

УДК 518.512.25

МЕТОДЫ ОБРАЩЕНИЯ ТРЕХДИАГОНАЛЬНЫХ МАТРИЦ *

В. БУХВЕРГЕР, Г. А. ЕМЕЛЬЯНЕНКО

(Исбрук—Дубна)

Получены эффективные алгоритмы обращения симметричных трехдиагональных матриц.

С трехдиагональными матрицами приходится работать не только при применении метода конечных разностей к краевым задачам для дифференциальных уравнений второго порядка [2], но и при решении задач ядерной физики [3]. Поэтому большой интерес вызывают экономичные методы обращения на ЭВМ ленточных матриц большого порядка.

В работе получены эффективные алгоритмы обращения симметричных трехдиагональных матриц. Доказана теорема об одном свойстве матрицы, обратной к трехдиагональной. Приводится сравнение полученных методов обращения с другими методами. Доказанная теорема полезна при решении в аналитическом виде проблемы обработки физической информации о движении заряженных частиц в пузырьковых камерах [4].

Пусть A — неособенная симметричная трехдиагональная матрица

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & a_2 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & a_3 & & \\ & a_3 & b_3 & a_4 & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ & 0 & & & a_n \\ & & & & a_n b_n \end{pmatrix}, \quad a_i, b_i \neq 0.$$

Найдем матрицу, обратную к A . Для этого воспользуемся разложением A в виде [1]

$$(1) \quad A = DQC, \quad D = (d_{ij}), \quad Q = (q_{ij}), \quad C = (c_{ij}),$$

где

$$d_{ij} = \begin{cases} b_i + C_i a_i, & i = j, \quad C_i = 0, \\ 0, & i \neq j; \end{cases}$$

$$q_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ \frac{a_i}{b_i + C_i a_i}, & i = j + 1, \quad j = 1, 2, \dots, n - 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях;} \end{cases}$$

* Результаты опубликованы в [1].

$$c_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ -C_j, & i = j - 1, j = 2, 3, \dots, n, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Из условия симметрии матрицы A получаем рекурсивную зависимость для коэффициентов C_i :

$$(2) \quad C_i = 0, \quad C_i = -\frac{a_i}{b_{i-1} + C_{i-1}a_{i-1}}, \quad 2 \leq i \leq n.$$

Матрицу, обратную к A , получим, воспользовавшись (1):

$$(3) \quad A^{-1} = C^{-1}Q^{-1}D^{-1}.$$

Обращение каждого из сомножителей в (3) не представляет труда.

Введем обозначения: $A^{-1} = \|a_{ij}^{-1}\|_1^n$, $D^{-1} = \|d_{ij}^{-1}\|_1^n$, $C^{-1} = \|C_{ij}^{-1}\|_1^n$, $Q^{-1} = \|q_{ij}^{-1}\|_1^n$. Тогда можно записать явный вид для коэффициентов обратных матриц:

$$d_{ij}^{-1} = \begin{cases} b_1^{-1}, & i = j = 1, \\ -\frac{C_{i+1}}{a_{i+1}}, & 2 \leq i = j \leq n-1, \\ (b_n + C_n a_n)^{-1}, & i = j = n; \end{cases}$$

$$c_{ij}^{-1} = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0, & i > j, \\ \prod_{k=j+1}^{i-1} C_k, & i < j; \end{cases}$$

$$q_{ij}^{-1} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & j > i, \\ \frac{a_{j+1}}{a_{i+1}} \prod_{k=j+2}^{i+1} C_k, & j < i \leq n-1, \\ -\frac{a_{j+1}}{b_n + C_n a_n} \prod_{k=j+2}^n C_k, & i = n, \quad 1 \leq j \leq n-2, \\ -\frac{a_n}{b_n + C_n a_n}, & i = n, \quad j = n-1. \end{cases}$$

Рассмотрим $Q^{-1}D^{-1} = F = \|f_{ij}\|_1^n$:

$$f_{ii} = b_i^{-1}; \quad f_{ij} = 0, \quad i < j; \quad f_{ij} = -a_{i+1}^{-1} \prod_{k=j+1}^{i+1} C_k, \quad j \leq i, \quad i = 2, 3, \dots, n-1;$$

$$f_{nj} = (b_n + C_n a_n)^{-1} \prod_{k=j+1}^n C_k, \quad 1 \leq j \leq n-1; \quad f_{nn} = (b_n + C_n a_n)^{-1}.$$

