

АлгоВики: некоторые аспекты исследований свойств алгоритмов на примере метода Хаусхолдера

А.В. Фролов¹, А.М. Теплов²

¹ИВМ РАН

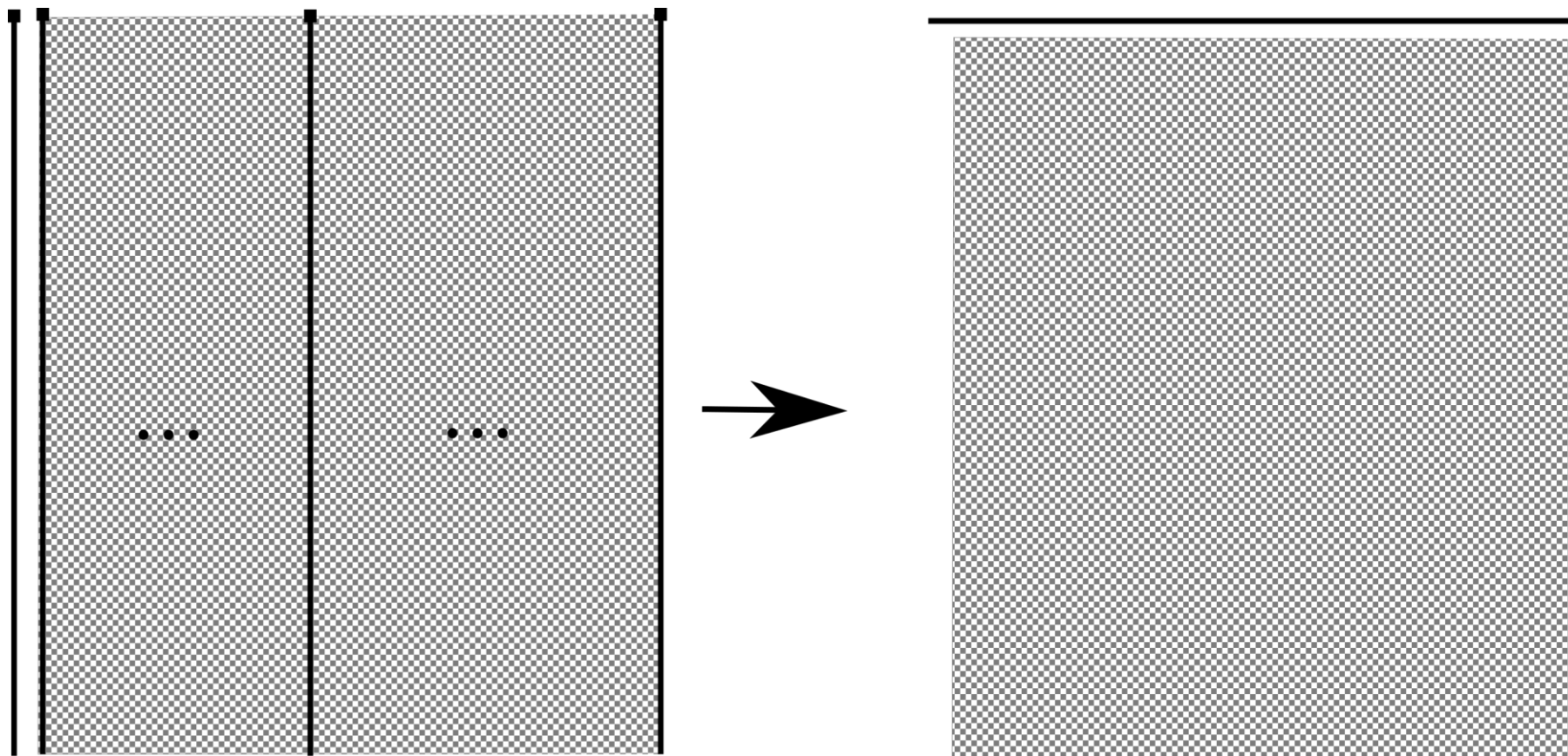
²НИВЦ МГУ

Тестирование алгоритмов и систем

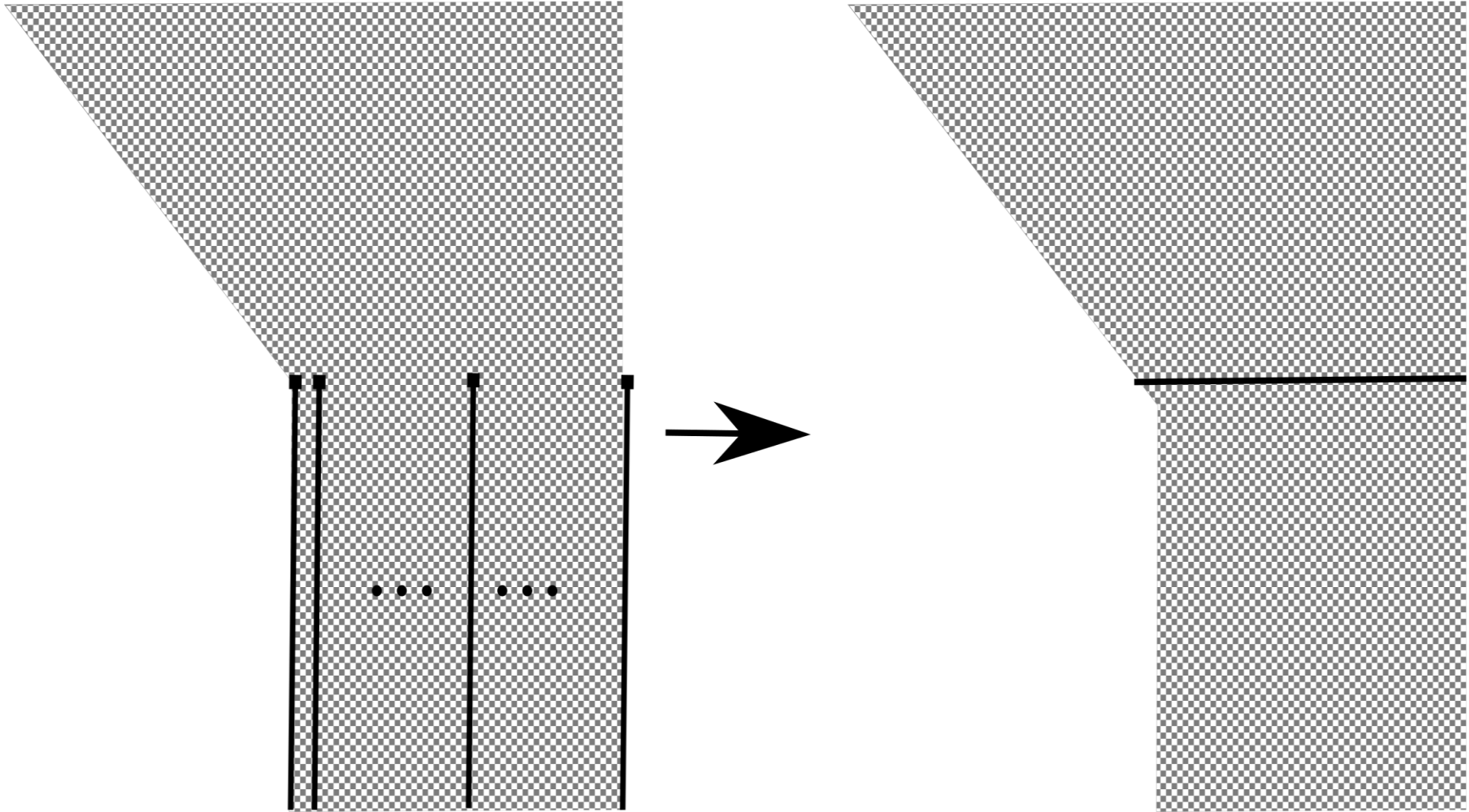
LINPACK, HPCG,...

...QR-разложение методом Хаусхолдера?

1й шаг метода Хаусхолдера



i -й шаг метода Хаусхолдера



Всего при преобразовании матрицы
общего вида в методе Хаусхолдера
выполняется $4n^3/3$ операций

А при преобразовании r -ранговой
модификации треугольной матрицы
общего вида в методе Хаусхолдера
выполняется только $O(rn^2)$ операций

Поскольку заранее неизвестно, какая матрица оказалась «на входе» алгоритма, то нужно для программ, содержащих ветвления по массовым группам операций, считать количество проделанной работы постфактум, по получившемуся разложению.

