УДК 004.942 + 623.454.862

КРИТЕРИИ ВЫБОРА МОДЕЛИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ НЕКОРРЕКТНЫХ ЗАДАЧ НА ОСНОВЕ SVD И QR РАЗЛОЖЕНИЙ

Е.Г. Ревунова, А.В. Тищук, А.А. Десятерик

Международный научно-учебный центр информационных технологий и систем. Украина, Киев, пр. Глушкова, 40.
egrevunova@gmail.com, avtyshcuk@gmail.com, sasha.desyaterik@gmail.com

Анотація. Запропоновано критерії вибору моделі для вирішення дискретних некоректних задач на основі усічення SVD та QR розкладань.
Ключові слова: дискретні некоректні задачі, усічення SVD та QR розкладань, вибір моделі
Abstract. We propose the models selection criteria for the solution of discrete ill-posed problems based on the truncated SVD and QR decomposition.

Keywords: discrete ill-posed problems, truncated SVD and QR decomposition, models selection
Аннотация. Предложены критерии выбора модели для решения дискретных некорректных задач на основе усечения SVD и QR разложений.
Ключевые слова: дискретные некорректные задачи, усечение SVD и QR разложений, выбор модели

Введение

Решение некорректных задач [1, 2, 3] актуально для многих областей науки и техники. Дискретные некорректные задачи [3] возникают, например, при дискретизации интегральных уравнений в таких областях как спектрометрия, гравиметрия, магнитометрия, электроразведка и др.

Одним из методов решения обратных задач является решение на основе усечения таких разложений матрицы как сингулярное (SVD) и QR [4, 5]. Решением на основе усечения называют такое, когда при решении используются не все компоненты SVD либо QR разложения. Поиск оптимального числа компонент разложения, такого, при котором решение дискретной некорректной задачи демонстрирует устойчивость и максимальную точность – является актуальным.

В данной работе предложены критерии выбора оптимального числа компонент SVD и QR разложений, основанные на аппроксимации ошибки восстановления вектора выхода. Проведено экспериментальное исследование точности решения дискретных некорректных задач с использованием предложенных критериев.

1. Решение обратной задачи на основе SVD и QR разложений

Многие приложения математики, физики и анализа данных требуют нахождения приближенного решения системы линейных уравнений

$$\mathbf{Ax} \approx \mathbf{y}\,, \qquad (1)$$

где матрица $\mathbf{A} \in \Re^{N \times N}$ и вектор $\mathbf{y} \in \Re^N$, искаженный аддитивным шумом $\boldsymbol{\varepsilon} \in \Re^N$ ($\mathbf{y} = \mathbf{y}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}$), известны, и требуется оценить вектор сигнала $\mathbf{x} \in \Re^N$. Задачу оценивания вектора $\mathbf{x}$ по известному вектору $\mathbf{y}$ и матрице $\mathbf{A}$ называют обратной задачей.

В случае, когда матрица $\mathbf{A}$ очень плохо обусловлена, для получения устойчивой оценки $\mathbf{x}'$ используют разложение по сингулярным значениям. Решение на основе сингулярного разложения получают следующим образом:

$$\mathbf{x}'_{SVD\ k} = \mathbf{A}^{+}_{SVD\ k}\mathbf{y}\,,\ \mathbf{A}^{+}_{SVD\ k} = \mathbf{V}_k \mathbf{S}_k^{-1} \mathbf{U}_k^{\mathrm{T}}\,. \qquad (2)$$

Здесь $\mathbf{A}_{SVD\ k} = \mathbf{U}_k \mathbf{S}_k \mathbf{V}_k^{\mathrm{T}}$ – приближение матрицы $\mathbf{A}$, полученное по k $(k < N)$ компонентам сингулярного разложения, $\mathbf{U}_k = (\mathbf{u}_1,..., \mathbf{u}_k)$ – матрица левых сингулярных векторов с ортонормированными столбцами, $\mathbf{V}_k = (\mathbf{v}_1,..., \mathbf{v}_k)$ – матрица правых сингулярных векторов с ортонормированными столбцами, $\mathbf{S}_k = diag\,(\sigma_1,..., \sigma_k)$ – матрица сингулярных чисел, $\mathbf{A}^+$ – обобщенное обращение (псевдообращение) матрицы $\mathbf{A}$.

