

УДК 519.612, 517.968.21, 517.983.54

© *А. В. Чернов***О ЯВНОМ ВЫРАЖЕНИИ РЕШЕНИЯ РЕГУЛЯРИЗИРУЮЩЕЙ ПО ТИХОНОВУ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ЧЕРЕЗ ПАРАМЕТР РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В КОНЕЧНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ**

Как известно, при использовании метода регуляризации Тихонова для решения операторных уравнений I рода приходится минимизировать регуляризованный функционал невязки. Точка минимума определяется из так называемого уравнения Эйлера, которое в конечномерном случае, а также при его дискретизации, записывается как зависящая от параметра регуляризации система линейных алгебраических уравнений специального вида. При этом существуют различные способы выбора параметра регуляризации. В частности, в рамках принципа обобщенной невязки приходится решать соответствующее уравнение обобщенной невязки относительно параметра. А это (при его численном решении) предполагает, в свою очередь, многократное решение параметризованной системы линейных алгебраических уравнений. В данной статье получена явная простая и эффективная формула решения однопараметрической системы для произвольного значения параметра. Приводятся пример вычислений по указанной формуле, а также пример численного решения интегрального уравнения Фредгольма I рода при использовании этой формулы, подтверждающий ее эффективность.

Ключевые слова: метод регуляризации Тихонова, метод обобщенной невязки, однопараметрическая система линейных алгебраических уравнений, метод разложения.

DOI: 10.35634/2226-3594-2022-60-06

Введение

Как указано в [1], линейные дискретные некорректные задачи вида

$$Az = b, \quad (0.1)$$

то есть фактически системы линейных алгебраических уравнений с плохо обусловленной матрицей A , возникают в различных постановках, включая дискретизацию интегральных уравнений Фредгольма первого рода, задачи распознавания образов, алгоритмы машинного обучения и т. д. (там же см. соответствующую библиографию). Далее будем считать, что A — матрица размера $m \times n$, а столбец $b \in \mathbb{R}^m$. В рамках метода регуляризации Тихонова исходная задача (0.1) заменяется задачей минимизации

$$(\|Ax - b\|^2 + \lambda^2 \|Lx\|^2) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n},$$

где матрица L может выбираться различными способами и называется матрицей регуляризации. Классический способ $L = E$. Параметр $\alpha = \lambda^2 > 0$ называется параметром регуляризации. Решение указанной задачи оптимизации определяется как решение системы:

$$(A^*A + \lambda^2 L^*L)x = A^*b. \quad (0.2)$$

В свою очередь, см., например, [2, с. 345–347], система (0.2) имеет единственное решение, если $\text{rank} \begin{pmatrix} A \\ L \end{pmatrix} = n$, или, равносильно, если нуль-пространства матриц A и L пересекаются лишь тривиальным образом, то есть $N(A) \cap N(L) = \{0\}$. Ясно, что при наличии обратной

матрицы L^{-1} это условие будет выполнено. В соответствии с вышеизложенным, разработаны различные подходы к практическому решению некорректных задач вида (0.1). Сделаем краткий обзор на эту тему.

1. Метод QR-факторизации [2, с. 345–347]. Исходная задача заменяется на новую с матрицей $\begin{pmatrix} A \\ \lambda L \end{pmatrix}$ и правой частью $\begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}$, а к ней уже применяется метод QR-факторизации. Решение исходной системы сводится к решению некоторой системы с треугольной матрицей.

2. Итерационные методы. Для определения оптимального значения параметра регуляризации можно использовать различные методы, в частности, метод обобщенной невязки. В рамках этого метода приходится решать так называемое уравнение обобщенной невязки. Численное решение этого уравнения представляет собой итерационный процесс, в ходе которого систему (0.2) приходится решать многократно при различных значениях параметра. С другой стороны, систему (0.2) тоже можно решать итерационными методами. Отсюда возникает идея совместить эти два итерационных процесса в один. На этом пути получаются итерационные методы регуляризации, в которых текущий вектор z_k на очередной итерации может рассматриваться как регуляризованное решение с номером итерации k , играющим роль параметра регуляризации. Например, в [2, с. 709] для случая $L = E$ итерационный процесс описывается формулой [2, (4.5.67)]:

$$z_{k+1} = z_k + (A^*A + \lambda^2 E)^{-1} A^*(b - Az_k),$$

при фиксированном λ , $z_0 = 0$ и z_1 , взятом как стандартное регуляризованное решение Тихонова.

3. Методы бидиагонализации. Основная идея — свести решение исходной системы к решению системы с двухдиагональной матрицей, за счет некоторого разложения (в частности, GSVD-разложения) матриц. GSVD (generalized singular value decomposition) матричной пары $\{A, L\}$ — это факторизации вида

$$A = UFX^T, \quad L = VGX^T,$$

где $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ и $V \in \mathbb{R}^{p \times p}$ ортогональные, $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$ — невырожденная, а F, G — диагональные матрицы специального вида. В частности, в [2, 2.3.3, с. 263] описывается метод бидиагонализации Голуба–Кахана (Golub–Kahan bidiagonalization). Аналогичные методы, эффективные для матриц большой размерности, см. в [3–5].

4. Разработка упрощенных методов поиска параметра регуляризации, близкого к оптимальному. Как указано в [1], разработаны различные методы поиска: generalized cross-validation (GCV), L-curve, quasi-optimality, Stein’s unbiased risk estimate (SURE) и т. д. (там же см. соответствующую библиографию). Собственно в [1] предлагается еще один такой метод. В работе [6] задача поиска параметра регуляризации формулируется как многокритериальная задача оптимизации, при условии $m \geq n$. В [7, 8] предлагаются новые эвристические методы поиска параметра регуляризации и производится сравнение с другими эвристическими методами. См. также обзор [9]. В [10] предлагается метод построения нижней и верхней оценок оптимального значения параметра регуляризации, эффективный для решения задач большой размерности и родственной методу GCV. Его развитие см. в [11]. Другие подходы к выбору параметра регуляризации для задач большой размерности см. в [12].

5. Получение явной и простой формулы для выражения решения системы вида (0.2) непосредственно через параметр. Из всех существующих на данный момент работ, реализующих эту идею, автору удалось найти лишь работу [13]. Поскольку этот подход наиболее близок к тематике нашей статьи, остановимся на ней подробнее. Получены явные формулы [13, (2.7), (2.16)]. Их использование предполагает QR-факторизацию матрицы $\begin{pmatrix} A \\ L \end{pmatrix}$

(то есть представление в виде произведения QR , где Q — ортогональная матрица, R — верхняя треугольная матрица). Затем Q представляется в виде $\begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix}$, $Q_1: m \times n$, $Q_2: p \times n$, $R: n \times n$. И требуется еще получить SVD (singular value decomposition)-разложение (сингулярное разложение) матрицы Q_1 . Формула [13, (2.16)] — трехсоставная, в зависимости от характера значений сингулярных чисел матрицы Q_1 . На самом деле стыковка непрерывная, поэтому это неважно. Как указано в [13], вычисление QR-факторизации требует порядка $3\frac{1}{3}n^3$ flops¹; SVD — соответственно, от $12n^3$ до $22n^3$ flops. Однако в [13] предполагаются выполненными следующие ограничения: сингулярные числа матрицы Q_1 должны быть в пределах от 0 до 1 [13, (2.3)], а параметр $\lambda \in (0, 1)$ (см. замечание после [13, (2.8)]). Кроме того, предполагается, что точная система (0.1) совместна, замечание перед [13, (1.6)].

Мы в настоящей статье предлагаем алгоритм, более дешевый в вычислительном плане, поскольку QR-факторизация не требуется, требуется лишь сингулярное разложение, и к тому же, для квадратной матрицы порядка n , плюс разложение Холецкого для квадратной симметричной положительно определенной (во многих случаях, трехдиагональной) матрицы. И при этом не накладывается никаких специальных ограничений, совместность системы (0.1) не требуется, а формула имеет более простой вид.

