线性方程组并行迭代解法的新思路

曾宪雯

(中国工程物理研究院研究生部 四川 绵阳 621900)

【摘要】针对求解大型线性方程组，利用改进后的MGS方法和分治策略，给出了一种求解任意相容性线性方程组通解或不相容性线性方程组最小二乘解通解的并行数值方法，分析了该方法的复杂性和数值稳定性，探讨其基于MIMD分布式存储或分布共享存储模型的消息传递并行算法的设计方法。

关 键 词 线性方程组; MGS正交约化; 分治策略; 消息传递MIMD并行算法

中图分类号 O241.6；O246 文献标识码 A

A New Approach to Parallel Method for System of Linear Equations

ZENG Xian-wen

(CAEP Graduate Department Sichuan Mianyang 621900)

Abstract This paper improves Gram-Schmidt's orthogonal reduction method(MGS)and then proceed to put forward a parallel numerical method to solve the general solution of arbitrary consistent system of linear equations or the general solution of the least squares solution of arbitrary inconsistent system of linear equations by the improved MGS method and the dividing-conquering strategy，also discusses its computational complexity and its numerical stability，so its corresponding message passing parallel programming rules based on the model with MIMD computer of the distributed memory or the distributed-shared memory.

Key words system of linear equations; MGS orthogonal reduction; dividing conquering strate-gy; message passing MIMD parallel algorithm

1 预备知识

用 $(\cdot,\cdot)$ 表示内积，$\oplus$ 表示直和运算。记 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$ 为 $[\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}]$。用自然语句和类PASCAL语句描述算法。

定义 1[1] 设有 $n\times m$ 阶线性方程组 $[\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}]$ 及给定正整数 q $(1<q<n)$。称算法 G_c 是 $[\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}]$ 的行分块划分分组方法，G_c ：1) $s=1,2,\cdots,q$ ；2) 划分 $[\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}]$ 成 q 个子方程组 $[\boldsymbol{A}_s\,|\,\bar{\boldsymbol{b}}_s]$，使得 $[\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}]=\underset{1\le s\le q}{\oplus}[\boldsymbol{A}_s\,|\,\bar{\boldsymbol{b}}_s]$。

定义 2[2] 设有 $n\times m$ 阶线性方程组 $[\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}]$，$r_{\min}=\min\limits_{x\in R^{m\times1}}\left\{\|\boldsymbol{AX}-\boldsymbol{b}\|_2\right\}$ 当且仅当。$\|\boldsymbol{AX}^*-\boldsymbol{b}\|_2=r_{\min}$ 时称 $\boldsymbol{X}^*$ 为 $[\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}]$ 的一个解。

收稿日期：2003 – 10 – 15
基金项目：中国工程物理研究院科学技术基金资助项目(20020656)
作者简介：曾宪雯(1964 –)，女，副教授，主要从事数值代数方面的研究.

定理 1[3] 记$[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]$为$(\boldsymbol{\alpha}^i,\boldsymbol{X})=b_i, i=1,2,\cdots,n,$，设$\boldsymbol{A}\in\boldsymbol{R}^{n\times m}$为正交规范行向量组。则$\boldsymbol{X}^*=\sum_{i=1}^{n}b_i(\boldsymbol{\alpha}^i)^T$必是$[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]$的一个解。

2 MGS正交约化分治策略

将$[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]=\bigoplus_{1\le s\le q}[\boldsymbol{A}_s|\bar{\boldsymbol{b}}_s]$记为$\left[\boldsymbol{\alpha}_1|\cdots|\boldsymbol{\alpha}_j|\cdots\boldsymbol{\alpha}_m|\boldsymbol{b}\right]=\bigoplus_{s=1}^{q}\left[\boldsymbol{\alpha}_1^s|\cdots|\boldsymbol{\alpha}_j^s|\cdots|\boldsymbol{\alpha}_m^s|\bar{\boldsymbol{b}}_s\right]$，记$\left[\bar{\boldsymbol{b}}_1^T|\cdots|\bar{\boldsymbol{b}}_s^T|\cdots|\bar{\boldsymbol{b}}_q^T\right]^T=\bar{\boldsymbol{b}}$，$\boldsymbol{E}=\left[\boldsymbol{e}_1|\cdots|\boldsymbol{e}_j|\cdots|\boldsymbol{e}_m\right]$是单位矩阵，$\lambda_j\in\boldsymbol{R}$是待定常数。

