

# 大型对称不定箭形线性方程组的分解方法

赵金熙<sup>\*\*</sup> 舒继武 张德富 王卫国<sup>\*\*</sup>

(南京大学软件新技术国家重点实验室, 南京 210093)

## A DIRECT METHOD FOR SOLVING SYMMETRIC INDEFINITE ARROW LINEAR SYSTEMS

Zhao Jinxin Shu Jiwu Zhang Defu Wang Weiguo

(Nanjing University)

**Abstract** An algorithm used generalized Cholesky factorization for symmetric indefinite arrow linear systems is presented. It is shown that the given algorithm is stable under some suitable conditions.

Computation tests are given to show the main features of the algorithm.

**Key words** Arrow linear systems, generalized Cholesky factorization, domain decomposition.

**AMS(1991) Subject classification** 65F10 65N55.

中图法分类号 O151.2.

### 1 引 言

首先考虑  $2 \times 2$  矩阵

$$K = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & k \end{bmatrix}.$$

显然当  $k > \frac{1}{2}$  时, 矩阵  $K$  是对称正定的, 且  $K$  可以分解成 Cholesky 因子:

---

收稿日期, 1996-09-17,

- 本研究工作得到国家 863-306 项目的资助;
- 作者在南京大学数学系, 本研究工作得到江苏省自然科学基金的部分资助.

$$K = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \sqrt{\frac{2k-1}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \sqrt{\frac{2k-1}{2}} \end{bmatrix}.$$

当  $k = \frac{1}{2}$  时,  $K$  为奇异矩阵; 而当  $k < \frac{1}{2}$  时,  $K$  为对称不定矩阵, 这时  $K$  有广义 Cholesky 分解式:

$$K = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \sqrt{\frac{1-2k}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\sqrt{\frac{1-2k}{2}} \end{bmatrix}.$$

并且这种分解是稳定的. 一般地我们给出定义<sup>[1,7]</sup>

定义 1.1 设有矩阵  $K \in R^{(m+n) \times (m+n)}$ , 若总存在排列矩阵  $P \in R^{(m+n) \times (m+n)}$  和对称正定矩阵  $H \in R^{m \times m}$ ,  $G \in R^{n \times n}$  使得

$$PKP^T = \begin{bmatrix} H & A^T \\ A & -G \end{bmatrix}, \quad (1.1)$$

则称矩阵  $K$  为对称拟定 (Symmetric quasidefinite) 矩阵.

从该定义可以看出, 若  $K$  为对称拟定矩阵, 则其必为不定矩阵, 且在一定的条件下为非奇异. 可以证明<sup>[1,7]</sup> 对称拟定矩阵是强可分解的, 即对每个排列矩阵  $P$ , 总存在对角矩阵  $D$  和下三角矩阵  $L$ , 使得

$$PKP^T = LDL^T. \quad (1.2)$$

我们称 (1.2) 式为  $PKP^T$  的广义 Cholesky 分解<sup>[7]</sup>. 而  $D$  也为不定矩阵. 因此一般的稳定性分析结果这里用不上, 且这种分解也可能是不稳定的.

作为一个例子, 对称拟定矩阵

$$K = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -(k+1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

则对任何  $k > 0$ ,  $K$  的广义 Cholesky 分解都存在, 且总能得到有限精度的分解因子.

而另一方面, 矩阵

$$K = \begin{bmatrix} k & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

也是对称拟定矩阵, 这时

$$K = \begin{bmatrix} k & 1 \\ 1/k & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ 0 & -(1 + \frac{1}{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{k} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

尽管  $K$  存在广义 Cholesky 分解, 但当  $|k| \rightarrow 0$  有限精度的算法变得不稳定. 关于对称拟定矩阵的广义 Cholesky 分解稳定性分析可参看[1].

由于对称拟定矩阵在数值最优化、微分方程数值解中有着重要的应用, 特别是大型稀疏对称拟定矩阵计算更是近年来讨论的一个热点, 可参看[1, 2, 3, 4, 5, 7]. 本文主要讨论在椭圆形偏微分区域分解法中出现的一类特殊对称系统<sup>[2]</sup>,



我们有

**定理 2.1<sup>[9]</sup>** 在线性系统(1.3)中,  $A_1, A_2, \dots, A_p$  为对称正定阵, 则系数矩阵  $K$  为对称正定矩阵的充要条件是

$$\tilde{Q} = Q - \sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i$$

为对称正定矩阵.

