Изв. АН Эстонии. Физ. Матем., 1989, 38, № 4, 418—422
https://doi.org/10.3176/phys.math.1989.4.08
УДК 512.8

Э. ЮБИ

МЕТОД ОРТОГОНАЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ

(Представил Г. Вайникко)

Предлагается конечный метод решения систем линейных алгебраических уравнений, использующий матрицы отражения Хаусхолдера для преобразования системы к треугольному виду. В отличие от обычного QR-разложения матрицы A, порядок выбора столбцов зависит от правых частей уравнений. На k-м шаге выполняется такое преобразование Хаусхолдера, которое аннулирует элементы начиная с $k+1$-го того столбца a_j, для которого минимален угол между a_j или $-a_j$ и невязкой $b-Ax^{k-1}$, $k=1, 2, \ldots$, где x^{k-1} — решение переопределенной задачи, найденное методом наименьших квадратов (МНК) с $k-1$ использованными столбцами, $x^0=0$. При этом не требуется решить задачу МНК. Выбранный порядок использования столбцов обеспечивает их «максимальную» линейную независимость.

1. Введение

Пусть заданы вещественные $(m\times n)$-матрица A и m-вектор b. Нужно найти n-вектор x, удовлетворяющий уравнению

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

Сведем его к задаче

$$\varphi(x)=\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2\to\min_{x\in R^n}. \tag{2}$$

В случае $m>n$ находится решение задачи (1) в смысле МНК, при $m=n$ — в обычном смысле и при $m<n$ определяется некоторая точка из множества решений (необязательно имеющая минимальную норму). Назовем активными те неизвестные x_j, которые соответствуют использованным столбцам матрицы A, и те строки, которые приведены к треугольному виду.

В качестве начальной точки выбирается всегда $x^0=0$. На каждом шаге к множеству индексов активных неизвестных IJ добавляется один элемент j_{k+1}. Очередная активная неизвестная $x_{j_{k+1}}$ определяется как решение задачи

$$\left|\frac{\partial\varphi(x^k)}{\partial x_j}\right|:\|a_j\|=\left|\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{1}{2}\|b^k-A^kx^k\|^2\right|:\|a_j\|\to\max_{j=1,\ldots,n}, \tag{3}$$

где x^k — текущая точка, A^k, b^k обозначают коэффициенты системы (1) после k-го преобразования, $A^0=A$, $b^0=b$. Отметим, что если некоторый столбец a_j линейно зависит от активных столбцов, то $\varphi'_{x_j}(x^k)=0$ (см. лемму 1 работы [1] в настоящем журнале). Поэтому критерий (3) исключает активизацию почти линейно зависимого набора столбцов.

После дополнения множества индексов активных неизвестных IJ новым элементом j_{k+1} к подматрице A, составленной из активных столбцов и приведенной на предыдущих шагах к треугольному виду, присоединяется очередной активный столбец $a^k_{j_{k+1}}$. В нем преобразованием Хаусхолдера аннулируется нужное количество элементов для получения треугольной системы. Соответствующие формулы приведены в следующей работе [1], а также в работе [2] (с. 137).

Отметим, что алгоритм решения линейных систем, использующий QR-разложение матрицы A, приведен также в работах [3, 4]. В нем порядок выбора столбцов не зависит от правых частей и определяется по максимальной длине G_j столбцов a_j (см. нижеследующую формулу (9)).

Преимущество предлагаемого метода заключается в досрочном нахождении решения задачи в том случае, когда правая часть b представима в виде линейной комбинации небольшого числа столбцов матрицы A. Например, если существует столбец A, кратный b, задача решается за один шаг.

По сравнению с методом Гаусса предлагаемый метод более универсален, он применим и в случае $m>n$.

Если число уравнений равняется числу неизвестных, $m=n$, в данном методе число операций в два раза больше, чем в методе Гаусса. Однако, если все элементы A и b находятся в небольшом диапазоне, можно использовать числа с фиксированной запятой и тем самым получить значительный выигрыш во времени.

Как и в методе Гаусса с частичным выбором направляющего элемента, на каждом шаге надо найти максимум из n чисел.

В следующем разделе подробно описывается предложенный алгоритм, в последнем приведены результаты вычислений.