定义 3 设有任意$n\times m$阶线性方程组$[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]$。称解法$\boldsymbol{PAR}_{GS-C}$为求解$[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]$的并行MGS方法：

1) 行分组划分$[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]$ $([\boldsymbol{A}_s|\bar{\boldsymbol{b}}_s],n_s,m)=G_c([\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}],n,m,q)$。

2) 赋初值 $type=1;\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}[1\cdot\cdot m]=\boldsymbol{0};\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}[1\cdot\cdot m]=\boldsymbol{0};\boldsymbol{R}=\left[\boldsymbol{\beta}_1|\cdots|\boldsymbol{\beta}_j|\cdots\|\boldsymbol{\beta}_m\right]=\boldsymbol{E};\boldsymbol{D}=\boldsymbol{D}[1\cdot\cdot m]=0$。

3) 线性变换$\boldsymbol{X}\leftarrow\boldsymbol{R}\boldsymbol{X}$及正交约化$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}$ 对$j=1,2,\cdots,m$；(1) 对$l=1,2,\cdots,j-1$，[对每一s：$(1\le s\le q)$并行执行$k_l^s=(\boldsymbol{\alpha}_l^s,\boldsymbol{\alpha}_j^s)$，$k_l=\sum_{s=1}^{q}k_l^s$；(2) 对每一$s$，$(1\le s\le q)$并行执行$\left[\boldsymbol{\alpha}^s=\boldsymbol{\alpha}_j^s-\sum_{l=1}^{j-1}k_l\boldsymbol{\alpha}_l^s;\ \left|\boldsymbol{\alpha}^s\right|=\left\|\boldsymbol{\alpha}^s\right\|_2^2\right]$；(3) $\left\|\boldsymbol{\alpha}_j\right\|_2=\left(\sum_{s=1}^{q}\left|\boldsymbol{\alpha}^s\right|\right)^{1/2}$；(4) 若$\left\|\boldsymbol{\alpha}_j\right\|_2=0$，则对每一s，$(1\le s\le q)$ 并行执行$\left[\bar{\boldsymbol{b}}_s=\bar{\boldsymbol{b}}_s-\lambda_j\boldsymbol{\alpha}_j^s;\ \boldsymbol{\alpha}_j^s=0\right]$；$\boldsymbol{J}[j]=\lambda_j;\ type=2;\boldsymbol{\beta}_j=\boldsymbol{0}]$；(5) 若$\left\|\boldsymbol{\alpha}_j\right\|_2\ne\boldsymbol{0}$作[对每一$s$，$(1\le s\le q)$ 并行执行 $\boldsymbol{\alpha}_j^s=\boldsymbol{\alpha}^s/\left\|\boldsymbol{\alpha}_j\right\|_2$；对$l=1,2,\cdots,j-1$作$\boldsymbol{D}[l]=-k_l/\left\|\boldsymbol{\alpha}_j\right\|_2$；$\boldsymbol{D}[j]=1/\left\|\boldsymbol{\alpha}_j\right\|_2$；$\boldsymbol{\beta}_j=\boldsymbol{R}\boldsymbol{D}$。

4) $\left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}-\boldsymbol{b}\right\|_2=r_{\min}$的通解为：

(1) 对$j=1,2,\cdots,m$作$\left[\text{对每一}s\right.$：$(1\le s\le q)$并行执行$k_j^s=(\boldsymbol{\alpha}_j^s,\bar{\boldsymbol{b}}_s)$；$k_j=\sum_{s=1}^{q}k_j^s;\boldsymbol{X}[j]=k_j\left.\right]$；(2) $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{X}+\boldsymbol{J}$；

(3) 对每一s，$(1\le s\le q)$并行执行$\left[\boldsymbol{Y}_s=\sum_{j=1}^{m}k_j\boldsymbol{\alpha}_j^s;\ r_{\min}^s=\left\|\boldsymbol{Y}_s-\bar{\boldsymbol{b}}_s\right\|_2^2\right]$；(4) $r_{\min}=(\sum_{s=1}^{q}r_{\min}^s)^{1/2}$记求解过程为：

$$(type,\boldsymbol{J},r_{\min},\boldsymbol{X}^*)=\boldsymbol{PAR}_{GS-C}([\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}],n,m,q) \tag{1}$$

