

对称不定矩阵的广义 Cholesky 分解法^{*1)}

赵金熙

(南京大学)

THE GENERALIZED CHOLSKY FACTORIZATION METHOD FOR SOLVING SYMMETRIC INDEFINITE LINEAR SYSTEMS

Zhao Jin-xi

(Nanjing University, Nanjing)

Abstract

We develop and analyze the generalized Cholesky factorization method for solving symmetric indefinite linear systems arising from discretization of the Stokes equations and in the context of minimization of quadratic forms subject to linear constraints. The new method presented here has the advantages of being both the computational cost and storage space. Operation counts of this method are same as the Cholesky factorization method for solving symmetric positive definite systems. The numerical example shows the effectiveness for the generalized Cholesky factorization method.

1. 引言

在具等式约束的二次规划及所谓鞍点问题中,经常会遇到解线性方程组

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}, \quad (1)$$

其中 $A \in R^{m \times m}$ 为对称正定阵, $B \in R^{n \times m}$ 为行满秩阵; $C \in R^{n \times n}$ 为对称半正定矩阵. 这类线性方程组有重要的应用背景. 例如对于 Stokes 方程:

$$\begin{aligned} -\Delta \mu + \nabla p &= f, \\ -\operatorname{div} u &= 0, \quad \text{在 } \Omega \text{ 上,} \\ u &= 0, \quad \text{在 } \partial\Omega \text{ 上,} \\ \int_{\Omega} p &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

* 1995年9月25日收到.

1) 国家 863 计划及江苏省自然科学基金资助项目.

这里 Ω 是在 R^d ($d = 2$ 或 3) 中的单连通有界区域. 这是计算流体力学中的一个基本问题. 用有限差分或有限元素技术离散化 (2) 时, 就会导出解方程组 (1) 的问题 [4].

由于 (1) 是一个对称不定问题, 对直接法而言, 可用 Bunch-Parlett 分解 [3], 即把原系数矩阵分解成

$$G = U^T D U$$

的形式, 其中 U 是上三角阵, D 为主对角块为 1×1 或 2×2 的对角形矩阵. 这种分解对问题 (1) 的特殊结构没有充分利用, 且由于块状主对角矩阵 D 的特殊性, 也会给计算带来一些困难. 因此许多学者转而研究用迭代法解问题 (1), 如 Elman 和 Golub [4] 提出了不精确 Uzawa 算法:

```
for  $k = 0$  until convergence, do
  compute  $u_{k+1}$  such that  $Au_{k+1} = f - B^T p_k + \delta_k$ 
  compute  $p_{k+1} = p_k + \alpha (Bu_{k+1} - Cp_k)$ 
end do
```

样该算法中问题 (1) 的 $g = 0$, 关于用迭代法解问题 (1) 的讨论可参见 [1, 2, 9, 5].

本文提出一种广义 Cholesky 分解算法, 其计算复杂性、存储量要求保持与对称正定矩阵时的 Cholesky 分解方法相同. 数值检验表明新算法是相当有效的.

2. 广义 Cholesky 分解

问题 (1) 中的系数矩阵

$$G = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix},$$

由于 A 为对称正定阵, 故 A^{-1} 存在, 又由于 B 为行满秩矩阵, C 为半正定矩阵, 故 $(C + BA^{-1}B^T)$ 为对称正定阵, 其逆矩阵一定存在. 这样矩阵 G 的逆矩阵有显式形式:

$$G^{-1} = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{bmatrix},$$

其中

$$\begin{aligned} G_{11} &= A^{-1} + A^{-1}B^T G_{22} B A^{-1}, \\ G_{12} &= -G_{22} B A^{-1}, \\ G_{21} &= G_{12}^T, \\ G_{22} &= -(C + B A^{-1} B^T)^{-1}. \end{aligned}$$

据此可以看出, 问题 (1) 存在唯一解, 且

$$\begin{cases} \mu = G_{11}f + G_{12}g, \\ p = G_{21}f + G_{22}g. \end{cases} \quad (3)$$

另一方面, 当系数矩阵为对称正定时, 由于 Cholesky 分解方法存储需要量小, 计算工作量少, 仅约为 $\frac{N^3}{6}$ flops 及 N 次开方运算, 且数值稳定性好, 而成为直接法中最常用的算

