А К А Д Е М И Я   Н А У К   С С С Р
Сибирское отделение
В Ы Ч И С Л И Т Е Л Ь Н Ы Й   Ц Е Н Т Р

На правах рукописи

БАБЕНКО Виктор Николаевич

УДК 519.61

ПРИВЕДЕНИЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ОТРАЖЕНИЙ ХАУСХОЛДЕРА К КАНОНИЧЕСКОМУ ВИДУ

01.01.07 - вычислительная математика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск 1991

Работа выполнена в ИНСТИТУ

Научный руководитель:
член-кооресспондент АН СССР, про

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук, профессор — Ильин В.П.

кандидат физико-математических наук — Митченко А.Д.

Ведущая организация: Волгоградский политехнический институт

Защита состоится "5" июня 1991 года на заседании специализированного совета К 002. I0.0I в Вычислительном центре СО АН СССР по адресу: 630090, Новосибирск-90, пр. Академика Лаврентьева, 6.

С диссертацией можно познакомиться в читальном зале ГПНТБ СО АН СССР (пр. Академика Лаврентьева, 6).

Автореферат разослан "30" апреля 1991 года

Ученый секретарь
специализированного совета
К 002.I0.0I к.ф.-м.н. — Ю.И.Кузнецов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА

Актуальность темы. В предлагаемой работе рассматривается вычислительная проблема приведения произведения отражений Хаусхолдера к каноническому виду.

При решении задач линейной алгебры во многих случаях исходная матрица ортогональными преобразованиями приводится к тому или иному каноническому виду. Применяемые преобразования - отражения Хаусхолдера и вращения Якоби. Узким местом этих методов является трудность прогноза количества потребующихся вращений, что приводит к неопределенности объема оперативной памяти ЭВМ /ОП/ для размещения вращений. К тому же вращений может быть так много, что возникает проблема их размещения в ОП. Чтобы избежать перечисленных проблем, можно воспользоваться приведением произведения отражений к каноническому виду, позволяющему отказаться от хранения преобразований вращения.

Вследствие изложенных причин разработка и исследование численных свойств алгоритмов приведения произведения отражений Хаусхолдера к каноническому виду является актуальной задачей.

Цель работы. Целью настоящей работы является разработка и исследование численных свойств алгоритмов, приводящих произведение отражений Хаусхолдера к каноническому виду.

Научная новизна. Выполненная диссертация является развитием и продолжением работы Куппена [1] по приведению произведения отражений к каноническому виду. Новыми в ней являются алгоритмы повышения индекса и компенсации произведения отражений. Производится тщательный анализ разработанных алгоритмов. Предложена специальная функция, позволяющая обеспечить отсутствие чувствительности алгоритма повышения индекса к ошибкам вычислений. Доказанные оценки точности выполнения алгоритмов повышения индекса и компенсации отражений позволили получить оценку точности выполнения алгоритма приведения произведения отражений к каноническому виду.

По алгоритмам повышения индекса и компенсации произведения отражений написана программа изменения индекса произведения отражений.

Практическая ценность. Применение программы изменения индекса произведения отражений совместно с процедурой отражения вектора обеспечивает приведение любого произведения отражений к каноническому виду с гарантированной точностью. Это позволяет преодолеть трудности, связанные с размещением ортогональных преобразований в ОП вычислительных машин.

Методы исследования. В диссертации используются методы численного анализа, заложенные в работах Д.Х.Уилкинсона, С.К. Годунова и др.

Апробация работы. Основные результаты докладывались на научных семинарах ИМ СО АН СССР (г. Новосибирск), ВЦ СО АН СССР (г. Новосибирск), на кафедре вычислительной математики Волгоградского государственного университета.

Публикации. По теме диссертации опубликована одна работа [I].

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, двух глав, двух приложений и списка цитируемой литературы. Работа занимает I05 страниц машинописного текста, включая три таблицы. Список литературы содержит I8 наименований отечественных и зарубежных авторов.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дается обзор литературы, содержащей описание методов, приводящих к задаче приведения произведения отражений Хаусхолдера к каноническому виду, обсуждаются актуальность, новизна и цель работы, излагаются содержание и основные результаты диссертации.

