_{h(\delta)}^+ u_\delta \rightarrow \bar{z}$.

3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ, ПРЕДЛАГАЕМАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ И ЕЕ ОБОСНОВАНИЕ

В некоторых практических случаях матрица СЛАУ известна точно, т.е. мы знаем $\bar{A}$, причем часто в форме аналитического выражения. При этом она может быть плохо обусловлена или даже вырождена. Тогда имеются основания заменить ее на близкую матрицу с лучшим числом обусловленности и использовать последнюю вместо точной. Это можно проиллюстрировать следующим примером.

Пример. Применение метода TSVD для улучшения обусловленности матрицы.

В задачах, связанных с продолжением потенциальных полей, иногда решается СЛАУ с матрицей вида

$$\bar{A} = \left[\frac{1}{(x_i - y_j)^2 + H_0^2} \right]_{i,j=1}^{m,n}, \quad (4)$$

где $\{x_i\}, \{y_j\}$ — равномерные сетки на отрезке $[-1, 1]$. При $m = 1991$, $n = 2001$ и $H_0 = 0.1$ матрица имеет спектральное число обусловленности $\nu_s = \rho_1 / \rho_M \approx 3.37 \cdot 10^{19}$, т.е. является чрезвычайно плохо обусловленной. Это связано со специфическим (экспоненциальным) порядком убывания сингулярных чисел ρ_k , $k = 1, \dots, M$, матрицы. Применив к матрице метод TSVD, т.е., например, заменив нулями ее сингулярные числа, которые удовлетворяют условию $\rho_k < h$, можно при «адекватном» выборе величины h улучшить число обусловленности. Так, для $h = 10^{-10}$ получим лучшее число обусловленности $\nu_s \approx 2.48 \cdot 10^9$. Соответственно улучшается устойчивость численных решений СЛАУ с такой матрицей. При этом, однако, не ясно, как конструктивно найти h , так как оценка близости матриц h в рассматриваемой постановке неизвестна.

Ниже предлагается следующая схема решения СЛАУ с известной матрицей $\bar{A}$, использующая приближенную матрицу с улучшенным числом обусловленности. Пусть дано сингулярное разложение точной матрицы: $\bar{A} = U\bar{R}V^T$, где U, V — ортогональные матрицы размера $m \times m$ и $n \times n$ соответственно, а $\bar{R}$ — диагональная матрица размера $m \times n$, содержащая сингулярные числа матрицы $\bar{A}$, упорядоченные по невозрастанию: $\bar{R} = \text{diag}[\bar{\rho}_1, \bar{\rho}_2, \dots, \bar{\rho}_{\bar{r}}, 0, \dots, 0]$, $\bar{\rho}_k \geq \bar{\rho}_{k+1} \geq 0$, $\bar{r} = \text{Rg } \bar{A} \leq M$. Считаем, что $\bar{A} \neq 0$ и точная правая часть СЛАУ $\bar{u} \neq 0$.

Схема решения СЛАУ с данными $\{\bar{A}, u_\delta\}$.

1) Для каждого h , $0 \leq h \leq H = \text{const}$, ищем приближенные матрицы в виде $\tilde{A}_h = U\tilde{R}_hV^T$, где

$$\tilde{R}_h = \text{diag}[\bar{\rho}_1 x_1(h), \bar{\rho}_2 x_2(h), \dots, \bar{\rho}_{\bar{r}} x_{\bar{r}}(h), 0, \dots, 0].$$

О выборе функций $x_k(h)$, $k = 1, \dots, \bar{r}$, в разных методах будет сказано ниже. Число H задается в каждом конкретном методе.

2) Вводим функцию $\beta_\delta(h) = \|\bar{A}\tilde{A}_h^+ u_\delta - u_\delta\|$, $0 \leq h \leq H$, и решаем уравнение $\beta_\delta(h) = \delta$. Обозначим его решение как $h(\delta) > 0$. Вопросы разрешимости уравнения будут исследованы далее.

3) Находим матрицу $\tilde{A}_{h(\delta)}$ и с ее помощью вычисляем приближенное решение СЛАУ: $z_\delta = \tilde{A}_{h(\delta)}^+ u_\delta$.

