УДК 004.02

КОНДРАШОВА Н.В.

МЕТОД ГРАМА-ШМИДТА-ГАУССА ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ В МГУА

Рассматривается рекуррентный метод решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для идентификации моделей с вложенными структурами. Метод Грама-Шмидта используется для проектирования исходной системы векторов переменных в ортонормированную, а обратный ход метода Гаусса – для определения коэффициентов СЛАУ. Показано, что такой способ решения является наименее вычислительно затратным по сравнению с известными рекуррентными и нерекуррентными прямыми («точными») методами решения СЛАУ

The recurrent decision method of linear algebraic equations systems (LAES) is considered for models identification with the imbedded structures. Grama-Shmidta's method is used for projection of initial variables vectors system into orthonormal one and backward motion of Gausse's method for LAES parameters determination. It is demonstrated that such decision method takes the least calculate time as compared to the known recurrent and non-recurrent direct (or exact) methods for LAES decisions.

Введение

Экономичный метод решения СЛАУ большой размерности за конечное число арифметических операций изложен в данной работе.

Методы численного решения делятся на две группы: итерационные методы и прямые («точные») методы [1].

Итерационные методы (методы последовательных приближений) состоят в том, что решение системы находится, как предел последовательных приближений параметров системы $\theta^{(\ell)}$ при $\ell \to \infty$, где ℓ номер итерации. К этим методам относится метод Зейделя, Якоби и т.д.

Прямыми (или точными) методами называются методы, позволяющие получить решение системы за конечное число арифметических операций. Прямые методы подразделяются на нерекурентные и рекуррентные. Широко известными нерекурентными методами являются обычный метод Гаусса, LU–метод, метод квадратного корня, метод вращений линейных систем и др. Различают рекуррентные методы перерасчета неизвестного вектора параметров системы:

1) при добавлении условных уравнений (строк);

2) при добавлении аргументов (столбцов) $\widehat{\mathbf{u}}_i$, $\dim \widehat{\mathbf{u}}_i = 1 \times i$, $i = \overline{1, s}$.

Рекуррентные методы при добавлении аргументов применяют тогда, когда процесс перебора рассматриваемых моделей организуется по методу вложенных структур моделей [2], получившему развитие в последнее десятилетие и известному как модель вложенных множеств (англ. Joe Celko's nested sets). Рекуррентные алгоритмы вычисления параметров применяются в алгоритмах метода группового учета аргументов (МГУА) для структурно-параметрической идентификации, как более экономичные по сравнению с нерекуррентными. Известными являются рекуррентный метод наименьших квадратов с окаймлением [3], рекуррентный алгоритм Гаусса и модификация алгоритма Грама-Шмидта [4].

Следует заметить, что реализация прямых методов на компьютере приводит к решению с погрешностью, т.к. все арифметические операции над переменными с плавающей точкой выполняются с округлением. В зависимости от свойств матрицы исходной системы и точности выполнения арифметических операций эти погрешности могут достигать значительных величин. Представленный в данной работе пример решения хорошо обусловленной СЛАУ четвертого порядка при вычислении с точностью примерно до 16 значащих цифр (1E-16) программой EXEL демонстрирует, что данная погрешность вычисления не влияет на результат.

Постановка задачи моделирования

Выборка представлена таблицей данных $W = (X \vdots y)$, размерность таблицы $\dim W = n \times (m+1)$, где n – число строк; m+1 – число столбцов таблицы. Условимся, что данные, обозначенные как X, являются значениями m входных переменных в n точках наблюдения, y – значениями выходной переменной в тех же точках. Эту же информацию можно представить в виде соответствующего размера матрицы $\mathbf{X}$ и вектора $\mathbf{y}$,

$$\dim \mathbf{X} = n \times m, \dim \mathbf{y} = n \times 1, \quad n \ge m.$$

Используя исходную информацию $(X \vdots y)$, построим ряд моделей вида:

$$y = \theta_0 + \theta_1 x_1 + ... + \theta_i x_i + \xi_i, \qquad (1)$$

К случайным отклонениям ξ_i в классическом регрессионном анализе выдвигаются следующие требования:

