V. V. Voevodin, T. L. Rudneva, The block variant of the reflection method in the solution of linear algebraic systems, *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.*, 1970, Volume 10, Number 5, 1281–1285

ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ и МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 10 | Сентябрь 1970 Октябрь | № 5

НАУЧНЫЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 518:512.25

О КЛЕТОЧНОМ ВАРИАНТЕ МЕТОДА ОТРАЖЕНИЙ ПРИ РЕШЕНИИ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В. В. ВОЕВОДИН, Т. Л. РУДНЕВА

(Москва)

При решении больших систем алгебраических уравнений на ЭВМ возникает необходимость создания и использования клеточных вариантов известных методов [1, 2].

Сравнивая различные методы решения, обычно рассматривают скорость их работы (число арифметических операций), удобство реализации на машине. Однако в последнее время [3, 4] особое внимание стали уделять вопросам точности и устойчивости счета. С точки зрения точности вычислений на классе систем лучшими являются методы, основанные на ортогональных преобразованиях, и наиболее эффективным среди этих методов является метод отражений. В настоящей заметке описывается клеточный вариант метода отражений.

Пусть имеем прямоугольную вещественную матрицу S размером $n\times l$, $l\leqslant n$. Разобьем ее на клетки

$$S' = \begin{array}{c|c|c} & l & n-l \\ \hline l & S_l' & S_{n-l}' \end{array},$$

где S_l' — квадратная матрица порядка l. Предположим, что столбцы матрицы S ортогональны, т. е.

$$S'S = E_l, \tag{1}$$

где E_l — единичная матрица порядка l.

По аналогии с обычным вариантом метода отражений будем строить матрицу

$$R = E_n - 2ww', \tag{2}$$

где w — матрица размером $n\times l$, причем $w'w = E_l$.

Имеем

$$R'R = E_n - 4ww' + 4ww'ww' = E_n,$$

т. е. R — ортогональная матрица.

Будем подбирать w таким образом, чтобы

$$RS = Q,\qquad Q' = \begin{array}{c|c|c} & l & n-l \\ \hline l & Q_l' & 0 \end{array}. \tag{3}$$

Так как R и S ортогональны, то Q (а следовательно, и Q_l) тоже должна быть ортогональной:

$$S'R'RS = Q'Q = E_l.$$

Перепишем (3), используя (2):

$$(E_n - 2ww')S = Q. \tag{4}$$

Умножим равенство (4) слева на S':

$$S'S - 2S'ww'S = S'Q. \tag{5}$$

Так как слева стоит матрица симметричная, $S'Q$ тоже должна быть симметричной. Пусть $S_l = t\lambda r$ — сингулярное разложение [5] матрицы S_l. Положим $Q_l = tIr$, где

I — диагональная матрица с вещественными диагональными элементами i_{kk}, по модулю равными 1. Знаки этих элементов определим позже.

Покажем, что построенная таким образом матрица Q удовлетворяет нужным условиям. Так как t, r и I ортогональные, то Q ортогональна. Кроме того,

$$S'Q = Q'S. \tag{6}$$

Действительно, так как в нашем случае $S'Q = S_l'Q_l$ и $Q'S = Q'_lS_l$, то имеем $S_l'Q_l = r'\lambda t'tIr$, т. е. эта матрица симметричная.

Теперь необходимо найти матрицу w. Более удобно перейти к новой матрице

$$U = S - Q. \tag{6'}$$

Обозначим $w'S = k$, где k — квадратная и, по предположению, невырожденная. Из (4) имеем

$$2wk = U, \tag{7}$$

откуда

$$2w = Uk^{-1}$$

и

$$2ww' = {}^1\!/_2U(k'k)^{-1}U'.$$

Но из ортогональности S и Q и соотношения (6) следует

$$U'U = (S' - Q')(S - Q) = 2(E - S'Q). \tag{8}$$

С другой стороны, из равенства (5) имеем

$$2k'k = E - S'Q.$$

Таким образом,

$$U'U = 4k'k.$$

Окончательно

$$R = E_n - 2U(U'U)^{-1}U', \qquad Q_l = tIr.$$

В дальнейшем нам придется вычислять $(U'U)^{-1}$, поэтому для устойчивости счета необходимо, чтобы обусловленность матрицы $U'U$ была минимальной. Но

$$U'U = 2(E_l - S_l'Q_l) = 2(E_l - r'\lambda Ir) = 2r'(E - \lambda I)r. \tag{9}$$

