МЕЖВЕДОМСТВЕННЫЙ РЕСПУБЛИКАНСКИЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК
1970 Геодезия, картография и аэрофотосъемка Выпуск 11

УДК 528.181:528.281.3

А. А. РЕМИНСКИЙ

ОБОБЩЕНИЕ ПРЯМЫХ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ НОРМАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

В основе описанных ниже исследований прямых численных методов лежит геометрическая интерпретация решения систем нормальных уравнений вида

$$A\overline{x} = \overline{f}. \tag{1}$$

где A — матрица коэффициентов системы нормальных уравнений, симметричная, положительно определенная, порядка n;
$\overline{x}$ — вектор неизвестных;
$\overline{f}$ — заданный вектор свободных членов.

Очевидно, что решение системы заключается в преобразовании заданного вектора функции $\overline{f}$ в неизвестный вектор аргумент $\overline{x}$ с учетом функциональной зависимости, заданной матрицей A. Полагаем, что компоненты системы (1) заданы в n-мерном пространстве относительно единичного базиса, векторы которого обозначим $\overline{j}_i$. Преобразования вектора $\overline{f}$ в процессе решения обусловим переходом к новым базисам в этом пространстве. В частности, одним из этапов решения является переход к таким двум базисам, которые связаны между собой матрицей A. Если это базисы $\overline{g}_i$ и $A\overline{g}_i$, то представление вектора $\overline{x}$ в базисе $\overline{g}_i$ совпадает с представлением вектора $\overline{f}$ в базисе $A\overline{g}_i$. Действительно, векторы $\overline{x}$ и $\overline{f}$ связаны со своими представлениями $\overline{x}^*$ и $\overline{f}^*$ зависимостями

$$\overline{x} = G\overline{x}^*, \tag{2}$$

$$\overline{f} = AG\overline{f}^*, \tag{3}$$

где G и AG матрицы, составленные из векторов-столбцов, соответственно, $\overline{g}_i$ и $A\overline{g}_i$ $(i, j = 1, 2, \ldots, n)$.

Подстановка этих выражений в систему нормальных уравнений $(AG\overline{x}^* = AG\overline{f}^*)$ делает тождественность представлений очевидной:

$$\overline{x}^* \equiv \overline{f}^*. \tag{4}$$

Тогда решение сведется к определению представления $\overline{f}^*$ из выражения (3) и к преобразованию его в исходный базис по формуле (2). Известно, что косоугольный базис должен иметь двойственный базис для разложения по нему некоторого вектора. Следовательно, для определения $\bar{f}^*$ из (3) необходимо построить базис $\bar{r}_i$, двойственный базису $A\bar{g}_i$, то есть удовлетворяющий условию

$$(\bar{r}_i, A\bar{g}_j) = \nu_i \delta_{ij} \equiv R^T A G = N. \tag{5}$$

Здесь приведены две тождественные записи условий двойственности, где N — диагональная матрица, составленная из действительных чисел ν_i, R — матрица, составленная из векторов-столбцов $\bar{r}_i$, δ_{ij} — символ Кронекера, T — знак транспонирования, $i, j = 1,2,\dots n$.

Умножив обе части выражения (3) слева на R^T, получим,

$$R^T \bar{f} = R^T A G \bar{f}^* = N \bar{f}^*,$$

откуда

$$\bar{f}^* = N^{-1} R^T \bar{f}$$

и

$$\bar{x} = G N^{-1} R^T \bar{f}. \tag{6}$$

Принимая во внимание базисы $\bar{r}_i$ и $\bar{g}_i$ условие (5) будем называть условием A-ортогональности, а базис $\bar{r}_i$ — A-ортогональным базису $\bar{g}_i$. Процесс построения базиса $\bar{r}_i$ опишем следующим образом (7). Здесь сначала строится система промежуточных векторов $\tilde{r}_i$ A-ортогональных векторам $\bar{g}_i$ от первого до одноименного со строящимся (а), затем производится их доортогонализация (б).

