УДК 519.6

МЕТОД L-КРИВОЙ ВСЕГДА ДАЕТ НЕУСТРАНИМУЮ СИСТЕМАТИЧЕСКУЮ ОШИБКУ

А. С. Леонов*), А. Г. Ягола

(кафедра математики)

Показано, что выбор параметра регуляризации в методе Тихонова по «способу L-кривой» порождает неустранимую систематическую ошибку при решении любой системы линейных алгебраических уравнений.

1. При обработке и анализе результатов многих физических экспериментов возникает необходимость решения вырожденных или плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданной расширенной матрицей. Типичная постановка задачи имеет следующий вид. Пусть точная система линейных алгебраических уравнений представлена в матричной форме

$$\overline{A}z = \overline{u}, \quad z \in \mathbf{R}^n, \quad \overline{u} \in \mathbf{R}^m, \tag{1}$$

где матрица системы $\overline{A}$ действительна и имеет размер $m \times n$, $\overline{A} \neq 0$, и считается, что $\overline{A}^T\overline{u} \neq 0$. Тогда система (1) имеет единственное нормальное псевдорешение $z \neq 0$, которое и подлежит отысканию. Для этого в нашем распоряжении вместо неизвестных точных данных $(\overline{A}, \overline{u})$ задачи имеются их приближенные реализации (A_h, u_δ) и оценки погрешностей h и δ этих приближений такие, что $\|\overline{A} - A_h\| \leqslant h$, $\|\overline{u} - u_\sigma\| \leqslant \delta$. Нормы в $\mathbf{R}^n$, $\mathbf{R}^m$ считаются евклидовыми, а матричная норма — спектральной. Требуется, используя данные $(A_h, u_\delta, h, \delta)$, построить устойчивое приближение $z_\eta \in \mathbf{R}^n$, $\eta = (h, \delta)$, к нормальному псевдорешению системы (1): $\|z_\eta - \overline{z}\| \to 0$ при $\eta \to 0$.

Хорошо известен подход к решению такой задачи, основанный на методе регуляризации Тихонова [1]. В тихоновской схеме находится семейство элементов

$$z^\alpha = (\alpha E + A_h^T A_h)^{-1} A_h^T u_\delta, \tag{2}$$

зависящее от параметра регуляризации $\alpha > 0$. Этот параметр выбирается специальным образом по приближенным данным задачи: $\alpha = \alpha_\eta = \alpha(\eta, A_h, u_\delta)$, и в качестве искомого приближения к $\overline{z}$ принимается элемент $z_\eta = z^{\alpha_\eta}$. Тогда при надлежащем выборе α_η оказывается, что $\|z_\eta - \overline{z}\| \to 0$ при $\eta \to 0$. Способы выбора параметра регуляризации хорошо исследованы [2, 3].

2. В работах [4–6] был предложен новый «эвристический» способ выбора, названный методом L-кривой. Он заключается в следующем. Вводятся хорошо известные в теории регуляризации (см. [1–3]) вспомогательные функции

$$\beta(\alpha) = \|A_h z^\alpha - u_\delta\|^2, \quad \gamma(\alpha) = \|z^\alpha\|^2$$

и с их помощью определяется так называемая L-кривая, которая в одном из вариантов метода задается параметрически на плоскости (β, γ) так:

$$L = \{(\beta(\alpha), \gamma(\alpha)): \quad \alpha > 0\}.$$

В качестве искомого параметра регуляризации выбирается точка максимальной кривизны $\alpha = \alpha_L(A_h, u_\delta)$ этой L-кривой. Таким образом, α_L явно не зависит от погрешностей $\eta = (h, \delta)$ данных задачи. Ряд численных экспериментов (см. [5, 6]) дал основание автору метода L-кривой заявить, что им создан устойчивый метод решения некорректных задач линейной алгебры, который не использует оценок погрешностей данных задачи. Поэтому, по его мнению, этот метод можно использовать в условиях, когда величины h и δ неизвестны или оценены очень грубо.

В работе [7] метод L-кривой был подвергнут анализу. Там показано, что создание устойчивого метода решения *некорректной* (неустойчивой) задачи без знания величин h и δ невозможно. Там же приведен простейший пример корректной задачи (одно уравнение с одним неизвестным), для которой метод L-кривой при любых погрешностях h и δ данных не дает устойчивого приближения к точному решению. На самом деле, как будет показано ниже, дело обстоит гораздо хуже. А именно: оказывается, что рассматриваемый вариант метода L-кривой *всегда* (т.е. для любой системы (1), неважно, корректной или нет) дает неустранимую систематическую ошибку. Это значит, что получаемые с его помощью «приближенные» решения в принципе не могут сходиться к искомому точному решению $\overline{z}$ задачи (1) при $h, \delta \to 0$. Сколь бы точные данные задачи (1) мы ни использовали, метод L-кривой дает такое «приближение» z^{α_L}, которое отличается от $\overline{z}$ не менее чем на фиксированную величину $\Delta_{\text{sist}} > 0$. Последняя не зависит от h, δ и определяется лишь точными данными $(\overline{A}, \overline{u})$ задачи (1). Все это ставит под сомнение пригодность метода L-кривой для решения каких-либо систем типа (1).

