ТЕОРІЯ ОПТИМАЛЬНИХ РІШЕНЬ

УДК 519.6

О.В. ПОПОВ

ПРО ЕФЕКТИВНИЙ МЕТОД РОЗВ'ЯЗУВАННЯ НЕКОРЕКТНИХ ЗАДАЧ З РОЗРІДЖЕНИМИ МАТРИЦЯМИ

Для знаходження наближень з наперед заданою точністю до нормального узагальненого або до зваженого нормального узагальненого розв'язків системи лінійних алгебраїчних рівнянь з додатно напіввизначеною симетричною розрідженою матрицею. Запропоновано метод триетапної регуляризації.

© О.В. Попов, 2013

Вступ. Математичне моделювання та пов'язаний з ним комп'ютерний експеримент нині є одним з основних засобів вивчення різноманітних явищ природи, процесів у суспільстві, економіці, науці, техніці тощо. При математичному моделюванні в різних галузях часто виникають розрахункові (дискретні або напівдискретні) задачі з надвеликою кількістю рівнянь, яка може перевищувати 10^7, причому дані цих задач мають *розріджену структуру*. У багатьох випадках розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) складає основу дослідження математичної моделі. Причому, як правило, розв'язування СЛАР або пов'язаних із СЛАР задач займає значну частину (50 % і більше) часу розв'язування всієї задачі загалом. Наприклад, СЛАР виникають при дискретизації крайових задач проекційно-різницевим методом (скінченних різниць, скінченних елементів).

Матриці таких СЛАР мають розріджену структуру, тобто кількість ненульових елементів матриці складає kn, де n – порядок матриці, а $k \ll n$, а сама структура визначається нумерацією невідомих задачі.

У деяких випадках матриця СЛАР виявляється напіввизначеною. Такі СЛАР виникають, наприклад, у результаті дискретизації при розрахунку міцності незакріплених конструкцій. СЛАР з напіввизначеною матрицею мають єдиний розв'язок на підпросторі – нормальний узагальнений розв'язок або нормальний псевдорозв'язок, який можна знайти методом найменших квадратів або зважених найменших квадратів, який дозволяє врахувати «вагу» окремих невідомих задачі. Через те, що дані прикладних моделей задаються з похибками, можуть змінитися властивості СЛАР, що розв'язуються. Наприклад, додатно напіввизначена матриця може стати додатно визначеною або навпаки знаконевизначеною. Тому є актуальним отримання достовірного нормального узагальненого розв'язку такої СЛАР.

В роботах [1, 2] запропоновано метод триетапної регуляризації для отримання наближення до нормального узагальненого розв'язку СЛАР з наперед заданою точністю. Цей метод ефективно реалізується на сучасних високопродуктивних комп'ютерах, у тому числі з паралельною організацією обчислень. У даній роботі цей метод поширюється на знаходження зваженого нормального псевдорозв'язку СЛАР.

Постановки задач. Розглянемо систему лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) з розрідженою симетричною додатно напіввизначеною матрицею $A = A^T, A \geq 0$ порядку n і рангу k

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

Такі СЛАР виникають, зокрема, при розв'язуванні методом скінченних елементів задач розрахунку міцності конструкцій, якщо на границі задано напруги (сили).

Задача (1) має розв'язок на підпросторі – узагальнений розв'язок у значенні найменших квадратів або псевдорозв'язок – будь-який вектор x_0, для якого евклідова норма нев'язки досягає найменшого значення:

$$\min_x \|Ax - b\| = \|Ax_0 - b\|. \tag{2}$$

Розв'язок $x_н$, який має найменшу евклідову норму

$$\min_{x_0} \|x\| = \|x_н\| \tag{3}$$

є єдиним і називається нормальним узагальненим розв'язком або *нормальним псевдорозв'язком*.

Поряд з задачею (2), (3) доцільно розглянути задачу зважених найменших квадратів з симетричними додатно визначеними матрицями-вагами $M = M^T$ та M^{-1}. У цьому випадку зваженим узагальненим розв'язком у значенні найменших квадратів або зваженим псевдорозв'язком називається будь-який вектор x_0, для якого зважена норма нев'язки досягає найменшого значення:

$$\min_x \|Ax - b\|_{M^{-1}} = \|Ax_0 - b\|_{M^{-1}}, \tag{4}$$

де $\|y\|_K = (y^{\mathrm{T}}Ky)^{½}$. Розглядатимемо випадок, коли M – розріджена матриця, множина ненульових елементів (структура) якої збігається з множиною ненульових елементів матриці A або є її підмножиною. А розв'язок $x_н$, який має найменшу зважену норму

$$\|x_н\|_M = \min_{x_0}\|x\|_M \tag{5}$$

називається зваженим нормальним узагальненим розв'язком або *зваженим нормальним псевдорозв'язком*.

