Рассматривается алгоритм трехэтапной регуляризации для задачи взвешенных наименьших квадратов с симметричной положительно полуопределенной матрицей. Получены оценки погрешности метода трехступенчатой регуляризации для нахождения взвешенного нормального псевдорешения задачи WLS. Представлено выражения для параметра регуляризации, гарантирующего заданную точность приближения к взвешенному нормальному псевдорешению.

УДК 519.6

Е.А. НИКОЛАЕВСКАЯ, А.Н. ХИМИЧ, М.Ф. ЯКОВЛЕВ

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ВЗВЕШЕННЫХ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ С СИММЕТРИЧНОЙ ПОЛОЖИТЕЛЬНО ПОЛУОПРЕДЕЛЕННОЙ МАТРИЦЕЙ

Введение. Много прикладных задач сводится к задачам наименьших квадратов и взвешенных наименьших квадратов [1]. Значительно меньше работ посвящено теории возмущений решения задачи взвешенных наименьших квадратов.

В работе [2] предложен алгоритм двухэтапной регуляризации решения СЛАУ. Для получения нормального псевдорешения с заданной точностью по этому алгоритму решена проблема выбора параметра регуляризации [3]. Алгоритм трехэтапной регуляризации используется в [4] для исследования и решения первой основной задачи теории упругости.

В данной работе рассматривается метод трёхэтапной регуляризации для задачи взвешенных наименьших квадратов.

1. **Постановка задачи.** Рассмотрим задачу взвешенных наименьших квадратов с положительно определенными весами M и M^{-1}

$$\min_{x\in S}\|x\|_{M^{-1}},\ S=\{x\mid \|Ax-b\|_M=\min\},\qquad (1)$$

где $A\in R^{m\times m}$ – симметричная положительно полуопределенная матрица ($A=A^T$, $A\geq 0$) ранга k, $M\in R^{m\times m}$ – симметричная положительно определенная матрица весов, $b\in R^m$.

Рассмотрим возмущенную задачу

$$\min_{x\in S}\|\bar{x}\|_{M^{-1}},\ S=\left\{\bar{x}\mid \left\|A\bar{x}-\left(b+\Delta b\right)\right\|_M=\min\right\},\qquad (2)$$

где

$$\overline{b} = b + \Delta b, \ \overline{x} = x + \Delta x. \tag{3}$$

Положим, что для погрешности элементов правой части выполняется следующее соотношение:

$$\|\Delta b\|_M \le \varepsilon_b \|b\|_M. \tag{4}$$

2. Алгоритм трёхэтапной схемы регуляризации для решения задачи взвешенных наименьших квадратов. Представим норму невязки в виде

$$\|Ax - b\|_M = \left\| M^{\frac{1}{2}} A M^{\frac{1}{2}} M^{-\frac{1}{2}} x - M^{\frac{1}{2}} b \right\| = \|Cy - d\|,$$

где $C = M^{\frac{1}{2}} A M^{\frac{1}{2}}$, $d = M^{\frac{1}{2}} b$, $y = M^{-\frac{1}{2}} x$.

Таким образом приходим к задаче

$$\min_{y \in S} \|y\|, \ S = \{x \mid \|Cy - d\| = \min\}.$$

Пусть имеем в общем случае несовместную систему линейных алгебраических уравнений

$$Cy \cong d \tag{5}$$

и возмущенную задачу

$$C\overline{y} \cong \overline{d}, \tag{6}$$

где $\overline{d} = M^{\frac{1}{2}} \overline{b}$, $\overline{y} = M^{-\frac{1}{2}} \overline{x}$. Обозначим $\hat{S} = \operatorname{Im} C$, $\tilde{S} = \ker C$ – соответственно образ и ядро матрицы C. Тогда любой вектор $x \in R^m$ можно представить в виде $x = \hat{x} + \tilde{x}$, $\hat{x} \in \hat{S}$, $\tilde{x} \in \tilde{S}$.

Учитывая введенные обозначения для задач (5), (6) можна записать

$$C\hat{y} = \hat{d}, \tag{7}$$

$$C\hat{\overline{y}} = \hat{\overline{d}}, \tag{8}$$

где $\hat{y}$, $\hat{\overline{y}}$ – нормальные псевдорешения задач (5), (6) соответственно.

Рассмотрим следующий алгоритм решения задачи. При произвольно выбранном параметре α (например, α = 0,01) выполняются следующие шаги алгоритма:

$$\left(C+\alpha E\right)z=\bar{d}\,, \tag{9}$$

$$\left(C+\alpha E\right)u=Cz\,, \tag{10}$$

$$u_H=\frac{u}{\max\limits_i\left|u_i\right|}\,, \tag{11}$$

$$\left(C+\alpha E\right)w=u_H\,, \tag{12}$$

$$\mu=\max_i\left|w_i\right|, \tag{13}$$

$$\alpha_1\le\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon}{\mu}-\left\|C\right\|\varepsilon_b\right). \tag{14}$$

Решение *u* является приближением к нормальному псевдорешению задачи (5). После нахождения *u,* проверяется достигнута ли точность ε. Если точность не достигнута, выполняются этапы (11)–(14) для определения значения параметра α_1, обеспечивающего достижение заданной точности. Данные четыре этапа алгоритма реализуют второй шаг итерационного степенного метода определения максимального по модулю собственного значения матрицы $\left(C+\alpha E\right)^{-1}$, то μ в (13) – приближение к собственному значению $\left(\lambda_k+\alpha\right)^{-1}$ [5].

