УДК 517.929

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ НА ОСНОВЕ МЕТОДА РАСШИРЕННОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ С РАЗРЕЖЕННОЙ МАТРИЦЕЙ

© 2008 С.Ю. Гоголева, О.В. Зотеева

Самарский государственный аэрокосмический университет

В данной статье рассматривается решение задачи наименьших квадратов. Предлагается преобразование ее к эквивалентной задаче решения расширенной системы линейных уравнений (СЛАУ) с применением соответствующих модификаций прямого проекционного метода (ППМ). Проводится сравнение ППМ и метода нормальных уравнений – сравниваются затраты объема оперативной памяти и количества арифметических операций для обоих методов. Рассматривается использование методов для разреженных матриц общего вида и приводится сравнительная таблица затрат.

Разреженная матрица, расширенная система, прямой проекционный метод, заполнение

Введение

Построение математических моделей многих практических задач приводит к решению СЛАУ с матрицами больших размерностей, причем зачастую большинство элементов этих матриц – нулевые. Наглядный пример этого – решение уравнений с частными производными методом конечных разностей.

При наличии большого количества нулевых элементов очевидна целесообразность хранения только ненулевых элементов, что ведет к сокращению затрат, а именно: объема памяти, количества арифметических операций и, следовательно, общего времени выполнения задачи. Сведение к минимуму выше перечисленных затрат обеспечивает наибольшую эффективность и наименьшую стоимость задачи в целом.

Для решения СЛАУ с разреженной матрицей чаще всего используются как прямые, так и итерационные методы. [1] В данной статье предлагается использовать ППМ и преобразовывать задачу наименьших квадратов к эквивалентной задаче решения расширенной СЛАУ.

Постановка задачи наименьших квадратов

Рассмотрим произвольную СЛАУ (1).

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

где $A \in R^{n\times m}$, $n \geq m$, $rank(A) = m$, $x \in R^m$, $b \in R^n$.

Решение (1) находится как (2):

$$x_* = Arg\min\|Ax - b\|_2^2, \tag{2}$$

где $x_* \in R^m$, $\|\cdot\|$ – евклидова норма вектора.

Метод нормальных уравнений

Задачу наименьших квадратов решают чаще всего методом нормальных уравнений [3].

Метод нормальных уравнений состоит из двух этапах:

- уравнение (1) преобразуется к виду

$$A^T Ax = A^T b, \tag{3}$$

$A^T A = C$, $A^T b = f$, получим

$$Cx = f \tag{4}$$

- производится разложение полученной матрицы C методом Холесского: $C = U^T U$, где U – верхнетреугольная матрица.

Система уравнений $U^T Ux = f$ распадается на две системы:

$$Ux = y,\ U^T y = f,$$

то есть решаем полученную систему (4) методом прямой подстановки и обратной подстановки.

Преимуществом метода является то, что работа ведется не со всей матрицей, а только с ее частью, полученной путем разложения.

Основной недостаток метода нормальных систем – в большинстве случаев происходит заполнение (появление новых ненулевых элементов в матрице коэффициентов), что ведет к дополнительным затратам оперативной памяти и увеличению числа арифметических операций. А также в системе уравнений (3) число обусловленности матрицы A возводится в квадрат.

Прямой проекционный метод

Решение нормальной системы уравнений (3) эквивалентно решению расширенной системы уравнений [4]:

$$\begin{pmatrix} E & A \\ A^T & O \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{5}$$

где E – единичная матрица размера $n\times n$.

Вычислительные формулы ППМ для матриц общего вида без учета структуры имеют вид:

$$P_{i+1}=P_i-\frac{g_{i+1}^{(i)}c_{i+1}^T P_i}{\omega_{i+1}},\ P_0=E \tag{6}$$

$$y_{i+1}=y_i+\frac{g_{i+1}^{(i)}(d_{i+1}-c_{i+1}^T y_i)}{w_{i+1}},\ y_0=0, \tag{7}$$

где $P_i=\left[g_1^{(i)}\ldots g_p^{(i)}\right]\in ¡^{p\times p}$, $p=n+m$, $\omega_{i+1}=c_{i+1}^T g_{i+1}^{(i)}$, $i=0,1\ldots p-1$, c_{i+1}^T – строки матрицы C.

Модификация ППМ для решения задачи наименьших квадратов

Преобразование задачи наименьших квадратов к расширенной СЛАУ с разреженной матрицей приводит к увеличению размерности исходной задачи, а увеличение размерности влечет в свою очередь трудности вычислительного характера. Поэтому предлагается данную систему решать с помощью модификации ППМ.

Благодаря специальной структуре матрицы расширенной СЛАУ и векторов ППМ в расширенной системе из $p=n+m$ уравнений n решаются аналитически. Это означает, что удается заранее вычислить значения первых n векторов и указать структуру векторов на последующих шагах алгоритма.