Розглянемо також збурену СЛАР

$$Ax = \bar{b}, \tag{6}$$

де $\bar{b} = b + \Delta b$ та

$$\|\Delta b\| \le \varepsilon_b \|b\| \text{ або } \|\Delta b\|_{M^{-1}} \le \varepsilon_b \|b\|_{M^{-1}}. \tag{7}$$

Розв'язування задач. Задачу зважених найменших квадратів (4), (5) у випадку симетричної додатно визначеної матриці M можна досить просто звести до задачі (2), (3) з іншими матрицею та правою частиною. Наприклад, наступним чином.

Враховуючи, що M симетрична додатно визначена матриця, існує її розвинення $L_M L_M^T = M$. Виходячи з того, що

$$\|Ax - b\|_{M^{-1}} = \left\|L_M^{-1} A L_M^{-T} L_M^T x - L_M^{-1} b\right\| \equiv \|Cy - d\|, \quad \|x\|_M = \left\|L_M^T x\right\| \equiv \|y\|,$$

де $C = L_M^{-1} A L_M^{-T}$, $d = L_M^{-1} b$, $y = L_M^T x$, замість задачі (4), (5) отримаємо задачу найменших квадратів виду (2), (3) з симетричною напіввизначеною матрицею C та правою частиною d. Але матриця C зберігає розріджену структуру матриці A тільки за умови, що матриця M – діагональна. В інших випадках наповненість матриці C збільшується і в загальному випадку її слід вважати щільною.

Зауважимо також, що для збуреної СЛАР (6), (7), позначаючи $\bar{d} = L_M^{-1}\bar{b}$, маємо задачу

$$Cy = \bar{d}, \quad \left\|\bar{d} - d\right\| \le \varepsilon_b \|d\|. \tag{8}$$

Нормальний узагальнений розв'язок задачі (1), тобто розв'язок задачі найменших квадратів (2), (3) з симетричною напіввизначеною матрицею можна обчислити, використовуючи сингулярне розвинення матриці, яке для симетричних матриць збігається з розвиненням за власними векторами $A = U\Lambda U^T$ (Λ – діагональна матриця власних значень). Проте матриця власних векторів U є щільною матрицею загального вигляду, яка не зберігає розріджену структуру (наприклад, стрічкову) матриці СЛАР A. Тому для таких випадків, як правило, використовуються різні методи регуляризації.

Для розв'язування задачі (2), (3) в [3] запропоновано метод двоетапної регуляризації. В роботі [1] запропоновано метод триетапної регуляризації, в якому розв'язано проблему вибору параметра регуляризації, який дозволяє обчислити наближення до узагальненого розв'язку з наперед заданою точністю.

Наближення до нормального псевдорозв'язку u отримуємо, послідовно розв'язуючи дві СЛАР (при довільно вибраному параметрі $\alpha > 0$)

$$(A + \alpha I)\, z = b_k, \quad (A + \alpha I)\, u = Az; \tag{9}$$

Точність отриманого наближення оцінюється величиною [1]

$$\|x-u\|/\|x\| \le \delta = (2\alpha + \|A\|\varepsilon_b)\mu\,, \tag{10}$$

де μ – максимальне власне значення матриці $(A+\alpha I)^{-1}$. Для обчислення наближення до μ виконуємо один крок степеневого методу, тобто розв'язуємо СЛАР $(A+\alpha I)w = u\left(\max\limits_i |u_i|\right)^{-1}$ та знаходимо $\mu \approx \max\limits_i |w_i|$.

Якщо виконується нерівність $\delta \le \varepsilon$, то необхідна точність ε досягнута при вибраному значенні α. Якщо нерівність не виконується, то за формулою $\alpha_1 \le \frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon}{\mu} - \|A\|\varepsilon_b\right)$ визначається нове значення зсуву і розв'язуються системи (9) з матрицею $A + \alpha_1 I$ – обчислюється нове наближення u, яке забезпечує необхідну точність ε нормального псевдорозв'язку.

