УДК 519.6

А.Н. ХИМИЧ, Е.А. НИКОЛАЕВСКАЯ

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ВЗВЕШЕННЫХ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ С ПРИБЛИЖЕННО ЗАДАННЫМИ ИСХОДНЫМИ ДАННЫМИ

На основании взвешенного сингулярного разложения предлагается алгоритм вычисления взвешенного нормального псевдорешения или его проекции с оценкой погрешности решения.

Введение. Исследованию задач взвешенных наименьших квадратов (WLS) и разработке методов их решения посвящено значительное количество работ [1 – 5], меньше – методам решения в условиях приближенно заданных исходных данных. В настоящей работе предлагается алгоритм нахождения взвешенного нормального псевдорешения в условиях приближенно заданных исходных данных, когда ранг матрицы может измениться. На основании взвешенного сингулярного разложения предлагается алгоритм вычисления взвешенного нормального псевдорешения или его проекции с оценкой погрешности решения.

1. Предварительные сведения. Пусть $R^{m\times n}$ – множество матриц размерностью $m\times n$. Для матрицы $A\in R^{m\times n}$ обозначим A^T матрицу, транспонированную к A, $rank(A)$ – ранг матрицы A; $\Re(A)$ – множество образов матрицы A; $N(A)$ – нулевое подпространство A; $\| \ \|$ – евклидова векторная и согласованная с ней спектральная матричная нормы; I – единичная матрица.

Для произвольной матрицы $A\in R^{m\times n}$ и симметричных положительно-определенных матриц M и N порядка m и n соответственно, единственная матрица $X\in R^{m\times n}$, удовлетворяющая следующим условиям:

$$AXA = A\,,\ XAX = X\,,\ (MAX)^T = MAX\,,\ (NXA)^T = NXA \qquad (1)$$

называется *взвешенной псевдообратной матрицей Мура – Пенроуза* для матрицы A и обозначается $X = A^+_{MN}$. В частности, когда $M = I \in R^{m\times m}$ и $N = I \in R^{n\times n}$, матрица X, удовлетворяющая (1), называется *псевдообратной матрицей Мура – Пенроуза* и обозначается $X = A^+$. Обозначим $A^\#$ взвешенную транспонированную матрицу к A:

$$A^\# = N^{-1}A^T M\,. \qquad (2)$$

Пусть $x \in R^m$, $y \in R^n$. Взвешенные векторные и матричные нормы определим следующим образом:

$$\|x\|_M = \left\|M^{1/2}x\right\|, \qquad \|y\|_N = \left\|N^{1/2}y\right\|, \qquad (3)$$

$$\|A\|_{MN} = \max_{\|x\|_N=1}\|Ax\|_M = \left\|M^{1/2}AN^{-1/2}\right\|,\ A \in R^{m\times n}, \qquad (4)$$

$$\|B\|_{NM} = \max_{\|y\|_M=1}\|By\|_N = \left\|N^{1/2}AM^{-1/2}\right\|,\ B \in R^{n\times m}. \qquad (5)$$

Представим матрицу в виде взвешенного сингулярного разложения [6].

Пусть $A \in R^{m\times n}$ и $rank(A) = k$, M и N – положительно определенные матрицы порядка m и n соответственно. Тогда существуют матрицы $U \in R^{m\times m}$ и $V \in R^{n\times n}$, удовлетворяющие условиям $U^T MU = I$ и $V^T N^{-1}V = I$, такие, что

$$A = U\begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}V^T, \qquad A^+_{MN} = N^{-1}V\begin{pmatrix} D^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}U^T M\,, \qquad (6)$$

где $D = diag(\mu_1, \mu_2, ..., \mu_k)$, $\mu_1 \ge \mu_2 \ge ... \ge \mu_k > 0$ и μ_i^2 – ненулевые собственные значения матрицы $A^\# A$. Неотрицательные значения μ_i называются взвешенными сингулярными значениями матрицы A, причем

$$\|A\|_{MN} = \mu_1\,, \qquad \left\|A^+_{MN}\right\|_{NM} = \frac{1}{\mu_k}.$$

Лемма [7]. Пусть A, $\Delta A \in R^{m\times n}$, $\mu_i(A)$ и $\mu_i(\overline{A})$ – взвешенные сингулярные значения матриц A и $\overline{A}$ соответственно.