Так как S_l — минор l-го порядка ортогональной матрицы S, то $|\lambda_{kk}| \leqslant 1$ для всех k и максимальное собственное значение $U'U$ не превосходит 4. Выберем знаки диагональных элементов матрицы I так, чтобы минимальное собственное значение было по возможности бо́льшим, а именно, положим

$$i_{kk} = \begin{cases} +1, & \lambda_{kk} < 0, \\ -1, & \lambda_{kk} \geqslant 0. \end{cases}$$

Покажем, что построенная таким образом матрица является искомой. Имеем

$$R'R = (E - 2U(U'U)^{-1}U')(E - 2U(U'U)^{-1}U') =$$
$$= E - 4U(U'U)^{-1}U' + 4U(U'U)^{-1}U'U(U'U)^{-1}U' = E.$$

$$RS = (E - 2U(U'U)^{-1}U')S = S - 2U(U'U)^{-1}U'S.$$

Но, согласно (8), $U'S = (S' - Q')S = S'S - Q'S = E - Q'S = {}^1\!/_2U'U$, поэтому $RS = S - U = Q$.

Пусть теперь матрица S размером $n \times l$ произвольна. С помощью ортогональных преобразований (например, матриц вращения) приведем ее к виду

$$S = N\Lambda, \qquad \Lambda' = l\begin{array}{c|c} l & n-l \\ \hline \Lambda_l' & 0 \end{array}, \tag{10}$$

где N — ортогональная, а Λ_l — верхняя треугольная. Так как Λ отлична от нуля только в первых l строках, из матрицы N размером $n \times n$ в разложении (10) участвуют только первые l столбцов. Обозначим их через $\tilde{S}$.

Для $\widetilde{S}$ выполнены условия ортогональности, поэтому, согласно изложенному выше, мы можем построить клеточную матрицу отражения $\widetilde{R}$ такую, что

$$\widetilde{R}\widetilde{S}=\widetilde{Q}, \qquad \widetilde{Q}'=\begin{array}{c} \\ l \end{array}\!\!\begin{array}{c|c} l & n-l \\ \hline \widetilde{Q}_l' & 0 \\ \hline \end{array}.$$

Окончательно будем иметь $\widetilde{R}S=\widetilde{Q}\Lambda_l$.

Теперь оценим величину ошибок округления при проведении вычислений с плавающей запятой в предложенном варианте метода отражений. При этом будем пользоваться системой обозначений и некоторыми результатами из [3]. Сначала предположим, что столбцы заданной матрицы S почти ортогональны, т. е.

$$S'S=E_l+\varepsilon_1.$$

Точная матрица преобразования такова:

$$R=E_n-2U(U'U)^{-1}U',$$

или, используя соотношения (6′) и (9), находим

$$R=E_n-(S-Q)r'(E_l-\lambda I)^{-1}r(S'-Q'). \tag{11}$$

Предположим, что матрицу R мы будем хранить в виде отдельных сомножителей, не перемножая их в явном виде. Поэтому все ошибки представления матрицы R будут возникать только при вычислении этих сомножителей. Будем помечать чертой сверху реально вычисленные величины.

1. Вычисляем компоненты сингулярного разложения

$$S_l=t\lambda r, \tag{12}$$

$$\bar{t}\bar{\lambda}\bar{r}=S_l+\varepsilon_2. \tag{13}$$

2. Вычисляем матрицу $\overline{Q}=fl_2(\bar{t}I\bar{r})\equiv\bar{t}I\bar{r}+\varepsilon_3$.