Для определения элементов обратной матрицы A^{-1} перемножим C^{-1} и F таким образом, чтобы у A^{-1} элементы предыдущего столбца были функциями элементов последующего столбца. Поскольку A симметричная, то

ниже приводятся рекурсивные формулы только для элементов верхнего треугольника A^{-1} :

$$A_{ij}^{-1} = C_{j+1}A_{ij+1}^{-1} - a_{j+1}^{-1} \prod_{k=i+1}^{j+1} C_k, \quad i \leq j, \quad j = n-1, n-2, \dots, 1;$$

$$(4) \quad A_{in}^{-1} = \alpha \prod_{k=i+1}^n C_k, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1;$$

$$A_{nn}^{-1} = \frac{1}{b_n + C_n a_n} = \alpha, \quad i = j = n.$$

В этих формулах C_i — элементы цепной дроби (2). При вычислении элементов матрицы A^{-1} полезно воспользоваться следующими рекомендациями:

а) заполнение обратной матрицы следует начинать от диагонали вверх и к тому же с последнего столбца, поскольку он вычисляется особенно просто:

$$A_{i-1,n}^{-1} = C_i A_{in}^{-1}, \quad i = n, n-1, \dots, 2;$$

б) вычисление предыдущих столбцов через последующие (имеется в виду естественный порядок нумерации столбцов в матрице) производится в 4 операции на каждый элемент столбца обратной матрицы (2 умножения, вычитание и деление).

Метод позволяет получить обратную матрицу сразу в упакованном виде, что особенно полезно при организации вычислений на алгоритмических языках.

Часто (см., например, [4]) бывает полезно знать явный вид элементов обратной матрицы A^{-1} , но при этом получаются довольно громоздкие выражения, с которыми трудно работать на практике. Однако если в (4) перейти от последовательных рекурсий к зависимости от последнего столбца, то нетрудно получить формулу для обратных элементов через C_k , которую можно использовать, если матрица, обратная к трехдиагональной, является промежуточной в цепи громоздких матричных выражений [4]. Ниже приводится вид этой зависимости от коэффициентов C_k :

$$(5) \quad A_{ij}^{-1} = \alpha \prod_{k=i+1}^n C_k \prod_{\eta=j+1}^n C_\eta - a_{j+1}^{-1} \prod_{k=i+1}^{j+1} C_k -$$

$$- \sum_{\mu=1}^{n-(j+1)} a_{n-\mu+1}^{-1} \prod_{k=i+1}^{n-\mu+1} C_k \prod_{\eta=\mu}^{n-(j+1)} C_{n-\eta}, \quad i \leq j, \quad 1 \leq j \leq n-1;$$

$$A_{nn}^{-1} = \alpha = \frac{1}{b_n + C_n a_n}, \quad A_{in}^{-1} = \alpha \prod_{k=i+1}^n C_k, \quad 1 \leq i \leq n-1.$$

Здесь и далее

$$\sum_{\mu=p}^q () = 0, \quad \prod_{k=p}^q C_k = 1, \text{ если } q < p.$$

Представим верхний треугольник обратной матрицы A^{-1} в виде суммы двух верхнетреугольных матриц: $\|A_{ij}^{-1}\| = \|B_{ij}\| + \|R_{ij}\|$, где

$$(6) \quad B_{ij} = \begin{cases} \left(\prod_{k=i+1}^n C_k \right) \left[\alpha \prod_{\mu=j+1}^n C_\mu - \left(a_{j+1} \prod_{\mu=j+2}^n C_\mu \right)^{-1} \right], \\ \quad \quad \quad i \leq j, \quad 1 \leq j \leq n-1; \\ \alpha \prod_{k=i+1}^n C_k, \quad 1 \leq i \leq n-1, \quad j = n; \\ \alpha, \quad i = j = n. \end{cases}$$

Итак, в (6) каждый элемент матрицы B записан в виде произведения двух сомножителей. Один из сомножителей зависит от i , а другой — только от j .

