

ТЕХНОЛОГИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ В МЕТОДЕ КАЧМАЖА

Бабенко В.Н.

ФГБОУ ВПО «Кубанский Государственный университет», Краснодар, Россия (350040, Краснодар, ул. Ставропольская, 149), e-mail: rnibvd@mail.ru

В работе [3] был изложен алгоритм Качмажа для решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности, соответственно, в [2] для него проведено исследование скорости сходимости. Однако вопросы технологии вычислений, которые в современных условиях выходят на первый план, остались не раскрытыми. Данная статья призвана устранить образовавшийся пробел. В формуле для вычисления последовательности приближений, сходящейся к точному решению, используется псевдоинверсия матриц. Процедура ее вычисления ведет к неоправданно большим расходам машинных ресурсов. В представленной работе изложены теоретические обоснования, позволяющие избежать указанной процедуры. Затем подробно излагается технология вычислений последовательности приближений к точному решению. Аналогичные действия проведены в отношении алгоритма вычисления наклонов линейных многообразий. В статье указаны способ размещения векторов отражений и возможности эффективного обмена данными между оперативной и внешней памятью.

Ключевые слова: алгоритм, псевдообращение матрицы, система линейных уравнений большой размерности, технология вычислений, обмен данными между оперативной и внешней памятью, преобразования отражения.

TECHNOLOGY OF CALCULATIONS IN METHOD KACHMAG

Babenko V.N.

Kuban State university, Krasnodar, Russia (350040, Krasnodar, Stavropolskaya street, 149), e-mail:rnibvd@mail.ru

In work [3] algorithm Kachmag for the decision of systems of the linear algebraic equations of the big dimension has been stated, accordingly in [2] for him{ research of speed of convergence is lead. However questions of technology of calculations which in modern conditions leave on the foreground, have remained not opened. Given clause is called to remove the formed blank. In the formula for calculation of sequence approach, converging to the exact decision, pseudo-inversion of matrixes is used. Procedure of its calculation conducts to unfairly big charges of machine resources. In the submitted work the theoretical substantiations are stated, allowing to avoid the specified procedure. Then the technology of calculations of sequence приближений to the exact decision is in detail stated. Similar actions are lead concerning algorithm of calculation of inclinations of linear varieties. In clause are specified a way of accommodation of vectors of reflections and opportunities of an effective exchange between operative and external memory.

Keywords: algorithm, pseudo-reference of a matrix, system of the linear equations of the big dimension, technology of calculations, data exchange between operative and external memory, transformations of reflection.

Введение

Для решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности в [3] был предложен алгоритм (в дальнейшем мы будем называть его алгоритмом Качмажа, так как он является обобщением алгоритма указанного автора). Суть предложенного алгоритма заключается в следующем.

Пусть задана система линейных алгебраических уравнений

$$(1) Ax = y,$$

где x, y – суть N -мерные векторы, A – невырожденная матрица. Последовательность приближений $\{x^i\}$, вычисляемых по формуле

$$(2) x^i = x^{i-1} + A_l^+(y_l - A_l x^{i-1}),$$

где $l = \text{mod}_p(i)$, x^0 – произвольный вектор, $i = 1, 2, \dots$, сходится по евклидовой норме к $\bar{x}$ – точному решению системы (1) [3]. Здесь матрица A и вектор y представляются следующим образом:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ \dots \\ A_p \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_p \end{pmatrix}.$$

В [2] был исследован характер сходимости вычислительного процесса (1). В частности, показано, что скорость сходимости метода Качмажа существенно зависит от наклонов между линейными многообразиями, определяемыми строками матриц A_l .

Введем обозначения $r^{i,i-1} = x^{i-1} - x^i$, $r^i = x^i - \bar{x}$. Далее вычитая из обеих частей (2) вектор x^{i-1} , получим

$$\begin{aligned} r^{i,i-1} &= -(A_l^+ y_l - A_l x^{i-1}) = \\ &= A_l^+ A_l x^{i-1} - A_l^+ y_l. \end{aligned}$$

Норма разности двух смежных приближений $\|r^{i,i-1}\|$, отнесенная к норме погрешности i -го приближения $\|r^i\|$, тем больше, чем больше $\theta(R(A_l^*), R(A_{l-1}^*))$ – наклон между линейными многообразиями $R(A_l^*)$ и $R(A_{l-1}^*)$, то есть справедливо неравенство

$$\frac{\|r^{i,i-1}\|}{\|r^i\|} \geq \theta(R(A_l^*), R(A_{l-1}^*)).$$

Здесь $R(A_l^*)$ и $R(A_{l-1}^*)$ – образы линейных операторов A_l^* и A_{l-1}^* соответственно.