Сделаем следующие **предположения** относительно функций $x_k(h)$: для всех $k = 1, \dots, M$

A) $1 < x_k(h) \leq c_k = \text{const}$ при $0 < h \leq H$;

B) $x_k(+0) = x_k(0) = 1$, $x_k(H) = 0$;

C) функции $x_k(h)$ непрерывны слева при $h \in (0, H]$;

D) функции $\theta[x_k(h)]$ монотонно не возрастают при $0 \leq h \leq H$.

Отметим некоторые простые следствия из этих предположений.

F1) $x_k(h) = 1 \iff h = 0$; F2) $0 \leq \theta[x_k(h)] \leq 1$; F3) $\lim_{h \rightarrow +0} \theta[x_k(h)] = \theta[x_k(0)] = 1$; F4) для любого h_0 , $h_0 \in [0, H]$, выполнено равенство

$$\overline{\lim}_{h \rightarrow h_0} \theta[x_k(h)] = \theta[x_k(h_0)].$$

Отметим также вытекающее из F2) и определения функции θ неравенство

$$\|\tilde{A}_h^+\|^2 = \sum_{k=1}^{\bar{r}} \bar{\rho}_k^{-2} \theta[x_k^2(h)] \leq \sum_{k=1}^{\bar{r}} \bar{\rho}_k^{-2} = \|\bar{A}^+\|^2. \quad (5)$$

Теорема 1. Пусть выполнены условия A)–C) и, кроме того, для каждого δ , $0 < \delta < \delta_0 = \text{const}$, выполнено неравенство $\|u_\delta\| > \mu_\delta$, где $\mu_\delta = \|\bar{A}\bar{A}^+ u_\delta - u_\delta\|$. Тогда

1) функция $\beta_\delta(h)$ монотонно не убывает при $h \in [0, H]$ и непрерывна слева в каждой точке $h > 0$;

2) $\beta_\delta^2(+0) = \mu_\delta^2$, $\beta_\delta^2(\|\bar{A}\|) = \|u_\delta\|^2$;

3) уравнение $\beta_\delta^2(h) = \delta^2 + \mu_\delta^2$ имеет обобщенное решение $h(\delta) > 0$;

4) $h(\delta) \rightarrow 0$ при $\delta \rightarrow 0$.

Замечание. В п. 3) теоремы решается уравнение с монотонной функцией $\beta_\delta(h)$. Его «обобщенное» решение $h(\delta)$ — это точка, для которой выполнены неравенства

$$\lim_{h \rightarrow h(\delta)} \beta_\delta^2(h) = \beta_\delta^2(h(\delta) - 0) \leq \mu_\delta^2 + \delta^2 \leq \beta_\delta^2(h(\delta) + 0) = \overline{\lim}_{h \rightarrow h(\delta)} \beta_\delta^2(h).$$

Такие уравнения возникали ранее при исследовании принципа невязки для решения некорректных обратных задач (см., например, [11]). В дальнейшем мы будем использовать часть этого неравенства, учитывающую непрерывность слева функции $\beta_\delta(h)$:

$$\beta_\delta^2(h(\delta)) = \beta_\delta^2(h(\delta) - 0) \leq \delta^2 + \mu_\delta^2. \quad (6)$$

Доказательство. Установим 1). Справедливо равенство

$$\beta_\delta^2(h) = \left\| \bar{A}^+ \tilde{A}_h^+ u_\delta - u_\delta \right\|^2 = \left\| U \bar{R} V^T V \tilde{R}_h^+ U^T u_\delta - U U^T u_\delta \right\|^2 = \left\| \bar{R} \tilde{R}_h^+ v_\delta - v_\delta \right\|^2,$$

где $v_\delta = U^T u_\delta = (v_k)_{k=1}^m$. Далее, учитывая вид матриц $\bar{R}$ и $\tilde{R}_h^+$, получим

$$\begin{aligned} \beta_\delta^2(h) &= \sum_{k=1}^m (\bar{\rho}_k \theta[\bar{\rho}_k x_k(h)] - 1)^2 v_k^2 = \sum_{k=1}^{\bar{r}} (\bar{\rho}_k \bar{\rho}_k^{-1} \theta[x_k(h)] - 1)^2 v_k^2 + \sum_{k=\bar{r}+1}^m v_k^2 = \\ &= \sum_{k=1}^{\bar{r}} (\theta[x_k(h)] - 1)^2 v_k^2 + \mu_\delta^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Отсюда, а также из свойств D) и F2), следует монотонность функции $\beta_\delta(h)$.