$$\left.\begin{aligned}
&\text{а)}\ \tilde{r}_i = \bar{g}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \rho_{ij} \tilde{r}_j, \quad (i = 1, 2, \dots, n),\\
&\rho_{ij} = (\tilde{r}_j, A\bar{g}_j)^{-1} \left[(\bar{g}_i, A\bar{g}_j) - \sum_{k=1}^{j-1} \rho_{ik} (\tilde{r}_k, A\bar{g}_j) \right];\\
&\text{б)}\ \bar{r}_i = \tilde{r}_i - \sum_{k=n}^{i+1} \eta_{ik} \bar{r}_k, \quad \eta_{ik} = \frac{(\tilde{r}_i, A\bar{g}_k)}{(\bar{r}_k, A\bar{g}_k)}.
\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

Кроме построения базиса, A-ортогонального данному, для осуществления условий двойственности воспользуемся методом построения базиса, векторы которого $\bar{s}_i$ взаимно A-ортогональны, то есть удовлетворяют условию

$$(\bar{s}_i, A\bar{s}_j) = \mu_i \delta_{ij} \equiv S^T A S = M, \tag{8}$$

где M — диагональная матрица, составленная из действительных чисел μ_i,

S — матрица, составленная из векторов-столбцов $\bar{s}_i$, $i, j = 1, 2, \dots, n$.

При этом представление вектора $\bar{x}$ в базисе $\bar{s}_i$ совпадает с представлением вектора $\bar{f}$ в базисе $A\bar{s}_i$. Используя двойственность базисов $\bar{s}_i$ и $A\bar{s}_i$, находим это представление, которое затем преобразуем к исходному базису, то есть в сущности повторяем преобразования предыдущего случая и приходим к выводу, что

$$\bar{x} = SM^{-1}S^{T}\bar{f}. \tag{9}$$

Основой для построения базиса $\bar{s}_i$ является система из n линейно независимых векторов $\bar{g}_i$ $(i=1, 2, \ldots, n)$. Процесс построения имеет вид [1]:

$$\bar{s}_i = \bar{g}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij}\bar{s}_j, \quad (i=1, 2, \ldots, n), \quad \gamma_{ij} = \frac{(\bar{s}_i, A\bar{s}_j)}{(\bar{s}_j, A\bar{s}_j)}. \tag{10}$$

Два процесса — (7) и (10) — по сути представляют первичное разделение прямых численных методов на две группы. Следует отметить, что введение нормирования позволяет упростить их. Очевидно, что матрицы N или M составлены из скалярных произведений одноименных векторов двойственных базисов, то есть $\nu_i = (\bar{r}_i, A\bar{g}_i)$, а $\mu_i = (\bar{s}_i, A\bar{s}_i)$. Нормированием строящегося вектора $\bar{r}_i$ или $\bar{s}_i$ добиваемся, чтобы $\nu_i = \mu_i = 1$. При этом матрицы N или M переходят в единичные, а при вычислении коэффициентов ρ_{ij}, η_{ik} или γ_{ij} отпадает необходимость в учете и вычислении знаменателя. Нормирование, как правило, качественно изменяет вычислительную схему и приводит к новому численному процессу. В общем виде нормирование в случаях (7) или (10) сводится к следующим операциям, соответственно:

$$\bar{r}_i^{*} = \frac{1}{\sigma_i^{*}}\bar{r}_i, \quad (i=1, 2, \ldots, n), \quad \sigma_i^{*} = (\bar{r}_i, A\bar{g}_i); \tag{11}$$

$$\bar{e}_i = \frac{1}{\sigma_i}\bar{s}_i, \quad (i=1, 2, \ldots, n), \quad \sigma_i = \left|\sqrt{(\bar{s}_i, A\bar{g}_i)}\right|. \tag{12}$$

Теперь остановимся на роли выбора исходного базиса при осуществлении рассматриваемых процессов A-ортогонализации.

