

УДК 519.6

Регуляризация решения системы линейных алгебраических уравнений методом максимального правдоподобия

В.С. Антюфеев

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук,
просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

E-mail: ant@osmf.sccc.ru

Антюфеев В.С. Регуляризация решения системы линейных алгебраических уравнений методом максимального правдоподобия // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд.-ние. — Новосибирск, 2013. — Т. 16, № 3. — С. 217–228.

В статье предложен метод регуляризации, позволяющий получить неотрицательное псевдорешение системы линейных алгебраических уравнений. Доказана теорема существования наилучшего допустимого решения. Рассматриваются геометрическая интерпретация этого псевдорешения, его свойства, некоторые естественные обобщения метода.

Ключевые слова: система линейных уравнений, положительная регуляризация, вероятностное распределение, стохастический ансамбль.

Antyufeev V.S. Finding the most probable non-negative solution of systems of linear algebraic equations by the likelihood method // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2013. — Vol. 16, № 3. — P. 217–228.

A probabilistic method for regularization is proposed. This method enables one to obtain a non-negative solution to systems of linear algebraic equations. A theorem of existence of the best possible solution is proved. A numerical example of the method application is given.

Key words: system of linear equations, non-negative regularization, probability distribution, stochastic ensemble.

1. Введение

Решение обратных задач естествознания часто приводит к решению некоторой системы линейных алгебраических уравнений:

$$Ax = b. \quad (1)$$

В естественных приложениях обычно компоненты b_i вектора b в правой части этой системы являются измеренными величинами, поэтому содержат ошибки. Эти ошибки приводят к ошибкам в определении компонент искомого вектора x . Если число обусловленности $\text{cond}(A)$ матрицы A системы сравнительно велико, то даже небольшие относительные ошибки вектора правой части системы могут привести к довольно большим относительным ошибкам вектора решения x .

Ошибки вектора решения x могут иметь различный характер. Точнее говоря, оценка значимости этих ошибок существенно зависит от поставленной задачи естествознания. “Значимые” ошибки приводят к недопустимым решениям, т. е. к таким решениям

системы (1), которые нельзя считать удовлетворительным решением поставленной естественной задачи. В связи с этим, чтобы устранить (хотя бы частично) нежелательные эффекты влияния ошибки правой части на форму решения, применяют различные методы регуляризации решения.

Регуляризация позволяет заменить недопустимый вектор решения на некоторый допустимый вектор (на “псевдорешение”), который является наилучшим для рассматриваемой задачи.

Рассмотрим примеры общепринятых методов регуляризации, затем оценим их пригодность для решения задач специального вида.

Исходная задача, например, может состоять в том, чтобы найти некоторую гладкую функцию $f(t)$ одной переменной. Этой неизвестной функции с непрерывно меняющимся аргументом t сопоставляют сеточную функцию. Значениями функции f в узлах t_i сетки являются числа x_i — компоненты искомого вектора x :

$$x_i = f(t_i).$$

Здесь количество неизвестных в соответствующей системе линейных алгебраических уравнений равно количеству узлов соответствующей сеточной функции. Поэтому можно построить график сеточной функции.

Характер этого графика (гладкость, промежутки монотонности и т. д.) должен быть типичным для искомой функции f , т. е. соответствовать исходной задаче естествознания. Однако ошибки измеренного вектора правой части приводят к значимым ошибкам в решении. В результате таких ошибок график сеточной функции получается нефизичным, т. е. имеет форму, нехарактерную для исходной задачи естествознания. Дефект решения может заключаться в том, что решение или его производные оказываются разрывными, немонотонными и т. д.

Для устранения таких дефектов решения удобно использовать сглаживающую регуляризацию Тихонова–Филлипса [1–3]. Не останавливаясь на деталях (см. [3]), отметим, что с конструктивной точки зрения эту регуляризацию можно свести к следующим формулам. Вместо исходной системы (1) с плохо обусловленной матрицей A решают другую систему линейных уравнений с новой матрицей $A^*A + \alpha\Omega$, а именно, систему следующего вида:

$$(A^*A + \alpha\Omega)x = A^*b. \quad (2)$$

Здесь Ω — специальная положительно определенная симметричная матрица, соответствующая так называемому функционалу регуляризации, а величина α — параметр регуляризации.

Как сказано выше, регуляризованное решение является в некотором смысле наилучшим в некотором множестве векторов, а именно, оно минимизирует некоторый функционал (см. [3]).

Одна из существенных трудностей использования регуляризации Тихонова–Филлипса состоит в том, что вычислитель должен уметь удачно выбирать величину параметра α . С одной стороны, увеличение параметра α приводит к положительным эффектам: регуляризованное решение становится более гладким, а число обусловленности матрицы $A^*A + \alpha\Omega$ может быть существенно уменьшено по сравнению с числом $\text{cond}(A)$. Однако приходится принимать во внимание, что система (2) отличается от исходной (истинной) системы (1). Поэтому одновременно с увеличением параметра α регуляризованное решение x_α системы (2) удаляется от истинного решения x исходной системы уравнений (1). Разумеется, этот эффект следует считать отрицательным. Строгих правил, регулирующих правильный выбор параметра α , нет. Трудности с выбором регуляризующего функ-

ционала и соответствующей матрицы Ω носят технический характер и обычно не являются серьезными.

Остановимся на другом методе регуляризации. Идея метода статистической регуляризации, предложенная Турчиным [4–6], существенно отличается от идеи сглаживающей регуляризации и основана на вероятностных соображениях. Она направлена на поиск наиболее вероятного решения в заданном статистическом ансамбле функций (или соответствующих им векторов).

Компоненты x_i искомого вектора $x = (x_1, \dots, x_n)$ считают координатами точки x в многомерном пространстве. Как и в случае гладкой регуляризации, здесь делается предположение относительно искомого вектора x . Но на этот раз предположение имеет вероятностный характер. А именно, мы предполагаем, что еще до решения системы нам априори известно (из опыта, из постановки естественной задачи и т. д.) вероятностное распределение искомого вектора x . Это распределение называют априорным распределением. Векторы b и x связаны уравнением (1). Здесь вектор b считают случайным из-за случайных ошибок измерения его компонент. Предполагается, что нам известно также условное распределение вектора b для каждого фиксированного значения вектора x . При сделанных предположениях, используя формулу Байеса для непрерывных распределений, можно получить формулу [5, 9, 10] для апостериорного распределения искомого вектора x :

$$P(x | b) = \frac{P(x) P(b | x)}{\int P(x) P(b | x) dx}. \quad (3)$$

Математическое ожидание этого распределения считают [5] регуляризованным (в смысле статистической регуляризации) решением системы (1).

Так же, как и в случае гладкой регуляризации, здесь регуляризованное решение является в определенном смысле наилучшим в некотором статистическом ансамбле векторов, а именно, регуляризованное решение минимизирует дисперсию некоторого вероятностного распределения [8].

Использование статистической регуляризации также связано с серьезными трудностями. Предварительная (априорная) информация о решении должна быть записана в виде многомерного вероятностного распределения с известными параметрами.

Опуская подробности [4, 5], приведем окончательные формулы, которые получил Турчин для случая, когда все многомерные распределения, упомянутые выше, являются нормальными. В этом случае вместо системы (1) рассматривают регуляризованную систему уравнений следующего вида:

$$(A^*A + C^{-1})x = A^*b. \quad (4)$$

Здесь C — положительно определенная симметричная матрица вторых моментов нормального распределения вектора x .

Сделаем несколько простых замечаний о сходстве этих методов регуляризации.

Несмотря на то, что исходная идея метода статистической регуляризации существенно отличается от идеи гладкой регуляризации, тем не менее окончательные формулы (2) и (4) — в случае нормального распределения — очень похожи.

Формально оба метода (как и метод наименьших квадратов для решения переопределенной системы уравнений) сводятся к минимизации функционала и окончательно приводят к решению системы уравнений с квадратной матрицей вида $(A^*A + \dots)$, как и в методе наименьших квадратов. Поэтому оба метода можно использовать и для переопределенной системы уравнений.

В этой статье мы рассматриваем следующий возможный дефект решения системы уравнений (1). Предположим, что по некоторым естественным причинам компоненты x_i точного решения x должны быть неотрицательными. Например, x_i может означать физическое количество одного вещества в некоторой смеси веществ. А ошибки правой части системы и плохая обусловленность матрицы системы могут привести к тому, что некоторые компоненты вектора решения станут отрицательными.

Чтобы устранить указанный дефект решения, попытаемся применить упомянутые методы регуляризации, а в случае неудачи предложить другой метод. Эта регуляризация должна изменить решение нужным образом, а именно, получить в каком-то смысле наилучшее решение, все компоненты которого (или, если необходимо, лишь некоторые из них) являются неотрицательными.