В случае, когда $\mathbf{y}$ содержит шум, ряд сингулярных чисел σ_i матрицы $\mathbf{A}$ плавно спадает к нулю, $\mathbf{A}$ имеет высокое число обусловленности, задачу оценки $\mathbf{x}$ называют дискретной некорректной обратной задачей [3]. Прием усечения сингулярного разложения с использованием перепада в ряду сингулярных значений не работает в дискретных некорректных задачах, поскольку, как отмечалось выше, здесь нет перепадов в ряду сингулярных значений и численный ранг не определен. Поиск числа компонент сингулярного разложения, соответствующего оптимальному решению дискретной некорректной задачи, является актуальным.

Другим матричным разложением, позволяющим получить устойчивую оценку $\mathbf{x}'$, является QR разложение. Решение задачи (1) на основе QR разложения получают следующим образом:

$$\mathbf{x}'_{QR} = \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{y}\,,\ \mathbf{A}^{+}_{QR\ k} = \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}}\,. \qquad (3)$$

Здесь $\mathbf{A}_{QR\ k} = \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_k$ – приближение матрицы $\mathbf{A}$, полученное по k $(k < N)$ компонентам QR разложения, $\mathbf{Q}_k$ – матрица с ортонормированными столбцами, $\mathbf{R}_k$ – верхнетреугольная матрица.

Будем оценивать точность решения обратной задачи с помощью ошибки e_x восстановления истинного сигнала $\mathbf{x}$, вычисляемой как $e_x = \left\| \mathbf{x} - \mathbf{x}'_k \right\| = \left\| \mathbf{e}_x \right\|$, где $\mathbf{x}'_k$ – вектор восстановленного сигнала, $\mathbf{e}_x$ – вектор ошибки восстановления сигнала $\mathbf{x}$ с использованием k компонент разложения.

Запишем выражение для вектора ошибки $\mathbf{e}_x$ таким образом, чтобы вектор шума входил в него в явном виде:

$$\mathbf{e}_x = \mathbf{A}_k^{+}(\mathbf{y}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}) - \mathbf{x} = \mathbf{A}_k^{+}\mathbf{y}_0 + \mathbf{A}_k^{+}\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{x} = \mathbf{A}_k^{+}\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{x} + \mathbf{A}_k^{+}\boldsymbol{\varepsilon}\,. \qquad (4)$$

Здесь $\mathbf{A}_k$ – приближение матрицы $\mathbf{A}$, полученное по k компонентам QR либо SVD разложения.

Используя (4), запишем выражение для ошибки восстановления истинного сигнала и проведем усреднение по реализациям шума:

$$e_x = \left\|\mathbf{A}_k^+\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{x} + \mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 = \left\|(\mathbf{A}_k^+\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2 + \left\|\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 - 2\left\langle(\mathbf{A}_k^+\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}, \mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\rangle, \tag{5}$$

$$\mathrm{E}\{e_x\} = \left\|(\mathbf{A}_k^+\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2 + \mathrm{E}\left\|\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 - 2\mathrm{E}\left\langle(\mathbf{A}_k^+\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}, \mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\rangle. \tag{6}$$

Учитывая, что $\mathrm{E}\left\langle(\mathbf{A}_k^+\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}, \mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\rangle = 0$ и $\mathrm{E}\left\|\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 = \mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}_k^+)$, получим выражение для среднеквадратичной ошибки восстановления истинного сигнала:

$$\mathrm{E}\{e_x\} = \left\|(\mathbf{A}_k^+\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2 + \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}_k^+). \tag{7}$$

Обозначим составляющие ошибки как

$$e_{x1} = \left\|(\mathbf{A}_k^+\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2,\ e_{x2} = \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}_k^+), \tag{8}$$

где e_{x1} – детерминированная составляющая ошибки и e_{x2} – стохастическая.

Точность восстановления вектора выхода оценим следующим образом: $e_y = \left\|\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}'_k\right\| = \left\|\mathbf{e}_y\right\|$, где $\mathbf{y}'_k = \mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\mathbf{y}$ – восстановленный вектор выхода, $\mathbf{e}_y$ – вектор ошибки восстановления выхода. Выражения для вектора ошибки $\mathbf{e}_y$ и ошибки восстановления выхода запишем как

$$\mathbf{e}_y = \mathbf{A}\mathbf{A}_k^+(\mathbf{y}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}) - \mathbf{y}_0 = \mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_0 + \mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}, \tag{9}$$

$$e_y = \left\|\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_0 + \mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 = \left\|\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_0\right\|^2 + \left\|\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 - 2\left\langle\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_0, \mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\rangle. \tag{10}$$

Усредним ошибку восстановления выхода по реализациям шума:

$$\mathrm{E}\{e_y\} = \left\|\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_0\right\|^2 + \mathrm{E}\left\|\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 - 2\mathrm{E}\left\langle\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_0, \mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\rangle. \tag{11}$$

Так как $2\mathrm{E}\left\langle\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\mathbf{y}_0 - \mathbf{y}_0, \mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\rangle = 0$ и $\mathrm{E}\left\|\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 = \mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+)$, среднеквадратичная ошибка восстановления выхода есть

$$\mathrm{E}\{e_y\} = \left\|(\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y}_0\right\|^2 + \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+). \tag{12}$$

Составляющие ошибки восстановления выхода:

$$e_{y1} = \left\|(\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y}_0\right\|^2,\ e_{y2} = \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{A}_k^+), \tag{13}$$

где e_{y1} – детерминированная составляющая ошибки и e_{y2} – стохастическая.

Рассмотрим составляющие ошибки восстановления сигнала $\mathbf{x}$ для решения на основе QR разложения. Детерминированная составляющая ошибки:

$$e_{QR\ x1} = \left\|(\mathbf{A}_k^+\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2 = \left\|(\mathbf{R}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2. \tag{14}$$

Стохастическая составляющая ошибки:

$$e_{QR\ x2} = \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_{QR\ k}^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}_{QR\ k}^+) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{Q}_k\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}}\mathbf{R}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}}) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}}\mathbf{R}_k^{-1}). \tag{15}$$

Составляющие ошибки восстановления выхода:

$$e_{QR\ y1} = \left\|(\mathbf{A}\mathbf{R}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0\right\|^2, \qquad (16)$$

$$e_{QR\ y2} = \sigma^2 trace\,(\mathbf{Q}_k\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{R}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}}) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{R}_k^{-1}), \qquad (17)$$

где $e_{QR\ y1}$ – детерминированная составляющая ошибки и $e_{QR\ y2}$ – стохастическая.

Запишем составляющие ошибки восстановления сигнала $\mathbf{x}$ для решения на основе SVD разложения как:

$$e_{SVD\ x1} = \left\|(\mathbf{A}_k^{+}\mathbf{A}_k - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2 = \left\|(\mathbf{V}_k\mathbf{S}_k^{-1}\mathbf{U}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{U}_k\mathbf{S}_k\mathbf{V}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2 = \left\|(\mathbf{V}_k\mathbf{V}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{x}\right\|^2, \qquad (18)$$

$$e_{SVD\ x2} = \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}_k^{+}) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{U}_k\mathbf{S}_k^{-1\mathrm{T}}\mathbf{V}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{V}_k\mathbf{S}_k^{-1}\mathbf{U}_k^{\mathrm{T}}) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{U}_k\mathbf{S}_k^{-2}\mathbf{U}_k^{\mathrm{T}}), \qquad (19)$$

где $e_{SVD\ x1}$ – детерминированная составляющая ошибки и $e_{SVD\ x2}$ – стохастическая. Составляющие ошибки восстановления выхода:

$$e_{SVD\ y1} = \left\|(\mathbf{A}_k\mathbf{A}_k^{+} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0\right\|^2 = \left\|(\mathbf{U}_k\mathbf{S}_k\mathbf{V}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{V}_k\mathbf{S}_k^{-1}\mathbf{U}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0\right\|^2 = \left\|(\mathbf{U}_k\mathbf{U}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0\right\|^2, \qquad (20)$$

$$e_{SVD\ y2} = \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}\mathbf{A}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_k\mathbf{A}_k^{+}) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{A}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_k\mathbf{A}_k^{+}\mathbf{A}_k^{+\mathrm{T}}) = \sigma^2 trace\,(\mathbf{V}_k\mathbf{V}_k^{\mathrm{T}}). \qquad (21)$$

Оптимальным числом компонент SVD либо QR разложения мы называем такое число *k*, при котором ошибка восстановления истинного сигнала минимальна. Одним из подходов к определению оптимального числа компонент SVD и QR разложений является подход выбора модели (*model selection*). Методы выбора модели используют различные критерии выбора [6]. Критерии выбора модели (КВМ) формулируются так, чтобы автоматически уменьшать число компонент модели с увеличением уровня шума. КВМ включают две составляющих. Одна из составляющих связана с точностью аппроксимации данных моделью. Значение этой составляющей убывает с ростом числа компонент модели. Другая составляющая, связанная с уровнем шума, с ростом числа компонент модели растет. Такое построение критериев обеспечивает достижение минимума ошибки на моделях, близких к оптимальным, путем баланса между сложностью модели и точностью аппроксимации.

Рассмотрим принцип построения КВМ для определения числа компонент SVD и QR разложений близкого к оптимальному.

2. Подход к определению оптимального числа компонент SVD и QR разложений

Поскольку в реальных условиях ошибку восстановления истинного сигнала вычислить невозможно из-за отсутствия данных об истинном сигнале, мы предлагаем для определения оптимального *k* использовать ошибку восстановления вектора выхода $\left\|\mathbf{y}' - \mathbf{y}_0\right\|$.

Рассмотрим подход к определению оптимального числа компонент SVD разложения. Выражение для среднеквадратичной ошибки восстановления выхода с использованием сингулярного разложения выглядит следующим образом:

$$e_{SVD\ y} = \left\| (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y}_0 \right\|^2 + \sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)\,. \tag{22}$$

Использовать для определения минимума ошибки непосредственно выражение (22) невозможно из-за наличия в нем вектора $\mathbf{y}_0$, который в реальных условиях неизвестен. Заменим в (22) неизвестный вектор $\mathbf{y}_0$, на известный вектор $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}$ (полученный, например, в результате измерений) и проведем усреднение по реализациям шума:

$$e'_{SVD\ y} = \left\| (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})(\mathbf{y}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}) \right\|^2 + \sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+) \tag{23}$$

$$\begin{gathered} \mathrm{E}\{e'_{SVD\ y}\} = \left\| (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y}_0 \right\|^2 + \mathrm{E}\left\| (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon} \right\|^2 + 2\mathrm{E}\left\langle (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y}_0, (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon} \right\rangle + \\ + \sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)\,. \end{gathered} \tag{24}$$

Учитывая, что $2\mathrm{E}\left\langle (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y}_0, (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon} \right\rangle = 0$

и $\mathrm{E}\left\| (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon} \right\|^2 = \sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})^{\mathrm{T}} (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I}))$, выражение (24) принимает следующий вид:

$$\begin{gathered} \mathrm{E}\{e'_{SVD\ y}\} = \left\| (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y}_0 \right\|^2 + \sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})^{\mathrm{T}} (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})) + \\ + \sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)\,. \end{gathered} \tag{25}$$

Сопоставив выражение для $\mathrm{E}\{e'_{SVD\ y}\}$ и выражение для среднеквадратичной ошибки восстановления выхода (22), видим, что они отличаются одним слагаемым: $\sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})^{\mathrm{T}} (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I}))$. Это позволяет нам скорректировать вклад шума в оценку детерминированной составляющей ошибки на основе зашумленного выхода $\left\| (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y} \right\|^2$ путем вычитания из нее $\sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})^{\mathrm{T}} (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I}))$ и получить аппроксимацию выражения (22), не содержащую неизвестного вектора $\mathbf{y}_0$:

$$CR_{SVD} = \left\| (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})\mathbf{y} \right\|^2 - \sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})^{\mathrm{T}} (\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+ - \mathbf{I})) + \sigma^2 trace\,((\mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^+)\,. \tag{26}$$

Мы получили выражение, аппроксимирующее ошибку восстановления выхода. Вместо неизвестного вектора $\mathbf{y}_0$ в выражение (26) входит известный вектор $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}$, поэтому CR_{SVD} может использоваться для определения оптимального числа компонент сингулярного разложения.