Первая глава состоит из пяти параграфов.

В первом параграфе вводится понятие канонического произведения отражений Хаусхолдера и доказывается лемма о представлении произвольного ортогонального преобразования в виде канонического произведения отражений.

Пусть $e_1,\dots,e_n$ - ортогональный базис вещественного евклидового пространства R^n. Отражение Хаусхолдера $P=I-2pp^*/p^*p$ называется элементарным ортогональным преобразованием индекса $i\ (In(P)=i)$, если $\forall j<i\ p^*e_j=0,\ p^*e_i\neq 0$. Произведение отражений $\tilde{P}=\tilde{P}_1\dots\tilde{P}_r\ (r\leq n)$ называется каноническим, если индексы отражений упорядочены отношениями: $In(\tilde{P}_1)<\dots<In(\tilde{P}_r)$.

Лемма I.I.2. Всякое ортогональное преобразование в R^n имеет единственное представление в виде канонического произведения отражений.

Цель второго параграфа - установление свойств произведений отражений, которые затем будут положены в основание алгоритма приведения произведения отражений к каноническому виду.

Пусть векторы a и b образуют отнормированный базис в плоскости Π. Преобразование вида

$$S = I + (a \vdots b)\begin{bmatrix} \cos\varphi - 1 & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi - 1 \end{bmatrix}(a \vdots b)^*$$

осуществляет поворот векторов, лежащих в плоскости Π, на угол φ и называется вращением Гивенса плоскости Π.

Лемма I.2.2. Произведение отражений $PQ = (I - pp^*)(I - qq^*)$ есть вращение плоскости $\Pi = \mathcal{R}(p \vdots q)$ на угол $\varphi = 2\angle pq$.

Лемма I.2.3. Пусть $P = I - pp^*$ и $Q = I - qq^*$ - отражения Хаусхолдера и вектор $u \in \mathcal{R}(p \vdots q)\ (\|u\| = \sqrt{2})$. Определим векторы $\tilde{p} = (I - uu^*)p$ и $\tilde{q} = (I - uu^*)q$, тогда

$$\tilde{Q}\tilde{P} = (I - \tilde{q}\tilde{q}^*)(I - \tilde{p}\tilde{p}^*) = PQ.$$

Лемма I.2.4. Пусть $P = I - pp^*$ и $Q = I - qq^*$ - отражения Хаусхолдера и U - произвольное вращение плоскости $\Pi = \mathcal{R}(p \vdots q)$. Определим векторы $\tilde{p} = Up$ и $\tilde{q} = Uq$, тогда

$$(I - \tilde{p}\tilde{p}^*)(I - \tilde{q}\tilde{q}^*) = PQ.$$

Лемма I.2.5. Пусть $P = I - pp^*$ и $Q = I - qq^*$ - отражения Хаусхолдера индекса i и $p \neq q$, тогда $\exists!$ пара отражений $\tilde{P} = I - \tilde{p}\tilde{p}^*$ и $\tilde{Q} = I - \tilde{q}\tilde{q}^*$ таких, что

$$\tilde{P}\tilde{Q} = PQ,\ In(\tilde{P}) = i < In(\tilde{Q}).$$

Лемма I.2.6. Пусть векторы p и q, определяющие отражения $P = I - pp^*$ и $Q = I - qq^*$, удовлетворяют условию: $\|p - q\| \leq \varepsilon \|q\|$, тогда

1. $\|P - Q\| \leq 2\varepsilon$,
2. $\|I - PQ\| \leq 2\varepsilon$.
3. Если $p = q$, то $PQ = I$.

В третьем параграфе формулируется задача приведения произведения отражений Хаусхолдера к каноническому виду и описываются средства ее решения.

Пусть в R^n задано произведение отражений $P = P_1 \ldots P_n \ldots P_N$, требуется построить последовательность отражений $\tilde{P}_1, \ldots, \tilde{P}_r$ такую, что $\tilde{P}_1 \ldots \tilde{P}_r = P$ и $In(\tilde{P}_1) < \ldots < In(\tilde{P}_r)$.

Поставленная задача решается с помощью применения трех операций:

1) операция упорядочения,

2) операция повышения индекса,

3) операция компенсации произведения отражений,

содержание которых раскрывается в следующих определениях.

Определение 1.3.1. Индексом произведения отражений $P=P_1 \ldots P_N$ будем называть и обозначать величину $In(P)=\sum_{i=1}^{N} In(P_i)$.

Определение 1.3.2. Если индексы отражений P и Q связаны соотношением $In(P)>In(Q)$, то замену отражений, описанную в лемме 1.2.3, при условии $u=p$, будем называть операцией упорядочения произведения отражений $(In(\tilde{Q})<In(\tilde{P}))$.

Определение 1.3.3. Замену произведения отражений, описанную леммой 1.2.5, будем называть операцией повышения индекса произведения отражений Хаусхолдера.

Определение 1.3.4. Замену произведения отражений тождественным (см. лемму 1.2.6, пункты 2,3) будем называть операцией компенсации произведения отражений.

В четвертом параграфе доказываются леммы, устанавливающие способы выполнения операции повышения индекса произведения отражений. Рассмотрен вопрос чувствительности задач упорядочения и повышения индекса произведения отражений.

Лемма 1.4.1. Пусть $P=I-pp^*$ и $Q=I-qq^*$ – преобразования отражения Хаусхолдера, причем $In(P)=In(Q)=i$ и $p\neq q$, тогда векторы $\tilde{p}$ и $\tilde{q}$, вычисленные по формулам:

$$\tilde{p}=P(\alpha q+\beta p), \quad \tilde{q}=(\alpha p+\beta q), \quad \text{где}$$

$$\alpha=q_i/S, \ \beta=-p_i/S, \ S=(p_i^2+q_i^2-p^*q p_i q_i)^{1/2},$$

удовлетворяют соотношениям:

$$(I-\tilde{p}\tilde{p}^*)(I-\tilde{q}\tilde{q}^*)=PQ, \ In(\tilde{p})=i<In(\tilde{q}).$$

Лемма 1.4.2. Пусть $P=I-pp^*$ и $Q=I-qq^*$ – отражения Хаусхолдера, причем $In(P)=In(Q)=i$ и $p\neq q$, тогда векторы $\tilde{p}$ и $\tilde{q}$, вычисляемые по формулам:

$\tilde{p} = \frac{1}{2}[(\alpha\tau - \beta\theta)q + (\alpha\theta + \beta\tau)z], \tilde{q} = \alpha q + \beta p$, где
$\alpha = z_i/S, \beta = -q_i/S, S = (q_i^2 + z_i^2)^{1/2}, \tau = q^* p, \theta = z^* p, z = \bar{\alpha} p + \bar{\beta} q,$
$\bar{\alpha} = 2/X, \bar{\beta} = -\tau/X, X = (4 - \tau^2)^{1/2}$
удовлетворяют соотношениям

$$(I - \tilde{p}\tilde{p}^*)(I - \tilde{q}\tilde{q}^*) = PQ, \; In(\tilde{p}) = i < In(\tilde{q}).$$

В результате исследования показано, что операции упорядочения и повышения индекса произведения отражений не чувствительны к ошибкам округлений. В связи с этим устанавливается, что формулы леммы I.4.2 нечувствительны к ошибкам вычислений, формулы же леммы I.4.I приобретают чувствительность к ошибкам округлений, если $p^* q \, p_i q_i > 0$, что накладывает ограничения на область их применения.

Пятый параграф посвящен описанию алгоритма изменения индекса произведения отражений.

Алгоритм изменения индекса произведения отражений

I. $|p^* q| \le 2 - \hat{\delta}_1$, если да, то $X = 4 - (p^* q)^2$, и идти на 4.
2. $\|p - \sigma q\|^2 > \delta^2 \|q\|^2$, если да, то $X = 2\|p - \sigma q\|^2$, и идти на 4.

$$\sigma = \begin{cases} I, \text{ если } p^* q > 0 \\ -I, \text{ если } p^* q < 0. \end{cases}$$

3. Выполнить компенсацию отражений P и Q и идти на IO.
4. $|q_i| \le \delta_q \|q\|$, если да, то выполнить $R3$ и идти на 9.
5. $|p_i| \le \delta_p \|p\|$, если да, то выполнить $R4$ и идти на 8.
6. $p^* q \, p_i q_i \le 0$, если да, то выполнить $R1$ и идти на 8.
7. Выполнить алгоритм $R2$.
8. $\tilde{p} = u / (\frac{1}{2} u^* u)^{1/2}$.
9. $\tilde{q} = v / (\frac{1}{2} v^* v)^{1/2}$.
IO. Конец.