定理 2 对求解过程式(1)有：1) $\boldsymbol{X}^*$是$\left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}-\boldsymbol{b}\right\|_2=r_{\min}$的通解；2) $type=1\Leftrightarrow rank(A)=m$；3) $type=2\Leftrightarrow rank(\boldsymbol{A})<m$；4) x_j是自由变量$\Leftrightarrow\boldsymbol{J}[j]=\lambda_j$($\lambda_j\in\boldsymbol{R}$为任意常数)；5) $[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]$相容$\Leftrightarrow r_{\min}=0$；6) $[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]$不相容$r_{\min}>0$。

证明 1) 容易证明，问题$\left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}-b\right\|_2=r_{\min}$等价于问题$\left\|\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Z}-\bar{\boldsymbol{b}}\right\|_2=r_{\min}$。2) 解法模块(2)和(3)完成下述$\boldsymbol{Q}\leftarrow\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}$及$\boldsymbol{R}\boldsymbol{Z}+\boldsymbol{J}\leftarrow\boldsymbol{X}$运算 (1) $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{E}$ (2) 对$j=1,2,\cdots,m$ 作①～⑤：

① $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_j-\sum_{l=1}^{j-1}(\boldsymbol{\alpha}_l,\boldsymbol{\alpha}_j)\boldsymbol{\alpha}_l=\left[\boldsymbol{\alpha}_j^1-\sum_{l=1}^{j-1}k_l\boldsymbol{\alpha}_l^1|\cdots|\boldsymbol{\alpha}_j^s-\sum_{l=1}^{j-1}k_l\boldsymbol{\alpha}_l^s|\cdots|\boldsymbol{\alpha}_j^q-\sum_{l=1}^{j-1}k_l\boldsymbol{\alpha}_l^q\right]$；

② $\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2=\left(\sum_{s=1}^{q}\left\|\boldsymbol{\alpha}^s\right\|_2^2\right)^{1/2}=\left(\sum_{s=1}^{q}\left|\boldsymbol{\alpha}^s\right|\right)^{1/2}$；

③ $\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2=0$作：$\bar{\boldsymbol{b}}_s=\bar{\boldsymbol{b}}_s-\lambda_j\boldsymbol{\alpha}_j^s$ (使$\boldsymbol{b}=\bar{\boldsymbol{b}}-\lambda_j\boldsymbol{\alpha}_j$)；$type=2;\boldsymbol{J}[j]=\lambda_j$；$\boldsymbol{\alpha}_j^s=0$ (使$\boldsymbol{\alpha}_j=0,\boldsymbol{\beta}_j=0$ ($\boldsymbol{D}_j=0$))；

④ 对$\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2\ne0$作$\boldsymbol{\alpha}_j=\boldsymbol{\alpha}/\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2=[\boldsymbol{\alpha}^1/\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2|\cdots|\boldsymbol{\alpha}^s/\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2|\cdots|\boldsymbol{\alpha}^q/\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2]$；$\boldsymbol{D}_j=[-(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_j)/\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2|\cdots|-(\boldsymbol{\alpha}_{j-1},\boldsymbol{\alpha}_j)/\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2|1/\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|_2|0|\cdots|0]^T$；

⑤ $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}_j$ ($\boldsymbol{R}_j=[\boldsymbol{e}_1|\cdots|\boldsymbol{e}_{j-1}|\boldsymbol{D}_j|\boldsymbol{e}_{j+1}|\ \cdots|\boldsymbol{e}_m]$，$\boldsymbol{E}=[\boldsymbol{e}_1|\cdots|\boldsymbol{e}_j|\cdots|\boldsymbol{e}_m]$为单位矩阵)；

(3) $\boldsymbol{Q}=[\boldsymbol{a}_1|\cdots|\boldsymbol{a}_j|\cdots|\boldsymbol{a}_m|]$。