Тем самым показано, что повышение скорости сходимости метода Качмажа может быть достигнуто путем группирования подсистем линейных алгебраических уравнений.

Также были решены задачи выбора значения параметра останова вычислительного процесса и установления связанной с ним оценкой точности полученного приближенного решения. Процесс вычислений по формуле (2) следует продолжать до тех пор, пока приближенное решение x^i не будет удовлетворять условию

$$(3) \|r^i\| = \|x^i - \bar{x}\| \leq \delta.$$

Но точное решение $\bar{x}$ неизвестно, поэтому обычно используется другой критерий останова вычислений – выполнение неравенства

$$\|r^{i,i-1}\| = \|x^{i-1} - x^i\| \leq \varepsilon.$$

Пусть k и r^{k-1} таковы, что

$\theta_{k,k-1} = \min_l \theta(R(A_l^*), R(A_{l-1}^*))$, тогда если для некоторого i выполняется неравенство

$$\|r^{i,i-1}\| \leq \delta \theta_{k,k-1} (1 - \theta_{k,k-1}^2)^{-1/2},$$

то процесс вычислений следует прекратить и в качестве $\bar{x}$ принять x^i . При этом будет обеспечено выполнение неравенства (3).

Поскольку скорость сходимости метода Качмажа существенно зависит от наклонов между линейными многообразиями, в [2] предложен алгоритм их вычисления:

- 1) $k=1$, взять произвольный вектор x^0 такой, что $Pr_{R(A_l^*)} x \neq 0$;
- 2) $y^k = P_{R_m} x^{k-1}$;
- 3) $x^k = P_{R_l} y^{k-1}$;
- 4) если $\|x^k\|^2 \|x^{k-1}\|^2 - (x^k, x^{k-1})^2 \leq \varepsilon$, то перейти на 5), иначе $k=k+1$, и идти на 2);
- 5) $\gamma = \|x^k\|^2 / \|y^k\|^2$;
- 6) $\theta_{lm} = (1 - \gamma)^{1/2}$;
- 7) конец.

Здесь через P_{R_m} и P_{R_l} обозначены ортопроекторы на $R(A_m^*)$ и $R(A_l^*)$ соответственно. Как известно, $P_{R_l} = A_l^+ A_l$ и $P_{R_m} = A_m^+ A_m$ [1, 6].

Достоинством алгоритма является его универсальность: метод Качмажа не опирается ни на какие частные свойства матрицы системы (1), за исключением требования невырожденности ее матрицы. Однако алгоритм не приобрел популярности, видимо, по той причине, что в формулах присутствует псевдообратная матрица A_l^+ , вычисление которой весьма накладно. В этой статье мы преследуем цель – предложить технологию вычислений в методе Качмажа, такую, что для ее реализации достаточно воспользоваться стандартными подпрограммами, имеющимися в большинстве пакетов программ вычислительной линейной алгебры, при этом вычисление псевдообратных матриц не требуется.

1. Технологические аспекты вычислений в методе Качмажа

В настоящее время вопросы разработки технологий вычислений в связи с их актуальностью вышли на первый план. Обратимся и мы к вопросу технологии вычислений метода Качмажа. Очевидно, непосредственное вычислений последовательности приближенных решений по формуле (2) неприемлемо, так как в ее состав входит псевдообратная матрица A_l^+ , вычисление которой является трудоемкой вычислительной

задачей. Нетрудно показать, что можно избежать процедуры вычисления A_l^+ . Пусть матрица A_l состоит из n строк и пусть $P_l = P_{1l} \dots P_{n-2,l}$ и $Q_l = Q_{1l} \dots Q_{nl}$ – произведения отражений, приводящие матрицу A_l к двухдиагональному виду с нижней побочной диагональю. Другими словами,

$$B_l = P_l^* A_l Q_l = (D_l \mid 0),$$

$$\text{где } D_l = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & . & . & . & . & 0 \\ b_2 & d_2 & . & . & . & . & . \\ 0 & b_3 & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & d_{n-1} & 0 & . \\ 0 & . & . & . & 0 & b_n & d_n \end{pmatrix}.$$

