文章编号:1002-1175(2009)02-0224-06

分块 Gram-Schmidt 正交化算法及其应用*

赵　韬[1,2†]　姜金荣[1]

(1 中国科学院计算机网络信息中心，北京 100190；2 中国科学院研究生院，北京 100049)

(2008 年 4 月 30 日收稿；2008 年 7 月 2 日收修改稿)

Zhao T, Jiang JR. A block Gram-Schmidt algorithm with its application. ***Journal of the Graduate School of the Chinese Academy of Sciences*****, 2009, 26(2): 224 ~ 229**

摘　要　Gram-Schmidt 正交化算法是数值线性代数中的基本算法之一,主要用于计算矩阵 QR 分解.经典和修正 Gram-Schmidt 正交化算法基于 level 1/2 BLAS 运算,低级 BLAS 运算对 cache 的利用率比较低,从而限制了算法性能.提出一种新的分块 Gram-Schmidt 正交化算法.新算法通过重正交保证产生矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性达到机器精度,并且利用 level 3 BLAS 运算提高了算法性能.数值试验表明,新算法能使得矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性达到机器精度,并且新算法使得性能得到显著提高.

关键词　Gram-Schmidt, Arnoldi 算法,正交化,分块算法,QR 分解

中图分类号　TP31

1　引言

构造正交基经常是 Krylov 子空间方法求解线性代数问题的关键步骤.一般地,可以通过经典 Gram-Schmidt(CGS)算法[1]或修正 Gram-Schmidt(MGS)[1]算法计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解从而获得正交基.CGS 和 MGS 在数学上等价,然而由于舍入误差的存在,这 2 种 Gram-Schmidt 算法产生的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性不能达到机器精度.通过重正交,矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性能够达到机器精度.带有重正交的 MGS(MGSR)[2,3]是基于向量 – 向量运算,而带有重正交的 CGS(CGSR)[2,3]是基于矩阵 – 向量运算,这 2 种算法都不能充分利用现代计算机的多层存储结构,因此限制了性能的提高.

为了提高 Gram-Schmidt 算法在现代计算机上的性能,Jably[4]利用重正交技术提出一种分块 MGSR 算法,该算法产生的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数成正比,即 $\boldsymbol{A}$ 的条件数越大,$\boldsymbol{Q}$ 的正交性的损失会越严重.Stathopoulos[5]提出一种利用矩阵右奇异向量的正交化方法,该算法在调用 level 3 BLAS 的同时也增加了浮点运算,增加的浮点运算抵消了部分因为 level 3 BLAS 带来的性能提高.而且该算法不是 QR 分解算法,它产生 1 个正交矩阵和 1 个满矩阵.

本文提出一种新的分块 Gram-Schmidt 正交化算法.新算法通过重正交保证矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性达到机器精度.而且通过调用 level 3 BLAS,算法利用矩阵 – 矩阵运算从而提高了性能.第二部分,我们给出新的分块的 Gram-Schmidt 正交化算法,并给出简要的误差分析.第三部分,数值试验将新算法,CGSR 和 Householder 算法[1]进行对比,说明通过重正交,新算法和 CGS 均能保证矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性达到机器精度.第四部分,将新算法和 CGSR 应用于计算矩阵特征值问题的 Arnoldi 算法,数值试验表明在性能方面,新

* 国家自然科学基金(60533020)和中国科学院知识创新工程青年人才领域项目(O714051A01)资助

†E-mail: zhaotao@sccas.cn

算法比 CGSR 有了显著提高.

2　分块 Gram-Schmidt 正交化算法

假设 $\boldsymbol{A}\in\boldsymbol{R}^{m\times n}$ 是列满秩的,其中 $m\geqslant n$.一般地,我们将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 均匀地分成 N 块,每块由 nb 个连续向量构成;对 $\boldsymbol{Q}$ 也做相应的划分.我们用 $\boldsymbol{Q}_k$ 表示由矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的前 k 列构成的矩阵.为了简化,算法省略了构造矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的语句.