Тогда

$$\mu_i(A) - \|\Delta A\|_{MN} \le \mu_i(\overline{A}) \le \mu_i(A) + \|\Delta A\|_{MN}\,. \qquad (7)$$

2. Постановка задачи. Рассмотрим задачу взвешенных наименьших квадратов с положительно определенными весами M и N:

$$\min_{x\in C}\|x\|_N\,,\ C = \{x \mid \|Ax - b\|_M = \min\}, \qquad (8)$$

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

Наряду с задачей (8) рассмотрим задачу с приближенно заданными исходными данными

$$\min_{x\in C}\|\bar{x}\|_N\,,\ C=\{\,\bar{x}\mid \|(A+\Delta A)\bar{x}-(b+\Delta b)\|_M=\min\},\tag{9}$$

где

$$\bar{A}=A+\Delta A,\ \ \bar{b}=b+\Delta b\,,\ \ \bar{x}=x+\Delta x\,.\tag{10}$$

Будем предполагать, что для погрешности элементов матрицы и правой части выполняются следующие соотношения:

$$\|\Delta A\|_{MN}\le\varepsilon_A\|A\|_{MN}\,,\quad \|\Delta b\|_M\le\varepsilon_b\|b\|_M\,.\tag{11}$$

3. Исследование свойств СЛАУ с приближенно заданными исходными данными. При исследовании математических свойств систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданными исходными данными, связанных с компьютерной реализацией, в качестве приближенной модели в (9), (10) будем понимать именно машинную модель задачи. Предположим, что погрешность исходных данных $\Delta A,\ \Delta b$ в этом случае содержит, кроме всего, и погрешность, возникающую при записи коэффициентов матрицы в память компьютера или их вычислении.

Определение 1. Матрицей полного ранга в пределах погрешности задания исходных данных будем считать матрицу, которая не может изменить ранг в области ΔA изменения ее элементов.

Определение 2. Матрицу полного ранга в пределах машинной точности будем считать матрицу, которая не может изменить ранг при изменении ее элементов в пределах машинной точности.

Компьютерный алгоритм исследования полноты ранга сводится к проверке двух соотношений

$$1.0+\gamma\ne1.0\,,\ \gamma=h^{-1}(A)\,,\tag{12}$$

$$\varepsilon_{\bar{A}}h(\bar{A})<1\,.\tag{13}$$

Первое условие, выполняющееся в арифметике с плавающей запятой, означает, что матрица имеет полный ранг в пределах машинной точности, а второе то, что она полного ранга и в пределах точности задания исходных данных.

При этих условиях решение машинной задачи существует, единственное и устойчивое. Такую машинную задачу следует рассматривать как корректно последовательную в пределах точности задания исходных данных. В противном случае матрица системы может оказаться матрицей не полного ранга и, следовательно, машинную модель задачи (9), (10) необходимо рассматривать как не корректно поставленную. Ключевым фактором при исследовании свойств машинной модели является критерий корректности задачи. В связи с этим полезным является то, что в условие для исследования машинной модели задачи (12) входит величина, обратная к $h(\bar{A})$. Поэтому для больших чисел обусловленности не наступает переполнение по порядку. Исчезновение порядка для $1.0/h(\bar{A})$ при больших числах обусловленности не фатально: машинный результат полагается равным нулю, что позволяет сделать правильный вывод о потере ранга матрицы машинной задачи.

Для анализа свойств машинной модели задач с матрицами не полного ранга в условиях приближенно заданных исходных данных фундаментальную роль играет определение ранга матрицы.

Определение 3. Рангом матрицы в условиях приближенно заданных исходных данных (эффективным рангом или δ-рангом) будем называть величину

$$rank(A,\delta) = \min_{\|A-B\|_{MN} \le \delta} rank(B).$$

Это означает, что δ-ранг матрицы равен минимальному рангу среди всех матриц в окрестности $\|A-B\|_{MN} \le \delta$.

Из работы [2] следует, что если $r(\delta)$ – δ-ранг матрицы, то $\mu_1 \ge \ldots \ge \mu_{r(\delta)} > \delta \ge \mu_{r(\delta)+1} \ge \ldots \ge \mu_p$, $p = \min(m,n)$.

Практический алгоритм для нахождения δ-ранга может быть определен следующим образом: найти величину *r*, равную наибольшему значению *i*, для которого выполняется неравенство

$$\frac{\delta}{\mu_i} < 1,\ \mu_i \ne 0,\ i = 1,2\ldots.$$

Для анализа значений ранга матрицы в рамках машинной точности величину δ можно связать машинной точностью, например, положив ее равной $\text{macheps}\|B\|$.