Как видно из сказанного выше, см. также [14–18], при использовании метода регуляризации Тихонова в сочетании с принципом обобщенной невязки для решения некорректных задач возникает необходимость многократного (при различных значениях параметра) решения однопараметрической системы линейных алгебраических уравнений вида:

$$(M^*M + \alpha C)z = f, \quad (0.3)$$

где M — матрица размера $m \times n$, C — симметричная, положительно определенная матрица порядка n , $\alpha > 0$ — числовой параметр.

Рассмотрим, например, задачу решения системы линейных алгебраических уравнений с приближенно известными исходными данными:

$$A_\varepsilon z = u_\varepsilon,$$

где A_ε — известное приближение с точностью $\varepsilon > 0$ неизвестной матрицы A размера $m \times n$, u_ε — известное приближение с точностью ε неизвестного столбца правых частей $u \in \mathbb{R}^n$. В соответствии с принципом регуляризации Тихонова, в качестве приближенного решения точной системы принимается z_ε^α — точка минимума сглаживающего функционала невязки

$$M_\alpha^\varepsilon(z) = |A_\varepsilon z - u_\varepsilon|^2 + \alpha |z|^2$$

при том или ином специальном выборе параметра α . В частности, в рамках метода обобщенной невязки, значение α ищется как решение так называемого уравнения обобщенной невязки, в которое входит z_ε^α . При этом можно заметить, что

$$M_\alpha^\varepsilon(z) = (A_\varepsilon z, A_\varepsilon z) - 2(A_\varepsilon z, u_\varepsilon) + |u_\varepsilon|^2 + \alpha(Ez, z) = (Bz, z) - 2(v, z) + |u_\varepsilon|^2 + \alpha(Ez, z),$$

где $B = A_\varepsilon^* A_\varepsilon$, $v = A_\varepsilon^* u_\varepsilon$. Отсюда

$$\frac{1}{2} \nabla M_\alpha^\varepsilon(z) = (B + \alpha E)z - v.$$

¹ flops (а также: flop/s, флопс или флоп/с) — акроним от англ. Floating-point Operations Per Second — внесистемная единица, используемая для измерения производительности компьютеров, показывающая, сколько операций с плавающей запятой в секунду выполняет данная вычислительная система. В соответствии с русскоязычной терминологией, речь идет о количестве арифметических операций.

Таким образом, z_ε^α определяется как решение уравнения

$$(B + \alpha E)z = v$$

вида (0.3). И при численном решении уравнения обобщенной невязки указанное матричное уравнение приходится решать многократно при различных значениях параметра $\alpha > 0$. На самом деле уравнение вида (0.3) возникает также и при решении более сложных задач. В частности, например, при решении интегральных уравнений Фредгольма I рода — далее мы остановимся на этом подробнее.

При не слишком малых $\alpha > 0$ (например, $\alpha \geq 0.001$) для решения матричного уравнения (0.3) можно использовать стандартные методы или соответствующие процедуры математических пакетов, в частности, оператор «обратный слэш» в системе MATLAB. Но при малых $\alpha > 0$ матрица системы будет уже плохо обусловленной. Поэтому решение стандартными методами будет неаккуратным, и станет «блуждать» (не будет стремиться к нормальному решению). Практика вычислений показывает, что если, скажем, применять метод сопряженных градиентов для многократного решения системы (0.3) в процессе применения метода регуляризации Тихонова в сочетании с принципом обобщенной невязки при решении той или иной некорректной задачи, то получаются плохие результаты за счет быстрого накопления погрешности. Существенно улучшить результат можно, если каждый раз выбирать начальную точку в методе сопряженных градиентов случайным образом. Этот прием снимает систематическую погрешность при вычислении вектора решения системы (0.3). Тем не менее, результат все равно получается далекий от идеального. Поэтому возникает потребность в другом, более устойчивом методе для решения системы (0.3). В этом качестве, вообще говоря, можно использовать *метод квадратных корней*, см., например, [19, § 2.5, с. 72–74]. Вообще, при наличии специальных свойств матрицы системы применимы эффективные алгоритмы, основанные на том или ином специальном разложении матриц, входящих в систему (в частности, разложении Холецкого, сингулярном разложении и т. д.), см., например, [19, 20]. Так, при использовании метода квадратных корней в ходе вычислений наблюдается более высокая устойчивость численного решения, за счет чего результаты для исходной (некорректной) задачи получаются достаточно хорошими. При использовании оператора «обратный слэш» в системе MATLAB характер устойчивости и адекватности численного решения оказывается примерно таким же, но при большей скорости вычислений (хотя при малых значениях параметра α выдается предупреждение о плохой обусловленности матрицы). Однако, какие бы методы для решения систем линейных алгебраических уравнений общего вида здесь ни использовались, система (0.3) будет решаться каждый раз заново для очередного значения параметра α . Здесь возникает мысль каким-то образом получить единообразную и при этом простую формулу для решения системы (0.3), которая не требовала бы проведения сложных вычислений для каждого нового значения параметра α и обеспечивала бы точность и устойчивость численного решения при сколь угодно малых значениях этого параметра.

Что касается применения принципа регуляризации Тихонова для решения систем линейных алгебраических уравнений с приближенно известными исходными данными, необходимо отметить, что имеется ряд работ, посвященных разработке различных итерационных методов с организацией процедуры выбора параметра α на каждой итерации, обеспечивающей устойчивость и адекватность численного решения. При этом, разумеется, используется специальный характер матрицы левой части. Соответственно, построение подобных алгоритмов базируется на том или ином специальном разложении матриц, входящих в систему (в частности, разложении Холецкого, сингулярном разложении и т. д.), см., например, [21–23] (там же см. дальнейшую библиографию). Аналогичный подход допускает распространение даже на бесконечномерный случай [24].

Однако можно обойтись и классическим методом обобщенной невязки, если иметь явную формулу, выражающую решение соответствующей системы вида (0.3) непосредственно через параметр $\alpha > 0$. Такая формула обеспечила бы также и существенное ускорение процесса численного решения уравнения обобщенной невязки. Именно вывод такой формулы и является целью данной статьи.

В сообществе специалистов, занимающихся практическим решением обратных и некорректных задач, обычно используется следующий прием [25]. Поскольку C — симметричная положительно определенная матрица, то методом квадратного корня она преобразуется к виду $C = S^*S$, где S — треугольная невырожденная матрица, см. [19, § 2.6]. Следовательно, существует S^{-1} . В частности, если матрица C — трехдиагональная, матрица S будет двухдиагональной, что существенно упрощает вычисления. Представление $C = S^*S$ называется разложением Холецкого. Конечно, эта процедура требует времени, но ее надо проделать лишь один раз (а не при всех α). Сделаем замену: $y = Sz$, то есть $z = S^{-1}y$. В результате матричное уравнение (0.3) принимает вид:

$$(M^*M + \alpha C)S^{-1}y = f.$$

Домножая слева на $(S^{-1})^*$, получаем:

$$(D^*D + \alpha E)y = (S^{-1})^*f,$$

где $D = MS^{-1}$ — представляется в виде $D = QPR$ с ортогональными матрицами R , Q и правой двухдиагональной матрицей P .

Действительно, в [20, гл. 2, § 2, с. 117] описывается алгоритм, который позволяет для любой квадратной матрицы D построить ортогональные матрицы R и Q такие, что матрица $Q^*DR = P$ будет иметь двухдиагональный вид (это так называемый обобщенный алгоритм Ланцоша; его описание занимает три страницы). Отсюда и получаем: $D = QPR^*$.

Делая теперь замену $x = Ry$, то есть $y = R^{-1}x$, получаем:

$$(R^{-1}P^*PR + \alpha E)R^{-1}x = (S^{-1})^*f,$$

то есть

$$(P^*P + \alpha E)x = R(S^{-1})^*f.$$

Поскольку здесь P^*P — трехдиагональная матрица, последнее уравнение легко решается методом прогонки.