Критический путь графа алгоритма для QR-разложений

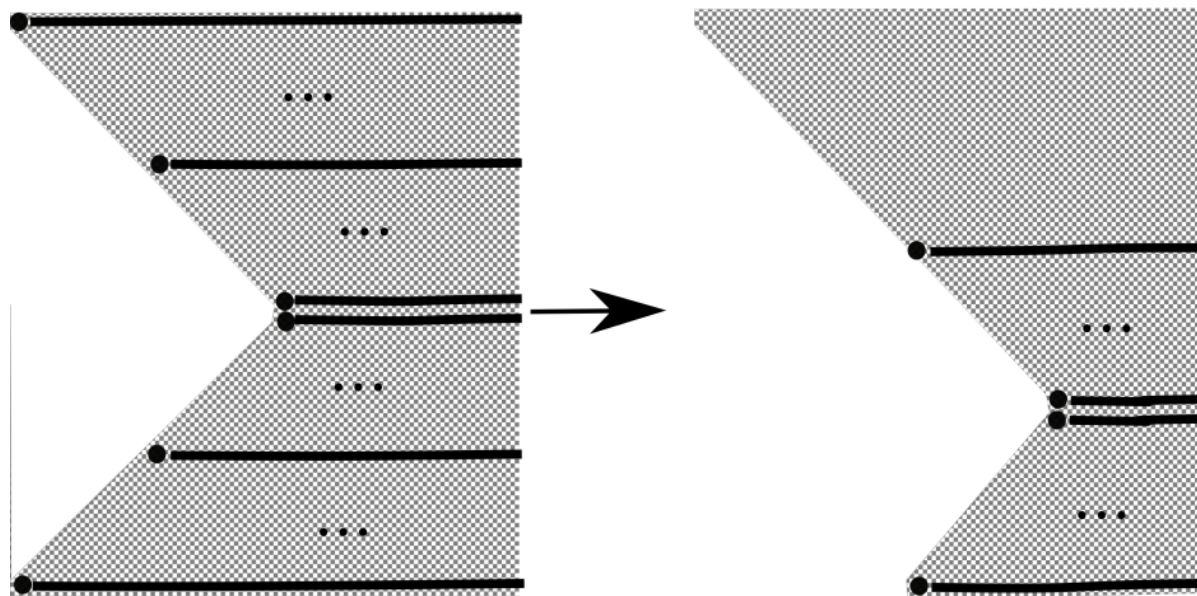
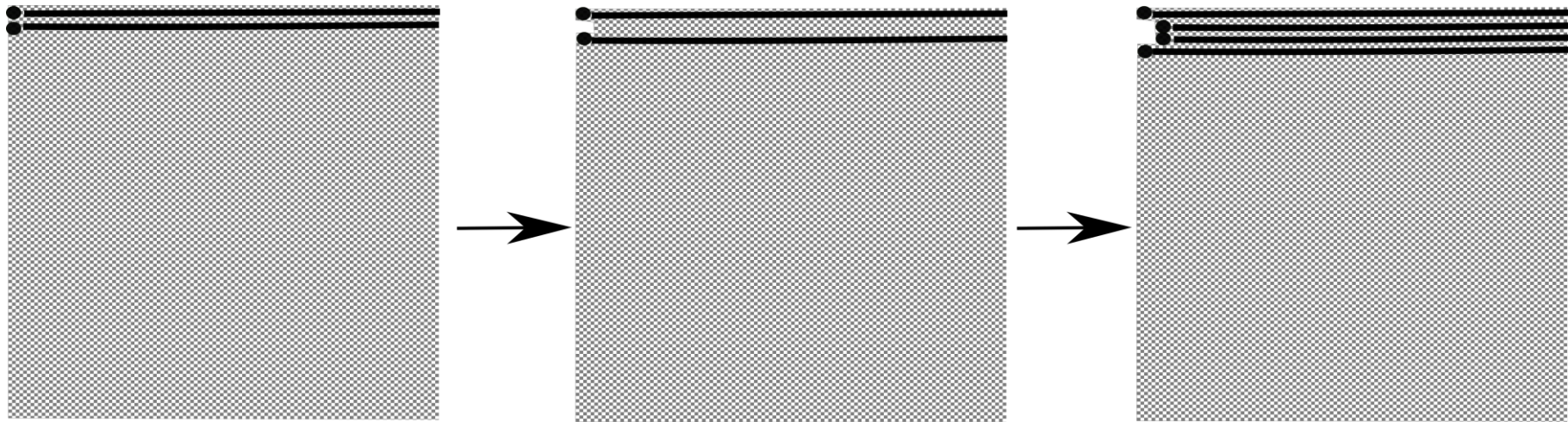
Исключены для рассмотрения:
ортогонализация и разложение Холецкого
для A^*A в произведение R^*R с $Q = AR^{-1}$