3. Вычисляем матрицу $\overline{U}=fl(S-\overline{Q})\equiv S-\overline{Q}+\varepsilon_4$.

4. Вычисляем диагональную матрицу $B=fl(E-\bar{\lambda}I)^{-1}\equiv(E-\bar{\lambda}I)^{-1}+\varepsilon_5$.

К сожалению, нельзя показать, что $\|R-\overline{R}\|$ мала, но можно получить соотношение $\overline{R}'\overline{R}=E+\varepsilon_6$, где $\|\varepsilon_6\|$ достаточно мала. Действительно,

$$\overline{R}'\overline{R}=E-\overline{U}\bar{r}'B\bar{r}\overline{U}'-\overline{U}\bar{r}'B'\bar{r}\overline{U}'+\overline{U}\bar{r}B'\bar{r}\overline{U}'\overline{U}\bar{r}'B\bar{r}\overline{U}'.$$

Поэтому, учитывая соотношение $B'=B$,

$$\overline{R}'\overline{R}=E-2\overline{U}\bar{r}'B\bar{r}\overline{U}'+\overline{U}\bar{r}'B'\bar{r}\overline{U}'\overline{U}\bar{r}'B\bar{r}\overline{U}'.$$

Теперь покажем, что $B'\bar{r}\overline{U}'\overline{U}\bar{r}'=2E+\varepsilon_9$. Имеем

$$B'\bar{r}\overline{U}'\overline{U}\bar{r}'=B\bar{r}(S'-\overline{Q}'+\varepsilon_4')(S-\overline{Q}+\varepsilon_4)\bar{r}'=B\bar{r}(S'-\overline{Q}')(S-\overline{Q})\bar{r}'+\varepsilon_{10}.$$

Пусть $\overline{Q}'\overline{Q}=E_l+\varepsilon_{11}$. Рассмотрим отдельно выражение

$$\bar{r}(S'-\overline{Q}')(S-\overline{Q})\bar{r}'=\bar{r}(S'S+\overline{Q}'\overline{Q}-\overline{Q}'S-S'\overline{Q})\bar{r}'=$$
$$=\bar{r}(E+\varepsilon_1+E+\varepsilon_{11}-(\bar{r}'I\bar{t}'+\varepsilon_3')t\lambda r-r'\lambda t'(\bar{t}I\bar{r}+\varepsilon_3))\bar{r}'=$$
$$=\bar{r}2E\bar{r}'-\bar{r}\bar{r}'I\bar{t}'t\lambda r\bar{r}'-\bar{r}r'\lambda t'\bar{t}I\bar{r}\bar{r}'+\varepsilon_{12}.$$

Из равенств (12) и (13) находим

$$\bar{t}\bar{\lambda}\bar{r}=t\lambda r+\varepsilon_2, \qquad \bar{\lambda}=\bar{t}'t\lambda r\bar{r}'+\varepsilon_{13}, \qquad \bar{\lambda}=\bar{r}r'\lambda t'\bar{t}+\varepsilon_{13}'.$$

Кроме этого, $\bar{r}\bar{r}'=E+\varepsilon_{14}$. Отсюда получаем

$$\bar{r}(S'-\overline{Q}')(S-\overline{Q})\bar{r}'=2(E-I\bar{\lambda})+\varepsilon_{15}, \qquad B'\bar{r}\overline{U}'\overline{U}\bar{r}'=2E+\varepsilon_9.$$

Следовательно, $\overline{R}'\overline{R}=E+\varepsilon_6$, и остается оценить $\|\varepsilon_6\|_2$.

Все возникающие при оценке ошибки более высокого порядка будем обозначать одной буквой ε. Пусть мы знаем, что для некоторых констант f и φ будет $\|\varepsilon_1\|_2\leqslant f2^{-t}$ и $\|\varepsilon_2\|_2\leqslant\varphi 2^{-t}$. Матрица ε_3 появляется при перемножении с двойной точностью почти ортогональных матриц, поэтому $\| \varepsilon_3 \|_2 \leqslant (1+\varepsilon)2^{-t}$. Матрица ε_4 состоит из ошибок при сложении двух почти ортогональных матриц, следовательно, $\| \varepsilon_4 \|_2 \leqslant (2+\varepsilon)2^{-t}$.

