V. V. Voevodin, The method of regularization, *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.*, 1969, Volume 9, Number 3, 673–675

ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ и МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 9 Май 1969 Июнь № 3

НАУЧНЫЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 518:512.25

О МЕТОДЕ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

В. В. ВОЕВОДИН

(Москва)

Ниже рассматриваются некоторые вопросы практической реализации метода регуляризации при решении систем линейных алгебраических уравнений. Описывается схема, при которой в некоторых случаях существенно повышается точность и скорость вычислений.

Пусть решается система

$$Ax = b \tag{1}$$

с матрицей A, имеющей N строк и n столбцов, где $N \geqslant n$. Применение метода регуляризации [1] сводится к многократному решению системы

$$(A'A + \alpha C)x_\alpha = A'b \tag{2}$$

при различных значениях параметра α. Здесь C — симметричная, положительно определенная матрица.

Прямое вычисление матрицы $A'A + \alpha C$ и решение системы (2) с этой матрицей неудобно в основном по двум причинам. Во-первых, это очень трудоемкий процесс, так как при каждом α приходится выполнять порядка n^3 операций, и, во-вторых, здесь трудно добиться высокой точности, так как при малых α приходится решать систему, близкую к системе

$$A'Ax = A'b, \tag{3}$$

которая обусловлена значительно хуже, чем (1). Оба этих недостатка можно устранить с помощью следующего приема.

Разложим матрицу C по методу квадратных корней [2] в произведение

$$C = B'B,$$

где B — правая треугольная матрица. Тогда система (2) будет эквивалентна системе

$$(P'P + \alpha E)y_\alpha = P'b, \tag{4}$$

где

$$P = AB^{-1}, \quad y_\alpha = Bx_\alpha. \tag{5}$$

Далее, представим матрицу P в виде произведения

$$P = QDR. \tag{6}$$

Здесь Q и R — унитарные матрицы, D — правая двухдиагональная. Разложение (6) можно получить с помощью матриц вращения или отражения [2]. Действительно, выберем унитарную матрицу Q_1 таким образом, чтобы в матрице $P_1 = Q_1P$ обратились в нули элементы первого столбца, лежащие ниже диагонали. Затем выберем унитарную матрицу R_1 из условия обращения в нуль элементов первой строки матрицы $P_2 = P_1R_1$, лежащих правее элемента (1.2). Умножая матрицу P поочередно слева и справа на унитарные матрицы и исключая элементы в таком порядке:

$$\begin{gathered}(2.1),\ (3.1),\ (4.1),\ldots,\ (N.1),\\ (1.3),\ (1.4),\ldots,\ (1.n),\\ (3.2),\ (4.2),\ldots,\ (N.2),\\ (2.4),\ldots,\ (2.n),\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\\ (n+1.n),\ldots,\ (N.n),\end{gathered}$$

придем к искомому разложению (6).

Теперь система (2) будет эквивалентна системе

$$(D'D+\alpha E)z_\alpha = d, \tag{7}$$

где

$$d = D'Q'b, \qquad z_\alpha = Ry_\alpha. \tag{8}$$

Матрица $D'D+\alpha E$ трехдиагональная, и для решения системы (7) требуется выполнить лишь порядка n операций. Переход от системы (2) к системе (7) требует однократного выполнения порядка Nn^2 операций; восстановление вектора x_α из преобразований (5), (8) требует выполнения порядка n^2 операций при каждом α. Общий выигрыш во времени примерно в $n/6$ раз, если систему (2) приходится решать для большого числа различных значений α.

Выигрыш во времени может быть еще бо́льшим, если параметр α выбирается по значениям скалярного произведения $(Cx_\alpha,\ x_\alpha)$ или евклидовой нормы ($\|\cdot\|_E$) невязки $r_\alpha = Ax_\alpha - b$. Легко проверить, что имеют место соотношения

$$(Cx_\alpha,\ x_\alpha) = \|z_\alpha\|_E{}^2, \qquad \|Ax_\alpha - b\|_E = \|Dz_\alpha - Q'b\|_E. \tag{9}$$

Вектор $Q'b$ уже вычислен при вычислении d из (8), и перехода к x_α не требуется. Описанная ситуация имеет место, например, в задаче определения вектора x, имеющего в области $\|Ax-b\|_E \leqslant \delta$ наименьшее значение $(Cx,\ x)$. Здесь приходится решать уравнение

$$\|Ax_\alpha - b\|_E = \delta \tag{10}$$

на множестве x_α из (2). Решение уравнения (10) единственно.

Если систему (7) решить с той же точностью, с какой заданы матрица A и вектор b, то будет почти та же потеря верных знаков, что и при решении систем (3). Этого можно избежать, если вычисление матрицы $D'D+\alpha E$, произведения матрицы D' на вектор $Q'b$ и решение самой системы (7) осуществлять с удвоенным числом знаков. При этом не будет сколько-нибудь заметного замедления счета, так как число таких операций невелико.