法. 但由于这里矩阵 G 为不定矩阵, 故 Cholesky 分解失效. 但能否找到类似的分解式且能保持 Cholesky 分解的优点呢? 这里我们有,

定理. 设系数矩阵

$$G = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix} \in R^{(m+n) \times (m+n)}$$

为问题 (1) 中的系数矩阵, 则必存在分解式

$$G = L\bar{L}, \quad (4)$$

其中

$$L = \begin{bmatrix} L_A & 0 \\ L_B & L_C \end{bmatrix}, \quad \bar{L} = \begin{bmatrix} L_A^T & L_B^T \\ & -L_C^T \end{bmatrix}.$$

且 $L_A \in R^{m \times m}$ 为下三角阵, $L_B \in R^{n \times m}$, $L_C \in R^{n \times n}$ 为下三角阵. 除 \bar{L} 中 L_C^T 前的负号外, 分解式 (4) 是唯一的.

证明. 因为 A 为对称正定阵, 故一定存在下三角阵 L_A , 使得

$$A = L_A L_A^T.$$

取

$$L_B = B(L_A^T)^{-1},$$

故

$$B = L_B(L_A^T).$$

又由于 C 为半正定阵, 故 $C + L_B L_B^T$ 为对称正定阵. 故一定存在 Cholesky 分解

$$C + L_B L_B^T = L_C L_C^T.$$

这样就有

$$L\bar{L} = \begin{bmatrix} L_A & 0 \\ L_B & L_C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_A^T & L_B^T \\ & -L_C^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_A L_A^T & L_A L_B^T \\ L_B L_A^T & L_B L_B^T - L_C L_C^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix} = G.$$

故得证.

这个定理告诉我们, 尽管 G 是对称不定矩阵, 但仍存在类似的 Cholesky 分解因子. 在 (4) 中, $L \in R^{(m+n) \times (m+n)}$ 为下三角阵, $\bar{L} \in R^{(m+n) \times (m+n)}$ 为上三角阵, 且在计算中只要得到子矩阵 L_A, L_B 和 L_C 后, 就可形成下三角阵 L 和上三角阵 \bar{L} . 即形成 \bar{L} 无需额外工作量, 故我们称 (4) 式为矩阵 G 的广义 Cholesky 分解式.

据 (4) 式我们容易得到,

推论. 若 $\tilde{G} = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix}$, 其中 A, B 同前述, 则 \tilde{G} 有分解式

$$\tilde{G} = \tilde{L}\tilde{\bar{L}}, \quad (5)$$

其中

$$\tilde{L} = \begin{bmatrix} L_A & 0 \\ L_B & \tilde{L}_C \end{bmatrix}, \quad \tilde{\bar{L}} = \begin{bmatrix} L_A^T & L_B^T \\ 0 & -\tilde{L}_C^T \end{bmatrix}.$$

且 L_A, L_B 同定理中的定义, 而 \tilde{L}_C 为 $L_B L_B^T$ 的 Cholesky 分解式, 即

$$\tilde{L}_C \tilde{L}_C^T = L_B L_B^T. \quad (6)$$

由于 B 为行满秩矩阵, 故

$$L_B = B(L_A^T)^{-1}$$

必也为行满秩矩阵. 这说明 $L_B L_B^T$ 为对称正定阵, (6) 式中的 \tilde{L}_C 一定存在. 该推论实际上给出了对称不定阵 $\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix}$ 的广义 Cholesky 分解. 这也是一类有重要应用背景的不定矩阵 [7].

另外根据分解式 (4) 我们有,

推论 2. 设 $G = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix}$ 有广义 Cholesky 分解式

$$G = L\bar{L},$$

且 L_A, L_C 的主对角元分别为 $l_{ii}, i = 1, 2, \dots, m; v_{ii}, i = 1, 2, \dots, n$. 则

$$\det(G) = (-1)^n \prod_{i=1}^m l_{ii}^2 \prod_{j=1}^n v_{jj}^2 = (-1)^n \det(A) \det(C + BA^{-1}B^T). \quad (7)$$

证明略.

