

РАЗЛОЖЕНИЯ СИММЕТРИЧНЫХ МАТРИЦ. РЕШЕНИЕ СЛАУ С СИММЕТРИЧНЫМИ МАТРИЦАМИ.

LDL^T-разложение симметричной матрицы (LU-разложение, использующее симметрию матрицы). Разложение Холецкого. Решение систем на основе разложения симметричных матриц. Вычислительная сложность алгоритмов решения систем с симметричными матрицами.

Ранее мы рассмотрели LU-разложение матрицы и применение LU-разложения для решения систем линейных алгебраических уравнений

$$Ax=b \quad (1)$$

(A – матрица порядка n , x и b – n -мерные векторы). Если использовать специфику матрицы, то можно осуществлять треугольные разложения с меньшими, чем в общем случае, вычислительными затратами. Рассмотрим случай симметричной ($A=A^T$) матрицы.

LU-разложение, использующее симметрию матрицы

Теорема 1 (теорема об LDL^T-разложении). Пусть A – симметричная матрица и все ее угловые миноры отличны от нуля, т.е. $A=A^T$, $\Delta_1 \neq 0$, $\Delta_2 \neq 0$, ..., $\Delta_n \neq 0$. Тогда и только тогда матрицу A можно представить, причем единственным образом, в виде $A=LDL^T$, где L – нижняя треугольная матрица с единичной диагональю, D – диагональная матрица с ненулевыми диагональными элементами.

Доказательство. Так как A удовлетворяет необходимым и достаточным условиям теоремы об LU-разложении, то $A=LU$, где L – нижняя треугольная матрица с единичной диагональю, а U – верхняя треугольная с ненулевыми диагональными элементами ($u_{kk} \neq 0$, $1 \leq k \leq n$).

Пусть $D = \text{diag}(d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn}) = \text{diag}(u_{11}, u_{22}, \dots, u_{nn})$ – диагональная матрица, главная диагональ которой совпадает с главной диагональю матрицы U , а R_1 – верхняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, полученная из матрицы U делением k -й строки на u_{kk} , $1 \leq k \leq n$. Тогда

$$U = DR_1.$$

Получили разложение

$$A = LDR_1, \quad (2)$$

где L и R_1 – треугольные матрицы с единичной главной диагональю, и D – диагональная матрица с ненулевыми диагональными элементами.

Так как $A=A^T$, то

$$LDR_1 = (R_1)^T D^T L^T.$$

Тогда, учитывая невырожденность сомножителей, получим сначала

$$R_1 = (LD)^{-1} (R_1)^T D L^T,$$

затем

$$R_1(L^T)^{-1} = D^{-1}L^{-1}(R_1)^TD. \quad (3)$$

Матрица, находящаяся в левой части равенства (3), является верхней треугольной, а в правой – нижней треугольной. Поэтому из (3) следует, что обе матрицы $R_1(L^T)^{-1}$ и $D^{-1}L^{-1}(R_1)^TD$ являются диагональными. Далее, так как матрица $R_1(L^T)^{-1}$ имеет единичную главную диагональ, то она является единичной, т.е. $R_1(L^T)^{-1} = E$, откуда следует $R_1 = L^T$. Тогда равенство (2) примет вид

$$A = LDL^T.$$

Единственность LDL^T -разложения следует из единственности LU -разложения.

Теорема доказана.

Лемма. При выполнении преобразований симметричной матрицы A по формулам прямого хода метода исключений Гаусса на любом шаге k выполняется

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ji}^{(k)}, \quad i = k+1, k+2, \dots, n, \quad j = k+1, k+2, \dots, n.$$

Доказательство проведем методом математической индукции. Для $k=1$ имеем (см. формулу (8) файла «Метод Гаусса»):

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} a_{1j} = a_{ji} - \frac{a_{1i}}{a_{11}} a_{j1} = a_{ji} - \frac{a_{j1}}{a_{11}} a_{1i} = a_{ji}^{(1)}.$$

Если верно $a_{ij}^{(k-1)} = a_{ji}^{(k-1)}$, $i = k, \dots, n$, $j = k, \dots, n$, то

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} a_{kj}^{(k-1)} = a_{ji}^{(k-1)} - \frac{a_{ki}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} a_{jk}^{(k-1)} = a_{ji}^{(k-1)} - \frac{a_{jk}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} a_{ki}^{(k-1)} = a_{ji}^{(k)}.$$

Лемма доказана.