В целом данный процесс весьма устойчив. Так, анализ, аналогичный [3], показывает, что при вычислениях с плавающей запятой реально полученное решение системы (2) есть точное решение возмущенной системы с величинами $C+\delta C$, $A+{}$ $+\delta A$, $b+\delta b$, причем для $N=n$

$$\begin{gathered}\|\delta C\|_E \leqslant f_c(n)2^{-t}\|C\|_E,\\ \|\delta A\|_E \leqslant f_A(n)(\lambda_1/\lambda_n)^{1/2}2^{-t}\|A\|_E,\\ \|\delta b\|_E \leqslant f_b(n)2^{-t}\|b\|_E.\end{gathered} \tag{11}$$

Здесь t — количество разрядов в двоичном представлении мантиссы, λ_1 и λ_n — соответственно, максимальное и минимальное собственные значения матрицы C. Функции $f(n)$ зависят от типа вычислений, но в самых худших случаях по порядку роста они не превосходят n^2.

Предположим теперь, что с помощью процесса (2) мы определяем нормальное решение x_0 системы (3), и будем считать для простоты $C=E$. Рассмотрим влияние возмущения входных данных на точность определения x_0. Итак, имеем

$$A'Ax_0 = A'b, \quad (A'A+\alpha E)x_\alpha = A'b, \quad (\tilde{A}'\tilde{A}+\alpha E)\tilde{x}_\alpha = \tilde{A}\tilde{b}, \tag{12}$$

где $\tilde{x}_\alpha$ — точное решение (2), соответствующее возмущенным $\tilde{A}$ и $\tilde{b}$.

Из второго и третьего уравнений (12) получаем

$$(\tilde{A}'\tilde{A} + \alpha E)(\tilde{x}_\alpha - x_\alpha) = -(\tilde{A}'\tilde{A} - A'A)x_\alpha + (\tilde{A}'\tilde{b} - A'b)$$

и, далее,

$$\|\tilde{x}_\alpha - \tilde{x}_\alpha\|_E \leqslant (\|\tilde{A}'\tilde{A} - A'A\|_E \|x_0\|_E + \|\tilde{A}'\tilde{b} - A'b\|_E)\alpha^{-1} = \frac{\theta}{\alpha}, \tag{13}$$

так как $\|x_\alpha\|_E \leqslant \|x_0\|_E$ [1].

Всегда имеет решение уравнение

$$A'AA'Av = A'b. \tag{14}$$

Пусть v_0 — его нормальное решение. Обозначим через $v_{\beta\alpha}$ решение такого уравнения:

$$(A'A + \beta E)(A'A + \alpha E)v_{\beta\alpha} = A'b. \tag{15}$$

Можно показать, что

$$\lim_{\substack{\beta\to+0,\\ \alpha\to+0}} v_{\beta\alpha} = v_0, \qquad \|v_{\beta\alpha}\|_E \leqslant \|v_0\|_E.$$

Действительно, представим матрицу A в виде произведения $A = T\Lambda L$, где T и L — ортогональные, а Λ — диагональная матрицы. Тогда после элементарных преобразований системы (14), (15) будут сведены к аналогичным системам с диагональными матрицами и наше утверждение легко проверяется.

Если x_α и x_β — решения (12), соответственно, для значений параметра, равных α и β, то

$$\begin{aligned}(A'A + \beta E)(A'A + \alpha E)(x_\beta - x_\alpha) &= \\ = (A'A + \beta E)[(A'A + \beta E)x_\beta &- (A'A + \alpha E)x_\alpha + \alpha x_\beta - \beta x_\beta] = \\ &= (A'A + \beta E)(\alpha - \beta)x_\beta = (\alpha - \beta)A'b.\end{aligned}$$

Согласно сказанному выше, $\|x_\beta - x_\alpha\|_E / |\alpha - \beta| \leqslant \|v_0\|_E$. Окончательно получаем

$$\min_\alpha \|x_0 - \tilde{x}_\alpha\|_E \leqslant \min_\alpha(\|x_0 - x_\alpha\|_E + \|x_\alpha - \tilde{x}_\alpha\|_E) \leqslant \min_\alpha\left(\alpha\|v_0\|_E + \frac{\Theta}{\alpha}\right) = 2(\Theta\|v_0\|_E)^{1/2},$$

по крайней мере при $\alpha = (\Theta / \|v_0\|_E)^{1/2}$.

Если исходные данные системы (1) заданы точно, то внесение ошибок при реализации вычислительного процесса равносильно внесению возмущений порядка $O\,(2^{-t})$ в A и b. Следовательно,

$$\min_\alpha \|x_0 - \tilde{x}_\alpha\| = O(2^{-t/2}),$$

и численная устойчивость обеспечена.

Поступила в редакцию 12.12.1967

Цитированная литература

1. А. Н. Тихонов. Об устойчивости алгоритмов для решения вырожденных систем линейных алгебраических уравнений. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1965, **5**, № 4, 718—722.
2. В. В. Воеводин. Численные методы алгебры. М., «Наука», 1966.
3. J. H. Wilkinson. The algebraic eigenvalue problem. Oxford, Clarendon Press, 1965.