Мы далее, используя в определенном смысле похожие идеи, получаем явное (и достаточно простое) выражение решения матричного уравнения (0.3) через параметр α и некоторые вспомогательные матрицы, которые строятся заранее лишь один раз. Отсюда вытекает абсолютно устойчивый и при этом простой и эффективный метод многократного (при различных значениях параметра α) решения параметрической системы (0.3).

Выше было сказано, что система вида (0.3) возникает при использовании метода обобщенной невязки не только для решения некорректных систем линейных алгебраических уравнений, но и в более сложных случаях. Мы далее покажем практически, как возникает система вида (0.3) при использовании метода регуляризации Тихонова в сочетании с принципом обобщенной невязки для численного решения интегрального уравнения Фредгольма I рода. Примечательно, что матрица C здесь оказывается трехдиагональной. Кроме того, поскольку это представляет самостоятельный интерес, опишем пример численного решения интегрального уравнения Фредгольма I рода при использовании предлагаемой схемы для решения параметризованной системы вида (0.3). Применяя известный прием изложения «от простого к сложному», мы для удобства читателя, сначала опишем вывод уравнения вида (0.3) при использовании формулы прямоугольников для дискретизации интегралов, а потом просто укажем изменения при замене ее на формулу трапеций.

§ 1. Вывод исследуемой системы при численном решении интегрального уравнения Фредгольма I рода

Следуя [18, п. 2.3.5], рассмотрим интегральное уравнение Фредгольма I рода

$$A^0[z](x) = u^0(x), \quad x \in [c; d], \quad (1.1)$$

с точно заданным оператором интегрального вида

$$A^0[z](x) = \int_a^b K^0(x, s)z(s) ds, \quad x \in [c; d], \quad z \in Z,$$

и правой частью $u^0 \in U$. Будем предполагать, что ядро $K^0(x, s)$ — функция, непрерывная на прямоугольнике $\Pi = [c; d] \times [a; b]$; $Z = L_2[a; b]$, $U = L_2[c; d]$. Ясно, что $A^0: Z \rightarrow U$ — линейный ограниченный оператор (ЛОО); пространства Z и U гильбертовы.

Предположим теперь, что нам известна априорная информация о том, что уравнение (1.1) имеет единственное решение $z^0 \in V_2^1[a; b]$. Поскольку пространство $V_2^1[a; b]$ тоже является гильбертовым со скалярным произведением

$$(y, z) = \int_a^b \{y(x)z(x) + y'(x)z'(x)\} dx,$$

а A^0 действует из $V_2^1[a; b]$ в U как ЛОО, можем считать, что $Z = V_2^1[a; b]$.

Будем предполагать далее, что вместо точного уравнения (1.1) нам известно лишь его приближение:

$$A^h[z](x) = u^\delta(x), \quad x \in [c; d],$$

где

$$A^h[z](x) = \int_a^b K^h(x, s)z(s) ds, \quad x \in [c; d], \quad z \in Z,$$

$$\|K^h - K^0\|_{L_2(\Pi)} \leq h, \quad \|u^\delta - u^0\|_{L_2[c; d]} \leq \delta, \quad h \in [0; h_0], \quad \delta \in [0; \delta_0].$$

Будем считать, кроме того, что функция $u^\delta(x)$ является непрерывной. Поскольку всякую функцию из $L_2[a; b]$ можно сколь угодно точно в метрике этого пространства приблизить бесконечно дифференцируемой функцией, данное предположение не слишком ограничительно.

Можно использовать абстрактную теорему о сходимости метода регуляризации Тихонова с обобщенной невязкой. На этом пути нам понадобится выписать сглаживающий функционал невязки:

$$M_\eta^\alpha(z) = \|A^h z - u^\delta\|_{L_2[c; d]}^2 + \alpha \|z\|_{V_2^1[a; b]}^2 =$$

$$= \int_c^d dx \left\{ \int_a^b K^h(x, s)z(s) ds - u^\delta(x) \right\}^2 + \alpha \left[\int_a^b z^2(s) ds + \int_a^b (z'(s))^2 ds \right],$$

и найти точку минимума $z_\eta^\alpha \in Z$ этого функционала из условия равенства нулю его производной Фреше (то есть градиента). Соответствующее уравнение называется *уравнением Эйлера*. Однако для того, чтобы это уравнение можно было решить численно, его придется подвергнуть дискретизации. Но можно поступить и по-другому, как мы, собственно, дальше и собираемся сделать. А именно, рассмотрим конечномерную аппроксимацию $\overline{M}_\eta^\alpha(\overline{z})$ функционала $M_\eta^\alpha(z)$; $\overline{M}_\eta^\alpha(\overline{z})$ — это будет сильно выпуклая квадратичная функция конечного

числа переменных $\bar{z} = (z_1, \dots, z_n)^*$. Точка минимума такой функции существует, единственна и определяется из условия равенства нулю ее градиента, то есть всех частных производных первого порядка. В итоге получим некоторую систему ЛАУ с симметричной положительно определенной матрицей. Фактически, эту систему можно рассматривать как дискретизацию уравнения Эйлера. А ее уже можно решать численно.

Итак, выберем равномерные сетки:

$$c = x_1 < x_2 < \dots < x_m = d, \quad a = s_1 < s_2 < \dots < s_n = b,$$

где $x_i - x_{i-1} = h_x$, $i = \overline{2, m}$, $s_j - s_{j-1} = h_s$, $j = \overline{2, n}$, $h_x = \frac{d-c}{m-1}$, $h_s = \frac{b-a}{n-1}$.

Используя квадратурную формулу прямоугольников, а также конечно-разностное представление производной, получаем:

$$\overline{M}_\eta^\alpha(\bar{z}) = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n K_{ij}^h z_j h_s - u_i^\delta \right)^2 h_x + \alpha \left[\sum_{j=1}^n z_j^2 h_s + \sum_{j=2}^n \frac{(z_j - z_{j-1})^2}{h_s} \right], \quad (1.2)$$

$$\bar{z} = (z_1, \dots, z_n)^* \in \mathbb{R}^n, \quad K_{ij}^h = K^h(x_i, s_j), \quad u_i^\delta = u^\delta(x_i), \quad z_j = z(s_j),$$

$i = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, n}$. Здесь $\overline{M}_\eta^\alpha(\bar{z})$ — сильно выпуклая квадратичная функция. Точка минимума этой функции определяется как решение системы ЛАУ:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial z_i} \overline{M}_\eta^\alpha(\bar{z}) = 0, \quad i = \overline{1, n}. \right.$$

Переписывая эти уравнения подробнее, получаем:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z_1} \overline{M}_\eta^\alpha = 0, \quad \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z_j} \overline{M}_\eta^\alpha = 0, \quad j = \overline{2, n-1}, \quad \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z_n} \overline{M}_\eta^\alpha = 0,$$

или (первое и последнее уравнения выписываем отдельно, поскольку у компоненты z_1 нет «соседа слева», а у компоненты z_n нет «соседа справа», что важно с учетом разностного отношения)

$$\begin{aligned} h_x h_s^2 \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i=1}^m K_{ik}^h K_{i1}^h \right) z_k + \alpha h_s z_1 - \alpha \frac{z_2 - z_1}{h_s} - \sum_{i=1}^m K_{i1}^h u_i^\delta h_x h_s &= 0, \\ h_x h_s^2 \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i=1}^m K_{ik}^h K_{ij}^h \right) z_k + \alpha h_s z_j - \alpha \frac{z_{j-1} - 2z_j + z_{j+1}}{h_s} - \sum_{i=1}^m K_{ij}^h u_i^\delta h_x h_s &= 0, \\ j = \overline{2, n-1}, \\ h_x h_s^2 \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i=1}^m K_{ik}^h K_{in}^h \right) z_k + \alpha h_s z_n - \alpha \frac{z_{n-1} - z_n}{h_s} - \sum_{i=1}^m K_{in}^h u_i^\delta h_x h_s &= 0. \end{aligned}$$