$E\xi_i = 0$ где $i = \overline{1, n}$ в каждой точке измерения математическое ожидание шума равен нулю, или в векторной форме: $\mathbf{E}(\xi) = \mathbf{0}_n$, где $\mathbf{0}_n$ – вектор из n нулей;

$E\xi_i\xi_k = 0, \quad k \ne i$ – шум некоррелированный;

$E\xi_i^2 = \sigma^2 < \infty$ – дисперсия шума существует и имеет конечное значение. Необходимо найти параметры (1), как решение системы условных линейных алгебраических уравнений:

$$\mathbf{X}_i \mathbf{и}_i = \mathbf{y}, \qquad (2)$$

$$\dim \mathbf{X}_i = n \times i, \quad \dim \mathbf{и}_i = i \times 1, \quad \dim \mathbf{y} = n \times 1,$$

$$n \ge m, \ \mathbf{и}_i, i = \overline{0, s}, \ s = \overline{s_\ell, s_j}, \ s_\ell \in \{0,1,...,m\},$$

$$s_j \in \{m, (m-1)..,0\}, \ s_\ell \le s_j.$$

Положим, что столбцы и строки матрицы $\mathbf{X}_i$ не являются линейно зависимыми, т.е. решение системы (2) существует.

В комбинаторных алгоритмах МГУА перебор всевозможных сочетаний аргументов $x_i, \quad i = \overline{1, m}$ возможен по методу вложенных структур, например, с помощью следующих генераторов двоичных структурных векторов: счетчика Гарсайда [5] или оптимизированного последовательного счетчика [6], в которых перебираемые одна за другой модели отличаются только одним членом. Названные счетчики реализуют полный перебор структур моделей без повторений добавлением по одному аргументу к предыдущей модели, исходя из достигнутых ранее состояний счетчика.

Пусть фиксирован порядок усложнения моделей, как:

$\mathbf{y} = \theta_{00}$

$\mathbf{y} = \theta_{10} + \theta_{11}\mathbf{x}_1 = \mathbf{X}_1\boldsymbol{\theta}_1$, $\dim \mathbf{X}_1 = n \times 2$, $\dim \boldsymbol{\theta}_1 = 2 \times 1$

$\mathbf{y} = \theta_{20} + \theta_{21}\mathbf{x}_1 + \theta_{22}\mathbf{x}_2 = \mathbf{X}_2\boldsymbol{\theta}_2$, $\dim \mathbf{X}_2 = n \times 3$, $\dim \boldsymbol{\theta}_2 = 3 \times 1$

... и т.д.

$$\mathbf{y} = \theta_{s0} + \theta_{s1}\mathbf{x}_1 + \theta_{s2}\mathbf{x}_2 + ... + \theta_{s2}\mathbf{x}_s = \mathbf{X}_s\boldsymbol{\theta}_s, \qquad (3)$$

$$\dim \mathbf{X}_s = n \times s, \ \dim \boldsymbol{\theta}_s = s \times 1.$$

Изложение основного материала

Традиционно в алгоритмах МГУА от систем условных уравнений вида (2) переходят к нормальным системам уравнений $\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i \mathbf{и}_i = \mathbf{X}_i^T \mathbf{y}$, решение которых существует, если определитель квадратной матрицы размерности $\dim \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i = i \times i$ отличен от нуля. Затем применение известных способов решения (Гаусса, LU–метод и т. д.) сводится в конечном итоге к эквивалентному преобразованию матрицы $\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i$ – к верхней треугольной матрице $\mathbf{R}_i$, $\dim \mathbf{R}_i = i \times i$, на которую справа умножается вектор параметров $\mathbf{и}_i$.

