УДК 519.61

УСТОЙЧИВОСТЬ ОРТОГОНАЛИЗАЦИИ ГРАМА–ШМИДТА И СПОСОБ ЕЕ ПОВЫШЕНИЯ

Бабенко В. Н.

STABILITY OF GRAM-SCHMIDT ORTHOGONALIZATION AND THE WAY OF ITS INCREASE

Babenko V. N.
Krasnodar Higher Military Aviation School for Pilots, Krasnodar, 350005, Russia
e-mail: rnibvd@mail.ru

Abstract. The orthogonal methods used when solving the system of the linear equations, are more stable. However the experience of use of the programs realizing these methods, has shown, that Gram-Schmidt and Lanczos orthogonalization methods can demonstrate the results of unacceptable accuracy. While transformational methods (methods of rotations and reflections) give reliable calculations of high accuracy when solving the same problems.

For the specified reasons in methods of simplification of the form of matrixes (including in QR-decomposition) users began to prefer transformations of Hausholder reflection and Jacobi rotation (Hivens). In this article under the example of QR-decomposition the nature of instability of Gram-Schmidt orthogonalization is revealed. This decomposition is chosen to simplify the statement of essence of the phenomenon what does not break the commonality of research.

To diminish the influence of the revealed lack it is offered to use procedure of bidimentional orthonormalizational basis construction. The executed tests have shown the efficiency of application of the specified procedure.

Keywords: Gram-Schmidt orthogonalization, QR-decomposition, reorthogonalization, condition number, linear variety, machine number, computational error

1. Системы векторов: ортогонализируемая и выстраиваемая ортонормированная, соотношения их линейных многообразий

В методах вычислительной линейной алгебры широко применяются методы представления исходной матрицы в виде произведения матриц

$$\mathbf{A} = \mathbf{QBP}^*. \tag{1.1}$$

где матрица $\mathbf{B}$ имеет простую форму (двухдиагональную, трехдиагональную, треугольную и т. д.) [1].

Определение 1. Величина

$$c(\mathbf{A}) = \frac{\max\limits_{\|x\|=1} \|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{Ay}\|_{\|\mathbf{y}\|=1}}$$

называется числом обусловленности матрицы $\mathbf{A}$.

Для числа обусловленности произведения $\mathbf{QBP}^*$ выполняется неравенство

$$c(\mathbf{QBP}^*) \leqslant c(\mathbf{Q})c(\mathbf{B})c(\mathbf{P}^*)$$

Определение 2. Метод разложения (1.1) называется:

1) устойчивым, если
$$c(\mathbf{A}) = c(\mathbf{Q})c(\mathbf{B})c(\mathbf{P}^*);$$
2) условно устойчивым, если он обеспечивает ограничение роста произведения $c(\mathbf{Q})c(\mathbf{B})c(\mathbf{P}^*)$;
3) неустойчивым, если он может привести к неограниченному росту величины $c(\mathbf{Q})c(\mathbf{B})c(\mathbf{P}^*)$.

Предложение 1. Следуя определению 1, все ортогональные методы нужно отнести к устойчивым. Однако опыт эксплуатации программ, реализующих ортогональные методы, показал, что методы Грама–Шмидта и Ланцоша могут приводить к результатам неприемлемой точности, в то время как трансформационные методы (методы вращений и отражений) на тех же задачах

Бабенко Виктор Николаевич, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры математики Краснодарского высшего военного авиационного училища летчиков; e-mail: rnibvd@mail.ru надежно давали результаты вычислений высокой точности [1].

Указанные причины привели к тому, что в методах упрощения вида матриц (в том числе и в **QR**-разложении) начали отдавать предпочтение преобразованиям отражения Хаусхолдера и вращения Якоби (Гивенса).

Данная статья открывает цикл работ, направленных на изучение указанного выше феномена. В работе предпринята попытка не теряя общности исследования раскрыть природу неустойчивости ортогонализации Грама–Шмидта на примере **QR**-разложения. Это разложение выбрано для упрощения изложения сущности явления.