算法 1　分块 Gram-Schmidt 正交化算法

计算$(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2,\cdots, \boldsymbol{a}_{nb})$的 QR 分解,得到 $\boldsymbol{Q}_{nb}$;

For $i=2$ to N

　$k=(i-1)nb$;

　$\boldsymbol{S}=(\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2,\cdots, \boldsymbol{s}_{nb})=\boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{a}_{k+1}, \boldsymbol{a}_{k+2},\cdots, \boldsymbol{a}_{k+nb})$;

　$\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2,\cdots, \boldsymbol{v}_{nb})=(\boldsymbol{a}_{k+1}, \boldsymbol{a}_{k+2},\cdots, \boldsymbol{a}_{k+nb})-\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{S}$;

　Repeat

　　$\boldsymbol{w}_1=\boldsymbol{v}_1$;

　　$\boldsymbol{s}=\boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}_1$;

　　$\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{w}_1-\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{s}$;

　Until $\boldsymbol{v}_1$ 正交于 $\boldsymbol{Q}_k$

　$\boldsymbol{q}_{k+1}=\boldsymbol{v}_1/\|\boldsymbol{v}_1\|_2$;

　For $j=2$ to nb

　　$\boldsymbol{t}_j=(\boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots,\boldsymbol{q}_{k+j-1})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_{k+j}$;

　　$\boldsymbol{v}_j=\boldsymbol{v}_j-(\boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots, \boldsymbol{q}_{k+j-1})\boldsymbol{t}_j$;

　　Repeat

　　　$\boldsymbol{w}_j=\boldsymbol{v}_j$;

　　　$\boldsymbol{t}=(\boldsymbol{Q}_k, \boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots, \boldsymbol{q}_{k+j-1})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}_j$;

　　　$\boldsymbol{v}_j=\boldsymbol{w}_j-(\boldsymbol{Q}_k, \boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots, \boldsymbol{q}_{k+j-1})\boldsymbol{t}$;

　　Until $\boldsymbol{v}_j$ 正交于$(\boldsymbol{Q}_k, \boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots, \boldsymbol{q}_{k+j-1})$

　　$\boldsymbol{q}_{k+j}=\boldsymbol{v}_j/\|\boldsymbol{v}_j\|_2$;

　Endfor

Endfor

外层 For 循环以分块的形式计算正交基;内层 For 循环以向量的形式计算每个分块内的正交基.重正交由 2 次 Repeat-Until 语句实现,在外循环中的 Repeat-Until 只对每个分块的第一个向量进行重正交,而在内循环中的 Repeat-Until 对每个分块中剩余的向量进行重正交.算法 1 和 CGSR 在重正交的计算方式上是相同的,不同点在于算法 1 以分块的形式对每个向量进行第一次正交化.

为了说明算法 1 的数值稳定性,我们对算法 1 进行了简要的误差分析.所有的误差分析都是基于浮点计算的标准模型[1,6]

$$\mathrm{fl}(a\ \mathrm{op}\ b)=(a\ \mathrm{op}\ b)(1+\varepsilon),\ |\varepsilon|\leqslant|\varepsilon_m|,\ \mathrm{op}=+,-,*,\backslash, \tag{1}$$

其中,fl 表示浮点计算,ε_m 表示单位舍入误差.

引理 1　假设 $\boldsymbol{A}\in\boldsymbol{R}^{m\times n}$, $\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n$ 和 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$, 那么

$$\|\boldsymbol{y}-\mathrm{fl}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})\|_2\leqslant\min(m, n)^{1/2}n\|\boldsymbol{A}\|_2\|\boldsymbol{x}\|_2\varepsilon_m+O(\varepsilon_m^2).$$

证明　将浮点运算标准模型(1)式应用到矩阵向量乘积即可得出结论(见文献[6]).