Вводя обозначения

$$b_{jk} = h_x h_s \sum_{i=1}^m K_{ik}^h K_{ij}^h, \quad f_j = \sum_{i=1}^m K_{ij}^h u_i^\delta h_x, \quad u = (u_1^\delta, \dots, u_m^\delta)^*,$$

и определяя соответствующие матрицы

$$\begin{aligned} B = (b_{jk})_{j,k=\overline{1,n}} &= h_x h_s K^* K, \quad f = (f_1, \dots, f_n)^* = h_x K^* u, \\ K &= (K_{ij}^h)_{\substack{i=\overline{1,m} \\ j=\overline{1,n}}}, \end{aligned}$$

после деления каждого уравнения на h_s можем переписать полученную систему в компактной матричной форме:

$$(B + \alpha C)\bar{z} = f, \quad (1.3)$$

где $C = E + \frac{1}{h_s^2}C_1$,

$$C_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Здесь $C_1 \geq 0$ — квадратная симметричная трехдиагональная матрица, у которой на главной диагонали стоит вектор вида $(1, 2, \dots, 2, 1)$, на диагоналях выше и ниже нее — вектор вида $(-1, \dots, -1)$, на остальных позициях — нули. Поясним факт неотрицательной определенности. Если рассмотреть матрицу C_γ , которая отличается от C_1 тем, что элемент $(C_1)_{nn}$ заменяется на число $\gamma \geq 1$, то легко проверяется, что $\det C_\gamma = \gamma - 1$. Это означает, что все угловые миноры матрицы C_γ , кроме $\det C_\gamma$, равны 1. Поэтому, согласно критерию Сильвестра, $C_\gamma > 0$ для всех $\gamma > 1$. В таком случае, опять же по критерию Сильвестра и по непрерывности главных миноров матрицы C_γ , при $\gamma \rightarrow 1 + 0$ получаем: $C_1 \geq 0$. Заметим, что матрица B тоже является симметричной и неотрицательно определенной, так как

$$(K^*K)^* = K^*K, \quad (K^*K\xi, \xi) = (K\xi, K\xi) = |K\xi|^2 \geq 0 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n.$$

Таким образом, матрица $(B + \alpha C)$ симметрична и строго положительно определена для любого $\alpha > 0$. Поэтому для решения системы (1.3) можно использовать, например, метод сопряженных градиентов.

Решая систему (1.3), получаем $\bar{z}_\eta^\alpha \in \mathbb{R}^n$ — конечномерную аппроксимацию элемента $z_\eta^\alpha \in Z$. После этого находим параметр регуляризации $\alpha = \alpha^*(\eta)$ как решение конечномерного аналога уравнения обобщенной невязки. Уравнение обобщенной невязки в нашем случае имеет вид:

$$\rho_\eta(\alpha) = \|A^h z_\eta^\alpha - u^\delta\|_{L_2[c;d]}^2 - (\delta + h \|z_\eta^\alpha\|_{V_2^1[a;b]})^2 - \mu_\eta = 0,$$

где $\mu_\eta = \inf_{z \in Z} \|A^h z - u^\delta\|_{L_2[c;d]}^2$. Его конечномерный аналог имеет вид:

$$\bar{\rho}_\eta[\bar{z}_\eta^\alpha] = 0,$$

где $\bar{\rho}_\eta[z]$ обозначает выражение:

$$\sum_{i=1}^m \left[\sum_{j=1}^n K_{ij}^h z_j h_s - u_i^\delta \right]^2 h_x - \left[\delta + h \sqrt{\sum_{j=1}^n z_j^2 h_s + \sum_{j=2}^n \frac{(z_j - z_{j-1})^2}{h_s}} \right]^2 - \bar{\mu}_\eta,$$

$$\bar{\mu}_\eta = \lim_{\alpha \rightarrow +0} \sum_{i=1}^m \left[\sum_{j=1}^n K_{ij}^h (\bar{z}_\eta^\alpha)_j h_s - u_i^\delta \right]^2 h_x.$$

Наконец, в качестве приближенного решения уравнения (1.1) берем ломаную, определяемую вектором $\bar{z}_\eta^{\alpha^*(\eta)}$ на узлах сетки $\{s_j, j = \overline{1, n}\}$. Напомним, что здесь мы просто следовали [18, п. 2.3.5]. Далее мы произведем некоторые уточнения, а результаты этого уточнения проиллюстрируем на конкретном численном примере.

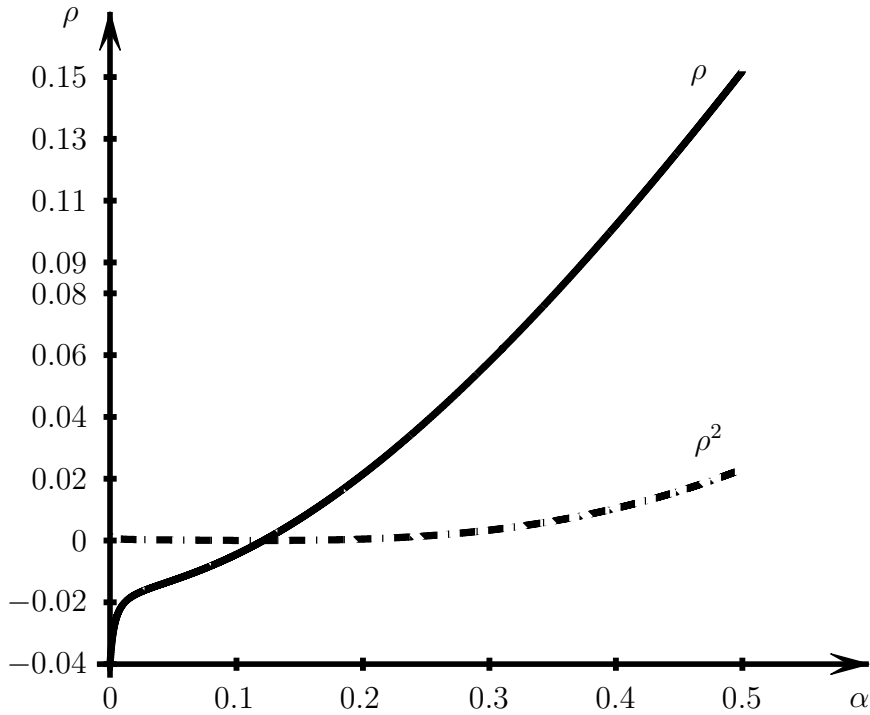


Рис. 1. Графики функций $\rho(\alpha)$, $\rho^2(\alpha)$

Исходные данные для численного эксперимента

Далее, говоря о результатах численного эксперимента, будем иметь в виду следующие исходные данные:

$$[a; b] = [c; d] = [-1; 1], \quad K^0(x, s) = \frac{1}{1 + (x - s)^2},$$

$$u^0(x) = 2 + (x^2 - 1) \{ \operatorname{arctg}(1 - x) + \operatorname{arctg}(1 + x) \} + x \ln \frac{1 + (1 - x)^2}{1 + (1 + x)^2}.$$

Точное решение: $z_0(x) = x^2$. При решении уравнения обобщенной невязки мы поступали следующим образом.