Пусть система векторов $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$ образует базис в R^n. Тогда выполнение вычислительной процедуры

1) $\mathbf{q}_1 = \frac{1}{\|\mathbf{a}_1\|}\mathbf{a}_1$,

2) $\mathbf{f}_j = \mathbf{a}_j - \sum\limits_{i=1}^{j-1} \mathbf{q}_i^* \mathbf{a}_j \mathbf{q}_i$, $\mathbf{q}_j = \frac{1}{\|\mathbf{f}_j\|}\mathbf{f}_j$, $j = \overline{2, n}$,

называемой ортогонализацией Грама–Шмидта, даст в R^n ортонормированный базис $\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n$.

Рассмотрим применение ортогонализации Грама–Шмидта для упрощения вида матриц при решении системы линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}.$$

Суть **QR**-разложения с помощью ортогонализации Грама–Шмидта состоит в следующем. Матрицу системы $\mathbf{A}$ представляют в виде вектор-столбцов $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1|\ldots|\mathbf{a}_n]$, затем к ним применяют ортогонализацию Грама–Шмидта. В результате получают ортонормированную систему вектор-столбцов $\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n$. Пусть $\mathbf{Q} = [\mathbf{q}_1|\ldots|\mathbf{q}_n]$, тогда форма матрицы $\mathbf{R}$, определенной формулой $\mathbf{R} = \mathbf{Q}^*\mathbf{A}$, будет верхней треугольной. При построении на ЭВМ ортогональной системы $\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n$ вследствие неизбежно возникающих погрешностей вычислений получим систему векторов $\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n$, для которых условие ортогональности может не выполняться (особенно если матрица $\mathbf{A}$ имеет высокий порядок).

Вопрос 1. Какова степень влияния указанного фактора на точность вычисленного решения и является ли он единственным?

При возникновении описанной ситуации рекомендуется прибегнуть к повторной ортогонализации (переортогонализации) [1, 2], по следующей схеме:

1) $\mathbf{h}_1 = \mathbf{p}_1$,

2) $\mathbf{f}_j = \mathbf{p}_j - \sum\limits_{i=1}^{j-1} \mathbf{h}_i^* \mathbf{p}_j \mathbf{h}_i$, $\mathbf{h}_j = \frac{1}{\|\mathbf{f}_j\|}\mathbf{f}_j$, $j = \overline{2, n}$.

Вопрос 2. Всегда ли указанная процедура приводит к повышению точности **QR**-разложения и соответственно вычисленного решения?

Начнем с ответа на вопрос 2.

1) Если линейные многообразия $R(\mathbf{p}_1|\ldots|\mathbf{p}_j)$ и $R(\mathbf{a}_1|\ldots|\mathbf{a}_j)$, $j = \overline{1, n-1}$ совпадают, и матрица $\mathbf{H} = [\mathbf{h}_1|\ldots|\mathbf{h}_n]$ вычислена без погрешностей, очевидно будет справедливо равенство $\mathbf{H} = \mathbf{Q}$. Соответственно матрица $\mathbf{H}^*\mathbf{A}$ примет верхнюю треугольную форму.
2) Если же линейные многообразия $R(\mathbf{p}_1|\ldots|\mathbf{p}_j)$ и $R(\mathbf{a}_1|\ldots|\mathbf{a}_j)$, $j = \overline{1, n-1}$ не совпадают и $\mathbf{H} = [\mathbf{h}_1|\ldots|\mathbf{h}_n]$ вычислена без погрешностей, то для последовательности многообразий $R(\mathbf{h}_1|\ldots|\mathbf{h}_j)$, $j = \overline{1, n-1}$ будут выполнены равенства $R(\mathbf{h}_1|\ldots|\mathbf{h}_j) = R(\mathbf{p}_1|\ldots|\mathbf{p}_j)$. Поэтому, несмотря на выполненную переортогонализацию системы векторов $\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n$, поддиагональные элементы матрицы $\mathbf{H}^*\mathbf{A}$ не обратятся в ноль. Другими словами, степень несовпадения образов $R(\mathbf{h}_1|\ldots|\mathbf{h}_j)$ и $R(\mathbf{a}_1|\ldots|\mathbf{a}_j)$ в результате переортогонализации не может стать меньшей, чем степень несовпадения образов $R(\mathbf{p}_1|\ldots|\mathbf{p}_j)$ и $R(\mathbf{a}_1|\ldots|\mathbf{a}_j)$. Именно вследствие указанного несовпадения поддиагональные элементы $\tilde{r}_{ij}$ $(i > j)$ матрицы $\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{H}^*\mathbf{A}$ примут значения отличные от нуля.
3) Если же линейные многообразия $R(\mathbf{p}_1|\ldots|\mathbf{p}_j)$ и $R(\mathbf{a}_1|\ldots|\mathbf{a}_j)$, $j = \overline{1, n-1}$ не совпадают, пусть даже матрица $\mathbf{P} = [\mathbf{p}_1|\ldots|\mathbf{p}_n]$ будет ортогональной, переортогонализация (без погрешностей вычислений) приведет к равенствам $\mathbf{H} = \mathbf{P}$, $\mathbf{H}^*\mathbf{A} = \mathbf{P}^*\mathbf{A}$.