3. Перейдем к обоснованию сказанного. Введем сингулярные разложения [8] матриц $\overline{A}$ и A_h : $\overline{A} = URV^T$, $A_h = U_h R_h V_h^T$. Здесь U, V, U_h, V_h — ортогональные матрицы; $\dim U = \dim U_h = m \times m$,

*) МИФИ.

$\dim V = \dim V_h = n \times n$; $R = \operatorname{diag}(\rho_1, \ldots, \rho_M)$, $R_h = \operatorname{diag}(\rho_1(h), \ldots, \rho_M(h))$ — прямоугольные диагональные матрицы размера $m \times n$, содержащие сингулярные числа $\rho_1 \geqslant \ldots \geqslant \rho_M \geqslant 0$, $\rho_1(h) \geqslant \ldots \geqslant \rho_M(h) \geqslant 0$ матриц $\overline{A}$ и A_h соответственно; $M \equiv \min(m,n)$. Известны следующие факты.

Лемма 1 (см. [3]). *Справедливы равенства*

$$z^\alpha = V_h(\alpha E + R_h^T R_h)^{-1} R_h^T U_h^T u_\delta,$$

$$\gamma(\alpha) = \|z^\alpha\|^2 = \|(\alpha E + R_h^T R_h)^{-1} R_h^T \nu(\eta)\|^2 = \sum_{i=1}^{M} \frac{\rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)}{[\alpha + \rho_i^2(h)]^2},$$

где $\nu(\eta) = (\nu_1(\eta), \ldots, \nu_m(\eta))^T = U_h^T u_\delta$.

Отметим также выполнение при $h, \delta \to 0$ соотношений

$$\|A_h\| = \rho_1(h) \to \rho_1 = \|\overline{A}\|,$$

$$\left\|A_h^T u_\delta\right\|^2 = \sum_{i=1}^{M} \rho_1^2(h)\nu_i^2(\eta) \to \left\|\overline{A}^T \overline{u}\right\|^2 \neq 0.$$

Лемма 2 (см. [2, 3]). *Для любого* $\alpha > 0$ *справедливо равенство* $\gamma(\alpha) = [\alpha\gamma(\alpha) + \beta(\alpha)]'$, *и потому* $\beta'(\alpha) = -\alpha\gamma'(\alpha)$.

Из леммы 2 легко найти, что

$$\frac{d\gamma}{d\beta} = -\frac{1}{\alpha}, \qquad \frac{d^2\gamma}{d\beta^2} = -\frac{1}{\alpha^3\gamma'(\alpha)}.$$

Это в свою очередь позволяет вычислить кривизну $k(\alpha)$ для L-кривой как функцию параметра $\alpha > 0$:

$$k(\alpha) = \left|\frac{d^2\gamma}{d\beta^2}\right| \cdot \left[1 + \left(\frac{d\gamma}{d\beta}\right)^2\right]^{3/2} = 1 \Big/ \left[|\gamma'(\alpha)| \left(1+\alpha^2\right)^{3/2}\right] \equiv 1/w(\alpha).$$

Поэтому вычисление точки максимальной кривизны L-кривой соответствует нахождению глобального минимума функции $w(\alpha)$ при $\alpha \to 0$. Из леммы 1 получим явное выражение для $w(\alpha)$ и ее производной:

$$w(\alpha) = 2\left(1+\alpha^2\right)^{3/2} \sum_{i=1}^{M} \frac{\rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)}{[\alpha + \rho_i^2(h)]^3},$$

$$w'(\alpha) = 6\left(1+\alpha^2\right)^{1/2} \left\{\alpha \sum_{i=1}^{M} \frac{\rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)}{[\alpha + \rho_i^2(h)]^3} - \left(1+\alpha^2\right) \sum_{i=1}^{M} \frac{\rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)}{[\alpha + \rho_i^2(h)]^4}\right\}. \tag{3}$$

Отсюда следует

Теорема 1. *Функция* $w(\alpha)$ *достигает своего глобального минимума в некоторой точке* α_L, *лежащей на отрезке* $[\alpha_{\min}(\eta), \alpha_{\max}(\eta)]$, *где* $\alpha_{\min}(\eta) = \rho_1(h) = \|A_h\|^{-2}$, $\alpha_{\max}(\eta) = 2\max\{\|A_h\|^2/x_0, \|A_h^T u_\delta\|^2/\|A_h A_h^T u_\delta\|^2\}$, *число* x_0 *— положительный корень уравнения* $1 - 3,5x = (1+x)^{-4}$.