Из доказательства теоремы 1 следует, что для получения элементов матриц LDL^T -разложения можно модифицировать алгоритмы LU -разложения. Например, если в алгоритме (12) файла «Метод Гаусса»

$$a_{ij}^{(0)} = a_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, n;$$

$$k = 1, 2, \dots, n-1:$$

$$j = k, \dots, n:$$

$$u_{kj} = a_{kj}^{(k-1)},$$

$$i = k+1, k+2, \dots, n:$$

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{u_{kk}},$$

$$j = k+1, \dots, n:$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik} u_{kj}$$

$$u_{nn} = a_{nn}^{(n-1)}.$$

преобразования матрицы выше главной диагонали не выполнять и воспользоваться равенствами $u_{kk} = d_{kk}$, $u_{kj} = a_{kj}^{(k-1)} = a_{jk}^{(k-1)}$ то получим

$$\begin{aligned}
a_{ij}^{(0)} &= a_{ij}, \quad i=1,2,\dots,n, \quad j=1,2,\dots,i; \\
k &= 1, 2, \dots, n-1: \\
d_{kk} &= a_{kk}^{(k-1)} \\
i &= k+1, k+2, \dots, n: \\
l_{ik} &= \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{d_{kk}}, \\
j &= k+1, \dots, i: \\
a_{ij}^{(k)} &= a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik} a_{jk}^{(k-1)}, \\
d_{nn} &= a_{nn}^{(n-1)}.
\end{aligned} \tag{4}$$

Элементы матрицы L – это вычисленные l_{ik} , а элементы главной диагонали диагональной матрицы D – это вычисленные $d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn}$.

Как и в случае несимметричной матрицы, можно использовать схему с меньшими требованиями к памяти компьютера при программной реализации:

$$\begin{aligned}
a_{ij}^{(0)} &= a_{ij}, \quad i=1,2,\dots,n, \quad j=1,2,\dots,i; \\
k &= 1, 2, \dots, n-1: \\
i &= k+1, k+2, \dots, n: \\
t_i &= a_{ik}^{(k-1)} \\
a_{ik}^{(k)} &= \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \\
j &= k+1, \dots, i: \\
a_{ij}^{(k)} &= a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k)} t_j.
\end{aligned} \tag{5}$$

Осуществляются преобразования прямого хода метода Гаусса, но на место нулевых элементов (ниже ведущего элемента) на каждом k -м шаге записываются величины $\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$ (на которые умножается k -е уравнение перед вычитанием его из i -го уравнения), которые и есть элементы l_{ik} матрицы L . Вместо элементов верхнего треугольника используются равные им вычисленные ранее элементы нижнего треугольника; для хранения вычисленных на шаге $k-1$ величин $a_{ik}^{(k-1)}$ (они еще потребуются, но на текущем шаге k элементы a_{ik} переопределяются), используется временный массив t_i . Верхний индекс в алгоритме (5) оставлен для наглядности, при программировании он не используется.

После завершения вычислений на месте элементов нижнего треугольника матрицы A расположены соответствующие элементы матриц L и D .

Замечание 1. Формулы (4), в отличие от алгоритма (5) (компактная схема), не предназначены для программирования. Например, $a_{jk}^{(k-1)}$ берется

именно с шага $k-1$; при программировании надо позаботиться о корректном использовании ячейки памяти a_{jk} .

Для получения элементов матриц D и L можно также использовать формулы (10), (11) файла «Метод Гаусса»

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = i, \dots, n,$$

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right), \quad j = 1, \dots, n-1, \quad i = j+1, \dots, n.$$

Полагая в этих формулах $u_{ii}=d_{ii}$, $u_{kj}=l_{jk}d_{kk}$ (так как $U=DL^T$) и опуская вычисления при $j>i$, получим

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_{kk}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (6)$$

$$l_{ij} = \frac{1}{d_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} d_{kk} \right), \quad j = 1, \dots, n-1, \quad i = j+1, \dots, n. \quad (7)$$

Как и при вычислениях по формулам (10), (11) файла «Метод Гаусса», следует чередовать вычисления при одном фиксированном i по формулам (6) и вычисления при одном фиксированном j по формулам (7).