Как видим, в первом случае переортогонализация приводит к точному **QR**-разложению, во втором — может привести к частичному повышению точности **QR**-

разложения, третьем — не приводит к изменению результата.

Ответ на первую часть вопроса 1 отрицательный. Действительно, после вычисления матрицы $\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{P}^*\mathbf{A}$, переходя к следующему этапу решения системы уравнений (обратный ход), в матрицу $\tilde{\mathbf{R}}$ вносится дополнительная погрешность, выражаемая формулой $\bar{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{D}$, где

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0 & . & . & . & 0 \\ \tilde{r}_{21} & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ \tilde{r}_{n1} & . & . & \tilde{r}_{n-1} & 0 \end{pmatrix}.$$

Наконец, отвечая на вторую часть вопроса 1, следует учесть, что число обусловленности матрицы $\mathbf{P}\tilde{\mathbf{R}}$ удовлетворяет неравенству

$$c(\mathbf{P}\tilde{\mathbf{R}}) \leqslant c(\mathbf{P})c(\tilde{\mathbf{R}}). \qquad (1.2)$$

Но $c(\mathbf{P}) \approx 1$, вследствие этого

$$c(\tilde{\mathbf{R}}) \approx c(\mathbf{A})(\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A},$$

$$c(\tilde{\mathbf{R}}) \leqslant c(\mathbf{P}^{-1})c(\mathbf{A}) = (c(\mathbf{P}))^{-1}\, c(\mathbf{A})).$$

Поэтому упоминаемый в первой части вопроса 1 фактор не может оказать значимого влияния на точность искомого решения.

Замечание 1. Необходимо отметить, что вместо вычисления матрицы $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}$, следуя схеме метода, вычисляется произведение $\mathbf{P}^*\mathbf{A}$. Но $c(\mathbf{P}^*) = c(\mathbf{P})$, что подтверждает справедливость сделанного выше вывода.

Из сказанного следует, что нужно сосредоточить усилия на поисках средств, препятствующих отклонению линейных многообразий $R\,(\mathbf{p}_1|\ldots|\mathbf{p}_j)$ от $R\,(\mathbf{a}_1|\ldots|\mathbf{a}_j)$, $j = \overline{1, n-1}$.

Замечание 2. В качестве альтернативы переортогонализации можно предложить ортогонализацию столбцов матрицы $\tilde{\mathbf{R}}$. Повторяя эту процедуру, получим последовательность $\{\tilde{\mathbf{R}}^{(i)}\}$, $i = 1,2,\ldots$, сходящуюся к матрице верхней треугольной формы. Однако такой подход к решению поставленной проблемы значительно повышает расходы машинного времени.

К положительным свойствам метода ортогонализации Грама–Шмидта могут быть отнесены его простота и доступность. Однако по указанным выше причинам он стал малоупотребительным в практических вычислениях.