Переход к верхней треугольной матрице возможен также непосредственно от прямоугольной матрицы $\mathbf{X}_i$, как:

$$\mathbf{R}_i = \mathbf{V}_i^T \mathbf{X}_i \qquad (4)$$

После чего компоненты вектора параметров $\hat{\mathbf{и}}_i$ находятся решением следующей преобразованной системы уравнений:

$$\mathbf{V}_i^T \mathbf{X}_i \mathbf{и}_i = \mathbf{V}_i^T \mathbf{y}, \qquad (5)$$

в обратном ходе обычного метода Гаусса. В работе [7] показано, что матрица преобразований $\mathbf{V}_i$ должна состоять из ортогональных векторов. $\mathbf{V}_i'$ – результат проектирования исходных векторов $\mathbf{x}_i, i = \overline{1, s}$ на ортогональную систему векторов $\mathbf{v}_i', i = \overline{1, s}$, а треугольная матрица $\mathbf{R}_i$ есть результат эквивалентного преобразования. Ортогонализация переменных может быть осуществлена рекуррентно с помощью процедуры Грама-Шмидта [8]:

$$\mathbf{v}_i' = \mathbf{x}_i - \sum_{j=0}^{i-1} (\mathbf{x}_i^T \mathbf{v}_j)\mathbf{v}_j, \qquad (6)$$

$$\dim \mathbf{v}_i' = \dim \mathbf{v}_i = n \times 1, \ i = \overline{0, s},$$

где $\mathbf{v}_i'$ – вектор ортогональный всем предыдущим i векторам. Если он не равен нулю, то на него может быть спроектирован вектор $\mathbf{x}_i$, а если он равен нулю (в реальных вычислениях – заданной ε погрешности вычисления) – значит к уже найденной ортогональной системе векторов $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_{i-1}$ данный вектор $\mathbf{x}_i$ является коллинеарным. И его нужно исключить из рассмотрения, т.к. он не может рассматриваться в качестве возможного аргумента модели. Вектора $\mathbf{v}'_i$ нормируются, как:

$$\mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{v}'_i}{(\mathbf{v}'^T_i \mathbf{v}'_i)^{1/2}} = \frac{\mathbf{v}'_i}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n} v'^2_{ij}}}, \; i = \overline{0, s}, \qquad (7)$$

где $|\mathbf{v}_j| = \sqrt{\sum_{j=1}^{n} v'^2_{ij}}$ есть длина вектора в n-мерном пространстве. Операция нормирования необходима для того, чтобы спроектировать вектор $\mathbf{x}_i$ на ортогональную систему полученных векторов $\mathbf{v}_j$, $j = \overline{1, (i-1)}$ и оценить искомый вектор параметров $\widehat{\mathbf{и}}_i$ как обратный ход в системе (5), поскольку $(\mathbf{x}_i^T \mathbf{v}_j) = |\mathbf{x}_i| \cos(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_j) = np_{\mathbf{v}_j} \mathbf{x}_i$, $\quad j = \overline{1, (i-1)}$, $\mathbf{V}_i^T \mathbf{V}_i = \mathbf{I}_i$, $\; i = \overline{0, m}$, где $\mathbf{I}_i$ – единичная диагональная матрица, имеющая размерность $\dim \mathbf{I}_i = (i+1) \times (i+1)$.

Для приведения индексации векторов в формуле (6) в соответствие со схемой усложнения моделей (3) необходимо определить вектор $\mathbf{x}_0$, как единичный $\mathbf{x}_0^T \overset{\Delta}{=} (1,1,...,1)$.

Из формулы (6) видно, что для вычисления ортогонального вектора $\mathbf{v}'_i$ при добавлении в модель вектора $\mathbf{x}_i$ необходима только матрица $\mathbf{V}_{i-1}$ и после вычисления $\mathbf{v}_i$ не следует пересчитывать полученные ортонормированные вектора $\mathbf{v}_j$, $j = \overline{1, (i-1)}$.

Вектор $\mathbf{v}'_0 \equiv \mathbf{x}_0$ и вектор $\mathbf{v}_0$ (в общем случае выбирается произвольно) совпадает с вектором $\mathbf{x}_0$ по направлению. В случае модели со свободным членом он имеет модуль $|\mathbf{v}_0| = 1$, $\quad \mathbf{v}_0 = \left(\frac{1}{\sqrt{n}}, \frac{1}{\sqrt{n}}, ..., \frac{1}{\sqrt{n}} \right)^T$, $\dim \mathbf{v}_i = n \times 1$.