3. Алгоритм нахождения взвешенного нормального псевдорешения СЛАУ с приближенно заданными исходными данными. Алгоритм основан на взвешенном сингулярном разложении матриц (6).

Пусть $A \in R^{m\times n}$ и $rank(A) = k$, *M* и *N* – положительно определенные матрицы порядка *m* и *n* соответственно.

Для решения некорректно поставленных задач в постановке (9), (10) алгоритм получения приближенного нормального псевдорешения системы (8) в зависимости от соотношения рангов матриц *A* и $\overline{A}$ сводится к следующим трем случаям.

1. В случае, если ранг матрицы не изменился $rank(\overline{A}) = rank(A) = k$, приближенное взвешенное нормальное псевдорешение строится по формуле

$$\overline{x} = \overline{A}^{+}_{MN}\overline{b}, \tag{14}$$

где $\overline{A}^{+}_{MN}$ представляется в виде взвешенного сингулярного разложения (6).

В этом случае взвешенное нормальное псевдорешение системы (8) приближается взвешенным нормальным псевдорешением системы (9) и, если $\|\Delta A\|_{MN}\left\|A^{+}_{MN}\right\|_{NM} < 1$, то погрешность решения оценивается формулой [8]

$$\frac{\left\|x-\bar{x}\right\|_N}{\left\|x\right\|_N} \le \frac{h}{1-h\varepsilon_A}\left(2\varepsilon_A + \alpha + h\varepsilon_A\beta\right), \tag{15}$$

где $h = h(A) = \| A \|_{MN} \| A^+_{MN} \|_{NM}$ – взвешенное число обусловленности матрицы A, символы $\| \ \|_{MN}$ и $\| \ \|_{NM}$ – взвешенные матричные нормы в соответствии с (3) – (5), A^+_{MN} – взвешенная псевдообратная матрица Мура – Пенроуза.

В случае полноты ранга матрицы и выполнения условий (12), (13) ранг матрицы не изменяется и для оценки погрешности можно воспользоваться формулами (14), (15).

Здесь и далее использованы в оценках следующие обозначения:

$$\alpha = \frac{\left\|\Delta b\right\|_M}{\left\|A\right\|_{MN}\left\|x\right\|_N},\ \beta = \frac{\left\|r\right\|_M}{\left\|x\right\|_N\left\|A\right\|_{MN}},\ \alpha_l = \frac{\left\|\Delta b\right\|_M}{\left\|A\right\|_{MN}\left\|x_l\right\|_N},\ \beta_l = \frac{\left\|r\right\|_M}{\left\|x_l\right\|_N\left\|A\right\|_{MN}}. \tag{16}$$

2. Ранг матрицы увеличился: $rank(\bar{A}) > rank(A) = k$. Приближенное взвешенное нормальное псевдорешение строится по формуле

$$\bar{x}_k = \bar{A}^{\ +}_{k\ MN}\,\bar{b}\ . \tag{17}$$

Взвешенная псевдообратная матрица $\bar{A}^{\ +}_{k\ MN}$ определяется следующим образом:

$$\bar{A}^{\ +}_{k\ MN} = N^{-1}\overline{V}\overline{D}^+_k\overline{U}^T M\ ,$$

где $\overline{D}_k$ – прямоугольная матрица, первые k диагональных элементов которой отличны от нуля и совпадают с соответствующими элементами матрицы $\overline{D}$ из (6), а все остальные элементы равны нулю.

В этом случае взвешенное нормальное псевдорешение системы (8) приближается проекцией взвешенного нормального псевдорешения системы (9) на правое главное взвешенное сингулярное подпространство размерностью k матрицы $\bar{A}$ и, если $\left\|\Delta A\right\|_{MN}\left\|A^+_{MN}\right\|_{NM} < \frac{1}{2}$, то погрешность решения оценивается формулой [9]

$$\frac{\left\|x-\bar{x}_k\right\|_N}{\left\|x\right\|_N} \le \frac{h}{1-2h\varepsilon_A}\left(2\varepsilon_A + \alpha + h\varepsilon_A\beta\right). \tag{18}$$

3. В случае, если ранг матрицы уменьшился $rank(A) > rank(\bar{A}) = l$, приближение к проекции взвешенного нормального псевдорешения задачи (8) строится по формуле (14). В этом случае проекция взвешенного нормального псевдорешения системы (8) на главное правое взвешенное сингулярное подпространство размерностью l матрицы A приближается взвешенным нормальным псевдорешением системы (9) и, если $\frac{\left\|\Delta A\right\|_{MN}}{\mu_l} < \frac{1}{2}$, погрешность проекции оценивается формулой [9]

$$\frac{\|x_l - \bar{x}\|_N}{\|x_l\|_N} \le \frac{\mu_1 / \mu_l}{1 - 2\|\Delta A\|_{MN} / \mu_l} \left(2\varepsilon_A + \alpha_l + \frac{\mu_1}{\mu_l} \varepsilon_A \beta_l \right), \tag{19}$$

где μ_i – взвешенные сингулярные числа матрицы А.