引理 2　如果 $\|\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\|_2\leqslant\alpha$,其中 $\boldsymbol{I}$ 是单位矩阵,那么 $\|\boldsymbol{Q}\|_2\leqslant1+\alpha/2$.

证明 直接应用三角不等式(见文献[7]).

引理 3 假设 $\boldsymbol{Q}\in\boldsymbol{R}^{m\times n}$,如果 $\|\boldsymbol{Q}\|_2\leqslant 2^{1/2}$,那么 $\|\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\|_2=1$.

证明 任意 $x\in\boldsymbol{R}^m$ 都可以分解成 $x_1\in r(\boldsymbol{Q})$ 和 $x_2\in r(\boldsymbol{Q})^{\perp}$ 的直和,因此我们有

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\|_2^2 &= \max_{\|x\|_2=1,x\in\boldsymbol{R}^m}\|(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}})x\|_2^2\\ &= \max_{\|x\|_2=1,x\in\boldsymbol{R}^m}\|x_1-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}x_1+x_2\|_2^2\\ &= \max_{\|x\|_2=1,x_1\in r(\boldsymbol{Q})}\{\|\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}x_1\|_2^2-2\|\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}x_1\|_2^2\}+\|x\|_2^2\\ &\leqslant \max_{\|x\|_2=1,x_1\in r(\boldsymbol{Q})}(\|\boldsymbol{Q}\|_2^2-2)\|\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}x_1\|_2^2+\|x\|_2^2.\end{aligned}$$

根据假设,我们有 $\|\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\|_2\leqslant 1$. 另一方面,如果 $x_1=0$,那么 $\|(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}})x\|_2=\|x\|_2$,因此有 $\|\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\|_2\geqslant 1$.

假设我们得到矩阵 $\boldsymbol{Q}_{k+j-1}=(\boldsymbol{Q}_k,\ \boldsymbol{q}_{k+1},\ \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots,\ \boldsymbol{q}_{k+j-1})$, $k=(i-1)nb$,其正交性达到机器精度,如果应用 CGSR[2,3]将 $\boldsymbol{a}_{k+j}$ 与 $\boldsymbol{Q}_{k+j-1}$ 进行第一次正交化,那么根据引理 1 和引理 2,我们有

$$\boldsymbol{s}_j=(\boldsymbol{Q}_k,\ \boldsymbol{q}_{k+1},\ \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots,\ \boldsymbol{q}_{k+j-1})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_{k+j}+\boldsymbol{\delta s},$$

其中,

$$\|\boldsymbol{\delta s}\|_2\leqslant m(k+j-1)^{1/2}\|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m+O(\varepsilon_m^2),$$

和

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}_j &= \mathrm{fl}(\boldsymbol{a}_{k+j}-\mathrm{fl}((\boldsymbol{Q}_k,\ \boldsymbol{q}_{k+1},\ \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots,\ \boldsymbol{q}_{k+j-1})\boldsymbol{s}_j))\\ &= \mathrm{fl}(\boldsymbol{a}_{k+j}-(\boldsymbol{Q}_k,\ \boldsymbol{q}_{k+1},\ \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots,\ \boldsymbol{q}_{k+j-1})\boldsymbol{s}_j-\boldsymbol{\delta}_1\boldsymbol{v})\\ &= \boldsymbol{a}_{k+j}-(\boldsymbol{Q}_k,\ \boldsymbol{q}_{k+1},\ \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots,\ \boldsymbol{q}_{k+j-1})\boldsymbol{s}_j-\boldsymbol{\delta}_1\boldsymbol{v}-\boldsymbol{\delta}_2\boldsymbol{v},\end{aligned}$$

其中,

$$\|\boldsymbol{\delta}_1\boldsymbol{v}\|_2\leqslant(k+j-1)^{3/2}\|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m+O(\varepsilon_m^2),$$
$$\|\boldsymbol{\delta}_2\boldsymbol{v}\|_2\leqslant\|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m+O(\varepsilon_m^2).$$

令 $\boldsymbol{\delta v}=\boldsymbol{Q}_{k+j-1}\boldsymbol{\delta s}+\boldsymbol{\delta}_1\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\delta}_2\boldsymbol{v}$,根据引理 3,我们有

$$\boldsymbol{v}_j=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}_{k+j-1}\boldsymbol{Q}_{k+j-1}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{a}_{k+j}-\boldsymbol{\delta v},\tag{2}$$

其中,$\|\boldsymbol{\delta v}\|_2\leqslant(m(k+j-1)^{1/2}+(k+j-1)^{3/2}+1)\|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m+O(\varepsilon_m^2)$.