В памяти ЭВМ число X с плавающей точкой представлено парой чисел: мантиссой m и целочисленным порядком K , причем $X = \gamma^K m$, γ - основание системы счисления, $\gamma^{-1} \le m < 1$. При выполнении алгоритмов $R1$ и $R2$ используется специальная функция

$$f(x) = \gamma^{K+\ell}, \; \ell = \begin{cases} -4, \text{ если } K \text{ четно} \\ -5, \text{ если } K \text{ нечетно.} \end{cases}$$

Ее применение с использованием повышенной точности вычислений позволяет обеспечить гарантированную точность выполнения алгоритмов $R1$ и $R2$.

Величины $\hat{\delta}_1$ и δ характеризуют близость векторов p и q , и их подбор должен быть осуществлен так, чтобы обеспечивался контроль за порядком $X_м$ - машинным результатом вычисления X . Кроме того, $\hat{\delta}$ должна удовлетворять еще одному требованию - погрешность компенсации должна быть равна или несколько превышать погрешность выполнения алгоритмов $R1$ и $R2$. Выбор $\delta_{\hat{p}}$ и δ_q осуществляется из этих же соображений. Значения δ_1 , δ , $\hat{\delta}_p$ и δ_q зависят от размера разрядной сетки и устанавливаются во второй главе.

Алгоритм $R1$ основан на реализации формул леммы I.4.I.

Алгоритм $R1(p^*qp_iq_i \le 0)$

1. $X = p_i^2 + q_i^2 - p^*qp_iq_i$, $y = f(x)$.
2. $\alpha = q_i / y^{1/2}$, $\beta = -p_i / y^{1/2}$.
3. $v_j = \alpha p_j + \beta q_j$, $j = i+1, n$.
4. $w_j = \alpha q_j + \beta p_j$, $j = i, n$.
5. $t = w^* p$, $u_j = w_j - t p_j$, $j = i, n$.
6. Конец.

В основу алгоритма $R2$ положены формулы леммы I.4.2.

Алгоритм $R2(p^*qp_iq_i > 0)$

Построение ортогонального базиса плоскости $\Pi = \mathcal{R}(p{:}q)$

1. $y = f(x)$, $\tau = p^*q$, $\alpha = 2/y^{1/2}$, $\beta = -\tau/y^{1/2}$.
2. $u_j = \alpha p_j + \beta q_j$, $j = i, n$.
3. $s = q^* u$, $v_j = 2u_j - s q_j$, $j = i, n$.
4. $s = (\frac{1}{2} v^* v)^{1/2}$, $z_j = v_j / s$, $j = i, n$.

Вычисление векторов $\tilde{p}$ и $\tilde{q}$

5. $\theta = z^* p$, $s = z_i^2 + q_i^2$, $y = f(s)$.
6. $\alpha = z_i / y^{1/2}$, $\beta = -q_i / y^{1/2}$.
7. $u_j = (\alpha\tau - \beta\theta) q_j + (\alpha\theta + \beta\tau) z_j$, $j = i, n$.

8. $v_j = \alpha q_j + \beta z_j$, $j = i+1, n$.

9. Конец.

Алгоритм $R3$ использует результаты леммы I.2.6 (пункт I).

Алгоритм $R3$

I. $q_i = 0$.

2. $v_j = q_j$, $j = i+1, n$.

3. Конец.

Леммы I.2.6 (пункт I) и I.2.3 служат для построения алгоритма $R4$.

Алгоритм $R4$

I. $u_j = q_j - p^* q p_j$, $j = i, n$.

2. $p_i = 0$, $v_j = p_j$, $j = i+1, n$.

3. Конец.

Лемма I.2.6 (пункт 2) указывает на возможность компенсации отражений с гарантированной точностью.