Даний метод можна використати для обчислення наближення до нормального узагальненого розв'язку задачі (8), за яким можна знайти наближення до зваженого нормального псевдорозв'язку задачі (6), (7). Але такий підхід вимагає обчислення в явному вигляді матриці C, яка може втратити розріджену структуру, та вектора $\bar{d}$. Тому доцільно так модифікувати метод триетапної регуляризації, щоб оперувати з матрицями A, M та вектором $\bar{b}$ і уникнути цих обчислень.

Тоді при довільно вибраному параметрі $\alpha_0 > 0$, наприклад, $\alpha_0 = 0{,}01$, наближення до зваженого нормального псевдорозв'язку u отримуємо, послідовно розв'язуючи дві СЛАР

$$(A + \alpha M)\, z = b_k, \quad (A + \alpha M)\, u = Az. \tag{11}$$

Далі розв'язуємо СЛАР $(A+\alpha M)w = Mu\left(\max\limits_i |u_i|\right)^{-1}$ та обчислюємо $\mu \approx \max\limits_i |w_i|$ – наближення до максимального власного значення узагальненої алгебраїчної проблеми $Mv = \mu(A + \alpha M)v$. По суті виконується один крок варіанту степеневого методу для узагальненої проблеми.

Аналогічно [1] можна отримати оцінку виду (10) точності наближеного зваженого нормального псевдорозв'язку

$$\|x-u\|_M / \|x\|_M \le \delta = (2\alpha + \|L_M^{-1} A L_M^{-T}\|\varepsilon_b)\mu\,.$$

Тепер, якщо виконується нерівність $\delta \le \varepsilon$, то необхідна точність ε досягнута при вибраному значенні α. Якщо нерівність не виконується, то за формулою $\alpha_1 \le 0{,}5(\varepsilon/\mu - \|L_M^{-1} A L_M^{-T}\|\varepsilon_b)$ визначається нове значення зсуву та розв'язуються системи (11) з матрицею $A + \alpha_1 M$ – обчислюється нове наближення u, яке забезпечує необхідну точність ε зваженого нормального псевдорозв'язку.

Висновки. Метод триетапної регуляризації є альтернативою методам, заснованим на сингулярному або зваженому сингулярному розвиненнях матриць. Перевагою методу триетапної регуляризації є менша кількість арифметичних операцій. При використанні алгоритмів сингулярного розвинення не вдається істотно зменшити кількість арифметичних операцій у зв'язку з необхідністю обчислення всіх сингулярних векторів. Достоїнства алгоритму триетапної регуляризації підсилюється для розріджених матриць.

Запропоновані схеми методу триетапної регуляризації поділяються на декілька підзадач з розрідженими матрицями, розв'язання яких ефективно реалізується [4] на сучасних високопродуктивних комп'ютерах, у тому числі з паралельною організацією обчислень.

А.В. Попов

ОБ ЭФФЕКТИВНОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ НЕКОРРЕКТНЫХ ЗАДАЧ
С РАЗРЕЖЕННЫМИ МАТРИЦАМИ

Для нахождения приближений с наперед заданной точностью к нормальному обобщенному или к взвешенному нормального обобщенному решениям системы линейных алгебраических уравнений с положительно полуопределенной разреженной симметричной матрицей предложен метод трехэтапной регуляризации.

A.V. Popov

ON THE EFFICIENT METHOD FOR THE SOLVING OF INCORRECT PROBLEMS
WITH SPARSE MATRICES

A three-staged regularization method is proposed for the finding within a priori given accuracy of approximations either to normal generalized or weighted normal generalized solutions of linear algebraic system with positive semi-defined sparse symmetric matrix.

1. *Химич А.Н., Яковлев М.Ф.* О решении систем с матрицами неполного ранга // Компьютерная математика. – 2003. – № 1. – С. 1–15.
2. *Попов А.В., Химич А.Н.* Исследование и решение первой основной задачи теории упругости // Компьютерная математика. – 2003. – № 2. – С. 105–114.
3. *Морозов В.А.* Методы регуляризации неустойчивых задач. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 216 с.
4. *Химич А.Н., Попов А.В., Полянко В.В.* Алгоритмы параллельных вычислений для задач линейной алгебры с матрицами нерегулярной структуры // Кибернетика и системный анализ. – 2011. – № 6. – С. 159–174.

Одержано 15.03.2013