

В качестве N можно взять любое положительное целое число не меньше чем $2n - 1$.

Если блоки a_i, b_i не обладают какой-либо спецификой, то величины $tr \, \mathcal{S}_l$ ($l=0, 1, \dots, n-1$) можно найти с затратой $O(p^2 N \log_2 N)$ операций - в соответствии с (4.5.6)-(4.5.8). Если же блоки a_i, b_i тёплицевы, то и \tilde{a}_i, \tilde{b}_i тёплицевы; поэтому общее число операций снижается до $O(p N \log_2 N)$. Соотношения (4.5.6)-(4.5.8) позволяют также строить оптимальные дважды циркулянтные предобуславливатели для дважды тёплицевых матриц порядка n (см. § 3) с затратой $O(n \log_2 n)$ операций; при построении соответствующего алгоритма нужно лишь учесть, что для любых матриц A_1, \dots, A_n одного порядка и любых чисел $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ выполняются соотношения

$$\mathcal{S}_l(\lambda_1 A_1 + \dots + \lambda_n A_n) = \lambda_1 \mathcal{S}_l(A_1) + \dots + \lambda_n \mathcal{S}_l(A_n).$$

§ 5. Ускоренные реализации метода окаймления

5.1. Метод окаймления и особенности его применения

Пусть задана матрица $A = [a_{ij}]_{ij=0}^{n-1}$ и предполагается, что она невырожденная вместе со своими ведущими подматрицами $A_k = [a_{ij}]_{ij=0}^k$. Классический метод окаймления / 73 / заключается в указании рекуррентного способа вычисления матриц $A_0^{-1}, A_1^{-1}, \dots, A_{n-1}^{-1}$. Однако во многих случаях, особенно для матриц специального вида, есть основания отказаться от вычисления всех элементов обратных матриц, а вместо этого перейти к получению их "в операторном виде". Последнее означает, что имеются некоторые представления обратных матриц, допускающие быстрое умножение их на вектор, а задача обращения матрицы ставится как задача вычисления параметров, входящих в эти представления. Описанный подход позволяет получать весьма экономичные реализации метода окаймления в случае матриц, обладающих различного рода спецификой.

Напомним основную конструкцию метода окаймления, применяемого к решению линейных алгебраических систем. Наряду с исходной системой

$$A \mathbf{z} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{z} = [z_0 \dots z_{n-1}]', \quad \mathbf{b} = [b_0 \dots b_{n-1}]' \quad (5.1.1)$$

рассматривается последовательность усеченных систем

$$A_k \mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)}, \quad \mathbf{z}^{(k)} = [z_0^{(k)} \dots z_{n-1}^{(k)}]', \quad \mathbf{b}^{(k)} = [b_0 \dots b_k]'. \quad (5.1.2)$$

Легко проверить, что вектор $\mathbf{z}^{(k)} - [z^{(k-1)} \ 0]'$ пропорционален последнему столбцу в A_k^{-1} ; соответствующий коэффициент пропорциональности легко вычисляется, причем для этого нужно знать лишь вектор $\mathbf{z}^{(k-1)}$ - на этом наблюдении и основывается метод окаймления для решения систем.

Более точно, предположим, что для некоторого $k \geq 1$ матрица A_k невырожденная. Обозначим $y^{(k)}$ последний столбец в A_k^{-1} . Тогда если $k-1$ -я усеченная система (5.1.2) совместна и $\mathbf{z}^{(k-1)}$ есть ее решение, то выполняются соотношения

$$\mathbf{z}^{(k)} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}^{(k-1)} \\ 0 \end{bmatrix} + y^{(k)} \lambda_k, \quad (5.1.3)$$

$$\lambda_k = b_k - \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} z_j^{(k-1)} \quad (5.1.4)$$

Реализация соотношений (5.1.3), (5.1.4) требует выполнения $O(k)$ арифметических операций. При изменении k от 0 до $n-1$ это составит $O(n^2)$ операций. Следовательно, для того чтобы построить $O(n)$ -алгоритм решения системы (5.1.1), остается найти ускоренный способ рекуррентного вычисления векторов $y^{(k)}$.