После нахождения приближения к псевдорешению проверяется выполнение неравенства

$$\left(2\alpha+\left\|A\right\|_{MM^{-1}}\varepsilon_b\right)\mu\le\varepsilon\,. \tag{15}$$

Если неравенство выполняется, то необходимая точность ε достигнута при заданном произвольном α. Если неравенство не выполняется, то, как вышеописано, по формуле (14) определяется новое значение α_1, которое должно обеспечить необходимую точность, и по формулам (9), (10) вычисляется приближение к взвешенному нормальному псевдорешению.

В работе [2] установлена сходимость *u* к нормальному псевдорешению задачи (5) при $\alpha\to0$.

Заметим, что система (9) эквивалентна системе двух уравнений:

$$\left(C+\alpha E\right)\hat{z}=\hat{\bar{d}}=\hat{d}+\Delta\,\hat{d}\,, \tag{16}$$

$$\alpha\tilde{z}=\tilde{\bar{d}}=\tilde{d}+\Delta\,\tilde{d}\,,$$

а уравнение (10) в силу $Cz=C\hat{z}+C\tilde{z}=C\hat{z}$ можно записать так

$$\left(C+\alpha E\right)u=C\hat{z}\,. \tag{17}$$

Приближение к взвешенному нормальному псевдорешению задачи (1) вычисляется по формуле

$$v=M^{-\frac{1}{2}}u\,.$$

Оценим погрешность взвешенного нормального псевдорешения задачи (1).

Лемма 1. Для погрешности взвешенного нормального псевдорешения задачи (1) имеет место оценка

$$\frac{\left\|\hat{x}-\hat{\bar{x}}\right\|_{M^{-1}}}{\left\|\hat{x}\right\|_{M^{-1}}}\le\left\|A\right\|_{MM^{-1}}\left\|A^{+}_{MM^{-1}}\right\|_{MM^{-1}}\frac{\left\|\Delta\hat{b}\right\|_{M}}{\left\|\hat{b}\right\|_{M}},$$

где $A^{+}_{MM^{-1}}$ – взвешенная псевдообратная матрица Мура – Пенроуза, $\Delta\hat{b}=\hat{\bar{b}}-\hat{b}$.

Задачу (2) будем считать хорошо обусловленной, если свойства задачи и погрешность исходных данных позволяют получить заданную точность ε решения, т. е.

$$\left\|A\right\|_{MM^{-1}}\left\|A^{+}_{MM^{-1}}\right\|_{MM^{-1}}\frac{\left\|\Delta\hat{b}\right\|_{M}}{\left\|\hat{b}\right\|_{M}}\le\varepsilon\,. \tag{18}$$

Теорема. Для погрешности приближения к взвешенному нормальному псевдорешению имеет место следующая оценка:

$$\frac{\left\|v-\hat{x}\right\|_{M^{-1}}}{\left\|\hat{x}\right\|_{M^{-1}}}\le\frac{\alpha}{\mu_k+\alpha}\left(1+\frac{\mu_m}{\mu_k+\alpha}\right)+\frac{\mu_m}{\mu_k+\alpha}\left(1+\frac{\alpha}{\mu_k+\alpha}\right)\frac{\left\|\Delta\hat{b}\right\|_{M}}{\left\|\hat{b}\right\|_{M}}, \tag{19}$$

где μ_k – наименьшее отличное от нуля собственное значение матрицы $C = M^{\frac{1}{2}} A M^{\frac{1}{2}}$ (или его оценка снизу), μ_m – её максимальное собственное значение (или его оценка сверху).

Доказательство леммы и теоремы легко получить из [3], используя обозначения $C = M^{\frac{1}{2}} A M^{\frac{1}{2}}$, $\hat{d} = M^{\frac{1}{2}} \hat{b}$, $\hat{y} = M^{-\frac{1}{2}} \hat{x}$, $u = M^{-\frac{1}{2}} v$ и взвешенные векторные нормы [6]:

$$\|u - \hat{y}\| = \left\| M^{-\frac{1}{2}} v - M^{-\frac{1}{2}} \hat{x} \right\| = \|v - \hat{x}\|_{M^{-1}},$$

$$\|\hat{d}\| = \left\| M^{\frac{1}{2}} \hat{b} \right\| = \|\hat{b}\|_M .$$

Для достижения необходимой точности параметр α выберем из условия

$$\frac{\|v - \hat{x}\|_{M^{-1}}}{\|\hat{x}\|_{M^{-1}}} \le \varepsilon .$$

Тогда с точностью до малых второго порядка можно получить оценку

$$\alpha \le \sqrt{\frac{\mu_k (\varepsilon \mu_k - \mu_m \varepsilon_b)}{1 - \varepsilon + \mu_k (1 - 2\varepsilon) + \mu_m (1 + 2\varepsilon_b)}}, \tag{20}$$

где $\varepsilon_b = \dfrac{\|\Delta \hat{b}\|_M}{\|\hat{b}\|_M}$.