С целью разработки критерия для определения оптимального числа компонент QR разложения заменим в выражении для среднеквадратичной ошибки восстановления выхода

$$e_{QR\ y} = \left\| (\mathbf{A}\mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0 \right\|^2 + \sigma^2 trace\,(\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{R}_k^{-1}) \tag{27}$$

неизвестный вектор $\mathbf{y}_0$ на известный вектор $\mathbf{y}$ и проведем усреднение по реализациям шума:

$$e'_{QR\ y} = \left\| (\mathbf{A}\mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})(\mathbf{y}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}) \right\|^2 + \sigma^2 trace\,(\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{R}_k^{-1})\,, \tag{28}$$

$$\mathrm{E}\{e'_{QR\ y}\} = \left\|(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0\right\|^2 + \mathrm{E}\left\|(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 + \\ + 2\mathrm{E}\left\langle(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0, (\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon}\right\rangle + \sigma^2 trace\,(\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{AR}_k^{-1})\,. \qquad (29)$$

Учитывая, что $2\mathrm{E}\left\langle(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0, (\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon}\right\rangle = 0$

и $\mathrm{E}\left\|(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\boldsymbol{\varepsilon}\right\|^2 = \sigma^2 trace\,((\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})^{\mathrm{T}}(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})$, выражение (29) принимает вид:

$$\mathrm{E}\{e'_{QR\ y}\} = \left\|(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}_0\right\|^2 + \sigma^2 trace\,((\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})^{\mathrm{T}}(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I}) + \\ + \sigma^2 trace\,(\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{AR}_k^{-1})\,. \qquad (30)$$

Скорректируем вклад шума в оценку детерминированной составляющей ошибки на основе зашумленного выхода $\left\|(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}\right\|^2$ путем вычитания из нее $\sigma^2 trace\,((\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})^{\mathrm{T}}(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})$ и получим аппроксимацию выражения (27):

$$CR_{QR} = \left\|(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})\mathbf{y}\right\|^2 - \sigma^2 trace\,((\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I})^{\mathrm{T}}(\mathbf{AR}_k^{-1}\mathbf{Q}_k^{\mathrm{T}} - \mathbf{I}) + \\ + \sigma^2 trace\,(\mathbf{R}_k^{-1\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{AR}_k^{-1})\,. \qquad (31)$$

Выражение (31), аппроксимирует ошибку восстановления выхода и поэтому может использоваться для определения оптимального числа компонент QR разложения.

3. Экспериментальное исследование

Экспериментальное исследование проведено для дискретных некорректных задач Carasso, Phillips, Delves [7]. В табл. 1 приведены результаты решения дискретных некорректных задач на основе сингулярного разложения, где размерность матрицы $\mathbf{A}$ составляла 40×40.

Таблица 1.

Среднее значение ошибки решения и его среднеквадратичное отклонение, среднее значение k и его среднеквадратичное отклонение при размерности матрицы 40×40.