К настоящему времени имеется большое количество работ, где рассматриваются различные варианты метода регуляризации и упомянутых подходов — сглаживающего и вероятностно-статистического. В связи с рассматриваемой здесь задачей следует упомянуть работу [7], в которой решается задача сглаживания при неотрицательных ограничениях. В отличие от [7], где не используются вероятностные соображения, в настоящей работе существенно используется вероятностное распределение вектора решения. Вслед за работой Турчина появилось много работ по обратным задачам, где используется стохастическая природа задачи. Хорошо известна работа [8] прикладного характера, содержащая большое количество ссылок, в которой используется статистическое моделирование. В настоящей работе, в отличие от [8], рассматривается задача с ограничениями на компоненты решения.

2. Постановка задачи

Итак, дана система линейных алгебраических уравнений (1). Некоторые компоненты x_i вектора решения x могут оказаться отрицательными. Задача состоит в том, чтобы найти вектор x^* , все компоненты которого являются неотрицательными числами. Причем этот вектор должен давать псевдорешение, наилучшее в некотором смысле. Конечно, критерий выбора наилучшего псевдорешения непосредственно связан с выбором метода регуляризации. Поэтому его можно определить лишь одновременно с выбором подходящего метода регуляризации.

Рассмотрим регуляризацию Тихонова–Филлипса. Для этого метода хорошо известны типичные регуляризующие функционалы, сглаживающие решение. Но здесь мы собираемся добиться иного результата, и сглаживающие функционалы совершенно не подходят для нашей цели. Были сделаны попытки построить такой функционал, чтобы его минимизация при подходящем выборе параметра регуляризации позволяла получать неотрицательное псевдорешение. Опуская детали, скажем, что эти попытки не принесли успеха. Стандартная сглаживающая регуляризация Тихонова–Филлипса не помогает устранить рассматриваемый дефект решения.

В статистической регуляризации Турчина рассматривается непрерывный нормальный ансамбль псевдорешений, который содержит как допустимые (с неотрицательными компонентами), так и недопустимые векторы. Поэтому регуляризованное решение может оказаться недопустимым, т. е. содержать отрицательные компоненты. Таким образом, и метод статистической регуляризации, приводящий к системе (3), также не позволяет решить нашу задачу.

И все же вероятностные соображения, используемые в методе статистической регуляризации, удалось применить для решения рассматриваемой задачи. Точнее говоря, примем следующие предположения и обозначения.

Пусть \bar{b} — это истинный (т.е. не содержащий ошибки) числовой вектор, который должен находиться в правой части системы (1). Конечно, вектор \bar{b} нам неизвестен, иначе незачем проводить регуляризацию решения.

Для удобства случайные векторы будем помечать тильдой.

Вектор правой части в системе (1) содержит случайную ошибку $\widetilde{\Delta b}$. Следовательно, он является случайным, и, согласно договоренности, для него далее используем обозначение \tilde{b} , причём

$$\tilde{b} = \bar{b} + \widetilde{\Delta b}. \quad (5)$$

Соответственно, вектор b в (1) — это числовой (неслучайный) выборочный вектор. Точно так же, вектор x — это числовой выборочный вектор.

Решением системы:

$$A\bar{x} = \bar{b}$$

с истинной правой частью является истинный и допустимый вектор \bar{x} , т.е. все его компоненты — неотрицательные числа. Соответственно, вектор x в (1) — это числовой (неслучайный) вектор (как и вектор b), который может оказаться недопустимым.

Для простоты предположим, что вектор ошибки $\widetilde{\Delta b}$ имеет многомерное нормальное распределение с нулевым математическим ожиданием. Тогда вектор \tilde{b} (см. (5)) также имеет нормальное распределение с математическим ожиданием \bar{b} . Найдём матрицу вторых моментов вектора \tilde{b} .

Напомним одну формулу для матриц вторых моментов [9]. Пусть случайный вектор x имеет нормальное распределение с матрицей вторых моментов Λ , C — матрица линейного отображения $C : x \rightarrow y$. Тогда матрица M вторых моментов вектора $y = Cx$ может быть вычислена по формуле

$$M = C \cdot \Lambda \cdot C^*. \quad (6)$$

Используем эту формулу при вычислении матриц вторых моментов, которые встретим далее.

Мы также неявно предполагаем, что матрица A является невырожденной. Следовательно, и вектор $\tilde{x} = A^{-1}\tilde{b}$ имеет нормальное распределение с математическим ожиданием \bar{x} [9]. Соответствующие формулы плотности вероятностных распределений мы приведем и используем в следующем пункте.

Вернемся к постановке задачи. Перечислим некоторые естественные требования к ее решению.

1. Решением задачи должен быть неотрицательный вектор x_+^* . Для краткости условие неотрицательности всех компонент вектора x будем иногда записывать в виде неравенства $x \geq 0$.
2. Если обычный вектор решения системы (1) x уже является неотрицательным, то регуляризованное решение x^* должно совпадать с ним: $x^* = x$.
3. Регуляризованный вектор решения задачи x^* должен быть в определенном смысле наилучшим из всех псевдорешений (например, должен минимизировать некоторый функционал, как и в случае стандартной регуляризации).

Выделим в пространстве R^n множество R_+^n всех точек с неотрицательными координатами и будем искать регуляризованное решение в этом множестве. А именно, назовем решением нашей задачи “наиболее вероятный” неотрицательный вектор. Это такой вектор $x^* \geq 0$, что плотность вероятности рассматриваемого нормального ансамбля принимает в точке x^* наибольшее из своих значений на множестве R_+^n всех неотрицательных точек.

Этот критерий отыскания регуляризованного решения, очевидно, напоминает метод максимального правдоподобия из математической статистики.

Окончательно постановку задачи можно сформулировать так.

В ансамбле случайных векторов с нормальным распределением найти неотрицательный вектор, на котором плотность распределения ансамбля принимает максимальное значение.

3. Функционал и его условный экстремум

Итак, мы свели рассматриваемую задачу к отысканию точки максимума для плотности некоторого нормального распределения на множестве R_+^n . Запишем формулы для соответствующих вероятностных плотностей, затем сведем нашу задачу к поиску условного экстремума некоторого функционала.

Плотность нормального распределения вектора \tilde{b} имеет вид

$$f_b(u) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det(C)}} \exp \left[-\frac{1}{2} (C^{-1}(u - \tilde{b}), (u - \tilde{b})) \right].$$

Здесь C — матрица вторых моментов вектора \tilde{b} .

Векторы x и b связаны равенством $A\tilde{x} = \tilde{b}$ или $\tilde{x} = A^{-1}\tilde{b}$. Найдем матрицу D вторых моментов случайного вектора \tilde{x} , пользуясь формулой (6):

$$D = A^{-1}C(A^{-1})^*.$$

Теперь получим выражение для D^{-1} :

$$D^{-1} = (A^{-1}C(A^{-1})^*)^{-1} = (A^{-1}C(A^*)^{-1})^{-1} = A^*C^{-1}A.$$

Наконец, плотность нормального распределения вектора \tilde{x} имеет вид

$$f_x(u) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det(A^*C^{-1}A)}} \exp \left[-\frac{1}{2} ((A^*C^{-1}A)(u - \tilde{x}), (u - \tilde{x})) \right].$$

Эта формула задает вероятностное распределение случайного вектора решения системы \tilde{x} , причем здесь мы неявно считаем, что истинный вектор \tilde{x} в этой формуле известен. На самом деле нам известен лишь выборочный вектор x из этого распределения. И, как в математической статистике, истинный вектор \tilde{x} для нас является случайным, он распределен по нормальному закону с той же матрицей вторых моментов D и известным математическим ожиданием x :

$$f_{\tilde{x}}(u) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det(D)}} \exp \left[-\frac{1}{2} (D^{-1}(u - x), (u - x)) \right].$$

Наша задача поиска регуляризованного решения теперь сводится к поиску максимума функции плотности $f_{\tilde{x}}(u)$ на множестве всех допустимых решений R_+^n . В свою очередь, эта задача, очевидно, сводится к поиску минимума для квадратичного функционала

$$\Phi(u) = (D^{-1}(u - x), (u - x)) \quad (7)$$

при условии $u \in R_+^n$.

4. Теорема существования и свойства точки минимума

В этом пункте мы рассмотрим вопрос о существовании точки минимума функционала $\Phi(u)$ в произвольном замкнутом множестве.

Прежде всего заметим, что квадратичный функционал $\Phi(u)$ является положительно определенным. В самом деле, как мы показали в предыдущем разделе, матрица D — это матрица вторых моментов случайного вектора \tilde{x} , и, следовательно по определению [9] является положительно определенной. Следовательно, и матрица D^{-1} также является положительно определенной. Поэтому

$$\Phi(u) = (D^{-1}(u - x), (u - x)) \geq 0$$

для любого вектора $u \in R^n$.

Поскольку функционал $\Phi(u)$ является положительно определенным, и, очевидно, $\Phi(x) = 0$, то точка x есть точка его глобального минимума. Однако нас интересует не его глобальный минимум, а минимум на множестве R_+^n .