Разложение Холецкого

Рассмотрим теперь случай, когда матрица является не только симметричной, но и положительно определенной. Матрица A называется положительно определенной ($A>0$), если $a^T A a > 0$ для любого ненулевого вектора a . Необходимым и достаточным условием положительной определенности матрицы является положительность всех ее угловых миноров, т.е. $\Delta_1 > 0$, $\Delta_2 > 0$, ..., $\Delta_n > 0$.

Теорема 2 (разложение Холецкого). Пусть A – симметричная положительно определенная матрица. Тогда матрицу A можно представить, причем единственным образом, в виде $A=R^T R$, где R – верхняя треугольная матрица с положительными диагональными элементами.

Доказательство. Матрица A удовлетворяет условиям теоремы 1, поэтому ее единственным образом можно представить в виде $A=(R_1)^T D R_1$, где R_1 – верхняя треугольная матрица с единичной диагональю, D – диагональная матрица. Подробнее, R_1 – верхняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, полученная из матрицы U разложения $A=LU$ делением k -й строки на u_{kk} , $1 \leq k \leq n$, $D=\text{diag}(d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn}) = \text{diag}(u_{11}, u_{22}, \dots, u_{nn})$ – диагональная матрица, ненулевые элементы которой есть элементы главной диагонали матрицы U . Так как $\Delta_1 > 0$, $\Delta_2 > 0$, ..., $\Delta_n > 0$, то (см. замечание 4 файла «Метод Гаусса»)

$$d_{11} = u_{11} = \Delta_1 > 0, \quad d_{mm} = u_{mm} = \frac{\Delta_m}{\Delta_{m-1}} > 0, \quad m = 2, \dots, n.$$

Тогда

$$A = (R_1)^T \text{diag}(d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn}) R_1 = \\ (R_1)^T \text{diag}(\sqrt{d_{11}}, \dots, \sqrt{d_{nn}}) \text{diag}(\sqrt{d_{11}}, \dots, \sqrt{d_{nn}}) R_1 = R^T R,$$

где $R = \text{diag}(\sqrt{d_{11}}, \dots, \sqrt{d_{nn}}) R_1$ – требуемая верхняя треугольная матрица с положительными диагональными элементами. Теорема доказана.

Перейдем к выводу формул для получения разложения Холецкого.

Рассмотрим разложения $A = LU$, $A = R^T R$, определяемые теоремой об LU-разложении и теоремой 2. Как следует из доказательства теоремы 2, R – это верхняя треугольная матрица, полученная из матрицы U делением k -й строки на $\sqrt{u_{kk}}$ (а R^T – это нижняя треугольная матрица, полученная из матрицы L умножением k -го столбца на $\sqrt{u_{kk}}$). Поэтому для получения элементов матрицы R можно взять за основу какой-либо алгоритм LU-разложения.

Возьмем за основу компактную схему Гаусса (алгоритм (13) файла «Метод Гаусса»):

$$a_{ij}^{(0)} = a_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, n;$$

$$k = 1, 2, \dots, n-1:$$

$$i = k+1, k+2, \dots, n:$$

$$a_{ik}^{(k)} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}},$$

$$j = k+1, k+2, \dots, n:$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k-1)}.$$

Здесь $a_{ik}^{(k)} = l_{ik}$, $a_{kj}^{(k-1)} = u_{kj}$, $a_{kk}^{(k-1)} = u_{kk}$. Для получения r_{kj} воспользуемся тем, что $a_{ik}^{(k-1)} = a_{ki}^{(k-1)}$ (поэтому, в частности, преобразования матрицы ниже главной диагонали не нужны), $r_{kj} = \frac{u_{kj}}{\sqrt{u_{kk}}}$ (в частности, $r_{kk} = \sqrt{u_{kk}}$), $a_{kj}^{(k-1)} = u_{kj}$, $a_{kk}^{(k-1)} = u_{kk}$:

$$a_{ij}^{(0)} = a_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, i;$$

$$k = 1, 2, \dots, n-1:$$

$$i = k+1, k+2, \dots, n:$$

$$l = \frac{a_{ki}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}},$$

$$j = i, \dots, n:$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l a_{kj}^{(k-1)},$$

$$r_{kk} = \sqrt{a_{kk}^{(k-1)}},$$

$$j = k, \dots, n:$$

(8)

$$r_{kj} = \frac{a_{kj}^{(k)}}{r_{kk}}.$$

Для получения элементов матрицы R можно также использовать формулы (10) файла «Метод Гаусса»