Доказательство. Из (3) с учетом неравенства $\rho_1(h) \geqslant \rho_i(h)$ получим

$$w'(\alpha) \leqslant 6(1+\alpha^2)^{1/2} \sum_{i=1}^{M} \frac{\rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)}{[\alpha + \rho_i^2(h)]^3} \times \left(\alpha - \frac{(1+\alpha)^2}{\alpha + \rho_1^2(h)}\right).$$

Поэтому $w'(\alpha) \leqslant 0$ при $0 < \alpha < \alpha_{\min}(\eta) = \rho_1^{-2}(h)$. Далее, пусть $\alpha > \alpha_{\max}(\eta)$. Введем величины $x_i = \rho_i^2(h)/\alpha$. Для них выполнены неравенства $x_i < \rho_1^2(h)/\alpha_{\max}(\eta) = \|A_h\|^2/\alpha_{\max}(\eta) \leqslant x_0/2$ и, как следствие, оценки: $1/(1+x_i)^3 > 1 - 3x$, $1/(1+x_i)^4 < 1 - 3,5x_i$. Поэтому из (3) при $\alpha > \alpha_{\max}(\eta)$ получим неравенство

$$w'(\alpha) > \frac{1}{\alpha^2}\left\{\sum_{i=1}^{M} \frac{\rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)}{[1+x_i]^3} - \frac{1+\alpha^2}{\alpha^2} \sum_{i=1}^{M} \frac{\rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)}{[1+x_i]^4}\right\} >$$

$$> \alpha^{-2}\left\{\sum_i \rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)(1-3x_i) - (1+\alpha^{-2})\sum_i \rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)(1-3,5x_i)\right\} >$$

$$> \alpha^{-4}\left\{\frac{\alpha}{2}\sum_i \rho_i^4(h)\nu_i^2(\eta) - \sum_i \rho_i^2(h)\nu_i^2(\eta)\right\} =$$

$$= 0,5\,\alpha^{-4}\left(\alpha\left\|A_h A_h^T u_\delta\right\|^2 - 2\left\|A_h^T u_\delta\right\|^2\right) > 0.$$

Таким образом, дробно-рациональная функция $w'(\alpha)$ имеет на отрезке $[\alpha_{\min}(\eta), \alpha_{\max}(\eta)]$ конечное число нулей, и по крайней мере один из них реализует глобальный минимум функции $w(\alpha)$.

Теорема 1 гарантирует существование параметра α_L, выбираемого по методу L-кривой. Однако главное следствие этой теоремы выглядит так.

Следствие. Справедливы соотношения

$$\alpha_{\min} \leqslant \varliminf_{\eta\to 0} \alpha_L(\eta) \leqslant \varlimsup_{\eta\to 0} \alpha_L(\eta) \leqslant \alpha_{\max},$$

где $\alpha_{\min} = \rho_1^{-2} = \|\overline{A}\|^{-2}$, $\alpha_{\max} = 2\max\{\|\overline{A}\|^2/x_0, \|\overline{A}^T\overline{u}\|^2 / \|\overline{A}\,\overline{A}^T\overline{u}\|^2\}$.

Тем самым параметр регуляризации, выбираемый по способу L-кривой, не может сходиться к нулю при $h, \delta \to 0$. Это нарушает известное необходимое условие (см. [9]) сходимости тихоновского регуляризующего алгоритма. Более того, справедлива

Теорема 2. *Пусть* $\alpha_L = \alpha_L(\eta)$ *— какая-либо точка, реализующая максимум кривизны* L*-кривой для данных* (A_h, u_δ). *Тогда*

$$\Delta_{\text{sist}} \equiv \varliminf_{\eta\to 0} \frac{\|z^{\alpha_L(\eta)} - \overline{z}\|}{\|\overline{z}\|} \geqslant \frac{\alpha_{\min}}{\alpha_{\min} + \|\overline{A}\|^2} = \frac{1}{1+\|\overline{A}\|^4} \equiv \varepsilon,$$