Остаются:

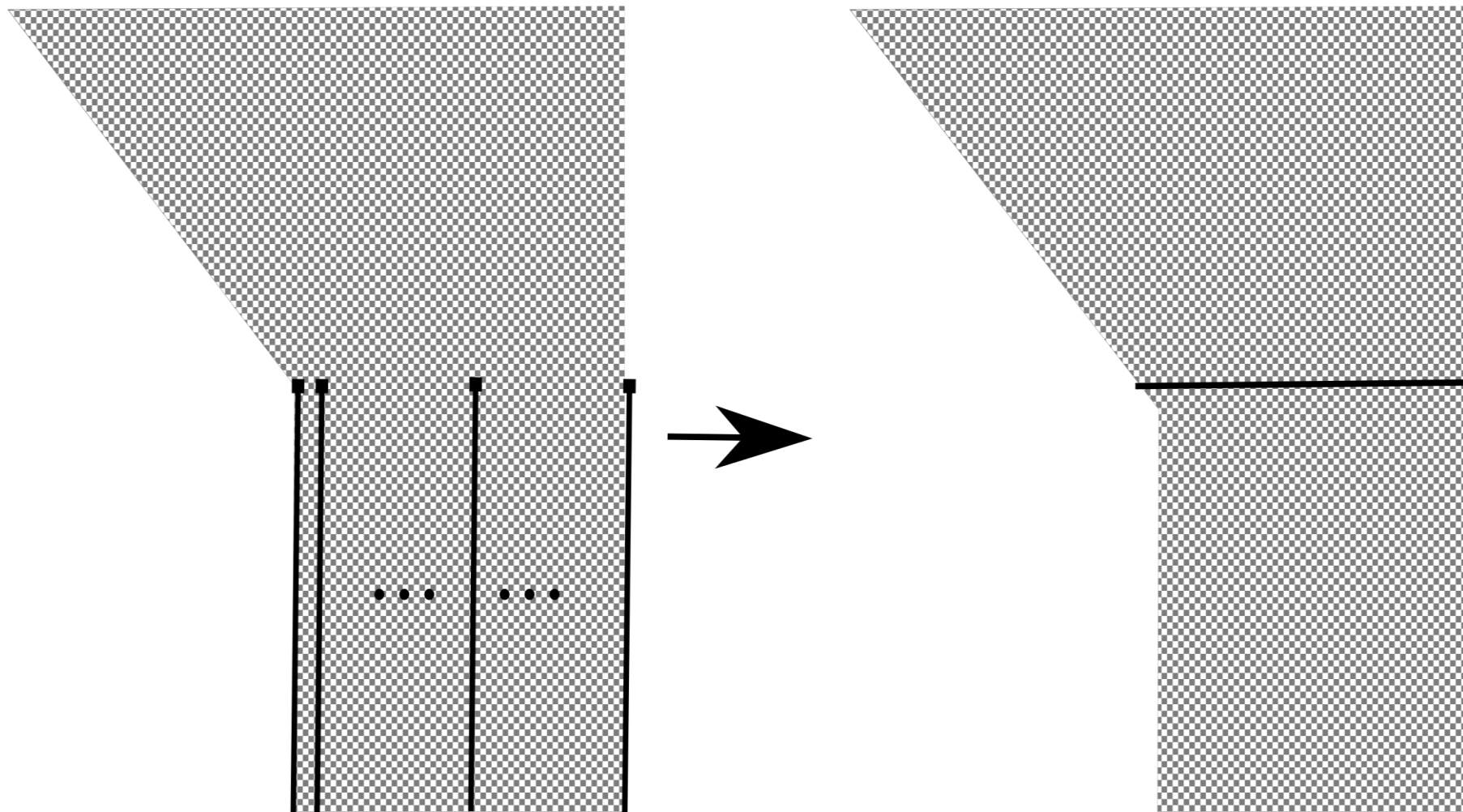
Гивенс (вращения) и

Хаусхолдер (отражения)

Гивенс (вращения) – линейный путь:



Классический хаусхолдер –
квадратичный путь (или $n \log n$ со
сдваиванием)



Преобразование отражения

$$U = E - \frac{1}{\gamma} v v^* \quad (s, s) = 0 \quad \gamma = 1/2, v = e_1$$