2. Описание алгоритма

Обозначим через (a_i, a_j) скалярное произведение столбцов a_i и a_j, $(a_i, a_j)=\sum_{k=1}^{m} a_{ki}a_{kj}$. Находим

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_j}=\sum_{k=1}^{m} a_{kj}[(A_k, x)-b_k]=\sum_{k=1}^{n}(a_j, a_k)x_k-(a_j, b), \tag{4}$$

где A_k обозначает k-ю строку матрицы A. На первом шаге при $x^0=0$ согласно критерию (3) активизируется та переменная, которая решает задачу

$$\frac{|(a_j, b)|}{\|a_j\|}\to\max_{j=1,\ldots,n}. \tag{5}$$

Соответствующий максимуму столбец $\pm a_{j_1}$ образует минимальный угол с вектором b. Выполним для всех столбцов системы (1) преобразование Хаусхолдера при $v=a_{j_1}$ и определим x_{j_1}. Затем, не принимая во внимание первое уравнение, аналогично выполним преобразование Хаусхолдера для $(m-1)$-векторов и определим x_{j_2}. Для определенности предложим, что на первом шаге активизируется x_1, на втором — x_2. Тогда

$$\begin{aligned}
a^2_{11}x_1+a^2_{12}x_2+a^2_{13}x_3+\ldots+a^2_{1n}x_n&=b^2_1,\\
a^2_{22}x_2+a^2_{23}x_3+\ldots+a^2_{2n}x_n&=b^2_2,\\
a^2_{33}x_3+\ldots+a^2_{3n}x_n&=b^2_3,\\
\cdots\cdots\cdots\cdots&,\\
a^2_{m3}x_3+\ldots+a^2_{mn}x_n&=b^2_m.
\end{aligned} \tag{6}$$

В дальнейшем для упрощения записи опускаем верхний индекс (номер шага). Активные переменные x_1, x_2 определяются из треугольной системы

$$\begin{aligned}
a_{11}x_1+a_{12}x_2&=b_1,\\
a_{22}x_2&=b_2.
\end{aligned} \tag{7}$$

Пассивные переменные $x_3 = \ldots = x_n = 0$. Частные производные от функции $\varphi(x)$ в формуле (3) могут быть вычислены по системе (6), не решая треугольной системы (7). Для нахождения $\varphi'_{x_j}(x^2)$, $j=1, \ldots, \ldots, n$ по системе (6) достаточно воспользоваться в формуле (5) $(m-2)$-векторами, так как первые два уравнения этой системы уже выполняются. На k-м шаге для определения вводимой переменной удобнее решать задачу, эквивалентную (5)

$$RE = \max_j \frac{F_j^2}{G_j^2}, \tag{8}$$

где

$$F_j = \sum_{s=k}^{m} a_{sj} b_s, \quad G_j^2 = a_{kj}^2 + a_{k+1j}^2 + \ldots + a_{mj}^2, \tag{9}$$

и максимум находится по всем неактивным переменным, для которых $G_j \neq 0$. Для тех неактивных столбцов, которые являются линейной комбинацией активных, всегда выполняется $F_j = G_j = 0$.

В общем случае для решения задачи может потребоваться менее m шагов. Например, когда существует столбец a_j, $a_j = b$, решение получается за один шаг. Если не принимать во внимание ошибок округления, то для нахождения решения потребуется не более чем $\operatorname{rank} A$ шагов (этапы 5 и 11 нижеследующего алгоритма).

В алгоритме используются два малых положительных параметра ε_1 и ε_2. При выполнении неравенств

$$\frac{1}{\|a_j\|} \left| \frac{\partial \varphi(x^k)}{\partial x_j} \right| = \frac{|F_j|}{G_j} \leqslant \varepsilon_1 \tag{10}$$

для всех пассивных переменных считается, что минимум $\varphi(x)$ найден. В этом случае либо задача (1) решена, либо установлено, что она решения не имеет. Если модули правых частей неактивных уравнений преобразованной системы (1) достаточно малы,

$$|b_i| \leqslant \varepsilon_2, \quad i = k+1, \ldots, m, \tag{11}$$

т. е. эти уравнения выполняются с точностью ε_2 и активные уравнения тоже выполняются (с машинной точностью), то считается, что задача (1) решена (шаги 5 и 11 алгоритма). Если при выполнении (10) нарушается хотя бы одно из неравенств (11), считается, что задача (1) решения не имеет.

Опишем теперь подробно алгоритмы VRMS решения задачи (1). Алгоритм VRMS $(A, b, IJ, x, F, G, m, n, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ следующий.

1. Вычислить n-векторы F, G^2 с координатами $F_j = (a_j, b)$, $G_j^2 = \|a_j\|^2$, $j = 1, \ldots, n$.
2. Положить число активных переменных $k := 0$ и $x := 0$.
3. Определить очередную активную переменную $x_{j_{k+1}}$ в соответствии с формулой (8) и записать j_{k+1} в массив индексов активных переменных IJ.
4. Если $RE < \varepsilon_1$, перейти к шагу 5, в противном случае к 7.
5. Проверить неравенство $|b_i| \leqslant \varepsilon_2$ для $i = k+1, \ldots, m$. Если все они выполняются, перейти к шагу 12, в противном случае к 6.
6. Система (1) решения не имеет. Для нахождения решения в смысле наименьших квадратов перейти к шагу 12.
7. Увеличить число активных переменных на единицу, $k := k+1$.
8. Проверить неравенство $k < m$. Если оно выполняется, перейти к шагу 9, в противном случае к 12.

