Итерационный метод решения систем линейных уравнений с использованием q-градиента

В.А. Есаулов, Д.В.Гринченков, В.А. Мохов

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова

Аннотация: Цель и задачи данной работы состоят в развитии итерационных методов методов решения систем линейных уравнения. Достижение цели и задач обеспечивается путем разработки итерационного метода с использованием аппарата q-дифференцирования. С помощью программного пакета Matlab проведен вычислительный эксперимент, в результате которого подтверждена работоспособность предложенного метода.

Ключевые слова: система линейных уравнений, целевая функция, градиентный метод, итерационный метод, моделирование, алгоритм, экстремум функции, q-производная, относительная погрешность, норма вектора, невязка, обусловленность задачи.

Введение

Численное решение систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) – одна из наиболее часто встречающихся задач в научно-технических исследованиях, экономике, статистике [1, 2]. Все используемые на практике методы решения СЛАУ можно разделить на прямые и итерационные [3]. Известно, что многие прямые методы решения СЛАУ, основанные на концепции абсолютной точности, при наличии погрешностей не могут быть положены в основу универсальных вычислительных программ для ЭВМ в силу неустойчивости решений к погрешностям.

Преимуществом итерационных методов является удобное применение в современной вычислительной технике. Они позволяют получить решение с заранее заданной точностью [3-5].

Построение итерационного метода решения СЛАУ с использованием q-градиента

Общая схема организации итерационного процесса решения СЛАУ $Ax = b$ имеет вид [1, 4]:

$$X_{k+1} = X_k - \tau_k \left(AX_k - b \right), \tag{1}$$

где X_k, X_{k+1} –приближения решения СЛАУ на *k*-й и *(k+1)*-й итерациях;

τ_k – шаг итерационного процесса.

В ряде итерационных методов решение СЛАУ рассматривают как задачу минимизации функции невязки [4, 5]:

$$f(X) = \left\| AX - b \right\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - b_i \right)^2 \to \min \ , \tag{2}$$

где X – вектор переменных целевой функции.

В итерационной постановке (3) может решаться с применением градиентных методов, имеющих вид:

$$X_{k+1} = X_k - \tau_k \nabla f\left(X_k \right), \tag{3}$$

X_k, X_{k+1} – значения аргумента функции (2) на *k*-й и *(k+1)*-й итерациях;

Рассмотрим итерационный процесс решения СЛАУ с применением q-производной [6, 7]. Использование q-производных при расчете антиградиента в методе наискорейшего спуска [6, 8] также дает возможность повышения качества поиска оптимума функции.

Определение q-производной имеет следующий вид [6]:

$$D_q f(x) = \begin{cases} \dfrac{f(qx) - f(x)}{qx - x}, x \neq 0 \\ \dfrac{df(0)}{dx}, x = 0 \\ \dfrac{df(x)}{dx}, q = 1 \end{cases} \quad , \tag{4}$$

Используя в (3) q-градиент с учетом (4) получим следующий итерационный процесс:

$$X_{k+1} = X_k - \tau_k \left(A_{q_k} X_k - 2A^T b \right), \quad (5)$$

где q_k , $1 \le q_k \le 2$ - порядок q-градиента на *k*-й итерации;

$A_{q_k} = \left(\left(2A^T A + (1 + q_k - 2) diag(A^T A) \right) \right)$ - главная матрица СЛАУ на *k*-й итерации.

Из (5) видно, что при фиксированном значении q_k шаг τ_k может определяться вариационными методами решения СЛАУ [4, 5]. Так, для метода минимальных невязок, величина τ_k рассчитается как

$$\tau_k = \frac{\left(r_k, A_{q_k} r_k \right)}{\left\| A_{q_k} r_k \right\|^2}, \quad (6)$$

Где $r_k = 2A^T b - A_{q_k} X_k$ – величина невязки.

В случае использования метода наискорейшего спуска для τ_k имеем:

$$\tau_k = \frac{\left\| r_k \right\|^2}{\left(r_k, A_{q_k} r_k \right)}, \quad (7)$$

Рассмотрим варианты расчета оптимальной величины q_k. Общая формула оценки величины q_k может быть сформулирована через оценку минимума (1) на k-ой итерации:

$$f(x_{k+1}) = \left\| AX_{k+1} - b \right\|^2 \to \min, \quad (8)$$

С учетом представлений (6), (7), задачу (8) можно переформулировать как задачу поиска q_k следующим образом:

$$f(x_{k+1}) = \left\| A \left(x_k + \frac{\left(r_k, A_{q_k} r_k \right)}{\left\| A_{q_k} r_k \right\|^2} r_k \right) - b \right\|^2 \to \min, \ 1 \le q_k \le 2, \quad (9)$$

С учетом (5), для формулы (7) оценки τ_k задача (8) примет вид

$$f(x_{k+1}) = \left\| A \left(x_k + \frac{\left\| r_k \right\|^2}{\left(r_k, A_{q_k} r_k \right)} r_k \right) - b \right\|^2 \to \min, \ 1 \le q_k \le 2, \quad (10)$$

Поиск величины q_k, как видно из (9), (10) представляет собой одномерную нелинейную задачу, может усложнить реализацию (5). В этой связи интерес представляет поиск способов упрощенного расчета q_k, минимально снижающих точность расчета решения СЛАУ.