3）执行模块(2)和(3)后求方程组 $\boldsymbol{QZ}=\bar{\boldsymbol{b}}$ 通解 $\boldsymbol{Z}^*$。注意到 $\boldsymbol{Q}$ 的列正交性质，由 $\sum_{j=1}^{m} z_j\boldsymbol{\alpha}_j=\bar{\boldsymbol{b}}$ 解得 $z_j=(\boldsymbol{\alpha}_j,\bar{\boldsymbol{b}})=\sum_{s=1}^{q}(\boldsymbol{\alpha}_j^s,\bar{\boldsymbol{b}}_s)=\sum_{s=1}^{q}k_j^s=k_j$，再由 $\|\boldsymbol{AX}-\boldsymbol{b}\|_2=\|\boldsymbol{QZ}-\bar{\boldsymbol{b}}\|_2=\left\|\sum_{j=1}^{m}k_j\boldsymbol{\alpha}_j-\bar{\boldsymbol{b}}\right\|_2=\left\|\sum_{s=1}^{q}\sum_{j=1}^{m}k_j\boldsymbol{\alpha}_j^s-\bar{\boldsymbol{b}}\right\|_2=(\sum_{s=1}^{q}\|\boldsymbol{Y}_s-\bar{\boldsymbol{b}}_s\|_2^2)^{1/2}=\left(\sum_{s=1}^{q}r_{\min}^s\right)^{1/2}$ 得到 $r_{\min}=\left(\sum_{s=1}^{q}r_{\min}^s\right)^{1/2}$。对原问题 $\|\boldsymbol{AX}-\boldsymbol{b}\|_2=r_{\min}$ 取 $\boldsymbol{X}^*=\boldsymbol{RZ}^*+\boldsymbol{J}$ 得到通解 $\boldsymbol{X}^*$。　证毕

解法容易转化成给定并行运算环境下的消息传递分布式MIMD并行算法。假定网络模型中有一台主机 p_0 和 q 台处理机 $p_s(s=1,2,\cdots,q)$，在 p_0 中存放上三角矩阵$\boldsymbol{R}$，在 p_s 中存放有对应数据$[\boldsymbol{A}_s\,|\,\bar{\boldsymbol{b}}_s]$。1) 因为划分过程能作到各处理机的负载平衡，故算法有较理想的加速比和并行效率。2) 须主机发出的主要通信信息为：k_l(实数，$m(m-1)/2$ 次)，$\|\alpha\|_2$(实数，m 次), k_j(实数，m 次)。须各处理机发出的通信信息为：k_l^s(实数，$m(m-1)/2$ 次)，$|\alpha^s|$(实数，m 次)，k_j^s(实数，m 次)，$r_{\min}^s$(实数，1次)。算法通信开销为 $O(m^2)$。3) 算法用MGS方法实现正交约化 $\boldsymbol{Q}\leftarrow\boldsymbol{AR}$，有较好的数值稳定性。4) 算法主要的计算开销由 $\boldsymbol{Q}\leftarrow\boldsymbol{AR}$ 运算决定。在最坏执行情况($type=1$,即$rank(A)=m$)下：主机 p_0 中生成 $\boldsymbol{R}$ 时，得 $\boldsymbol{D}_j$ 须作 j 次乘以 $1/\|\alpha\|_2$ 运算，计算 $\boldsymbol{\beta}_j=\boldsymbol{RD}_j$ 须作 $j(j-1)/2$ 次乘法运算，共须作 $\sum_{j=1}^{m}(j(j-1)/2+j)=m(m+1)(m+2)/6$ 次实数乘法运算，主机 p_0 中计算$\boldsymbol{X}^*$=$\boldsymbol{RZ}^*$须作 $m(m+1)/2$ 次实数乘法运算，主机 p_0 的计算量为 $O(m^3/6)$；处理机 p_s 中实现 $\boldsymbol{Q}\leftarrow\boldsymbol{AR}$ 分块运算须作 $n_s(m^2+m)$ 次实数乘法运算，p_s 中计算量为 $O(n_s m^2)$。

3　模拟数值实验

取 $q=3$ 求解

$$
[\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}]=\left[\begin{array}{ccccccccc|c}
1&1&0&0&0&0&0&0&1&3\\
1&1&1&0&0&0&0&0&0&3\\
0&1&1&1&0&0&0&0&0&3\\
0&0&1&1&1&0&0&0&0&3\\
0&0&0&1&1&1&0&0&0&3\\
0&0&0&0&1&1&1&0&0&3\\
0&0&0&0&0&1&1&1&0&3\\
0&0&0&0&0&0&1&1&0&3\\
1&1&0&0&0&0&0&0&1&0
\end{array}\right]
$$

3.1　分组过程设计

$s=1:(\alpha^i,\boldsymbol{X})=b_i,\ i=1,2,3;\quad s=2:(\alpha^i,\boldsymbol{X})=b_i,\ i=4,5,6;\quad s=3:(\alpha^i,\boldsymbol{X})=b_i,\ i=7,8,9$。