9. Выполнить преобразование Хаусхолдера с вектором $v=a_{j_{k+1}}$ для столбцов матрицы A и b.

10. Вычислить новые $F_j=F_j-a_{kj}b_k$ и $G_j^2=G_j^2-a_{kj}^2$, $j=1,\ldots,\bar{n}$.

11. Проверить неравенство $|b_i|\leqslant\varepsilon_2$ для $i=k+1,\ldots,m$. Если все они выполняются, перейти к шагу 12, в противном случае к 3.

12. Решить треугольную систему, аналогичную системе (7) для нахождения неизвестных $x_{j_1},\ldots,x_{j_k}$.

13. Задача решена.

3. Результаты вычислений

Задачи были решены на ЭВМ ЕС-1046 (операционная система VM). Программа составлена на алгоритмическом языке ФОРТРАН-77. Использовалась двойная точность.

Пример 1.

$$\begin{aligned} x_1-2x_2+x_3&=1,\\ 2x_1-3x_2+4x_3&=3,\\ -2x_1+x_2\qquad&=-3.\end{aligned}$$

Величины $\dfrac{F_j^2}{G_j^2}=\dfrac{(a_j,b)^2}{\|a_j\|^2}=\dfrac{169}{9},\dfrac{196}{14},\dfrac{169}{17}$.

По критерию (8) активизируется x_1, $v=(1,2,-2)^{\mathrm{T}}$. Преобразуем столбцы по формулам (6)—(9) работы [1].

$$\begin{aligned} -3x_1+3{,}33x_2-3x_3&=-4{,}33,\\ -0{,}33x_2+2x_3&=0{,}33,\\ -1{,}67x_2+2x_3&=-0{,}33.\end{aligned}$$

Теперь $\dfrac{F_j^2}{G_j^2}=\dfrac{0}{0},\ \dfrac{0{,}19}{2{,}88},\ \dfrac{0}{8}$.

Активизируется x_2, $v=(-0{,}33,\ -1{,}67)^{\mathrm{T}}$. Система преобразуется к виду

$$\begin{aligned} -3x_1+3{,}33x_2-3x_3&=-4{,}33,\\ 1{,}70x_2-2{,}35x_3&=0{,}26,\\ -1{,}57x_3&=-0{,}39,\end{aligned}$$

откуда $x_3=0{,}25$, $x_2=0{,}5$, $x_1=1{,}75$.

Пример 2. Рассмотрим задачу из работы [4] (с. 123), имеющую целочисленное решение и число обусловленности равное $3{,}66\cdot10^6$,

$$A=\begin{pmatrix}-74&80&18&-11&-4&-8\\14&-69&21&28&0&7\\66&-72&-5&7&1&4\\-12&66&-30&-23&3&-3\\3&8&-7&-4&1&0\\4&-12&4&4&0&1\end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}.$$

При $\varepsilon_1=10^{-15}$ и $\varepsilon_2=10^{-11}$ вычисления прекратились после пятого шага, хотя $\operatorname{rank}A=6$. Второй столбец не активизировался, так как выполнялось неравенство (11). При этом $x_1=0{,}999\ 999\ 999\ 999\ 972$, $x_2=0$, $x_3=-1{,}999\ 999\ 999\ 999\ 94$, $x_4=14{,}999\ 999\ 999\ 999\ 6$, $x_5=42{,}999\ 999\ 999\ 998\ 7$, $x_6=-55{,}999\ 999\ 999\ 998\ 4$. Минимум в задаче (2) $\varphi(x)=0{,}779\cdot10^{-26}$. При $\varepsilon_1=10^{-15}$ и $\varepsilon_2=10^{-16}$ выполнялись все шесть шагов: $x_1=1{,}000\ 000\ 000\ 002\ 06$, $x_2=-0{,}000\ 000\ 000\ 001\ 784$, $x_3=-2{,}000\ 000\ 000\ 007\ 97$, $x_4=15{,}000\ 000\ 000\ 053\ 1$, $x_5=43{,}000\ 000\ 000\ 165\ 2$, $x_6=-56{,}000\ 000\ 000\ 210\ 7$, $\varphi(x)=0{,}774\cdot10^{-26}$.

В следующих примерах для задания элементов A и b использовалась стандартная подпрограмма GAUSS, генерирующая нормально распределенные случайные величины со средней AM и дисперсией σ^2.