对于矩阵的每个列向量只用一次重正交的 CGSR 算法(CGSR2),Abdelmalek[8, pp. 349~358]证明了如果 $\|\boldsymbol{v}_j\|_2$ 足够大,那么 CGSR2 算法保证矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性达到机器精度.Giraud[9, pp. 93~97]建立了 Abdelmalek 的假设与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数 $k(\boldsymbol{A})$ 之间的关系,证明了如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不是严重病态,那么 CGSR2 保证矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性达到机器精度,其结论可以用定理 1 表示.

定理 1[9] 如果 $c_1k(\boldsymbol{A})\varepsilon_m<1$,那么由 CGSR2 计算得到的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 满足

$$\|\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\|_2\leqslant c_2\boldsymbol{\varepsilon}_m,\tag{3}$$

其中,c_1, c_2 是与 m, n 相关的常数.

在实际应用中,对于大多数矩阵 CGSR 计算一次重正交即可使得矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性达到机器精度;对于接近奇异的矩阵,2 次重正交可以保证 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性[3,10,11].

现在应用算法 1 将 $\boldsymbol{a}_{k+j}$ 与 $\boldsymbol{Q}_{k+j-1}$ 进行第一次正交化.根据引理 1 和引理 2,我们有

$$\boldsymbol{s}_j=\boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_{k+j}+\boldsymbol{\delta s},$$
$$\boldsymbol{t}_j=(\boldsymbol{q}_{k+1},\ \boldsymbol{q}_{k+2},\cdots,\ \boldsymbol{q}_{k+j-1})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_{k+j}+\boldsymbol{\delta t},$$

其中,$\|(\boldsymbol{\delta s}^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{\delta t}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\|_2\leqslant m(k+j-1)^{1/2}\|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m+O(\varepsilon_m^2)$.

利用上式和引理 1,我们有

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{v}_j &= \mathrm{fl}(\boldsymbol{a}_{k+j} - \mathrm{fl}(\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{s}_j) - \mathrm{fl}((\boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+2}, \cdots, \boldsymbol{q}_{k+j-1})\boldsymbol{t}_j) \\
&= \mathrm{fl}(\boldsymbol{a}_{k+j} - (\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{s}_j + \boldsymbol{\delta}_1\boldsymbol{v}) - ((\boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+2}, \cdots, \boldsymbol{q}_{k+j-1})\boldsymbol{t}_j + \boldsymbol{\delta}_2\boldsymbol{v})) \\
&= \boldsymbol{a}_{k+j} - \boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{s}_j - (\boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{q}_{k+2}, \cdots, \boldsymbol{q}_{k+j-1})\boldsymbol{t}_j - \boldsymbol{\delta}_1\boldsymbol{v} - \boldsymbol{\delta}_2\boldsymbol{v} - \boldsymbol{\delta}_3\boldsymbol{v},
\end{aligned}
$$

其中,

$$
\begin{aligned}
\|\boldsymbol{\delta}_1\boldsymbol{v}\|_2 &\leqslant k^{3/2}\|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m + O(\varepsilon_m^2), \\
\|\boldsymbol{\delta}_2\boldsymbol{v}\|_2 &\leqslant (j-1)^{3/2}\|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m + O(\varepsilon_m^2), \\
\|\boldsymbol{\delta}_3\boldsymbol{v}\|_2 &\leqslant \|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m + O(\varepsilon_m^2).
\end{aligned}
$$