Квадратичный функционал $\Phi(u)$ является непрерывной функцией, поэтому имеет наименьшее значение на любом компактном множестве $K \subset R^n$ и принимает это наименьшее значение в некоторой точке $x \in K$. Однако замкнутое множество

$$R_+^n = \{u : u_i \geq 0, i = 1, \dots, n\}$$

не является компактным, и эту теорему здесь нельзя использовать.

Тем не менее, можно доказать существование условного минимума функционала при заданных и даже более слабых условиях.

Сначала уточним условия нашей задачи, затем удалим некоторые из них. Это позволит избавиться от громоздких формул и упростить доказательство.

Мы рассматриваем замкнутое множество специального вида — “положительный октант” R_+^n . Этот специальный вид множества R_+^n не имеет значения для доказательства теоремы существования минимума. Мы воспользуемся им ниже лишь для доказательства единственности.

Вид (7) функционала также не имеет значения. Для доказательства теоремы будут нужны лишь следующие его свойства: непрерывность, положительность и поведение функционала на бесконечности.

Теорема. Пусть $\Phi(u)$ — непрерывный функционал в R^n , который принимает лишь неотрицательные значения. Кроме того, пусть выполняется условие

$$\lim_{|u| \rightarrow +\infty} \Phi(u) = +\infty.$$

Пусть $K \subset R^n$ — произвольное (возможно неограниченное) замкнутое множество.

Тогда найдется такая точка $x^* \in K$, что функционал $\Phi(u)$ принимает в ней свое наименьшее значение на множестве K :

$$\Phi(x^*) = \min_{u \in K} \Phi(u).$$

Доказательство. Пусть u_0 — произвольная точка множества K и r — произвольное положительное число. Обозначим $S(u_0, r)$ шар радиуса r с центром в точке u_0 .

Точка $u_0 \in K$ может оказаться или не оказаться искомой точкой минимума функционала $\Phi(u)$ на множестве K . Но в любом случае

$$\Phi(u_0) \geq \inf_{u \in K} \Phi(u).$$

Согласно условию роста функционала $\Phi(u)$ на бесконечности, можно найти такую величину $r_0 > 0$ радиуса шара $S(u_0, r)$, что все значения этого функционала на точках u , лежащих вне шара $S(u_0, r_0)$, будут превышать любое наперед заданное число, например число $\Phi(u_0)$:

$$\Phi(u) > \Phi(u_0) \geq \inf_{u \in K} \Phi(u) \quad \text{при} \quad |u| > r_0. \quad (8)$$

Все пространство R^n представим в виде объединения шара $S(u_0, r_0)$ и его дополнения:

$$R^n = S(u_0, r_0) \cup \bar{S}(u_0, r_0), \quad \text{где} \quad \bar{S}(u_0, r_0) = R^n - S(u_0, r_0).$$

Соответственно множество K представим в виде объединения двух непересекающихся подмножеств (см. рис. 1):

$$K = K_1 \cup K_2, \quad (9)$$

$$\text{где} \quad K_1 = K \cap S(u_0, r_0); \quad K_2 = K \cap \bar{S}(u_0, r_0).$$

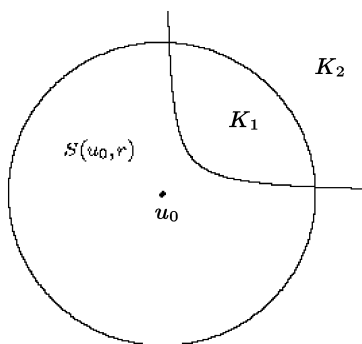


Рис. 1. Поиск условного минимума функционала

Шар $S(u_0, r_0)$ в конечномерном пространстве R^n является компактным множеством. Множество K_1 является пересечением замкнутого K и компактного $S(u_0, r_0)$, поэтому K_1 является компактным. Следовательно, непрерывная функция $\Phi(u)$ достигает своей точной нижней грани на множестве K_1 в некоторой точке $x^* \in K_1$:

$$\Phi(x^*) = \min_{u \in K_1} \Phi(u). \quad (10)$$

Теперь нетрудно показать, что найденная точка x^* является искомой точкой минимума функционала $\Phi(u)$ на всем множестве K .