2. Способ построения двумерного ортонормированного базиса с гарантированной точностью

В статье [3] для пары произвольных векторов $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$ из R^n предложен способ построения двумерного ортогонального базиса $\mathbf{z}$, $\mathbf{q}$ с гарантированной точностью. Он применяется в рамках численной реализации преобразования вращения Гивенса плоскости $R\,(\mathbf{p}|\mathbf{q})$. Этот способ обеспечивает контроль за степенью несовпадения плоскостей $R\,(\mathbf{z}|\mathbf{q})$ и $R\,(\mathbf{p}|\mathbf{q})$. Использование указанного способа построения двумерного ортонормированного базиса в процессе ортогонализации Гранма-Шмидта позволяет надеяться на то, что она хотя бы частично будет реабилитирована.

В памяти ЭВМ число x в формате с плавающей точкой представляется парой чисел мантиссой m и целочисленным порядком k, причем $x = \gamma^k m$. Здесь γ — основание системы счисления. Мантисса m удовлетворяет неравенству $\gamma^{-1} \leqslant m < 1$. Введем в рассмотрение функцию

$$f(x) = \gamma^{k+l}, \text{ где } l = \begin{cases} -4, & \text{если } k \text{ четно}, \\ -5, & \text{если } k \text{ нечетно}. \end{cases}$$

Эта функция будет использована в алгоритме построения двумерного ортонормированного базиса плоскости $\Pi = R\,(\mathbf{p}|\mathbf{q})$. Ниже приводится алгоритм построения такого базиса.

2.1. Алгоритм построения двумерного ортонормированного базиса плоскости $\Pi = R\,(\mathbf{p}|\mathbf{q})$

Входными данными служат векторы $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, удовлетворяющие требованию $\|\mathbf{p}\| = \|\mathbf{q}\| = 1$. На выходе получается вектор $\mathbf{z}$, причем $\mathbf{z}\perp\mathbf{q}$, $\|\mathbf{z}\| = 1$.

1) Проверка выполнения условия $|\mathbf{p}^*\mathbf{q}| \leqslant 1 - \widehat{\delta}_1$. Если неравенство выполнено, то $x = 1 - (\mathbf{p}^*, \mathbf{q})^2$ и переход на шаг 4.
2) Присваивание $\alpha = \varepsilon_1$, вычисление $\mathbf{g} = \frac{1}{\alpha}\mathbf{p}$, $\mathbf{h} = \frac{1}{\alpha}\mathbf{q}$, $t = \|\mathbf{g} - \sigma\mathbf{h}\|^2$, $x = \alpha t$. Здесь

$$\sigma = \begin{cases} 1, & \text{если } \mathbf{p}^*\mathbf{q} > 0, \\ -1, & \text{если } \mathbf{p}^*\mathbf{q} < 0. \end{cases}$$

Проверка выполнения условия $x > \delta^2$. Если неравенство выполнено — переход на шаг 4.

3) Сообщение: «векторы и $\mathbf{q}$ колинеарны».
4) $y = f(x)$, $\tau = \mathbf{q}^*\mathbf{p}$.
5) $\alpha = 2/y^{1/2}$, $\beta = -\tau/y^{1/2}$.
6) $u_j = \alpha p_j + \beta q_j$, $j = \overline{1,n}$.
7) $s = \mathbf{u}^*\mathbf{q}$.
8) $v_j = 2u_j - sq_j$, $j = \overline{1,n}$.
9) $s = (\mathbf{v}^*, \mathbf{v})^{1/2}$.
10) $z_j = v_j/s$, $j = \overline{1,n}$.
11) Конец.