Задача	M(e)	ско	M(k)	ско	M(e)	ско	M(k)	ско	M(e)	ско	M(k)	ско
Phillips	nl=1E–3				nl=1E–4				nl=1E–5			
e	9.24e-2	2.67e-2	15.5	2.05	1.11e-2	3.37e-3	23.40	2.15	6.38e-4	1.87e-4	32.38	1.31
$\mathbf{CR}_{\mathrm{SVD}}$	**1.07e-1**	**3.09e-2**	**14.4**	**2.70**	**1.31e-2**	**4.74e-3**	**22.44**	**2.72**	**7.66e-4**	**2.97e-4**	**31.86**	**1.80**
Cp	1.84e-1	4.69e-2	9.88	0.52	2.38e-2	5.84e-3	17.16	0.55	2.15e-3	3.36e-4	24.96	0.28
AIC	1.33e-1	1.54e-2	11.2	0.77	1.73e-2	2.19e-3	18.30	0.95	2.04e-3	1.24e-4	25.12	0.33
MDL	1.51e-1	2.61e-2	10.4	0.54	7.73e-2	4.67e-2	13.58	3.21	1.54e-2	9.52e-6	18.0	0.0
Carroso	nl=1E–3				nl=1E–4				nl=1E–5			
e	8.37e-4	3.11e-4	11.6	0.49	3.06e-4	3.17e-5	15.7	2.07	2.15e-4	6.22e-6	21.8	1.71
$\mathbf{CR}_{\mathrm{SVD}}$	**9.89e-4**	**4.61e-4**	**11.3**	**1.04**	**3.32e-4**	**5.39e-5**	**14.04**	**2.24**	**2.22e-4**	**1.21e-5**	**22.9**	**2.78**
Cp	4.49e-3	1.57e-3	7.52	0.89	3.36e-4	1.39e-5	12.00	0.0	2.32e-4	2.76e-6	17.0	0.0
AIC	1.36e-3	3.46e-4	10.2	1.04	3.50e-4	4.83e-5	12.34	1.14	2.29e-4	6.72e-6	18.1	1.81
MDL	4.41e-3	1.63e-3	7.56	0.91	3.61e-4	1.01e-4	11.94	0.24	3.28e-4	1.27e-6	12.0	0.0

Продолжение таблицы 1

Delves	nl=1E–4				nl=1E–5				nl=1E–6			
e	2.83e-2	3.62e-3	7.96	1.40	1.23e-2	1.30e-3	16.74	2.03	2.87e-3	6.74e-4	36.44	2.67
CR_{SVD}	**3.21e-2**	**5.80e-3**	**7.22**	**1.63**	**1.36e-2**	**2.28e-3**	**16.52**	**2.89**	**3.29e-3**	**7.99e-4**	**34.62**	**3.83**
Cp	4.60e-2	4.33e-3	3.92	0.39	2.17e-2	1.51e-3	8.54	0.65	9.62e-3	7.09e-4	17.20	0.97
AIC	4.16e-2	1.90e-2	6.60	1.57	1.54e-2	1.73e-3	13.06	1.72	7.89e-3	8.47e-4	19.88	1.47
MDL	4.12e-2	3.98e-3	4.52	0.58	2.20e-2	2.08e-3	8.44	0.81	1.81e-2	7.06e-4	10.06	0.37

Для исследования эффективности предложенных критериев выбора модели проведено вычисление среднего значения $M(e)$ и с.к.о. ошибки решения для случаев определения оптимального числа компонент сингулярного разложения по критерию CR_{SVD}, числа компонент QR разложения по критерию CR_{QR} и по критериям выбора модели (Маллоуза Cp [8], Акаике AIC [9], минимальной длины описания MDL [10]).

В табл. 2 приведены результаты решения дискретных некорректных задач на основе QR разложения, где размерность матрицы $\mathbf{A}$ составляла 40×40.

Таблица 2.

Среднее значение ошибки решения и его среднеквадратичное отклонение, с реднее значение k и его среднеквадратичное отклонение при размерности матрицы 40×40.