3. 广义 Cholesky 分解的实现

由 (4) 的分解式我们可以看出, 广义 Cholesky 分解与 Cholesky 分解相比, 仍然保留了 Cholesky 分解的所有优点, 且计算实现也是类似的. 令

$$A = [a_{ij}] \in R^{m \times m}, B = [b_{ij}] \in R^{n \times m}, C = [c_{ij}] \in R^{n \times n}.$$

且

$$L_A = [l_{ij}] \in R^{m \times m} \text{ 为下三角阵,}$$

$$L_B = [t_{ij}] \in R^{n \times m},$$

$$L_C = [v_{ij}] \in R^{n \times n} \text{ 为下三角阵,}$$

在以下的讨论中, 当指标 $j = 1$ 时表达式中的求和式 $\sum_{k=1}^{j-1}$ 取为 0.

由于

$$L_A L_A^T = A,$$

故得

$$l_{ij} = \begin{cases} \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, & i = j, \\ \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right) / l_{jj}, & i > j, \end{cases} \quad (8)$$

$$i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, i.$$

矩阵 $L_B = [t_{ij}]$ 的元素为

$$t_{ij} = \left(b_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} t_{ik}t_{jk} \right) / l_{jj} \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (9)$$

这说明在形成 $L_B = B(L_A^T)^{-1}$ 的元素时, 无需显式形成 L_A^{-1} , 而按 (9) 式计算即可确定 t_{ij} . 再由

$$L_C L_C^T = C + L_B L_B^T$$

得 $L_C = [v_{ij}]$ 的元素表达式为,

$$v_{ij} = \begin{cases} \left(c_{ii} + \sum_{k=1}^m t_{ik}^2 - \sum_{p=1}^{j-1} v_{ip}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, & i = j, \\ \left(c_{ij} + \sum_{k=1}^m t_{ik}t_{jk} - \sum_{p=1}^{j-1} v_{ip}v_{jp} \right) / v_{jj}, & i > j, \\ i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, i. \end{cases} \quad (10)$$

需要指出的是, 在实际计算中 L_A, L_B, L_C 分别复盖 A, B, C 的存贮单元, 使得程序更为紧凑、有效. 在得到 G 的广义 Cholesky 分解后, 问题 (1) 的解向量就容易求得了:

(1) 令

$$\begin{bmatrix} L_A & 0 \\ L_B & L_C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix},$$

故由回代 $L_A y_1 = f$ 得 y_1 ; 再由 $L_C y_2 = g - L_B y_1$ 回代得 y_2 .

(2) 类似地有

$$\begin{bmatrix} L_A^T & L_B^T \\ 0 & -L_C^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix},$$

既由 $L_C^T p = -y_2$, 得 p , 再由 $L_A^T u = y_1 - L_B^T p$ 得 u . 这样就得到解向量 $\begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix}$.

4. 几点讨论

对于广义 Cholesky 分解式, 其计算复杂性及存贮复杂性仍与 Cholesky 分解相一致. 约为 $\frac{N^3}{6}$ 次 flops, 这里 $N = m + n$, 以及 N 次开方运算.

另一方面, 由于 A 为对称正定阵, 故当 A 的最小特征值 $\lambda_m(A)$ 大于某一控制值时, 例如

$$\lambda_m(A) \geq 2.00002m^{\frac{1}{2}} \alpha \mu,$$

这里 $\alpha = \max_i (a_{ii})$, μ 为机器精度, 则 A 的 Cholesky 分解就能顺利进行. 事实上, 由 (8) 式得

$$a_{ii} = l_{i1}^2 + l_{i2}^2 + \dots + l_{ii}^2,$$

故有

$$l_{ik} \leq \sqrt{a_{ii}}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad k = 1, 2, \dots, i, \quad (11)$$

这说明 L_A 的元素不会增长太大.

下面我们注意 L_C 的元素的生长. 由于 L_A 的元素不会增长太大, 而 B 为行满秩矩阵, 故总能使

$$L_B = B(L_A^T)^{-1} = [t_{ij}] \in R^{n \times m}$$

的元素得到有效的控制. 不妨设

$$M = \max_{1 \leq j \leq n} |t_{j1}^2 + \dots + t_{jm}^2|.$$

由 (1) 式得

$$c_{ii} + \sum_{k=1}^m t_{ik}^2 = \sum_{p=1}^i v_{ip}^2 \quad (12)$$

而 C 为给定的半正定矩阵, $c_{ii} \geq 0, i = 1, 2, \dots, n$. 则有 (12) 式得

$$v_{ip} \leq \sqrt{c_{ii} + M}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad p = 1, 2, \dots, i$$

这同样说明 L_C 的元素增长一般不会太大. 在一定的条件下数值计算是稳定的.