事实上, 若矩阵  $K$  是正定的, 且以  $\lambda_i(X)$  表示某个矩阵  $X$  的第  $i$  个特征值并以降序排列, 则有特征值的单调性可得

$$\lambda_i(Q) \geq \lambda_i\left(\sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i\right), \quad i = 1, 2, \dots, p,$$

$$\begin{aligned} \lambda_i(\tilde{Q}) &= \lambda_i\left(Q - \sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i\right) \\ &\leq \lambda_j(Q) - \lambda_l\left(\sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i\right), \quad \forall j+l \leq i+1. \end{aligned}$$

由[7]的结果可知, 在矩阵  $K$  中若  $Q$  为零矩阵且  $B_i, i=1, 2, \dots, p$  中至少有一个为列满秩矩阵, 则矩阵  $K$  一定存在广义 Cholesky 分解, 则我们有

**定理 2.2<sup>[7]</sup>** 在线性系统(1.3)中, 若  $A_1, A_2, \dots, A_p$  为对称正定矩阵, 而

$$\tilde{Q} = Q - \sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i$$

是负定矩阵, 则矩阵  $K$  一定存在广义 Cholesky 分解, 即

$$K = \begin{bmatrix} A_1 & & & B_1 \\ & \ddots & & \vdots \\ & & A_p & B_p \\ B_1^T & \dots & B_p^T & Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & L_p & \\ E_1^T & \dots & E_p^T & \tilde{G} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_1^T & & & E_1 \\ & \ddots & & \vdots \\ & & L_p^T & E_p \\ & & & -\tilde{G}^T \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

这里  $L_1, L_2, \dots, L_p, G$  都为非奇异下三角阵.

由定理 2.2 我们可以看出, 若  $Q$  为负定矩阵时, 矩阵  $K$  就一定是对称拟定矩阵, 这时  $K$  一定有  $\sum_{i=1}^p r_i$  个正特征值,  $r$  个负的特征值.

另一方面有时尽管  $Q$  不一定是负定矩阵, 但

$$\tilde{Q} = Q - \sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i \quad (2.5)$$

是负定阵, 这时由定理 2.2 可知, 矩阵  $K$  一定存在广义 Cholesky 分解式(2.4)式. 这就是说, 我们这里讨论的是比对称拟定矩阵更广的一类不定矩阵. 事实上满足下列二个条件之一就能保证(2.5)式中的矩阵  $\tilde{Q}$  为负定阵:

- (a)  $Q$  为半负定阵但  $B_1, B_2, \dots, B_p$  中至少有一个列满秩矩阵;
- (b)  $Q$  为负定阵.

即满足上面给出的条件(a)、(b)中的任一条, 矩阵  $K$  就有(2.4)的分解式.

## 3 算法的实现

对于线性系统(1.3),若矩阵  $K$  中的  $Q$  满足

$$\tilde{Q} = Q - \sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i$$

为负定的条件,则我们考虑  $K$  的广义 Cholesky 分解的实现,由于  $A_1, A_2, \dots, A_p$  为对称正定矩阵,故容易得到其 Cholesky 分解式,即

$$A_i = L_i L_i^T, \quad i = 1, 2, \dots, p. \quad (3.1)$$

为了得到分解式(2.4)就得计算  $E_i, i=1, 2, \dots, p$ . 即

$$E_i = L_i^{-1} B_i, \quad i = 1, 2, \dots, p. \quad (3.2)$$

这可以通过回代求解一个矩阵方程得到  $E_i$ . 事实上 们可以由下列递推式计算得到  $E_i$ , 设

$$L_i = [l_{ij}] \in R^{r_i \times r_i}, \quad B_i = [b_{ij}] \in R^{r_i \times r}, \quad E_i = [e_{ij}] \in R^{r_i \times r}.$$

则  $E_i$  的元素  $e_{ij}$  可由下列表达式得到:

$$\begin{aligned} e_{1j} &= b_{1j}/e_{11}, & j &= 1, 2, \dots, r, \\ e_{ij} &= (b_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} e_{kj})/l_{ii}, & i &= 2, \dots, r_i, \\ & & j &= 1, 2, \dots, r. \end{aligned} \quad (3.3)$$

这样依次得到  $E_1, E_2, \dots, E_p$  后就可计算

$$\tilde{Q} = Q - \sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i = Q - \sum_{i=1}^p E_i^T E_i.$$

注意到这里  $Q$  为满足前面条件(a)或(b)的矩阵,故我们分两种情况讨论.

(1) 若  $Q=0, A_1, A_2, \dots, A_p$  中至少有一个为满秩矩阵,这时矩阵

$$E^T = (E_1^T, \dots, E_p^T) \in R^{r \times r}, \quad \bar{r} = \sum_{i=1}^p r_i,$$

必为行满秩矩阵. 故这时若  $E_i$  为大型矩阵,则可利用分块直交分解方法(QR 分解),得到

$$E = \begin{bmatrix} E_1 \\ \vdots \\ E_p \end{bmatrix} = Q_1 R, \quad (3.4)$$

其中  $Q_1 \in R^{r \times r}$  的列直交阵,  $R \in R^{r \times r}$  上三角矩阵. 并注意到在对  $E$  进行 QR 分解时,我们并不需要保留到直交矩阵  $Q_1$ . 这时令

$$\tilde{C} = R^T,$$

就可得到

$$\tilde{C} \tilde{C}^T = -\tilde{C} = \sum_{i=1}^p E_i^T E_i. \quad (3.5)$$

从而完成了(2.4)的广义 Cholesky 分解.