Начнем с единичного исходного базиса $\bar{g}_i = \bar{\iota}_i$, то есть $G=I$, где I — единичная матрица, составленная из векторов-столбцов $\bar{\iota}_i$. При этом происходят значительные упрощения. В частности, при построении базиса, A-ортогонального единичному, векторы $A\bar{\iota}_i$ представляют i-е столбцы матрицы A. Упрощается также преобразование (6). Если к тому же процесс A-ортогонализации вести с нормированием, получим численный метод для вычисления обратной матрицы. В самом деле, при $N=I$ и $G=I$ условие (5) примет вид

$$R^{*T}A = I,$$

откуда

$$R^{*} = A^{-1}. \tag{13}$$

Таким образом, вычисление обратной матрицы (метод пополнения, метод разбиения на клетки и др.) есть построение базиса, A-ортонормального данному единичному. Одним из вычислительных методов, применяемых для этой цели, является следующий:

$$
\left.\begin{aligned}
&\text{а)}\quad \tilde{r}_i = \bar{\iota}_i - \sum_{j=1} \rho^*_{ij}\tilde{r}^*_j, \quad (i = 1, 2, \ldots, n), \quad \tilde{r}^*_i = \frac{1}{\sigma^*_i}\tilde{r}_i,\\
&\sigma^*_i = (\tilde{r}_i, A\bar{\iota}_i), \quad \rho^*_{ij} = (\bar{\iota}_i, A\bar{\iota}_j) - \sum_{k=1}^{j-1} \rho^*_{ik}(\tilde{r}^*_k, A\bar{\iota}_j);\\
&\text{б)}\quad \bar{r}^*_i = \tilde{r}^*_i - \sum_{k=n}^{i+1} \eta^*_{ik}\bar{r}^*_k, \quad \eta^*_{ik} = (\tilde{r}^*_i, A\bar{\iota}_k).
\end{aligned}\right\} \tag{14}
$$

Обратимся к построению базиса из взаимно A-ортогональных векторов (10). Если в качестве исходного здесь использовать единичный базис, то придем к треугольной факторизации матрицы A. Название определяется тем фактом, что из векторов процесса составляются треугольные матрицы, произведение которых дает матрицу A. Убедиться в этом можно следующим образом.

Векторы $\bar{\iota}_i$ исходного базиса имеют координатами в A-ортогональном базисе $\bar{s}_i$ коэффициенты $\bar{\gamma}_{ij}$ процесса A-ортогонализации, что следует из выражения (10):

$$
\bar{\iota}_i = \bar{s}_i + \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij}\bar{s}_j, \quad (i = 1, 2, \ldots, n)
$$

или в матричной форме:

$$
I = \Gamma S^T, \tag{15}
$$

где

$$
\Gamma = \begin{Vmatrix} 1 & & & \\ \gamma_{21} & 1 & & \\ \cdot & \cdot & \cdot\ \cdot & \cdot\ \cdot \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \cdot\ \cdot & 1 \end{Vmatrix},
$$

откуда

$$
S^T = \Gamma^{-1}. \tag{16}
$$

Произвольные манипуляции с треугольными матрицами одинакового строения, а также произведение треугольной матрицы на диагональную дают снова треугольные матрицы того же строения. То есть, с учетом соотношения (8) запишем:

$$
A = S^{-1T} MS^{-1} = \Gamma M\Gamma^T = \Gamma M_1 M_2 \Gamma^T = \Gamma^*_1 \Gamma^{*T}_2, \tag{17}
$$

где диагональная матрица M представлена в виде произведения двух диагональных M_1 и M_2.

Методы треугольной факторизации образуют наиболее многочисленную и исследованную группу. Сюда относятся все вычислительные схемы метода исключения неизвестных, эскалаторный метод, метод ортогональных векторов и т. д. [1].

Если процесс треугольной факторизации вести с нормированием, то $M_1 = M_2$ и $\Gamma^*_1 = \Gamma^*_2 = T^T$, где T — матрица, произведение которой на транспонированную ей даст матрицу A (метод квадратных корней).