5. 数值检验

我们在南京大学数学系中心实验室的 PC 386 计算机上, 用 Matlab 计算了下列问题:

$$\begin{bmatrix} A_m & B^T \\ B & -C_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}. \quad (13)$$

m, n 为取不同的值, 为保证 B 为行满秩, 故要求 $m \geq n$. (13) 中的矩阵分别确定为,

$$A_m = H_m + I_m \in R^{m \times m}, \quad H_m = \left[\frac{1}{i+j-1} \right], \quad I_m \text{ 为 } m \times m$$

单位矩阵. 故 A_m 为 $m \times m$ 对称正定阵.

$$B = [b_{ij}] = [\max(i, j)] \in R^{n \times m},$$

故 B 为行满秩矩阵.

$$C_n = U_n \Sigma_n U_n^T \in R^{n \times n},$$

其中

$$U_n = I_n - \frac{2}{w^T w} w w^T, \quad w = (1, 2, \dots, n)^T.$$

$$\Sigma_n = \text{diag}(1, 2, \dots, n-1, 0).$$

故 C_n 为 $n \times n$ 的对称半正定矩阵. 而 $f \in R^m, g \in R^n$ 的确定是使所检验问题总是有精确解

$$u^* = (1, 2, \dots, m)^T, \quad p^* = (m+1, m+2, \dots, m+n)^T.$$

计算得到的解记为 $x = \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix}$, 精确解记为 $x^* = \begin{bmatrix} u^* \\ p^* \end{bmatrix}$. 计算结果有下表给出.

m	广义 Cholesky 分解		Gauss 消去法		$\ x - x^*\ _2$
	n	flops	$\ x - x^*\ _2$	flops	
10	10	3998	9.4259e-12	8207	2.8856e-12
20	10	11533	3.4882e-11	24125	1.0046e-11
30	20	50321	4.7859e-10	100187	2.2251e-10
50	30	188938	6.1818e-09	384447	1.7993e-09
50	40	267548	1.7401e-08	540643	4.4792e-09
50	50	344524	2.0480e-08	733965	9.4886e-09

在表中所指的 Gauss 消去法是由 Matlab 给出的. 计算结果表明, 本文提出的广义 Cholesky 分解方法是相当有效的, 运算量小, 存贮空间少, 数值精度高, 是其优势所在.

参 考 文 献

- [1] R.E. Bank, B.D. Welfert, H. Yserentant, A class of iterative methods for solving saddle point problems, *Number. Math.*, **56** (1990), 645-666.
- [2] J.H. Bramble, J.E. Pasciak, A preconditioning technique for indefinite systems resulting from mixed approximations of elliptic problems, *Math. Comp.*, **5** (1988), 1-17.
- [3] J.R. Bunch, B.N. Parlett, Direct methods for solving symmetric indefinite systems of linear equations, *SIAM J. Num. Anal.*, **8** (1971), 639-655.
- [4] H.C. Elman, G.H. Golub, Inexact and preconditioned Uzawa algorithms for saddle point problems, Numerical Analysis project, Stanford University, NA-93-02, 1993.
- [4] G.H. Golub, M.A. Saunders, Linear least squares and quadratic programming, in J. Abadie, editor, *Integer and Nonlinear Programming*, New York, 1970, 229-256.
- [5] D.J. Silvester, Optimal low order finite element methods for incompressible flow, Technical Report 223, Mathematics Department, University of Manchester Institute of Science and Technology, 1992.
- [6] G.H. Golub, C.F. Van Loan, *Matrix Computations*, The John Hopkins University Press, Baltimore, 1989.
- [7] Y. Yuan, *Numerical Methods for Nonlinear Programming*, Shanghai Scientific & Technical Publishers, 1993.
- [8] 蒋尔雄, 对称矩阵计算, 上海科技出版社, 1984.
- [9] 赵金熙, 线性系统递推算法的研究, 南京大学博士论文, 1987.