Равенства, указанные в п. 2) теоремы, следуют из свойств B), F3) и F4). Существование обобщенного решения уравнения из п. 3) следует из монотонности функции $\beta_\delta(h)$ и условия $\|u_\delta\| > \mu_\delta$ теоремы (аналогичное утверждение см. [10]).

Докажем сходимость из п. 4). Предположим, что $h(\delta) \not\rightarrow 0$ при $\delta \rightarrow 0$. Тогда существует последовательность $\{\delta_N\}$, $\delta_N \rightarrow 0$, для которой $h(\delta_N) = h_N \rightarrow h_0 > 0$ при $N \rightarrow \infty$. Из равенства (7) и свойства (6) решений $h(\delta_N) = h_N$ следует

$$\beta_\delta^2(h_N) = \sum_{k=1}^{\bar{r}} (\theta[x_k(h_N)] - 1)^2 (v_{\delta_N})_k^2 + \mu_{\delta_N}^2 \leq \delta_N^2 + \mu_{\delta_N}^2 \implies \sum_{k=1}^{\bar{r}} (\theta[x_k(h_N)] - 1)^2 (v_{\delta_N})_k^2 \leq \delta_N^2.$$

Переходя в последнем неравенстве к пределу при $N \rightarrow \infty$, с учетом F4) получаем

$$\sum_{k=1}^{\bar{r}} (\theta[x_k(h_0)] - 1)^2 \bar{v}_k^2 = 0,$$

где $(\bar{v}_k)_{k=1}^m = U^T \bar{u}$. Отсюда следует, что найдется номер k , для которого $\theta[x_k(h_0)] = 1$, так как $\|\bar{u}\| = \|U^T \bar{u}\| \neq 0$. Но тогда по свойствам D), F1), F2) оказывается, что $x_k(h_0) = 1 \implies h_0 = 0$, т. е. $h_N \rightarrow 0$. Полученное противоречие доказывает теорему. $\square$

Теорема 2. *Приближенное решение СЛАУ $z_\delta = \tilde{A}_{h(\delta)}^+ u_\delta$ сходится к нормальному псевдорешению $\bar{z}$ при $\delta \rightarrow 0$.*

Доказательство. Из вида матриц $\tilde{A}_{h(\delta)}, \bar{A}$ следует $\left\| \tilde{A}_{h(\delta)} - \bar{A} \right\|^2 = \sum_{k=1}^{\bar{r}} \bar{\rho}_k^2 (x_k(h(\delta)) - 1)^2$,

при этом в силу свойства B) и доказанной сходимости $h(\delta) \rightarrow 0$ выполнено равенство $\lim_{\delta \rightarrow 0} x_k(h(\delta)) = x_k(0) = 1$. Поэтому $\tilde{A}_{h(\delta)} \rightarrow \bar{A}$. Применяя теперь следствие 2, с учетом (5) получим $\tilde{A}_{h(\delta)}^+ \rightarrow \bar{A}^+$ и $z_\delta = \tilde{A}_{h(\delta)}^+ u_\delta \rightarrow \bar{z} = \bar{A}^+ \bar{u}$. $\square$

Исследуем вопрос об улучшении числа обусловленности исходной матрицы $\bar{A}$ при переходе к матрице $\tilde{A}_{h(\delta)}$. Здесь мы будем рассматривать спектральные числа обусловленности $\nu_s(A) = \rho_1/\rho_r$, где r — ранг соответствующей матрицы A .

Теорема 3. Пусть $r(\delta)$ — ранг матрицы $\tilde{A}_{h(\delta)}$. Предположим, что $x_k(h) \sim 1 + a_k h$ при $h \rightarrow +0$ для каждого k , $1 \leq k \leq \bar{r}$, причем $a_1 < a_2 < \dots < a_{\bar{r}}$. Тогда при $\delta \rightarrow 0$ справедлива оценка $\nu_s(\tilde{A}_{h(\delta)}) \sim \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}}(1 - h(\delta)(a_{r(\delta)} - a_1)) < \nu_s(\bar{A})$.