(2) 若  $Q$  为对称负定矩阵,则可先对  $-Q$  进行 Cholesky 分解,即

$$Q = -L_0 L_0^T,$$

其中  $L_0 \in R^{r \times r}$  为下三角矩阵. 然后利用分块直交分解对矩阵

$$\tilde{E} = \begin{bmatrix} E_1 \\ \vdots \\ E_p \\ L_Q^T \end{bmatrix} \in R^{r \times r}, \quad r = \sum_{i=1}^p r_i + r,$$

进行 QR 分解得到

$$\tilde{E} = Q_2 \tilde{R}, \quad (3.6)$$

这里  $Q_2 \in R^{r \times r}$  为列直交阵,  $\tilde{R} \in R^{r \times r}$  上三角阵. 故令

$$\tilde{G} = \tilde{R}^T.$$

这样就得到

$$\begin{aligned} \tilde{G}\tilde{G}^T &= [E_1^T, \dots, E_p^T, L_Q] \begin{bmatrix} E_1 \\ \vdots \\ E_p \\ L_Q^T \end{bmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^p E_i^T E_i - Q. \end{aligned} \quad (3.7)$$

故得到了对称不定阵  $K$  的广义 Cholesky 分解式 (2.4). 前面已经讲到, 对称拟定矩阵一定是强可分解的, 而我们这里讨论的广义 Cholesky 分解实际上是对称拟定矩阵更广的一类矩阵, 即

$$\tilde{Q} = Q - \sum_{i=1}^p B_i^T A_i^{-1} B_i$$

为负定的情况.

当系统 (1.3) 中的矩阵  $Q$  为负定矩阵时, 我们可以给出如下解系统方程组 (1.3) 的算法.

#### 算法

1. 对  $i=1, 2, \dots, p$  计算  $A_i$  的 Cholesky 因子和  $E_i$ :

$$A_i = L_i L_i^T, \quad E_i = L_i^{-1} B_i.$$

2. 对  $-Q$  进行 Cholesky 分解:  $Q = -L_Q L_Q^T$ .

3. 用分块 QR 分解得到:

$$\tilde{E} = \begin{bmatrix} L_Q^T \\ E_1 \\ \vdots \\ E_p \end{bmatrix} = Q_2 \tilde{R}.$$

4. 令  $\tilde{G} = \tilde{R}^T$ .

5. 通过回代得到 (1.3) 的解:

$$5.1 \text{ 对 } i=1, 2, \dots, p \text{ 计算 } y_i = L_i^{-1} f_i; y_{p+1} = \tilde{G}^{-1} (g - \sum_{i=1}^p E_i^T y_i).$$

$$5.2 \text{ 对 } i=p, p-1, \dots, 1 \text{ 计算 } x_i = L_i^{-T} (y_i - E_i Z).$$

这样

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \\ z \end{bmatrix}$$

就是我们所要求的解向量.

值得注意的是对于这样的箭形矩阵系统,我们很容易用并行计算实现上述算法.若有  $p$  台处理机,则首先利用第  $i$  台处理机对  $A_i$  进行 Cholesky 分解并计算  $E_i = L_i^{-1}B_i$ , 然后完成  $\sum_{i=1}^p E_i^T E_i - Q$  的并行 Cholesky 分解以及后面的回代过程.因此该算法的安排是紧凑的,这对减少工作量和存储空间是很有利的.

#### 4 稳定性分析

在这一节我们仅考虑(1.3)中  $Q$  为对称负定矩阵时的情形.这时我们可取

$$Q = -W,$$

而  $W$  为  $r \times r$  对称正定阵.这样

$$K = \begin{bmatrix} \tilde{A} & B \\ B^T & -W \end{bmatrix} = KI,$$

其中

$$K = K = \begin{bmatrix} \tilde{A} & -B \\ B^T & W \end{bmatrix}, \quad I = K = \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & -I_r \end{bmatrix}, \quad \tilde{r} = \sum_{i=1}^p r_i.$$

令

$$T = (K + K^T)/2 = K = \begin{bmatrix} \tilde{A} & 0 \\ 0 & W \end{bmatrix}, \quad S = (KK^T)/2 = K = \begin{bmatrix} 0 & -B \\ B^T & 0 \end{bmatrix}.$$

故  $T$  为对称正定阵,即  $K$  为非对称正定阵.