В представленном выше алгоритме используются три параметра: α, $\widehat{\delta}_1$ и δ. Здесь $\widehat{\delta}_1$ и δ характеризуют близость векторов $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$. Выбор их значений осуществляется так, чтобы обеспечить контроль за порядком величины $(x)_\mu$, где $(x)_\mu$ — машинный результат вычисления значения величины x, x — аргумент введенной выше функции $f(x)$. Именно благодаря применению функции $f(x)$ обеспечивается вычисление с гарантированной точностью. Кроме того, константа δ должна указывать условия, при которых вычисление второго базисного вектора не может быть осуществлено с гарантированной точностью. Значения величин $\widehat{\delta}_1$ и δ зависят от разрядности сетки используемой ЭВМ. Непростой вопрос о выборе значений параметров α и δ в силу его объемности оставлен за рамками этой статьи. Значение $\widehat{\delta}_1$ установлено в [3] при анализе погрешностей вычислений по описанному выше алгоритму: $\widehat{\delta}_1 = 9\varepsilon_1$, $\varepsilon_1 = \gamma^{-q+1}$, q — количество разрядов, отведенных под мантиссу m. Там же получены оценки погрешностей, возникающих при вычислении вектора z, которые здесь приводятся в виде справки. Следуя формулам алгоритма построения двумерного ортогонального базиса вместо искомого вектора $\mathbf{z}$, получим его машинный вариант $\mathbf{z}_\mu$, причем

$$\mathbf{z}_\mu = \delta_1\mathbf{q} + (1+\delta_2)\mathbf{z} + \delta_3\mathbf{g}, \quad \mathbf{g} = \frac{1}{\|\bar{\mathbf{g}}\|}\bar{\mathbf{g}},$$

$\bar{\mathbf{g}} = \text{Пр}\mathbf{z}_\mu$ — проекция вектора $\mathbf{z}_\mu$ на $N(\mathbf{p}^*|\mathbf{q}^*)$, $|\delta_1| < 15\varepsilon_1$, $\delta_2 < 2\varepsilon_1$,

$$\delta_3 < 3{,}5\varepsilon_1. \tag{2.1}$$

Далее представлен новый вариант процедуры ортогонализации Грама–Шмидта, позволяющий строить двумерный ортонормированный базис с гарантированной точностью.

2.2. Новый вариант процедуры ортогонализация Грама–Шмидта

Шаг 1. $\mathbf{q}_1 = \frac{1}{\|\mathbf{a}_1\|}\mathbf{a}_1$;

Шаг 2. $s = \frac{1}{\|\mathbf{a}_2\|}$, $\mathbf{p} = s\mathbf{a}_2$, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1$, выполнить алгоритм построения двумерного ортонормированного базиса (вычислить вектор $\mathbf{z}$), $\mathbf{q}_2 = \mathbf{z}$;

Шаг j ($j = \overline{3,n}$). $s = \frac{1}{\|\mathbf{a}_j\|}$, $\mathbf{p} = s\mathbf{a}_j$, $\mathbf{g}_j = \sum\limits_{i=1}^{j-1} \mathbf{q}_i^* \boldsymbol{p} \boldsymbol{q}_i$, $s = \frac{1}{\|\mathbf{g}_j\|}$, $\mathbf{q} = s\mathbf{g}_j$, выполнить алгоритм построения двумерного ортонормированного базиса (вычислить вектор $\mathbf{z}$), $\mathbf{q}_j = \mathbf{z}$.

3. Примеры

В этой главе показана справедливость ранее высказанных утверждений и проведено сравнение процедур обычной ортогонализации Грама–Шмидта с применением алгоритма построения двумерного ортонормированного базиса.

Рассмотрим задачу приближения многочлена n-й степени многочленом $(n-1)$-й степени [4]. Решение этой задачи приводит к системе линейных уравнений с плохо обусловленной матрицей $\mathbf{A}$, называемой матрицей Гилберта. Степень $n-1$ примем равной пяти (соответственно, порядок матрицы A равен 6), при этом число обусловленности матрицы $\mathbf{A}$ составило 14951058,6412255 (далее приводится не более четырех знаков после запятой, если это не противоречит целям исследования). В результате ортогонализации Грама–Шмидта приходим к матрице $\mathbf{P}$, у которой $c(\mathbf{P}) = 1{,}0000001233986$. Число обусловленности матрицы $\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{P}^*\mathbf{A}$ составило: $c(\tilde{\mathbf{R}}) = 14951058{,}615548$.