令 $\boldsymbol{\delta v} = \boldsymbol{Q}_{k+j-1}(\boldsymbol{\delta s}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{\delta t}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\delta}_1\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\delta}_2\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\delta}_3\boldsymbol{v}$,根据引理 3,我们有

$$
\boldsymbol{v}_j = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{Q}_{k+j-1}\boldsymbol{Q}_{k+j-1}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{a}_{k+j} - \boldsymbol{\delta v}, \tag{4}
$$

其中,$\|\boldsymbol{\delta v}\|_2 \leqslant (m(k+j-1)^{1/2} + k^{3/2} + (j-1)^{3/2} + 1)\|\boldsymbol{a}_{k+j}\|_2\varepsilon_m + O(\varepsilon_m^2)$.

对比(2)和(4)式,易证对于第一次正交化,当 $nb \geqslant 2$ 时,算法 1 产生的误差的上界小于 CGSR 产生的误差的上界.算法 1 和 CGSR 计算重正交的方式相同,如果将算法 1 中重正交的次数限制为一次,那么类似定理 1 可以证明算法 1 计算非严重病态矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解,得到的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 满足(3)式,其中 c_1, c_2是与 m, n 和 nb 相关的常数.

3　数值试验

分别应用 CGSR,Householder 变换[7]和算法 1 计算 3 个测试矩阵的 QR 分解,然后报告试验结果.我们用 $\|\boldsymbol{I} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\|_2$ 表示矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性的损失程度.所有试验用 Matlab 实现,其中单位舍入误差 $\varepsilon_m \approx 2.22\mathrm{e}-16$.前 2 个测试矩阵经常被用于检验正交化算法[3,10,12,13].第 1 个测试矩阵是一个 50 阶的 Hilbert 矩阵[3],通过 Matlab 函数 cond 计算,其条件数为 1.46e+21.第 2 个测试矩阵是一个 201×200 的 Lauchli 矩阵[4,10,13],由如下 Matlab 语句生成:

$$
\boldsymbol{A} = [\mathrm{ones}(1, 200);\ \mathrm{eye}(200) * 1\mathrm{e}-16],
$$

其条件数为 1.41e+17,由 Matlab 函数 cond 计算得到.因为第 1 和第 2 个矩阵几乎是数值奇异的,所以 CGSR 和算法 1 均需要对矩阵中的每个向量计算 2 次重正交.我们采用 Smoktunowicz 的方法[13]构造 glued 矩阵做为第 3 个测试矩阵,其阶数为 500,通过 Matlab 函数 cond 计算其条件数为 4.05e+10.对于第 3 个测试矩阵,算法 1 和 CGSR 只需要 1 次重正交.试验结果见表 1~表 3.

表 1　不同正交化算法计算 Hilbert 矩阵的 QR 分解,对比 $\boldsymbol{Q}$ 的正交损失 $\|\boldsymbol{I} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\|_2$

(1e-16)

Householder					14.8				
CGSR					7.16				
算法 1	分块	2	4	6	8	10	12	16	20
	$\|\boldsymbol{I} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\|_2$	6.50	7.20	5.32	6.36	6.33	5.50	5.83	6.66

表 2　不同正交化算法计算 Lauchli 矩阵的 QR 分解,对比 $\boldsymbol{Q}$ 的正交损失 $\|\boldsymbol{I} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\|_2$

(1e-16)

Householder					29.9				
CGSR					4.77				
算法 1	分块	8	12	16	32	48	64	80	96
	$\|\boldsymbol{I} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\|_2$	4.81	4.82	4.80	4.73	4.74	4.73	4.78	4.73

表 3 不同正交化算法计算 glued 矩阵的 QR 分解,对比 Q 的正交损失 $\| I - Q^T Q \|_2$ (1e-15)

Householder		3.35							
CGSR		2.74							
算法 1	分块	16	32	64	96	128	160	192	224
	$\| I - Q^T Q \|_2$	1.96	1.94	2.28	2.11	2.10	2.48	2.21	2.23