Доказательство. Из вида сингулярных чисел матрицы $\tilde{A}_{h(\delta)}$ следует равенство $\nu_s(\tilde{A}_{h(\delta)}) = \frac{\bar{\rho}_1 x_1(h(\delta))}{\bar{\rho}_{r(\delta)} x_{r(\delta)}(h(\delta))}$, причем $r(\delta) \leq \bar{r}$. Отсюда с учетом условия теоремы и сходимости $h(\delta) \rightarrow 0$ получается цепочка соотношений

$$\begin{aligned} \nu_s(\tilde{A}_{h(\delta)}) &= \frac{\bar{\rho}_1 x_1(h(\delta))}{\bar{\rho}_{r(\delta)} x_{r(\delta)}(h(\delta))} \sim \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}} \frac{1 + a_1 h(\delta)}{1 + a_{r(\delta)} h(\delta)} \sim \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}} (1 + a_1 h(\delta))(1 - a_{r(\delta)} h(\delta)) \sim \\ &\sim \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}} (1 - h(\delta)(a_{r(\delta)} - a_1)) < \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}} \leq \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{\bar{r}}} = \nu_s(\bar{A}), \end{aligned}$$

доказывающая теорему. $\square$

Таким образом, число обусловленности матрицы предлагаемого метода лучше числа обусловленности исходной точной матрицы, по крайней мере для «достаточно малых» δ . Если в дополнение к условиям теоремы точная матрица имеет значительное число близких к нулю сингулярных чисел, как в примере 3, то может оказаться, что $\bar{\rho}_{r(\delta)} \gg \bar{\rho}_{\bar{r}}$, и тогда $\nu_s(\tilde{A}_{h(\delta)}) \ll \nu_s(\bar{A})$. Далее это будет проиллюстрировано.

4. КОНКРЕТНЫЙ МЕТОД, РЕАЛИЗУЮЩИЙ ПРЕДЛОЖЕННУЮ СХЕМУ РЕШЕНИЯ СЛАУ

Для простоты предположим, что сингулярные числа матрицы $\bar{A}$ простые: $\bar{\rho}_k > \bar{\rho}_{k+1}$, $k = 1, 2, \dots, M - 1$.

Как центральный пример, рассмотрим метод, использующий процедуру улучшения числа обусловленности с помощью минимальных псевдообратных матрицы или коротко, **метод МПМУ**. В этом методе

$$x_k(h) = \{\bar{x}_k(h), 0 \leq h \leq h_k; 0, h > h_k\}$$

для $1 \leq k \leq \bar{r}$, где $\bar{x}_k(h)$ — решение уравнения $\bar{x}_k^4 - \bar{x}_k^3 = h \bar{\rho}_k^{-4}$, $\bar{x}_k \in \left[1, \frac{3}{2}\right]$, а $h_k = \frac{27}{16} \bar{\rho}_k^4$.

Тогда

$$\theta[x_k(h)] = \left\{ \frac{1}{\bar{x}_k(h)}, 0 \leq h \leq h_k; 0, h > h_k \right\}.$$

Положим также $H > h_1 = \frac{27}{16} \bar{\rho}_1^4$. Непосредственно из определения следуют свойства функции $x_k(h)$: А) $1 \leq x_k(h) \leq \frac{3}{2}$; В) $x_k(0) = x_k(+0) = \bar{x}_k(0) = 1$; С) $x_k(h)$ непрерывна слева при $0 < h \leq H$. Справедливо также свойство D). Оно следует из возрастания функции $\bar{x}_k(h)$ при $h \in [0, h_k]$ (см. [10], [11]). Тогда $\theta[x_k(h)] = \frac{1}{\bar{x}_k(h)} > 0$ убывает при $h \in [0, h_k]$ и равна нулю при $h > h_k$. Анализируя асимптотику функций $x_k(h)$ при $h \rightarrow +0$, можно убедиться, что $x_k(h) \sim 1 + h \bar{\rho}_k^{-4}$. Это означает выполнение условия теоремы 3 с $a_k = \bar{\rho}_k^{-4}$, причем $a_k = \bar{\rho}_k^{-4} < \bar{\rho}_{k+1}^{-4} = a_{k+1}$ для всех допустимых k .