Как известно, функция $\rho(\alpha) = \rho_\eta(\alpha)$ является возрастающей. Например, для возмущенной параметром ε системы линейных алгебраических уравнений вида $A^h z = u^\delta$ при $h = \varepsilon$, $\delta = \varepsilon^2$, $\eta = (h, \delta)$,

$$A^h = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}, \quad u^\delta = \begin{pmatrix} 2 \\ \varepsilon^2 \end{pmatrix},$$

функция обобщенной невязки $\rho(\alpha) = \rho_\eta(\alpha)$ при $\varepsilon = 0.1$ имеет график, изображенный на рис. 1 (соответствующий корень уравнения обобщенной невязки $\alpha = \alpha^*(\eta) = 0.12132$, а соответствующий вектор, принимаемый как приближение к нормальному решению $z_\eta^\alpha = (0.97419, 0.90762)$; при $\varepsilon \rightarrow 0$ будет $\alpha^*(\eta) \rightarrow 0$, $z_\eta^\alpha \rightarrow (1, 1)$). Отсюда понятно, что квадрат $\rho^2(\alpha)$ есть унимодальная функция, причем уравнение обобщенной невязки равносильно уравнению

$$\rho^2(\alpha) = 0.$$

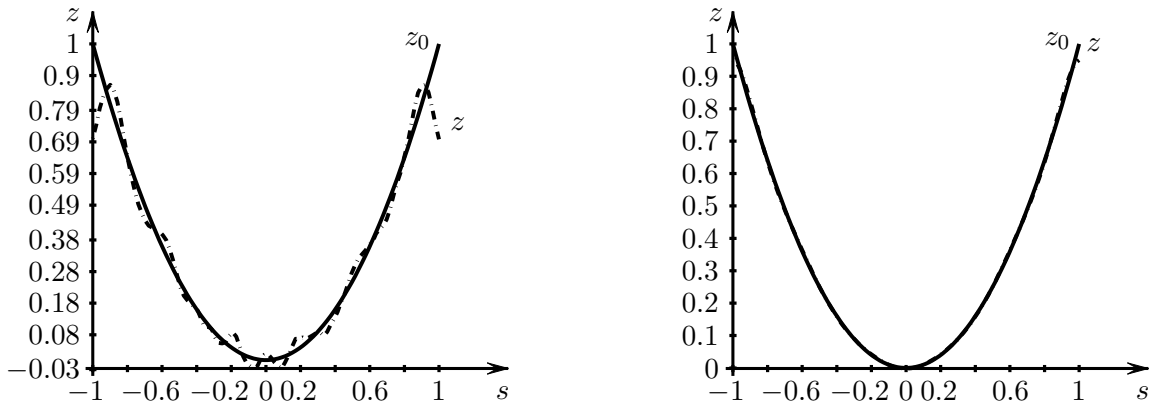


Рис. 2. Исходная формула (слева) и уточненная формула (справа)

Поэтому решение уравнения обобщенной невязки можно найти как точку минимума функции $\rho^2(\alpha)$. А для этого можно использовать методы минимизации унимодальных функций. Мы использовали метод золотого сечения. При этом как раз и происходит многократное решение системы (1.3) при различных значениях параметра α .

Уточнение формулы конечной аппроксимации

Аппроксимация сглаживающего функционала невязки по формуле (1.2) на самом деле дает не очень хорошие результаты — см. рис. 2, слева. Связано это с тем, что крайние промежутки слева и справа должны учитываться отдельно, поскольку по смыслу аппроксимации играют роль «полупространств» и при этом общее количество промежутков у нас равно $(m - 1)$ — оно не соответствует количеству слагаемых в сумме, аппроксимирующей интеграл по отрезку $[c; d]$. Аналогичное замечание можно сделать и относительно аппроксимации интеграла по отрезку $[a; b]$. В [26, гл. 9, § 28, формула (9.9), с. 130] приводится уточненное представление аппроксимации функционала невязки. Сравнивая это представление с формулой (1.2), видим, что в первом и последнем слагаемом в соответствующих суммах нужно добавить множитель $\frac{1}{2}$. В результате приходим к следующей уточненной (модифицированной) формуле:

$$\overline{M}_\eta^\alpha(\bar{z}) = \sum_{i=1}^m \gamma_i \left[\sum_{j=1}^n \beta_j K_{ij}^h z_j h_s - u_i^\delta \right]^2 h_x + \alpha \left[\sum_{j=1}^n \beta_j z_j^2 h_s + \sum_{j=2}^n \frac{(z_j - z_{j-1})^2}{h_s} \right],$$

где

$$\gamma_1 = \gamma_m = \frac{1}{2}, \quad \beta_1 = \beta_n = \frac{1}{2}, \quad \gamma_i = 1, \quad i = \overline{2, m-1}, \quad \beta_j = 1, \quad j = \overline{2, n-1}.$$

То же самое можно переписать в виде:

$$\overline{M}_\eta^\alpha(\bar{z}) = \sum_{i=1}^m \left[\sum_{j=1}^n \tilde{K}_{ij} z_j h_s - \tilde{u}_i \right]^2 h_x + \alpha \left[\sum_{j=1}^n \beta_j z_j^2 h_s + \sum_{j=2}^n \frac{(z_j - z_{j-1})^2}{h_s} \right], \quad (1.4)$$

где $\tilde{K}_{ij} = \sqrt{\gamma_i} \beta_j K_{ij}^h$, $\tilde{u}_i = \sqrt{\gamma_i} u_i^\delta$. Здесь матрица $\tilde{K} = \left(\tilde{K}_{ij}^h \right)_{\substack{i=\overline{1, m} \\ j=\overline{1, n}}}$ отличается от матрицы K тем, что первая и последняя строка матрицы K умножается на $\frac{1}{\sqrt{2}}$, а первый

и последний столбец матрицы K умножается на $\frac{1}{2}$. Столбец \tilde{u} отличается от столбца u^δ тем, что первый и последний элемент умножается на $\frac{1}{\sqrt{2}}$. Отсюда нетрудно понять, что приходим опять к тому же уравнению (1.3), в котором

$$B = h_x h_s \tilde{K}^* \tilde{K}, \quad f = h_x \tilde{K}^* \tilde{u}, \quad C = \frac{1}{h_s^2} C_1 + \tilde{E},$$

где матрица \tilde{E} отличается от единичной матрицы E тем, что первый и последний элементы на главной диагонали умножаются на $\frac{1}{2}$.

Таким образом, если написана программа, использующая формулу (1.2), то ее нетрудно модифицировать под уточненную формулу (1.4). Использование уточненной формулы аппроксимации при решении интегрального уравнения Фредгольма I рода позволяет существенно улучшить результат — см. рис. 2, справа. Заметим, что система (1.3) представляется в виде (0.3).

§ 2. Описание предлагаемого метода решения исследуемой системы

Представим подход, который позволяет, проведя (один раз!) предварительную работу по преобразованию системы (0.3), сделать процесс ее численного решения в ходе многократного варьирования параметра α быстрым и устойчивым. Этот подход основан на следующем утверждении.

Теорема 2.1. Пусть для матрицы C имеется разложение Холецкого: $C = S^* S$; и кроме того, приняты обозначения: $D = M S^{-1}$, $G = D^* D$. Предположим, что для матрицы G найдено сингулярное разложение: $G = U R U^*$; $R = \text{diag } r$ (здесь r — вектор собственных чисел матрицы G). Тогда решение системы (0.3) можно найти по формулам:

$$x_i = \frac{v_i}{r_i + \alpha}, \quad i = \overline{1, n}; \quad v = U^* (S^{-1})^* f = Q^* f; \quad z = Q x, \quad Q = S^{-1} U. \quad (2.1)$$

Доказательство. Методом квадратных корней матрица C представляется в виде: $C = S^* S$, где S — верхняя треугольная матрица.