Путем довольно громоздких преобразований третьего слагаемого в (5) можно представить элементы матрицы R в виде, аналогичном (6):

$$(7) \quad R_{ij} = \begin{cases} \left(\prod_{k=i+1}^n C_k \right) \left(\prod_{\tau=j+1}^n C_\tau \right) \left[\frac{1}{a_n C_n} + \sum_{\tau=j+2}^{n-1} \frac{C_\tau}{a_\tau} \left(\prod_{\mu=\tau}^n C_\mu \right)^{-2} \right], \\ \quad \quad \quad i \leq j, \quad 1 \leq j \leq n-2; \\ 0 \cdot \prod_{k=i+1}^n C_k, \quad 1 \leq i \leq n-1, \quad j = n-1; \\ 0 \cdot \prod_{k=i+1}^n C_k, \quad 1 \leq i \leq n, \quad j = n. \end{cases}$$

Поскольку в (6) и (7) сомножители, зависящие от i , одинаковы, то каждый элемент верхнего треугольника матрицы, обратной к A , может быть записан как произведение двух элементов, один из которых зависит только от i , а другой — только от j .

Окончательно получаем $A_{ij}^{-1} = V_i W_j$, если $i \leq j$. Причем после некоторых упрощений (6) и (7) для компонент вектора-столбца V и вектора-строки W получаем выражения

$$(8) \quad V_i = \prod_{k=i+1}^n C_k, \quad 1 \leq i \leq n; \quad W_j = V_j \left(\alpha - \sum_{k=j+1}^n \frac{C_k}{a_k} V_{k-1}^{-2} \right), \quad 1 \leq j \leq n,$$

где

$$\alpha = \frac{1}{b_n + C_n a_n}, \quad C_1 = 0, \quad C_k = -\frac{a_k}{b_{k-1} + C_{k-1} a_{k-1}}, \quad 2 \leq k \leq n.$$

При построении численной процедуры следует воспользоваться следую-

цей рекурсивной формулой для W_j :

$$W_j = V_{j+1}^{-1} \left(V_j W_{j+1} - \frac{1}{a_{j+1}} \right), \quad j = n-1, \dots, 1; \quad W_n = \alpha.$$

Выше, по существу, доказана первая часть следующей теоремы.

Теорема. Если A — неособенная трехдиагональная матрица, все элементы которой отличны от нуля, то элементы обратной матрицы могут быть представлены в виде

$$(9) \quad A_{ij}^{-1} = \begin{cases} V_i W_j, & i \leq j, \\ W_i V_j, & j \leq i. \end{cases}$$

Верно и обратное, т. е. матрица, обратная к (9), является трехдиагональной.

Вторая часть теоремы легко доказывается методом математической индукции, при этом полезно для обращения матрицы, представимой в виде (9), воспользоваться формулами метода окаймления [4]. Не прибегая к подробному доказательству второй части теоремы, мы приведем общий вид элементов обратной матрицы, который получен указанным выше способом. При этом справедливость второй части теоремы легко проверяется непосредственным перемножением прямой и обратной матриц.

Итак, пусть $M = \|M_{ij}\|_1^n$, $M^{-1} = \|M_{ij}^{-1}\|_1^n$ и

$$(10) \quad M_{ij} = \begin{cases} \alpha_i \beta_j, & i \leq j, \\ \beta_i \alpha_j, & j \leq i. \end{cases}$$

Тогда элементы обратной матрицы M^{-1} имеют вид

$$(11) \quad \begin{aligned} M_{11}^{-1} &= \alpha_1^{-1} \left(\beta_1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \beta_2 \right)^{-1}, \quad i = j = 1; \\ M_{22}^{-1} &= \alpha_1 \alpha_2^{-2} \left(\beta_1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \beta_2 \right)^{-1} + \alpha_2^{-1} \left(\beta_2 - \frac{\alpha_2}{\alpha_3} \beta_3 \right)^{-1}, \quad i = j = 2; \\ M_{33}^{-1} &= \alpha_3^{-1} \beta_3^{-1} + \alpha_2 \alpha_3^{-2} \left(\beta_2 - \frac{\alpha_2}{\alpha_3} \beta_3 \right)^{-1} + \alpha_4^{-1} \frac{\beta_4}{\beta_3} \left(\beta_3 - \frac{\alpha_3}{\alpha_4} \beta_4 \right)^{-1}, \\ & i = j = 3; \\ M_{ii}^{-1} &= \alpha_i^{-1} \frac{\beta_{i-1}}{\beta_i} \left(\beta_{i-1} - \frac{\alpha_{i-1}}{\alpha_i} \beta_i \right)^{-1} + \alpha_{i+1}^{-1} \frac{\beta_{i+1}}{\beta_i} \left(\beta_i - \frac{\alpha_i}{\alpha_{i+1}} \beta_{i+1} \right)^{-1}, \\ & 3 < i = j \leq n-1; \\ M_{nn}^{-1} &= \alpha_n^{-1} \frac{\beta_{n-1}}{\beta_n} \left(\beta_{n-1} - \frac{\alpha_{n-1}}{\alpha_n} \beta_n \right)^{-1}, \quad i = j = n; \\ M_{ij} &= 0, \quad |i-j| > 1; \\ M_{i,i+1} &= -\alpha_j^{-1} \left(\beta_i - \frac{\alpha_i}{\alpha_j} \beta_j \right)^{-1}, \quad 2 \leq j = i+1 \leq n; \\ M_{i,i-1} &= -\alpha_i^{-1} \left(\beta_j - \frac{\alpha_j}{\alpha_i} \beta_i \right)^{-1}, \quad 2 \leq i = j+1 \leq n, \end{aligned}$$

