COMPUTATIONAL MATHEMATICS
BANACH CENTER PUBLICATIONS, VOLUME 13
PWN–POLISH SCIENTIFIC PUBLISHERS
WARSAW 1984

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ В КОМПЮТЕРНОМ ОФОРМЛЕНИИ

В. Н. ФАДДЕЕВА

*ЛОМИ, наб. Фонтанки 27, Ленинград Д–11, СССР*

Прежде всего я хочу поблагодарить оргкомитет семестра за лестную для меня возможность выступить на этой трибуне. В последнее время в области вычислительных методов линейной алгебры интерес сдвинулся с математического аспекта в сторону аспекта связанного с построением соответствующего Software. У меня этот аспект вызывает интерес, может быть потому, что в свое время мне много приходилось считать на настольных машинах по бурно появляющимся методам, иногда столь неожиданным, как метод минимальных итераций Ланцоша или метод LR-алгорифма Рутисхаузера, и я хорошо отдаю себе отчет в сложности аккуратного проведения этих вычислений на компютерах.

Итак, Software по вычислительным методам линейной алгебры. Что это такое?

Вычислительные методы линейной алгебры позволяют и притом многими методами вычислять многие объекты, к каталогу которых я обращусь позднее. Эти объекты достаточно легко объединяются в группы по признаку порождающих их методов, так что вычисление их удобно проводить в рамках соответствующего пакета. Анализ вычислительных методов подсказывает желательность построения по крайней мере пяти пакетов, легко распознаваемых по их названиям, именно:

1. Уравнения,
2. Спектр,
3. Пучек,
4. Sparse,
5. Сетка.

Я не буду останавливаться здесь на архитектуре этих пакетов, а обращусь к менее организованным единицам, позволяющим вычислять нужные нам объекты, а именно алгол процедурам и фортран подпрограммам, которые в дальнейшем мы будем называть алгоритмами. Если считать временем их появления 1960 г., то к настоящему моменту их написано уже изрядное число и этот процесс бурно продолжается. При этом все они делятся на два класса. В один класс, который можно назвать мировым фондом алгоритмов относятся алгоритмы, тексты которых напечатаны в каком либо издании, в другой класс — личные фонды — можно отнести алгоритмы, листинги которых часто не общедоступны.

Мной была сделана попытка по собранию мирового фонда алгоритмов по вычислительным методам линейной алгебры и в результате появилась книга [1] с их библиографическим описанием. Уже сейчас я имею сведения о пропущенных алгоритмах. Мне бы хотелось уменьшить эту неполноту материала вашими сообщениями о пропущенных мной работах с тем чтобы сразу подготовить дополнение.

Уже попытка составления систематического указателя привела по существу к тому каталогу вычисляемых объектов, о котором я говорила и который я сейчас приведу. Но прежде я хочу сказать о том, что принятое деление по рубрикам [F1], [F2], [F3], [F4], [F5] мной было отклонено может быть именно потому, что оно неправильно выявляло вычисляемые объекты.

Мировой фонд алгоритмов позволяет находить следующие объекты:

1. Скалярное произведение векторов,
2. Ортонормированную систему векторов,
3. Сумму матриц,
4. Произведение матрицы на число,
5. Произведение двух матриц (в том числе по Штрассену),
6. Нормы матриц,
7. Тензорное произведение матриц,
8. Следы степеней матриц,
9. Корень квадратный из положительно определенной матрицы,
10. Множители в различных факторизациях матрицы,
11. Значение определителя,
12. Приближение к числу обусловленности матрицы,
13. Инерцию (сигнатуру) симметричной или эрмитовой матрицы,
14. Решение однородной системы алгебраических уравнений,
15. Ядро матрицы,
16. Ранг матрицы,
17. Решение системы алгебраических уравнений с квадратной неособенной матрицей коэффициентов,
18. Обобщенное решение переопределенной системы,

19. Решение переопределенной системы с наименьшей невязкой в норме $l_\infty$ (Чебышевское решение),

20. Решение переопределенной системы с наименьшей невязкой в норме $l_1$,

21. Нормальное решение недоопределенной системы,

22. Обобщенное нормальное решение системы с прямоугольной матрицей коэффициентов неполного ранга,

23. Проекцию решения системы с плохо обусловленной матрицей коэффициентов в подпространство нетянутое на собственные векторы принадлежащие группе „больших" собственных значений при условии отрыва их от группы собственных значений,

24. Решение системы по методу регуляризации,

25. $A^-$,

26. $A^+$,

27. Сингулярное разложение матрицы,

28. Точное решение линейной системы с рациональными коэффициентами,

29. Решение некоторых матричных уравнений,

30. Наибольшее по модулю собственное значение,

31. Наибольшее по модулю собственное значение и принадлежащий ему собственный вектор,

