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 $P_i = \left[g_1^{(i)} ... g_p^{(i)}\right] \in \mathbb{R}^{p\times p}$, $p = n+m$, $\omega_{i+1} = c_{i+1}^T g_{i+1}^{(i)}$, $i = 0,1...p-1$, 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:

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

Обозначим

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

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

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

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

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

где $i = 0,1,...m-1$.

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:

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

$при\ i > n\ a_{im} \neq 0.$

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.

References

1. **Golub, Dg., Van Lown, Ch.** Matrix Calculation / Dg. Golub, , Ch. Van Lown, – Moscow: “Mir” (Science), 1999. – 548 p. – [in Russian].

2. **Gdanov, A.I.** Direct consecutive method of the decision of the linear algebraic equations systems / A.I. Gdanov // Reports the Russian Academy of Sciences, 1997. – V. 356, N 4. – P. 442-444. – [in Russian].

3. **Louson, Ch.** The numerical decision of problems by least squares method / Ch. Louson, R. Henson – Moscow: “Nauka” (Science). – 1986. – 230 p. – [in Russian].

4. **Bjork A**. Handbook of numerical analysis. V. 1. North-Holland: Elsevier. 1990.

SOLVING THE LEAST SQUARES PROBLEM USING THE METHOD OF AN EXTENDED SET OF EQUATIONS WITH SPARSE MATRIX

 S.Yu. Gogoleva, O.V. Zoteeva

Samara State Aerospace University

The solution of the least squares problem is discussed. The proper least squares problem is formulated and solved using the straightforward projection method (SPM). We propose that it should be reduced to an equivalent problem of solving an extended set of linear equations (ESLE) using the corresponding SPM's modifications. We compare the SPM and the normal equations method in terms of the RAM space utilized and the number of arithmetic operations needed. The use of the methods for the general sparse matrix is discussed and a table of comparative computational efforts is given.

Sparse matrix, extended set, direct projection method, completing

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.

Gogoleva Sofja Yurjevna, S.P. Korolyov Samara State Aerospace University, associate professor, e-mail: gogoleva_s@mail.ru. Area of research: matrix calculation.

Zoteeva Olga Vladimirovna, S.P. Korolyov Samara State Aerospace University, student, e-mail: zoteeva_o@mail.ru . Area of research: mathematical modeling.