Предположим, что для главных миноров матрицы C выполняются условия:

$\det\overline{C}_i\neq 0$, $\forall i=1,2,\ldots,p$, $p=n+m$

Обозначим

$v_j^{(i)}=\left(q_j^{(i)},s_j^{(i)}\right)^T$, $y_i=\left(r_i,x_i\right)^T\in ¡^p$,

где $q_j^{(i)}$, $r_i\in ¡^n$, $s_j^{(i)}$, $x_i\in ¡^m$, $i=0,1,\ldots p-2$, $q_k^{(0)}=-a_k$, $s_k^{(0)}=e_k$, $k=0,1,\ldots m$, $y_0=d$.

Полученный вариант алгоритма ППМ для решения задач наименьших квадратов реализуется следующим образом:

$$v_j^{(i+1)}=v_j^{(i)}-\frac{a_{i+1}^T q_j^{(i+1)}}{\tau_{i+1}}v_{i+1}^{(i)}, \tag{8}$$

где $\tau_{i+1}=a_{i+1}^T q_j^{(i+1)}$,

$i=0,1,\ldots m-2$, $j=i+2,i+3,\ldots m$,

$$y_{i+1}=y_i-\frac{a_{i+1}^T r_i}{\tau_{i+1}}\nu_{i+1}^{(i)} \tag{9}$$

где $i=0,1,\ldots m-1$.

Рассмотренные формулы применительно к методу расширенных систем позволяют избежать ненужных n первых шагов, что существенно сокращает число операций, затрачиваемых на решение задачи, а также объем оперативной памяти, затрачиваемый на промежуточные действия.

Применения ППМ к решению задач с разреженными матрицами

На основе разработанного метода проводились вычислительные эксперименты решения задач наименьших квадратов с разреженными матрицами.

Рассмотрим разреженную матрицу $A\in R^{m\times n}$, у которой ненулевые элементы определены следующим образом:

при $i\leq n$ $a_{ij}\neq 0$, *если* $i\leq j$,

при $i>n$ $a_{im}\neq 0$.

На I этапе метода нормальных уравнений получим целиком заполненную матрицу С, а при решении задачи ППМ для расширенной матрицы, заполнение будет в 2 раза меньше.

В таблице 1 сравниваются объемы затрат памяти и число арифметических операций двух рассмотренных в работе методов.

Мы видим, что заполнение для таких матриц в методе расширенных систем в 2 раза меньше, чем в методе нормальных уравнений. Таким образом, можно сделать вывод, что метод расширенной системы уравнений гораздо эффективнее метода нормальных уравнений.

Таблица 1

Метод	Число арифметических операций	Оперативная память

Метод нормальных уравнений	$\frac{m^3}{3}+2nm$	$\frac{m+1}{2}m$
ППМ для решения расш СЛАУ	$\frac{m^3}{3}+\frac{3}{2}nm^2-m^2$	$\frac{m+1}{4}m$

Заключение

В статье был рассмотрен прямой проекционный метод применительно к задаче наименьших квадратов.

Его модификация для данной задачи с учетом разреженности расширенной системы позволяет существенно сократить количество шагов алгоритма, а также уменьшить объемы затрачиваемой оперативной памяти и арифметических операций. Этот факт существенно упрощает решение задачи и уменьшает время поиска ее решения, что является довольно существенным преимуществом.

Сравнение прямого проекционного метода с методом нормальных уравнений показало, что ППМ требует для решения задачи объемы затрат, в разы меньше, чем метод нормальных уравнений.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта для молодых исследователей НОЦ №14 “Математические основы дифракционной оптики и обработки изображений”.

Библиографический список

1. **Голуб, Дж., Ван Лоун, Ч.** Матричные вычисления [текст] / Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун – М.: Мир, 1999. – 548 с.
2. **Жданов А.И.** Прямой последовательный метод решения систем линейных алгебраических уравнений [текст] / А.И. Жданов // Докл. РАН. – 1997. – Т. 356, N 4. – С. 442-444.
3. **Лоусон Ч.** Численное решение задач методом наименьших квадратов. [текст] / Ч. Лоусон, Р.Хенсон – М.: Наука, 1986. – 230 с.
4. **Bjork A**. Handbook of numerical analysis. V. 1. [текст] / A. Bjork – North-Holland: Elsevier. 1990.

Сведения об авторах

Гоголева Софья Юрьевна, Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева, доцент кафедры прикладной математики, e-mail: gogoleva_s@mail.ru. Область научных интересов – матричные вычисления.

Зотеева Ольга Владимировна, Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева, студентка, e-mail: zoteeva_o@mail.ru . Область научных интересов – математическое моделирование.