т.е. метод L*-кривой имеет относительную систематическую ошибку, не меньшую, чем указанное число* $\varepsilon > 0$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Из следствия теоремы 1 ясно, что ограниченное множество $\{\alpha_L(\eta)\}$ имеет по крайней мере одну предельную точку при $\eta \to 0$. Это значит, что для некоторой последовательности $\{\eta_N\} \to 0$ соответствующая последовательность параметров регуляризации $\{\alpha_N\} = \{\alpha_L(\eta_N)\}$ сходится к некоторому пределу $\widetilde{\alpha}$, $\widetilde{\alpha} \geqslant \alpha_{\min}$. Тогда из равенства (2) с $\alpha = \alpha_N$ при помощи стандартной техники доказательства (см. [3, с. 222; 8, с. 192]) можно получить сходимость

$$z^{\alpha_N} \xrightarrow{R^n} \widetilde{z} = \left(\widetilde{\alpha}E + \overline{A}^T\overline{A}\right)^{-1}\overline{A}^T\overline{u} = \\ = V\left(\widetilde{\alpha}E + R^TR\right)^{-1}R^TRV^T\overline{z}.$$

Поэтому

$$\lim_{N\to\infty}\|z^{\alpha_N} - \overline{z}\|^2 = \|\widetilde{z} - \overline{z}\|^2 = \\ = \left\|V\left[\left(\widetilde{\alpha}E + R^TR\right)^{-1}R^TR - E\right]V^T\overline{z}\right\|^2 \geqslant \\ \geqslant \widetilde{\alpha}^2\left\|\left(\widetilde{\alpha}E + R^TR\right)^{-1}V^T\overline{z}\right\|^2 \geqslant \\ \geqslant \frac{\widetilde{\alpha}^2}{\left(\widetilde{\alpha} + \rho_1^2\right)^2}\left\|V^T\overline{z}\right\|^2 \geqslant \frac{\alpha_{\min}^2}{\left(\alpha_{\min} + \rho_1^2\right)^2}\|\overline{z}\|^2.$$

Аналогичное соотношение справедливо и для любой другой сходящейся последовательности $\{\alpha_L(\eta_N)\}$, выбранной из семейства $\{\alpha_L(\eta)\}$, $\eta \to 0$. Это и доказывает теорему.

4. В заключение рассмотрим пример, иллюстрирующий результат теоремы 2. Пусть $\overline{A} = \mathrm{diag}(1,0)$, $A_h = \mathrm{diag}(1,h)$ $(0 < h < 1)$ и $\overline{u} = u_\delta = (1,1)^T$. Тогда, как легко вычислить, $\overline{z} = (1,0)^T$. Для данного примера можно найти, что

$$w(\alpha) = 2\left(1+\alpha^2\right)^{3/2}\left\{\frac{1}{(1+\alpha)^3} + \frac{h^2}{(\alpha+h^2)^3}\right\},$$

$$\|z^\alpha - \overline{z}\|^2 = \frac{\alpha^2}{(1+\alpha)^2} + \frac{h^2}{\left(\alpha+h^2\right)^2}.$$

Используя функцию $w(\alpha)$, как в теореме 1, для нахождения параметра регуляризации $\alpha_L(h)$ по методу L-кривой, получим, что $\alpha_L(h) \to \widetilde{\alpha} = 1$ при $h \to 0$. Тогда $\Delta_{\mathrm{sist}} = \widetilde{\alpha}^2 \Big/ (1+\widetilde{\alpha})^2 = 0,5$. Итак, в данном примере метод L-кривой дает неустранимую систематическую ошибку в 50%. Этот пример показывает, что оценка систематической ошибки снизу, данная в теореме 2, неулучшаема.

Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований за финансовую поддержку (грант 95-01-00486).

Литература

1. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М., 1979.
2. *Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г.* Численные методы решения некорректных задач. М., 1990.
3. *Тихонов А.Н., Леонов А.С., Ягола А.Г.* Нелинейные некорректные задачи. М., 1995.
4. *Hansen P.C.* // Inverse Problems. 1992. **8**. P. 849.
5. *Hansen P.C., O'Leary D.P.* // Report UMIACS-TR-91-142. Dept. of Comput. Science, Univ. of Maryland, 1991.
6. *Hansen P.C.* // SIAM Rev. 1992. **34**, No.4. P. 561.
7. *Леонов А.С., Ягола А.Г.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1995. №4. С. 28 (Moscow University Phys. Bull. 1995. No. 4. P. 25).
8. *Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А.* Матрицы и вычисления. М., 1984.
9. *Бакушинский А.Б., Гончарский А.В.* Некорректные задачи. Численные методы и приложения. М., 1989.

Поступила в редакцию
19.03.97