МАТЕМАТИКА

Владимир Николаевич КУТРУНОВ –
заведующий кафедрой математического моделирования

Анна Александровна РАЗИНКОВА –
старший преподаватель филиала ТюмГУ в г. Сургуте

УДК 519.6

АНАЛОГ МЕТОДА ГАУССА РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ БЕЗ ВЫБОРА ГЛАВНОГО ЭЛЕМЕНТА

АННОТАЦИЯ. Новый прямой метод решения систем алгебраических уравнений размерности (m,n) *имеет прямой и обратный ход. Вследствие исключения процедуры выбора главного элемента усилена его вычислительная устойчивость.*

New direct method for solving linear systems of algebraic equations with (m,n)-matrix consists of the direct and backward parts. The absence of the main element choosing increases the numeric efficiency and accuracy of the method.

Как было показано в работе [1], нормальное псевдорешение системы уравнений

$$Au^T = b \tag{1}$$

имеет вид

$$u^T = (E - A^T(AA^T)^{-1}A)p^T + A^T(AA^T)^{-1}b^T, \tag{2}$$

где A матрица размерности (m,n), ранг которой равен m. Тогда AA^T – квадратная матрица размерности $m\times m$. Её ранг, как и матрицы A, равен m, следовательно, обратная матрица $(AA^T)^{-1}$ существует.

Решение (2) представим в матричной форме

$$u^T = \Phi p^T + D^T,$$

где $\Phi = E - A^T(AA^T)^{-1}A$ и $D = Qb^T = A^T(AA^T)^{-1}b^T$ В цитируемой статье доказана теорема:

Теорема 1. Квадратная матрица Φ является проектором, матрица Q псевдообратной матрицей к матрице A, а вектор D нормальным псевдорешением системы уравнений (1).

В статье [1] на основе общего решения (2) был сконструирован алгоритм решения системы (1) без обратного хода. Но формула (2) позволяет предложить также и отличный от гауссова метод исключения, включающий прямой и обратный ход. Разработаем реализацию этой схемы, основанную на последовательном решении отдельных уравнений и подстановке очередного решения во все оставшиеся уравнения системы. Этот подход идейно совпадает с гауссовым исключением с той существенной разницей, что не исключается никакое конкретное неизвестное.

Рассмотрим отдельное уравнение $su^T = q$. Здесь роль матрицы A играет вектор s, а вектора b^T число q. В случае одного уравнения легко вычисляются все необходимые величины формулы (2). Например, $\left(AA^T\right) = ss^T, \left(AA^T\right)^{-1} = 1/ss^T$. Выполнив все необходимые операции, в соответствии с правилом (2) можно записать его общее решение:

$$u^T = \left(E - \frac{s^T s}{ss^T}\right)p^T + \frac{s^T}{ss^T}q. \tag{3}$$

Эта формула является общим решением одного алгебраического уравнения, содержащего n неизвестных, однако в отличие от методов, в основе которых лежит метод исключения, ни одна из неизвестных компонент решения не выделена. Все неизвестные равноправны. Как и следовало ожидать, решение имеет существенный произвол, задаваемый вектором p^T. Пусть формула (3) является результатом решения первого уравнения из системы (1). Тогда, если продолжать аналогию с методом исключения, то для выполнения собственно исключения это решение надо подставить в оставшиеся уравнения системы. В результате получится система из *m-1* уравнения, содержащая в качестве неизвестной величины n-мерный вектор p^T. В полученной *m-1*-мерной системе уравнений по аналогии можно повторить процедуру исключения. Для получения рекуррентных формул прямого хода надо записать вид общего решения после использования первых i уравнений исходной алгебраической системы. Последнее уравнение этой группы уравнений имеет вид:

$$a'_i p_i^T = b'_i, \tag{4}$$

где вектор a'_i и число b'_i получились в уравнении с номером i после подстановки в него решения модифицированного уравнения с номером $i-1$. Отметим, что первое уравнение не модифицируется, поэтому

$$a'_1 = a_1;\ b'_1 = b_1;\ p_1^T = u^T. \tag{5}$$

Решение уравнения (4) в соответствии с (3) имеет вид:

$$p_i^T = \Phi_i p_{i+1}^T + D_i^T, \tag{6}$$

где
$$\Phi_i = E - \frac{(a'_i)^T a'_i}{a'_i (a'_i)^T},\quad D_i^T = \frac{(a'_i)^T}{a'_i (a'_i)^T} b'_i = Q_i b'_i. \tag{7}$$

Данная матрица и вектор отличаются от введенных в работе [1]. Их некоторые свойства будут изучены ниже. Полученное решение (6) надо подставить в уравнения $a'_j p_i^T = b'_j$, $j = i+1, i+2,...,m$ (то есть во все уравнения, следующие за уравнением (4)). Эта операция аналогична гауссову исключению, но она не уменьшает количество неизвестных, а лишь заменяет один неизвестный вектор p_i^T на другой неизвестный вектор p_{i+1}^T той же размерности. После небольшого преобразования подстановка дает:

$$a'_j \Phi_i p_{i+1}^T = b'_j - a'_j D_i^T .$$

Процедура модифицирует все уравнения с номерами $j > i$ за счет уже модифицированного уравнения с номером i, превращая их в следующие: $a''_j p_{i+1}^T = b''_j$, $m \ge j > i$. Модификация коэффициентов выполняется по формулам : $a''_j = a'_j \Phi_i$, $b''_j = b'_j - a'_j D_i^T$, $j = i+1, i+2,...,m$. Для дальнейших расчётов понадобятся только модифицированные коэффициенты уравнений, поэтому вместо символа двойного штриха будем писать один штрих и формулы модификации запишем в соответствии с символикой языков программирования с помощью оператора присваивания (:=):

$$a'_j := a'_j \Phi_i; \quad b'_j := b'_j - a'_j D_i^T, \qquad m \ge j > i. \tag{8}$$

Эта запись конструктивна с вычислительной точки зрения. Она означает, что система уравнений, определяемая вначале матрицей $A'_1 = A$ и вектором $b'^T = b^T$, последовательно модифицируется в матрицы A'_i, $i = 1,2,3,...m-1$, с помощью формул (8) начиная со строки с номером $i+1$, и модифицированную матрицу можно вычислять, не используя дополнительной памяти компьютера. В частности, после решения уравнения (4) по формулам (6), (7), а также модификации строк матрицы A'_i и вектора b' по формулам (8), модифицированное уравнение, следующее за уравнением (4), примет вид $a'_{i+1} p_{i+1}^T = b'_{i+1}$. Если это не последнее уравнение системы (т. е. $i+1 \ne m$), то с ним надо произвести действия исключения, аналогичные действиям (6)-(8). В противном случае (т.е. когда $i+1 = m$), последний раз было модифицировано последнее уравнение. Для осуществления обратного хода метода исключения его надо решить:

$$p_m^T = \Phi_m p_{m+1}^T + D_m^T, \tag{9}$$

где матрица и вектор Φ_m, D_m^T, необходимые для обратного хода, вычисляются по формулам (7).

В результате можно компактно записать прямой ход предлагаемого метода исключения. Пусть g_i, $i = 1,2,...,m$, компонента вектора g для хранения скалярных квадратов строк матрицы A конечной модификации. Вычислительный процесс имеет вид:

$$A' = A, \quad b' = b, \quad g_1 = a'_1 a'^T_1 .$$

$$\left.\begin{array}{l} \left.\begin{array}{l} b'_j := b'_j - a'_j D_i^T, \\ a'_j := a'_j \Phi_i, \end{array}\right] \; j = i+1, i+2,...,m \\ g_{i+1} = a'_{i+1} a'^T_{i+1} \end{array}\right] \; i = 1,2,...m-1. \tag{11}$$

В записи отмечены два вложенных цикла, а для описания процесса модификации матрицы A и вектора b использован оператор присваивания :=. Отметим, что матрицы Φ_i и вектора D_i^T явно не вычисляются. Нужны лишь результаты их действия на вектора a'_j, поэтому они эффективно используются в соответствии со своими факторизованными конструкциями (7), в которых величины $a'_i a'^T_i$ заменяются вычисленными значениями g_i. Результатами расчета прямого хода будут модифицированные матрица A и вектор b, соответственно A', b', которые вычислены и хранятся на исходных местах, и вектор g скалярных квадратов строк матрицы A'.

Теперь, полагая вычисленным решение p_m^T, можно выполнить обратный ход, вычисляя по формуле (6) последовательность промежуточных решений p_i^T, $i = m-1, m-2, ..., 1$. Вследствие (9) все они будут зависеть от произвольного вектора p_{m+1}^T. На последнем этапе, с учетом (5), получим решение задачи $u^T = p_1^T$. Если исходная система уравнений имела единственное решение, то произвол в этом решении должен исчезнуть. Следовательно, в решении p_1^T должен обратиться в нуль коэффициент при произвольном векторе p_{m+1}^T. После некоторых выкладок рекуррентный обратный ход можно записать явно. Для произвольного промежуточного решения p_i^T этот результат имеет вид:

$$p_i^T = \prod_{k=i}^{m} \Phi_k p_{m+1}^T + \sum_{j=i}^{m-1} \prod_{k=i}^{j} \Phi_k D_{j+1}^T + D_i^T, \quad i = m-1, m-2, ..., 2, 1. \qquad (11)$$

Для получения рекуррентных формул, удобных для расчетов, запишем соотношения (11) в следующей форме:

$$p_i^T = f_i p_{m+1}^T + d_i^T, \quad i = m-1, m-2, .., 2, 1. \qquad (12)$$

Из анализа равенства (11) и его сопоставления с формулой (12) следуют рекуррентные соотношения для вычисления коэффициентов f_i, d_i^T:

$$f_j = \prod_{k=j}^{m} \Phi_k = \Phi_j f_{j+1}, \qquad j = m-1, m-2, ..., i; \quad f_m = \Phi_m,$$

$$d_j^T = D_j^T + \Phi_j d_{j+1}^T, \qquad j = m-1, m-2, ..., i; \quad d_m^T = D_m^T.$$

Полагая $i = 1$, получим компактную последовательность обратного хода для получения нормального псевдорешения исходной системы уравнений:

$$\begin{aligned} u^T &= p_1^T = f_1 p_{m+1}^T + d_1^T, \\ f_i &= \Phi_i f_{i+1}, \quad f_m = \Phi_m, \\ d_i^T &= D_i^T + \Phi_i d_{i+1}^T, \quad d_m^T = D_m^T. \end{aligned} \qquad (13)$$

В процессе обратного хода (13) матрицы Φ_i и вектора D_i^T явно не вычисляются. Нужны лишь результаты их действия на матрицы f_i и вектора

d_i^T, поэтому они эффективно используются в соответствии со своими факторизованными конструкциями (7) через вычисленные вектора a_i'. Но для хранения последовательности матриц f_i придется выделить n^2 ячеек памяти персонального компьютера. В случае $m < n$ матрица f_1 необходима для получения по формулам (13) общего решения уравнения (1) с учетом произвола в виде вектора p_m^T. В случае $n = m$ решение не должно зависеть от произвольного вектора p_m^T, поэтому матрица f_1 должна быть нулевой и ее вычисление, а также вычисление всех промежуточных матриц f_i может быть опущено. Решением будет вектор $u^T = d_1^T$. Если все же матрица f_1 вычислена, то степень её отклонения от нулевой матрицы может служить мерой вычислительной точности найденного единственного решения u^T. Из вида общего решения (11) следует, что

$$f_1 = \prod_{k=1}^{m} \Phi_k$$

и на основании изложенного должна иметь место

Теорема 2. Если $n = m$ и квадратная матрица A не вырожденная, то

$$f_1 = \prod_{k=1}^{n} \Phi_k = 0 .$$

Чтобы доказать это, а также лучше изучить свойства сконструированного метода, необходимо изучить некоторые особенности матриц Φ_i и вектора D_i^T.

В соответствии с теоремой 1 любая из матриц Φ_i является проектором, то есть $\Phi_i = \Phi_i^T$, $\Phi_i \Phi_i = \Phi_i$, кроме того, $\Phi_i D_i^T = 0$, или, что то же самое, $\Phi_i Q_i = 0$. Эти утверждения непосредственно следуют из (7).

Из формулы (8) следует, что любая строка матрицы с номером j последовательно модифицируется с помощью проекторов Φ_i с меньшими номерами. Из рекурсивной записи (8) легко получить окончательный результат модификации через исходную строку матрицы:

$$a_j' = a_j \prod_{k=0}^{j-1} \Phi_k, \qquad \Phi_0 = E \tag{14}$$

Непосредственно из (8) видно, что $a_j' \Phi_j = 0$, поэтому, с учётом (14) получится

$$a_j' \Phi_j = \left(a_j \prod_{k=0}^{j-1} \Phi_k \right) \Phi_j = a_j \prod_{k=0}^{j} \Phi_k = 0 .$$

Число сомножителей в произведении может быть увеличено, поэтому отсюда следует более общий случай

$$a_j \prod_{k=0}^{r} \Phi_k = 0, \qquad j \le r . \tag{15}$$

Подстановка выражения (14) модифицированных коэффициентов в формулу (7) приводит к следующему представлению проектора:

$$\Phi_i = E - \frac{a_i'^T a_i'}{a_i' a_i^T} = E - \frac{\left(\prod_{j=1}^{i-1}\Phi_j\right)^T a_i^T a_i \prod_{j=1}^{i-1}\Phi_j}{a_i \prod_{j=1}^{i-1}\Phi_j \left(\prod_{j=1}^{i-1}\Phi_j\right)^T a_i^T}. \quad (16)$$

Умножая выражение (16) слева или справа на проектор Φ_{i-1}, учитывая свойство $\Phi_{i-1}\Phi_{i-1} = \Phi_{i-1}$, а также равенство (16), получим

$$\Phi_{i-1}\Phi_i = \Phi_i\Phi_{i-1} = \Phi_i + \Phi_{i-1} - E. \quad (17)$$

Умножая равенство (16) на Φ_{i-2}, учитывая коммутативность (17), свойство проектора $\Phi_{i-2}\Phi_{i-2} = \Phi_{i-2}$ и ещё раз само равенство (16), найдём:

$$\Phi_{i-2}\Phi_i = \Phi_i\Phi_{i-2} = \Phi_i + \Phi_{i-2} - E.$$

Действуя по аналогии, получим теорему:

Теорема 3. Матрицы Φ_i симметричны, являются проекторами, коммутативны, а их произведение может быть вычислено с помощью операций сложения, то есть

$$\Phi_i\Phi_j = \Phi_j\Phi_i = \Phi_i + \Phi_j - E, \quad i \neq j,$$

$$\Phi_i\Phi_i = \Phi_i$$

Следствие:

$$\prod_{i=k}^{j}\Phi_i\left(\prod_{i=k}^{j}\Phi_i\right)^T = \prod_{i=k}^{j}\Phi_i = \left(\prod_{i=k}^{j}\Phi_i\right)^T = \sum_{i=k}^{j}\Phi_i - (j-k)E. \quad (18)$$

Докажем теперь теорему 2. Ее доказательство опирается на равенство (15). Пусть матрица A квадратная, полного ранга. Тогда ее строки являются линейно независимыми векторами a_i и образуют базис в пространстве R^n. Разложим по этому базису произвольный вектор

$$z = \sum_{k=1}^{n}\beta_k a_k.$$

Произведем выкладки

$$z\prod_{i=0}^{n}\Phi_i = \sum_{k=1}^{n}\beta_k\left(a_k\prod_{i=0}^{n}\Phi_i\right) = 0.$$

Так как $k \le n$, то выражение в скобках на основании равенства (15) равно нулю. Из-за произвольности вектора z отсюда следует утверждение теоремы 2, следовательно, решение системы (1) в случае $n = m$ оказывается единственным, равным $u^T = d_1^T$ и нет необходимости вычислять последовательность векторов f_i.

Отметим некоторые особенности построенного метода. В классическом методе Гаусса для усиления вычислительной устойчивости метода используются различные идеи выбора исключаемого элемента, основанные на том, чтобы в процессе деления получающиеся строки не превосходили по модулю единицу. Так как в предлагаемом методе отсутствует не достаточно обоснованная процедура выбора номера исключаемой неизвестной величины, а условие ограниченности диапазона чисел благодаря формуле (7) будет автоматически выполняться, то от метода ожидается его значительная по сравнению с другими методами вычислительная устойчивость. Вычислительная устойчивость может быть усилена, если уравнения, почти линейно зависимые от предыдущих уравнений, будут решаться в последнюю очередь. Почти линейная зависимость, (или линейная зависимость) может устанавливаться при исследовании формулы исключения (7). Если квадрат $a_i'a_i'^T$ строки i матрицы A оказался нулевым, то соответствующее уравнение линейно зависимо от предыдущих уравнений. Его следует исключить из процедуры прямого и обратного хода и отдельно проанализировать причину этого явления. Если же эта величина оказалась «малой», то это уравнение следует переставить в системе уравнений, рассматривать последним и операцию исключения провести в последний момент. В этом случае эта почти линейная зависимость будет мало влиять на основной вычислительный процесс.

Можно отметить также наличие в алгоритме как прямого, так и обратного хода ряда вычислений, которые могут выполняться параллельно.

Сравнение с другими методами может осуществляться с помощью подсчета флопов (операций с плавающеё запятой). Используем данные из книг [2, 3].

Метод	Флопы
Гауссово исключение	$2n^3/3$
Ортогонализация Хаусхолдера	$4n^3/3$
Модифицированный Грамма-Шмидта	$2n^3$
Двухдиагонализация	$8n^3/3$
SVD- метод	$12n^3$
Наш метод ортогонального проектирования	$2n^3$
Наш аналог метода Гаусса	$2n^3$

В [2,3] отмечается, что метод флопов «грязный» метод сравнения, так как не учитывает действия по поиску и перезаписи информации, а этих операций может оказаться значительно больше, чем флопов. В самом деле, два предложенных метода решения алгебраических уравнений и собственный метод пакета Maple V при решении системы из семи уравнений работают одно и то же время, 0,94 секунды, хотя по флопам они различны. Отметим также, что по флопам самым быстродействующим оказывается метод Гаусса, хотя многие авторы отмечают, что группа методов ортогонализации более устойчива к влиянию погрешностей, а по фактической скорости счета сопоставима с ним.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кутрунов В. Н. Проекционный метод поиска псевдорешений систем линейных алгебраических уравнений // Вестник ТюмГУ. 2004. № 4. С. 242-250.

2. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1984. 320 с.

3. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления / Пер. с англ. М.: Мир,1999. 548 с.