表 1 ~ 表 3 说明算法 1 和 CGSR 比 Householder 变换能产生正交损失更小的矩阵 Q.对于近似数值奇异的矩阵,算法 1 和 CGSR 通过 2 次重正交产生的矩阵 Q 的正交损失比 Householder 变换产生矩阵 Q 的正交损失低;而对于一般矩阵,算法 1 和 CGSR 只需要 1 次重正交即可使得矩阵 Q 的正交性达到机器精度.试验结果表明,通过选择适当的分块大小,算法 1 产生矩阵的正交损失最小.

4 基于 Gram-Schmidt 正交化过程的 Arnoldi 算法

我们将算法 1 应用到求解矩阵特征值问题的精化 Arnoldi 算法[14]得到分块精化 Arnoldi 算法[15].假设每个分块由 r 个向量构成,分块 Arnoldi 算法以矩阵形式表示为

$$AU_m = U_m H_m + V_{m+1} h_{m+1,\ m} E_m^H,$$

其中,$A \in R^{n \times n}$,U_m 是 $n \times mr$ 的正交矩阵,V_{m+1}是 $n \times r$ 的正交矩阵,H_m 是 mr 阶块上 Hessenberg 矩阵,比上 Hessenberg 矩阵多 $r-1$ 条下对角线,$h_{m+1,\ m}$是 r 阶上三角矩阵,矩阵 E_m 的前$(m-1)r$ 行是零矩阵,其最后 r 行是 r 阶单位矩阵.

在$[0,\ 1] \times [0,\ 1]$区域上,考虑边界条件 $u(x,\ y) = 0$ 的对流扩散方程[8]

$$-\Delta u(x,\ y) + \rho u_x = \tau u(x,\ y),$$

取 $\rho = 1$,通过中心差分,我们得到一个 1225×1225 块三对角矩阵 $A = \mathrm{tri}(-I,\ B_{35},\ -I)$,其中,$B_{35} = \mathrm{tri}(-73/72,\ 4,\ -71/72)$,$I$ 是 35 阶单位矩阵.我们分别应用分块精化 Arnoldi 算法和精化 Arnoldi 算法计算矩阵 A 的依实部最大的前 num 个特征值 λ_i 及其对应的特征向量 φ_i.设停止迭代的条件为 $\| A\varphi_i - \lambda_i \varphi_i \|_2 < 1\mathrm{e}-7$.分块精化 Arnoldi 算法的初始矩阵和精化 Arnoldi 算法的初始向量均依平均分布随机产生.所有算法均用 C 语言实现,并在 Dell OptiPlex GX110 上进行测试.表 4 给出试验结果,其中 it 表示迭代次数,time 表示一次迭代的平均时间,sp 表示加速比,其定义如下:

sp = 精化 Arnoldi 算法一次迭代的平均时间/分块 Arnoldi 算法一次迭代的平均时间.

对于分块精化 Arnoldi 算法,我们令 $r = num$.

表 4 分块精化 Arnoldi 算法和精化 Arnoldi 算法计算矩阵特征值

	分块 Arnoldi 算法				Arnoldi 算法		
Num	sp	m	it	time/s	m	it	time/s
4	2.326	22	8	1.785	88	30	4.152
6	2.494	20	9	2.417	120	43	6.028
8	2.389	18	15	3.115	144	200	7.441
10	2.235	16	17	4.219	160	328	9.429

从表 4 可以看出,对于不同的分块尺寸,分块精化 Arnoldi 算法的迭代次数和平均一次迭代时间均显著小于精化 Arnoldi 算法.当分块 $r = 6$ 时加速比达到最大,随着分块增大,加速比降低.这是因为 $r = num$,分块增大使得矩阵 H_m 的阶数增大并且需要求解更多的精化向量[14,15],从而增加了求解精化向量的计算量,这部分增加的计算量部分抵消了因为增大分块使性能得到的提高.