Сделаем замену:

$$y = S z \quad \Rightarrow \quad z = S^{-1} y.$$

Тогда система (0.3) принимает вид:

$$(M^* M + \alpha C) S^{-1} y = f.$$

Домножая полученную систему слева на матрицу $(S^{-1})^*$, получаем:

$$[(M S^{-1})^* (M S^{-1}) + \alpha (S^{-1})^* S^*] y = (S^{-1})^* f.$$

Здесь $(S^{-1})^* S^* = (S S^{-1})^* = E^* = E$. Поэтому, обозначая $D = M S^{-1}$, имеем:

$$(D^* D + \alpha E) y = (S^{-1})^* f.$$

Как известно, с помощью классического алгоритма, см., например, [27, § 1.11], симметричную вещественную матрицу $G = D^* D$ можно привести к диагональному виду. А именно, можно построить ортогональную матрицу U из собственных векторов оператора G такую, что

$$U^* G U = R,$$

где R — диагональная матрица, на главной диагонали которой расположены собственные числа r_1, \dots, r_n оператора G , с учетом их кратности. Поскольку матрица G симметрична, все собственные числа вещественны. А так как матрица G неотрицательно определена, то они еще и неотрицательны: $r_j \geq 0, j = \overline{1, n}$. Поскольку матрица U ортогональна ($U^{-1} = U^*$), то же самое можно записать в виде:

$$G = URU^*.$$

Заметим, что представление вида

$$G = URV^*,$$

где U, V — ортогональные матрицы, R — диагональная матрица, называется *сингулярным разложением матрицы*, см., например, [20, гл. 1, § 1].

Пусть $R = (r_{ij})_{i,j=\overline{1,n}}$; $r_{ii} = r_i \geq 0, i = \overline{1, n}$; $r_{ij} = 0, i \neq j$. Сделаем замену: $y = Ux$. Тогда система относительно y переписывается в виде системы относительно x :

$$(GU + \alpha U)x = (S^{-1})^* f.$$

Домножая эту систему на матрицу U^* слева, получаем:

$$(U^*GU + \alpha U^*U)x = U^*(S^{-1})^* f,$$

то есть

$$(R + \alpha E)x = v,$$

где $v = U^*(S^{-1})^* f$. Решение такой системы очевидно:

$$x_i = \frac{v_i}{r_i + \alpha}, \quad i = \overline{1, n}.$$

При этом решение исходной системы получаем по формуле:

$$z = S^{-1}y = S^{-1}Ux \Rightarrow z = Qx, \quad Q = S^{-1}U.$$

Теорема доказана. □

З а м е ч а н и е 1. В системе MATLAB матрицу S из разложения Холецкого матрицы C можно получить, выполнив команду:

```
>> S=chol(C);
```

имеется в виду: «получить разложение Холецкого матрицы C ».

З а м е ч а н и е 2. В системе MATLAB сингулярное разложение матрицы G можно получить, выполнив команду:

```
>> [U,R,V]=svd(G);
```

В таблице 1 приводится сравнение различных методов, используемых для решения системы вида (0.3) в процессе решения интегрального уравнения Фредгольма I рода в рамках численного эксперимента, описанного выше. Имеются в виду следующие методы:

- 1) метод сопряженных градиентов;
- 2) метод квадратных корней;
- 3) решение средствами системы MATLAB (оператор «обратный слэш»);

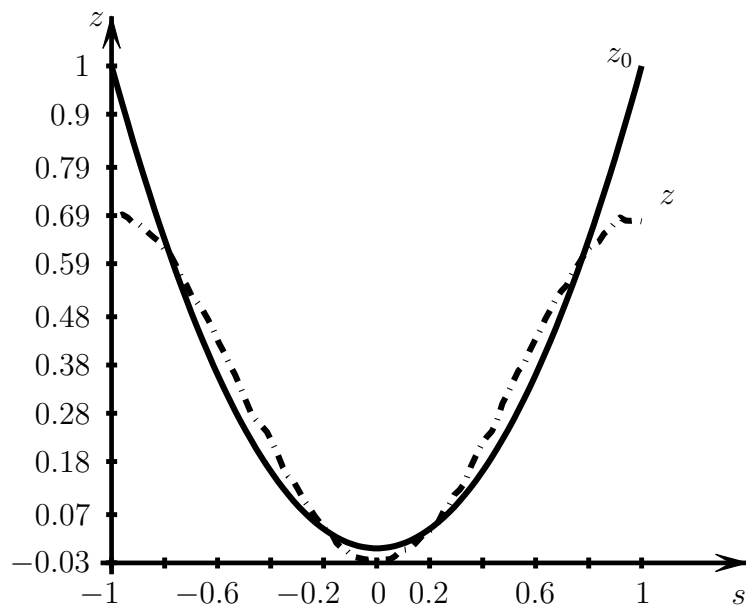


Рис. 3. Использование метода сопряженных градиентов

Таблица 1. Результаты численных экспериментов

Метод	Время счета, сек.	α	ρ
1	1.6066	0.00018543	3.8493E-005
2	0.83255	9.5262E-012	1.395E-019
3	0.10914	9.4686E-012	-6.304E-020
4	0.039207	1.1081E-011	4.1508E-023

4) предлагаемый метод.

Из этой таблицы видно, что предлагаемый подход оказывается существенно лучше как по времени счета, так и по точности решения. Отметим, кроме того, следующие факты. По методу 1: результат см. на рис. 3. По методу 4: результат см. на рис. 2, справа. По методам 2 и 3 результат визуально почти такой же, как для метода 4. Но оба они тратят существенно больше времени. Кроме того, при использовании метода 3 система MATLAB выдает следующее предостережение:

Warning: Matrix is close to singular or badly scaled.
Results may be inaccurate. RCOND = 2.612762e-020.

Следует понимать также, что использование оператора MATLAB для решения системы линейных алгебраических уравнений — это все равно, что использование черного ящика: мы не знаем, какие методы и как именно там реализуются, и в какой именно степени следует доверять полученному решению. Наконец, при использовании формулы (2.1), то есть метода 4, численное решение оказывается более устойчивым, чем в остальных случаях.

§3. Пример

Решить систему (0.3) с помощью формул (2.1), если:

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & -2\sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 5 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 5 \\ 10 \\ -20 \end{pmatrix}, \quad \alpha = 1.$$

Решение. Разложение Холецкого:

$$C = S^*S, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Действительно,

$$S^*S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 5 \end{pmatrix}.$$

Найдем S^{-1} :

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 1 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right),$$

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad D = MS^{-1}, \quad G = D^*D,$$

$$D = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & -2\sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix};$$

$$G = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 5 & 3 & 0 \\ 3 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 18 \end{pmatrix}.$$

Найдем собственные числа и нормированные собственные векторы матрицы G :

$$G - \lambda E = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 5 - 2\lambda & 3 & 0 \\ 3 & 5 - 2\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 18 - 2\lambda \end{pmatrix}.$$

Характеристическое уравнение:

$$\det(G - \lambda E) = 0 \Leftrightarrow (9 - \lambda)[(5 - 2\lambda)^2 - 9] = 0$$

имеет корни:

$$\lambda_1 = 9, \quad \lambda_2 = 4, \quad \lambda_3 = 1.$$

Собственному числу $\lambda_1 = 9$ соответствует система для собственного вектора:

$$\begin{cases} -13x_1 + 3x_2 = 0, \\ 3x_1 - 13x_2 = 0, \\ 0 = 0. \end{cases}$$

Нормированным собственным вектором можем взять: $q_1 = (0, 0, 1)^*$.

Собственному числу $\lambda_2 = 4$ соответствует система для собственного вектора:

$$\begin{cases} -3x_1 + 3x_2 = 0, \\ 3x_1 - 3x_2 = 0, \\ 10x_3 = 0. \end{cases}$$

Нормированным собственным вектором можем взять: $q_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)^*$.

Собственному числу $\lambda_3 = 1$ соответствует система для собственного вектора:

$$\begin{cases} 3x_1 + 3x_2 = 0, \\ 3x_1 + 3x_2 = 0, \\ 16x_3 = 0. \end{cases}$$

Нормированным собственным вектором можем взять: $q_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1, 0)^*$.