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = i, \dots, n,$$

с учетом равенств $r_{ij} = \frac{u_{ij}}{\sqrt{u_{ii}}}$ (в частности, $r_{ii} = \sqrt{u_{ii}}$), $r_{ik}^T = l_{ik} \sqrt{u_{kk}} = r_{ki}$:

$$r_{ij} r_{ii} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki} r_{kj}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = i, \dots, n.$$

Отсюда, выделяя случай $i=j$, получим

$$r_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} (r_{ki})^2}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (9)$$

$$r_{ij} = \frac{1}{r_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki} r_{kj} \right), \quad i = 1, \dots, n-1, \quad j = i+1, \dots, n. \quad (10)$$

При вычислениях по формулам (9), (10) сначала производятся все вычисления для $i=1$, затем для $i=2$, и так далее.

Получить элементы матрицы R^T можно исходя из формул (6), (7), предназначенных для вычисления LDL^T -разложения $A = LDL^T$. Напомним, R^T – это нижняя треугольная матрица, полученная из матрицы L умножением k -го столбца на $\sqrt{d_{kk}}$. Так как $r_{ii}^T = \sqrt{d_{ii}}$, $r_{ik}^T = l_{ik} \sqrt{d_{kk}}$, то из (6), (7) сначала получим

$$(r_{ii}^T)^2 = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} (r_{ik}^T)^2, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$\frac{r_{ij}^T}{r_{jj}^T} = \frac{1}{(r_{jj}^T)^2} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} r_{ik}^T r_{jk}^T \right), \quad j = 1, \dots, n-1, \quad i = j+1, \dots, n,$$

затем

$$r_{ii}^T = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} (r_{ik}^T)^2}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (11)$$

$$r_{ij}^T = \frac{1}{r_{jj}^T} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} r_{ik}^T r_{jk}^T \right), \quad j = 1, \dots, n-1, \quad i = j+1, \dots, n. \quad (12)$$

Вычисления при одном фиксированном i по формулам (11) чередуются с вычислениями при одном фиксированном j по формулам (12).

Замечание 2. В рассмотренных разложениях выбор ведущего элемента отсутствует. Все прямые методы, не использующие выбор ведущего элемента, приводят к неустойчивым, вообще говоря, алгоритмам.

Замечание 3. Разложением Холецкого наряду с представлением $A=R^TR$ называют также представление вида $A=LL^T$ и, соответственно, в формулах (11), (12) вместо r_{ii}^T и r_{ik}^T используются обозначения l_{ii} и l_{ik} . Следует понимать, что матрица L в разложении Холецкого $A=LL^T$ не совпадает с рассмотренной ранее матрицей L в разложениях $A=LU$, $A=LDL^T$ (элементы столбцов отличаются на множитель).

Замечание 4. Реализации разложения Холецкого $A=LL^T$ в известных библиотеках LINPACK и LAPACK, основанных на BLAS, используют вычисления скалярных произведений (суммы (11), (12)) в виде вызова соответствующей подпрограммы. По сравнению с реализациями путём вычитания из элемента покомпонентных произведений, являющихся частями скалярных произведений, это влечёт за собой дополнительную операцию суммирования на каждый из $n(n+1)/2$ вычисляемый элемент матрицы L . Но основной недостаток – не наличие лишних операций, а то, что в используемых BLAS подпрограммах скалярное произведение реализовано без режима накопления. Это перечёркивает имеющиеся для разложения Холецкого наименьшие среди разложений оценки эквивалентного возмущения, поскольку они выведены в предположении использования режима накопления при вычислении скалярных произведений. Поэтому при использовании реализации разложения Холецкого без режима накопления, можно не получить желаемую вычислительную точность (придется использовать подпрограммы двойной точности) [4].