Легко обнаружить, что псевдорешение w системы уравнений $B_l w = v$, задаваемое

$$\text{соотношением } w = B_l^+ v, \text{ где } B_l^+ = \begin{pmatrix} D_l^{-1} \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ может быть определено по формулам:}$$

$$(12) w_1 = v_1 / d_1;$$

$$w_i = (v_i - b_i w_{i-1}) / d_i, \text{ для } i = 2, n;$$

$$w_i = 0, \text{ для } i = n+1, N. \text{ С учетом последних соотношений обратимся к формуле (2)}$$

$$\begin{aligned} x^i &= x^{i-1} + A_l^+ (y_l - A_l x^{i-1}) = \\ &= x^{i-1} - A_l^+ A_l x^{i-1} + A_l^+ y_l = \\ &= (I - A_l^+ A_l) x^{i-1} + A_l^+ y_l = \\ &= (I - Q_l B_l^+ B_l Q_l^*) x^{i-1} + Q_l B_l^+ P_l^* y_l = \\ &= Q_l (I - B_l^+ B_l) Q_l^* x^{i-1} + Q_l B_l^+ P_l^* y_l = \\ &= Q_l ((I - B_l^+ B_l) Q_l^* x^{i-1} + B_l^+ P_l^* y_l). \end{aligned}$$

Введем обозначения: $P_l^* y_l = v_l$, $Q_l^* x^{i-1} = u^{i-1}$, $w_l = B_l^+ v_l$. С учетом этих обозначений мы можем записать

$$(13) x^i = Q_l ((I - B_l^+ B_l) u^{i-1} + w_l).$$

Определим структуру матрицы $I - B_l^+ B_l$. Очевидно, $B_l^+ B_l = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ и, следовательно,

$I - B_l^+ B_l = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}$. Учитывая последние соотношения, (13) перепишем в виде

$x^i = Q_l (\bar{u}^{i-1} + w_l)$, где $\bar{u}^{i-1} = (0 \dots 0 u_{n+1}^{i-1} \dots u_N^{i-1})^*$, а компоненты вектора w_l определяются по формулам (12). Учитывая структуру векторов $\bar{u}^{i-1}$ и w_l , окончательно запишем

$$x^i = Q_l \bar{\bar{u}}^{i-1}, \text{ где } \bar{\bar{u}}^{i-1} = (w_{1l} \dots w_{nl} u_{n+1}^{i-1} \dots u_N^{i-1})^*.$$

Подводя итоги нашим усилиям, изложим метод Качмажа в новом виде:

- 1) $i=1$, x^0 – произвольный вектор;
- 2) по матрице A_l построить отражения $P_{1l}, \dots, P_{n-2,l}$ и $Q_{1l}, \dots, Q_{nl}$, приводящие матрицу A_l к двухдиагональному виду и вычислить элементы $d_1, \dots, d_n$ и $b_2, \dots, b_n$ матрицы D_l ;
- 3) вычислить $v_l = P_l^* y_l$, $u^{i-1} = Q_l^* x^{i-1}$, $w_l = B_l^+ v_l$, где $P_l = P_{1l} \dots P_{n-2,l}$ и $Q_l = Q_{1l} \dots Q_{nl}$;
- 4) вычислить $x^i = Q_l \bar{\bar{u}}^{i-1}$, где $\bar{\bar{u}}^{i-1} = (w_{1l} \dots w_{nl} u_{n+1}^{i-1} \dots u_N^{i-1})^*$;
- 5) если $\|x^i - x^{i-1}\| > \delta \theta_{k,k-1} (1 - \theta_{k,k-1}^2)^{-1/2}$, то $i=i+1$ и идти на 2);
- 6) конец.

Аналогичные действия проведем в отношении алгоритма вычисления наклонов линейных многообразий. Введем обозначения: n_l , n_m – количество строк у матриц A_l , A_m соответственно. Пусть $B_m = P_m^* A_m Q_m = (D_m \mid 0)$. Обращаясь к п. 2) алгоритма вычисления наклонов линейных многообразий, мы можем записать цепочку равенств

$$\begin{aligned} y^k &= A_m^+ A_m x^{k-1} = \\ &= (P_m B_m Q_m^*)^+ P_m B_m Q_m^* x^{k-1} = \\ &= Q_m B_m^+ P_m^* P_m B_m Q_m^* x^{k-1} = \\ &= Q_m B_m^+ B_m Q_m^* x^{k-1}. \end{aligned}$$

Структура матрицы $B_m^+ B_m$ нам известна, поэтому, введя обозначение $u^{k-1} = Q_m^* x^{k-1}$, мы можем записать

$$y^k = Q_m \bar{u}^{k-1}, \text{ где } \bar{u}^{k-1} = (u_1^{k-1} \dots u_{n_m}^{k-1} 0 \dots 0)^*.$$

Аналогично, обращаясь к пункту 3) алгоритма, запишем

$$x^k = A_l^+ A_l y^k = Q_l B_l^+ B_l Q_l^* y^k.$$

Введя обозначение $v^k = Q_l^* y^k$, мы получим формулу

$$x^k = Q_l \bar{v}^k, \text{ где } \bar{v}^k = (v_1^k \dots v_{n_l}^k 0 \dots 0)^*.$$

В соответствии с изложенным выше, мы изменим алгоритм вычисления наклонов линейных многообразий.