5　结论

本文提出一种新的分块 Gram-Schmidt 算法计算矩阵 QR 分解.误差分析表明新算法通过重正交保证矩阵 Q 的正交性达到机器精度.数值试验表明,新算法计算得到的矩阵 Q 的正交性达到机器精度,并且如果选择适当的分块,由新算法产生矩阵 Q 的正交损失小于由 CGSR 和 Householder 算法产生矩阵 Q 的正交损失.通过利用矩阵 - 矩阵运算,新算法提高了性能.将新算法应用到求解矩阵特征值的精化 Arnoldi 算法,试验结果表明新算法比 CGSR 算法在性能方面有了显著提高.

参考文献

[1] Golub GH, Van Loan CF, Matrix computations, 3rd ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 1996

[2] Daniel JW, Gragg WB, Kaufman L, *et al*. Reorthogonalization and stable algorithms for updating the Gram-Schmidt QR factorization. *Math Comp*, 1976, 30:772 ~ 795

[3] Stewart GW. Matrix algorithms: basic decompositions. Philadelphia: SIAM, 1998

[4] Jalby W, Philippe B. Stability analysis and improvement of the block Gram-Schmidt algorithm. *SIAM J Sci Statist Comput*, 1991, 12:1058 ~ 1073

[5] Stathopoulos A, Wu K. A block orthogonalization procedure with constant sysnchronization requirements. *SIAM J Sci Comput*, 2002, 23:2165 ~ 2182

[6] Higham NJ. Accuracy and stability of numerical algorithms, 2nd ed. Philadelphia: SIAM, 2002

[7] Hoffmann W. Iterative algorithms for Gram-Schmidt orthogonalization. *Computing*, 1989, 41:353 ~ 367

[8] Abdelmalek NN. Round off error analysis for Gram-Schmidt method and solutions of linear least squares problems. *BIT*, 1971, 11:345 ~ 368

[9] Giraud L, Langou J, Rozloznik M, *et al*, Rounding error analysis of the classical Gram-Schmidt orthogonalization process. *Numer Math*, 2005, 101:87 ~ 100

[10] Bjorck A. Numerics of Gram-Schmidt orthogonalization. *Linear Algebra Appl*, 1994, 198:297 ~ 316

[11] Parlett N. The symmetric eigenvalue problem. New Jersey: Prentice-Hall, 1980

[12] Bjorck A. Solving linear least squares problems by Gram-Schmidt orthogonalization. *BIT*, 1967, 7:1 ~ 21

[13] Smoktunowicz A, Barlow JL, Langou J. A note on the error analysis of classical Gram-Schmidt. *Numer Math*, 2006, 105:299 ~ 313

[14] Jia ZX. Polynomail characterizations of the refined approximate eigenvectors by the refined Arnoldi method and an implicitly restarted refined Arnoldi algorithm. *Linear Algebra Appl*, 1999, 287:191 ~ 214

[15] Jia ZX. A refined iterative algorithm based on the block Arnoldi process for large unsymmetric eigenproblems. *Linear Algebra Appl*, 1998, 270:171 ~ 189

A block Gram-Schmidt algorithm with its application

ZHAO Tao[1,2]　JIANG Jin-Rong[1]

(1 *Computer Network Information Center*, *Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100190, *China*;

2 *Graduate University*, *Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100049, *China*)

Abstract　Gram-Schmidt algorithm is one of the fundamental methods in linear algebra, which is mainly used to compute QR decomposition. The classical and modified Gram-Schmidt are both based on level 1 or level 2 BLAS operations which have low cache reuse. In this paper, a new block Gram-Schmidt algorithm is proposed. The new algorithm ensures the orthogonality of resulting matrix Q is close to machine precision and improves performance because of using level 3 BLAS. Numerical experiments confirm the favorable numerical stability of the new algorithm and its effectiveness on modern computers.

Key words　Gram-Schmidt, Arnoldi algorithm, orthogonalization, block algorithm, QR