Если ввести обозначения

$$\begin{aligned}
 V_i &= \text{const} (-1)^i \det_{i-1}(b_1, \dots, b_{i-1}; a_2, \dots, a_{i-1}) \left(\prod_{k=2}^i a_k \right)^{-1}, \\
 (12) \quad W_j &= (-1)^j \det_{n-j}(b_{j+1}, \dots, b_n; a_{j+2}, \dots, a_n) \left(\prod_{k=j+1}^n a_k \right)^{-1}. \\
 \text{const} &= [\det_n(b_1, \dots, b_n; a_2, a_3, \dots, a_n)]^{-1} \prod_{k=2}^n a_k,
 \end{aligned}$$

то формула для элементов верхнего треугольника приобретает вид

$$A_{ij}^{-1} = V_i W_j, \quad i \leq j.$$

Тем самым мы показали справедливость первого утверждения теоремы для $i \leq j$. Справедливость утверждения теоремы для нижнего треугольника вытекает из условия симметрии матрицы A .

Детерминанты, появляющиеся в (12), легко выразить рекурсивным образом, а именно:

$$\begin{aligned}
 (13) \quad \det_0 &= 1, \quad \det_1(b_1) = b_1, \\
 \det_i(b_1, \dots, b_i; a_2, \dots, a_i) &= b_i \det_{i-1}(b_1, \dots, b_{i-1}; a_2, \dots, a_{i-1}) - \\
 &- a_i^2 \det_{i-2}(b_1, \dots, b_{i-2}; a_2, \dots, a_{i-2}), \quad i = 2, 3, \dots, n; \\
 \det_1(b_n) &= b_n, \\
 \det_l(b_{n-l+1}, \dots, b_n; a_{n-l+2}, \dots, a_n) &= \\
 &= b_{n-l+1} \det_{l-1}(b_{n-l+2}, \dots, b_n; a_{n-l+3}, \dots, a_n) - \\
 &- a_{n-l+2}^2 \det_{l-2}(b_{n-l+3}, \dots, b_n; a_{n-l+4}, \dots, a_n), \quad l = 2, 3, \dots, n.
 \end{aligned}$$

Формулы (13) легко получаются, если детерминант симметрической трехдиагональной матрицы разложить два раза последовательно: первый раз — по элементам первой (последней) строки и второй раз — в одном из полученных слагаемых по элементам первого (последнего) столбца.

Нетрудно из (12), (13) получить следующий алгоритм (VW2) для вычисления величин V_i, W_j , где $a_1 = a_{n+1} = 1$:

$$\begin{aligned}
 W_{n+1} &= 0, \quad W_n = (-1)^n, \quad W_{j-2} = -\frac{b_{j-1}W_{j-1} + a_j W_j}{a_{j-1}}, \\
 j &= n+1, \dots, 2, \\
 V_0 &= 0, \quad V_1 = -1/W_0, \quad V_{i+2} = -\frac{b_{i+1}V_{i+1} + a_{i+1}V_i}{a_{i+2}}, \\
 i &= 0, \dots, n-2.
 \end{aligned}$$