- 1) $k=1$, взять произвольный вектор x^0 такой, что $Pr_{R(A_m^*)} x \neq 0$;
- 2) $u^{k-1} = Q_m^* x^{k-1}$, $y^k = Q_m \bar{u}^{k-1}$,
где $\bar{u}^{k-1} = (u_1^{k-1} \dots u_{n_m}^{k-1} 0 \dots 0)^*$;
- 3) $v^k = Q_l^* y^k$, $x^k = Q_l \bar{v}^k$,
где $\bar{v}^k = (v_1^k \dots v_{n_l}^k 0 \dots 0)^*$;
- 4) если $\|x^k\|^2 \|x^{k-1}\|^2 - (x^k, x^{k-1})^2 \leq \varepsilon$, то перейти на 5), иначе $k=k+1$, и идти на 2);
- 5) $\gamma = \|x^k\|^2 / \|y^k\|^2$;
- 6) $\theta_{lm} = (1 - \gamma)^{1/2}$;
- 7) конец.

2. Обсуждение результатов

Анализируя изложенные алгоритмы, мы видим, что для их реализации достаточно воспользоваться стандартными вычислительными процедурами: приведения матрицы к двухдиагональному виду вычисления отраженного вектора, сложения векторов, вычисления скалярного произведения векторов и нормы вектора, имеющимися в большинстве пакетов программ по вычислительной линейной алгебре [4, 5]. Разрабатывать новые программы не нужно.

К достоинствам алгоритма Качмажа мы должны отнести простоту организации обмена данными между оперативной и внешней памятью (построчный обмен), кроме этого указанный обмен можно (должно) производить параллельно.

При выполнении i -той итерации векторы отражений $p_{1l}, \dots, p_{n-2,l}$ и $q_{1l}, \dots, q_{nl}$ ($l = i, i = 1, p$), определяющие преобразования отражения $P_{1l}, \dots, P_{n-2,l}$ и $Q_{1l}, \dots, Q_{nl}$, которые приводят матрицу A_l к двухдиагональному виду $B_l = P_l^* A_l Q_l = (D_l \mid 0)$, следует располагать в оперативной памяти (ОП) на месте, занимаемом исходной матрицей A_l , а после итерации завершения данные, содержащие информацию о векторах отражения, — перенести во внешнюю память (ВП). Вычисленные элементы двух диагоналей матрицы D_l

ввиду незначительности занимаемого ими объема следует хранить в ОП. Когда $i > p$, информацию о векторах отражения $p_{1l}, \dots, p_{n-2,l}$ и $q_{1l}, \dots, q_{nl}$ можно получить построчным чтением массива ВП, ранее содержащим элементы матрицы A_l .

Замечание 1. Обратимся к геометрической интерпретации метода Качмажа. С последовательностью приближений $\{x^i\}$, где $x^i = (x_1^i \dots x_N^i)^*$, свяжем последовательность точек $\{M^i(x_1^i \dots x_N^i)\}$. Нетрудно обнаружить, что для любого i точка M^i является проекцией точки M^{i-1} на гиперплоскость $H_l = \{x : A_l x = y_l\}$, поэтому метод Качмажа еще называют проекционным [3].

Список литературы

1. Алберт А. Регрессия, псевдоинверсия и рекуррентное оценивание. – М.: Мир, 1977. – 234 с.
2. Бабенко В.Н. Сходимость проекционного алгоритма Качмажа // Вычисл. матем. и матем. физики. – 1984. - №10. – С. 1571-1573.
3. Васильченко Г.П., Светлаков А.А. Проекционный алгоритм решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности // Вычисл. матем. и матем. физики. – 1980. - №1. – С. 3-10.
4. Годунов С.К. Решение систем линейных уравнений. – Новосибирск: Наука, 1980. – 177 с.
5. Годунов С.К., Антонов А.Г., Кирилук О.П., Костин В.И. Гарантированная точность решения систем линейных уравнений в евклидовых пространствах. – Новосибирск: Наука, 1988. – 449 с.
6. Стренг Г. Линейная алгебра и ее применение. – М.: Мир, 1980. – 454 с.

Рецензенты:

Лебедев К.А., д.ф.-м.н., профессор кафедры вычислительной математики и информатики ФГБОУ ВПО Кубанского государственного университета, г. Краснодар.

Усатиков С.В., д.ф.-м.н., профессор кафедры общей математики ФГБОУ ВПО Кубанского государственного технологического университета, г. Краснодар.