$$(s, s) \neq 0 \quad v = \frac{1}{\sqrt{(s, s)}} s \pm e_1, \quad \gamma = 1 + \frac{|s_1|}{\sqrt{(s, s)}}$$

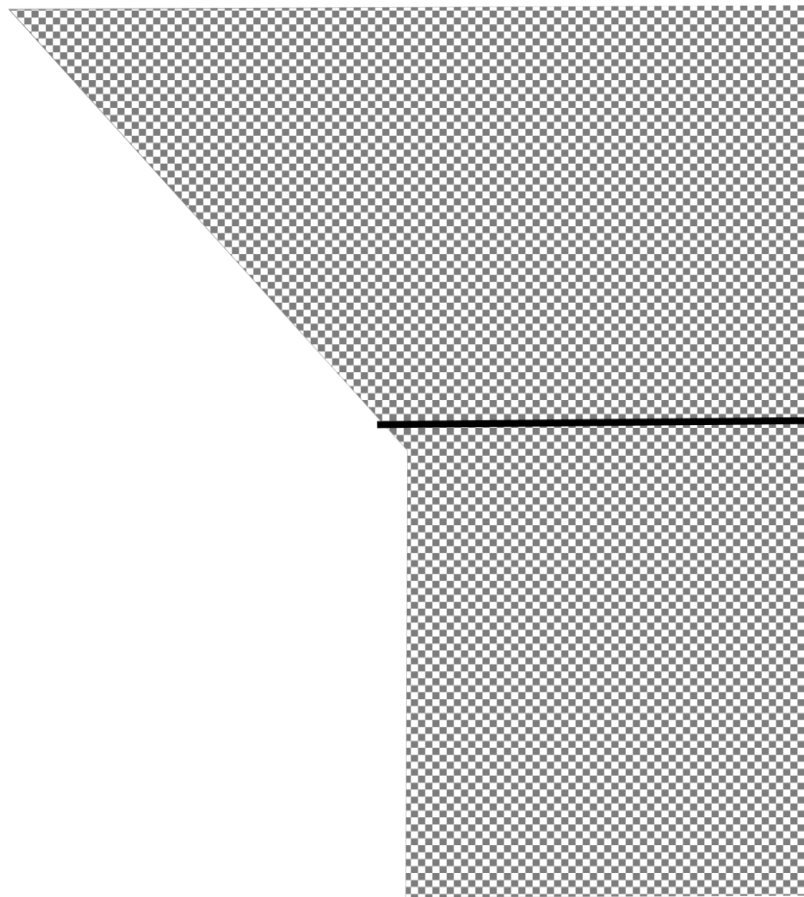
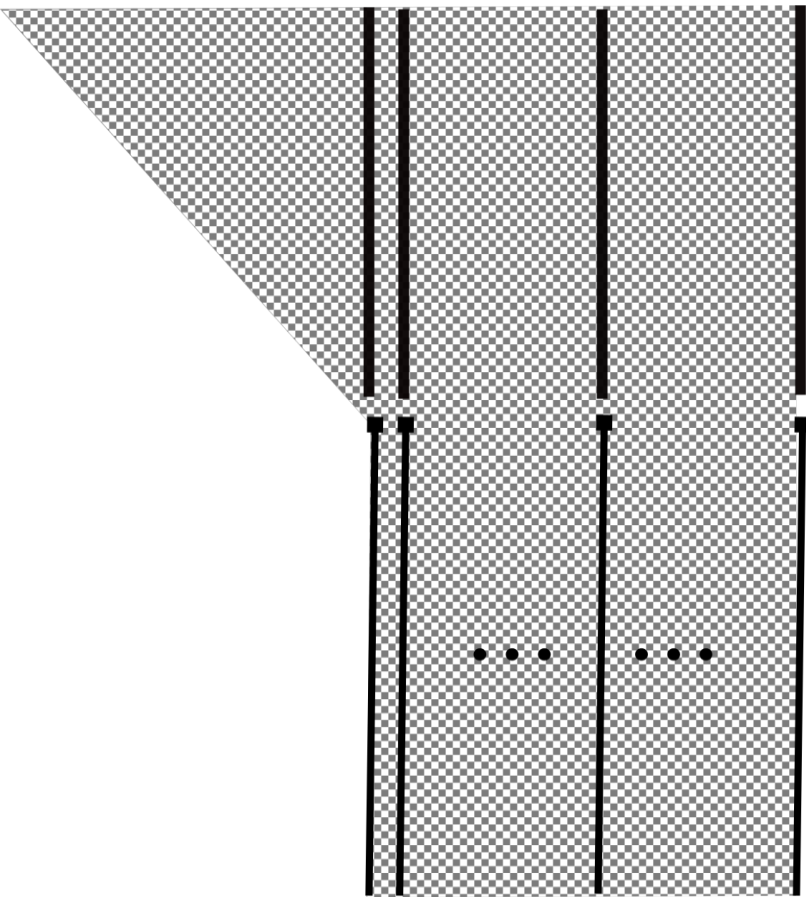
$$Uz = z - \frac{(z, v)}{\gamma} v = z - \beta v$$

$$\beta = \frac{(z, v)}{\gamma} = \frac{\frac{1}{\sqrt{(s, s)}} (z, s) \pm z_1}{1 + \frac{|s_1|}{\sqrt{(s, s)}}} = \frac{(z, s) \pm \sqrt{(s, s)} z_1}{\sqrt{(s, s)} + |s_1|}$$

Преобразование отражения

$$(Uz)_1 = z_1 - \frac{(z, s) \pm \sqrt{(s, s)}z_1}{(s, s) + |s_1|\sqrt{(s, s)}} \left(s_1 \pm \sqrt{(s, s)} \right)$$

$$(Uz)_j = z_j - \frac{(z, s) \pm \sqrt{(s, s)}z_1}{(s, s) + |s_1|\sqrt{(s, s)}} s_j$$



$$(Ux, Uy) = (x, U^*Uy) = (x, y)$$

$$(z^k, z^m)_H = \sum_{j=i}^n z_j^k \overline{z_j^m}$$

$$(z^k, z^m)_H = (z^k, z^m) - (z^k, z^m)_B$$

$$(z^k, z^m) = \sum_{j=1}^n z_j^k \overline{z_j^m} \qquad (z^k, z^m)_B = \sum_{j=1}^{i-1} z_j^k \overline{z_j^m}$$

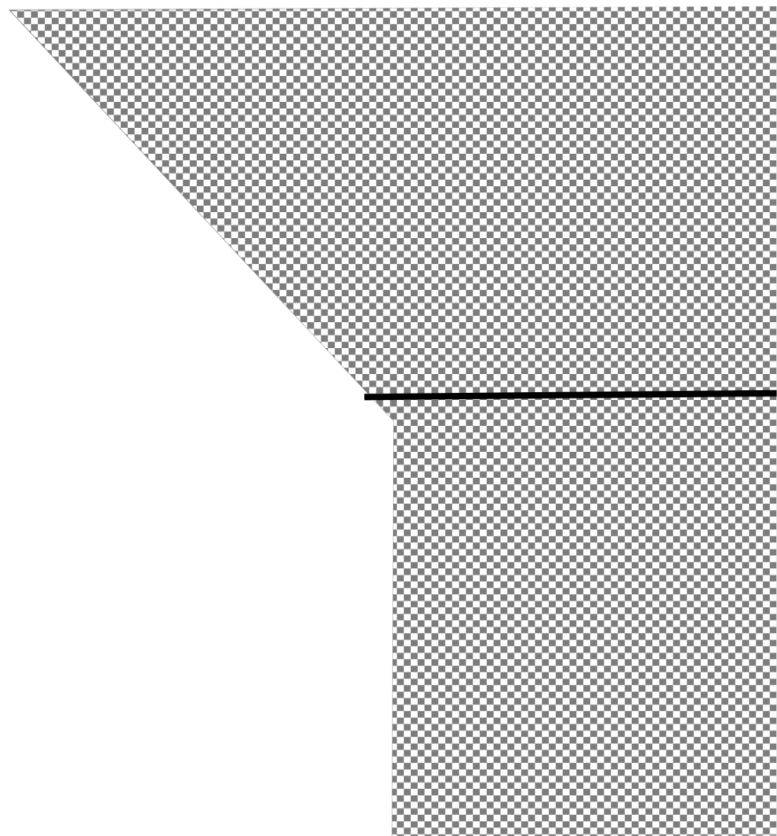
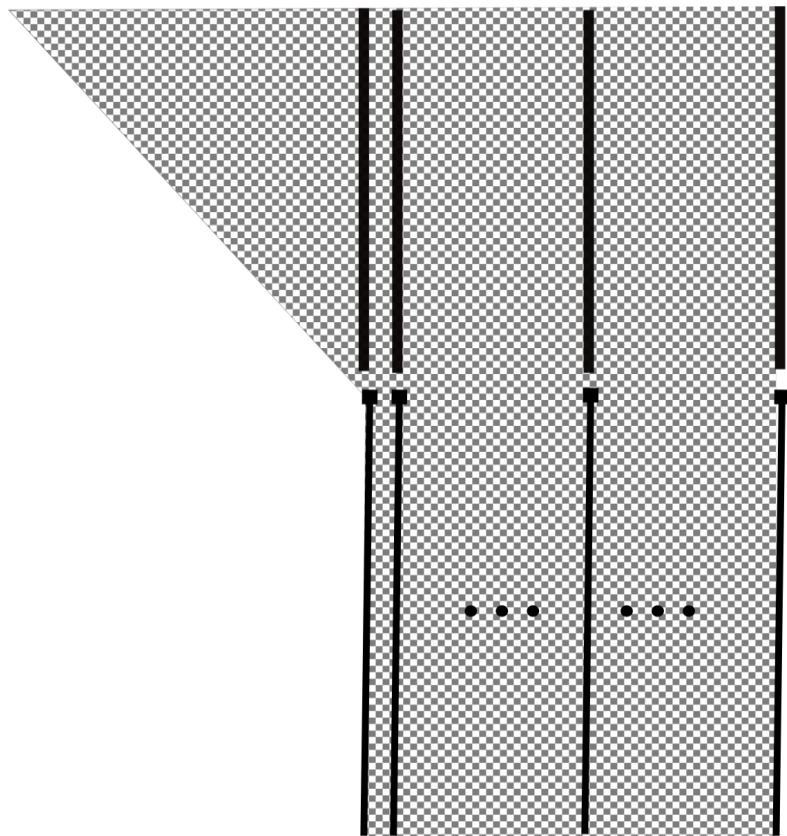


Схема с предвычислением матрицы Грама столбцов A

- Вычисление матрицы Грама
- На каждом шаге:
 - Вычисление вектора отражения и коэффициентов
 - Модификация матрицы
 - Модификация остатков матрицы Грама
- В результате – линейный критический путь

Оставшиеся вопросы

- Исследование на устойчивость новой схемы
- Исследование на целесообразность включения в библиотеки именно Хаусхолдера (отражений), а не Гивенса (вращений)

Спасибо за внимание!

АлгоВики: некоторые аспекты исследований свойств алгоритмов на примере метода Хаусхолдера

А.В. Фролов¹, А.М. Теплов²

¹ИВМ РАН

²НИВЦ МГУ