3.2　正交约化结果

$$
s=1\begin{bmatrix}
1/\sqrt{3}&0&-1/\sqrt{15}&1/\sqrt{35}&0&-1/3\sqrt{7}&1/3\sqrt{11}&0&1/\sqrt{22}\\
1/\sqrt{3}&0&2/\sqrt{15}&-2/\sqrt{15}&0&2/3\sqrt{7}&-2/3\sqrt{11}&0&-2/\sqrt{22}\\
0&1&0&0&0&0&0&0&0
\end{bmatrix}
$$

$$
s=2\begin{bmatrix}
0&0&3/\sqrt{15}&2/\sqrt{35}&0&-2/3\sqrt{7}&2/3\sqrt{11}&0&2/\sqrt{22}\\
0&0&0&5/\sqrt{35}&0&2/3\sqrt{7}&-2/3\sqrt{11}&0&-2/\sqrt{22}\\
0&0&0&0&1&0&0&0&0
\end{bmatrix}
$$

$$s=3\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7/3\sqrt{7} & 2/3\sqrt{11} & 0 & 2/\sqrt{22} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11/3\sqrt{11} & 0 & -2/\sqrt{22} \\ 1/\sqrt{3} & 0 & -1/\sqrt{15} & 1/\sqrt{35} & 0 & -1/3\sqrt{7} & 1/3\sqrt{11} & 0 & 1/\sqrt{22} \end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{J}[8]=\lambda,\quad x_8$为自由变量，$type=2$，$\bar{\boldsymbol{b}}=[3,3,3\,|\,3,3,3\,|\,3-\lambda,3-\lambda,0]^T$。

$$\boldsymbol{D}_9=\left(-\sqrt{22}/\sqrt{3},0,\sqrt{22}/\sqrt{15},-\sqrt{22}/\sqrt{35},0,\sqrt{22}/3\sqrt{7},-\sqrt{22}/3\sqrt{11},0,\sqrt{22}/2\right)^T$$

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & -1 & 2/\sqrt{15} & 3/\sqrt{35} & -1 & 4/3\sqrt{7} & 5/3\sqrt{11} & 0 & -6/\sqrt{22} \\ 0 & 1 & -3/\sqrt{15} & -2/\sqrt{35} & 1 & -5/3\sqrt{7} & -4/3\sqrt{11} & 0 & -4/\sqrt{22} \\ 0 & 0 & 3/\sqrt{15} & -3/\sqrt{35} & 0 & 3/3\sqrt{7} & -3/3\sqrt{11} & 0 & 8/\sqrt{22} \\ 0 & 0 & 0 & 5/\sqrt{35} & -1 & 2/3\sqrt{7} & 7/3\sqrt{11} & 0 & -4/\sqrt{22} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -7/3\sqrt{7} & -2/3\sqrt{11} & 0 & -2/\sqrt{22} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9/3\sqrt{7} & -7/3\sqrt{11} & 0 & 4/\sqrt{22} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9/3\sqrt{11} & 0 & -2/\sqrt{22} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11/\sqrt{22} \end{bmatrix}$$

3.3 求解结果

$$\boldsymbol{Z}^*=(2\sqrt{3},3,12/\sqrt{15},18/\sqrt{35},3,\ 8/\sqrt{7}-7\lambda/3\sqrt{7},\ 10/\sqrt{11}-2\lambda/3\sqrt{11}-3\lambda/\sqrt{11},\ 0,-3/\sqrt{22})^T$$

$$\boldsymbol{X}^*=\boldsymbol{R}\boldsymbol{Z}^*+\boldsymbol{J}=(3,0,0,3,0,0,3,\lambda,-3/2)^T$$

$$r_{\min}=\left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^*-\boldsymbol{b}\right\|_2=\left\|\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Z}^*-\boldsymbol{b}\right\|_2=\left(\sum_{s=1}^{3}r_{\min}^{s}\right)^{1/2}=(9/4+0+9/4)^{1/2}=3/\sqrt{2}>0$$

参 考 文 献

[1] 杨本立. 线性方程组大数法快速并行解法[J]. 四川大学学报(自科版), 2003, 40(4): 626-631

[2] 杨本立. 超定方程组最小二乘解行处理法[J]. 云南师范大学学报(自科版), 1999, 17(1): 1-4

[3] 曾宪雯，祁晓彬，郝 军. 线性代数方程组正交化行处理法[J]. 四川师范大学学报(自科版)，1999，22(3): 265-268

编 辑 刘文珍