Задача	M(e)	ско	M(k)	ско	M(e)	ско	M(k)	ско	M(e)	ско	M(k)	ско
Phillips	nl=1E–3				nl=1E–4				nl=1E–5			
e	0.11e-2	0.21e-3	11.1	0.50	3.3e-4	4.39e-5	16.24	1.1	2.2e-4	8.1e-6	22.36	2.2
CR_{QR}	**0.16e-2**	**0.84e-3**	**11.8**	**1.22**	**3.9e-4**	**0.15e-3**	**16.82**	**1.8**	**2.2e-4**	**1.69e-5**	**23.78**	**2.2**
Cp	0.62e-2	0.11e-2	7.26	0.88	7.9e-4	5.19e-6	11.00	0.0	2.3e-4	5.54e-6	17.94	0.24
AIC	0.22e-2	0.26e-2	11.5	0.95	3.9e-4	0.12e-3	15.34	0.85	2.3e-4	9.3e-6	19.60	1.67
MDL	0.64e-2	0.19e-3	7.04	0.28	7.9e-4	5.19e-6	11.00	0.0	7.1e-4	0.18e-3	11.64	1.48
Carroso	nl=1E–3				nl=1E–4				nl=1E–5			
e	0.067	0.026	14.8	0.84	0.0085	0.002	20.4	3.43	7.4e-4	0.21e-3	31.4	2.0
CR_{QR}	**0.095**	**0.044**	**13.44**	**2.26**	**0.0095**	**0.0027**	**19.3**	**3.70**	**8.8e-4**	**0.37e-3**	**31.3**	**3.0**
Cp	0.205	0.050	7.84	0.99	0.010	0.4e-3	15.0	0.0	2.5e-3	4.13e-5	23.0	0.0
AIC	0.138	0.024	10.48	1.82	0.011	0.8e-3	15.3	0.74	2.5e-3	4.10e-5	23.0	0.0
MDL	0.148	0.005	9.0	0.0	0.010	0.4e-3	15.0	0.0	9.8e-3	3.78e-6	15.0	0.0
Delves	nl=1E–3				nl=1E–4				nl=1E–5			
e	0.064	0.006	2.98	0.85	0.029	0.005	7.20	1.75	0.014	0.0008	14.06	3.25
CR_{QR}	**0.075**	**0.022**	**3.42**	**1.40**	**0.034**	**0.011**	**7.86**	**2.11**	**0.015**	**0.0023**	**14.70**	**4.48**
Cp	0.089	0.030	1.68	0.47	0.049	0.003	3.94	0.24	0.020	0.0066	8.40	1.98
AIC	0.454	2.19	3.00	1.65	0.046	0.037	6.82	1.62	0.015	0.0005	10.88	1.36
MDL	0.075	0.015	2.16	0.42	0.043	0.009	4.70	0.95	0.022	0.0067	7.84	2.01

4. Выводы

Предложенные приближения ошибки восстановления выхода на основе SVD и QR разложений близки к истинным значениям аппроксимируемой ошибки. В силу этого предложенные критерии выбора оптимального числа компонент SVD и QR разложений: CR_{SVD} и CR_{QR}, основанные на аппроксимации ошибки восстановления вектора выхода, могут использоваться для определения оптимального числа компонент соответствующих разложений.

Экспериментальное исследование точности решения дискретных некорректных задач с использованием предложенных критериев подтверждает их эффективность – в сравнении с решениями на основе таких критериев как Cp, AIC и MDL решение на основе CR_{SVD} и CR_{QR} демонстрирует наибольшую точность.

Литература

1. Тихонов А.Н. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. – 285 с.

2. Морозов В.А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука, 1987. – 239 с.

3. Hansen P.C. Rank-deficient and discrete ill-posed problems. Numerical aspects of linear inversion. – Philadelphia: SIAM, 1998. – 247 p.

4. Hansen P.C., Truncated SVD solutions to discrete ill-posed problems with ill-determined numerical rank, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 11 (1990), pp. 503-518.

5. G. H. Golub and C. F. Van Loan, Matrix Computations, Third Edition, the Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 1996.

6. Ивахненко А.Г., Степашко В.С. Помехоустойчивость моделирования. – Киев: Наук. думка, 1985. – 216 с.

7. Hansen P.C. Regularization Tools: A Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems // Numer. Algorithms. – 1994. – V.6. – P.1-35.

8. Mallows C.L. Some comments on Cp // Technometrics. – 1973. – V. 15, № 4. – P. 661-675.

9. Akaike H. A new look at the statistical model identification // IEEE Transactions on Automatic Control. – 1974. – V. 19, № 6. – P. 716-723.

10. Hansen M., Yu B. Model selection and minimum description length principle //J. Amer. Statist. Assoc. – 2001. – V. 96. – P. 746-774.