В самом деле, из (10) следует, что неравенство

$$\Phi(x^*) \leq \Phi(u)$$

выполняется для любой точки $u \in K_1$. С другой стороны, точки множества K_2 лежат за пределами шара $S(u_0, r_0)$. Поэтому из (8) следует, что для любой точки $u \in K_2$ выполняется неравенство

$$\Phi(x^*) \leq \Phi(u_0) \leq \Phi(u).$$

Итак, неравенство

$$\Phi(x^*) \leq \Phi(u)$$

выполняется для всех точек $u \in K_1$ и для всех точек $u \in K_2$. Поскольку (см. (9)) множество K является объединением множеств K_1 и K_2 , то это неравенство выполняется для всех точек $u \in K$. Так как, кроме того, точка x^* принадлежит множеству K , то

$$\Phi(x^*) = \min_{u \in K} \Phi(u). \quad \square$$

Напомним, что точка минимума x^* интересует нас лишь потому, что мы считаем ее регуляризованным решением системы (1). Поэтому отметим некоторые свойства точки условного минимума.

Сначала проверим, что выполняются три естественных требования к регуляризованному решению x^* , сформулированные в конце пункта 2.

- 1) Согласно теореме (см. (10)), точка x^* принадлежит $K_1 \subset K$. Но здесь $K = R_+^n$. Следовательно, $x^* \geq 0$, и первое требование выполняется.
- 2) Пусть обычный вектор решения системы x является неотрицательным, т. е. $x \in R_+^n$. Тогда x является одновременно точкой глобального и локального (в R_+^n) минимума. Следовательно, $x^* = x$, и второе требование выполняется.
- 3) Регуляризованный вектор решения x^* минимизирует функционал $\Phi(u)$. В этом смысле он является наилучшим из всех допустимых псевдорешений в R_+^n .

Рассмотрим вопрос о единственности точки x^* . На самом деле, в тех ослабленных условиях, как выше была сформулирована теорема, эта точка минимума произвольного функционала не является единственной (нетрудно построить соответствующий контрпример). Но в исходной задаче $\Phi(u)$ — это положительный квадратичный функционал, а R_+^n — это выпуклое множество. И если выполнены условия исходной задачи, то [11–13] искомый условный минимум является единственным.

Кроме того, точка условного минимума обязательно [12] лежит на границе множества K . Здесь существенными оказываются условия выпуклости множества и функционала.

5. Геометрическая интерпретация

Рассмотрим геометрическую интерпретацию задачи поиска условного минимума на множестве R_+^n в двумерном случае. Она наглядно объяснит предлагаемый подход.

Первый квадрант координатной плоскости — это множество R_+^2 , точка x — решение системы (1). Эллипсы (в многомерном случае — эллипсоиды) изображают линии (поверхности) уровня квадратичного функционала $\Phi(u)$. Эллипсы меньшего размера соответствуют меньшим значениям функционала. Точка x — это точка абсолютного минимума функционала $\Phi(u)$.

Здесь решение системы является недопустимым, так как первая координата точки x отрицательна, $x \notin R_+^2$.

Чтобы найти наиболее вероятную точку $x^* \in R_+^2$, будем увеличивать, “раздувать” эти концентрические эллипсы, удаляясь от точки x . Найдем точку, в которой “переменный” эллипс соприкоснется с множеством R_+^2 . Очевидно, именно в этой точке функционал достигает условного минимума на множестве R_+^2 . Она является решением задачи.

Еще одна интерпретация, связанная с функциональным анализом. Рассмотрим на координатной плоскости норму, которая задана следующей формулой:

$$x \rightarrow \|x\|_A = \sqrt{(Ax, x)}.$$

Для этой нормы рассмотренные эллипсы являются концентрическими сферами с центром в начале координат. Тогда искомая “точка соприкосновения” есть ближайшая (в смысле этой нормы) к точке множества R_+^n . Из приведенного рис. 2. понятно, что

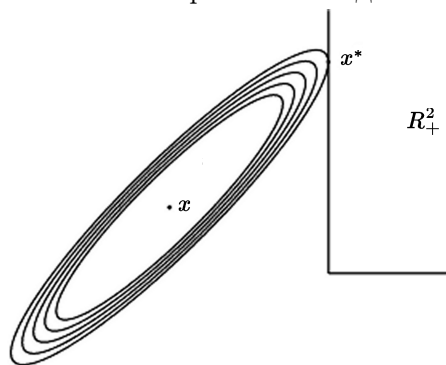


Рис. 2. Геометрический смысл условного минимума квадратичного функционала

- 1) “точка соприкосновения” является единственной;
- 2) обязательно лежит на границе допустимого множества R_+^n .

Эти наглядные свойства регуляризованного решения кажутся очевидными из рисунка. Впрочем, они могут быть строго доказаны (см. конец п. 4).

6. Поиск экстремума

Здесь мы опишем численный поиск условного минимума квадратичного функционала $\Phi(u)$.