Заметим, что описанные здесь построения остаются в силе, если матрицы и векторы являются блочными. Единственное ограничение на матрицу A , которое в последующих разделах будем считать выполненным, - это обратимость подматриц A_k для всех $0 \leq k \leq n-1$.

Для записи алгоритмов ниже мы будем использовать операторы \uparrow и \downarrow , переводящие m -мерный вектор $\mathbf{z} = [z_0 \dots z_{m-1}]'$ в $m+1$ -векторы:

$$\uparrow \mathbf{z} \equiv [z_0 \dots z_{m-1} \ 0]', \quad (5.1.5)$$

$$\downarrow \mathbf{z} \equiv [0 \ z_0 \dots z_{m-1}]'. \quad (5.1.6)$$

Нам понадобятся также операторы \uparrow и \downarrow , действующие по сле-

дующим правилам:

$$\uparrow z = [z_1 \dots z_{m-1} 0]', \quad (5.1.7)$$

$$\downarrow z = [0 z_0 \dots z_{m-2}']'. \quad (5.1.8)$$

5.2. Тёплицевы и ганкелевы системы

Рассмотрим систему (5.1.1) в предположении, что матрица A (блочно) тёплицева, т.е. $a_{ij} = a_{i-j}$ ($0 \leq i, j \leq n-1$). Чтобы организовать вычисление векторов $y^{(k)}$, мы можем в данном случае воспользоваться конструкцией того же метода окаймления (см. /17, 92/). Системы $A_k y^{(k)} = [0 \dots 0 1]'$ нельзя считать усеченными; однако от них можно перейти к системам $(JA_k J)(Jy^{(k)}) = [1 0 \dots 0]'$, которые являются усеченными для системы

$$(JAJ)(Jy) = [1 0 \dots 0]'. \quad (5.2.1)$$

Это означает, что матрицы $JA_k J$ суть ведущие подматрицы в матрице JAJ . Здесь

$$J = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix},$$

причем порядок определяется в зависимости от контекста.

Заметим, что последний столбец матрицы $(JA_k J)^{-1}$ можно записать в виде $Jx^{(k)}$, где $x^{(k)}$ - первый столбец в A_k^{-1} . Поэтому согласно § 5.1 для соответствующего (блока) β_k находим

$$Jy^{(k)} = Jy^{(k-1)} + Jx^{(k)} \beta_k,$$

или, после применения J к обеим частям,

$$y^{(k)} = y^{(k-1)} + x^{(k)} \beta_k. \quad (5.2.2)$$

Поскольку вектор $x^{(k)}$ удовлетворяет усеченной системе $A_k x^{(k)} = [1 0 \dots 0]'$, для соответствующего (блока) d_k имеем

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + y^{(k)} d_k. \quad (5.2.3)$$

Объединяя (5.2.2) и (5.2.3), получаем

$$x^{(k)} (I - d_k \beta_k) = x^{(k-1)} + y^{(k-1)} d_k,$$

$$y^{(k)} (I - \beta_k d_k) = x^{(k-1)} \beta_k + y^{(k-1)}, \quad (5.2.4)$$

$$d_k = - \sum_{j=0}^{k-1} a_{k-j} x_j^{(k-1)}, \quad \beta_k = - \sum_{j=0}^{k-1} a_{-1-j} y_j^{(k-1)}.$$

В силу тёплицевости подматрица, дополнительная к A_0 в A_k , есть не что иное, как A_{k-1} ; поэтому блоки $x_0^{(k-1)}$; $y_{k-1}^{(k-1)}$ невырожденные - с учетом основного предположения об обратимости всех подматриц A_k . Вследствие (5.2.4) блоки $I - d_k \beta_k$ и $I - \beta_k d_k$ невырожденные для всех $1 \leq k < n-1$.