Из нормированных собственных векторов составляем ортогональную матрицу

$$U = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Вообще говоря, можно написать сразу: $R = \text{diag } r$, $r = (9, 4, 1)$. Но на всякий случай проверим:

$$\begin{aligned} R = U^*GU &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3 & 0 \\ 3 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 18 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 18 \\ 4\sqrt{2} & 4\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \text{diag } r. \end{aligned}$$

Для $Q = S^{-1}U$ имеем:

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & \sqrt{2} \\ 2 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Соответственно,

$$v = Q^* f = \begin{pmatrix} -2 & 2 & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \sqrt{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 \\ 10 \\ -20 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -10 \\ 5\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

По формулам (2.1) получаем:

$$x_1 = \frac{v_1}{r_1 + \alpha} = \frac{-10}{9 + 1} = -1, \quad x_2 = \frac{v_2}{r_2 + \alpha} = \frac{5\sqrt{2}}{4 + 1} = \sqrt{2}, \quad x_3 = \frac{v_3}{r_3 + \alpha} = \frac{0}{1 + 1} = 0;$$

$$z = Qx = \begin{pmatrix} -2 & 0 & \sqrt{2} \\ 2 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Проверка. Для $B = M^*M$, $A = B + \alpha C$ имеем:

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & -2\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 2\sqrt{2} & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & -2\sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} & 4 & -3 \\ 4 & 8 & -8 \\ -3 & -8 & 19 \end{pmatrix},$$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} & 4 & -3 \\ 4 & 8 & -8 \\ -3 & -8 & 19 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{2} & 5 & -3 \\ 5 & 10 & -10 \\ -3 & -10 & 24 \end{pmatrix},$$

$$Az = \begin{pmatrix} \frac{7}{2} & 5 & -3 \\ 5 & 10 & -10 \\ -3 & -10 & 24 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 10 \\ -20 \end{pmatrix} = f.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Levin E., Meltzer A. Y. Estimation of the regularization parameter in linear discrete ill-posed problems using the Picard parameter // *SIAM Journal on Scientific Computing*. 2017. Vol. 39. Issue 6. P. A2741–A2762. <https://doi.org/10.1137/17M1123195>
2. Björck Å. *Numerical methods in matrix computations*. Cham: Springer, 2015. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-05089-8>
3. Reichel L., Yu X. Matrix decompositions for Tikhonov regularization // *Electronic Transactions on Numerical Analysis*. 2015. Vol. 43. P. 223–243. <https://www.emis.de/journals/ETNA/vol.43.2014-2015/pp223-243.dir/pp223-243.pdf>
4. Dykes L., Noschese S., Reichel L. Rescaling the GSVD with application to ill-posed problems // *Numerical Algorithms*. 2015. Vol. 68. Issue 3. P. 531–545. <https://doi.org/10.1007/s11075-014-9859-3>
5. Onunwor E., Reichel L. On the computation of a truncated SVD of a large linear discrete ill-posed problem // *Numerical Algorithms*. 2017. Vol. 75. Issue 2. P. 359–380. <https://doi.org/10.1007/s11075-016-0259-8>
6. Zare H., Hajarian M. Determination of regularization parameter via solving a multi-objective optimization problem // *Applied Numerical Mathematics*. 2020. Vol. 156. P. 542–554. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2020.05.021>

7. Hochstenbach M. E., Reichel L., Rodriguez G. Regularization parameter determination for discrete ill-posed problems // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2015. Vol. 273. P. 132–149. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2014.06.004>
8. Park Y., Reichel L., Rodriguez G., Yu X. Parameter determination for Tikhonov regularization problems in general form // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2018. Vol. 343. P. 12–25. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2018.04.049>
9. Bauer F., Lukas M. A. Comparing parameter choice methods for regularization of ill-posed problems // *Mathematics and Computers in Simulation*. 2011. Vol. 81. Issue 9. P. 1795–1841. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2011.01.016>
10. Fenu C., Reichel L., Rodriguez G. GCV for Tikhonov regularization via global Golub–Kahan decomposition // *Numerical Linear Algebra with Applications*. 2016. Vol. 23. Issue 3. P. 467–484. <https://doi.org/10.1002/nla.2034>
11. Fenu C., Reichel L., Rodriguez G., Sadok H. GCV for Tikhonov regularization by partial SVD // *BIT Numerical Mathematics*. 2017. Vol. 57. Issue 4. P. 1019–1039. <https://doi.org/10.1007/s10543-017-0662-0>
12. Reichel L., Rodriguez G. Old and new parameter choice rules for discrete ill-posed problems // *Numerical Algorithms*. 2013. Vol. 63. Issue 1. P. 65–87. <https://doi.org/10.1007/s11075-012-9612-8>
13. Dykes L., Reichel L. Simplified GSVD computations for the solution of linear discrete ill-posed problems // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2014. Vol. 255. P. 15–27. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2013.04.019>
14. Гласко В. Б. Обратные задачи математической физики. М.: МГУ, 1984. <https://zbmath.org/?q=an:0542.35002>
15. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984. <https://zbmath.org/?q=an:0537.65024>
16. Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. <https://zbmath.org/?q=an:0712.65042>
17. Петров Ю. П., Сизиков В. С. Корректные, некорректные и промежуточные задачи с приложениями. СПб.: Политехник, 2003.
18. Сумин М. И. Некорректные задачи и методы их решения. Нижний Новгород: ННГУ, 2009.
19. Вержбицкий В. М. Основы численных методов. М.: Высшая школа, 2002.
20. Годунов С. К., Антонов А. Г., Кирилук О. П., Костин В. И. Гарантированная точность решения систем линейных уравнений в евклидовых пространствах. Новосибирск: Наука, 1998.
21. Surnin Yu. V. Decomposition and regularization of the solution of ill-conditioned inverse problems in processing of measurement information. Part 1. A theoretical evaluation of the method // *Measurement Techniques*. 2018. Vol. 61. Issue 3. P. 223–231. <https://doi.org/10.1007/s11018-018-1413-6>
22. Zhdanov A. I. Implicit iterative schemes based on singular decomposition and regularizing algorithms // *Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Физико-математические науки»*. 2018. Т. 22. № 3. С. 549–556. <https://doi.org/10.14498/vsgtu1592>
23. Buccini A., Pasha M., Reichel L. Generalized singular value decomposition with iterated Tikhonov regularization // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2020. Vol. 373. P. 112276. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.05.024>
24. Bianchi D., Donatelli M. On generalized iterated Tikhonov regularization with operator-dependent seminorms // *Electronic Transactions on Numerical Analysis*. 2017. Vol. 47. P. 73–99. https://doi.org/10.1553/etna_vol47s73
25. Ватульян А. О., Явруян О. В. Методические указания к практическим заданиям по с/к «Обратные задачи механики» для студентов мех.-мат. ф-та. Ростов-на-Дону: РГУ, 2005.
26. Васильева А. Б., Тихонов Н. А. Интегральные уравнения. М.: Физматлит, 2002. <https://zbmath.org/?q=an:1017.45001>
27. Чернов А. В. Линейная алгебра и функциональный анализ: основы теории и примеры решения задач. Нижний Новгород: НГТУ, 2010.

Поступила в редакцию 28.09.2022

Принята в печать 20.10.2022

Чернов Андрей Владимирович, к. ф.-м. н., доцент, кафедра прикладной математики, Нижегородский государственный университет, 603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23;
Нижегородский государственный технический университет, 603950, Россия, г. Нижний Новгород, ул. Минина, 24;

ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-1464-8249>

E-mail: chavnn@mail.ru

Цитирование: А. В. Чернов. О явном выражении решения регуляризирующей по Тихонову задачи оптимизации через параметр регуляризации в конечномерном случае // Известия Института математики и информатики Удмуртского государственного университета. 2022. Т. 60. С. 90–110.

On explicit expression of the solution to the regularizing by Tikhonov optimization problem in terms of the regularization parameter in the finite-dimensional case

Keywords: Tikhonov regularization method, generalized residual method, one-parametric system of linear algebraic equations, decomposition method.