В случае точно заданных исходных данных оценка (13) преобразуется к виду

$$\frac{\|v - \hat{x}\|_{M^{-1}}}{\|\hat{x}\|_{M^{-1}}} \le \frac{\alpha}{\mu_k + \alpha} \left(1 + \frac{\mu_m}{\mu_k + \alpha} \right),$$

а для параметра α справедлива оценка

$$\alpha \le \sqrt{\frac{\mu_k^2 \varepsilon}{1-\varepsilon+\mu_k(1-2\varepsilon)+\mu_m}}\,, \qquad (21)$$

которая получена с точностью до малых второго порядка.

Таким образом, получено значение параметра α, при использовании двух шагов вышеприведенного алгоритма.

Для получения достоверного решения системы (5) необходимо, чтобы исходные данные удовлетворяли условию (18) (задача хорошо обусловлена). Выбор параметра α, который удовлетворяет (21), будет гарантировать заданную точность приближения к взвешенному нормальному псевдорешению.

Заключение. Трехэтапная схема регуляризации является альтернативой методу, основанном на алгоритме взвешенного сингулярного разложения [7]. Преимуществом трехэтапной схемы регуляризации – меньшее количество арифметических операций.

Достоинства алгоритма трехэтапной регуляризации усиливаются для матриц специальной структуры, например, ленточных. При использовании алгоритма взвешенного сингулярного разложения не удается существенно уменьшить количество арифметических операций учитывая необходимость вычисления всех сингулярных векторов.

О.А. Ніколаєвська, *О.М. Хіміч*, *М.Ф. Яковлев*

РОЗВ'ЯЗОК ЗАДАЧІ ЗВАЖЕНИХ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ
ІЗ СИМЕТРИЧНОЮ ДОДАТНО НАПІВВИЗНАЧЕНОЮ МАТРИЦЕЮ

Розглядається алгоритм триетапної регуляризації для задачі зважених найменших квадратів із симетричною додатно напіввизначеною матрицею. Отримано оцінки похибки методу триетапної регуляризації для знаходження зваженого нормального псевдорозв'язку задачі WLS. Представлено вирази для параметру регуляризації, які гарантують задану точність зваженого нормального псевдорозв'язку.

E.A. Nikolevskaya, *A.N. Khimich*, *M.F. Yakovlev*

SOLUTION TO THE WEIGHTED LEAST-SQUARES PROBLEM WITH A SYMMETRIC
POSITIVELY SEMI-DEFINITE MATRIX

The algorithm of three-stage regularization for weighed least-squares problem with a symmetric positively semi-definite matrix is considered. The error estimations of the three-stage regularization method for finding the weighed normal pseudosolution of WLS problem are obtained. Expressions for the parameter of regularization, which guarantee the prescribed accuracy of the weighed normal pseudosolution, are presented.

1. *Ben Israel A., Greville T.N.E.* Generalized Inverse: Theory and Applications. – New York: Springer Verlag, 2003. – 400 p.
2. *Морозов В.А.* Методы регуляризации неустойчивых задач. – М.: Изд-во Московского ун-та, 1987. – 217 с.
3. *Химич А.Н., Яковлев М.Ф.* О решении систем с матрицами неполного ранга // Компьютерная математика. – 2003. – № 1. – С. 1–15.
4. *Попов А.В., Химич А.Н.* Исследование и решение первой основной задачи теории упругости // Компьютерная математика. – 2003. – № 2. – С. 105–114.
5. *Уилкинсон Дж., Райнш К.* Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. – М.: Машиностроение, 1976. – 389 с.
6. *Химич А.Н., Николаевская Е.А.* Анализ достоверности компьютерных решений систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданными исходными данными // Кибернетика и системный анализ. – 2008. – № 6. – С. 83–95.
7. *Химич А.Н., Николаевская Е.А.* Решение задачи взвешенных наименьших квадратов с приближенно заданными исходными данными // Теорія оптимальних рішень. – 2008. – № 7. – С. 132–139.

Получено 15.12.2008

Об авторах:

Николаевская Елена Анатольевна,
младший научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,
e-mail elena_nea@ukr.net

Химич Александр Николаевич,
доктор физико-математических наук, заведующий отделом
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,
e-mail : dept150@insyg.kiev.ua

Яковлев Михаил Федорович,
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины.