Журнал обчислювальної та прикладної математики
2012, №4(110)
Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 519.852:519.876

ПРО ПОБУДОВУ ОЦІНЮВАЧА ЧИСЛА ОБУМОВЛЕНОСТІ МЕТОДОМ БАЗИСНИХ МАТРИЦЬ

В. О. Богаєнко, В. І. Кудін

Резюме. Розглядається процедура оцінки числа обумосленості при аналізі СЛАР методом базисних матриць. Приводяться рекурентні формули зв'язку цих оцінок на ітераціях методу. Описується система прийняття рішень щодо вибору алгоритма методу базисних матриць, який здатен дати розв'язок СЛАР з наперед заданою точністю.

Вступ

Лінійні системи, зокрема системи лінійних алгебраїчних рівнянь за своєю природою є некоректними [1–8] і характеризуються числом обумовленості. Це число, що подається як добуток норм прямої та оберненої матриць, пов'язує відносну похибку розв'язку зі збуреннями вектора обмежень. Розрахунок числа обумовленості навіть для систем невеликих розмірів є трудомісткою процедурою. Проблема розпізнання системи з поганою обумовленістю є актуальною, оскільки виявивши таку властивість до розрахунку чи в ході проведення розрахунків, можна оцінити відхилення точного розв'язку від наближеного. Це важливо знати не лише для оцінки впливу змін (неточностей, або збурень в моделі) на розв'язок але й для оцінювання області належності розв'язків системи при "відомих" збуреннях. Одним із варіантів збурень можуть бути зміни в векторі правих частин у вигляді сфери заданого радіусу. Інший більш складний вид збурень "торкається" як вектора так і матриці обмежень. Збурення можуть розглядатись і як нечіткості [9] у поданні елементів моделі. В даній роботі розвинуто дослідження [10] по аналізу впливу малих збурень на точність розв'язку включенням результатів по оцінюванню числа обумовленості для погано обумовлених систем.

Для аналізу властивостей таких лінійних систем рівнянь з квадратною матрицею обмежень було запропоновано метод базисних матриць (МБМ) [11], направлений не лише на знаходження розв'язку, але й на аналіз властивостей моделі. Зокрема, на основі формул зв'язку елементів методу в сусідніх ітераціях запропоновано процедуру знаходження величини рангу матриці обмежень. Встановлено умову єдиності розв'язків системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) з різним типом обмежень у випадку невиродженості матриці обмежень. В методі закладена можливість не лише аналізувати вплив змін в елементах моделі на величину рангу, невиродженість матриці обмежень тощо, але й побудувати "оцінювач" числа обумовленості та рекурентні формули зв'язку цих оцінок на ітераціях методу.

Аналіз впливу на розв'язки лінійної системи елементів методу базисних матриць

Нехай маємо математичну модель з точно заданими елементами вигляду

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

та збурену модель з наближено заданими елементами вигляду

$$\overline{A}\overline{u}^T = \overline{C}. \tag{2}$$

При проведенні дослідження будемо вважати заданим значення машинного нуля. Знайдений машинний розв'язок задачі є точним для деякої збуреної СЛАР (2).

Вважаємо, що $\Delta A = \overline{A} - A$, $\Delta C = \overline{C} - C = (\Delta c_1, \Delta c_2, \ .... \Delta c_m\ )$,

$$\|\Delta A\| = \left\|\overline{A} - A\right\| \le \varepsilon_A\ ,\ \ \|\Delta C\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}(\Delta c_i)^2} = C_B \le \varepsilon_B.$$

Наведемо деякі положення, що будуть використані в роботі.

Введемо на множині m-вимірних векторів деяку метрику. Будемо вважати, що розв'язок і права частина задачі **(1)** належать лінійному простору H, що складається з m-вимірних дійсних векторів. В H будемо використовувати сферичну норму $\|x\|_{III} = |x| = \sqrt{|x_1|^2 + |x_2|^2 + ... + |x_n|^n}$ та норми матриць $M(A) = n\underbrace{\max}_{i,j}|a_{ij}|$, $N(A) = \sqrt{\sum_{i,j}|a_{ij}|^2} = \sqrt{SpA^*A}$.

Відомо [1], що якщо матриця A має обернену та виконується умова $\|\Delta A\| < \left\|A^{-1}\right\|^{-1}$, тоді матриця $\overline{A} = A + \Delta A$ має обернену і справедлива така оцінка відносної похибки при збуренні всіх елементів моделі

$$\frac{\|\overline{u_0}\ - u_0\|}{\|u_0\|} \le \frac{M_A}{1 - M_A\left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}\right)} \cdot \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta c\|}{\|c\|}\right), \tag{3}$$

де $M_A = \|A\| \times \left\|A^{-1}\right\|$ є числом обумовленості.

При збуренні лише у векторі правих частин формула набуде вигляду

$$\frac{\|\overline{u_0}\ - u_0\|}{\|u_0\|} \le M_A \times \frac{\|\Delta c\|}{\|c\|}. \tag{4}$$

Число обумовленості M_A матриці A характеризує ступінь залежності відносної похибки розв'язку від відносної похибки правої частини. Матриці з великим числом обумовленості M_A називають погано обумовленими матрицями. При чисельному розв'язку систем з погано обумовленими матрицями можливе сильне накопичення похибок.

Якщо $\delta_u = \frac{\|\overline{u_0}\ - u_0\|}{\|u_0\|}$, а $\delta_c = \frac{\|\Delta c\|}{\|c\|}$, то випливає, що

$$M_A \ge \frac{\delta_u}{\delta_c}. \tag{5}$$

Відмітимо такі властивості числа обумовленості:

1) $M_A \ge 1$;

2) $M_A \geq \frac{|\lambda_{max}(A)|}{|\lambda_{\min}(A)|}$, де $\lambda_{\max}(A)$ і $\lambda_{\min}(A)$ — відповідно найбільше і найменше за модулем власні числа матриці A;
3) $M_{AB} \leq M_A M_B$.

Основою запропонованого МБМ є ідея порядкової базисної матриці. Базисні матриці в ході ітерацій послідовно змінюються вводом-виводом із неї рядків-нормалей обмежень задачі.

Розглянемо згідно [8, 9] СЛАР вигляду (1), де матриця А розмірності в загальному випадку $n \times m,\ n \geq m$. В нашому випадку $n = m,$ а також допоміжну тривіальну СЛАР вигляду

$$Iu = K, \tag{6}$$

де I — одинична матриця розмірності *(m, m),* а $K = \underbrace{(1, 1, ..., 1)}_{m}^{T}$ — вектор розмірності m, $C = (c_1,\, c_2,\, ..,\, c_m)^T$, $u = (u_1,\, u_2,\, ..,\, u_m)^T$, $a_j = (a_{j1},\, a_{j2},\, \ldots,\, a_{jm})$, $j = (1, 2, .., n)$ — рядки матриці, T — знак транспонування.

Означення 1. Підматрицю A_1 матриці A, складену із m лінійно незалежних рядків-нормалей $(i_1, i_2, ..., i_m)$ обмежень, будемо називати штучною базисною, а розв'язок u_0 відповідної їм системи рівнянь

$$A_1 u = C^0, \tag{7}$$

де $C^0 = (c_{i_1}, c_{i_2}, ..., c_{i_m}) \subset C$ — штучним базисним.

Нехай e_{rV} — елементи матриці A_1^{-1}, оберненої до A_1, $u_0 = (u_{01}, u_{02}, ..., u_{0m})$ — базисний розв'язок, $\alpha_r = (\alpha_{r1}, \alpha_{r2}, ..., \alpha_{rm})$ — вектор розвинення вектору-нормалі обмеження $a_r u_1 \leq c_r$ за рядками базисної матриці A_1, $\alpha_0 = (\alpha_{01}, \alpha_{02}, ..., \alpha_{0m})$ — вектор розвинення вектору-нормалі цільової функції за рядками базисної матриці A_1, $\Delta_r = a_r u_0^T - c_r$ — нев'язка r-го обмеження у вершині. Всі введені елементи в новій базисній матриці $\overline{A}_1$ будемо позначати рискою зверху.

Теорема 1. [11] *Між коефіцієнтами розвинення нормалей обмежень (1), за рядками штучної базисної матриці, елементами обернених матриць, базисними розв'язками, нев'язками обмежень та значеннями цільової функції в двох суміжних базисних матрицях мають місце такі співвідношення:*

$$\overline{\alpha}_{rk} = \frac{\alpha_{rk}}{\alpha_{lk}}, \overline{\alpha}_{ri} = \alpha_{rV} - \frac{\alpha_{rk}}{\alpha_{lk}}\alpha_{lV},\ r = \overline{0, n};\ i = \overline{1, m};\, V \neq k; \tag{8}$$

$$\overline{e}_{rk} = \frac{e_{rk}}{\alpha_{lk}}, \overline{e}_{ri} = e_{rV} - \frac{e_{rk}}{\alpha_{lk}}\alpha_{lV},\ r = \overline{1, m};\ i = \overline{1, m};\, V \neq k; \tag{9}$$

$$\overline{u}_{0j} = u_{0j} - \frac{e_{jk}}{\alpha_{1k}}\Delta_l,\ j = \overline{1, m}; \tag{10}$$

$$\overline{\Delta}_k = -\frac{\Delta_l}{\alpha_{lk}},\ \overline{\Delta}_r = \Delta_r - \frac{\alpha_{rk}}{\alpha_{lk}}\Delta_l,\ r = \overline{1, n};\ r \neq k, \tag{11}$$

причому умовою невиродженості базисної матриці при заміні вектором-нормаллю a_l обмеження $a_l u^T \leq c_l$ k-го рядка базисної матриці A_1 є виконання $\alpha_{lk} \neq 0$.

На основі (8)–(11) будується схема визначення рангу системи (1) та розв'язку системи рівнянь, послідовними змінами базисних матриць та відповідних штучних розв'язків.

Теорема 2. [11] *Для існування единого розв'язку (1) необхідно і достатньо, щоб* $\alpha_{lk}^{(i)} \neq 0, \; i = \overline{1,m}$, *де* $\alpha_{lk}^{(i)}$ *– ведучі елементи симплексної ітерації МБМ по заміщенню рядків базисної матриці (7) нормалями обмежень (1).*

Наслідок 1. Матриця A основної системи (1) невироджена, якщо $\alpha_{lk}^{(i)} \neq 0, \; i = \overline{1,m}$.

Наслідок 2. Ранг системи (1) визначається кількістю коректних заміщень рядків матриці обмежень (7) векторами нормалями (1), згідно формул (8)–(11).

Метод базисних матриць дає формули зв'язку елементів методу, зокрема розв'язків системи на двох сусідніх ітераціях. Значення $\frac{\Delta_l}{\alpha_{lk}}$ та e_k впливають на формування розв'язків та елементів оберненої матриці. В формулі зв'язку розв'язків $\frac{\Delta_l}{\alpha_{lk}}$ є довжиною ребра вектору e_k, який зв'язує суміжні вершини (розв'язки). Неважко переконатись, що малість α_{lk} дає зростання величини ребра, тобто малим збуренням в моделі відповідають значні якісні відхилення "сусідніх розв'язків".

Це підтверджується експериментальними дослідженнями з використанням методу базисних матриць для погано обумовлених систем, які проілюстрували зв'язки таких елементів методу, як провідні елементи, норми ведучих стовпців та числа обумовленості. На рис. 1–3. наведено графіки залежностей цих елементів, отриманих в результаті експерименту, при входженні (за 100 ітерацій) в стан поганої обумовленості методом базисних матриць. Експеримент демонструє кількісно-якісні зв'язки елементів методу досліджуваної моделі.

Як видно з графіків, входження СЛАР в стан поганої обумовленості характеризується кількісними значеннями (числа обумовленості, ведучих елементів, норм ведучих стовпців обернених матриць), які можна сформулювати у вигляді таких висновків:

— число обумовленості різко збільшується;
— ведучі елементи симплексних перетворень МБМ набувають значень близьких до нуля (різко спадають);
— норми стовпців зростають;
— якісна поведінка значення ведучого елемента, норми ведучого стовпця оберненої матриці збігається з поведінкою значення числа обумовленості (фази зростання ідентичні з точністю до масштабуючих множників);
— в стані поганої обумовленості малим збуренням в моделі відповідають значні якісні відхилення "сусідніх розв'язків";
— проміжні розв'язки погано обумовленої системи "мало" відхиляються від загальних розв'язків (багатовиду) системи неповного рангу.

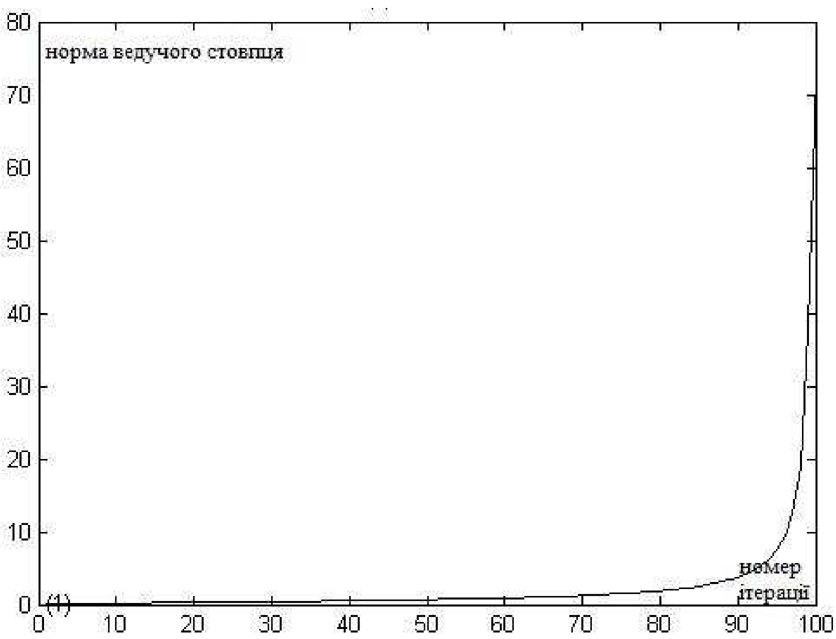

Рис. 1. Значення норми ведучого стовпця оберненої матриці модельної задачі

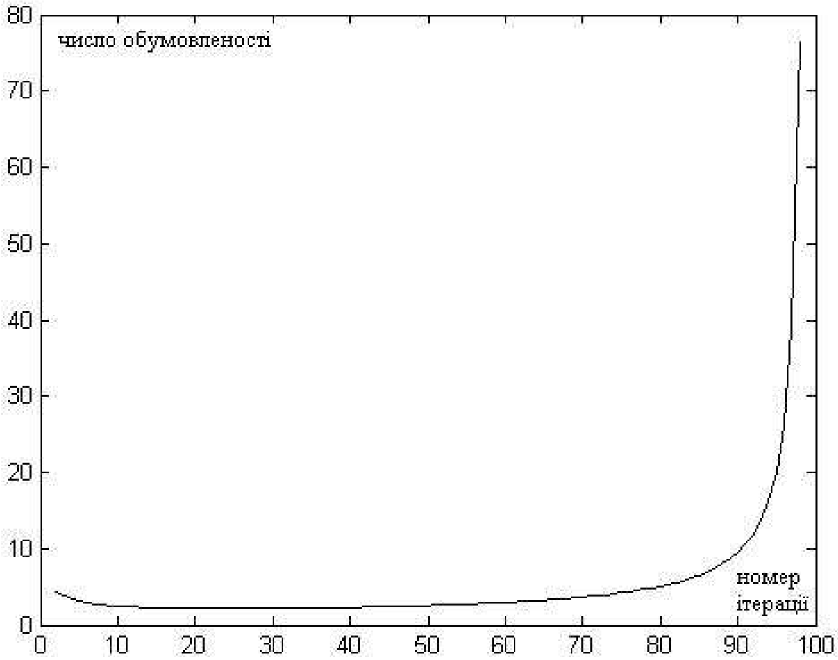

Рис. 2. Значення числа обумовленості

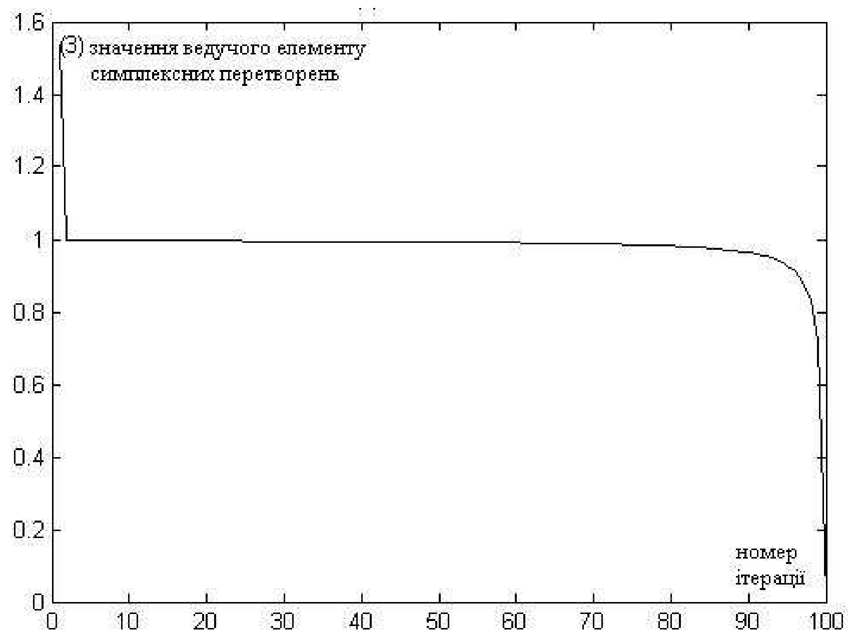

Рис. 3. Значення ведучого елементу симплексних перетворень в модельній задачі

Комп'ютерне дослідження збурених моделей та вірогідності отриманих результатів

Нехай маємо математичну модель з точно заданими елементами вигляду (1), (2).

Вважаємо, що $\Delta A = \overline{A} - A$, $\Delta C = \overline{C} - C = (\Delta c_1, \Delta c_2, \ .... \Delta c_m)$,

$$\|\Delta A\| = \left\|\overline{A} - A\right\| \le \varepsilon_A \ , \ \ \|\Delta C\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} (\Delta c_i)^2} = C_B \le \varepsilon_B.$$

Для нев'язок машинно заданих обмежень (2) при збуренні у векторі правих частин можемо записати $\overline{\Delta}_l = a_l \overline{u}_0^T - \overline{c_l}$ або $\overline{\Delta}_l = a_l \overline{u}_0^T - \Delta c_l - c_l$, бо $\overline{c}_l = (c_l + \Delta c_l)$. Відповідно для точно заданих елементів системи (1)

$$\Delta_l = a_l \overline{u}_0^T - c_l = a_l \overline{u}_0^T + \Delta c_l - \overline{c}_l = a_l \overline{u}_0^T + \Delta c_l - \overline{c}_l = \Delta c_l, \qquad (12)$$

оскільки $a_l \overline{u}_0^T - \overline{c}_l = 0$, як нев'язка розв'язку системи рівнянь при неточно заданих данних в схемі методу базисних матриць.

Для нев'язок обмежень (2) при збуренні у всіх елементах обмеження можемо записати $\overline{\Delta}_l = \overline{a}_l \overline{u}_0^T - \overline{c}_l$, а для нев'язки обмеження математичної моделі (1)

$$\begin{aligned} \Delta_l &= a_l \overline{u}_0^T - c_l = (\overline{a}_l - \Delta a_l) \overline{u}_0^T - (\overline{c}_l - \Delta c_l) = \\ &= \overline{a}_l \overline{u}_0^T - \overline{c}_l - \Delta a_l \overline{u}_0^T + \Delta c_l = -\Delta a_l \overline{u}_0^T + \Delta c_l, \end{aligned} \qquad (13)$$

враховуючи, що $\overline{a}_l \overline{u}_0^T - \overline{c}_l = 0$.

Проведемо дослідження впливу наближеного формування моделі на розв'язок задачі. Згідно формул зв'язку суміжних розв'язків в методі базисних матриць (8)–(11) це можна відобразити в загальному вигляді як зв'язок розв'язку на першій та на останній (m-тій) ітераціях. Послідовність ітерацій по заміщенню рядків неточно заданої матриці $\overline{A}$ рядками точної матриці A буде вестись у припущенні, що відомі всі елементи методу при розв'язанні задачі з неточно заданими елементами моделі (2).

Теорема 3. *Для відносної похибки точно та наближено заданих систем (1) та (2) при збуреннях у векторі правих частин справедливе співвідношення*

$$\frac{\|\overline{u}_0 - u_0\|}{\|u_0\|} \le \frac{\|A\| \times \sum_{i=1}^{m} \left\| \frac{e_{k^{(i)}}}{\alpha_{l^{(i)}k^{(i)}}} \times \Delta_{l^{(i)}} \right\|}{\|C\|}, \tag{14}$$

$$\overline{c}_l = (c_l + \Delta c_l),$$

$$\Delta_{l^{(i)}} = a_{l^{(i)}}\overline{u}_0 - c_l = a_{l^{(i)}}\overline{u}_0 + \Delta c_{l^{(i)}} - \overline{c}_{l^{(i)}} = a_{l^{(i)}}\overline{u}_0 + \Delta c_{l^{(i)}} - \overline{c}_{l^{(i)}} = \Delta c_{l^{(i)}}. \tag{15}$$

Для верхньої оцінки $\left\|A^{-1}\right\|$ *виконується*

$$\left\|A^{-1}\right\| \le (\sum_{i=1}^{m} \left\| \frac{e_{k^{(i)}}}{\alpha_{l^{(i)}k^{(i)}}} \right\|). \tag{16}$$

Доведення. Покомпонентна формула переходу від розв'язку збуреної моделі до точної має вигляд

$$u_{0j} = \overline{u}_{0j} - \frac{e_{jk}}{\alpha_{1k}}\Delta_l,\ j = \overline{1,m},\ l = \overline{1,m},$$

а у векторному представленні $u_0 = \overline{u}_0 - \frac{e_k}{\alpha_{1k}}\Delta_l$ або $\overline{u}_0 - u_0 = \frac{e_k}{\alpha_{1k}}\Delta_l$.

Запишемо формули зв'язку послідовності суміжних розв'язків при проведенні m ітерацій заміщення згідно положень МБМ.

Вважаємо, що u_0 — розв'язок точно заданої задачі (1), тоді m ітерацій переходу від збуреної у векторі правих частин моделі (2) до точної можна записати у вигляді

$$\overline{u}_0 - u_0^{(1)} = \frac{e_{k^{(1)}}}{\alpha_{l^{(1)}k^{(1)}}}\Delta_{l^{(1)}}, \overline{u}_0^{(1)} - u_0^{(2)} = \frac{e_{k^{(2)}}}{\alpha_{l^{(2)}k^{(2)}}}\Delta_{l^{(2)}}, u_0^{(2)} - u_0^{(3)} = \frac{e_{k^{(3)}}}{\alpha_{l^{(3)}k^{(3)}}}\Delta_{l^{(3)}},$$

$$u_0^{(m-2)} - u_0^{(m-1)} = \frac{e_{k^{(m-1)}}}{\alpha_{l^{(m-1)}k^{(m-1)}}}\Delta_{l^{(m-1)}}, u_0^{(m-1)} - u_0^{(m)} = \frac{e_{k^{(m)}}}{\alpha_{l^{(m)}k^{(m)}}}\Delta_{l^{(m)}}.$$

Просумуємо всі ліві та праві складові співвідношень і отримаємо

$$\overline{u}_0 - u_0^{(m)} = \sum_{i=1}^{m} \frac{e_{k^{(i)}}}{\alpha_{l^{(i)}k^{(i)}}}\Delta_{l^{(i)}}, u_0^{(m)} = u_0,$$

$$\Delta_{l^{(i)}} = a_{l^{(i)}}\overline{u}_0 - c_l = a_{l^{(i)}}\overline{u}_0 + \Delta c_{l^{(i)}} - \overline{c}_{l^{(i)}} = a_{l^{(i)}}\overline{u}_0 + \Delta c_{l^{(i)}} - \overline{c}_{l^{(i)}} = \Delta c_{l^{(i)}},$$

де $u_0^{(m)}$ — розв'язок системи з точно заданими елементами.

Введемо в розгляд матрицю $\hat{A} = (\widetilde{e}_{k^{(1)}}, \widetilde{e}_{k^{(2)}}, ..., \widetilde{e}_{k^{(m)}})$ утворену стовпцями вигляду $\widetilde{e}_{k^{(j)}} = \frac{e_{k^{(j)}}}{\alpha_{l^{(j)}k^{(j)}}}$, $j = \overline{1,m}$.

Враховуючи (12), можемо записати

$$(\overline{u}_0 - u_0^{(m)})^T = \sum_{i=1}^{m} \frac{e_{k(i)}}{\alpha_{l(i)k(i)}} \Delta_{l(i)} = \sum_{j=1}^{m} \widetilde{e}_{k(j} \times \Delta c_{l(j)} = \hat{A} \times \Delta C.$$

З іншого боку

$A\overline{u}_0^T = \overline{C}$ та $Au_0^T = C$, тобто $A(\overline{u}_0 - u_0)^T = \overline{C} - C = (\Delta c_1, \Delta c_2, \ .... \Delta c_m)^T$,

$$(\overline{u}_0 - u_0)^T = A^{-1} \times (\overline{C} - C) = A^{-1} \times (\Delta c_1, \Delta c_2, \ .... \Delta c_m)^T = A^{-1} \times \Delta C \ .$$

З останніх співвідношень витікає, що $A^{-1} = \hat{A}$.

Для оцінки за евклідовою нормою матриці та вектору витікає справедливість співідношень

$$\left\|A^{-1}\right\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{m}\left|\widetilde{e}_{jk}\right|^2} = \sqrt{\sum_{k=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\left|\widetilde{e}_{jk}\right|^2} = \sqrt{\sum_{k=1}^{m}\|\widetilde{e}_k\|^2},$$

оскільки $\|\widetilde{e}_k\| = \sqrt{\sum_{j=1}^m e_{jk}^2}$, $\|\widetilde{e}_k\|^2 = \sum_{j=1}^m e_{jk}^2$.

Тоді $\left\|A^{-1}\right\|^2 = \sum_{k=1}^m \|\widetilde{e}_k\|^2$, $\left\|A^{-1}\right\| \le \sum_{k=1}^m \|\widetilde{e}_k\|$.

Можемо записати оціночне співвідношення для норми

$$\left\|A^{-1}\right\| \le (\sum_{i=1}^{m}\left\|\frac{e_{k(i)}}{\alpha_{l(i)k(i)}}\right\|).$$

Для норми різниці розв'язків точно та наближено заданих систем (1), (2) збурених у векторі правих частин справедливо таке

$$\|\overline{u}_0 - u_0\| \le \sum_{i=1}^{m}\left\|\frac{e_{k(i)}}{\alpha_{l(i)k(i)}} \times \Delta_{l(i)}\right\| = \left\|\hat{A} \times \Delta C\right\| \le \left\|\hat{A}\right\| \times \|\Delta C\| \, .$$

В припущенні, що відома $\|A\|$ проведемо еквівалентні перетворення та знайдемо зв'язки відносних похибок розв'язків точно та наближено заданих систем до відносних похибок правих частин систем:

$$\frac{\|\overline{u}_0 - u_0\|}{\|u_0\|} \le \frac{\|A\| \times \left\|\hat{A}\right\| \times \|\Delta C\|}{\|A\| \times \|u_0\|} \le \frac{\|A\| \times \left\|\hat{A}\right\| \times \|\Delta C\|}{\|C\|}$$

або

$$\frac{\|\overline{u}_0 - u_0\|}{\|u_0\|} \le \frac{\|A\| \times \sum_{i=1}^m \left\|\frac{e_{k(i)}}{\alpha_{l(i)k(i)}} \times \Delta_{l(i)}\right\|}{\|C\|}.$$

Ці співвідношення за змістом погоджуються з формулою (15). $\square$

Побудуємо на основі МБМ оціночну формулу для похибок відхилення математичного розв'язку від збуреного. Слід зазначити, що в формулі (14), можна вважати $M_A = \|A\| \times \sum_{i=1}^m \left\|\frac{e_{k(i)}}{\alpha_{l(i)k(i)}}\right\|$.

Наслідок 3. Верхньою оцінкою норм суміжних обернених матриць на ітераціях методу базисних матриць є співвідношення

$$\left\|A_b^{(r)^{-1}}\right\| \leq (\sum_{i=1}^{r}\left\|\frac{e_{k^{(i)}}}{\alpha_{l^{(i)}k^{(i)}}}\right\| + (m-r)), \quad r=\overline{1,m}. \tag{17}$$

Для норм суміжних базисних матриць справедливі такі рекурентні співвідношення

$$\left\|A_b^{(r)}\right\|^2 = \left\|A_b^{(r-1)}\right\|^2 + (\sum_{j=1}^{m} a_{i_r j}^2 - 1), \quad r=\overline{2,m}. \tag{18}$$

Для чисел обумовленості суміжних систем на ітераціях методу виконуються співвідношення

$$M_A^{(r)} \leq (\sum_{i=1}^{r}\left\|\frac{e_{k^{(i)}}}{\alpha_{l^{(i)}k^{(i)}}}\right\|) \times \left\|A_b^{(r)}\right\|, \; r=\overline{1,m}. \tag{19}$$

Таким чином, процедура методу базисних матриць дозволяє отримувати верхні оцінки числа обумовленості системи на кожній ітерації, що дозволяє в процесі розрахунків приймати рішення щодо зміни алгоритму аналізу СЛАУ на такий, який може дати розв'язок з заданою точністю.

Для оцінки числа обумовленості можна отримати рекурентні формули, використання яких дозволяє робити перерахунок з лінійною складністю, тоді як повний перерахунок числа обумовленості виконується з квадратичною складністю.

Нехай

$$M_k = \|A_k\| \times \left\|A_k^{-1}\right\|,$$

де M_k — число обумовленості на k-ій ітерації, A_k — матриця, складена з рядків, введених до k-ї ітерації, A_k^{-1} — поточна базисна матриця, обернена до A_k.

$$\|A_k\|^2 = \|A_{k-1}\|^2 + \|a_k\|^2,$$

$$\|A_k^{-1}\|^2 = \left\|A_{k-1}^{-1} - \frac{e_k}{\alpha_{kk}} a_k A_{k-1}^{-1}\right\|^2 + \left\|\frac{e_k}{\alpha_{kk}}\right\|^2 \leq$$

$$\leq \|A_{k-1}^{-1}\|^2 + \left\|\frac{e_k}{\alpha_{kk}} a_k A_{k-1}^{-1}\right\|^2 + \left\|\frac{e_k}{\alpha_{kk}}\right\|^2 = \|A_{k-1}^{-1}\|^2 + \frac{\|e_k\|^2}{\alpha_{kk}^2}\|\alpha_k\|^2 + \left\|\frac{e_k}{\alpha_{kk}}\right\|^2 = N_a$$

$$M_k \leq \|A_k\| \times N_a = \tilde{M}_k.$$

Тут N_a — верхня оцінка норми поточної базисної матриці, а $\tilde{M}_k$ — верхня оцінка числа обумовленості матриці A_k.

Система прийняття рішень щодо вибору алгоритму

Значення верхньої оцінки використовується системою прийняття рішень для вибору алгоритму, який здатен дати розв'язок СЛАР з наперед заданою точністю. Окрім оцінки числа обумовленості для прийняття такого рішення система повинна мати залежність точності обчислень від числа обумовленості системи для кожного алгоритму. Така залежність для алгоритмів методу базисних матриць є лінійною [12] й будується евристично лінійною інтерполяцією з отриманих тестових даних з фіксацією найбільшого числа обумовленості, при якому алгоритм обертає матрицю, як матрицю повного рангу. Ця вибірка даних поповнюється в процесі роботи системи. Аналогічно, проте кусочно-лінійною інтерполяцією, формується й залежність часу, що витрачається на розрахунки, від розмірності матриць.

Система прийняття рішень може оптимізувати розрахунки за двома критеріями: по часу та точності розрахунків. Оптимізація по часу здійснюється до початку роботи алгоритму МБМ — відбувається вибір найшвидшого алгоритму. Оптимізація ж по точності відбувається в процесі розрахунків. Процедура вибору нового алгоритму запускається у випадку, коли оцінка точності поточного алгоритму, отримана з використанням евристичних залежностей та оцінки числа обумовленості, стає меншою за задану бажану точність. Новий алгоритм вибирається по комбінованому критерію: як найшвидший з тих, що дає точність більшу ніж бажана, або за відсутністю таких алгоритмів — як найточніший з наявних.

Була проведена серія обчислювальних експериментів по з'ясуванню залежностей числа обумовленості матриці та його верхньої оцінки від номера ітерації. Отримана залежність для матриці з $M=7\cdot 10^6$ приведена на рис. 4.

Графік зміни значення ведучого елементу для погано обумовленої ($M=2.2\cdot 10^{10}$) та добре обумовленої ($M=2.7\cdot 10^6$) матриць показані на рис. 5 та рис. 6 відповідно.

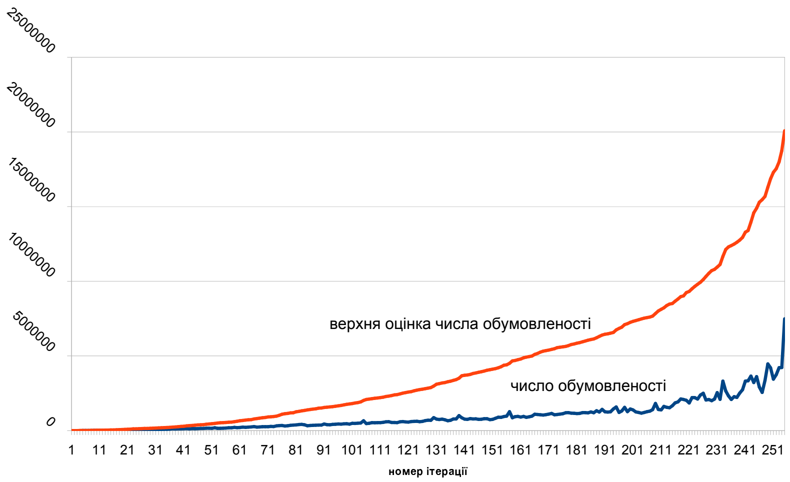

Рис. 4. Число обумовленості та його верхня оцінка на ітераціях

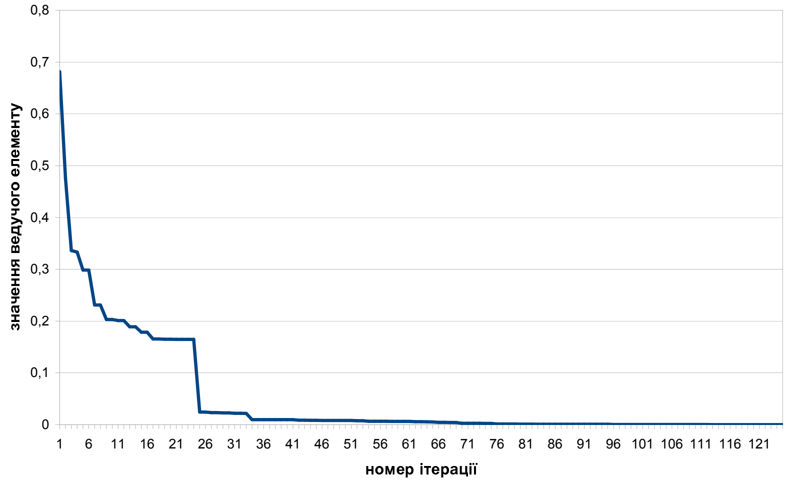

Рис. 5. Значення ведучого елементу на ітераціях для погано обумовленої матриці

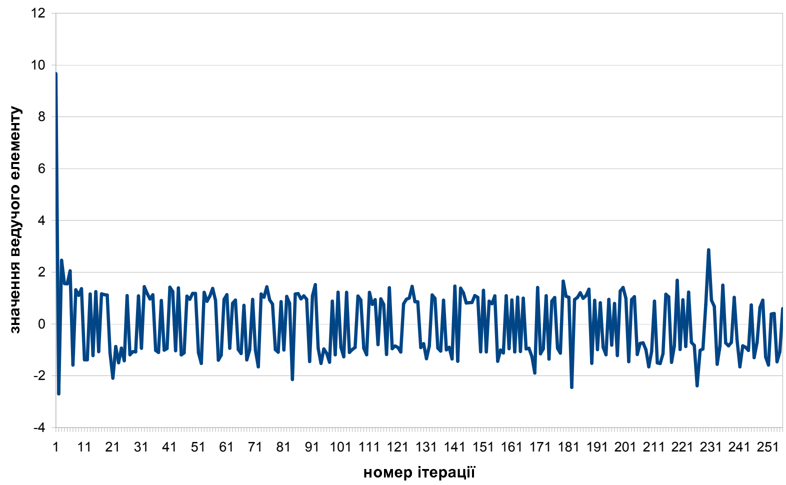

Рис. 6. Значення ведучого елементу на ітераціях для добре обумовленої матриці

Графіки зміни на ітераціях точності обернення матриці та її оцінок, використовуючи реальне число обумовленості матриці та його верхню оцінку для погано й добре обумовленої матриці, приведені на рис. 7 та рис. 8 відповідно.

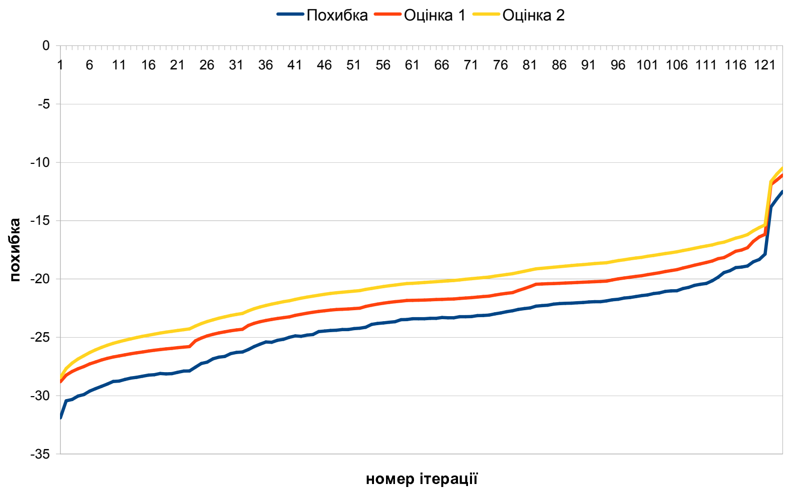

Рис. 7. Похибка обернення та її оцінки (оцінка 1 — по реальному числу обумовленості, оцінка 2 — по верхній оцінці числа обумовленості) для погано обумовленої матриці

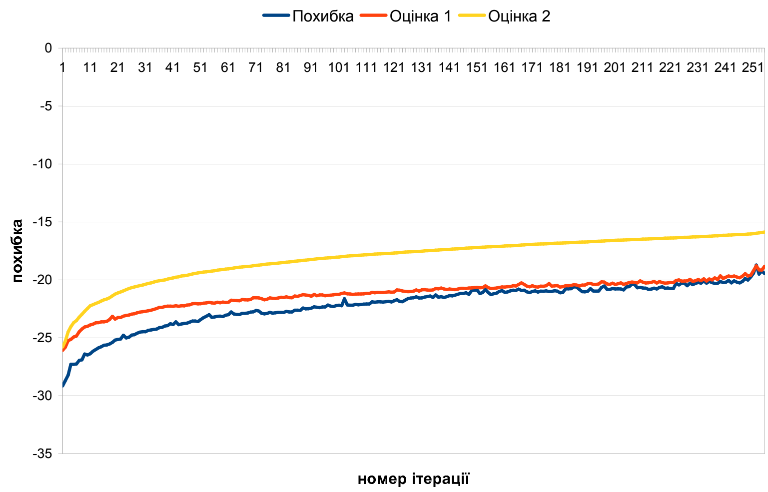

Рис. 8. Похибка обернення та її оцінки (оцінка 1 — по реальному числу обумовленості, оцінка 2 — по верхній оцінці числа обумовленості) для добре обумовленої матриці

Роботу автоматичної системи прийняття рішень проілюструємо на задачі розв'язання СЛАР розмірності 544×125, яка виникає при дискретизації методом функцій Гріна крайової задачі для лінійного еліптичного рівняння.

В обчислювальних експериментах ставилась умова досягнення заданої точності розрахунків з різними значеннями ε цієї точності.

Процедура зміни алгоритмів розв'язання для $\varepsilon = 10^{-10}$ показана у табл. 1.

У колонці 1 алгоритм МБМ кодується таким чином: перша цифра вказує на вигляд початкової матриці (0 — одинична, 1 — заповнена випадковими числами не більшими по модулю за одиницю, 2 — дорівнює вихідній матриці, 3, 4, 5 — те ж, що й 0, 1, 2, але при введенні рядка до базисної матриці перерахунок здійснюється використовуючи різницю поточного й попереднього рядків), друга цифра — кількість ітерацій уточнення.

Таблиця 1. Робота автоматичної системи прийняття рішень при розв'язанні СЛАР розмірності 544×125 ($\varepsilon = 10^{-10}$).

Стадія	Алгоритм	Оцінка M	M	Похибка обернення	Оцінка похибки обернення поточним алгоритмом	Оцінка похибки обернення новим алгоритмом	Номер ітерації, на якій відбулась зміна алгоритму
1	2	3	4	5	6	7	8
I	(0,0)						
II	(1,1)	$2.9{\cdot}10^{11}$	$3.6{\cdot}10^{10}$	$5.7{\cdot}10^{-14}$	$1.1{\cdot}10^{-10}$	$3.8{\cdot}10^{-11}$	79
Результат		$5.2{\cdot}10^{11}$	$7.1{\cdot}10^{10}$	$6.5{\cdot}10^{-14}$	$3.4{\cdot}10^{-10}$		

В цьому випадку використання початкового алгоритму не дозволяє отримати бажану точність, проте це можна зробити іншими алгоритмами, найкращий з яких вибирається за критерієм швидкодії.

Процедура зміни алгоритмів розв'язання для $\varepsilon = 10^{-20}$ показана у табл. 2.

Таблиця 2. Робота автоматичної системи прийняття рішень при розв'язанні СЛАР розмірності 544×125 ($\varepsilon = 10^{-20}$).

Стадія	Алгоритм	Оцінка M	M	Похибка обернення	Оцінка похибки обернення поточним алгоритмом	Оцінка похибки обернення новим алгоритмом	Номер ітерації, на якій відбулась зміна алгоритму
1	2	3	4	5	6	7	8
I	(0,0)						
II	(3,1)	$1.3{\cdot}10^{6}$	$8.2{\cdot}10^{5}$	$1.9{\cdot}10^{-26}$	$1.6{\cdot}10^{-20}$	$6.6{\cdot}10^{-21}$	20
III	(0,1)	$2.8{\cdot}10^{6}$	$7.2{\cdot}10^{5}$	$2.1{\cdot}10^{-26}$	$1.1{\cdot}10^{-20}$	$2.4{\cdot}10^{-21}$	22
IV	(2,1)	$2.2{\cdot}10^{7}$	$1.8{\cdot}10^{6}$	$7.7{\cdot}10^{-24}$	$6.9{\cdot}10^{-19}$	$6.0{\cdot}10^{-19}$	32
Результат		$3.3{\cdot}10^{9}$	$6.6{\cdot}10^{7}$	$5.9{\cdot}10^{-10}$			Матриця неповного рангу

В даному випадку перші дві зміни відбуваються в ситуації, коли існують алгоритми, здатні розв'язати СЛАР з числом обумовленості, яке оцінене на проміжних ітераціях з заданою точністю. В процесі розрахунків, зі збільшенням оцінки числа обумовленості, виявляється, що таких алгоритмів не існує й остання зміна відбувається на найточніший в поточній ситуації алгоритм. Проте в результаті цей алгоритм не знаходить розв'язок СЛАР, вважаючи матрицю матрицею неповного рангу. Така ситуація вказує на ваду автоматичної побудови залежності між точністю розрахунків та числом обумовленості й на потребу задіяти при формуванні такої залежності особи, приймаючої рішення.

Процедура зміни алгоритмів розв'язання для $\varepsilon = 10^{-5}$ показана у табл. 3.

Таблиця 3. Робота автоматичної системи прийняття рішень при розв'язанні СЛАР розмірності 544×125 ($\varepsilon = 10^{-5}$).

Стадія	Алгоритм	Оцінка M	M	Похибка обернення	Оцінка похибки обернення поточним алгоритмом	Оцінка похибки обернення новим алгоритмом	Номер ітерації, на якій відбулась зміна алгоритму
1	2	3	4	5	6	7	8
I	(0,0)						
II	(3,0)	$2.6 \cdot 10^{13}$	$3.8 \cdot 10^{12}$	$2.4 \cdot 10^{-10}$	$1.0 \cdot 10^{-5}$	$5.7 \cdot 10^{-6}$	100
III	(1,1)	$3.6 \cdot 10^{13}$	$2.2 \cdot 10^{12}$	$3.7 \cdot 10^{-10}$	$1.0 \cdot 10^{-5}$	$1.6 \cdot 10^{-6}$	103
Результат		$5.2 \cdot 10^{11}$	$7.1 \cdot 10^{10}$	$6.5 \cdot 10^{-14}$	$3.4 \cdot 10^{-10}$		

Встановлення достатньо низької граничної точності дозволяє при кожній зміні вибирати найшвидший алгоритм з наявних. Так, алгоритм без уточнення при певних значеннях оцінки числа обумовленості був тут достатньо точним й найшвидшим, проте при збільшені оцінки M перестав давати необхідну точність й перерахунок був здійснений іншим алгоритмом.

Звісно, час, який витрачається на повторні розрахунки та вибір алгоритмів є значним й розв'язання може суттєво уповільнитись. Скажімо, в даній ситуації, час роботи базового алгоритму — 49 мс, тоді як час розрахунків у вищеописаних експериментах у 6–10 разів більший (в даному випадку такий розрив може мати причиною невелику розмірність тестових матриць). З іншого боку, базовий алгоритм розв'язує СЛАР, як СЛАР з матрицею неповного рангу й точність розв'язання при цьому є абсолютно незадовільною — $2 \cdot 10^2$.

Література

1. Самарский А. А. Численные методы: учеб.пособие для вузов по спец. "Прикл. математика" / А. Самарский, А. Гулин. — М.: Наука, 1989. — 429 с.
2. Тихонов А. Н. Об устойчивости алгоритмов для решения вырожденных систем линейных алгебраических уравнений. / А. Н. Тихонов // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. — 1965–5, №4. — С. 718—722.
3. Фаддеев Д. К. Вычислительные методы линейной алгебры. / Д. Фаддеев, В. Фаддеева. — М: Физматгиз, 1960, — 656 с.
4. Воеводин В. В. Вычислительные основы линейной алгебры. / В. Воеводин — М.: Наука, — 1979. — 303 с.
5. Воеводин В. В. Ошибки округления и устойчивость в прямых методах линейной алгебры. / В. Воеводин — М.: Изд-во МГУ, 1969. — 153 с.
6. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложение. / Дж. Деммель — М.: Мир, — 2001. — 430 с.

7. Петунін Ю. І. Про одну концепцію обумовленності систем лінійних алгебраїчних рівнянь. / Ю. І. Петунін, О. М. Рябічев, О. М. Акчурін // Вісник КУ. Сер. фіз.-мат. науки. — 1998. — №4. — С. 180–187.
8. Ляшко С. И. Двадцатая проблема Гильберта. Обобщенные решения операторных уравнений. / С. И. Ляшко, Д. А. Номировский, Ю. И. Петунин, В. В. Семенов // М.: Диалектика, 2009. — 192 с.
9. Орловский С. А. Принятие решений при нечёткой исходной информации. / С. А. Орловский . — М: Наука, — 1981. — 206 с.
10. Богаенко В. А. О принятии решений при анализе малых возмущений линейный моделей. / В. А. Богаенко, В. И. Кудин // Information Models of Knowledge, ITHEA, Kiev-Sofia, — 2010. — P. 226–232.
11. Кудін В. І. Метод штучних базисних матриць. / В. І. Кудін, С. І. Ляшко, Ю. П. Яценко, Н. В. Хритоненко // Доповіді НАН України. — 2007. — №9. — С. 30–34.
12. Богаенко В. А. Об особенностях организации вычислений на основе метода базисных матриц. / В. А. Богаенко, В. И. Кудин, В. В. Скопецкий // Кибернетика и системный анализ. — 2012. — Т. 48, №4. — С. 146–154

Інститут Кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, просп. Глушкова, 40, Київ, 03680, Україна.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64, Київ, 01601, Україна.

Надійшла 15.11.2012