Замечание 5. В настоящее время считается [4], что популярность разложения Холецкого, оправданная для систем с очень маленькой памятью, устарела и для решения тех же задач вместо разложения Холецкого следует использовать LDL^T -разложение. Достоинство LDL^T -разложения состоит также в том, что при его получении не требуется находить квадратные корни и поэтому оно существует не только для положительно определенных матриц.

Замечание 6. Существует блочная версия разложения Холецкого. Блочная версия применяется для повышения производительности вычислений.

Замечание 7 (о разложении матрицы с комплексными элементами). Пусть матрица A является эрмитовой, т.е. выполняется равенство $A=A^*$ (т.е. $a_{ij} = \overline{a_{ji}}$) и все ее угловые миноры отличны от нуля. Тогда матрицу A можно представить в виде $A=S^*DS$, где S – верхняя треугольная матрица с положительными элементами на главной диагонали, S^* – матрица, комплексно-сопряженная с матрицей S , D – диагональная матрица с элементами ± 1 по диагонали.

Решение систем на основе разложения симметричных матриц

После факторизации матрицы A процесс решения системы $Ax=b$ распадается на решение систем с треугольными и диагональной матрицами. Рассмотрим этапы получения решения для случая LDL^T -разложения:

- получение разложения $A=LDL^T$ по формулам (4), или (5), или (6), (7); тогда система примет вид $LDL^Tx=b$, или $Ly=b$, где $y=Dz$, $z=L^Tx$;
- решение системы $Ly=b$ с нижней треугольной матрицей;
- решение системы $Dz=y$ с диагональной матрицей;
- решение системы $L^Tx=z$ с верхней треугольной матрицей.

Подсчитаем число умножений и делений, требуемых для нахождения LDL^T -разложения по формулам (4) или (5):

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^n \left(1 + \sum_{j=k+1}^i 1 \right) &= \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^n (i-k+1) = \sum_{k=1}^{n-1} \left(\sum_{i=k+1}^n i - (k-1) \sum_{i=k+1}^n 1 \right) = \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{k+1+n}{2} (n-k) - (k-1)(n-k) \right) = \sum_{k=1}^{n-1} \left((n-k) \frac{n-k+3}{2} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 + \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{1}{2} \left(\frac{(n-1)n(2n-1)}{6} + \frac{3n(n-1)}{2} \right) = \\ &= \frac{1}{2} n(n-1) \frac{n+4}{3}. \end{aligned}$$

Здесь использовались формулы

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{n(n-1)}{2}, \quad \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6}.$$

Получение LDL^T -разложения требует порядка $\frac{1}{6}n^3$ операций (умножения и деления), решение систем $Ly=b$, $Dz=y$ и $L^Tx=z$ требует порядка n^2 операций. Таким образом, вычислительная сложность при больших n примерно в 2 раза меньше, чем вычислительная сложность метода Гаусса. Это ожидаемо, так как данный алгоритм, в отличие от метода Гаусса, использует свойство симметрии.

Замечание 8. Применение разложения Холецкого для решения систем линейных алгебраических уравнений называют методом Холецкого или методом квадратного корня (название связано с характерными операциями, отсутствующими в родственных разложениях Гаусса). Получения решения системы $Ax=b$ для случая разложения $A=S^*DS$ также называют методом квадратного корня (операции извлечения корня присутствуют в алгоритмах получения разложения).

Замечание 9. Все рассмотренные разложения можно также использовать для вычисления определителя матрицы A . Например, для случая LDL^T -разложения имеем:

$$\det A = \det L \det D \det L^T = d_{11} \dots d_{nn}.$$

Список использованных источников

1. Самарский А.А. Гулин А.В. Численные методы. М: Наука. 1989. 432 с.
2. Репников В.И. Вычислительные методы алгебры. Курс лекций. Минск. Белгосуниверситет. Кафедра вычислительной математики. 2011.
3. Андреев В.Б. Численные методы. Часть I.
4. Фролов А.В., Воеводин Вад.В., Коньшин И.Н., Теплов А.М. Исследование структурных свойств алгоритма разложения Холецкого: от давно известных фактов до новых выводов // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2015): Труды международной научной конференции (Екатеринбург, 31марта – 2 апреля 2015 г.). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2015. С. 365–369.

Кстати, симметричная матрица имеет только действительные собственные значения, а положительно определенная – только положительные.