Выше мы отметили, что эта точка лежит на границе многомерного “положительно-го октанта” R_+^n . Эта граница является объединением конечного числа множеств, каждое из которых является частью одного из линейных подпространств, образующих границу R_+^n . Поиск минимума положительного квадратичного функционала на линейном подпространстве сводится к решению системы линейных уравнений. Отсюда возникло предположение, что этот минимум можно найти точно и за конечное число действий. Однако число этих линейных подпространств размерности $0, 1, 2, \dots, (n - 1)$ равно 2^n . А исключить те подпространства, где точка минимума не может находиться, очень трудно.

Оказалось, что вопрос можно решить гораздо проще: эту точку можно найти с помощью итерационного алгоритма. А соответствующие компьютерные программы входят в состав пакетов Matlab и Fortran.

Изменим форму записи функционала. Матрица D^{-1} является положительно определенной. Значит, существует матрица $S = \sqrt{D^{-1}}$, причем матрица S сама является симметричной и положительно определенной. Поэтому матрицу D^{-1} можно записать в таком виде

$$D^{-1} = \sqrt{D^{-1}} \cdot \sqrt{D^{-1}} = S^* S.$$

Теперь перепишем формулу (7) для квадратичного функционала

$$\Phi(u) = ((S^T S)(u-x), (u-x)) = ((S^T S)u, u) - 2(Su, x) + x^2 = 2 \left[\frac{1}{2} ((S^T S)u, u) - (u, S^T x) \right] + x^2.$$

Выражение в квадратных скобках — это запись функционала в таком виде, который используют в стандартных программах при поиске минимума квадратичного функционала. Пользуясь этой программой, можно найти точку минимума — решение поставленной задачи.

7. Обобщение и изменение метода

В предыдущем пункте мы отметили, что точка регуляризованного решения обязательно лежит на границе допустимого множества R_+^n . Это значит, что некоторые компоненты регуляризованного решения обязательно равны нулю. По разным причинам это свойство регуляризованного решения является его недостатком.

Нельзя ли, используя вероятностные соображения, получить строго положительное регуляризованное решение, чтобы соответствующая точка лежала внутри, а не на границе множества R_+^n ?

Можно поступить следующим образом. Рассмотрим след нормального распределения $f_x(u)$ на множестве R_+^n , т. е. такое вероятностное распределение, плотность которого совпадает (с учетом нормировки) с $f_x(u)$ на множестве R_+^n и равна нулю в остальных точках пространства.

Точка математического ожидания этого распределения, очевидно, лежит внутри множества R_+^n и логично считать ее регуляризованным решением.

Нетрудно понять, что этот метод близок к общему методу статистической регуляризации (3). Здесь (в отличие от регуляризации Турчина) в качестве априорного распределения точки x используется след распределения $f_x(u)$. При этом заметим, что исходное

вероятностное распределение $f_x(u)$ вектора x здесь не обязано быть нормальным (см. замечания ниже).

Вопрос о преимуществах этого способа регуляризации перед описанным выше требует исследований. В общем случае найти точку математического ожидания аналитически (т. е. точно) нельзя. Численное отыскание точки без использования статистического моделирования (метода Монте-Карло) также невозможно, за исключением практически неинтересного случая, когда размерность пространства решений (т. е. число неизвестных) $n \leq 3$. Искомую точку математического ожидания следа вероятностного распределения можно найти, лишь моделируя случайные точки методом исключения (см. [14]).

Описанный метод можно обобщить еще в одном направлении. Мы рассматривали нормальное распределение вектора правой части b и ограничение вида $x_i \geq 0$ на все компоненты решения. Легко видеть, что можно рассматривать эти ограничения лишь на некоторые (т. е. не все) компоненты. Можно пойти дальше и рассматривать ограничение вида $x \in K$, где $K \subset R^n$ — сравнительно произвольное множество. Одновременно с этим можно рассматривать произвольное (не обязательно нормальное) непрерывное распределение вектора правой части b .

В связи с замечаниями о единственности регуляризованного решения в конце п. 4 и в п. 5 понятны возможные ограничения на выбор новой плотности и “множества допустимости” K . А именно, для того, чтобы регуляризованное решение было единственным, следует выбирать выпуклое множество K и выпуклую функцию плотности.

8. Численный пример

В этом пункте приведен результат численного эксперимента. Рассматривается система линейных уравнений с трехдиагональной матрицей A размера 100×100 :

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & & & 0 \\ 1 & 2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{100} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{100} \end{pmatrix}.$$

Число обусловленности матрицы системы $\text{cond}(A) = 4133$ (здесь $\text{cond}(A)$ — это отношение максимального сингулярного числа матрицы A к минимальному).

