Метод расширенных регуляризованных нормальных уравнений для систем с разреженными матрицами

С.Ю. Гоголева

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, 443086, Московское шоссе, 34, Самара, Россия

Аннотация

Предлагается новый подход для решения некорректных задач, который позволяет эффективно вычислять нормальные псевдорешения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений и находить приемлемое по точности решение с минимальным заполнением разреженных матриц.

Ключевые слова: метод регуляризации; расширенная система; разреженные матрицы; заполнение, выбор ведущего элемента

1. Введение

Многие практические задачи нахождения решения по имеющимся данным являются типичными представителями некорректных задач. Следует отметить, что такие задачи обладают рядом неприятных с точки зрения обработки свойств и для их решения стандартные методы неприменимы**.** Благодаря трудам академика А.Н. Тихонова разработана общая стратегия построения устойчивых методов решения некорректных (неустойчивых задач) в операторной форме [1]. В ее основе лежит понятие регуляризирующего оператора или, что тоже, регуляризирующего алгоритма. Реализуя этот алгоритм, приходится решать систему нормальных регуляризованных систем линейных алгебраических уравнений. Эта система часто является плохо обусловленной. Необходимо правильно подобрать параметр регуляризации, чтобы снизить число обусловленности. Также важно выбрать метод решения, который был бы численно устойчивым. Часто некорректные задачи приводят и к системам с большими и разреженными матрицами коэффициентов, в которых большинство элементов равны нулю. При хранении и преобразовании таких матриц в компьютере бывает полезно, а часто и необходимо, использовать специальные алгоритмы и структуры данных, которые учитывают разреженную структуру матрицы. Операции и алгоритмы, применяемые для работы с обычными, плотными матрицами, применительно к большим разреженным матрицам работают относительно медленно и требуют значительных объёмов памяти. Можно значительно сэкономить память, уменьшить время решения поставленной задачи, если хранить и обрабатывать только ненулевые элементы.

Серьезную проблему при хранении и обработке разреженных матриц представляет заполнение, т.е. возникновение новых ненулевых элементов в процессе вычисления. Хороший алгоритм для разреженных матриц пытается сохранить разреженность.

В данной работе предлагается подход, с использованием специальной формы расширенных регуляризованных нормальных уравнений. Этот подход позволяет решить систему уравнений при существенно меньших значениях параметра регуляризации, а также снизить погрешности решения и уменьшить заполнение.

2. Постановка задачи

Рассмотрим систему алгебраических уравнений

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

где матрица $A \in R^{n\times m}$, $b \in R^n$.

Регуляризованное решение системы (1) находится как $x = \mathrm{Argmin}_{x\in R^m}\{\|Ax - b\|_2^2 + \alpha^2\|x\|_2^2\}$, которое является эквивалентным решению смещенной нормальной системы

$$(A^T A + \alpha^2 E)x = A^T b, \tag{2}$$

где α^2–параметр регуляризации.

Число обусловленности системы (3) находится как

$$cond_2(A^T A + \alpha^2 E) = \frac{\sigma_1^2+\alpha^2}{\sigma_m^2+\alpha^2},$$

где $\sigma_1 \geq \sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_m$ - сингулярные числа матрицы А.

Так как матрица системы симметричная, то, в случае хорошей обусловленности, она решается методом Холесского. Система (2) часто является плохо обусловленной, тогда применяют методы, основанные на ортогональных преобразованиях, но они ведут к значительному росту числа арифметических операций. Поэтому вместо системы (2) в работе предложено рассмотреть подход на основе расширенной регуляризованной системы уравнений.

3. Метод расширенной регуляризованной нормальной системы с выбором ведущего элемента.

Вместо системы (3) в работе предлагается рассмотреть эквивалентную ей систему алгебраических уравнений [2]:

$$\begin{pmatrix} E & A \\ A^T & -\alpha^2 E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} r \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

где $r = b - Ax$– вектор невязки.

Число обусловленности матрицы системы (3) незначительно меньше числа обусловленности матрицы нормальной системы уравнений (2). Поэтому с целью снижения числа обусловленности в систему (3) вводится параметр $\beta > 0$:

$$\begin{pmatrix} \beta E & A \\ A^T & -\frac{\alpha^2 E}{\beta} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{r}{\beta} \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \leftrightarrow C(\beta) = d. \tag{4}$$

Регуляризованная нормальная система эквивалентна регуляризованной расширенной системе. Минимум числа обусловленности матрицы (4) достигается при $\beta_* = \sqrt{\frac{\sigma_m^2}{2} + \alpha^2}$, где σ_m – минимальное сингулярное число матрицы A.

Даже при выборе $\beta_{**} = \sqrt{\alpha^2}$ спектральное число обусловленности матрицы системы (4) будет $\sqrt{\frac{\sigma_1^2+\alpha^2}{\alpha^2}}$. Таким образом, рассматриваемый подход позволяет повысить численную устойчивость рассматриваемой задачи и снизить погрешности при нахождении решения системы уравнений (1).

