Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 284, 2002 г.

С. А. Харченко, А. Ю. Еремин

МУЛЬТИПЛИКАТИВНАЯ КОРРЕКЦИЯ МАТРИЦЫ НА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ПОДПРОСТРАНСТВ. I: ОСНОВНЫЕ АЛГОРИТМЫ И ТЕОРИЯ В ОБЩЕМ НЕСИММЕТРИЧНОМ НЕЗНАКООПРЕДЕЛЕННОМ СЛУЧАЕ

1. Введение

В контексте разработки эффективных итерационных методов проблемы построения качественных переобуславливателей тесно связана с задачей построения достаточно точных матричных аппроксимаций. Как правило, построение конкретного переобуславливателя может быть интерпретировано в терминах построения матричной аппроксимации в смысле некоторого критерия. Например, можно пытаться строить качественные переобуславливатели исходя из минимизации числа обусловленности, нормы уклонения от единичной матрицы, числа собственных значений вне некоторой области и т.п.

За исключением редких случаев (когда явно учитывается происхождение матрицы коэффициентов, как, например, в многосеточных методах, или когда матрица коэффициентов имеет специальный вид) получить конструктивные оценки получаемой точности матричной аппроксимации не удается, а значит не удается реально оценить результирующее качество переобуславливания. В случае плохо обусловленных линейных систем это как правило приводит к тому, что либо строится относительно "дешевый" переобуславливатель, приводящий к низкой скорости сходимости, либо строится чрезмерно "дорогой" переобуславливатель, обеспечивающий избыточно высокую скорость сходимости. В обоих случаях не удается оптимальным образом сбалансировать затраты на построение переобуславливателя и на выполнение переобусловленных итераций.

Работа выполнена при финансовой поддержке NWO, Нидерланды (грант 047-008-007).

В настоящее время построение в общем случае алгебраической техники, позволяющей строить переобуславливатели гарантированного заданного качества, представляется слишком сложной проблемой. Поэтому в данной работе мы рассматриваем задачу гарантированного улучшения качества переобусловленной матрицы, иными словами, задачу построения более точной матричной аппроксимации уже переобусловленной матрицы. Рассматриваемая задача может быть иначе сформулирована следующим образом. Пусть A – переобусловленная матрица, т.е., мы предполагаем, что элементы A недоступны и мы можем только вычислить результат умножения матрицы A на вектор. Более того, мы предполагаем, что переобусловленная матрица A только незначительно отличается от единичной матрицы, за исключением подпространства размерности $k \ll N$, N — размерность A. Для повторного переобуславливания переобусловленной матрицы A нам требуется построить матрицу K, обладающую следующими свойствами:

(А) действие повторного переобуславливателя K отличается от действия единичной матрицы только на подпространстве малой размерности, т.е., мы не хотим сильно испортить качество первичного переобуславливания;

(Б) K корректирует действие A на подпространстве малой размерности, а также позволяет контролировать в некотором смысле свойства откорректированной матрицы на остальной части пространства. Мы не можем допустить коррекции свойств A на некоторой части пространства за счет неконтролируемого изменения свойств AK на остальной части пространства, если мы хотим добиться гарантированной точности матричной аппроксимации.

Целью данной работы является построение в общем несимметричном незнакоопределенном случае алгебраической техники, которая позволяет как раз конструировать подобные матричные корректоры K и конструктивно оценивать спектральные/сингулярные свойства AK и тем самым предсказывать результирующие свойства сходимости соответствующих итерационных методов. При этом нам необходимо построить конструктивную теорию сходимости предложенных алгоритмов, которая может эффективно использоваться для оптимизации свойств результирующих алгоритмов.

Работа построена следующим образом. В разделе 2 мы вводим в рассмотрение основное понятие характеристики подпространства и его образа относительно некоторой фиксированной матрицы A. В разделе 3 мы вводим понятие оператора коррекции матрицы A на подпространстве $\mathrm{Span}\,(Y)$ вида

$$K = (I_N - YY^T)(I_N - WW^T) + YR^{-1}W, \tag{1.1}$$

где

$$\begin{cases} AY &= WR, \\ Y^TY &= I_k, \\ W^TW &= I_k. \end{cases} \tag{1.2}$$

Мы показываем, что K действительно удовлетворяет требованиям (А) и (Б) и корректирует действие A одновременно на подпространстве $\mathrm{Span}\,(Y)$ и на его образе относительно A – подпространстве $\mathrm{Span}\,(W)$. Мы отдельно рассматриваем корректирующие свойства K для случая матрицы A, знакоопределенной на подпространстве, ортогональном к $\mathrm{Span}\,(W)$, и для случая невырожденной матрицы A общего вида. Иными словами, мы получаем оценки величины $||I_N - AK||$ и других свойств AK в терминах оцениваемых характеристик подпространства $\mathrm{Span}\,(Y)$ относительно матрицы A, введенных в рассмотрение в разделе 2.

При построении K для обеспечения невырожденности оператора коррекции иногда необходимо использовать так называемую технику расщепления подпространств. Это означает, что соотношения (1.2) предварительно преобразуются к соотношениям типа (1.2), но уже с меньшим количеством столбцов в матрицах Y и W, причем столбцы этих матриц являются линейными комбинациями столбцов соответствующих исходных матриц. В этом случае полный оператор коррекции строится последовательно по частям, каждая мультипликативная часть которого есть матрица вида (1.1). Для обоснования техники расщепления подпространств в конце раздела 3 приводятся оценки корректирующих свойств построенной таким образом части оператора коррекции. А именно, оцениваются характеристики некоторого подпространства, вычисляемого через неиспользованное в операторе коррекции подпространство, по отношению к откорректированной матрице AK.

Очевидно, естественным способом порождения подпространства $\mathrm{Span}\,(Y)$, на основе которого строятся соотношения (1.2), является выполнение некоторого числа итераций типа Арнольди с матрицей A. Однако прямое применение корректора K в случае, когда значение k велико, представляется неразумным. Для этого в разделе 4 мы рассматриваем так называемые (ε, α) аппроксимации $K^{(\varepsilon\alpha)}$ оператора коррекции K, которые совместно с техникой расщепления подпространств позволяют значительно сократить память на хранение Y и W и одновременно сократить арифметичецкие затраты при построении $K^{(\varepsilon\alpha)}$ и при умножении $K^{(\varepsilon\alpha)}$ на вектор. Мы также приводим оценки возможного ухудшения корректирующих свойств $K^{(\varepsilon\alpha)}$ в зависимости от параметров ε и α. Раздел 5 содержит некоторые полезные замечания о построении итерационных алгоритмов на основе предложенной теории.

2. Характеристики матрицы и характеристики подпространства

Пусть $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ – некоторая фиксированная невырожденная матрица. Пусть $M_k \subset \mathbb{R}^N$ – подпространство пространства $\mathbb{R}^N$ размерности k. При $k = 0$ будем предполагать, что подпространство M_k пусто, т.е. $M_0 = \emptyset$.

Определение 2.1. *Функцию $f_A : M_k \to \mathbb{R}$, $0 \le k < N$, будем называть характеристикой подпространства $M_k \subset \mathbb{R}^N$ относительно матрицы A (в случае $k = 0$ f_A будем называть характеристикой матрицы A), если она принимает неотрицательные конечные значения для любого подпространства M_k, не совпадающего с $\mathbb{R}^N$.*

При $k > 0$ подпространство $M_k \subset \mathbb{R}^N$ будем задавать, фиксируя некоторый его базис, а именно: пусть $Y_k = [y_1, \ldots, y_k]$, $k > 0$, – матрица, составленная из k линейно независимых векторов, тогда

$$M_k = \mathrm{Span}\,(Y_k). \tag{2.1}$$

В случае $k = 0$ будем также предполагать, что равенство (2.1) имеет место, считая, что в матрице Y_k нет ни одного столбца.

Значение характеристики f_A на подпространстве M_k будем обозначать $f_A(Y_k)$, имея в виду, что между M_k и Y_k имеет место соотношение (2.1).

Замечание 2.1 В определении 2.1 предполагается, что значение характеристики $f_A(Y_k)$ не зависит при $k > 0$ от выбора базиса в подпространстве $M_k = \mathrm{Span}\,(Y_k)$, например, можно выбрать ортонормированный базис. Поэтому в дальнейшем без ограничения общности при $k > 0$ мы будем предполагать, что столбцы матрицы Y_k ортонормированы.

Пример 2.1. Функция

$$f_A(Y_k) = \dim(\mathrm{Span}\,(Y_k))$$

является, очевидно, характеристикой подпространства в смысле Определения 2.1 и принимает значения $0, 1, \ldots, N-1$. Этот пример, однако, не является содержательным, поскольку в данном случае значение характеристики для конкретного подпространства не зависит от матрицы A.

Введем некоторые обозначения, которые будут использоваться в дальнейшем. Пусть

$$A_+ = \frac{A + A^T}{2} \quad \text{и} \quad A_- = \frac{A - A^T}{2} \tag{2.2}$$

обозначают соответственно симметричную и антисимметричную части матрицы A. Обозначим через $Y_k^\perp$ дополнение к Y_k до ортонормированного базиса в $\mathbb{R}^N$ (при $k = 0$ столбцы матрицы $Y_0^\perp$ образуют ортонормированный базис в $\mathbb{R}^N$). Заметим, что в силу условия $k < N$ имеет место неравенство

$$\dim(\mathrm{Span}\,(Y_k^\perp)) > 0. \tag{2.3}$$

Рассмотрим матрицу $A[Y_k, Y_k^\perp]$ и ее QR разложение:

$$A[Y_k, Y_k^\perp] = [W_k, W_k^\perp] \begin{bmatrix} R_k & R_k^{(12)} \\ 0 & R_k^{(22)} \end{bmatrix}, \tag{2.4}$$

где $[W_k, W_k^\perp]$ – ортогональная матрица, $W_k \in \mathbb{R}^{N\times k}$ – матрица с ортонормированными столбцами, матрицы $R_k \in \mathbb{R}^{k\times k}$ и $R_k^{(22)} \in \mathbb{R}^{(N-k)\times(N-k)}$ – верхние треугольные матрицы.

Матрицы $[Y_k, Y_k^\perp]$ и $[W_k, W_k^\perp]$ по построению ортогональные, поэтому из (2.4) также следует равенство

$$A^T[W_k, W_k^\perp] = [Y_k, Y_k^\perp] \begin{bmatrix} R_k^T & 0 \\ (R_k^{(12)})^T & (R_k^{(22)})^T \end{bmatrix}, \tag{2.5}$$

причем для матрицы $W_k^\perp$, по аналогии с (2.3), имеется соотношение

$$\dim(\mathrm{Span}\,(W_k^\perp)) > 0. \tag{2.6}$$

Из соотношений (2.4) и (2.5) следует пара двойственных соотношений

$$AY_k = W_k R_k, \tag{2.7}$$

$$A^T W_k^{\perp} = Y_k^{\perp} (R_k^{(22)})^T. \tag{2.8}$$

Определение 2.2. *Подпространство* $\mathrm{Span}\,(W_k)$ *(соответственно* $\mathrm{Span}\,(Y_k^{\perp})$*) будем называть образом подпространства* $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ *(*$\mathrm{Span}\,(W_k^{\perp})$*) относительно матрицы* A *(*A^T*). Подпространство* $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ *(*$\mathrm{Span}\,(W_k^{\perp})$*) будем называть прообразом подпространства* $\mathrm{Span}\,(W_k)$ *(*$\mathrm{Span}\,(Y_k^{\perp})$*) относительно матрицы* A *(*A^T*).*

Покажем, что определение 2.2 корректно, а именно, докажем, что образ не зависит от выбора базиса в прообразе. Докажем это для соотношения (2.7); для соотношения (2.8) доказательство аналогично.

Утверждение 2.1. *Для невырожденной матрицы* A *при* $k > 0$ *подпространство* $\mathrm{Span}\,(W_k)$ *определено из соотношения* (2.7) *однозначно и не зависит от выбора базиса в подпространстве* $\mathrm{Span}\,(Y_k)$.

Доказательство. Для невырожденной матрицы A матрица R_k из соотношения (2.7) невырождена (см. [1]). Пусть $w \in \mathrm{Span}\,(W_k)$, т.е., $w = W_k z$ для некоторого $z \in \mathbb{R}^k$. Покажем, что для любого базиса в подпространстве $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ вектор w лежит в линейной оболочке образа подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$. Действительно, пусть $U \in \mathbb{R}^{k\times k}$ – некоторая ортогональная матрица и пусть столбцы матрицы $Y_k' = Y_k U$ образуют новый базис подпространства. Имеют место соотношения

$$w = W_k z = AY_k R_k^{-1} z = AY_k U U^T R_k^{-1} z = AY_k' z',$$

где $z' = U^T R_k^{-1} z$. $\square$

Используя соотношения (2.3)–(2.8), введем некоторые величины, которые рассматриваются как функции подпространства, ортогонального к $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ или его образу $\mathrm{Span}\,(W_k)$, по отношению к матрице A или A_-, а именно, обозначим

$$\lambda_A^+(Y_k) = \min_{\substack{w \perp \mathrm{Span}\,(W_k) \\ ||w|| \neq 0}} \frac{|(Aw, w)|}{||w||^2}, \tag{2.9}$$

$$\Lambda_A^+(Y_k) = \max_{\substack{w \perp \mathrm{Span}\,(W_k) \\ ||w|| \neq 0}} \frac{|(Aw, w)|}{||w||^2}, \tag{2.10}$$

$$\sigma_A(Y_k) = \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(Y_k) \\ ||y|| \neq 0}} \frac{||Ay||}{||y||}, \tag{2.11}$$

$$\mu_A(Y_k) = \frac{\lambda_A^+(Y_k)}{\sigma_A(Y_k)}, \tag{2.12}$$

$$\sigma_A^-(Y_k) = ||(W_k^\perp)^T A_- W_k^\perp||, \tag{2.13}$$

$$\varphi_A(Y_k) = \begin{cases} \sqrt{(\sigma_A(Y_k))^2 - (\lambda_A^+(Y_k))^2}, k = 0, \\ ||R_k^{(12)}||, k > 0. \end{cases} \tag{2.14}$$

Поясним прежде всего использованные в определениях (2.9)–(2.14) обозначения. Для этого посмотрим, каким характеристикам матрицы при $k = 0$ соответствуют введенные выше функции.

Учитывая тождество $(Aw, w) = (A_+ w, w)$, имеющее место для любого $w \in \mathbb{R}^N$, легко показать, что при $k = 0$ величина λ_A^+ равна либо 0, либо модулю наименьшего по абсолютной величине собственного значения матрицы A_+, Λ_A^+ равна модулю наибольшего по абсолютной величине собственного значения матрицы A_+, σ_A равна старшему сингулярному значению матрицы A, σ_A^- равна старшему сингулярному значению матрицы A_-; для симметричной положительно определенной матрицы A величина μ_A равна обратному числу обусловленности матрицы A.

Можно ввести в рассмотрение и многие другие величины, характеризующие подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ по отношению к матрице A. Однако в данной работе мы сознательно ограничиваемся только теми величинами, которые потребуются нам в последующем изложении.

Определение 2.2. *Величины* (2.9)–(2.14) *являются характеристиками подпространства* $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ *по отношению к матрице* A *в смысле Определения* 2.1.

Доказательство. В силу условий (2.3) и (2.6) множества ненулевых векторов, ортогональных к $\operatorname{Span}(Y_k)$ и $\operatorname{Span}(W_k)$ соответственно, непусты. Далее, функции $\dfrac{|(Aw,w)|}{\|w\|^2}$ и $\dfrac{\|Ay\|}{\|y\|}$ однородны, функции $|(Aw,w)|$ и $\|Ay\|$ непрерывны и неотрицательны, следовательно величины $\lambda_A^+(Y_k)$, $\Lambda_A^+(Y_k)$ и $\sigma_A(Y_k)$ достигаются на соответствующих векторах, а потому эти величины определены, неотрицательны и конечны для любого подпространства $\operatorname{Span}(Y_k)$, не совпадающего с $\mathbb{R}^N$. Значение функций $\lambda_A^+(Y_k)$, $\Lambda_A^+(Y_k)$ и $\sigma_A(Y_k)$ не зависит от выбора базиса подпространства $\operatorname{Span}(Y_k)$, поскольку в силу Утверждения 2.1 подпространство $\operatorname{Span}(W_k)$ из соотношения (2.7) определено однозначно и не зависит от выбора базиса в $\operatorname{Span}(Y_k)$, а также поскольку условие ортогональности вектора к подпространству не зависит от выбора базиса в этом подпространстве. Далее, $\sigma_A(Y_k) \neq 0$, поскольку в противном случае нашелся бы вектор y, $y \neq 0$, такой, что $Ay = 0$, но это противоречит условию невырожденности матрицы A. Тем самым доказано, что функция $\mu_A(Y_k)$ также определена, неотрицательна, конечна и ее значение не зависит от выбора базиса в подпространстве $\operatorname{Span}(Y_k)$.