Методы треугольной факторизации особенно просты по построению, а решение здесь можно находить элементарным способом подстановки из цепи матричных равенств с треугольными матрицами:

$$\Gamma_1^* \bar{z} = \bar{f}, \ \Gamma_2^{*T} \bar{x} = \bar{z} \text{ или } T^T \bar{z} = \bar{f}, \ T\bar{x} = \bar{z}. \tag{18}$$

Для сравнения рассмотрим другой базис, который используется как исходный для A-ортогонализации при построении прямых численных методов. Это базис вида:

$$\bar{g}_i = A^{i-1} \bar{q}_0, \ (i = 1, 2, \ldots, n), \text{ то есть, } \bar{q}_0, A\bar{q}_0, \ldots, A^{n-1}\bar{q}_0, \tag{19}$$

где $\bar{q}_0$ — некоторый начальный вектор n-мерного пространства.

В качестве исходного этот базис нашел применение только для построения взаимно A-ортогональных векторов (метод A-минимальных итераций, метод сопряженных градиентов и т. д.). Особенностью процесса A-ортогонализации для базиса (19) является построение векторов $\bar{s}_i$ по рекуррентным формулам [4] с небольшим объемом промежуточной информации [2]. Это благоприятный фактор для реализации счета на электронных вычислительных машинах, даже при том обстоятельстве, что количество арифметических операций в этих методах значительно больше, чем в численных методах, основанных на A-ортогонализации исходного единичного базиса.

Нормирование упрощает и качественно изменяет вычислительный процесс, стабилизирует норму строящихся векторов (метод A-минимальных итераций с нормированием [3]).

Таким образом, свойства численных методов в основном зависят от выбора исходного базиса. Другими факторами являются способ A-ортогонализации, наличие нормирования, способ преобразования $\bar{x}$ в $\bar{f}$ и др.

Процесс A-ортогонализации		Исходный базис: Единичный	Исходный базис: Рекуррентный $\bar{q}_0, A\bar{q}_0, A^2\bar{q}_0, \ldots, A^{n-l}\bar{q}_0$
Построение базиса, A-ортогонального данному	без нормирования	Построение матрицы из векторов, A-ортогональных единичным $\bar{x} = N^{-1} R^T \bar{f}$	—
	с нормированием	Построение матрицы, обратной к заданной $\bar{x} = A^{-1} \bar{f}$	—
Построение базиса из взаимно A-ортогональных векторов	без нормирования	1. Метод исключения неизвестных 2. Эскалаторный метод 3. Метод Перселла $\Gamma_1^* \bar{z} = \bar{f}, \Gamma_2^{*T} \bar{x} = \bar{z}$	1. Метод A-минимальных 2. Метод сопряженных градиентов $\bar{x} = SM^{-1} S^T \bar{f}$
	с нормированием	Метод квадратных корней $T^T \bar{z} = \bar{f}, \ T\bar{x} = \bar{z}$	Метод A-минимальных итераций с нормированием $\bar{x} = EE^T \bar{f}$

В заключение обобщим приведенные рассуждения в виде таблицы, где численные методы расположены по способу построения процесса A-ортогонализации. Выбор процесса A-ортогонализации и исходного базиса предопределяет наиболее экономичный способ преобразования вектора $\bar{f}$ в вектор неизвестных $\bar{x}$. Он указан в таблице с применением обозначений, принятых в тексте. Вычислительные методы упрощаются сверху вниз. При этом уменьшается количество арифметических операций и объем промежуточной информации. Коренное изменение свойств численных методов происходит при переходе к новому исходному базису. Таким образом, геометрическая интерпретация вычислительных процессов позволила создать основу для классификации численных методов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Магуськин Б. Ф. Прямые методы решения систем нормальных уравнений с треугольной факторизацией. Известия вузов, «Геодезия и аэрофотосъемка», № 4, 1962.
2. Магуськин Б. Ф. Некоторые вопросы решения систем нормальных уравнений и обращения их матриц. Автореферат дисс. М., 1965.
3. Реминский А. А. Решение разложением нормальных уравнений по системе сопряженных векторов. Известия вузов, «Геодезия и аэрофотосъемка», вып. 1, 1967.
4. Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры.М.—Л., 1963.

Работа поступила
4 июня 1968 года.