32. Цепочку собственных значений,

33. Цепочку собственных значений и принадлежащие им собственные векторы,

34. Собственные значения матрицы, лежащие в полуплоскостях $\mathrm{Re}\lambda < \alpha$, $\mathrm{Re}\lambda > \alpha$, $\alpha$ — заданное вещественное число,

35. Собственные значения матрицы, лежащие в полосе $\alpha < \mathrm{Re}\lambda < \beta$, $\alpha$, $\beta$ заданы,

36. Все собственные значения матрицы,

37. Все собственные значения матрицы и принадлежащие им собственные векторы,

38. Жорданову форму матрицы,

39. Коэффициенты характеристического полинома,

40. Собственные значения и принадлежащие им собственные векторы линейного регулярного пучка,

41. Собственные значения и принадлежащие им собственные векторы линейного регулярного пучка с вырожденными матрицами,

42. Изолированное собственное значение нелинейной проблемы и принадлежащий ему собственный вектор,

43. Оценки ошибок округления.

При этом алгоритмы написаны для матриц, структура которых описывается следующей таблицей

| *Вещественная арифметика* | *Комплексная арифметика* |
|---|---|
| **Трехдиагональные** | |
| 1. Общий случай | 1. Общий случай |
| 2. Симметричные положительно определенные | 2. Эрмитовы положительно определенные |
| **Ленточные** | |
| 1. Общий случай | 1. Общий случай |
| 2. Симметричные положительно определенные | 2. Эрмитовы положительно определенные |
| **Треугольные** | |
| 1. Верхние | 1. Верхние |
| 2. Нижние | 2. Нижние |
| **Хессенберговы** | |
| 1. Верхние | 1. Верхние |
| 2. Нижние | 2. Нижние |
| **Симметричные и эрмитовы** | |
| 1. Общий случай | 1. Общий случай эрмитовой |
| 2. Положительно определенные | 2. Положительно определенные Эрмитовы |
| | 3. Симметричные |
| **Квадратные** | |
| 1. Общий случай | 1. Общий случай |
| **Теплицевы** | |
| 1. Общий случай | 1. Общий случай |

Прямоугольные

1. $m > n$ rank $A = n$,
2. $m < n$ rank $A = m$,
3. rank $A = \min(m, n)$.

Разреженные матрицы

1. Блочно треугольная форма 


2. Окаймленная блочно-треугольная форма 

3. Блочно диагональная матрица BDF

4. Односторонне окаймленная блочно диагональная форма SBBDF

5. Двусторонне окаймленная блочно диагональная форма DBBDF

6. Ленточно-треугольная форма BNTF

7. Окаймленная ленточная треугольная форма BBNTF

8. Блочная ленточная форма BF

9. Односторонне окаймленная ленточная форма SBBF

10. Двусторонне окаймленная ленточная форма DBBF

11. Матрица задается процедурой вычисления вектора $Ax$.

Вычисление перечисленных объектов в действительности получается в результате работы алгоритма на $M$-компютере, где $M$ —метка компютера. Мы будем называеь эту реализацию алгоритма $M$-программой. Подчеркнем сразу, что одноименные объекты вычисленные по разным $M$-программам отвечающему одному алгоритму окажутся как правило различными, и число совпадающих значащих цифр может колебаться в больших пределах. Повидимому основными факторами приводящими к этому обстоятельству оказываются величина $t$ определяющая длину мантисы в двоичном разложении числа в $M$-компютере, способы перевода чисел из десятичной системы в двоичную и способы округления принятые в $M$-компютере.

Основная трудность при анализе software заключается в том, что среди перечисленных в каталоге объектов многие очень неустойчивы. К таковым в первую очередь относится объект 16. — ранг матрицы, знание которого необходимо для определения других объектов.

Две концепции иногда спасают положение. Я имею в виду концепцию замораживания и концепцию уточнения. Поясним это на примере обращения матрицы.