Возможность представления элементов матрицы, обратной к трехдиагональной, в виде $A_{ij}^{-1} = V_i W_j$ дает ряд практических преимуществ. Во-первых, хранение обратной матрицы в памяти ЭВМ требует $2n$ ячеек вместо n^2 , так как храним только V, W . Это позволяет решать линейные системы

$$(14) \quad AX = B$$

прямым методом (т. е. $X = A^{-1}B$, где A — трехдиагональная). Отсутствие представления (9) приводило многих авторов к необходимости отказаться от прямого метода решения линейных систем (14) и разрабатывать специальные методы [5]. Во-вторых, для вычисления только одной компоненты $x_i \in X$ (решение системы (14)) не требуется вычислять все элементы обратной матрицы, а также другие компоненты вектора-решения. Это преимущество получается в [4] довольно сложным образом.

Способ хранения матрицы A^{-1} в памяти ЭВМ в виде двух векторов выгоден и в том случае, если ее элементы необходимо извлекать из памяти много раз подряд (например, решать (14) с многими правыми частями). При этом надо проделать, в сущности, две операции чтения через индексные регистры и одно умножение V, W . Если же вся обратная матрица A^{-1} хранится в памяти ЭВМ, то обычно необходимо проделать вычисления $i * n + j$, чтобы определить место элемента A_{ij}^{-1} в памяти ЭВМ. Таким образом, также требуется одно умножение и несколько индексных операций. Отсюда следует, что при экономии памяти не замедляется скорость счета, а это большое преимущество перед методом прогонки [8], когда B в (14) является матрицей.

В заключение отметим, что обращение трехдиагональной матрицы по методу $VW1$ требует $9n + n(n+1)/2$ операций, а по методу $VW2$ — только $8n + n(n+1)/2$ операций, что существенно меньше, чем затраты времени при использовании, например, методов Жордана, окаймления, квадратного корня [9].

Указанные выше преимущества предложенных методов обращения трехдиагональных матриц, по существу, справедливы и для QR -разложения [10] матрицы A , поскольку на получение только унитарной (ортогональной) матрицы Q необходимо более $11n$ мультипликативных операций.

Не меньшее число мультипликативных операций необходимо и для получения верхнетреугольной трехполосной матрицы R . Таким образом, очевиден не только выигрыш в объеме памяти, необходимой для хранения A^{-1} в виде VW , перед QR , но и в затратах машинного времени на получение верхнего треугольника A^{-1} . Решение же (14) с учетом QR -разложения матрицы A приводит либо к решению двух простых систем линейных уравнений

$$RX = Y, \quad QY = B,$$

либо к решению системы

$$RX = Q^*B,$$

что опять-таки требует больше, чем $10n + n^2/2$ операций, необходимых для решения по предложенному методу VW .

Авторы благодарны Н. Н. Говоруноу, Е. П. Жидкову и И. Н. Силину за полезные обсуждения.

Поступила в редакцию 29.03.1971
Переработанный вариант 21.11.1972

Цитированная литература

1. В. Бухбергер, Г. А. Емельяненко. Методы обращения трехдиагональных матриц. Препринт ОИЯИ, P44-5686, Дубна, 1971.
2. P. Henrici. Discrete variable methods in ordinary differential equations. New York — London, J. Wiley and Sons, Inc., 1962.
3. В. А. Манюков, П. В. Шляпников. Функция распределения случайных смещений точек трека из-за кулоновского многократного рассеяния. Препринт ОИЯИ, P10-4256, Дубна, 1969.
4. Г. А. Емельяненко. Полная функция правдоподобия при обработке камерных снимков. Препринт ОИЯИ, P10-5278, Дубна, 1970.
5. T. Thomas, S. T. A method of solving a system of linear equations whose coefficients form a tridiagonal matrix. Quart. Appl. Math., 1964, 22, № 2, 105—106.
6. Д. К. Фаддеев, В. Н. Фаддеева. Вычислительные методы линейной алгебры. М., Физматгиз, 1960.
7. А. Н. Рублев. Линейная алгебра. М., «Высшая школа», 1968.
8. Б. Н. Демидович, И. А. Марон, Э. З. Шувалова. Численные методы анализа. М., Физматгиз, 1962.
9. В. В. Воеводин. Численные методы алгебры (теория и алгоритмы). М., Физматгиз, 1966.
10. Дж. Х. Уилкинсон. Алгебраическая проблема собственных значений. М., «Наука», 1970.