Таким образом, справедливы теоремы 2 и 3, гарантирующие сходимость метода и улучшение числа обусловленности. В некоторых случаях это число значительно отличается от

$\nu_s(\bar{A})$. Например, теоретически возможен случай $x_{r(\delta)}(h(\delta)) = x_{r(\delta)}(h_{r(\delta)}) = \frac{3}{2}$. Он реализуется, когда обобщенным решением уравнения $\beta_\delta^2(h) = \delta^2 + \mu_\delta^2$ является точка разрыва $h_{r(\delta)}$ функции $\beta_\delta(h)$. Тогда как в теореме 3

$$\nu_s(\tilde{A}_{h(\delta)}) = \frac{2}{3} \frac{\bar{\rho}_1 x_1(h(\delta))}{\bar{\rho}_{r(\delta)}} \sim \frac{2}{3} \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}} (1 - h(\delta)(\bar{\rho}_{r(\delta)}^{-4} - \bar{\rho}_k^{-4})) < \frac{2}{3} \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}} \leq \frac{2}{3} \nu_s(\bar{A}), \quad (8)$$

и в этом случае число обусловленности матрицы, используемой для решения СЛАУ, улучшается по меньшей мере в полтора раза. Сравним этот метод с некоторыми другими.

Метод TSVD. Здесь вместо $\bar{A}$ используется матрица $\tilde{A}_{r(\delta)} = U \tilde{R}_{r(\delta)} V^T$, в которой $\tilde{R}_{r(\delta)} = \text{diag} [\bar{\rho}_1, \bar{\rho}_2, \dots, \bar{\rho}_{r(\delta)}, 0, \dots, 0]$, а ее ранг $r(\delta)$ находится как решение уравнения $\beta_\delta^2(r) = \mu_\delta^2 + \delta^2$ с монотонно невозрастающей функцией $\beta_\delta^2(r) = \sum_{k=r+1}^m v_k^2$. Можно убедиться,

что $r(\delta) = r$ при «достаточно малых» δ . Таким образом, неравенство $\nu_s(\tilde{A}_{r(\delta)}) = \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}} \leq \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_r} = \nu_s(\bar{A})$ при малых δ становится равенством, и метод TSVD не дает улучшения числа обусловленности.

Варианты метода регуляризации. В методе регуляризации А.Н. Тихонова (МРТ) приближенное решение СЛАУ ищется в виде $z_\delta = (\alpha(\delta)I + \bar{A}^* \bar{A})^{-1} \bar{A}^* u_\delta$, где параметр $\alpha(\delta) > 0$ выбирается одним из известных методов (см., например, [7], [11], [15], [17]). Во всяком случае $\alpha(\delta) \rightarrow 0$ при $\delta \rightarrow 0$. С помощью сингулярного разложения матрицы $\bar{A}$ найдем, что $z_\delta = VT_\delta^{-1}U^T u_\delta$, где

$$T_\delta = \text{diag} \left[\frac{\alpha(\delta) + \bar{\rho}_1^2}{\bar{\rho}_1}, \frac{\alpha(\delta) + \bar{\rho}_2^2}{\bar{\rho}_2}, \dots, \frac{\alpha(\delta) + \bar{\rho}_r^2}{\bar{\rho}_r}, 0, \dots, 0 \right].$$

Тогда как при доказательстве теоремы 3 при $\alpha(\delta) \rightarrow 0$ получим

$$\begin{aligned} \nu_s(T_\delta) &= \frac{\bar{\rho}_r(\alpha(\delta) + \bar{\rho}_1^2)}{\bar{\rho}_1(\alpha(\delta) + \bar{\rho}_r^2)} = \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_r} \frac{(1 + \alpha(\delta)/\bar{\rho}_1^2)}{(1 + \alpha(\delta)/\bar{\rho}_r^2)} \sim \nu_s(\bar{A}) \left(1 + \frac{\alpha(\delta)}{\bar{\rho}_1^2}\right) \left(1 - \frac{\alpha(\delta)}{\bar{\rho}_r^2}\right) \sim \\ &\sim \nu_s(\bar{A}) \left(1 - \alpha(\delta) \left(\frac{1}{\bar{\rho}_r^2} - \frac{1}{\bar{\rho}_1^2}\right)\right) < \nu_s(\bar{A}), \end{aligned}$$

так как $\rho_1 > \rho_r$.