Номер	m	n	AM	σ	$\varphi(x)$	Время
3.	100	100	100	1000	$0{,}124\cdot 10^{-19}$	26″
4.	200	200	—2	100	$0{,}659\cdot 10^{-21}$	3′32″
5.	220	220	10	100	$0{,}637\cdot 10^{-21}$	4′41′
6.	100	400	1	10	$0{,}464\cdot 10^{-25}$	4′23″

ЛИТЕРАТУРА

1. *Юби Э.* // Изв. АН Эстонии. Физика. Математика, 1989, 38, № 4, 423—432.
2. *Лоусон Ч., Хенсон Р.* Численное решение задач метода наименьших квадратов. М., Наука, 1986.
3. Единая система электронных вычислительных машин. Пакет научных подпрограмм на языке ФОРТРАН-4. Руководство программиста. Книга 1. 1977.
4. *Уилкинсон, Райнш.* Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М., Наука, 1976.

Таллиннский политехнический институт

Поступила в редакцию
18/I 1989

Переработанный вариант
8/VI 1989

E. ÜBI

ORTOGONAALSETE TEISENDUSTE MEETOD

On vaadeldud ortogonaalsete teisenduste kasutamist lineaarse võrrandisüsteemi lahendamisel ja esitatud uus eeskiri juhtveeru valikuks.

E. ÜBI

METHOD OF ORTHOGONAL TRANSFORMATIONS

In this paper a direct method for solving an under-determined system of linear equations is proposed. The method is based on QR-decomposition of the coefficient matrix and the least-squares approach. First the initial vector x^0 is taken to be equal to zero. Further, at each kth step one more so-called active variable x_j is added to the set of previous active variables. The current x^{k-1} is defined as a least-squares solution for a over-determined linear system of $k-1$ variables and m equations. The problem is solved when the number of active variables becomes equal to the number of equations. The criterion for activizing the variables ensures «maximal» linear independence of the active columns. Numerical examples are presented.

Изв. АН Эстонии. Физ. Матем., 1989, 38, № 4, 423—432

УДК 519.8

Э. ЮБИ

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ В МАТЕМАТИЧЕСКОМ ПРОГРАММИРОВАНИИ

(Представил Г. Вайникко)

Предлагается конечный метод нахождения решения системы недоопределенных линейных уравнений $Ax=b$, $x\geqslant 0$, основанный на QR-разложении матрицы коэффициентов. Используется высокоразвитая технология метода наименьших квадратов (МНК). Начальные значения всех переменных нулевые, $x^0=0$. На $k+1$-м шаге число активных переменных растет на единицу, активизируется переменная x_j, для которой минимален угол между столбцом a_j и невязкой $b-Ax^k$. При этом x^k определяется МНК из переопределенной системы с k переменными и m уравнениями. Задача решена, если число активных переменных равняется числу уравнений m и выполняется условие неотрицательности всех переменных (в противном случае отрицательные переменные приравниваются к нулю). Используются ортогональные преобразования Хаусхолдера и Гивенса, гарантирующие численную устойчивость алгоритма. Кроме того, выбранный критерий активизации переменных обеспечивает «максимальную» линейную независимость активных столбцов. Опыт решения задач на ЭВМ показывает эффективность предложенного метода (незначительно различаются времена решения рассматриваемой задачи и системы $Ax=b$).

1. Введение

Пусть задана $(m\times n)$-матрица A и m вектор b. Нужно найти n-вектор x, удовлетворяющий условиям

$$\begin{gathered} Ax=b, \\ x\geqslant 0. \end{gathered} \tag{1}$$

В линейном программировании задача (1) — это нахождение начального допустимого решения. Задача квадратичного программирования сводится к определению такого решения задачи (1), которая удовлетворяет еще условиям дополняющей нежесткости.

В работе [1] предлагается решить задачу (1), используя функцию Лагранжа задачи

$$\varphi(x)=\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2\to\min_{x\geqslant 0}. \tag{2}$$

В данной работе предлагается алгоритм решения задачи (1), основанный на применении покоординатной минимизации и МНК для задачи (2). В качестве начальной точки выбирается всегда $x^0=0$. На каждом шаге к множеству индексов активных переменных IJ добавляется один элемент j_{k+1}. Очередная активная переменная $x_{j_{k+1}}$ определяется как решение задачи

$$-\frac{\partial\varphi(x^k)}{\partial x_j}:\|a_j\|=\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{1}{2}\|b^k-A^kx^k\|^2:\|a_j\|\to\max_{j=1,\ldots,n}, \tag{3}$$

где x^k — текущая точка, вычисленная с помощью МНК, A^k, b^k — коэффициенты системы после k-го преобразования, $A^0=A$, $b^0=b$, $k=0, 1\ldots$. Если некоторый столбец a_j есть линейная комбинация активных столбцов, то $\varphi'_{x_j}(x^k)=0$, так как значение $\varphi(x)$ не убывает при неизменном подпространстве, натянутом на активные столбцы мат-