下面我们考虑  $Kx=f$  的扰动方程组  $(K+\Delta k)\hat{x}=f$ , 不设一般性由上面的变换,我们总可假设  $K$  为非对称正定阵,这样我们可以利用 Golub 和 Van Loan 在[2]中给出的定理,对(1.3)进行扰动分析.

设  $K$  的精确广义 Cholesky 分解为

$$K = L_1 L_2^T,$$

而实际计算得到的因子分解为  $\hat{L}_1$  和  $\hat{L}_2^T$ . 我们假设它们是有界的,即存在  $r$ , 使得

$$\|\hat{L}_1\| \|\hat{L}_2^T\| \leq r \|L_1\| \|L_2^T\|. \quad (4.1)$$

同时我们令

$$r' = \sum_{i=1}^p r_i + r.$$

并设  $\mu$  为单位浮点舍入. 这时可得<sup>[2]</sup>,

$$\|\hat{L}_1\| \|\hat{L}_2^T\| \leq r' (\|T\|_2 + \|ST^{-1}S\|_2). \quad (4.2)$$



$$x^T = (x_1^T, x_2^T, \dots, x_n^T)^T = (1, 2, \dots, n, n+1, \dots, 2n, \dots, 5n)^T.$$

我们来看一下问题(5.1)的性态,首先可以看出,子矩阵  $A_1, A_2, \dots, A_4$  都是对称正定矩阵,且是好条件的. 而取  $n \times n$  对称矩阵  $Q=0$  时, (5.1) 就是一个  $5n \times 5n$  的对称不定矩阵系统. 显然,我们用本文讨论的广义 Cholesky 分解求解该问题时,矩阵

$$\tilde{Q} = \sum_{i=1}^4 B_i^T A_i^{-1} B_i \quad (5.2)$$

的条件对解的影响很大,所以我们首先给出  $\tilde{Q}$  的极端特征值和谱条件数.

表1  $\tilde{Q}$  的极端特征值和谱条件数

方程组阶数 $m=5n$	$\lambda_{\max}(\tilde{Q})$	$\lambda_{\min}(\tilde{Q})$	$\text{cond}(\tilde{Q})$
30	4.141E+02	0.0515	8.04E+03
40	1.250E+03	0.0484	2.58E+04
250	1.678E+06	0.0449	3.74E+07
300	3.465E+06	0.0449	7.72E+07
400	1.089E+07	0.0448	2.43E+08
500	2.650E+07	0.0448	5.91E+08

从表1可以看出,随着方程组阶数的增高, $\tilde{Q}$  的条件数也变大,由下列可以看出,  $\text{cond}(\tilde{Q})$  对解的影响也是很大的,在表2中我们所用的精度指标为:

$$E = \|x - x^*\|_2. \quad (5.3)$$

这里  $x, x^*$  分别为计算得到的解和精确解.

表2 解的精度表

方程组阶数	30	40	250	300	350	400	500
计算精度 指标	3.57E-11	71.E-10	3.19E-06	8.42E-06	1.84E-05	3.44E-05	1.62E-4

从表2可以看出,广义 Cholesky 分解对称不定“箭形”方程组还是相当有效的,且其解的精度与  $\text{cond}(\tilde{Q})$  有很大关系.

作者对本文审稿人得出的修改意见和建议,特别是对定理2.1的简化表示衷心的感谢

### 参 考 文 献

- 1 Gill, P. E. Saunders, M. A. and Shinnerl, J. R., On the stability of Cholesky factorization for symmetric quasidefinite systems, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 17(1996), No. 1.
- 2 Golub, G. H. and Van Loan, C. F., Matrix Computations, Second ed., The Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 1989.

- 3 Forsgren, A. , Gill, P. E. and Shinnerl, J. R. , Stability of symmetric ill-conditioned systems arising in interior methods for constrained optimization, SIAM J. Matrix Anal. Appl. , 17(1996), No. 1.
- 4 Duff, I. S. , The solution of augmented systems, RAL-93-084, Rutherford Appleton Laboratory, 1993.
- 5 Ren, W. and Zhao, J. , Iterative methods with Preconditioners for indefinite systems, submitted to LAA, 1996.
- 6 赵金熙,解广义半正定线性方程组的一类直接方法,高等学校计算数学学报,18(1996), No. 1, 62-68.
- 7 赵金熙,对称不定矩阵的广义 Cholesky 分解方法,计算数学,18(1996),No. 4.
- 8 赵金熙,解等式约束加权线性最小二乘问题的矩阵校正方法,高等学校计算数学学报,18(1996), No. 2, 97-103.
- 9 Horn, R. A. and Hohnson, C. R. , Matrix analysis, Cambridge University Press, 1985.