Замечание 1. В качестве ранга исходной матрицы в условиях приближенно заданных исходных данных следует брать эффективный ранг.

Замечание 2. Связь между числом обусловленности задачи с точными исходными данными $h(A)$ и числом обусловленности матрицы системы с приближенно заданными исходными данными $h(\bar{A})$ устанавливают оценки

$$\frac{1 - \varepsilon_A}{1 + \varepsilon_A h} \le \frac{h(\bar{A})}{h(A)} \le \frac{1 + \varepsilon_A}{1 - \varepsilon_A h},$$

которые легко получить для взвешенной матричной нормы на основании результатов леммы 3.

Замечание 3. Из-за нулевых столбцов в матрице D^+ лишь самое большое первые n столбцов матрицы U могут действительно вносить вклад в произведение (16). Более того, если некоторые из взвешенных сингулярных чисел равны нулю, то нужны менее чем n столбцов U. Если κ_p - количество ненулевых взвешенных сингулярных чисел, то можно U сократить до размеров $m \times k_p$, D^+ – до размеров $\kappa_p \times k_p$, V^T – до размеров $\kappa_p \times n$. Формально такие матрицы U и V не являются M - и N^{-1} – ортогональными соответственно, поскольку они не квадратные. Однако их столбцы составляют взвешенные ортонормированные системы векторов.

Заключение. Предложены алгоритмы компьютерного исследования и нахождения нормального взвешенного псевдорешения или его проекции с оценкой погрешности решений.

О.М. Хіміч, О.А. Ніколаєвська

РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧІ ЗВАЖЕНИХ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ З НАБЛИЖЕНО ЗАДАНИМИ ВИХІДНИМИ ДАНИМИ

На базі зваженого сингулярного розкладання пропонується алгоритм обчислення зваженого нормального псевдорозв'язку або його проекцій з оцінкою похибки розв'язку.

A.N. Khimich, E.A. Nikolaevskaya

THE DECISION OF A PROBLEM OF THE WEIGHED LEAST SQUARES WITH APPROXIMATELY SET INITIAL DATA

On the basis of weighted singular value decomposition the algorithm of calculation of the weighted normal pseudosolution or its projection with an astimation of an arror of the solution is offered.

1. *Ben Israel A., Greville T.N.E.* Generalized Inverse: Theory and Applications. – New York: Willey, 1974. – 436 p.
2. *Голуб Дж., Ван Лоун.* Матричные вычисления. – М.: Мир, 1999. – 549 с.
3. *Сергиенко И.В., Галба Е.Ф., Дейнека В.С.* Предельные представления взвешенных псевдообратных матриц с положительно-определенными весами и регуляризация задач // Кибернетика и системный анализ. – 2003. – № 6. – С. 46 – 65.
4. *Морозов В.А.* Методы регуляризации неустойчивых задач. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987. – 216 с.
5. *Wei Y., Wang G.* PCR algorithm for parallel computing minimum-norm (T) least-squares (S) solution of inconsistent linear equations // Applied Math. Computation. – 2002. – N 133. – P. 547 – 557.
6. *Van Loan C.F.* Generalizing the singular value decomposition // SIAM J. Numerical Analysis. – 1976. – N 13. – P. 76 – 83.
7. *Wei Y., Wang D.* Condition numbers and perturbation of weighted Moore-Penrose inverse and weighted least squares problem // Applied Math. Computation. – 2003. – N 145. – P. 45 – 58.
8. *Химич А.Н., Николаевская Е.А.* Оценка погрешности решения задачи взвешенных наименьших квадратов // Компьютерная математика. – Киев: Ин–т кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, 2006. – № 3. – С. 36 – 45.
9. *Химич А.Н., Николаевская Е.А.* Анализ возмущения решения задачи взвешенных наименьших квадратов // Теорія оптимальних рішень. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, 2007. – № 6. – С. 12 – 20.

Получено 15.05.2008