После переортогонализации матрицы получаем матрицу $(c(\mathbf{H}) = 1)$, при этом матрица $\mathbf{H}^*\mathbf{A}$ приняла треугольный вид $(c(\mathbf{R}) = 14951058{,}6412974)$.

Решение системы $\boldsymbol{Rx} = \mathbf{z}$, где $\mathbf{R} = \mathbf{H}^*\mathbf{A}$, $\mathbf{z} = \mathbf{H}^*\mathbf{y}$ с помощью обратного дает нам результат, идентичный приведенному в [4]. Этот пример иллюстрирует первый из рассмотренных случаев соотношений линейных многообразий: $R(\mathbf{p}_1|\dots|\mathbf{p}_j)$ и $R(\mathbf{a}_1|\dots|\mathbf{a}_j)$, $j = \overline{1,n-1}$ совпадают. Следует отметить, что в [4] использована процедура приведения матрицы системы к двухдиагональному виду преобразованиями отражения Хаусхолдера, устойчивость которой была отмечена выше.

Проиллюстрируем второй случай. Введем в матрицу небольшие возмущения (на уровне погрешностей выполнения арифметических операций) и примем ее в качестве матрицы :

$$\delta = 2^{-23} \approx 1{,}921 \times 10^{-7}, \quad c = \delta, \quad d = -\delta,$$

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{h_1}, \quad \mathbf{p}_6 = \mathbf{h}_6 - c\mathbf{h_1}, \quad \mathbf{p}_2 = \mathbf{h}_2 - d\mathbf{h}_6,$$

$$\mathbf{p}_3 = \mathbf{h}_3 - c\mathbf{h}_6, \quad \mathbf{p}_4 = \mathbf{h}_4 - d\mathbf{h}_6, \quad \mathbf{p}_5 = \mathbf{h}_5 - c\mathbf{h}_6.$$

При этом полученная матрица несколько утратила свою ортогональность:

$$c(\mathbf{P}) = 1{,}00000026656011,$$

а у матрицы $\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{P}^*\mathbf{A}$ появились «большие» поддиагональные элементы в последней строке:

$$-1{,}456 \cdot 10^{-7}, \ -8{,}367 \cdot 10^{-8}, \ -6{,}014 \cdot 10^{-8}, \ -4{,}4732 \cdot 10^{-8}, \ -3{,}915 \cdot 10^{-8}.$$

После переортогонализации матрицы получается практически ортогональная матрица $(c(\mathbf{H}) = 1)$, однако полученная матрица

$$\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{H}^*\mathbf{A} \quad (c(\tilde{\mathbf{R}}) = 14951058{,}6149272) \tag{3.1}$$

все равно имеет большие поддиагональные элементы в последней строке:

$$0, \ -1{,}651 \cdot 10^{-8}, \ -1{,}688 \cdot 10^{-8}, \ -1{,}546 \cdot 10^{-8}, \ -1{,}393 \cdot 10^{-8}.$$

Описанный пример показывает, что если образы $R(\mathbf{a}_1|\dots|\mathbf{a}_j)$ и $R(\mathbf{p}_1|\dots|\mathbf{p}_j)$, $j = \overline{1, n-1}$ (возмущенной системы векторов, получаемой при машинной реализации процедуры ортогонализации Грама–Шмидта) не совпадают, то переортогонализация матрицы не приводит матрицу $\mathbf{R}$ к треугольному виду. Вследствие этого, переходя к выполнению обратного хода с матрицей $\bar{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{D}$, в матрицу $\tilde{\mathbf{R}}$ вносится, возможно, неприемлемая погрешность

$$c(\bar{\mathbf{R}}) = 1{,}64 \cdot 10^7, \quad c(\mathbf{A}) = 1{,}50 \cdot 10^7,$$

$$\frac{c(\bar{\mathbf{R}}) - c(\mathbf{A})}{c(\mathbf{A})} = 0{,}094.$$

Иллюстрация третьего случая. Пусть $\mathbf{P} = \mathbf{H}$, где $\mathbf{H}$ — возмущенная матрица, как это описано выше. После переортогонализации матрицы $\mathbf{P}$ получается матрица $\mathbf{H}$, практически совпадающая с $\mathbf{P}$, и матрица $\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{H}^*\mathbf{A}$, совпадающая с матрицей (3.1).