Диагональная матрица ε_5 появляется при вычислениях типа $1/\alpha$, где все $\alpha \geqslant 1$, поэтому $\| \varepsilon_5 \|_2 \leqslant (1+\varepsilon)2^{-t}$. Так как $\| B \|_2 \leqslant 1$, то, учитывая соотношение

$$\varepsilon_{10} = B\bar{r}\varepsilon_4'(S-\bar{Q})\bar{r}' + B\bar{r}(S'-\bar{Q}')\varepsilon_4\bar{r}',$$

находим

$$\| \varepsilon_{10} \|_2 \leqslant 2(\| B \|_2 \| \bar{r} \|_2 \| \varepsilon_4 \|_2 \| S-\bar{Q} \|_2 \| \bar{r}' \|_2) \leqslant (8+\varepsilon)2^{-t}.$$

Имеем, далее

$$\bar{Q}'\bar{Q} = \bar{r}'I\bar{t}'\bar{t}I\bar{r} + \varepsilon_3'\bar{t}I\bar{r} + \bar{r}'I\bar{t}'\varepsilon_3.$$

Пусть $\bar{r}'\bar{r} = E_l + \varepsilon_{14}$ и $\bar{t}'\bar{t} = E_l + \varepsilon_{14}^*$. По предположению, $\bar{Q}'\bar{Q} = E_l + \varepsilon_{11}$. Известно, что $\|\varepsilon_{14}\|_2$, $\|\varepsilon_{14}^*\|_2$, $\|\varepsilon_3\|_2 \leqslant (1+\varepsilon)2^{-t}$, поэтому $\|\varepsilon_{11}\|_2 \leqslant (4+\varepsilon)2^{-t}$.

Оценим $\| \varepsilon_{12} \|_2$. Эта ошибка имеет вид

$$\varepsilon_{12} = \bar{r}\varepsilon_1\bar{r}' + \bar{r}\varepsilon_{11}\bar{r}' - \bar{r}\varepsilon_3'\bar{t}\lambda r\bar{r}' - \bar{r}r'\lambda t'\varepsilon_3\bar{r}'.$$

Следовательно, учитывая полученные выше оценки, находим $\|\varepsilon_{12}\|_2 \leqslant (j+6+\varepsilon)2^{-t}$. В свою очередь, $\varepsilon_{13} = \bar{t}'\varepsilon_2\bar{r}'$. Поэтому $\| \varepsilon_{13} \|_2 \leqslant (\varphi+\varepsilon)2^{-t}$.

Рассмотрим теперь

$$\varepsilon_{15} = 2\varepsilon_{14} - \varepsilon_{14}I\bar{\lambda} + I\varepsilon_{13} - \bar{\lambda}I\varepsilon_{14} + \varepsilon_{13}'I + \varepsilon_{12} + \varepsilon_{14}\varepsilon_{13} + \varepsilon_{13}'\varepsilon_{14},$$

откуда

$$\| \varepsilon_{15} \|_2 \leqslant (10+2\varphi+f+\varepsilon)2^{-t}.$$

Так как $B'\bar{r}\bar{U}'\bar{U}\bar{r}' = ((E-\bar{\lambda}I)^{-1}+\varepsilon_5)(2(E-I\bar{\lambda})+\varepsilon_{15})+\varepsilon_{10}$ и $\varepsilon_9 = \varepsilon_5 2(E-I\bar{\lambda}) + (E-\bar{\lambda}I)^{-1}\varepsilon_{15} + \varepsilon_{10}$, то

$$\|\varepsilon_9\|_2 \leqslant (4+10+2\varphi+f+8+\varepsilon)2^{-t},$$

или

$$\| \varepsilon_9 \|_2 \leqslant (22+2\varphi+f+\varepsilon)2^{-t}.$$

Окончательно,

$$\varepsilon_6 = \bar{U}\bar{r}'\varepsilon_9 B\bar{r}\bar{U}' \quad \text{и} \quad \| \varepsilon_6 \| \leqslant (88+8\varphi+4f+\varepsilon)2^{-t}.$$

Таким образом, показано, что построенная матрица $\bar{R}$ почти ортогональна.