В 1966 г. по процедуре acc inverse Мартин, Петерс и Уилкинсон получили на KDF9 (39 двоичных знаков в мантисе, накопление скаляр-

ного произведения) в качестве 1-го столбца матрицы обратной для матрицы $360360\,H_7$, где $H_7$ сегмент Гильберта седьмого порядка значение

$$\begin{array}{r} 1.359\ 751\ 359\ 75\cdot 10^{-4} \\ -3.263\ 403\ 263\ 40\cdot 10^{-3} \\ 2.447\ 552\ 447\ 55\cdot 10^{-2} \\ -8.158\ 508\ 158\ 50\cdot 10^{-2} \\ 1.346\ 153\ 846\ 15\cdot 10^{-1} \\ -1.076\ 923\ 076\ 92\cdot 10^{-1} \\ 3.333\ 333\ 333\ 33\cdot 10^{-2} \end{array}$$

верное с 12 значащами знаками. Оно получено в результате двух шагов итерационного улучшения [2]. Обусловленность рассматриваемой матрицы равна $0.475\cdot 10^9$. Применяя тот же прием улучшения вычисление, проведенное по пакету разработанному для ЕС под руководством Молчанова [3] дали для того же 1-го столбца значение

$$\begin{array}{r} 0.135\ 975\ 1\cdot 10^{-3} \\ -0.326\ 340\ 3\cdot 10^{-2} \\ 0.244\ 755\ 2\cdot 10^{-1} \\ -0.815\ 850\ 5\cdot 10^{-1} \\ 0.134\ 615\ 4 \\ -0.107\ 692\ 2 \\ 0.333\ 333\ 3\cdot 10^{-1} \end{array}$$

верное со всеми 7 значащими знаками. Оно получено в результате применения 5 шагов итерации.

Однако при введении в пакет начальных данных $36.0360\,H_7$ — в качестве 1-го столбца обратной матрицы было получено, после 4-х итерационных улучшений значение

$$\begin{array}{r} 0.113\ 484\ 0\cdot 10 \\ -0.246\ 212\ 0\cdot 10^{2} \\ 0.174\ 124\ 7\cdot 10^{3} \\ -0.560\ 314\ 7\cdot 10^{3} \\ 0.904\ 808\ 6\cdot 10^{3} \\ -0.714\ 312\ 5\cdot 10^{3} \\ 0.219\ 316\ 8\cdot 10^{3} \end{array}$$

не сохраняющее уже ни одного верного знака! и даже меняющие в пятой и шестой компоненте порядки. Это разительное расхождение получилось, конечно в силу плохой обусловленности матрицы потому, что в ЕС компютере в качестве замороженной матрицы оказалось, после перевода в шестнадцатиричную систему матрица, первый столбец которой мы приводим после ее перевода в десятичную запись

36.035 995 483 398 437 5
18.017 990 112 304 687 5
12.011 999 130 249 022 8
9.008 999 824 523 925 57
7.207 199 096 679 687 5
6.005 999 565 124 511 67
5.147 999 763 488 7699 45

Для этой „замороженной" системы последний приведенный столбец оказался снова с 7 знаками 1-ым столбцом обратной матрицы. (См. распечатку с Cyber'a)!

Рассмотренный пример показывает, что имеющийся в руках исследователя аппарат улучшения не учитывает возможные вариации входных данных и „отвечает" лишь за ответ для замороженной задачи.

Сразу отметим, что катастрофа полученная при умножении на $10^{-4}$ на компютерах с большим $t$ чем у ЕС наступает не так быстро. Уже БЭСМ6 дает даже по процедуре без итерационного улучшения более близкое к истинному значению.

Таким образом для решения замороженной невырожденной, но быть может очень близкой к вырожденной системы разработаны приемы позволяющие найти ее решение с любой степенью точности. Однако, если входные данные системы заданы не точно, но лишь с некоторыми допусками, то множество возможных решений заполняют некоторую область, естественную область задачи, которая может быть даже бесконечной при слишком больших допусках. Если допуски очень малы (причем можно указать допустимую степень малости в каждом конкретном случае), то допустимая область будет небольшой и будет окружать точное решение выбранной замороженной системы. Мне представляется оценка этой области важной задачей и некоторые попытки оценки этой области описаны в работах Д. К. Фаддеева и моих [4], [5], [6], [7]. При таком подходе в качестве ответа в задаче решения линейной системы принимается решение некоторой замороженной системы и приближенное описание естественной области.

Такая же форма ответа желательна при решении любой конечной вычислительной задачи.

Бывают благоприятные случаи, когда при неточно заданных входных данных, даже с не очень малыми допусками можно определить некоторую устойчивую часть решения, которая не будет точным решением, но сможет хорошо отражать информацию, содержащуюся во входных данных. Устойчивым будет, например, проекция решения в подпространство натянутое на главные направления, отвечающие большим сингулярным значениям. Поиск других таких объектов проводится методами регуляризации А. Н. Тихонова.

Следует отметить, что имеются абсолютно неустойчивые задачи. К ним относятся все, формы решения которых зависят от определения ранга матрицы, ибо при малых изменениях элементов матрицы ранг может меняться скачкообразно. Определение ранга существенно зависит от допуска в вопросе „различия нуля от не нуля".