Численный эксперимент состоит в следующем. Пусть \bar{x} — вектор “истинного” решения, $\bar{x}_{20} = 0.1$, остальные компоненты $\bar{x}_k = 1$. Соответственно, “истинный” вектор правой части $\bar{b} = A\bar{x}$. К этому вектору добавили случайный вектор $\widetilde{\Delta b}$ “погрешности измерений”: $\bar{b} \implies b = \bar{b} + \widetilde{\Delta b}$. Компоненты вектора $\widetilde{\Delta b}$ — независимые случайные величины, распределенные по нормальному закону со среднеквадратическим отклонением $\varepsilon = 0.01$ (соответственно, матрица C вторых моментов случайного вектора b равна $C = \varepsilon^2 \cdot E$, где E — единичная матрица).

Сначала получили искаженное решение системы $Ax = b$, содержащее одну отрицательную компоненту $x_{20} = -0.768$. Затем нашли регуляризованное решение x^* . Двенадцать его компонент равны 0, остальные компоненты — положительные числа.

Напомним, что рассматриваемый метод позволяет находить лишь наиболее вероятное неотрицательное псевдорешение, которое является ближайшим в определенном смысле (см. п. 5) к искаженному недопустимому решению. Чтобы приблизить псевдорешение x^* к истинному решению, оставив его неотрицательным, следует использовать сочетание

предложенного метода, который использует лишь информацию о неотрицательности истинного решения, и другой регуляризации, в которой используется более существенная информация о решении. Предложенный метод позволяет сочетать такие действия.

9. Заключение

Некоторые прикладные задачи приводят к решению плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений, решение которых обязано быть неотрицательным. В работе предложен метод “неотрицательной регуляризации”, использующий априорную информацию о вероятностном распределении многомерной точки решения.

Задача сведена к поиску экстремума нелинейного функционала на множестве R_+^n . Доказана теорема существования минимума.

Новый метод позволяет учитывать разнообразные (не только неотрицательные) ограничения на решение (см. п. 7). Метод может легко быть использован в практических расчетах и допускает сочетание с другими методами регуляризации. Он имеет простой геометрический смысл.

Остаются вопросы, относящиеся к точности псевдорешения, которые требуют дальнейших исследований.

Литература

1. **Тихонов А.Н.** О некорректных задачах линейной алгебры и устойчивом методе их решения // Докл. АН СССР. — 1965. — Т. 163, № 6. — С. 591–595.
2. **Тихонов А.Н.** О регуляризации некорректно поставленных задач // Докл. АН СССР. — 1963. — Т. 153, № 1. — С. 49–52.
3. **Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.** Методы решения некорректных задач. — М.: Наука, 1979.
4. **Турчин В.Ф.** Решение уравнения Фредгольма 1-го рода в статистическом ансамбле гладких функций // ЖВМиМФ. — 1967. — Т. 7, № 6. — С. 1120–1128.
5. **Козлов В.Л., Малкевич С.М., Турчин В.Ф.** Использование методов математической статистики для решения некорректных задач // УФН. — 1970. — Вып. 3, № 2. — С. 345–386.
6. **Турчин В.Ф., Нозик В.З.** Статистическая регуляризация решения некорректных задач // Изв. АН СССР, сер. ФАО. — 1969. — Т. 5, № 1. — С. 255–267.
7. **Butler J.P., Reeds J.A., and Dawson S.V.** Estimating solutions of first kind integral equations with nonnegative constraints and optimal smoothing // SIAM J. on Numerical Analysis. — 1981. — Vol. 18, № 3. — P. 410–421.
8. **Mosegaard K., Tarantola A.** Monte Carlo sampling of solutions to inverse problems // J. Geophys. Res. — 1995. — Vol. 100, № 7. — P. 12431–12447.
9. **Крамер Г.** Математические методы статистики. — М.: Мир, 1975.
10. **Андерсон Т.** Введение в многомерный статистический анализ. — М.: Физматгиз, 1963.
11. **Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П.** Теория линейных некорректных задач и ее приложения. — М.: Наука, 1978.
12. **Моисеев Н.Н., Иванилов Ю.П., Столярова Е.М.** Методы оптимизации. — М.: Наука, 1978.
13. **Васильев В.П.** Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1980.
14. **Ермаков С.М., Михайлов Г.А.** Курс статистического моделирования. — М.: Наука, 1976.

Поступила в редакцию 23 мая 2011 г.,
в окончательном варианте 7 июня 2012 г.