Все последующие вектора строятся, как ортогональные к предыдущим, поэтому вся совокупность векторов не зависит от порядка включения последующих векторов при фиксированном множестве переменных $\mathbf{x}_i \in \mathbf{X}_s$. На порядок их следования в матрице $\mathbf{V}_s$ влияет только порядок включения переменных $\mathbf{x}_i$ в модель.

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{x}_1 - (\mathbf{x}_1^T \mathbf{v}_0) \mathbf{v}_0, \; \mathbf{v}_1 = \frac{\mathbf{v}'_1}{|\mathbf{v}'_1|},$$

$$\mathbf{v}'_2 = \mathbf{x}_2 - (\mathbf{x}_2^T \mathbf{v}_0) \mathbf{v}_0 - (\mathbf{x}_2^T \mathbf{v}_1) \mathbf{v}_1, \; \mathbf{v}_2 = \frac{\mathbf{v}'_2}{|\mathbf{v}'_2|},$$

и т. д.

$$\mathbf{v}'_s = \mathbf{x}_s - \sum_{j=0}^{s-1} (\mathbf{x}_s^T \mathbf{v}_j) \mathbf{v}_j, \quad \mathbf{v}_s = \frac{\mathbf{v}'_s}{|\mathbf{v}'_s|}.$$

Матрица $\mathbf{V}_s = (\mathbf{V}_{s-1} \vdots \mathbf{v}_s)$ составлена из ортонормированных векторов $\mathbf{V}_s = (\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, ..., \mathbf{v}_{s-1}, \mathbf{v}_s)$. После этого получаем треугольную матрицу $\mathbf{R}_s$ по формуле (4).

Для системы уравнений $\mathbf{X}_s \boldsymbol{\theta}_s = \mathbf{y}$ из определенной системы $\mathbf{V}_s^T \mathbf{X}_s \mathbf{и}_s = \mathbf{V}_s^T \mathbf{y}$ находим решение. Выпишем соотношения для определения компонентов вектора параметров:

$$\theta_{ss} = \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{v}_s}{\mathbf{x}_s^T \mathbf{v}_s},$$

$$\theta_{ss-1} = \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{v}_{s-1} - (\mathbf{x}_s^T \mathbf{v}_{s-1}) \theta_{ss}}{\mathbf{x}_{s-1}^T \mathbf{v}_{s-1}},$$

$$\dots$$

$$\theta_{s0} = \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{v}_0 - (\mathbf{x}_1^T \mathbf{v}_0) \theta_{s1} - ... - (\mathbf{x}_s^T \mathbf{v}_0) \theta_{ss}}{\mathbf{x}_0^T \mathbf{v}_0}, \qquad (8)$$

Изменение индекса $s = \overline{s_\ell, s_j}$.организуется таким образом, чтобы был полный перебор вариантов моделей без повторов структур $s_j \in \{m,..,2\}, s_\ell \in \{1,2,...,s_k\}$, $\; s_k < m$, $\; s_\ell \le s_j$. Оценим количество операций.

Учитывая, что операция сложения выполняется намного быстрее, чем операция умножения и деления, обычно ограничиваются подсчетом последних.

Известно [1] , что для решения СЛАУ методом Гаусса без выбора главного элемента требуется $\frac{s^3}{3} + s^2 - \frac{s}{3}$ умножений и делений, решение СЛАУ методом квадратного корня требует $\frac{s^3}{6} + \frac{3}{2}s^2 + \frac{s}{3}$ и s операций извлечения корней. Метод вращения предполагает вчетверо больше операций умножения, чем в методе Гаусса. При больших значениях размерности s, можно сказать, что вычислительные затраты на операции умножения и деления в методе Гаусса составляют величину $O\left(\frac{s^3}{3}\right)$, в методе квадратных корней $O\left(\frac{s^3}{6}\right)$, в методе вращений $O\left(\frac{4}{3}s^3\right)$.