К этому классу задач относится определение канонической формы Жордана матрицы, определение канонической формы пучка матрицы, решение прямоугольной системы неполного ранга и т.д. Написанные для этих задач алгоритмы по существу решают близкую задачу, в которой ранги связанных с ней матриц равны тем, которые получены по алгоритму, а вернее по $M$-программе. Напомним например, что для установления клеток Жордана, соответствующих собственному значению надо знать ранги матриц $A-\lambda E$, $(A-\lambda E)^2, \ldots, (A-\lambda E)^{k-1}$, где $k$ кратность $\lambda$. Исчерпывающая характеристика близости данной матрицы к матрице данного вида канонической формы Жордана повидимому еще не найдена. Это же относится и к более сложным задачам.

Многие алгоритмы мирового фонда написаны по методам всесторонне изученным. В частности, большие усилия были затрачены на исследование результата накопления ошибок от округления. В процессе этого изучения сформировались важные характеристики самых методов [8], [9].

Метод называется *численно устойчивым*, если вычисленное решение отличается от истинного по некоторой норме, не более чем на произведение относительной точности компютера на норму решения и на число обусловленности задачи.

Далее, метод называется *хорошо идущим*, если вычисленное решение является точным для задачи, входные данные которой находятся в близости порядка точности задания входных данных, исходной задачи.

Для задачи решения линейной системы хорошо идущий метод численно устойчив, но не наоборот.

В задаче решения линейной системы невязка решения, полученного по хорошо идущему методу удовлетворяет неравенству

$$\|r\| = \xi \|A\| \|y\|,$$

где $y$ — вычисленное решение, $\xi$ — множитель относительной точности компютера. Вожьняковский [9] доказал, что если это неравенство выполнено для вычисленного решения, то метод по которому оно получено является хорошо идущим.

По ряду методов проведены исследования с точки зрения этих критериев.

Тем не менее мне кажется важным провести тестирование собранных алгоритмов. Среди них есть много уже прошедших такое испытание в рамках NATS, но есть и менее исследованные. Следует отметить, что некоторые, сыгравшие пионерскую роль алгоритмы уже ушли в историю.

Полагаю, что каждый алгоритм следует окружить серией досье, подразумевая под $M$-досье алгоритма $K$ собрание протоколов вычислений данного объекта по алгоритму $K$ с помощью программы, приспособленной к компютеру $M$ ($KM$-программы) для ряда тестовых значений аргумента.

## Литература


[1] В. Н. Фаддеева, Е. А. Мейник, В. П. Еремина, *Вычислительные методы линейной алгебры, Библиографический указатель алгол-процедур и фортран-подпрограмм, 1960–1979 гг*, Ленинград 1980, 122с.

[2] R. S. Martin, G. Peters, J. H. Wilkinson, *Iterative refinement of the solution of a positive definite system of equations*, Numer. Math. 8 (1966), 203–216.

[3] И. Н. Молчанов, Л. Д. Николенко, В. С. Зубатенко, *Программный комплекс для решения систем линейных алгебраических уравнений*; В кн.: *Вычислительная математика в современном научно-техническом прогрессе*, Киев 1978, 172–173.

[4] D. K. Faddeev, V. N. Faddeeva, *Stability in linear algebra problems, Proc. IFIP Congres 68, Edinburgh, 1968*, vol. 1, *Mathematics*, North-Holland, Software Amsterdam, 1969, 33–39.

[5] Д. К. Фаддеев, В. Н. Фаддеева, *Об естественных нормах для оценивания решения конечной вычислительной задачи*, Ж. вычисл. мат. и мат. физ. 9.1 (1969), 3–13.

[6] D. K. Faddeev, V. N. Faddeeva, *Natural norms in algebraic processes*, SIAM, J. Numer. Anal. 7 (1970), 520–531.

[7] Д. К. Фаддеев, В. Н. Фаддеева, *Сопутствующая матрица и оценивание решения конечной вычислительной задачи*; В кн.: *Вычислительные методы линейной алгебры*, Новосибирск 1973, 4–10.

[8] F. L. Bauer, J. Heinhold, K. S. Amelson, R. Sauer, *Moderne Rechenanlagen*, Teubner, Stuttgart 1965.

[9] H. Woźniakowski, *Numerical stability of the Chebyshev method for the solution of large linear systems*, Numer. Math. 28 (1974), 191–209.


*Presented to the Semester*
*Computational Mathematics*
*February 20 – May 30, 1980*