Преобразование к расширенной системе уравнений приводит к увеличению размерности исходной задачи. Использование известных методов для ее решения приводит к вычислительным трудностям. Поэтому предлагается рассмотреть модификацию прямого проекционного метода [4, 6] с выбором ведущего элемента, которая позволяет сократить число арифметических операций для получения решения расширенной систему уравнений.

Благодаря специальной структуре матрицы расширенной СЛАУ и векторов прямого проекционного метода 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.

Для разреженных систем с целью уменьшения заполнения предлагается применить в прямом проекционном методе стратегию Марковица. [3]

Пусть производится k-й шаг прямого проекционного метода. Число $r(i,k)$обозначает число ненулевых элементов в i-ой строке активной подматрицы C_k, а $s(j,k)$ – число ненулевых элементов в j-ом столбце C_k. Ценой Марковица элемента $c_{ij}^{(k)}$называется число

$$M_{ijk} = (r(i,k) - 1)(s(j,k) - 1), \left(i,j = \overline{1 \dots k}\right).$$

Цена M_{ijk} равна числу элементов, изменяющих значение при переходе к следующему шагу разложения, если главным выбран элемент $c_{ij}^{(k)}$,она является верхней границей для размера заполнения, возникающего при выборе $c_{ij}^{(k)}$. Положим

$$M_k = \min\left\{M_{ijk} \middle| \, i,j = \overline{k \dots n}\right\}.$$

Стратегия Марковица состоит в том, что на каждом шаге k за главный принимается элемент с ценой Марковица M_k. Это не обязательно означает, что будет получен минимум заполнения на k-ом шаге; однако находить цены Марковица значительно проще, чем вычислять для каждого элемента C_k величину порождаемого им заполнения.

Для обеспечения численной устойчивости, на роль ведущего элемента будем выбирать элементы активной подматрицы, удовлетворяющие условию

$$\left|c_{ij}^{(k)}\right| u \geq \max_{k \leq x \leq m, k \leq y \leq n} \left|c_{xy}^{(k)}\right|,$$

Где рекомендуется выбирать параметр $u > 1$.

В таблице 1 приведен список рассмотренных матриц из коллекции Harwell-BoeingCollection вместе с их характеристиками: размер, число ненулевых элементов и число обусловленности. [5]

Таблица 1 . Характеристики тестируемых матриц

Название	Размерность	Кол-во ненулевых элементов	Число обусловленности
ash958	958×292	1916	2,1903E+6
flower_8_1	628×513	1538	7,0295E+15
ch7-8-b1	1176×56	2352	4,7861E+14
mk11-b1	990×55	1980	9,8787E+7
well1033	1033×320	4732	1,6613E+2
photogrammetry	1388×390	11816	4.3591E+08
ash608	608×188	1216	1,7661E+6

Приведем решение системы уравнений (1) с использованием плохо обусловленной матрицы photogrammetry.

Результаты численного исследования приведены в таблице 2.

Таблица 2. Результаты работы методов для матрицы photogrammetry

Метод	Матрица системы	Выбор вед-го эл-та	Отн-ая погрешность	Время выполнения, с
Метод Холесского	$A^T A$	-	2,8400E-8	20,1600
Прямой проекционный метод	C	по строке	3,7416E-11	42,3949
		стратегия Марковица	3,4203E-12	50,0140
QR разложение	A	-	4,6837E-12	78,6559

Из таблицы 2 мы видим, что прямой проекционный метод для расширенной системы с выбором ведущего элемента и использованием стратегии Марковица дает по точности такие же результаты, как и QR-метод, но требует меньшего время выполнения.

4. Заключение

Рассмотрен новый подход для решения некорректных задач. Данный подход позволяет эффективно вычислять нормальные псевдорешения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений и находить приемлемое по точности решение. 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. Стратегия Марковица в рассмотренной модификации позволяет уменьшить заполнение разреженной матрицы. Этот факт существенно упрощает решение задачи и уменьшает время поиска ее решения, что является довольно существенным преимуществом.

Литература

[1] Тихонов, А.Н., Гончарский, А.В., Степанов, В.В., Ягола, А.Г. Численные методы решения некорректных задач.- М.: Наука, 1990. -229 с.

[2] Жданов, А.И. Метод решения регуляризованных нормальных уравнений //Журнал вычислительной математики и математической физики. - 2012. Т.52, № 2. С. 205-208.

[3] Златев, З., Эстербю О. Прямые методы для разреженных матриц: Пер. с англ.- М.: Мир 1987. - 120 с.

[4] Жданов, А.И. Прямой последовательный метод решения систем линейных алгебраических уравнений //Докл. РАН. - 1997. Т. 356. No 4. С. 442-444.

[5] Harwell-BoeingCollection. [Электронныйресурс] // MatrixMarket: [сайт]. [1998]. URL: http://math.nist.gov/MatrixMarket/data/Harwell-Boeing/ (5.02.16).

[6] Гоголева, С.Ю., Зотеева, О.В. Решение задачи наименьших квадратов на основе метода расширенной системы уравнений с разреженной матрицей // Вестник СГАУ. - 2008. №2. С. 175-178.