Функция $\sigma_A^-(Y_k)$ определена, конечна и неотрицательна. Ее значение не зависит от выбора базиса в $\operatorname{Span}(Y_k)$, поскольку подпространства $\operatorname{Span}(W_k)$ и $\operatorname{Span}(W_k^\perp)$ определены однозначно, а значение нормы не зависит от выбора ортогонального множителя.

Рассмотрим функцию $\varphi_A(Y_k)$. При $k = 0$ в силу неравенства

$$\lambda_A^+ = \min_{\|w\| \neq 0} \frac{|(Aw,w)|}{\|w\|^2} \leq \|A\| = \sigma_A$$

получаем, что величина $\varphi_A(Y_k)$ определена, неотрицательна и конечна. При $k > 0$ она также, очевидно, определена, неотрицательна и конечна. Покажем, что значение $\varphi_A(Y_k)$ при $k > 0$ не зависит от выбора базиса в подпространстве $\operatorname{Span}(Y_k)$. Действительно, пусть $Y_k' = Y_k U_k$, $Y_k'^\perp = Y_k^\perp V_{N-k}$, где $U_k \in \mathbb{R}^{k\times k}$, $V_{N-k} \in \mathbb{R}^{(N-k)\times(N-k)}$ и матрицы U_k и V_{N-k} ортогональны. Для матриц $\tilde{R}_k = R_k U_k$ и $\tilde{R}_k^{(22)} = R_k^{(22)} V_{N-k}$ построим их QR разложение в виде

$$\begin{aligned} \tilde{R}_k &= Q_k R_k', \\ \tilde{R}_k^{(22)} &= Q_{N-k}^{(22)} R_k^{(22)'}, \end{aligned}$$

где Q_k и $Q^{(22)}_{N-k}$ – ортогональные матрицы, а матрицы R'_k и $R^{(22)'}_k$ – верхние треугольные. Тогда

$$A[Y'_k, Y'^{\perp}_k] = [W_k, W_k^{\perp}] \begin{bmatrix} R_k & R_k^{(12)} \\ 0 & R_k^{(22)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_k & 0 \\ 0 & V_{N-k} \end{bmatrix} =$$

$$= [W_k Q_k, W_k^{\perp} Q^{(22)}_{N-k}] \begin{bmatrix} R'_k & Q_k^T R_k^{(12)} V_{N-k} \\ 0 & R_k^{(22)'} \end{bmatrix}$$

является QR разложением матрицы $A[Y'_k, Y'^{\perp}_k]$. Теперь

$$\varphi_A(Y'_k) = \|R_k^{(12)'}\| = \|Q_k^T R_k^{(12)} V_{N-k}\| = \|R_k^{(12)}\| = \varphi_A(Y_k).$$

□

Определение 2.3. *Характеристику подпространства f_A будем называть неубывающей (невозрастающей), если для любых двух подпространств* $\mathrm{Span}\,(Y'_k)$ *и* $\mathrm{Span}\,(Y''_l)$ *таких, что* $\mathrm{Span}\,(Y'_k) \subset \mathrm{Span}\,(Y''_l)$, *имеет место неравенство* $f_A(Y'_k) \leq f_A(Y''_l)$ $(f_A(Y'_k) \geq f_A(Y''_l))$.

Утверждение 2.3. *Функции* $\lambda^+_A(Y_k)$ *и* $\mu_A(Y_k)$ *являются неубывающими характеристиками подпространства. Функции* $\Lambda^+_A(Y_k)$, $\sigma_A(Y_k)$ *и* $\sigma^-_A(Y_k)$ *являются невозрастающими характеристиками подпространства.*

Доказательство. Из включения $\mathrm{Span}\,(Y'_k) \subset \mathrm{Span}\,(Y''_l)$ следует включение $\mathrm{Span}\,((Y'_k)^{\perp}) \supset \mathrm{Span}\,((Y''_l)^{\perp})$. Далее, из включения $\mathrm{Span}\,(Y'_k) \subset \mathrm{Span}\,(Y''_l)$ следует включение $\mathrm{Span}\,(W'_k) \subset \mathrm{Span}\,(W''_l)$ для образов подпространств относительно матрицы A. Но тогда $\mathrm{Span}\,((W'_k)^{\perp}) \supset \mathrm{Span}\,((W''_l)^{\perp})$, поэтому

$$(W''_l)^{\perp} = (W'_k)^{\perp} U$$

для некоторой матрицы U с ортонормированными столбцами. Поэтому

$$\begin{aligned}\sigma^-_A(Y''_l) &= ||((W''_l)^{\perp})^T A_-((W''_l)^{\perp})^T|| = \\ &= ||U^T((W'_k)^{\perp})^T A_-(W'_k)^{\perp} U|| \leq \\ &\leq ||((W'_k)^{\perp})^T A_-(W'_k)^{\perp}|| = \sigma^-_A(Y'_k).\end{aligned}$$

Монотонность характеристик $\lambda^+_A(Y_k)$, $\Lambda^+_A(Y_k)$ и $\sigma_A(Y_k)$ следует из их определений и из определений $\min$ и $\max$ по заданному непустому множеству. Из свойств монотонности характеристик $\lambda_A^+(Y_k)$ и $\sigma_A(Y_k)$ теперь следует, что характеристика $\mu_A(Y_k)$ является неубывающей характеристикой подпространства. $\square$

Как показывает следующий пример, характеристика подпространства не обязательно обладает свойством монотонности.

Пример 2.2. Покажем, что при $k \neq 0$ характеристика $\varphi_A(Y_k)$ не является монотонной. Пусть $N = 4$,

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 \\ & 1 & 1 & 0 \\ & & 1 & 3 \\ \mathrm{O} & & & 1 \end{bmatrix}, \qquad Y_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$Y_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad Y_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Тогда, как легко проверить, имеют место равенства

$$\varphi_A(Y_1) = 2, \quad \varphi_A(Y_2) = 1, \quad \varphi_A(Y_3) = 3.$$

В то же время имеют место включения

$$\mathrm{Span}\,(Y_1) \subset \mathrm{Span}\,(Y_2) \subset \mathrm{Span}\,(Y_3).$$

Несмотря на то, что характеристика $\varphi_A(Y_k)$ не является монотонной, ее значение на конкретном подпространстве можно оценить, используя невозрастающую характеристику подпространства. Точнее, имеет место следующее утверждение.

Утверждение 2.4. *Имеют место неравенства*

$$0 \leq \varphi_A(Y_k) \leq \sqrt{(\sigma_A(Y_k))^2 - (\lambda_A^+(Y_k))^2} \equiv \bar{\varphi}_A(Y_k), \tag{2.15}$$

где $\bar{\varphi}_A(Y_k)$ – невозрастающая характеристика подпространства.

Доказательство. Из определения $\sigma_A(Y_k)$ и равенства (2.4) следует соотношение

$$\sigma_A(Y_k) = \left\| \begin{bmatrix} R_k^{(12)} \\ R_k^{(22)} \end{bmatrix} \right\|. \tag{2.16}$$

С другой стороны, в силу тождества (2.8) для $\lambda_A^+(Y_k)$ имеет место оценка

$$
\begin{aligned}
\lambda_A^+(Y_k) &= \min_{\substack{w \perp \mathrm{Span}\,(W_k)\\ ||w|| \neq 0}} \frac{|(Aw, w)|}{||w||^2} = \\
&= \min_{||z|| \neq 0} \frac{|(AW_k^\perp z, W_k^\perp z)|}{||W_k^\perp z||^2} = \\
&= \min_{||z|| \neq 0} \frac{|(W_k^\perp z, A^T W_k^\perp z)|}{||z||^2} = \\
&= \min_{||z|| \neq 0} \frac{|(W_k^\perp z, Y_k^\perp (R_k^{(22)})^T z)|}{||z||^2} \leq ||R_k^{(22)}||.
\end{aligned}
\tag{2.17}
$$

Объединяя (2.16) и (2.17), получаем неравенство

$$\lambda_A^+(Y_k) \leq \sigma_A(Y_k) \tag{2.18}$$

поэтому функция $\bar{\varphi}_A(Y_k)$ определена, неотрицательна, конечна и не зависит от выбора базиса в подпространстве $\mathrm{Span}\,(Y_k)$, т.е., $\bar{\varphi}_A(Y_k)$ является характеристикой подпространства. Свойства монотонности характеристики $\bar{\varphi}_A(Y_k)$ очевидны. Покажем, что имеет место неравенство

$$\varphi_A(Y_k) \leq \bar{\varphi}_A(Y_k). \tag{2.19}$$

При $k = 0$ это неравенство переходит в равенство в силу определения (2.14) функции $\varphi_A(Y_k)$. Рассмотрим случай $k > 0$. В силу (2.17) имеет место неравенство

$$
\begin{aligned}
\lambda_A^+(Y_k) = \min_{||z|| \neq 0} \frac{|(W_k^\perp z, Y_k^\perp (R_k^{(22)})^T z)|}{||z||^2} \leq \\
\leq \min_{||z|| \neq 0} \frac{||(R_k^{(22)})^T z||}{||z||} = \sigma_{\min}(R_k^{(22)}),
\end{aligned}
$$

т.е.,

$$\lambda_A^+(Y_k) \leq \sigma_{\min}(R_k^{(22)}). \tag{2.20}$$

Пусть теперь $z \in \mathbb{R}^{N-k}$ – произвольный вектор такой, что $||z|| \neq 0$.

Имеют место соотношения:

$$(\sigma_A(Y_k))^2 \geq \frac{\left\| \begin{bmatrix} R_k^{(12)} \\ R_k^{(22)} \end{bmatrix} z \right\|^2}{||z||^2} = \frac{||R_k^{(12)}z||^2 + ||R_k^{(22)}z||^2}{||z||^2} \geq$$

$$\geq \frac{||R_k^{(12)}z||^2}{||z||^2} + \sigma_{\min}^2(R_k^{(22)}) \geq \frac{||R_k^{(12)}z||^2}{||z||^2} + (\lambda_A^+(Y_k))^2,$$

т.е.

$$\frac{||R_k^{(12)}z||}{||z||} \leq \sqrt{(\sigma_A(Y_k))^2 - (\lambda_A^+(Y_k))^2} = \bar{\varphi}_A(Y_k). \tag{2.21}$$

Поскольку в неравенстве (2.21) вектор z, $||z|| \neq 0$, произволен, получаем

$$\varphi_A(Y_k) = ||R_k^{(12)}|| = \max_{||z|| \neq 0} \frac{||R_k^{(12)}z||}{||z||} \leq \bar{\varphi}_A(Y_k).$$

□

3. Оператор коррекции матрицы на подпространстве и его свойства

Изложение раздела построено следующим образом. В пункте 3.1 вводится определение оператора коррекции матрицы на подпространстве и рассматриваются основные формулы и обозначения, связанные с этим определением. В пункте 3.2 в терминах введенных обозначений приводятся некоторые вспомогательные утверждения. В пункте 3.3 описываются необходимые и достаточные условия, при выполнении которых оператор коррекции является невырожденной матрицей. В пункте 3.4 рассматриваются корректирующие свойства оператора коррекции в частном случае $\mu_A(Y_k) > 0$. В пункте 3.5 описывается способ построения невырожденного оператора коррекции в общем случае с использованием техники расщепления подпространств и рассматриваются его корректирующие свойства.

3.1. Определение оператора коррекции.

Предположим, что для невырожденной возможно незнакоопределенной матрицы $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ известна матрица с ортонормированными столбцами $Y_k \in \mathbb{R}^{N \times k}$, $0 < k < N$, и матрицы $W_k \in$

$\mathbb{R}N \times k$ и $R_k \in \mathbb{R}^{k\times k}$ такие, что имеют место соотношения

$$\begin{cases} AY_k = W_k R_k, \\ Y_k^T Y_k = I_k, \\ W_k^T W_k = I_k. \end{cases} \tag{3.1}$$

Определение 3.1. *Если выполнены соотношения* (3.1), *то при* $d \neq 0$ *квадратную* $N \times N$ *матрицу*

$$K_d = (I_N - Y_k Y_k^T)(I_N - W_k W_k^T) + dY_k R_k^{-1} W_k^T \tag{3.2}$$

будем называть оператором коррекции матрицы A *на подпространстве* $\mathrm{Span}\,(Y_k)$.

Замечание 3.1. Такое название оператора K_d при $d \neq 0$ объясняется тем, что, как будет показано ниже, оператор K_d при некоторых дополнительных условиях невырожден, и при этом корректирует действие матрицы A на подпространстве $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ и его образе, а на подпространствах, ортогональных $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ и его образу, корректирующие свойства оператора K_d можно оценить, если известны оценки характеристик (2.9)–(2.14) подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ по отношению к матрице A.

Замечание 3.2. Определение оператора коррекции также можно записать в следующем виде, эквивалентном (3.2):

$$K_d = I_N + [Y_k, W_k] \begin{bmatrix} -I_k & dR_k^{-1} + Y_k^T W_k \\ 0 & -I_k \end{bmatrix} [Y_k, W_k]^T, \tag{3.3}$$

Пусть $Y_k^\perp$ и $W_k^\perp$ – дополнения к Y_k и W_k соответственно до ортонормированного базиса в $\mathbb{R}^N$. Из ортогональности матриц $[Y_k, Y_k^\perp]$ и $[W_k, W_k^\perp]$ следуют тождества

$$I_N - Y_k Y_k^T = Y_k^\perp (Y_k^\perp)^T \quad \text{и} \quad I_N - W_k W_k^T = W_k^\perp (W_k^\perp)^T,$$

поэтому оператор коррекции можно также записать в виде

$$K_d = Y_k^\perp (Y_k^\perp)^T W_k^\perp (W_k^\perp)^T + dY_k R_k^{-1} W_k^T. \tag{3.4}$$

Равенство (3.4) можно теперь переписать в виде

$$K_d = [Y_k, Y_k^\perp] \begin{bmatrix} dR_k^{-1} & 0 \\ 0 & (Y_k^\perp)^T W_k^\perp \end{bmatrix} [W_k, W_k^\perp]^T. \tag{3.5}$$

Используя равенства (3.1), (2.4) и (3.5), легко получить следующее выражение для откорректированной матрицы AK_d:

$$AK_d = dW_k W_k^T + W_k^{\perp} T (W_k^{\perp})^T + W_k S (W_k^{\perp})^T, \tag{3.6}$$

где использованы обозначения

$$T = R_k^{(22)} (Y_k^{\perp})^T W_k^{\perp}, \tag{3.7}$$

$$S = R_k^{(12)} (Y_k^{\perp})^T W_k^{\perp}. \tag{3.8}$$

3.2. Вспомогательные утверждения.

Обозначим через

$$T_+ = \frac{T + T^T}{2}, \qquad T_- = \frac{T - T^T}{2} \tag{3.9}$$

соответственно симметричную и антисимметричную части квадратной матрицы T. Тогда из равенства (2.8) получим

$$T^T = (W_k^{\perp})^T A^T W_k^{\perp}, \tag{3.10}$$

поэтому

$$\begin{cases} T_+ = (W_k^{\perp})^T A_+ W_k^{\perp}, \\ T_- = (W_k^{\perp})^T A_- W_k^{\perp}. \end{cases} \tag{3.11}$$

Утверждение 3.1. *Имеют место равенства*

$$\begin{cases} W_k^T A K_d W_k = dI_k, \\ (W_k^{\perp})^T A K_d W_k^{\perp} = (W_k^{\perp})^T A W_k^{\perp}. \end{cases} \tag{3.12}$$

Доказательство. Первое из равенств (3.12) легко следует из (3.6), второе – из равенств (3.6) и (3.10). $\square$

Замечание 3.3. Равенства (3.12) уже дают некоторое представление о корректирующих свойствах оператора коррекции. А именно, на подпространстве $\mathrm{Span}\,(W_k)$ матрица AK_d является скалярной матрицей, а на подпространстве $\mathrm{Span}\,(W_k^{\perp})$ матрица AK_d совпадает с матрицей A. Однако утверждение 3.1 не описывает глобальных свойств оператора коррекции.

Теорема 3.1. [(о $C-S$ разложении), [3]]. *Если матрица*

$$Q = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix}$$

ортогональна, $Q \in \mathbb{R}^{N\times N}$, $Q_{11} \in \mathbb{R}^{k\times k}$, $Q_{22} \in \mathbb{R}^{(N-k)\times(N-k)}$, *причем* $k \le N-k$, *то существуют ортогональные матрицы* $U_1, V_1 \in \mathbb{R}^{k\times k}$ *и ортогональные матрицы* $U_2, V_2 \in \mathbb{R}^{(N-k)\times(N-k)}$ *такие, что*

$$\begin{bmatrix} U_1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 & 0 \\ 0 & V_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C & S & 0 \\ -S & C & 0 \\ 0 & 0 & I_{N-2k} \end{bmatrix},$$

где

$$C = \operatorname{diag}(c_1, \dots, c_k) \in \mathbb{R}^{k\times k}, \quad c_i = \cos(\Theta_i),$$
$$S = \operatorname{diag}(s_1, \dots, s_k) \in \mathbb{R}^{k\times k}, \quad s_i = \sin(\Theta_i)$$

и

$$0 \le \Theta_1 \le \dots \le \Theta_k \le \frac{\pi}{2}.$$

Следствие 3.1. *Если матрицы* $[Y_k, Y_k^\perp]$ *и* $[W_k, W_k^\perp]$ *ортогональны и* $0 < k < N$, *то имеет место равенство*

$$\sigma_{\min}(Y_k^T W_k) = \sigma_{\min}((Y_k^\perp)^T W_k^\perp). \tag{3.13}$$

Доказательство. $Q = [Y_k, Y_k^\perp]^T [W_k, W_k^\perp]$ является по построению ортогональной матрицей, причем

$$Q = \begin{bmatrix} Y_k^T W_k & Y_k^T W_k^\perp \\ (Y_k^\perp)^T W_k & (Y_k^\perp)^T W_k^\perp \end{bmatrix}.$$

Если $k \le N-k$, то применив к ней утверждение теоремы 3.1, получаем (3.13). Если $k \ge N-k$, то положив $k' = N-k$, $Y_k' = Y_k^\perp$, $(Y_k')^\perp = Y_k$, $W_k' = W_k^\perp$, $(W_k')^\perp = W_k$ и применив теорему 3.1 к матрице

$$Q' = [Y_k', (Y_k')^\perp]^T \, [W_k', (W_k')^\perp]$$

снова получим (3.13). $\square$

В дальнейшем изложении для краткости будем использовать следующие обозначения

$$\begin{aligned} &\lambda^+ = \lambda_A^+(Y_k), && \Lambda^+ = \Lambda_A^+(Y_k), \\ &\sigma = \sigma_A(Y_k), && \mu = \mu_A^+(Y_k), \\ &\sigma^- = \sigma_A^-(Y_k), && \varphi = \varphi_A(Y_k). \end{aligned} \tag{3.14}$$

Утверждение 3.2. *Имеют место неравенства*

$$0 \leq \lambda^+ \leq \frac{|(T_+ z, z)|}{||z||^2} \leq \Lambda^+, \quad \forall z \in \mathbb{R}^{N-k}, \quad ||z|| \neq 0, \tag{3.15}$$

$$||T_-|| = \sigma^-, \tag{3.16}$$

$$||S|| \leq \varphi, \tag{3.17}$$

$$\sigma_{\min}(Y_k^T W_k) \geq \mu. \tag{3.18}$$

Доказательство. Равенство (3.16) следует из соотношения

$$T_- = (W_k^\perp)^T A_- W_k^\perp.$$

Неравенство (3.17) легко следует из определений S и φ.

Чтобы доказать неравенства (3.15), рассмотрим тождество $(Aw, w) \equiv (A_+ w, w)$, верное для всех $w \in \mathbb{R}^N$. Положив $w = W_k^\perp z$, получаем при $||z|| \neq 0$

$$\frac{(A_+ w, w)}{||w||^2} = \frac{(A_+ W_k^\perp z, W_k^\perp z)}{||z||^2} = \frac{(T_+ z, z)}{||z||^2}. \tag{3.19}$$

Но по определению величин λ^+ и Λ^+ имеют место неравенства

$$0 \leq \lambda^+ \leq \frac{|(A_+ w, w)|}{||w||^2} \leq \Lambda^+, \quad \forall w \in \mathbb{R}^N, \quad w \perp W_k, \quad ||w|| \neq 0,$$

откуда в силу (3.19) следуют неравенства (3.15).

Для любого вектора z, $z \in \mathbb{R}^{N-k}$, $||z|| \neq 0$, имеет место неравенство

$$\frac{|(W_k^\perp z, Y_k^\perp (R_k^{(22)})^T z)|}{||z||^2} = \frac{|((Y_k^\perp)^T W_k^\perp z, (R_k^{(22)})^T z)|}{||z||^2} \leq$$

$$\leq ||R_k^{(22)}|| \frac{||(Y_k^\perp)^T W_k^\perp z||}{||z||}. \tag{3.20}$$

Беря минимум по всем z, $||z|| \neq 0$, в левой и правой частях (3.20), получаем неравенство

$$0 \le \lambda^+ = \lambda_A^+(Y_k) = \min_{\substack{w \perp \mathrm{Span}\,(W_k) \\ ||w|| \neq 0}} \frac{|(Aw, w)|}{||w||^2} = \min_{||z|| \neq 0} \frac{|(AW_k^\perp z, W_k^\perp z)|}{||z||^2} =$$
$$= \min_{||z|| \neq 0} \frac{|(W_k^\perp z, Y_k^\perp (R_k^{(22)})^T z)|}{||z||^2} \le$$
$$\le ||R_k^{(22)}|| \sigma_{\min}((Y_k^\perp)^T W_k^\perp),$$

откуда в силу следствия 3.1 получаем оценку

$$\sigma_{\min}(Y_k^T W_k) \ge \frac{\lambda^+}{||R_k^{(22)}||}. \tag{3.21}$$

Как и в (2.16), имеет место равенство

$$\sigma = \sigma_A(Y_k) = \left\| \begin{bmatrix} R_k^{(12)} \\ R_k^{(22)} \end{bmatrix} \right\|,$$

откуда из неравенства (3.21) получаем оценку

$$\sigma_{\min}(Y_k^T W_k) \ge \frac{\lambda^+}{\sigma} = \mu.$$

□

Замечание 3.4. Матрица T_+ симметричная, поэтому неравенства (3.15) утверждения 3.2 можно рассматривать как утверждение о том, что спектр матрицы T_+ содержится в объединении отрезков $[-\Lambda^+, -\lambda^+] \cup [\lambda^+, \Lambda^+]$.

Утверждение 3.3. *Пусть N_-, N_0 и N_+ соответственно количества отрицательных, нулевых и положительных собственных значений матрицы A_+, $N = N_- + N_0 + N_+$. Тогда, если имеет место неравенство*

$$\lambda_A^+(Y_k) > 0,$$

то

$$k \ge \min(N_-, N_+) + N_0. \tag{3.22}$$

Доказательство. Пусть X_-, X_0 и X_+ – матрицы с ортонормированными столбцами, составленными из собственных векторов матрицы A_+, отвечающих соответственно отрицательным, нулевым и положительным собственным значениям. Пусть

$$k < N_- + N_0. \tag{3.23}$$

Если число k удовлетворяет неравенству (3.23), то матрица

$$Z = W_k^T[X_-, X_0], \qquad Z \in \mathbb{R}^{k\times(N_-+N_0)} \tag{3.24}$$

является прямоугольной матрицей, у которой число строк строго меньше числа столбцов. Для такой матрицы всегда существует ненулевой вектор $z \in \mathbb{R}^{(N_-+N_0)}$ такой, что

$$Zz = 0. \tag{3.25}$$

Обозначим $w = [X_-, X_0]z$, $w \in \mathbb{R}^N$, $||w|| \neq 0$; тогда равенство (3.25) можно записать в виде

$$w \perp \mathrm{Span}\,(W_k).$$

Кроме того, очевидно, для вектора w по построению имеет место неравенство

$$(Aw, w) = (A_+w, w) \leq 0.$$

Получили, что если имеет место неравенство (3.23), то для любой матрицы W_k с k ортонормированными столбцами существует ненулевой вектор $w \in \mathbb{R}^N$, $w \perp \mathrm{Span}\,(W_k)$, такой, что $(Aw, w) \leq 0$. Аналогично, если имеет место неравенство

$$k < N_+ + N_0,$$

то для любой матрицы W_k с k ортонормированными столбцами существует ненулевой вектор $w \in \mathbb{R}^N$, $w \perp \mathrm{Span}\,(W_k)$, такой, что $(Aw, w) \geq 0$. Поэтому, чтобы гарантировать знакоопределенность квадратичной формы (Aw, w) для всех ненулевых $w \perp \mathrm{Span}\,(W_k)$, необходимо, чтобы k удовлетворял неравенству (3.22). □

Замечание 3.5. Несмотря на то, что матрица A по предположению невырождена, ее симметричная часть, очевидно, может иметь нулевые собственные значения или даже быть нулевой матрицей, например,

$$N = 2, \qquad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad A_+ = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Замечание 3.6. Условие (3.22) является необходимым, но не достаточным условием для знакоопределенности квадратичной формы (Aw, w) на подпространстве, ортогональном $\operatorname{Span}(W_k)$. Тем не менее, оценка (3.22) является точной оценкой, она достигается в случае $N_- \le N_+$, например, для матрицы $W_k = [X_-, X_0]$.

3.3. Невырожденность оператора коррекции.

Утверждение 3.4. *Если имеет место неравенство*

$$\sigma_{\min}(Y_k^T W_k) > 0, \tag{3.26}$$

то для любого $d \neq 0$

$$\sigma_{\min}(K_d) = \min\left\{ \frac{|\,d\,|}{\sigma_{\max}(R_k)}, \sigma_{\min}(Y_k^T W_k) \right\} > 0, \tag{3.27}$$

т.е. оператор коррекции является невырожденной матрицей, а обратный оператор K_d^{-1} имеет вид

$$K_d^{-1} = I_N + [Y_k, W_k] \begin{bmatrix} 0 & -(Y_k^T W_k)^{-T} \\ d^{-1} R_k & 0 \end{bmatrix} [Y_k, W_k]^T. \tag{3.28}$$

Доказательство. Равенство (3.27) следует из соотношения (3.5) и из следствия 3.1.

Чтобы доказать равенство (3.28), используем для K_d выражение (3.3). Составим произведение матрицы K_d из (3.3) на матрицу из правой части (3.28). Учитывая равенство

$$[Y_k, W_k]^T [Y_k, W_k] = \begin{bmatrix} I_k & \Omega \\ \Omega^T & I_k \end{bmatrix},$$

где для краткости использовано обозначение $\Omega = Y_k^T W_k$, в результате умножения получим матрицу вида

$$I_N + [Y_k, W_k] Z [Y_k, W_k]^T,$$

где для матрицы $Z \in \mathbb{R}^{2k \times 2k}$ по построению имеют место равенства

$$Z = \begin{bmatrix} -I_k & dR_k^{-1} + \Omega \\ 0 & -I_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -\Omega^{-T} \\ d^{-1} R_k & 0 \end{bmatrix} +$$
$$+ \begin{bmatrix} -I_k & dR_k^{-1} + \Omega \\ 0 & -I_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_k & \Omega \\ \Omega^T & I_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -\Omega^{-T} \\ d^{-1} R_k & 0 \end{bmatrix} \equiv 0.$$

□

Равенство (3.27) утверждения 3.4 показывает, что условие (3.26) является необходимым и достаточным условием невырожденности оператора коррекции. Учитывая неравенство (3.18) утверждения 3.2, получаем следующий достаточный критерий невырожденности оператора коррекции.

Следствие 3.2. *Если имеет место неравенство*

$$\mu = \mu_A(Y_k) > 0,$$

то оператор коррекции K_d *из* (3.2) *невырожден.*

В последующем изложении, имея в виду интересующие нас приложения, мы будем рассматривать только невырожденные операторы коррекции. По этой причине естественно ввести следующее определение.

Определение 3.2. *Для заданного положительного числа* μ_{thr} *подпространство* $\operatorname{Span}(Y_k)$ *будем называть удовлетворяющим условию аппроксимации, если имеет место неравенство*

$$\mu_A(Y_k) \geq \mu_{thr} > 0. \tag{3.29}$$

Учитывая, что условие $\mu > 0$ является достаточным условием невырожденности оператора коррекции, подробно рассмотрим корректирующие свойства оператора коррекции прежде всего в случае, когда выполнено условие аппроксимации.

3.4. Оператор коррекции при $\mu \geq \mu_{thr} > 0$.

Итак, пусть для матрицы с k ортонормированными столбцами Y_k имеют место соотношения (3.1) и соотношение $\mu = \mu_A(Y_k) \geq \mu_{thr} > 0$. Тогда из следствия 3.2 получаем, что при $d \neq 0$ можно рассматривать невырожденный оператор коррекции из определения 3.1. Более того, если величина μ_{thr} не очень близка к нулю, например, $\mu_{thr} \simeq 0.1$, и если старшее сингулярное значение матрицы R_k не очень велико, то из утверждения 3.4 получаем, что в этом случае оператор коррекции далек от вырождения.

По определению характеристики μ_A условие $\mu_A(Y_k) > 0$ означает, что имеет место неравенство

$$\lambda^+ = \lambda_A^+(Y_k) > 0. \tag{3.30}$$

Из определения характеристики $\lambda_A^+(Y_k)$ легко следует, что для всех $w \in \mathbb{R}^N$ таких, что $w \perp \mathrm{Span}\,(W_k)$, $||w|| \neq 0$, квадратичная форма (Aw, w) знакоопределена. Имея в виду интересующие нас приложения, будем в последующем изложении предполагать для определенности, что если имеет место (3.30), то для всех $w \in \mathbb{R}^N$, $w \perp \mathrm{Span}\,(W_k)$, $||w|| \neq 0$, квадратичная форма (Aw, w) положительно определена. По этим же причинам в последующем изложении ограничимся только положительными значениями параметра d оператора коррекции.

Корректирующие свойства K_d в терминах свойств откорректированной матрицы AK_d при $\mu > 0$ сформулированы в следующей теореме.

Теорема 3.2. *При $d > 0$ и $\mu > 0$ имеют место неравенства*

$$||AK_d - dI_N|| \leq \max\{|\Lambda^+ - d|, |d - \lambda^+|\} + \sigma^- + \varphi, \tag{3.31}$$

$$\begin{cases} \lambda^+_{AK_d} \geq \min(d, \lambda^+) - \dfrac{1}{2}\varphi, \\ \Lambda^+_{AK_d} \leq \max(d, \Lambda^+) + \dfrac{1}{2}\varphi, \\ \sigma_{AK_d} \leq \sqrt{\sigma^2 + d^2}, \\ \mu_{AK_d} \geq \dfrac{\max\left\{\min(d, \lambda^+) - \dfrac{1}{2}\varphi, 0\right\}}{\sqrt{\sigma^2 + d^2}}, \\ \sigma^-_{AK_d} \leq \sigma^- + \varphi, \end{cases} \tag{3.32}$$

где в неравенствах (3.32) рассматриваются соответствующие характеристики матрицы AK_d.

Доказательство. Докажем неравенство (3.31). Имеем неравенство

$$\begin{aligned} ||AK_d - dI_N|| &= ||(AK_d - dI_N)[W_k, W_k^\perp]|| \leq \\ &\leq ||(AK_d - dI_N)W_k|| + ||(AK_d - dI_N)W_k^\perp||. \end{aligned}$$

Но

$$(AK_d - dI_N)W_k = dAY_kR_k^{-1} - dW_k = 0,$$

с другой стороны, из равенства (3.6) следует соотношение

$$(AK_d - dI_N)W_k^\perp = W_kS + W_k^\perp(T - dI_{N-k}),$$

поэтому
$$||AK_d - dI_N|| \leq ||S|| + ||T - dI_{N-k}||. \tag{3.33}$$

Имеет место тождество
$$T = T_+ + T_-,$$
поэтому
$$||T - dI_{N-k}|| \leq ||T_+ - dI_{N-k}|| + ||T_-||.$$

Неравенство (3.31) теперь легко следует из оценок утверждения 3.2 и из того факта, что спектр симметричной матрицы T_+ по предположению находится в интервале $[\lambda^+, \Lambda^+]$ и $\lambda^+ > 0$.

Оценим характеристики матрицы AK_d. Представим вектор $w \in \mathbb{R}^N$, $||w|| \neq 0$, в виде
$$w = W_k w_1 + W_k^{\perp} w_2,$$
тогда из (3.6) легко выводится соотношение
$$\frac{(AK_d w, w)}{||w||^2} = \frac{d||w_1||^2 + (T_+ w_2, w_2) + (Sw_2, w_1)}{||w_1||^2 + ||w_2||^2}. \tag{3.34}$$

Но из оценки утверждения 3.2 следует неравенство
$$\frac{|(Sw_2, w_1)|}{||w_1||^2 + ||w_2||^2} \leq ||S|| \frac{||w_1||\,||w_2||}{||w_1||^2 + ||w_2||^2} \leq \frac{1}{2}\varphi,$$
откуда из (3.34) получаем требуемые оценки величин
$$\lambda^+_{AK_d} = \min_{||w|| \neq 0} \frac{|(AK_d w, w)|}{||w||^2}$$
и
$$\Lambda^+_{AK_d} = \max_{||w|| \neq 0} \frac{|(AK_d w, w)|}{||w||^2}.$$

Оценим σ_{AK_d}. Для этого снова представим $w \in \mathbb{R}^N$, $||w|| \neq 0$, в виде $w = W_k w_1 + W_k^{\perp} w_2$, тогда в силу равенства (3.6) имеет место соотношение
$$AK_d w = dW_k w_1 + W_k^{\perp} T w_2 + W_k S w_2 = [W_k, W_k^{\perp}] \begin{bmatrix} dw_1 + Sw_2 \\ Tw_2 \end{bmatrix},$$
поэтому $||AK_d w|| \leq d||w_1|| + \left\| \begin{bmatrix} S \\ T \end{bmatrix} \right\| ||w_2||.$

Из определений S и T следует неравенство

$$\left\| \begin{bmatrix} S \\ T \end{bmatrix} \right\| = \left\| \begin{bmatrix} R_k^{(12)} \\ R_k^{(22)} \end{bmatrix} (Y_k^{\perp})^T W_k^{\perp} \right\| \leq \left\| \begin{bmatrix} R_k^{(12)} \\ R_k^{(22)} \end{bmatrix} \right\| = \sigma,$$

откуда получаем оценку

$$\sigma_{AK_d} = \max_{||w|| \neq 0} \frac{||AK_d w||}{||w||} \leq \max_{||w|| \neq 0} \frac{d||w_1|| + \sigma||w_2||}{||w||} =$$

$$= \max_{||w|| \neq 0} \frac{d||w_1|| + \sigma||w_2||}{\sqrt{||w_1||^2 + ||w_2||^2}} \leq \sqrt{\sigma^2 + d^2}.$$

Неравенство для характеристики μ_{AK_d} теперь следует из выведенных оценок для $\lambda^+_{AK_d}$ и σ_{AK_d}.

Оценим величину $\sigma^-_{AK_d}$. В силу (3.6) имеет место равенство

$$\frac{AK_d - (AK_d)^T}{2} = W_k^{\perp} T_- (W_k^{\perp})^T + \frac{W_k S (W_k^{\perp})^T - W_k^{\perp} S^T W_k}{2},$$

откуда из утверждения 3.2 получаем оценку

$$||(AK_d)_-|| \leq ||T_-|| + ||S|| \leq \sigma^- + \varphi.$$

□

Замечание 3.7. Неравенство (2.15) утверждения 2.4 позволяет из неравенств (3.32) получить также оценку сверху характеристики φ_{AK_d}. Мы не приводим соответствующее громоздкое выражение, поскольку оно не будет использоваться в дальнейшем.

Во введении говорилось о том, что целью данной работы является построение так называемого повторного переобуславливателя, т.е., оператора, который корректирует действие исходного переобуславливания на подпространстве малой размерности, а на остальной части пространства изменения, внесенные этим оператором, невелики и могут быть оценены, т.е., на остальной части пространства в основном действует исходный переобуславливатель. Используя оценки теоремы 3.2, покажем, что оператор коррекции K_d удовлетворяет этим требованиям.

Пусть A – некоторая переобусловленная матрица. По определению переобуславливания это означает, что матрица A в некотором смысле близка к единичной матрице. Количественно близость переобусловленной матрицы к единичной можно характеризовать различными способами. Можно рассматривать, например, следующие величины:

а) норма отклонения переобусловленной матрицы A от единичной;
б) количество собственных значений симметричной части A_+ переобусловленной матрицы A вне некоторого интервала, содержащего 1 и не содержащего 0;
в) количество старших сингулярных значений переобусловленной матрицы A вне некоторого интервала, содержащего 1;
г) количество старших сингулярных значений антисимметричной части A^- переобусловленной матрицы A вне некоторого полуинтервала, содержащего 0.

Если переобусловленная матрица A недостаточно близка к единичной матрице в каком-либо из упомянутых выше смыслов или в их комбинации, то можно использовать оператор коррекции для корректировки начального переобуславливания таким образом, чтобы соответствующие требования выполнялись. Более того, из оценок теоремы 3.2 следует, что можно строить оператор коррекции таким образом, чтобы откорректированная переобусловленная матрица являлась переобусловленной матрицей практически любого наперед заданного качества в упомянутых выше смыслах. Действительно, в оценках теоремы 3.2 участвуют только параметр d и характеристики подпространства, введенные в разделе 2. Эти характеристики являются (или оцениваются) монотонными характеристиками подпространства. Для переобусловленной матрицы A можно ожидать, что существует такое подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_k)$, возможно большой размерности k, такое, что характеристики $\lambda_A^+(Y_k)$, $\Lambda_A^+(Y_k)$ и $\sigma_A(Y_k)$ очень близки к 1, а характеристики $\sigma_A^-(Y_k)$ и $\varphi_A(Y_k)$ очень близки к 0. В этом случае при $d = 1$ из оценок теоремы 3.2 получаем, что $||AK_d - I_N||$ очень близка к 0, $\lambda^+_{AK_d}$ и $\Lambda^+_{AK_d}$ очень близки к 1, $\sigma^-_{AK_d}$ очень близка к 0, а из неравенства

$$\sigma_{AK_d} = ||AK_d|| \leq ||I_N|| + ||I_N - AK_d||$$

получаем, что σ_{AK_d} и μ_{AK_d} также очень близки к 1. Это означает, что при правильном выборе подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ можно удовлетворить всем упомянутым выше количественным критериям качества переобуславливания для матрицы AK_d. С другой стороны, для фактического нахождения такого подпространства необходимо провести некоторые вычисления, включающие в себя как минимум умножения на переобусловленную матрицу A и ортогонализации, и эти затраты тем больше, чем больше k. Более того, при большой размерности k подходящего подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ также могут потребоваться большие затраты памяти для хранения базисов соответствующих подпространств и большие арифметические затраты для использования этих базисов при умножении на оператор коррекции. Поэтому на практике основной интерес представляет ситуация, при которой требования на качество откорректированного переобуславливания удается удовлетворить при относительно небольшой размерности k подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$, $k \ll N$.

3.5. Оператор коррекции в общем случае. Расщепление подпространств.

В предыдущем разделе были изучены свойства оператора коррекции в случае, когда для матрицы A заранее известно подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ и его базис Y_k такие, что $\mu_A(Y_k) \geq \mu_{thr} > 0$, где величина μ_{thr} не слишком мала. Из определения величины $\mu_A(Y_k)$ и монотонности характеристики σ_A следует, что это неравенство будет выполнено, например, если имеет место неравенство

$$\lambda_A^+(Y_k) \geq \lambda_{thr}^+ > 0,$$

где

$$\lambda_{thr}^+ = \mu_{thr}\sigma_{\max}(A).$$

Для матрицы, собственные значения симметричной части которой плохо отделены от нуля, и тем более для незнакоопределенной матрицы задача нахождения такого подпространства и выбор базиса в нем является непростой вычислительной задачей. Более того, из утверждения 3.3 следует, что размерность подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$, удовлетворяющего более слабому условию $\lambda_A^+(Y_k) > 0$, оценивается снизу величиной $N_- + N_0$, где N_- и N_0 – соответственно количество отрицательных и нулевых собственных значений матрицы A_+ с учетом их кратностей. Это означает, что для сильно незнакоопределенных матриц или для матриц, спектр симметричной части которых плохо отделен от нуля, число k для выполнения условия $\mu_A(Y_k) \geq \mu_{thr} > 0$ может быть большим. Поэтому возникает естественный вопрос: можно ли таким образом организовать процесс построения оператора коррекции матрицы A, чтобы избежать условия $\mu_A(Y_k) \geq \mu_{thr} > 0$

и, тем не менее, сохранить полезные свойства оператора коррекции? В этом разделе мы предлагаем некоторый способ построения оператора коррекции в случае, когда известна только часть необходимого подпространства.

Если текущее подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ удовлетворяет условию аппроксимации (3.29), то в соответствии с теорией, изложенной в разделе 3.4, можно построить соответствующий невырожденный оператор коррекции K_d матрицы A. Если для текущего подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ неравенство (3.29) не выполнено, в том числе если имеет место равенство

$$\mu_A(Y_k) = 0, \tag{3.35}$$

то теория раздела 3.4 неприменима для построения невырожденного оператора коррекции. В этом случае оператор коррекции будем строить последовательно, шаг за шагом, а именно: из подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k^{(1)})$ будем выделять подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_{k_{(1)}}^{(1)})$, возможно меньшей размерности $k_{(1)}$, по которому будем строить невырожденный оператор коррекции $K_d^{(1)}$. Затем для новой невырожденной матрицы $AK_d^{(1)}$ будем строить подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_{k_{(2)}}^{(2)})$, по которому будем строить следующий невырожденный оператор коррекции $K_d^{(2)}$, и т.д. В результате полный оператор коррекции будет иметь вид:

$$K_d = K_d^{(1)} K_d^{(2)} \dots, \tag{3.36}$$

где все множители справа – невырожденные операторы коррекции, причем оператор $K_d^{(i)}$ строился для матрицы $AK_d^{(1)} \dots K_d^{(i-1)}$.

Последующее изложение этого раздела посвящено тому, как для текущей невырожденной матрицы $AK_d^{(1)} \dots K_d^{(i-1)}$ и некоторого текущего подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k^{(i)})$ построить подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_{k_{(i)}}^{(i)})$, возможно меньшей размерности $k_{(i)}$, и новый невырожденный оператор коррекции $K_d^{(i)}$. При этом для упрощения обозначений текущая матрица снова будет обозначаться A, а в обозначениях подпространств и оператора коррекции индексы $(1) \dots (i)$ будут опускаться.

Пусть для текущих матриц A и Y_k имеют место равенства

(3.1), т.е.,

$$\begin{cases} AY_k \ = W_k R_k, \\ Y_k^T Y_k = I_k, \\ W_k^T W_k = I_k, \end{cases} \tag{3.37}$$

причем подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ не обязательно удовлетворяет условию аппроксимации для заданного μ_{thr}. В этом случае оператор K_d, построенный по формуле (3.2), не обязательно невырожденный, или, если μ близко к нулю, может быть очень близок к вырожденному. Тем не менее из текущего подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ можно легко выделить подпространство возможно меньшей размерности, для которого можно построить соответствующий невырожденный оператор коррекции такой, что он будет далек от вырожденного. При этом одновременно на соответствующем подпространстве этот оператор будет обладать нужными свойствами коррекции действия матрицы A, аналогичными описанным в теореме 3.2. Рассмотрим все это более подробно.

Вычислим сингулярное разложение матрицы R_k из (3.37)

$$R_k = U_k \Sigma_k V_k^T. \tag{3.38}$$

Пусть для некоторого целого числа l, $0 < l \leq k$, сингулярные тройки в (3.38) упорядочены таким образом, что для расщепления

$$\begin{aligned} Y_k V_k &= [Y, Y'], & Y &\in \mathbb{R}^{N\times l}, & Y' &\in \mathbb{R}^{N\times(k-l)}, \\ W_k U_k &= [W, W'], & W &\in \mathbb{R}^{N\times l}, & W' &\in \mathbb{R}^{N\times(k-l)}, \\ \Sigma_k &= \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & \Sigma' \end{bmatrix}, & \Sigma &\in \mathbb{R}^{l\times l}, & \Sigma' &\in \mathbb{R}^{(k-l)\times(k-l)} \end{aligned} \tag{3.39}$$

имеет место неравенство

$$\sigma_{\min}(Y^T W) > 0. \tag{3.40}$$

Из соотношений (3.37), (3.38) и (3.39) следуют соотношения

$$\begin{cases} AY &= & W\Sigma, \\ Y^T Y &= & I_l, \\ W^T W &= & I_l, \end{cases} \tag{3.41}$$

поэтому из утверждения 3.4 и неравенства (3.40) получим, что матрица

$$K_d = (I - YY^T)(I - WW^T) + dY\Sigma^{-1}W^T \tag{3.42}$$

невырождена. Пусть $Y_k^{\perp}$ и $W_k^{\perp}$ соответственно дополнения к Y_k и W_k до ортонормированного базиса в $\mathbb{R}^N$. Тогда для матрицы $A[Y, Y', Y_k^{\perp}]$ в силу (3.37), (3.38) и (3.39) ее QR разложение можно записать по аналогии с (2.4) в виде:

$$A[Y, Y', Y_k^{\perp}] = [W, W', W_k^{\perp}] \begin{bmatrix} \Sigma & 0 & R_{\Sigma}^{(12)} \\ 0 & \Sigma' & R_{\Sigma'}^{(12)} \\ 0 & 0 & R_k^{(22)} \end{bmatrix}. \tag{3.43}$$

При $l < k$ используем матрицу Y' для построения подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ такого, чтобы подпространство $\mathrm{Span}\,(W')$ являлось его образом относительно матрицы AK_d, где K_d определено равенством (3.42). В силу равенства $AY' = W'\Sigma'$ для этого достаточно вычислить матрицу

$$\hat{Y}' = K_d^{-1} Y' \tag{3.44}$$

и построить QR разложение матрицы $\hat{Y}'$ в виде

$$\hat{Y}' = \widetilde{Y}' \tilde{R}'. \tag{3.45}$$

Действительно, матрица K_d невырождена, поэтому матрица $\hat{Y}'$ из (3.44) имеет полный столбцевой ранг. Но тогда верхняя треугольная матрица $\tilde{R}'$ из (3.45) невырождена, а для матрицы $\widetilde{Y}'$ из (3.45) имеют место соотношения

$$AK_d\widetilde{Y}' = AK_d\hat{Y}'(\tilde{R}')^{-1} = AY'(\tilde{R}')^{-1} = W'\Sigma'(\tilde{R}')^{-1},$$

что и требовалось.

Теперь оценим характеристики подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ по отношению к матрице AK_d в терминах характеристик (3.14) подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ по отношению к матрице A.

Теорема 3.3. *Обозначим* $\xi = \dfrac{||\Sigma'||}{\sigma}$, $\omega = \sigma_{\min}(Y^T W)$. *При* $d > 0$

имеют место неравенства

$$\begin{cases} \lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') \geq \min(d, \lambda^+) - \dfrac{1}{2}\varphi, \\ \Lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') \leq \max(d, \Lambda^+) + \dfrac{1}{2}\varphi, \\ \sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') \leq \sqrt{(\theta\sigma)^2 + d^2}, \quad \theta \geq 1, \quad \textit{где} \\ \theta = \begin{cases} 1, & l = k, \\ \min\left\{\sqrt{1+\xi^2}, \dfrac{1 + (1-\omega^2)\sqrt{1+\xi^2}}{\omega}\right\}, & l < k, \end{cases} \\ \mu_{AK_d}(\widetilde{Y}') \geq \dfrac{\max\left\{\min(d, \lambda^+) - \dfrac{1}{2}\varphi, 0\right\}}{\sqrt{(\theta\sigma)^2 + d^2}}, \\ \sigma^-_{AK_d}(\widetilde{Y}') \leq \sigma^- + \varphi. \end{cases} \tag{3.46}$$

Доказательство. По построению подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ подпространство $\mathrm{Span}\,(W')$ является его образом относительно матрицы AK_d, поэтому

$$\begin{cases} \lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') = \min\limits_{\substack{w \perp \mathrm{Span}\,(W') \\ ||w|| \neq 0}} \dfrac{|(AK_d w, w)|}{||w||^2}, \\ \Lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') = \max\limits_{\substack{w \perp \mathrm{Span}\,(W') \\ ||w|| \neq 0}} \dfrac{|(AK_d w, w)|}{||w||^2}. \end{cases} \tag{3.47}$$

Из соотношений (3.42) и (3.43) можно получить следующее выражение для матрицы AK_d, аналогичное выражению (3.6):

$$AK_d = dWW^T + W^\perp \widetilde{T}(W^\perp)^T + W\widetilde{S}(W^\perp)^T, \tag{3.48}$$

здесь введены обозначения

$$\begin{aligned} Y^\perp &= [Y', Y_k^\perp], \qquad W^\perp = [W', W_k^\perp], \\ \widetilde{T} &= \begin{bmatrix} \Sigma' & R^{(12)}_{\Sigma'} \\ 0 & R^{(22)}_k \end{bmatrix} (Y^\perp)^T W^\perp, \\ \widetilde{S} &= \left[0, R^{(12)}_\Sigma\right] (Y^\perp)^T W^\perp. \end{aligned} \tag{3.49}$$

По аналогии с равенством (3.10) легко можно вывести соотношение

$$\widetilde{T}^T = (W^\perp)^T A^T W^\perp. \tag{3.50}$$

Из (3.50) получаем соотношение

$$[0, I_{N-k}]\widetilde{T}^T \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} = [0, I_{N-k}](W^\perp)^T A^T W^\perp \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} =$$
$$= (W_k^\perp)^T A^T W_k^\perp = T^T,$$

т.е.

$$T = [0, I_{N-k}]\widetilde{T} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix}, \tag{3.51}$$

где для симметричной и антисимметричной частей матрицы T имеют место неравенства (3.15) и (3.16) утверждения 3.2. Далее, для матрицы $\widetilde{S}$ имеет место неравенство

$$||\widetilde{S}|| \le ||[0,\ R_\Sigma^{(12)}]|| \le \left\| \begin{bmatrix} R_\Sigma^{(12)} \\ R_{\Sigma'}^{(12)} \end{bmatrix} \right\| = \varphi. \tag{3.52}$$

Условие ортогональности $w \perp \mathrm{Span}\,(W')$ равносильно выражению $w = Ww_1 + W_k^\perp w_2$ для некоторых w_1 и w_2. Для таких ненулевых векторов w имеет место равенство

$$(AK_d w, w) = d(w_1, w_1) + \left(\widetilde{T} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} w_2, \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} w_2 \right) +$$
$$+ \left(\widetilde{S} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} w_2, w_1 \right) = d(w_1, w_1) + (Tw_2, w_2) + \left(\widetilde{S} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} w_2, w_1 \right).$$

Для ненулевого вектора $w = Ww_1 + W_k^\perp w_2$ имеет место неравенство

$$\frac{\left| \left(\widetilde{S} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} w_2, w_1 \right) \right|}{||w_1||^2 + ||w_2||^2} \le ||\widetilde{S}|| \frac{||w_1||\,||w_2||}{||w_1||^2 + ||w_2||^2} \le \frac{1}{2}\varphi,$$

откуда из утверждения 3.2 получаем оценки характеристик $\lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}')$ и $\Lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}')$.

Оценим $\sigma^-_{AK_d}(\widetilde{Y}')$. По определению имеет место равенство

$$\sigma^-_{AK_d}(\widetilde{Y}') = \left\| \left((W')^\perp \right)^T \frac{AK_d - (AK_d)^T}{2} (W')^\perp \right\|, \tag{3.53}$$

поскольку образом подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ по отношению к матрице AK_d является подпространство $\mathrm{Span}\,(W')$. Далее, в качестве $(W')^\perp$ можно взять матрицу $[W, W_k^\perp]$. Если матрицы $\widetilde{T}$ и

$\widetilde{S}$ из (3.49) представить в блочном виде

$$\widetilde{T} = \begin{bmatrix} \widetilde{T}_{11} & \widetilde{T}_{12} \\ \widetilde{T}_{21} & \widetilde{T}_{22} \end{bmatrix}, \quad \widetilde{S} = [\widetilde{S}_1,\ \widetilde{S}_2], \tag{3.54}$$

то из формулы (3.48) легко можно вывести следующее выражение для матрицы AK_d:

$$AK_d = [W, W', W_k^{\perp}] \begin{bmatrix} dI_l & \widetilde{S}_1 & \widetilde{S}_2 \\ 0 & \widetilde{T}_{11} & \widetilde{T}_{12} \\ 0 & \widetilde{T}_{21} & \widetilde{T}_{22} \end{bmatrix} [W, W', W_k^{\perp}]^T. \tag{3.55}$$

Подставляя выражение для AK_d из (3.55) в (3.53), получим

$$\sigma^{-}_{AK_d}(\widetilde{Y}') = \left\| \begin{bmatrix} 0 & \dfrac{\widetilde{S}_2}{2} \\ -\dfrac{\widetilde{S}_2^T}{2} & \dfrac{\widetilde{T}_{22} - \widetilde{T}_{22}^T}{2} \end{bmatrix} \right\|.$$

Сравнивая (3.54) и (3.51), получим $\widetilde{T}_{22} = T$, поэтому

$$\sigma^{-}_{AK_d}(\widetilde{Y}') \le ||T_-|| + ||\widetilde{S}_2|| \le \sigma^- + \varphi.$$

Оценим $\sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}')$. По определению

$$\sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') = \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}') \\ ||y|| \ne 0}} \frac{||AK_d y||}{||y||}. \tag{3.56}$$

Представим вектор y в виде $y = Ww_1 + W^{\perp} w_2$ для некоторых w_1 и w_2, тогда из (3.48) и (3.49) следует равенство

$$AK_d y = dWw_1 + [W, W^{\perp}] \begin{bmatrix} 0 & R_{\Sigma}^{(12)} \\ \Sigma' & R_{\Sigma'}^{(12)} \\ 0 & R_k^{(22)} \end{bmatrix} (Y^{\perp})^T W^{\perp} w_2. \tag{3.57}$$

Имея в виду, что $\left\| \begin{bmatrix} R_{\Sigma}^{(12)} \\ R_{\Sigma'}^{(12)} \\ R_k^{(22)} \end{bmatrix} \right\| = \sigma$, из (3.57) получим оценку

$$||AK_d y|| \le d||w_1|| + ||\Sigma'||\,||w_2^{(1)}|| + \sigma||w_2^{(2)}||, \tag{3.58}$$

где

$$\begin{bmatrix} w_2^{(1)} \\ w_2^{(2)} \end{bmatrix} = (Y^{\perp})^T W^{\perp} w_2$$

и

$$\left\| \begin{bmatrix} w_2^{(1)} \\ w_2^{(2)} \end{bmatrix} \right\| \le ||w_2||.$$

Теперь из неравенства (3.58) при $||y|| \ne 0$ с использованием неравенства Коши–Буняковского получим

$$\begin{aligned} \frac{||AK_d y||}{||y||} &\le \frac{d||w_1|| + ||\Sigma'||\,||w_2^{(1)}|| + \sigma||w_2^{(2)}||}{\sqrt{||w_1||^2 + ||w_2||^2}} \le \\ &\le \frac{d||w_1|| + ||\Sigma'||\,||w_2^{(1)}|| + \sigma||w_2^{(2)}||}{\sqrt{||w_1||^2 + ||w_2^{(1)}||^2 + ||w_2^{(2)}||^2}} \le \\ &\le \sqrt{d^2 + ||\Sigma'||^2 + \sigma^2}. \end{aligned} \tag{3.59}$$

Неравенство (3.59) верно для любого ненулевого вектора y, поэтому

$$\sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') \le \sqrt{d^2 + \sigma^2 + ||\Sigma'||^2}. \tag{3.60}$$

Если расщепление в (3.39) таково, что $l = k$, то в (3.57) отсутствует столбец с матрицей Σ', в этом частном случае неравенство (3.60) очевидно переходит в неравенство

$$\sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') \le \sqrt{d^2 + \sigma^2}.$$

Неравенство (3.60) получено для произвольного вектора y, $||y|| \ne 0$, а в определении (3.56) вектор y не произволен. Уточним оценку (3.60), учитывая условие ортогональности $y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ при $l<k$.

При $l < k$ условие $y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ равносильно условию

$$y^T \widetilde{Y}' z = 0, \quad \forall z \in \mathbb{R}^{k-l}, \quad ||z|| \ne 0. \tag{3.61}$$

Подставим в (3.61) выражение для $\widetilde{Y}'$ из (3.44) и (3.45), получим условие

$$y^T K_d^{-1} Y' (\tilde{R}')^{-1} z = 0, \qquad \forall z \in \mathbb{R}^{k-l}, \qquad ||z|| \ne 0. \tag{3.62}$$

Учитывая невырожденность матрицы $\tilde{R}'$ условие (3.62) можно записать в виде

$$K_d^{-T} y \perp \mathrm{Span}\,(Y')$$

или

$$K_d^{-T} y = Y y_1 + Y_k^{\perp} y_2 \tag{3.63}$$

для некоторых y_1 и y_2. Умножим обе части равенства (3.63) на K_d^T и подставим выражение для K_d из (3.42); получим

$$\begin{aligned} y &= K_d^T Y y_1 + K_d^T Y_k^\perp y_2 = \\ &= dW\Sigma^{-1} y_1 + W^\perp (W^\perp)^T Y^\perp (Y^\perp)^T Y_k^\perp y_2. \end{aligned} \tag{3.64}$$

Из формулы (3.64) получаем связь между векторами w_1 и w_2, введенными ранее, и векторами y_1 и y_2, а именно:

$$\begin{cases} w_1 &= \quad dW\Sigma^{-1} y_1, \\ w_2 &= \quad (W^\perp)^T Y^\perp (Y^\perp)^T Y_k^\perp y_2. \end{cases} \tag{3.65}$$

При этом имеет место неравенство

$$\begin{aligned} ||y_2|| = \left\| \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} y_2 \right\| &= \left\| ((W^\perp)^T Y^\perp)^{-1} w_2 \right\| \le \\ \le || \left((W^\perp)^T Y^\perp\right)^{-1} || \, ||w_2|| &= \frac{||w_2||}{\sigma_{\min}(Y^T W)}, \end{aligned} \tag{3.66}$$

где последнее равенство следует из теоремы 3.1 о $C-S$ разложении.

Второе равенство в (3.65) действительно показывает, что в разложении $y = Ww_1 + W^\perp w_2$ вектор w_2 не произволен. Подставим вектор w_2 из второго равенства в (3.65) в (3.57), получим

$$\begin{aligned} AK_d y = dWw_1 + [W, W^\perp] &\begin{bmatrix} 0 & R_\Sigma^{(12)} \\ \Sigma' & R_{\Sigma'}^{(12)} \\ 0 & R_k^{(22)} \end{bmatrix} \times \\ \times (Y^\perp)^T W^\perp (W^\perp)^T Y^\perp &\begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} y_2. \end{aligned} \tag{3.67}$$

Обозначим

$$\Omega = (Y^\perp)^T W^\perp \tag{3.68}$$

и пусть

$$\Omega = U_\Omega \Sigma_\Omega V_\Omega^T \tag{3.69}$$

– сингулярное разложение матрицы Ω. Из равенств (3.68) и (3.69) получаем выражение

$$(Y^\perp)^T W^\perp (W^\perp)^T Y^\perp = \Omega\Omega^T = I_{N-l} + U_\Omega(\Sigma_\Omega^2 - I_{N-l}) U_\Omega^T. \tag{3.70}$$

Подставим (3.70) в (3.67), получим

$$\begin{aligned} AK_d y = dWw_1 + [W, W^{\perp}] \begin{bmatrix} R_{\Sigma}^{(12)} \\ R_{\Sigma'}^{(12)} \\ R_k^{(22)} \end{bmatrix} y_2 + \\ + [W, W^{\perp}] \begin{bmatrix} 0 & R_{\Sigma}^{(12)} \\ \Sigma' & R_{\Sigma'}^{(12)} \\ 0 & R_k^{(22)} \end{bmatrix} U_{\Omega}(\Sigma_{\Omega}^2 - I_{N-l})U_{\Omega}^T \begin{bmatrix} 0 \\ I_{N-k} \end{bmatrix} y_2. \end{aligned} \tag{3.71}$$

Учитывая равенство $||\Sigma_{\Omega}^2 - I_{N-l}|| = 1 - \sigma_{\min}^2(Y^T W)$, которое следует из теоремы 3.1 о $C-S$ разложении, и учитывая неравенство

$$\left\| \begin{bmatrix} 0 & R_{\Sigma}^{(12)} \\ \Sigma' & R_{\Sigma'}^{(12)} \\ 0 & R_k^{(22)} \end{bmatrix} \right\| \leq \sqrt{\sigma^2 + ||\Sigma'||^2},$$

из (3.71) и (3.66) получаем оценку

$$\begin{aligned} ||AK_d y|| \leq d||w_1|| + (\sigma + (1 - \sigma_{\min}^2(Y^T W))\sqrt{\sigma^2 + ||\Sigma'||^2})||y_2|| \leq \\ \leq d||w_1|| + \frac{\sigma + (1 - \sigma_{\min}^2(Y^T W))\sqrt{\sigma^2 + ||\Sigma'||^2}}{\sigma_{\min}(Y^T W)} ||w_2||. \end{aligned}$$

Обозначим

$$\theta = \frac{1 + (1 - \sigma_{\min}^2(Y^T W))\sqrt{1 + \left(\dfrac{||\Sigma'||}{\sigma}\right)^2}}{\sigma_{\min}(Y^T W)},$$

тогда

$$||AK_d y|| \leq d||w_1|| + \theta\sigma||w_2||,$$

поэтому окончательно

$$\sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') \leq \sqrt{(\theta\sigma)^2 + d^2}.$$

□

Сравним неравенства (3.32) и (3.46) теорем 3.2 и 3.3. Легко заметить любопытное сходство между оценками характеристик подпространств по отношению к откорректированной матрице. Более того, в частных случаях $l = k$, $\xi \ll 1$ или $\omega \approx 1$ величины в правых частях соответствующих неравенств либо просто совпадают, либо очень близки. Тем самым показано, что в оценках (3.46) величины справа в явном виде почти не зависят от выбранного в (3.39) расщепления подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ и его образа. Оценка (3.46) зависит от расщепления (3.39) в основном неявно в виде предположения (3.40), поскольку для построения матрицы $\widetilde{Y}'$ по формулам (3.44) и (3.45) требуется невырожденность матрицы K_d из (3.42).

Слабая явная связь между способом расщепления подпространств в (3.39) и качеством коррекции матрицы на подпространстве позволяет сформулировать дополнительные условия на выбор расщепления (3.39). Эти дополнительные к (3.40) условия состоят в следующем:

- при выборе расщепления (3.39) необходимо по возможности максимизировать ранг оператора коррекции и тем самым минимизировать размерность подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$;
- механизм построения расщепления (3.39) должен быть таким, чтобы при достижении аппроксимации в смысле определения 3.2 все текущее подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ использовалось для построения оператора коррекции, т.е., реализовывался случай, подробно рассмотренный в разделе 3.4.

Простейший механизм построения расщепления (3.39), удовлетворяющий условию (3.40) и удовлетворяющий описанным выше дополнительным условиям, состоит в следующем. Для сингулярного разложения (3.38) с произвольным пока упорядочиванием сингулярных троек вычислим матрицы

$$\hat{Y}_k = Y_k V_k, \qquad \hat{W}_k = W_k U_k. \tag{3.72}$$

Вычислим матрицу

$$\Omega = \hat{Y}_k^T \hat{W}_k. \tag{3.73}$$

Для квадратной матрицы Ω построим по возможности максимальный набор индексов $J = \{j_1, \ldots, j_l\}$ такой, что главная подматрица Ω_J матрицы Ω, состоящая из элементов Ω, расположенных в строках и столбцах из набора индексов J, удовлетворяет условию

$$\sigma_{\min}(\Omega_J) \geq \mu_{thr} > 0, \tag{3.74}$$

где μ_{thr} – заданный в определении 3.2 порог.

Построим расщепление (3.39) в соответствии с набором индексов J. Для этого столбцы матриц Y и W составим соответственно из столбцов матриц $\hat{Y}_k$ и $\hat{W}_k$ в позициях $j_1, \ldots, j_l$, а диагональные элементы матрицы Σ составим из диагональных элементов матрицы Σ_k в позициях $(j_1, j_1), \ldots, (j_l, j_l)$. Матрицы Y', W' и Σ' составим из остальных элементов матриц $\hat{Y}_k$, $\hat{W}_k$ и Σ_k таким образом, чтобы в соответствии с (3.43) имело место равенство

$$A[Y, Y'] = [W, W'] \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & \Sigma' \end{bmatrix}. \tag{3.75}$$

При таком построении расщепления (3.39) неравенство (3.40) выполнено автоматически, поскольку по построению имеют место соотношения

$$\sigma_{\min}(Y^T W) = \sigma_{\min}(\Omega_J) > 0.$$

Дополнительное условие максимальности ранга матрицы K_d из (3.42) также выполнено, поскольку мы искали максимальный по числу элементов набор индексов J. И, наконец, дополнительное условие о достижении аппроксимации также выполнено. Действительно, при достижении аппроксимации из неравенства (3.18) утверждения 3.2 следует неравенство

$$\sigma_{\min}(Y_k^T W_k) \geq \mu_{thr}. \tag{3.76}$$

Неравенство (3.76) означает, что при достижении аппроксимации можно положить $J = \{1, \ldots, k\}$.

Замечание 3.8. В неравенствах теоремы 3.3 отсутствует оценка нормы отклонения матрицы AK_d от единичной матрицы. Тем не менее это вовсе не означает, что нам неизвестны свойства матрицы AK_d в смысле качества переобуславливания. Прежде всего заметим, что неравенства теоремы 3.3 дают оценки тех самых характеристик подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ по отношению к матрице AK_d (за исключением $\varphi_{AK_d}(\widetilde{Y}')$, которую также можно оценить с использованием неравенства (2.15) утверждения 2.4), которые входят в неравенства теоремы 3.2. Другими словами, если для матрицы (AK_d) и подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ можно построить невырожденный оператор коррекции K_d' (т.е., если $\sigma_{\min}((\widetilde{Y}')^T W') > 0$), то для матрицы $(AK_d)K_d'$ имеют место оценки теоремы 3.2, где характеристики подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$ по отношению к матрице AK_d оценены в теореме 3.3. Более того, в соответствии с результатами, изложенными в работе [1], величину $\mu_{AK_d}(\widetilde{Y}')$, оценка для которой приведена в теореме 3.3, можно взять в качестве единственного критерия качества переобуславливания, поскольку именно эта величина определяет скорость сходимости алгоритма SOFGMRES(m) с матрицей AK_d, если в качестве начального подпространства этого алгоритма выбрано подпространство $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}')$.

4. (ε, α) аппроксимация оператора коррекции

В разделе 3.5 был описан способ построения для матричных соотношений (3.37) расщепления (3.39) такого, что для расщепленных матричных соотношений (3.41) соответствующий оператор коррекции (3.42) далек от вырожденного. При этих условиях можно ожидать, что матрицу K_d из (3.42) можно заменить некоторой близкой к ней в некотором смысле матрицей, которая также невырождена и обладает свойствами, близкими к описанным в теореме 3.3 корректирующим свойствам матрицы K_d. Рассмотрим это более подробно.

Пусть имеют место соотношения (3.41), т.е.,

$$\begin{cases} AY & = & W\Sigma, \\ Y^TY & = & I_l, \\ W^TW & = & I_l, \end{cases}$$

и пусть

$$\sigma_{\min}(Y^TW) \geq \mu_{thr} > 0.$$

Пусть оператор коррекции K_d имеет вид (3.42), т.е.,

$$K_d = (I_N - YY^T)(I_N - WW^T) + dY\Sigma^{-1}W^T.$$

Запишем оператор коррекции K_d в виде, аналогичном (3.28), т.е.

$$K_d = I_N + [Y, W]\begin{bmatrix} -I_l & d\Sigma^{-1} + Y^TW \\ 0 & -I_l \end{bmatrix}[Y, W]^T. \qquad (4.1)$$

Определение 4.1. *Пусть ε и α, $\varepsilon \geq 0$, $\alpha \geq 0$ – некоторые неотрицательные числа. Квадратную матрицу $K_d^{(\varepsilon\alpha)} \in \mathbb{R}^{N\times N}$ будем называть (ε, α) аппроксимацией оператора коррекции K_d из* (3.42), *если имеет место равенство*

$$K_d^{(\varepsilon\alpha)} = I_N + [Y_{\varepsilon\alpha}, W_\varepsilon]\begin{bmatrix} -I_l & d\Sigma^{-1} + Y^TW \\ 0 & -I_l \end{bmatrix}[Y_\varepsilon, W_{\varepsilon\alpha}]^T, \qquad (4.2)$$

причем для матриц Y_ε, W_ε, $Y_{\varepsilon\alpha}$, $W_{\varepsilon\alpha} \in \mathbb{R}^{N\times l}$ имеют место неравенства

$$\left\{\begin{array}{lllllll} ||Y-Y_\varepsilon|| & \leq & \varepsilon, & & & \\ ||W-W_\varepsilon|| & \leq & \varepsilon, & & & \\ ||Y-Y_{\varepsilon\alpha}|| & \leq & \varepsilon, & ||(Y-Y_{\varepsilon\alpha})\Sigma^{-1}|| & \leq & \alpha, \\ ||W-W_{\varepsilon\alpha}|| & \leq & \varepsilon, & ||(W-W_{\varepsilon\alpha})\Sigma^{-1}|| & \leq & \alpha. \end{array}\right. \tag{4.3}$$

Введем следующие обозначения для матриц ошибок

$$\left\{\begin{array}{lll} E_{Y_\varepsilon} & = & Y-Y_\varepsilon, \\ E_{W_\varepsilon} & = & W-W_\varepsilon, \\ E_{Y_{\varepsilon\alpha}} & = & Y-Y_{\varepsilon\alpha}, \\ E_{W_{\varepsilon\alpha}} & = & W-W_{\varepsilon\alpha}, \\ E_K & = & K_d-K_d^{(\varepsilon\alpha)}, \end{array}\right. \tag{4.4}$$

E_{Y_ε}, E_{W_ε}, $E_{Y_{\varepsilon\alpha}}$, $E_{W_{\varepsilon\alpha}} \in \mathbb{R}^{N\times l}$, $E_K \in \mathbb{R}^{N\times N}$, тогда неравенства (4.3) можно переписать в виде

$$\left\{\begin{array}{llllll} ||E_{Y_\varepsilon}|| & \leq & \varepsilon, & & & \\ ||E_{W_\varepsilon}|| & \leq & \varepsilon, & & & \\ ||E_{Y_{\varepsilon\alpha}}|| & \leq & \varepsilon, & ||E_{Y_{\varepsilon\alpha}}\Sigma^{-1}|| & \leq & \alpha, \\ ||E_{W_{\varepsilon\alpha}}|| & \leq & \varepsilon, & ||E_{W_{\varepsilon\alpha}}\Sigma^{-1}|| & \leq & \alpha. \end{array}\right. \tag{4.5}$$

Утверждение 4.1. *Имеют место неравенства*

$$||E_K|| \leq 2\sqrt{2}(1+\varepsilon)(3\varepsilon+d\alpha), \tag{4.6}$$

$$||AE_K|| \leq 2\sqrt{2}(1+\varepsilon)(3\varepsilon+d\alpha)\sqrt{\sigma^2+\max\{||\Sigma||^2, ||\Sigma'||^2\}}. \tag{4.7}$$

Доказательство. Обозначим

$$D = \begin{bmatrix} -I_l & d\Sigma^{-1}+Y^TW \\ 0 & -I_l \end{bmatrix}, \tag{4.8}$$

$D \in \mathbb{R}^{2l\times 2l}$. В терминах (4.4) для матрицы E_K можно вывести следующее выражение

$$\begin{aligned} E_K &= K_d - K_d^{(\varepsilon\alpha)} = \\ &= [Y,W]D[E_{Y_\varepsilon}, E_{W_{\varepsilon\alpha}}]^T + [E_{Y_{\varepsilon\alpha}}, E_{W_\varepsilon}]D[Y_\varepsilon, W_{\varepsilon\alpha}]^T. \end{aligned} \tag{4.9}$$

Далее

$$||[E_{Y_{\varepsilon\alpha}}, E_{W_\varepsilon}]D|| \leq ||E_{Y_{\varepsilon\alpha}}|| + ||E_{W_\varepsilon}|| + ||E_{Y_{\varepsilon\alpha}}(d\Sigma^{-1}+Y^TW)|| \leq 3\varepsilon+d\alpha,$$

аналогично
$$||[E_{Y_\varepsilon}, E_{W_{\varepsilon\alpha}}]D^T|| \leq 3\varepsilon + d\alpha.$$
Учитывая неравенства
$$||[Y, W]|| \leq \sqrt{2}$$
и
$$||[Y_\varepsilon, W_{\varepsilon\alpha}]|| = ||[Y, W] - [E_{Y_\varepsilon}, E_{W_{\varepsilon\alpha}}]|| \leq \sqrt{2} + \sqrt{2}\varepsilon,$$
из соотношения (4.9) получим оценку
$$||E_K|| \leq \sqrt{2}(3\varepsilon + d\alpha) + (\sqrt{2} + \sqrt{2}\varepsilon)(3\varepsilon + d\alpha) \leq 2\sqrt{2}(1+\varepsilon)(3\varepsilon + d\alpha).$$

Для матрицы $A[Y, Y', Y_k^\perp]$ имеет место QR разложение (3.43), поэтому
$$\sigma_{\max}(A) \leq \sqrt{\sigma^2_{\max}\left(\begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & \Sigma' \end{bmatrix}\right) + \sigma^2} = \sqrt{\sigma^2 + \max\{||\Sigma||^2, ||\Sigma'||^2\}},$$
теперь из (4.6) следует неравенство (4.7). □

Следствие 4.1. *Если для фиксированных d, ε и α имеет место неравенство*
$$2\sqrt{2}(1+\varepsilon)(3\varepsilon + d\alpha) < \min\{\frac{d}{||\Sigma||}, \sigma_{\min}(Y^T W)\}, \tag{4.10}$$
то оператор $K_d^{(\varepsilon\alpha)}$ является невырожденной матрицей.

Доказательство. Утверждение следствия 4.1 следует из оценки (4.6) утверждения 4.1 и из оценки (3.27) младшего сингулярного значения матрицы K_d. □

В дальнейшем изложении мы будем предполагать, что параметры ε и α достаточно малы, чтобы неравенство (4.10) было выполнено, т.е., оператор $K_d^{(\varepsilon\alpha)}$ невырожден.

Рассмотрим теперь корректирующие свойства $K_d^{(\varepsilon\alpha)}$. По аналогии с изложением в разделе 3.5, пусть $\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha} \in \mathbb{R}^{N\times(k-l)}$ – матрица с $k-l$ ортонормированными столбцами такая, что образ $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})$ по отношению к матрице $AK_d^{(\varepsilon\alpha)}$ есть подпространство $\mathrm{Span}\,(W')$. Строим матрицу $\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}$ по формулам, аналогичным формулам (3.44) и (3.45), а именно, вычисляем
$$\hat{Y}'_{\varepsilon\alpha} = \left(K_d^{(\varepsilon\alpha)}\right)^{-1} Y' \tag{4.11}$$

и пусть

$$\hat{Y}'_{\varepsilon\alpha} = \widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}\widetilde{R}'_{\varepsilon\alpha} \tag{4.12}$$

есть QR разложение матрицы $\hat{Y}'_{\varepsilon\alpha}$. Тогда образом подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})$ для $\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}$ из (4.12) по отношению к матрице $AK_d^{(\varepsilon\alpha)}$ является подпространство $\mathrm{Span}\,(W')$. Доказывается это утверждение таким же образом, как доказывалось аналогичное утверждение в разделе 3.5.

Теорема 4.11. *При фиксированных* $d > 0$, $\varepsilon, \alpha \geq 0$ *таких, что выполнено* (4.10), *пусть* γ, $0 < \gamma \leq \dfrac{\sqrt{2}}{3} < \dfrac{1}{2}$ *– некоторое положительное число такое, что имеет место неравенство*

$$2(2\varepsilon + \varepsilon^2) < \gamma \min\left\{\frac{d}{||\Sigma||}, \sigma_{\min}(Y^T W)\right\}. \tag{4.13}$$

Тогда имеют место неравенства:

$$\begin{cases} \lambda^+_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) \geq \lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') - ||AE_K||, \\ \Lambda^+_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) \leq \Lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') + ||AE_K||, \\ \sigma_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) \leq \begin{cases} \sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') + ||AE_K||, & l = k, \\ \sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') + ||AE_K|| + \eta||\Sigma'||, & l < k, \end{cases} \\ \text{где} \quad \begin{cases} 0 \leq \eta \leq \min\left\{1, \gamma\left[\dfrac{\gamma(1+\varepsilon)}{\varepsilon(1-\gamma)} + 2\right]\right\} & \text{при} \quad \varepsilon \neq 0, \\ \qquad \eta = 0 & \text{при} \quad \varepsilon = 0, \end{cases} \\ \mu_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) \geq \dfrac{\max\{\lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') - ||AE_K||, 0\}}{\sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') + ||AE_K|| + \eta||\Sigma'||}, \\ \sigma^-_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) \leq \sigma^-_{AK_d}(\widetilde{Y}') + ||AE_K||. \end{cases} \tag{4.14}$$

Доказательство. Из неравенства

$$2(2\varepsilon + \varepsilon^2) \leq \frac{\sqrt{2}}{3} 2\sqrt{2}(1+\varepsilon)3\varepsilon,$$

которое имеет место для любых неотрицательных ε, и из неравенства (4.10), гарантирующего невырожденность $K_d^{(\varepsilon\alpha)}$, получаем

$$2(2\varepsilon + \varepsilon^2) \leq \frac{\sqrt{2}}{3} 2\sqrt{2}(1+\varepsilon)(3\varepsilon + d\alpha) < \frac{\sqrt{2}}{3} \min\left\{\frac{d}{||\Sigma||}, \sigma_{\min}(Y^T W)\right\},$$

т.е., действительно существует такое положительное γ, $0 < \gamma \leq \frac{\sqrt{2}}{3}$, что выполнено неравенство (4.13).

Далее, образом подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})$ по отношению к матрице $AK_d^{(\varepsilon\alpha)}$ является подпространство $\mathrm{Span}\,(W')$, поэтому по определению

$$\lambda^+_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) = \min_{\substack{w\perp \mathrm{Span}\,(W')\\ ||w||\neq 0}} \frac{|(AK_d^{(\varepsilon\alpha)}w,w)|}{||w||^2} =$$

$$= \min_{\substack{w\perp \mathrm{Span}\,(W')\\ ||w||\neq 0}} \frac{|((AK_d - AE_K)w,w)|}{||w||^2} \geq$$

$$\geq \min_{\substack{w\perp \mathrm{Span}\,(W')\\ ||w||\neq 0}} \frac{|(AK_d w,w)|}{||w||^2} - ||AE_K|| = \lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') - ||AE_K||.$$

Аналогично доказывается неравенство

$$\Lambda^+_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) \leq \Lambda^+_{AK_d}(\widetilde{Y}') + ||AE_K||.$$

Далее, по определению

$$\sigma^-_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) = \left\| \left((W')^\perp\right)^T \, \frac{AK_d^{(\varepsilon\alpha)} - (AK_d^{(\varepsilon\alpha)})^T}{2}\, (W')^\perp \right\| =$$

$$= \left\| \left((W')^\perp\right)^T \left[\frac{AK_d - (AK_d)^T}{2} + \frac{(AE_K)^T - AE_K}{2}\right] (W')^\perp \right\| \leq$$

$$\leq \left\| \left((W')^\perp\right)^T \frac{AK_d - (AK_d)^T}{2} (W')^\perp \right\| + ||AE_K|| = \sigma^-_{AK_d}(\widetilde{Y}') + ||AE_K||.$$

Оценим $\sigma_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})$. По определению

$$\sigma_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}_{\varepsilon\alpha}) = \max_{\substack{y\perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})\\ ||y||\neq 0}} \frac{||AK_d^{(\varepsilon\alpha)}y||}{||y||}. \qquad (4.15)$$

Представим вектор $y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})$, $||y|| \neq 0$, из правой части (4.15) в виде

$$y = \widetilde{Y}'y_1 + (\widetilde{Y}')^\perp y_2, \qquad (4.16)$$

$||y_1|| \le ||y||$, $||y_2|| \le ||y||$; тогда из (4.15) следуют неравенства

$$\sigma_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) \le ||AE_K|| + \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})\\ ||y|| \ne 0}} \frac{||AK_d y||}{||y||} \le$$

$$\le ||AE_K|| + \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})\\ y = \widetilde{Y}' y_1 + (\widetilde{Y}')^{\perp} y_2\\ ||y|| \ne 0}} \frac{||AK_d \widetilde{Y}' y_1||}{||y||} + \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})\\ y = \widetilde{Y}' y_1 + (\widetilde{Y}')^{\perp} y_2\\ ||y|| \ne 0}} \frac{||AK_d (\widetilde{Y}')^{\perp} y_2||}{||y||} \le$$

$$\le ||AE_K|| + ||AK_d \widetilde{Y}'|| \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})\\ y = \widetilde{Y}' y_1 + (\widetilde{Y}')^{\perp} y_2\\ ||y|| \ne 0}} \frac{||y_1||}{||y||} + \max_{||y_2|| \ne 0} \frac{||AK_d (\widetilde{Y}')^{\perp} y_2||}{||y_2||}.$$

Для $AK_d\widetilde{Y}'$ в разделе 3.5 было получено выражение

$$AK_d \widetilde{Y}' = W' \Sigma' (\widetilde{R}')^{-1}. \tag{4.17}$$

Оценим $||(\widetilde{R}')^{-1}||$. Для этого из соотношения

$$K_d^{-1} Y' = \widetilde{Y} \widetilde{R}',$$

в котором Y' и $\widetilde{Y}'$ – матрицы с ортонормированными столбцами, выразим матрицу $(\widetilde{R}')^{-1}$ явно, получим

$$(\widetilde{R}')^{-1} = (Y')^T K_d \widetilde{Y}'. \tag{4.18}$$

Подставляя в (4.18) вместо K_d его явное выражение из (3.5), получим

$$||(\widetilde{R}')^{-1}|| = ||(Y')^T [Y, Y^{\perp}] \begin{bmatrix} d\Sigma^{-1} & 0 \\ 0 & (Y^{\perp})^T W^{\perp} \end{bmatrix} [W, W^{\perp}]^T \widetilde{Y}'|| \le$$

$$\le \left\| [0, I_{k-l}, 0] \begin{bmatrix} d\Sigma^{-1} & 0 \\ 0 & (Y^{\perp})^T W^{\perp} \end{bmatrix} \right\| \le ||(Y^{\perp})^T W^{\perp}|| \le 1. \tag{4.19}$$

Теперь из (4.17) и из определения $\sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}')$ получим

$$\sigma_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}) \le \sigma_{AK_d}(\widetilde{Y}') + ||AE_K|| + \eta ||\Sigma'||, \tag{4.20}$$

где

$$\eta = \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})\\ y = \widetilde{Y}' y_1 + (\widetilde{Y}')^{\perp} y_2\\ ||y|| \ne 0}} \frac{||y_1||}{||y||}.$$

Из неравенства $\dfrac{||y_1||}{||y||} \le 1$ и из определения η следует оценка $0 \le \eta \le 1$. Уточним эту оценку для малых ε и γ.

По определению $\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}$ условие $y \perp \mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})$ можно записать в виде

$$(Y')^T (K_d^{(\varepsilon\alpha)})^{-T} y = 0. \tag{4.21}$$

Чтобы вывести условия, которые накладывает соотношение (4.21) на вектор y, найдем явную связь между матрицами $(K_d^{(\varepsilon\alpha)})^{-T}$ и $(K_d)^{-T}$.

Если ввести обозначение (4.8) и обозначения

$$U = [Y, W], \quad V = [Y, W], \quad U_{\varepsilon\alpha} = [Y_{\varepsilon\alpha}, W_\varepsilon], \quad V_{\varepsilon\alpha} = [Y_\varepsilon, W_{\varepsilon\alpha}], \tag{4.22}$$

то матрицы K_d и $K_d^{(\varepsilon\alpha)}$ имеют вид

$$K_d = I_N + UDV^T, \quad K_d^{(\varepsilon\alpha)} = I_N + U_{\varepsilon\alpha} D V_{\varepsilon\alpha}^T, \tag{4.23}$$

а матрицы K_d^{-1} и $(K_d^{(\varepsilon\alpha)})^{-1}$ имеют вид

$$K_d^{-1} = I_N + UZV^T, \quad \left(K_d^{(\varepsilon\alpha)}\right)^{-1} = I_N + U_{\varepsilon\alpha} Z_{\varepsilon\alpha} V_{\varepsilon\alpha}^T, \tag{4.24}$$

где матрицы $Z \in \mathbb{R}^{2l\times 2l}$ и $Z_{\varepsilon\alpha} \in \mathbb{R}^{2l\times 2l}$ по построению удовлетворяют уравнениям

$$D + Z + DV^T UZ = 0 \tag{4.25}$$

и

$$D + Z_{\varepsilon\alpha} + DV_{\varepsilon\alpha}^T U_{\varepsilon\alpha} Z_{\varepsilon\alpha} = 0 \tag{4.26}$$

соответственно, причем из утверждения 3.4 следует, что матрица Z имеет вид

$$Z = \begin{bmatrix} 0 & -(Y^T W)^{-T} \\ \dfrac{\Sigma}{d} & 0 \end{bmatrix}. \tag{4.27}$$

Обозначим

$$E_{V^TU} = V^T U - V_{\varepsilon\alpha}^T U_{\varepsilon\alpha}, \tag{4.28}$$

тогда из (4.22) и (4.4) получаем

$$E_{V^TU} =$$
$$\begin{bmatrix} Y^T E_{Y_{\varepsilon\alpha}} + E_{Y_\varepsilon}{}^T Y - E_{Y_\varepsilon}{}^T E_{Y_{\varepsilon\alpha}} & E_{Y_\varepsilon}{}^T W + Y^T E_{W_{\varepsilon\alpha}} + E_{Y_\varepsilon}{}^T E_{W_{\varepsilon\alpha}} \\ E_{W_{\varepsilon\alpha}}{}^T Y + W^T E_{Y_\varepsilon} - E_{W_{\varepsilon\alpha}}{}^T E_{Y_\varepsilon} & W^T E_{W_\varepsilon} + E_{W_{\varepsilon\alpha}}{}^T W - E_{W_{\varepsilon\alpha}}{}^T E_{W_\varepsilon} \end{bmatrix}.$$

В силу неравенств (4.5) и равенств $||Y|| = ||W|| = 1$ отсюда получаем оценку

$$||E_{V^TU}|| \le$$
$$\le \left\| \begin{bmatrix} E^{(11)}_{V^TU} & 0 \\ 0 & E^{(22)}_{V^TU} \end{bmatrix} \right\| + \left\| \begin{bmatrix} 0 & E^{(12)}_{V^TU} \\ E^{(21)}_{V^TU} & 0 \end{bmatrix} \right\| \le 2(2\varepsilon + \varepsilon^2). \quad (4.29)$$

Обозначим

$$E_Z = Z - Z_{\varepsilon\alpha}, \quad (4.30)$$

вычитая (4.26) из (4.27), получим равенство

$$E_Z + D[-E_{V^TU}Z + E_{V^TU}E_Z + V^TUE_Z] = 0. \quad (4.31)$$

Но из равенства (4.25) следует равенство

$$I_{2l} + DV^TU = -DZ^{-1},$$

поэтому равенство (4.31) можно записать в виде

$$D[-E_{V^TU}Z + E_{V^TU}E_Z] - DZ^{-1}E_Z = 0,$$

откуда в силу невырожденности D окончательно получаем матричное уравнение для матрицы E_Z:

$$(Z^{-1} - E_{V^TU})E_Z = E_{V^TU}Z. \quad (4.32)$$

Из (4.27) для матрицы Z^{-1} получается следующее выражение

$$Z^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & d\Sigma^{-1} \\ -(Y^TW)^T & 0 \end{bmatrix},$$

поэтому

$$\sigma_{\min}(Z^{-1}) = \min\left\{\frac{d}{||\Sigma||}, \sigma_{\min}(Y^TW)\right\} = \sigma_{\min}(K_d), \quad (4.33)$$

где последнее равенство следует из равенства (3.27) утверждения 3.4. Равенство (4.33) также означает, что

$$||Z|| = \frac{1}{\sigma_{\min}(Z^{-1})} = \frac{1}{\sigma_{\min}(K_d)}. \quad (4.34)$$

Неравенства (4.29) совместно с неравенствами (4.33) и (4.13) означают, что

$$||E_{V^TU}|| < \gamma\sigma_{\min}(Z^{-1}) = \gamma\sigma_{\min}(K_d),$$

поэтому

$$||(Z^{-1} - E_{V^TU})^{-1}|| < \frac{1}{(1-\gamma)\sigma_{\min}(K_d)},$$

$$||E_{V^TU}|| \, ||Z|| < \gamma \frac{\sigma_{\min}(K_d)}{\sigma_{\min}(K_d)} = \gamma$$

и

$$||E_Z|| \leq ||(Z^{-1} - E_{V^TU})^{-1}|| \, ||E_{V^TU}|| \, ||Z|| < \frac{\gamma}{1-\gamma} \, \frac{1}{\sigma_{\min}(K_d)}. \quad (4.35)$$

Теперь

$$\begin{aligned}\left(K_d^{(\varepsilon\alpha)}\right)^{-T} &= I_N + [Y_\varepsilon, W_{\varepsilon\alpha}](Z - E_Z)^T[Y_{\varepsilon\alpha}, W_\varepsilon]^T = \\ &= I_N + [Y,W]Z^T[Y,W]^T - [Y_\varepsilon W_{\varepsilon\alpha}]E_Z^T[Y_{\varepsilon\alpha} W_\varepsilon]^T - \\ &- [E_{Y_\varepsilon}, E_{W_{\varepsilon\alpha}}]Z^T[Y_{\varepsilon\alpha}, W_\varepsilon]^T - [Y,W]Z^T[E_{Y_{\varepsilon\alpha}}, E_{W_\varepsilon}]^T = \\ &= (K_d)^{-T} + \Psi,\end{aligned}$$

где для матрицы $\Psi = (K_d^{(\varepsilon\alpha)})^{-T} - (K_d)^{-T}$ из неравенств $||[Y,W]|| \leq \sqrt{2}$, $||[Y_{\varepsilon\alpha}, W_\varepsilon]|| \leq \sqrt{2}(1+\varepsilon)$, $||[E_{Y_\varepsilon}, E_{W_{\varepsilon\alpha}}]|| \leq \sqrt{2}\varepsilon$, $||[E_{Y_{\varepsilon\alpha}}, E_{W_\varepsilon}]|| \leq \sqrt{2}\varepsilon$, $||Z|| = \dfrac{1}{\sigma_{\min}(K_d)}$ и $||E_Z|| \leq \dfrac{\gamma}{1-\gamma}\dfrac{1}{\sigma_{\min}(K_d)}$ получаем неравенства

$$\begin{aligned}||\Psi|| &\leq ||E_Z|| \, ||[Y_\varepsilon, W_{\varepsilon\alpha}]|| \, ||[Y_{\varepsilon\alpha}, W_\varepsilon]|| + ||Z|| \, ||[E_{Y_\varepsilon}, E_{W_{\varepsilon\alpha}}]|| \, ||[Y_{\varepsilon\alpha}, W_\varepsilon]|| + \\ &+ ||Z|| \, ||[Y,W]|| \, ||[E_{Y_{\varepsilon\alpha}}, E_{W_\varepsilon}]|| \leq \frac{2(1+\varepsilon)}{\sigma_{\min}(K_d)} \left[\frac{\gamma}{1-\gamma}(1+\varepsilon) + 2\varepsilon\right]. \quad (4.36)\end{aligned}$$

Окончательно оценим сверху величину η. Имеем неравенства

$$\begin{aligned}\frac{||y_1||}{||y||} = \frac{||(\widetilde{Y}')^T y||}{||y||} &= \frac{||(\widetilde{R}')^{-T}(Y')^T K_d^{-T} y||}{||y||} = \\ &= \frac{||(\widetilde{R}')^{-T}(Y')^T \Psi y||}{||y||} \leq ||\Psi|| \, ||(\widetilde{R}')^{-1}||,\end{aligned} \quad (4.37)$$

здесь предпоследнее равенство следует из равенства

$$0 = (Y')^T (K_d^{(\varepsilon\alpha)})^{-T} y = (Y')^T((K_d)^{-T} + \Psi)y.$$

Объединяя (4.37), (4.36) и (4.19), получим следующую уточненную оценку величины η в случае малых ε и γ:

$$\eta \leq \frac{2(1+\varepsilon)\left[\dfrac{\gamma}{1-\gamma}(1+\varepsilon)+2\varepsilon\right]}{\sigma_{\min}(K_d)}. \tag{4.38}$$

Учитывая равенство (4.33) и неравенство (4.13) из неравенства (4.38) при $\varepsilon \neq 0$ после простых преобразований получаем неравенство

$$\eta \leq \gamma\left[\frac{\gamma}{\varepsilon}\,\frac{(1+\varepsilon)}{(1-\gamma)}+2\right]. \tag{4.39}$$

При $\varepsilon = 0$ неравенство (4.13) имеет место при произвольно малом γ, поэтому в случае $\varepsilon = 0$ из неравенства (4.38) получаем равенство $\eta = 0$. □

5. Реализация алгоритмов

В предыдущих разделах этой работы были представлены абстрактные алгебраические конструкции, которые можно тем или иным способом использовать в том или ином контексте в соответствующих вычислительных алгоритмах. В этом разделе излагаются вычислительные алгоритмы, использующие изложенные ранее алгебраические конструкции, в контексте итерационных алгоритмов решения переобусловленных систем линейных уравнений.

Изложение этого раздела построено следующим образом. В пункте 5.1 излагается вычислительный алгоритм построения (ε, α) аппроксимации оператора коррекции. В пункте 5.2 приводится полный итерационный алгоритм решения переобусловленной системы линейных уравнений.

5.1. Вычислительный алгоритм построения (ε, α) аппроксимации оператора коррекции.

Рассмотрим оператор коррекции вида (4.1), т.е.,

$$K_d = I_N + [Y,\ W]\begin{bmatrix} -I_l & d\Sigma^{-1}+Y^TW \\ 0 & -I_l \end{bmatrix}[Y,\ W]^T, \tag{5.1}$$

где $Y,\ W \in \mathbb{R}^{N\times l}$ – известные прямоугольные матрицы с ортонормированными столбцами, $\Sigma \in \mathbb{R}^{l\times l}$ – известная квадратная матрица с положительными диагональными элементами. В соответствии с определением 4.1 из раздела 4 для построения (ε, α) аппроксимации (4.2) оператора коррекции (5.1), где ε и α – заданные неотрицательные числа, необходимо построить матрицы Y_ε, W_ε, $Y_{\varepsilon\alpha}$ и $W_{\varepsilon\alpha} \in \mathbb{R}^{N\times l}$ такие, что имеют место неравенства (4.3), т.е.,

$$\begin{cases} \|Y - Y_\varepsilon\| & \leq \varepsilon, & \\ \|W - W_\varepsilon\| & \leq \varepsilon, & \\ \|Y - Y_{\varepsilon\alpha}\| & \leq \varepsilon, & \|(Y - Y_{\varepsilon\alpha})\Sigma^{-1}\| \leq \alpha, \\ \|W - W_{\varepsilon\alpha}\| & \leq \varepsilon, & \|(W - W_{\varepsilon\alpha})\Sigma^{-1}\| \leq \alpha. \end{cases} \tag{5.2}$$

Прежде всего заметим, что Y и W – матрицы с ортонормированными столбцами. Поэтому если при приближении i-го столбца каждой из этих матриц некоторым другим столбцом сделана некоторая ошибка, то вероятнее всего векторы ошибок для разных столбцов практически ортогональны между собой. В силу свойств евклидовой нормы это означает, что условия (5.2) можно без ограничения общности переписать в следующем виде:

$$\begin{cases} \|\{Y\}_{*,i} - \{Y_\varepsilon\}_{*,i}\| \leq \varepsilon, \ i = 1, \ldots, l; \\ \|\{W\}_{*,i} - \{W_\varepsilon\}_{*,i}\| \leq \varepsilon, \ i = 1, \ldots, l; \\ \|\{Y\}_{*,i} - \{Y_{\varepsilon\alpha}\}_{*,i}\| \leq \varepsilon, \ \|(\{Y\}_{*,i} - \{Y_{\varepsilon\alpha}\}_{*,i})\{\Sigma\}^{-1}_{i,i}\| \leq \alpha, \ i = 1, \ldots, l; \\ \|\{W\}_{*,i} - \{W_{\varepsilon\alpha}\}_{*,i}\| \leq \varepsilon, \ \|(\{W\}_{*,i} - \{W_{\varepsilon\alpha}\}_{*,i})\{\Sigma\}^{-1}_{i,i}\| \leq \alpha, \ i = 1, \ldots, l. \end{cases} \tag{5.3}$$

Действительно, если из неравенств (5.3) не следуют неравенства (5.2), то очевидно в условиях (5.3) можно заменить параметры ε и α на параметры ε' и α' соответственно такие, что $0 \leq \varepsilon' \leq \varepsilon$, $0 \leq \alpha' \leq \alpha$ и что из неравенств (5.3) будут следовать неравенства (5.2) с исходными ε и α.

Условия (5.3) означают, что задача построения (ε, α) аппроксимации свелась к $4l$ задачам построения вектора, приближающего заданный вектор с некоторой точностью, зависящей от ε, α и Σ. Ниже мы представим алгоритм решения этой задачи для столбцов матриц Y_ε и $Y_{\varepsilon\alpha}$; для столбцов матриц W_ε и $W_{\varepsilon\alpha}$ задача решается аналогично.

Для i-го столбца $y_{\varepsilon\alpha,i}$ матрицы $Y_{\varepsilon\alpha}$ имеются два условия аппроксимации:

$$\|y_i - y_{\varepsilon\alpha,i}\| \leq \varepsilon, \qquad \|(y_i - y_{\varepsilon\alpha,i})\{\Sigma\}^{-1}_{ii}\| \leq \alpha, \tag{5.4}$$

где y_i – i-й столбец матрицы Y. В силу условия нормировки $\|y_i\| = 1$ условия (5.4) можно объединить в одно условие

$$\|y_i - y_{\varepsilon\alpha,i}\| \leq \min\{\varepsilon, \alpha\{\Sigma\}_{ii}\}\|y_i\|. \tag{5.5}$$

Обозначим
$$\beta_i = \min\{\varepsilon, \alpha\{\Sigma\}_{ii}\}.$$

Пусть по вектору y_i некоторым образом построен вектор $y_{\varepsilon\alpha,i}$ такой, что имеет место неравенство
$$||y_i - y_{\varepsilon\alpha,i}|| \le \beta_i\,||y_i||.$$

Для этого можно, например, использовать технику округленного хранения вещественных массивов в виде упакованных массивов целых чисел. Учитывая предыдущее неравенство и условие на вектор $y_{\varepsilon,i}$ вида
$$||y_i - y_{\varepsilon,i}|| \le \varepsilon\,||y_i|| \tag{5.6}$$
получаем, что неравенство (5.6) будет выполнено, если вектор $y_{\varepsilon,i}$ строить по вектору $y_{\varepsilon\alpha,i}$ с выполнением условия
$$||y_{\varepsilon\alpha,i} - y_{\varepsilon,i}|| \le (\varepsilon - \beta_i)\,||y_i||. \tag{5.7}$$

Действительно, если неравенство (5.7) выполнено, то в силу неравенства треугольника
$$\begin{aligned}||y_i - y_{\varepsilon,i}|| &\le ||y_i - y_{\varepsilon\alpha,i}|| + ||y_{\varepsilon\alpha,i} - y_{\varepsilon,i}|| \le \\ &\le \beta_i||y_i|| + (\varepsilon - \beta_i)||y_i|| = \varepsilon\,||y_i||.\end{aligned}$$

Для того, чтобы неравенство (5.7) имело место, структуру разреженности вектора $y_{\varepsilon,i}$ будем строить следующим образом. Все элементы вектора $y_{\varepsilon\alpha,i}$, по модулю большие или равные величине $(\varepsilon - \beta_i)$, оставляем в векторе $y_{\varepsilon,i}$. Все элементы вектора $y_{\varepsilon\alpha,i}$, по модулю меньшие величины $\dfrac{\varepsilon - \beta_i}{\sqrt{N}}$, исключаем из структуры вектора $y_{\varepsilon,i}$, а сделанную при этом ошибку суммируем в смысле евклидовой нормы; она, очевидно, будет не больше, чем $(\varepsilon - \beta_i)$. По остающимся элементам строим гистограмму распределения модулей этих элементов вектора. По этой гистограмме с учетом уже сделанной ошибки окончательно определяем порог модулей элементов вектора $y_{\varepsilon\alpha,i}$, при обнулении которых из вектора $y_{\varepsilon\alpha,i}$ неравенство (5.7) для результирующего вектора $y_{\varepsilon,i}$ будет выполнено.

5.2. Итерационный алгоритм решения системы линейных уравнений.

В этом разделе излагается алгоритм решения системы линейных алгебраических уравнений, основанный на описанном в работе [1] алгоритме SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией, в котором для уменьшения полных арифметических затрат и затрат памяти при рестартах алгоритма строятся соответствующие операторы коррекции и их (ε, α) аппроксимации.

Кратко напомним некоторые изложенные в работе [1] обозначения, алгебраические конструкции, алгоритмы и теоретические оценки, связанные с алгоритмом SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией.

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b, \tag{5.8}$$

где $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ – заданная невырожденная, возможно незнакоопределенная несимметричная матрица, $b \in \mathbb{R}^N$ – заданный вектор правой части, $x \in \mathbb{R}^N$ – искомый вектор решения.

В алгоритме SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией ключевую роль играют следующие матричные соотношения

$$\left\{ \begin{array}{ccc} AY_k & = & P_{k+1}H_k, \\ Y_k^T Y_k & = & I_k, \\ P_{k+1}^T P_{k+1} & = & I_{k+1}, \\ b & = & P_{k+1}\gamma_{k+1}, \end{array} \right. \tag{5.9}$$

где $Y_k \in \mathbb{R}^{N\times k}$, $P_{k+1} \in \mathbb{R}^{N\times(k+1)}$, $H_k \in \mathbb{R}^{(k+1)\times k}$ – верхняя хессенбергова матрица, $\gamma_{k+1} \in \mathbb{R}^{(k+1)}$. В процессе итераций алгоритма SOFGMRES(m) соотношения (5.9) сначала достраиваются, т.е., в матрице Y_k появляются некоторые новые столбцы, которые являются не чем иным, как ортогонализованными к предыдущим столбцам матрицы Y_k векторами невязки системы (5.8). Именно этот выбор новых направлений в матрице Y_k гарантирует сходимость алгоритма SOFGMRES(m) к решению системы (5.8). Новые направления в матрице Y_k используются для того, чтобы расширить соотношения (5.9). А именно, производится умножение новых направлений на матрицу A, а затем проводятся необходимые ортогонализации, чтобы снова получились соотношения типа (5.9), но с большим количеством столбцов в матрицах Y_k и P_{k+1}. В дальнейшем расширенные соотношения типа (5.9) фильтруются. Это означает, что среди новых направлений, добавленных в Y_k, некоторым специальным образом выбираются только те ортонормированные линейные комбинации, которые необходимы для дальнейших вычислений. Это линейные комбинации, гарантирующие монотонность падения нормы невязки системы (5.8) при рестартах, а также линейные комбинации, гарантирующие поддержание при рестартах высокой скорости сходимости алгоритма SOFGMRES(m) в смысле падения нормы невязки системы (5.8). После того, как все необходимые линейные комбинации новых направлений найдены, все ранее добавленные в (5.9) новые направления отбрасываются, а в соотношения (5.9) добавляются только отобранные их линейные комбинации, и т.д. После нескольких рестартов алгоритма SOFGMRES(m) накопленные при разных рестартах алгоритма в соотношениях (5.9) новые направления фильтруются совместно, и т.д.

В основе теории сходимости и механизмов фильтрации алгоритма SOFGMRES(m) лежит следующее утверждение.

Теорема 5.1 ([1]). *Имеет место неравенство*

$$||r_{k+1}|| \le ||r_k||\sqrt{1-\mu_A^2(Y_k)}, \tag{5.10}$$

где r_k *– невязка системы* (5.8) *для соотношений* (5.9)*,* r_{k+1} *– невязка системы* (5.8) *для расширенных соотношений* (5.9) *при добавлении текущего вектора направлений, а* $\mu_A(Y_k)$ *– введенная в разделе* 2 *характеристика подпространства* $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ *по отношению к матрице* A*.*

Следуя работе [1], покажем, что соотношения (5.9) легко можно преобразовать к виду (3.1) с соответствующими матрицами W_k и R_k, тем самым результат такого преобразования может быть использован для построения оператора коррекции.

Матрица H_k в соотношениях (5.9) по предположению верхняя хессенбергова, поэтому существует набор вращений Гивенса $G_i \in \mathbb{R}^{(k+1)\times(k+1)}$, $i=1,\ldots,k$,

$$G_i = \begin{bmatrix} I_{i-1} & & & 0 \\ & c_i & s_i & \\ & -s_i & c_i & \\ 0 & & & I_{k-i} \end{bmatrix}, \quad c_i^2+s_i^2=1,$$

такой, что

$$H_k = Q_k \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{5.11}$$

где

$$Q_k = G_1 \cdots G_k$$

– ортогональная матрица, которая представляет собой произведение вращений Гивенса, R_k – верхняя треугольная матрица. Равенство (5.11) является QR-разложением матрицы H_k.

Обозначим

$$W_k = P_{k+1} Q_k \begin{bmatrix} I_k \\ 0 \end{bmatrix}. \qquad (5.12)$$

Очевидно, что для матрицы $W_k \in \mathbb{R}^{N \times k}$ имеет место соотношение ортогональности

$$W_k^T W_k = I_k. \qquad (5.13)$$

Первое из равенств (5.9) с использованием (5.11) и (5.12) можно теперь переписать в виде

$$\begin{aligned} AY_k = P_{k+1} H_k = P_{k+1} Q_k \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix} = \\ = P_{k+1} Q_k \begin{bmatrix} I_k \\ 0 \end{bmatrix} R_k = W_k R_k. \end{aligned} \qquad (5.14)$$

Объединяя (5.14), (5.13) и (5.9), получаем соотношения (3.1).

Объединяя алгоритм SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией из [1] с изложенной в разделах 3–5 этой работы техникой построения оператора коррекции и техникой вычисления его (ε, α) аппроксимации, получаем следующий комбинированный итерационный алгоритм решения системы линейных алгебраических уравнений (5.8):

Алгоритм (cs)SOFGMRES (SOFGMRES algorithm with Correction and Sparsification)

Step 0. Инициализация:

$x_0 = 0$; $r_0 = b$;

For $s = 1, \ldots, s_{\max}$ Do (Внешний цикл: рестарты)

Пусть для некоторого k имеют место соотношения (5.9), где в качестве правой части используется текущая невязка r_{s-1};

Stage I: построение расширенных матричных соотношений

Начиная с соотношений (5.9), проводим один глобальный цикл итераций алгоритма SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией;

If (в процессе итераций найдено решение системы (5.8) с заданной точностью) Then

Stop

End If

End Stage I

В результате выполнения Stage I после окончания итераций получаем расширенные матричные соотношения вида (5.9), но уже с $k+l$ столбцами, $l \geq 0$. Переобозначим $k := k+l$. В результате выполнения Stage I также получаем новое приближение x_s к решению системы (5.8). Вычисляем новую невязку $r_s = b - Ax_s$;

Stage II: построение (ε, α) аппроксимации оператора коррекции

Step 1. Соотношения (5.9) преобразуются к виду (3.1);

Step 2. Для заданного порога μ_{thr} производится расщепление подпространств $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ и $\mathrm{Span}\,(W_k)$ в соответствии с изложением раздела 3.5;

Step 3. Для выбранных порогов ε и α вычисляется невырожденная (ε, α) аппроксимация $K_d^{(\varepsilon\alpha)}$ оператора коррекции с $d = 1$, как это описано в разделе 4 и в пункте 5.1 раздела 5;

Step 4. В соответствии с расщеплением (3.39) по формулам (4.11) и (4.12) строим матрицу с ортонормированными столбцами $\tilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}$;

End Stage II

В результате выполнения Stage II построен и сохранен в упакованном виде оператор коррекции $K_d^{(\varepsilon\alpha)}$ и матрица $\tilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}$ с $k - l$ ортонормированными столбцами;

Stage III: рестарт

Переобозначим $k := k - l$, $A := AK_d^{(\varepsilon\alpha)}$, $Y_k := \tilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}$;

В соответствии с новыми обозначениями строим соотношения (5.9), где в качестве правой части b используется текущий вектор невязки r_s;

End Stage III

End For

Для обоснования представленного выше алгоритма (cs)SOFGMRES достаточно показать, что при правильном выборе порога расщепления подпространств μ_{thr} и порогов (ε, α) аппроксимации оператора коррекции свойства сходимости приведенного выше алгоритма не должны сильно отличаться от свойств сходимости алгоритма SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией, в котором вместо построения операторов коррекции в соотношениях (5.9) последовательно накапливаются вектора направлений.

Действительно, в соответствии с теоремой 5.1, свойства сходимости алгоритма SOFGMRES(m) определяются свойствами характеристики $\mu_A(Y_k)$ подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ по отношению к матрице A. Но в оценках теоремы 3.3 показано, что при правильном выборе расщепления подпространств $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ и $\mathrm{Span}\,(W_k)$ величина $\mu_{AK_d}(\widetilde{Y}')$ слабо зависит от конкретного вида расщепления и не сильно отличается от величины $\mu_A(Y_k)$. С другой стороны, в оценках теоремы 4.1 показано, что при достаточно малых ε и α величина $\mu_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha})$, которая будет определять сходимость алгоритма (cs)SOFGMRES после рестарта, не сильно отличается от величины $\mu_{AK_d}(\widetilde{Y}')$. Получили цепочку приближенных равенств

$$\mu_A(Y_k) \approx \mu_{AK_d}(\widetilde{Y}') \approx \mu_{AK_d^{(\varepsilon\alpha)}}(\widetilde{Y}'_{\varepsilon\alpha}),$$

что в силу теории сходимости алгоритма SOFGMRES(m) доказывает требуемое утверждение.

В работе [1] также показано, каким образом в процессе итераций алгоритма SOFGMRES(m) можно оценивать величины $\lambda_A^+(Y_k)$ и $\sigma_A(Y_k)$ для текущего начального подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ и, тем самым, как можно оценивать величину $\mu_A(Y_k)$. Если использовать эту технику в алгоритме (cs)SOFGMRES, то это означает, что в процессе итераций этого алгоритма можно не только последовательно корректировать переобуславливание для улучшения его качества, но и получать апостериорные оценки качества уже построенного к текущему моменту откорректированного переобуславливания. Именно такую последовательность действий, когда переобуславливатель уточняется, а затем его текущее качество контролируется и, при необходимости, снова улучшается, и т.д., естественно называть *мультипликативной коррекцией матрицы на последовательности подпространств.*

Подчеркнем, что в алгоритме (cs)SOFGMRES коррекция переобуславливания не является самоцелью, а происходит исключительно как побочный результат основного процесса итерационного решения системы линейных уравнений (5.8). Именно по этой причине число итераций в алгоритме (cs)SOFGMRES при решении системы (5.8) как правило не сильно отличается от числа итераций алгоритма GMRES(∞) для этой же системы.

6. Заключение

В работе построена в общем несимметричном незнакоопределенном случае алгебраическая техника, позволяющая конструировать матричные корректоры вида

$$K = (I_N - YY^T)(I_N - WW^T) + YR^{-1}W.$$

Предложенная теория сходимости алгоритмов типа SOFGMRES(m), применяемых для построения матричных корректоров K, позволяет не только оценивать спектральные/сингулярные свойства соответствующей переобусловленной матрицы, но также позволяет оптимизировать свойства K на основе вычислимых оценок. Как показано в работе, предлагаемая теория в некотором смысле позволяет строить корректоры K с практически любым наперед заданным качеством переобуславливания. В работе рассматриваются также способы построения (ε, α) аппроксимации матричных корректоров с использованием техники расщепления подпространств. В результате удается представить единый корректор матрицы в мультипликативном виде с так называемыми "разреженными" корректорами $K^{(\varepsilon,\alpha)}$ в качестве факторов, что позволяет значительно сократить арифметические затраты и затраты памяти при контролируемом ухудшении качества $K^{(\varepsilon,\alpha)}$ по сравнению с K.

В численной практике предлагаемая техника построения корректоров может применяться для решения самых различных задач. Во второй части данной работы мы планируем численно исследовать возможности техники конструирования матричных корректоров при построении многоуровневых итерационных методов решения линейных систем с невырожденными матрицами коэффициентов.

Литература

1. С. А. Харченко, А. Ю. Еремин, *Новые алгоритмы типа* GMRES(k) *с явными рестартами и анализ их свойств сходимости на основе QR формы матричных соотношений.* — Зап. научн. семин. ПОМИ, **268** (2000), 190–241.

2. В. В. Воеводин, *Вычислительные основы линейной алгебры.* Наука, М. (1977).
3. Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун, *Матричные вычисления.* Мир, М. (1999).

Kharchenko S. A. and Yeremin A. Yu. Multiplicative correction of a matrix on a sequence of subspaces. I: Basic algorithms and theory for general unsymmetric matrices.

The paper considers the problem of a guaranteed improvement of matrix properties by preconditioning. An algorithm for constructing the so-called basic correctors, differing from the identity matrix by a small-rank term, is suggested. A basic corrector improves the matrix action on a subspace of small dimension and provides a possibility of controlling its action on the complementary subspace. In the algorithm suggested, basic correctors are computed by using the operation of multiplying the original matrix by a vector. The resulting preconditioner is a composition of basic correctors. Its nonsingularity is guaranteed in the general unsymmetric and indefinite case, and estimates enabling one to predict the convergence properties of the corresponding iterative algorithm are obtained. In order to reduce the arithmetic and memory costs, it is suggested to replace basic correctors by their approximations. Estimates for the resulting deterioration of the preconditioning quality are presented.

Вычислительный Центр РАН
kharchen@ccas.ru

Поступило 15 октября2001 г.

Научно-исследовательский
Вычислительный Центр МГУ
badger@vvv.srcc.msu.su