MSC2020: 45B05, 65F05, 65F22, 65J20, 65J22, 65R30, 65R32

DOI: 10.35634/2226-3594-2022-60-06

It is well known that using the Tikhonov regularization method for solving operator equations of the first kind one has to minimize a regularized residual functional. The minimizer is determined from so called Euler equation which in finite-dimensional case and at its discretization is written as a one-parametric (depending on the regularization parameter) system of linear algebraic equations of special form. Here, there exist various ways of choosing the regularization parameter. In particular, in the frame of principle of generalized residual, it is necessary to solve the corresponding equation of generalized residual with respect to the regularization parameter. And it implies (when solving this equation numerically), in turn, multifold solving a one-parametric system of linear algebraic equations for arbitrary value of the parameter. In this paper we obtain an explicit simple and effective formula of solution to a one-parametric system for an arbitrary value of the parameter. We give an example of computations by above-mentioned formula and also an example of numerical solution of the Fredholm integral equation of the first kind under usage of this formula which substantiates its effectiveness.

REFERENCES

1. Levin E., Meltzer A. Y. Estimation of the regularization parameter in linear discrete ill-posed problems using the Picard parameter, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2017, vol. 39, issue 6, pp. A2741–A2762. <https://doi.org/10.1137/17M1123195>
2. Björck Å. *Numerical methods in matrix computations*, Cham: Springer, 2015. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-05089-8>
3. Reichel L., Yu X. Matrix decompositions for Tikhonov regularization, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 2015, vol. 43, pp. 223–243. <https://www.emis.de/journals/ETNA/vol.43.2014-2015/pp223-243.dir/pp223-243.pdf>
4. Dykes L., Noschese S., Reichel L. Rescaling the GSVD with application to ill-posed problems, *Numerical Algorithms*, 2015, vol. 68, issue 3, pp. 531–545. <https://doi.org/10.1007/s11075-014-9859-3>
5. Onunwor E., Reichel L. On the computation of a truncated SVD of a large linear discrete ill-posed problem, *Numerical Algorithms*, 2017, vol. 75, issue 2, pp. 359–380. <https://doi.org/10.1007/s11075-016-0259-8>
6. Zare H., Hajarian M. Determination of regularization parameter via solving a multi-objective optimization problem, *Applied Numerical Mathematics*, 2020, vol. 156, pp. 542–554. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2020.05.021>
7. Hochstenbach M. E., Reichel L., Rodriguez G. Regularization parameter determination for discrete ill-posed problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2015, vol. 273, pp. 132–149. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2014.06.004>
8. Park Y., Reichel L., Rodriguez G., Yu X. Parameter determination for Tikhonov regularization problems in general form, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2018, vol. 343, pp. 12–25. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2018.04.049>
9. Bauer F., Lukas M. A. Comparing parameter choice methods for regularization of ill-posed problems, *Mathematics and Computers in Simulation*, 2011, vol. 81, issue 9, pp. 1795–1841. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2011.01.016>

10. Fenu C., Reichel L., Rodriguez G. GCV for Tikhonov regularization via global Golub–Kahan decomposition, *Numerical Linear Algebra with Applications*, 2016, vol. 23, issue 3, pp. 467–484. <https://doi.org/10.1002/nla.2034>
11. Fenu C., Reichel L., Rodriguez G., Sadok H. GCV for Tikhonov regularization by partial SVD, *BIT Numerical Mathematics*, 2017, vol. 57, issue 4, pp. 1019–1039. <https://doi.org/10.1007/s10543-017-0662-0>
12. Reichel L., Rodriguez G. Old and new parameter choice rules for discrete ill-posed problems, *Numerical Algorithms*, 2013, vol. 63, issue 1, pp. 65–87. <https://doi.org/10.1007/s11075-012-9612-8>
13. Dykes L., Reichel L. Simplified GSVD computations for the solution of linear discrete ill-posed problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2014, vol. 255, pp. 15–27. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2013.04.019>
14. Glasko V.B. *Inverse problems of mathematical physics*, New York: American Institute of Physics, 1988. <https://zbmath.org/?q=an:0685.35001>
15. Voevodin V.V., Kuznetsov Yu. A. *Matritsy i vychisleniya* (Matrices and computations), Moscow: Nauka, 1984. <https://zbmath.org/?q=an:0537.65024>
16. Tikhonov A. N., Goncharky A. V., Stepanov V. V., Yagola A. G. *Numerical methods for the solution of ill-posed problems*, Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995. <https://zbmath.org/?q=an:0831.65059>
17. Petrov Yu. P., Sizikov V.S. *Well-posed, ill-posed, and intermediate problems with applications*, Utrecht: VSP, 2005. <https://zbmath.org/?q=an:1099.35159>
18. Sumin M. I. *Nekorrektnye zadachi i metody ikh resheniya* (Incorrect problems and methods of solving them), Nizhny Novgorod: Nizhny Novgorod State University, 2009.
19. Verzhbitskii V.M. *Osnovy chislennykh metodov* (Elements of numerical methods), Moscow: Vysshaya Shkola, 2002.
20. Godunov S. K., Antonov A. G., Kirilyuk O. P., Kostin V. I. *Guaranteed accuracy in numerical linear algebra*, Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1993. <https://zbmath.org/?q=an:0793.65014>
21. Surnin Yu. V. Decomposition and regularization of the solution of ill-conditioned inverse problems in processing of measurement information. Part 1. A theoretical evaluation of the method, *Measurement Techniques*, 2018, vol. 61, issue 3, pp. 223–231. <https://doi.org/10.1007/s11018-018-1413-6>
22. Zhdanov A. I. Implicit iterative schemes based on singular decomposition and regularizing algorithms, *Vestnik Samarskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2018, vol. 22, no. 3, pp. 549–556. <https://doi.org/10.14498/vsgtu1592>
23. Buccini A., Pasha M., Reichel L. Generalized singular value decomposition with iterated Tikhonov regularization, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2020, vol. 373, 112276. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.05.024>
24. Bianchi D., Donatelli M. On generalized iterated Tikhonov regularization with operator-dependent seminorms, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 2017, vol. 47, pp. 73–99. https://doi.org/10.1553/etna_vol47s73
25. Vatul'yan A. O., Yavruyan O. V. *Metodicheskie ukazaniya k prakticheskim zadaniyam po spetsial'nomu kursu "Obratnye zadachi mekhaniki" dlya studentov mekhaniko-matematicheskogo fakul'teta* (Methodical instructions for practical tasks on the special course "Inverse problems of mechanics" for students of mechanical-mathematical faculty), Rostov-on-Don: Rostov State University, 2005.
26. Vasil'eva A. B., Tikhonov N. A. *Integral'nye uravneniya* (Integral equations), Moscow: Fizmatlit, 2002. <https://zbmath.org/?q=an:1017.45001>
27. Chernov A. V. *Lineinaya algebra i funktsional'nyi analiz: osnovy teorii i primery resheniya zadach* (Linear algebra and functional analysis: theory foundations and examples of solving problems), Nizhny Novgorod: Nizhny Novgorod State Technical University, 2010.

Received 28.09.2022

Accepted 20.10.2022

Andrei Vladimirovich Chernov, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Department of Applied Mathematics, Nizhny Novgorod State University, pr. Gagarina, 23, Nizhny Novgorod, 603950,

Russia;

Nizhny Novgorod State Technical University, ul. Minina, 24, Nizhny Novgorod, 603950, Russia.

ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-1464-8249>

E-mail: chavnn@mail.ru

Citation: A. V. Chernov. On explicit expression of the solution to the regularizing by Tikhonov optimization problem in terms of the regularization parameter in the finite-dimensional case, *Izvestiya Instituta Matematiki i Informatiki Udmurtskogo Gosudarstvennogo Universiteta*, 2022, vol. 60, pp. 90–110.