Для рекуррентных алгоритмов наименьших квадратов с окаймлением [6] и модификации алгоритмов Гаусса и Грама-Шмидта в работе [3] дана следующая оценка количества вычислительных операций: $3s^2-2s$.

Для того, чтобы можно было сравнивать метод Грама-Шмидта-Гаусса с другими методами не будем учитывать оценку свободного члена в уравнении (1).

Для получения ортонормированной системы векторов Грама-Шмидта $\mathbf{V}_s=(\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2,...,\mathbf{v}_{s-1},\mathbf{v}_s)$ требуется s^2 операций умножения и деления и s операций извлечения квадратного корня. Для получения треугольной матрицы $\mathbf{R}_s -\ 0{,}5s^2+2s$ операций и для умножения матрицы на вектор $\mathbf{V}_s^T\mathbf{y}\ -\ s$ операций. Для обратного хода при определении параметров s-ой модели по методу Гаусса необходимо сделать $0{,}5s^2+s$ операций умножения и деления. Всего – $2s^2+5s$ операций умножения, деления и извлечения квадратного корня.

При больших значениях размерности s, можно сказать, что вычислительные затраты на операции умножения и деления для вложенных структур в рекуррентном методе Гаусса и методе наименьших квадратов с окаймлением составляют величину $O(3s^2)$, в методе Грама-Шмидта-Гаусса вычислительные затраты на операции умножения, деления и извлечения квадратного корня составляют величину $O(2s^2)$.

Пример

Продемонстрируем метод Грама-Шмидта-Гаусса на примере решения СЛАУ четвертого порядка.

Пусть имеем систему условных уравнений: $\mathbf{Xи}=\mathbf{y}$, $\dim\mathbf{X}=5\times 4$:

$$
\begin{aligned}
&\theta_0+5\theta_1-\theta_2+2\theta_3=9{,}5\\
&\theta_0+3\theta_1+4\theta_2-5\theta_3=-3{,}5\\
&\theta_0+\theta_1+\theta_2+\theta_3=6{,}5\quad ,\\
&\theta_0+\theta_1+\theta_2-\theta_3=0{,}5\\
&\theta_0-2\theta_1+3\theta_2-3\theta_3=-4{,}5
\end{aligned}
$$

$$
\mathbf{X}=\begin{bmatrix}1&5&-1&2\\1&3&4&-5\\1&1&1&1\\1&1&1&-1\\1&-2&3&-3\end{bmatrix},\ \mathbf{y}=\begin{bmatrix}9{,}5\\-3{,}5\\6{,}5\\0{,}5\\-4{,}5\end{bmatrix}.
$$

На первом шаге получаем первый нормированный вектор-столбец $\mathbf{v}_0$, совпадающий по направлению с первым вектором $\mathbf{x}_0$ матрицы $\mathbf{X}$.

$$
\mathbf{v}_0=\begin{bmatrix}0{,}447213595\\0{,}447213595\\0{,}447213595\\0{,}447213595\\0{,}447213595\end{bmatrix}
$$

На втором шаге находим вектор-столбец $\mathbf{v}_1'$ – ортогональную проекцию $\mathbf{x}_1$ к первому вектору $\mathbf{x}_0$ по формуле (6) и нормируем ее по формуле (7). Получим:

$$
\mathbf{v}_1=\begin{bmatrix}0{,}65192\\0{,}268438\\-0{,}11504\\-0{,}11504\\-0{,}69027\end{bmatrix}.
$$

На третьем шаге находим ортогональный $\mathbf{v}_2$ к полученным двум ортогональным векторам $\mathbf{v}_0$ и $\mathbf{v}_1$, и находим проекцию третьего вектора-столбца $\mathbf{x}_2$ на $\mathbf{v}_2$, как $\mathbf{v}_2'$ после чего нормируем его. Получаем:

$$
\mathbf{v}_2=\begin{bmatrix}-0{,}40252\\0{,}850235\\-0{,}23893\\-0{,}23893\\0{,}030135\end{bmatrix}
$$