Аналогичные выкладки, проведенные для метода решения СЛАУ из работы [17]:

$$z_\delta = (\alpha(\delta)I + \bar{A}^T \bar{A})^{-1} \bar{A}^T \bar{A} \bar{A}^T (\alpha(\delta)I + \bar{A} \bar{A}^T)^{-1} u_\delta = VM_\delta^{-1}U^T,$$

дают похожую оценку

$$\nu_s(M_\delta) \sim \nu_s(\bar{A}) \left(1 - \alpha(\delta) \left(\frac{1}{\bar{\rho}_r^2} - \frac{1}{\bar{\rho}_1^2}\right)\right)^2 < \nu_s(\bar{A}).$$

Таким образом, эти варианты метода регуляризации теоретически обеспечивают улучшение числа обусловленности для матриц T_δ и M_δ , с помощью которых решаются СЛАУ, по сравнению с исходной матрицей $\bar{A}$. При этом, однако, эти матрицы имеют тот же ранг, что и $\bar{A}$, в то время как в методе с МПМ ранг $r(\delta)$ матрицы $\tilde{A}_{h(\delta)}$ может быть существенно меньше $\bar{r}$. Ниже это будет продемонстрировано в численном эксперименте. Как следствие, главные члены чисел обусловленности $\nu_s(T_\delta)$ и $\nu_s(M_\delta)$, выражающиеся членом $\frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_r}$, не могут

быть лучше главного члена числа обусловленности $\nu_s(\tilde{A}_{h(\delta)}) \sim \frac{\bar{\rho}_1}{\bar{\rho}_{r(\delta)}}$. Кроме того, для числа $\nu_s(\tilde{A}_{h(\delta)})$ может выполняться оценка (8), которая гарантирует уменьшение числа обусловленности в полтора раза. Эта возможность демонстрируется ниже.

5. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Проиллюстрируем основные особенности предлагаемой схемы решения СЛАУ на примере рассмотренного выше метода МПМУ. Будем решать модельную СЛАУ с плохо обусловленной матрицей $\bar{A}$ вида (4) и точным решением $\bar{z} = ((1 - x^2) \sin(4\pi x))$, $-1 \leq x \leq 1$. Точная правая часть этой СЛАУ вычисляется как $\bar{u} = \bar{A}\bar{z}$ и возмущается аддитивной помехой $a_\delta w$: $u_\delta = u + a_\delta w$. Здесь $w \in \mathbb{R}_c^m$ — вектор, сформированный с помощью датчика нормально распределенных псевдослучайных чисел с нулевым средним и единичной дисперсией, а $a_\delta = \delta \|u\|_2 / \|w\|_2$. Таким образом, для полученной приближенной правой части u_δ выполнено равенство $\|u_\delta - \bar{u}\|_2 = \delta \|\bar{u}\|_2$. Подобная схема возмущения данных часто применяется при исследовании методов решения некорректных задач (см., например, [15]). Введенное так число δ позволяет оценивать уровень ошибки в процентах. Далее, для решения этой СЛАУ с различными уровнями ошибки данных δ применяется метод МПМУ, а также для сравнения методы TSVD и MPT с выбором параметра регуляризации $\alpha(\delta)$ по принципу невязки [17].

В таблице приведены результаты расчетов: точности $\Delta = \frac{\|z_\delta - \bar{z}\|_2}{\|\bar{z}\|_2}$ получаемых приближенных решений z_δ и числа обусловленности $\nu_{MPM} = \nu_s(\tilde{A}_{h(\delta)})$, $\nu_{TSVD} = \nu_s(\tilde{A}_{r(\delta)})$, $\nu_{MRT} = \nu_s(T_\delta)$.

Таблица. Сравнение точностей решений и чисел обусловленности матриц методов МПМУ, TSVD и MPT

δ	0.005	0.01	0.05	0.1	0.2	0.3
Δ_{MPM}	0.0024	0.0043	0.0117	0.0154	0.0333	0.0406
Δ_{TSVD}	0.0027	0.0052	0.0131	0.0184	0.0346	0.0496
Δ_{MRT}	0.0082	0.0108	0.0269	0.0358	0.0495	0.0989
ν_{MPM}	20.972	20.971	10.353	10.353	10.353	5.6134
ν_{TSVD}	33.421	33.420	15.530	15.530	15.530	8.4172
ν_{MRT}	$2.3 \cdot 10^{12}$	$5.9 \cdot 10^{12}$	$3.3 \cdot 10^{13}$	$7.7 \cdot 10^{13}$	$2.6 \cdot 10^{14}$	$5.6 \cdot 10^{14}$