Теперь рассмотрим произведение

$$\bar{R}S = (E-\bar{U}\bar{r}'B\bar{r}U')S = S - \bar{U}\bar{r}'B\bar{r}\bar{U}'S =$$
$$= S - (S-\bar{Q}+\varepsilon_4)\bar{r}'((E-\bar{\lambda}I)^{-1}+\varepsilon_5)\bar{r}(S'-\bar{Q}'+\varepsilon_4')S =$$
$$= S - (S-\bar{Q})\bar{r}'(E-\bar{\lambda}I)^{-1}\bar{r}(S'-\bar{Q}')S + \varepsilon_{16}.$$

Здесь

$$\varepsilon_{16} = -\varepsilon_4\bar{r}'(E-\bar{\lambda}I)^{-1}\bar{r}(S'-\bar{Q}')S - (S-\bar{Q})\bar{r}'\varepsilon_5\bar{r}(S'-\bar{Q}')S - (S-\bar{Q})\bar{r}'(E-\bar{\lambda}I)^{-1}\bar{r}\varepsilon_4'S.$$

Следовательно, $\| \varepsilon_{16} \|_2 \leqslant (12+\varepsilon)2^{-t}$.

Рассмотрим отдельно произведение

$$\bar{r}(S'-\bar{Q}')S = \bar{r}(S'S-\bar{Q}'S) = \bar{r}(E_l+\varepsilon_1-(\bar{r}'I\bar{t}'+\varepsilon_3')t\lambda r) = \bar{r}E_l - I\bar{t}'t\lambda r + \varepsilon_{17},$$

где $\varepsilon_{17} = \bar{r}\varepsilon_1 - \bar{r}\varepsilon_3't\lambda r - \varepsilon_{14}'I\bar{t}'t\lambda r$ и $\| \varepsilon_{17} \|_2 \leqslant (2+f+\varepsilon)2^{-t}$. Так как $\bar{t}'t\lambda r = \bar{\lambda}\bar{r} + \varepsilon_{18}$, где $\varepsilon_{18} = \bar{t}'\varepsilon_2$, то $\| \varepsilon_{18} \|_2 \leqslant (\varphi+\varepsilon)2^{-t}$.

Таким образом, имеем

$$\bar{r}(S'-\bar{Q}')S = \bar{r}E_l - I\bar{\lambda}\bar{r} + \varepsilon_{19} = (E_l - I\bar{\lambda})\bar{r} + \varepsilon_{19},$$
$$\varepsilon_{19} = \varepsilon_{17} - I\varepsilon_{18}, \qquad \| \varepsilon_{19} \|_2 \leqslant (2+f+\varphi+\varepsilon)2^{-t},$$

откуда

$$\bar{R}S = S - S(E_l+\varepsilon_{20}) + \bar{Q}(E_l+\varepsilon_{20}) + \varepsilon_{16} = \bar{Q} + \varepsilon_{21},$$

где

$$\varepsilon_{20} = \varepsilon_{14} + \bar{r}'(E-\bar{\lambda}I)^{-1}\varepsilon_{19}, \qquad \| \varepsilon_{20} \|_2 \leqslant (3+f+\varphi+\varepsilon)2^{-t},$$
$$\varepsilon_{21} = \varepsilon_{16} + \bar{Q}\varepsilon_{20} - S\varepsilon_{20}, \qquad \| \varepsilon_{21} \|_2 \leqslant (18+2f+2\varphi+\varepsilon)2^{-t}.$$