При поиске эвристики, адекватно описывающей расчет q_k, будем исходить из определения q-производной (4). Из нее видно, что q показывает, во сколько раз отличаются начальная и конечная точки, в которых вычисляются значения функций.

Рассмотрим векторы X_{k+1} и X_k. Вектор $\xi_k = X_{k+1} - X_k$ можно интерпретировать как невязку между приближениями, характеризующую сходимость процесса (1). С учетом ξ_k связь между координатами X_{k+1} и X_k можно представить следующим образом:

$$X_{k+1} = X_k + \xi_k = \left(I + \Omega^k\right) X_k \qquad (11)$$

где Ω^k - матрица перехода, связывающая ξ_k и X_k;

I – единичная матрица.

Матрицу Ω^k можно рассматривать как преобразование растяжения X_k, она будет иметь диагональный характер. Коэффициенты растяжения соответственно составят

$$\Omega_{ii}^k = \frac{X_{k+1}^i - X_k^i}{X_k^i} \qquad (12)$$

где X_k^i и X_{k+1}^i – i-е координаты векторов X_k и X_{k+1}.

Если считать, что компоненты X_k^i и X_{k+1}^i достаточно близки по своему значению, (23) можно аппроксимировать как

$$\Omega_{ii}^k = \frac{X_{k+1}^i - X_k^i}{X_k^i} \approx \frac{X_{k+1}^i - X_k^i}{X_{k+1}^i} \approx \frac{X_{k+1}^i - X_k^i}{\overline{X}^i} \qquad (13)$$

где $\overline{X}^i = \dfrac{X_{k+1}^i + X_k^i}{2}$ - среднее значение.

Выражение (12) можно определить как относительную погрешность координаты X_{k+1}^i относительно X_k^i. С учетом геометрического смысла (4) элемент Ω_{ii}^k можно интерпретировать как порядок частной q-производной функции (2) по переменной x_i. Таким образом, из анализа (12), (13) можно сделать вывод о том, что величину порядка q_k можно оценить по величине погрешности между векторами X_{k+1} и X_k.

Если рассмотреть величину порядка q-градиента в смысле (12), (13), то (5) можно записать следующим образом:

$$X_{k+1} = X_k - \tau_k\left(\left(2A^T A + \Omega^k \cdot diag(A^T A)\right)X_k - 2A^T b\right) \qquad (14)$$

Упростим (14), преобразовав элементы матрицы Ω^k в одно значение. Для этого оценим параметр порядка q-градиента q_k как погрешность для векторов X_{k+1} и X_k следующим образом:

$$q_k = 1 + \varepsilon_k = 1 + \frac{\|X_{k+1} - X_k\|}{\|X_{k+1}\|} \qquad (15)$$

Формула (15) описывает степень близости X_k и X_{k+1} при условии, что X_{k+1} на *k*-й итерации можно рассматривать как точку минимума (1).

От выбора нормы $\|\cdot\|$ для оценки q_k в (15) зависит точность решения в итерационном процессе (5). Наиболее очевидным решением представляется выбор норм $\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_\infty$ как наиболее часто встречающихся в практике оценивания параметров матриц и характеристик итерационных процессов [5].

Вычислительный эксперимент

Для сравнительного анализа степени эффективности с методикой (5) и ее вариациями (8)-(15) выбирались методы Зейделя, Якоби, а также минимальной невязки и наискорейшего спуска [9]. Максимальное число итераций для каждого из методов задавалось как 4000. Критерием останова итерационных процессов являлось отношение $\|X_{k+1} - X_k\|_2 \le \delta$, где δ – допустимая погрешность. Величина погрешности задавалась как $\delta = 10^{-7}$.

В качестве тестовой СЛАУ выбиралась задача Филипса [10], известная своей плохой обусловленностью. Порядок СЛАУ составил 100. При этом в качестве начального приближения задавался нулевой вектор.

Данные о величине погрешности решения СЛАУ при использовании стандартных методов и (5) с расчетом порядка q-градиента из (9), из (10) приведены в табл. 1.

Таблица № 1.

. Сводная таблица погрешностей решения задачи Филипса

Численные методы решения СЛАУ	Погрешность, %
Методы Зейделя и Якоби	–
Метод минимальной невязки	1.79
Метод минимальной невязки для (3)	0.63
Метод наискорейшего спуска	–
Метод наискорейшего спуска для (3)	0.646
Методика (5), определение q_k из (9)	0.614
Методика (5), определение q_k из (10)	0.5133

Оценки погрешности решения задачи Филипса при использовании модифицированных методик определения порядка q-градиента приведены в табл. 2.