Из таблицы видно, что метод МПМУ имеет лучшую точность для всех рассмотренных уровней возмущения данных. Особо отметим высокую точность этого метода при больших возмущениях: $\delta = 0.1, 0.2, 0.3$. Таблица также наглядно показывает, насколько числа обусловленности матриц метода МПМУ меньше чисел обусловленности других методов и, особенно, числа обусловленности исходной матрицы СЛАУ $\nu_s \approx 3.37 \cdot 10^{19}$. Отметим также, что для метода из работы [17] результаты очень похожи на их аналоги из метода MPT и поэтому в таблицу не включены.

Расчеты показали также, что резкое уменьшение числа обусловленности в методе МПМУ (см. (8)) возникает достаточно часто. Например, при $\delta = 0.05$ оказалось, что $h(\delta)$ есть точка разрыва функции $\beta_\delta(h)$, поэтому для такого $h(\delta)$ выполнена оценка (8). «Эффекты» такого рода возникали и для других δ .

В заключение отметим, что подобные результаты получались также в численных экспериментах с другими СЛАУ, имеющими плохо обусловленные матрицы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бахвалов Н.С. *Численные методы* (Наука, М., 1973).
- [2] Калиткин Н.Н. *Численные методы* (Наука, М., 1978).
- [3] Голуб Дж., Ван Лоун Ч. *Матричные вычисления* (Мир, М., 1999).
- [4] Воеводин Вал.В. *Вычислительные основы линейной алгебры* (Наука, М., 1977).
- [5] Тыртышников Е.Е. *Методы численного анализа* (Издательский центр "Академия", М., 2007).
- [6] Лоусон Ч., Хенсон Р. *Численное решение задач метода наименьших квадратов* (Наука, М., 1986).
- [7] Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. *Методы решения некорректных задач* (Наука, М., 1979).
- [8] Varah J.M. *On the numerical solution of ill-conditioned linear systems with applications to ill-posed problems*, SIAM J. Num. Anal. **10**, 257–267 (1973).
- [9] Golub G.H. *Least squares, singular values and matrix approximation*, Appl. Math. **13** (1), 44–51 (1968).
- [10] Леонов А.С. *Метод минимальной псевдообратной матрицы*, Журн. вычисл. матем. и матем. физ. **27** (8), 1123–1138 (1987).
- [11] Тихонов А.Н., Леонов А.С., Ягола А.Г. *Нелинейные некорректные задачи*, 2-е изд. (Курс, М., 2017).
- [12] Леонов А.С. *Решение некорректно поставленных обратных задач: очерк теории, практические алгоритмы и демонстрации в МАТЛАБ*, 2-е изд. (Либроком, М., 2013).
- [13] Воеводин Вал.В., Кузнецов Ю.А. *Матрицы и вычисления* (Наука, М., 1984).
- [14] Беклемишев Д.В. *Дополнительные главы линейной алгебры* (Наука, М., 1983).
- [15] Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. *Численные методы решения некорректных задач* (Наука, М., 1990).
- [16] Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П. *Теория линейных некорректных задач и ее приложения* (Наука, М., 1978).
- [17] Морозов В.А. *Регулярные методы решения некорректно поставленных задач* (Наука, М., 1987).

Александр Сергеевич Леонов

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,

Каширское ш., д. 31, г. Москва, 115409, Россия,

e-mail: asleonov@mephi.ru

A.S. Leonov

Methods for solving ill-conditioned systems of linear algebraic equations that improve the conditionality

Abstract. The problem of solving systems of linear algebraic equations (SLAE) with an ill-conditioned or degenerate exact matrix and an approximate right-hand side is considered. A scheme for solving such a problem is proposed and justified, which makes it possible to improve the conditionality of the SLAE matrix. As a result, an approximate solution that is stable to perturbations of the right-hand side is obtained with a higher accuracy than when using some other methods. The scheme is implemented by an algorithm that uses minimal pseudoinverse matrices. The results of numerical experiments are presented, confirming the theoretical provisions of the article.

Keywords: ill-conditioned SLAE, minimal pseudoinverse matrix method.

Alexandr Sergeevich Leonov

National Research Nuclear University “MEPhI”,

31 Kashirskoe shosse, Moscow, 115409 Russia,

e-mail: asleonov@mephi.ru