Итак, применяя преобразование $\bar{R}$ и заменяя при этом $\bar{R}\bar{S}$ на $\bar{Q}$, мы вносим погрешность не более чем ε_{21}. Оценим теперь ошибку при вычислении произведения $\bar{R}\tilde{S}$, где $\tilde{S}$ уже не предполагается ортогональной, т. е. оценим разность $F = \bar{R}\tilde{S} - fl(\bar{R}\tilde{S})$. Имеем

$$\bar{R}\tilde{S} = (E - \bar{U}\bar{r}'B\bar{r}\bar{U}')\tilde{S} = \tilde{S} - \bar{U}\bar{r}'B\bar{r}\bar{U}'\tilde{S}.$$

Аналогично тому, как это было проделано выше, рассматриваем последовательные операции

$$fl_2(\bar{U}'\tilde{S}) = \bar{U}'\tilde{S} + F_1, \qquad \|F_1\|_E \leqslant (2+\varepsilon)\,\|\tilde{S}\|_E 2^{-t},$$

$$fl_2(\bar{r}fl_2(\bar{U}'\tilde{S})) = \bar{r}\bar{U}'\tilde{S} + F_2, \qquad \|F_2\|_E \leqslant (4+\varepsilon)\,\|\tilde{S}\|_E 2^{-t},$$

$$fl_2(Bfl_2(\bar{r}\bar{U}'\tilde{S})) = B\bar{r}\bar{U}'\tilde{S} + F_3, \qquad \|F_3\|_E \leqslant (6+\varepsilon)\,\|\tilde{S}\|_E 2^{-t},$$

$$fl_2(\bar{r}'fl_2(B\bar{r}\bar{U}'\tilde{S})) = \bar{r}'B\bar{r}\bar{U}'\tilde{S} + F_4, \qquad \|F_4\|_E \leqslant (8+\varepsilon)\,\|\tilde{S}\|_E 2^{-t},$$

$$fl_2(\bar{U}fl_2(\bar{r}'B\bar{r}\bar{U}'\tilde{S})) = \bar{U}\bar{r}'B\bar{r}\bar{U}'\tilde{S} + F, \qquad \|F\|_E \leqslant (20+\varepsilon)\,\|\tilde{S}\|_E 2^{-t}.$$

Таким образом, умножение $\bar{R}$ на произвольную матрицу $\tilde{S}$ можно выполнить с хорошей точностью.

Поступила в редакцию 20.01.1970

Цитированная литература

1. В. М. Волович. О решении систем линейных алгебраических уравнений клеточными методами. В сб. «Вычисл. методы и программирование». Вып. 3. М., Изд-во МГУ, 1965.
2. Тан Чжэнь. О клеточном методе ортогонализации решения систем совместных линейных алгебраических уравнений с большим числом неизвестных. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1961, 1, № 1, 78—89.
3. J. H. Wilkinson. The algebraic eigenvalue problem. Oxford, Clarendon Press, 1965.
4. В. В. Воеводин. Ошибки округления и устойчивость в прямых методах линейной алгебры. Ротапринт ВЦ МГУ, 1969.
5. В. В. Воеводин. Численные методы алгебры (теория и алгорифмы). М., «Наука», 1966.

УДК 518:517.949.12

РЕГУЛЯРИЗОВАННЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ПРОЦЕСС ДЛЯ АНАЛИЗА ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ

Л. АЛЕКСАНДРОВ

(Болгария, София)

В вычислительной практике часто встречается задача выделения экспонент с неизвестными декрементами h_i и амплитудами a_0, a_i по конечному числу значений их суммы y_j, известных приближенно:

$$a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_i \exp(-h_i x_j) = y_j, \qquad j = 1, 2, \ldots, m. \tag{1}$$

Число экспонент n, вообще говоря, также неизвестно.

Ввиду большой чувствительности решения к малым изменениям величин $y(x_j)$ требуется применять специальные устойчивые методы для решения системы (1).

В настоящей работе предлагается итерационный процесс построения решения системы (1), основанной на одной специфической для экспоненциальных зависимостей линеаризации. На каждой итерации для решения плохообусловленных систем