Таблица № 2

Погрешности решения задачи Филипса при использовании упрощенных методик расчета q_k

Методы решения СЛАУ	Погрешность, %
Методика (13), (14) с оценкой шага τ_k по (6)	0.5710
Методика (13), (14) с оценкой шага τ_k по (7)	0.6625

Методика (5) с оценкой шага τ_k по (6), оценка q_k по (15)	
Норма $\|\cdot\|_1$ для оценки q_k	0.5786
Норма $\|\cdot\|_2$ для оценки q_k	0.5725
Норма $\|\cdot\|_\infty$ для оценки q_k	0.5730
Методика (5) с оценкой шага τ_k по (7), оценка q_k по (15)	
Норма $\|\cdot\|_1$ для оценки q_k	0.6405
Норма $\|\cdot\|_2$ для оценки q_k	0.6339
Норма $\|\cdot\|_\infty$ для оценки q_k	0.6267

Знак «–» в табл. 1, 2 означает, что указанные методы расходятся. Из сравнительного анализа погрешностей в табл. 1, 2 вытекает, что наименьшую величину ошибки для решения задачи Филипса дает методика (5) с использованием (10). Вместе с тем, модификации (13) – (15) оценки порядка градиента дают сопоставимую величину ошибки при более простом способе расчета q_k.

Заключение

В статье предложена методика решения СЛАУ (5) на основе использования q-градиента от функции (2) с возможностью адаптивной оценки его порядка. Вычислительный эксперимент показал ее применимость в отношении решения плохо обусловленных задач. Следующими шагами в модификации методов решения СЛАУ могут стать обобщение проекционных методов решения СЛАУ с учетом использования q-градиентов и дополнительной информации о решаемой СЛАУ.

Литература

1. Шарый С.П. Курс вычислительных методов. Учеб. пособие. – Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т. , 2014 г. , 279 с.

2. Целигоров Н.А., Целигорова Е.Н., Мафура Г.В. Математические модели неопределённостей систем управления и методы, используемые для их исследования // Инженерный вестник Дона, 2012, № 4(часть 2) URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/ n4p2y2012/1340.

3. Бегляров В.В., Берёза А.Н. Гибридный эволюционный алгоритм решения систем линейных алгебраических уравнений, описывающих электрические цепи // Инженерный вестник Дона, 2013, №1 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/ n1y2013/1540.

4. Хейгеман Л. Прикладные итерационные методы: пер. с англ. / Л. Хейгеман, Д. Янг. – М.: Мир, 1986. – 446 с.

5. Голуб Дж. Матричные вычисления: пер. с англ. / Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун. – М.: Мир, 1999. – 548 с.

6. A. C. Soterroni, R. L. Galski and F. M. Ramos, “The q-gradient vector for unconstrained continuous optimization problem” // Operations Research Proceddings 2010, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, pp. 365–370 (2011).

7. Ernst, T.: A method for q-calculus. J. Nonlinear Math. Phys. 10, pp. 487–525 (2003).

8. Ubaid M. Al-Saggaf, Muhammad Moinuddin, Muhammad Arif, Azzedine Zerguine. Theq-Least Mean Squares algorithm // Signal Processing 111 (2015), pp. 50-60.

9. Горбаченко В. И. Вычислительная линейная алгебра с примерами на MATLAB. — СПб.: БХВ-Петербург, 2011. — 320 с.

10. Phillips D.L. A technique for the numerical solution of integral equation of the first kind // J.ACM. – 1962. – № 9. – pp. 84-97.

References

1. Sharyj S.P. Kurs vychislitel'nyh metodov. Ucheb. Posobie [The course of computing methods. Tutorial]. Novosibirsk: Novosib. gos. un-t., 2014 g., 279 p.

2. Celigorov N.A., Celigorova E.N., Mafura G.V. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2012, № 4(part 2) URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4p2y2012/1340.

3. Begljarov V.V., Berjoza A.N. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2013, №1 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/ n1y2013/1540.

4. Hageman L. Prikladnye iteratsionnye metody [Applied Iterative Methods]: per. s angl. L. Hageman, D. Young. M.: Mir, 1986. 446 p.

5. Golub H. Matrichnye vychisleniya [Matrix Computations]: per. s angl. H. Golub, Ch. Van Loun. M.: Mir, 1999. 548 p.

6. A. C. Soterroni, R. L. Galski and F. M. Ramos, "The q-gradient vector for unconstrained continuous optimization problem". Operations Research Proceddings 2010, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, pp. 365-370 (2011).

7. Ernst, T.: A method for q-calculus. J. Nonlinear Math. Phys. 10, pp. 487–525 (2003).

8. Ubaid M. Al-Saggaf, Muhammad Moinuddin, Muhammad Arif, Azzedine Zerguine. Theq-Least Mean Squares algorithm. Signal Processing 111 (2015), pp. 50-60

9. Gorbachenko V. I. Vychislitel'naya lineynaya algebra s primerami na MATLAB [Numerical Linear Algebra with examples in MATLAB]. SPb: BKhV-Peterburg, 2011. 320 p.

10. Phillips D.L. A technique for the numerical solution of integral equation of the first kind. J.ACM. 1962. № 9. pp. 84-97.