На четвертом и последнем шаге получаем четвертый вектор-столбец $\mathbf{v}_3$ матрицы $\mathbf{V}$, ортогональной к матрице плана $\mathbf{X}$:

$$\mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix} -0{,}13311 \\ 0{,}020478 \\ 0{,}815284 \\ -0{,}53883 \\ -0{,}16382 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} 0{,}4472136 & 0{,}65192 & -0{,}40252 & -0{,}13311 \\ 0{,}4472136 & 0{,}268438 & 0{,}850235 & 0{,}020478 \\ 0{,}4472136 & -0{,}11504 & -0{,}23893 & 0{,}815284 \\ 0{,}4472136 & -0{,}11504 & -0{,}23893 & -0{,}53883 \\ 0{,}4472136 & -0{,}69027 & 0{,}030135 & -0{,}16382 \end{bmatrix}$$

Умножаем транспонированную матрицу $\mathbf{V}^T$ на матрицу **X,** либо заполняем по формулам (8) соответствующие элементы верхней треугольной матрицы $\mathbf{R}_3$:

$$\mathbf{V}^T\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 2{,}236067977 & 3{,}577708764 & 3{,}577709 & -2{,}683282 \\ 0 & 5{,}215361924 & -1{,}879064 & 2{,}032457 \\ -2{,}28983E-16 & -4{,}02456E-16 & 3{,}416009 & -5{,}146615 \\ -3{,}88578E-16 & 7{,}77156E-16 & -2{,}72E-15 & 1{,}476982 \end{bmatrix}$$

Умножаем транспонированную матрицу $\mathbf{V}^T$ на вектор **y** и получаем вектор-столбец:

$$\mathbf{V}^T\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 3{,}801316 \\ 7{,}554605 \\ -8{,}60783 \\ 4{,}430945 \end{bmatrix}.$$

И, наконец, по формуле (8) вычисляем коэффициенты уравнения, как обратный ход метода Гаусса. Получаем: $\hat{\mathbf{и}} = \mathbf{и} = \begin{bmatrix} 0{,}5 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$.

Выводы и перспективы

Метод Грама-Шмидта-Гаусса решения линейной системы уравнений является наиболее экономичным из известных рекуррентных и нерекуррентных методов, поскольку он пропорционален удвоенному квадрату числа операций. Данный метод непосредственно работает с исходной таблицей (прямоугольной матрицей) данных без предварительного преобразования ее к квадратному виду (к системе нормальных уравнений), что позволяет отсеивать коллинеарные векторы на этапе построения ортонормированных векторов в пространстве точек, проделав лишь s^2 операций умножения. Ввиду того, что по методу Грама-Шмидта-Гаусса при $s > 7$ в 1,5 раза делается меньше операций, чем известными экономичными рекуррентными методами (не говоря о нерекуррентных методах), его ошибка вычислений накапливается в меньшей степени, что дает преимущество данному методу при прочих равных условиях (одинаковый ранг матрицы, одинаковая степень ее обусловленности, одинаковая погрешность вычисления и т.д.) перед другими и делает его наиболее численно устойчивым.

Список литературы

1. А.Ф.Ляхов, Солдатов Е.В., Чернова Е.В. Прямые методы решения систем линейных алгебраических уравнений– Н.Новгород: ННГУ, 1999.–16 с.
2. Шелудько О.И. Самоорганизация математических моделей при решении некоторых задач надежности и контроля. // Дисс. на соиск. учен. степ. канд. техн. наук. К.: КПИ. – 1975. – 166 с.
3. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. Изд. 2-е.. – М.-Л.: Физматгиз, 1963 г.
4. Єфіменко С. М. Інструментальні засоби для дослідження та застосування методів моделювання за статистичними даними // Автореферат канд. дисертації на здоб. наук. ст. канд. техн. наук, К.: МННЦ ИТіС. – 2009. – 20 с.
5. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ. – М.: Мир, 1980. – 456 с.

6. Ивахненко А.Г., Степашко В.С. Помехоустойчивость моделирования. – К.: Наук. думка, 1985. –214с.
7. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1973. – 831 с.
8. Хорн Р., Джонсон Ч. Матричный анализ. – М.: Мир, 1989. – 655 с.

Поступила в редакцию 12.12.2009