Ниже приводятся результаты второй части поставленой в этом параграфе задачи. При выполнении тестовых испытаний были найдены контрольные величины $c(\mathbf{P})$, $c(\bar{\mathbf{R}})$,

$$\frac{c(\bar{\mathbf{R}}) - c(\mathbf{A})}{c(\mathbf{A})}, \quad \frac{\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|},$$

где $\tilde{\mathbf{x}}$ — вычисленное решение, $\mathbf{x}$ — эталонное решение [4]. Ниже приводятся полученные значения величин в представленном выше порядке:

1) 1,0000001233986, $1{,}64{\cdot}10^7$;
   0,09437760600826, $1{,}625{\cdot}10^{-1}$;
2) 1,00000012750932, $1{,}5{\cdot}10^7$;
   0,002693128268834, $1{,}151{\cdot}10^{-5}$.

4. Обсуждение результатов и выводы

Вывод 1. Исследуемые в работе погрешности не могут быть уменьшены с помощью переортогонализации.

Вывод 2. Применение построения двумерного ортонормированного базиса в рамках процедуры ортогонализации Грама–Шмидта обеспечивает контроль за указанными выше погрешностями, в результате чего элементы матрицы погрешностей $\mathbf{D}$, вносимых в матрицу $\tilde{\mathbf{R}}$ на переходе от этапа вычисления верхней треугольной матрицы $\mathbf{R}$ к этапу обратного хода, в котором используется матрица $\bar{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{D}$, не оказали практического влияния на точность вычисленного решения.

Проведем сравнение трудоемкости этих двух процессов ортогонализации. Нетрудно установить, что оценкой трудоемкости реализации процедуры ортогонализации Грама–Шмидта является величина n^3, соответственно оценка трудоемкости модифицированной процедуры равна $n^3 + 6n^2$. Здесь учтены только операции умножения. Если после первой ортогонализации матрица $\mathbf{Q}$ не ортогональна, применяют переортогонализацию, вследствие чего полная трудоемкость повышается до $2n^3$.

Литература

1. *Икрамов Х. Д.* Несимметрическая проблема собственных значений. М.: Наука, 1991, 240 с.

2. *Беклемишев Д. В.* Дополнительные главы линейной алгебры. М.: Наука,1983, 335 с.
3. *Бабенко В. Н.* Алгоритм изменения индекса произведения отражений Хаусхолдера // Сиб. матем. журнал. Т. 32, № 5, Деп. в ВИНИТИ за № 5350-В90. 59 с.
4. *Годунов С. К.* Решение систем линейных уравнений. Новосибирск: Наука, 1980. 177 с.

References

1. Ikramov H. D. *Nesimmetricheskaya problema sobstvennykh znacheniy* [Non-symmetric eigenvalue problem]. Moscow, Nauka Publ., 1991, 240 p. (In Russian)
2. Beklemishev D. V. *Dopolnitel'nye glavy lineynoy algebry* [Additional chapters of linear algebra]. Moscow, Nauka Publ., 1983, 335 p. (In Russian)
3. Babenko V. N. Algoritm izmeneniya indeksa proizvedeniya otrazheniy Khauskholdera [The algorithm works by changing the index of Householder reflections]. *Sibirskiy matematicheskiy zhurnal* [Siberian Mathematical Journal], vol. 32, no. 5, 59 p. (In Russian)
4. Godunov S. K. *Reshenie sistem lineynykh uravneniy* [Solution of systems of linear equations]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1980, 177 p. (In Russian)

Статья поступила 22 октября 2014 г.