Вторая глава состоит из четырех параграфов и содержит тщательное численное исследование алгоритма приведения произведения отражений Хаусхолдера к каноническому виду.

Одной из основных численных характеристик ЭВМ является число ε_1. Оно определяется следующим образом. Пусть $X = \{x_m | x_m > 1\}$ - множество машинных чисел с плавающей точкой, больших единицы, тогда $\varepsilon_1 = \inf X - 1$.

В первом параграфе исследуется точность алгоритма повышения индекса произведения отражений $R1$. Его результатом является точность численной реализации алгоритма на ЭВМ. Пусть имеем исходное произведение отражений PQ. В результате выполнения алгоритма $R1$ получим произведение отражений $(\tilde{P}\tilde{Q})_m$, причем

$$\|(\tilde{P}\tilde{Q})_m - PQ\| < 60\varepsilon_1.$$

Целью второго параграфа является получение оценок точности алгоритмов $R2$, $R3$ и $R4$. Устанавливается такое важное свойство алгоритма $R2$, как обеспечение построения двумерного ортогонального базиса плоскости вращения с гарантированной точностью, что позволило получить оценку точности его выполнения:

$$\|(\tilde{P}\tilde{Q})_м - PQ\| < 65\varepsilon_1.$$

Наряду с этим показано, что выбор в качестве δ_q и δ_p констант $49\varepsilon_1$ и $27.5\varepsilon_1$ обеспечивает выполнение алгоритмов $R3$ и $R4$ с точностью, описываемой неравенствами:

$$\|(\tilde{Q})_м - Q\| < 101\varepsilon_1,$$
$$\|(\tilde{P}\tilde{Q})_м - PQ\| < 101\varepsilon_1.$$

В третьем параграфе устанавливается, что выбор: $\delta = 50\varepsilon_1$, обеспечивает гарантированную точность замены произведения отражений тождественным:

$$\|I - PQ\| < 101\varepsilon_1.$$

В четвертом параграфе, благодаря оценкам, характеризующим погрешность выполнения операций, приводящих произведение Хаусхолдера к каноническому виду, дается оценка точности канонического произведения.

Точности выполнения операций упорядочения, повышения индекса и компенсации произведения отражений соответственно описываются неравенствами:

$$\|(\tilde{Q})_м P - PQ\| < \delta_y = 40\varepsilon_1,$$
$$\|(\tilde{P}\tilde{Q})_м - PQ\| < \delta_n = 101\varepsilon_1,$$
$$\|I - PQ\| < \delta_к = 101\varepsilon_1.$$

Пусть для приведения произведения отражений P к каноническому виду $\bar{P}$ потребовалось выполнить: M_y операций упорядочения, M_n операций повышения индекса и $M_к$ операций компенсации произведения отражений. Тогда справедлива оценка точности:

$$\|(\tilde{P})_м - P\| < M_y\delta_y + M_n\delta_n + M_к\delta_к.$$

Автор выражает глубокую благодарность члену-корреспонденту С.К.Годунову за научное руководство и постоянную поддержку, а также В.И.Костину за полезные советы и замечания.

Основное содержание диссертации опубликовано в работе:

I. Бабенко В.Н. Алгоритм изменения индекса произведения отражений Хаусхолдера. Новосибирск, 1990, 59 с. Рукопись представлена редакцией Сибирского матем. журнала. Деп. в ВИНИТИ

II.IO.90, I5350-B90.

ЛИТЕРАТУРА

1. Cuppen J.J.M. On updating triangular Products of Householder reflections. Numer. Mathematik, 45, 403-409, 1984.

БАБЕНКО Виктор Николаевич

ПРИВЕДЕНИЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ОТРАЖЕНИЙ ХАУСХОЛДЕРА
К КАНОНИЧЕСКОМУ ВИДУ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Подписан к печати 30.03.91 г.. Формат 60x84-1/16. Бумага писчая №1. Печать плоская. Усл. п.л. 1. Учетн.-издат.л. 1. З. №897. Т. 100 .
Бесплатно.

ВГПИ. Межвузовский центр оперативной полиграфии. 400013. Волгоград, пр. им. В.И.Ленина,27.