Чтобы сократить число операций, целесообразно ввести нормировку вычисляемых векторов (см. / 58 /). Будем считать, что первый и последний столбцы в A_k^{-1} имеют вид $x^{(k)} p_k$ и $y^{(k)} q_k$, где p_k, q_k - невырожденные нормировочные блоки. В этих обозначениях алгоритм вычисления параметров для определения A^{-1} можно сформулировать следующим образом:

$$k=0: \quad p_0 = q_0 = a_0^{-1}, \quad x_0^{(0)} = y_0^{(0)} = I;$$

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

$$F_k = \sum_{j=0}^{k-1} a_{k-j} x_j^{(k-1)}, \quad G_k = \sum_{j=0}^{k-1} a_{-1-j} y_j^{(k-1)}, \quad (5.2.5)$$

$$s_k = -q_{k-1} F_k, \quad t_k = -p_{k-1} G_k,$$

$$p_k = (I - t_k s_k)^{-1} p_{k-1}, \quad q_k = (I - s_k t_k)^{-1} q_{k-1},$$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + y^{(k-1)} s_k, \quad y^{(k)} = x^{(k-1)} t_k + y^{(k-1)}.$$

$$Z_k A_k - A_k Z_k = \begin{bmatrix} t_1 - t_{-1} & -h_0 - t_2 & -h_1 - t_3 & \dots & -h_{k-2} - t_k & -h_{k-1} + h_{k+1} \\ t_2 + h_0 & & & & & t_k + h_{k+1} \\ t_3 + h_1 & & & & & t_{k-1} + h_{k+2} \\ \dots & & & & & \dots \\ t_k + h_{k-2} & & & & & t_{-2} + h_{2k} \\ -h_{k+1} + h_{k-1} & -h_{k+2} - t_k & -h_{k+3} - t_{k+1} & \dots & -h_{2k} - t_k & t_{-1} - t_1 \end{bmatrix} \quad (5.3.3)$$

Это проверяется непосредственно. С помощью (5.3.3) легко получается скелетное разложение для $Z_k A_k^{-1} - A_k^{-1} Z_k$, по которому можно восстановить A_k^{-1} /94/. Однако мы используем (5.3.3) с иной целью.

Согласно методу окаймления, для решения системы (5.1.1) достаточно найти экономичный способ вычисления последних столбцов матрицы A_k^{-1} . Будем считать, что эти столбцы имеют вид $y_j^{(k)} q_k^{-1}$, где q_k - невырожденный нормировочный блок. Кроме того, пусть $x^{(k)}$ обозначает первый столбец для A_k^{-1} , и введем еще один вектор $\kappa^{(k)}$, удовлетворяющий усеченной системе

$$A_k \kappa^{(k)} = u^{(k)} = [t_{j+1} + h_{j-1}]_{j=0}^k \quad (5.3.4)$$

где $h_{-1} = -t_{-1}$, $t_n = -h_n$. Тогда вектор $A_k \kappa^{(n-1)}$ совпадает с первым столбцом матрицы в правой части соотношения (5.3.3) при $k = n - 1$, а вектор $A_k \kappa^{(k)}$ есть не что иное, как ее усеченный первый столбец.

Попытаемся выразить $y^{(k)}$ через $y^{(k-1)}$, $x^{(k-1)}$ и $\kappa^{(k-1)}$:

$$y^{(k)} = Z_k \uparrow y^{(k-1)} + \uparrow y^{(k-1)} d_k + \uparrow \uparrow y^{(k-1)} \beta_k + \uparrow x^{(k-1)} \gamma_k + \uparrow \kappa^{(k-1)} \delta_k \quad (5.3.5)$$

Чтобы найти блоки $d_k, \beta_k, \gamma_k, \delta_k$, умножим обе части слева на A_k . Предварительно заметим, что в силу (5.3.3)

$$\begin{aligned} A_k Z_k \uparrow y^{(k-1)} &= Z_k A_k \uparrow y^{(k-1)} - u^{(k)} y_0^{(k-1)} + \\ &+ [F_k, 0, \dots, 0, G_k]' = \\ &= [F_k, 0, \dots, 0, q_{k-1}, E_k, q_{k-1} + G_k]' - u^{(k)} y_0^{(k-1)}, \end{aligned}$$

где

$$E_k = \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} y_j^{(k-1)}, \quad F_k = \sum_{j=1}^{k-1} (h_{j+1} + t_{-j}) y_j^{(k-1)}, \quad G_k = \sum_{j=0}^{k-1} (h_{k-1+j} + t_{k+1-j}) y_j^{(k-1)} \quad (5.3.6)$$

Итак, после умножения (5.3.5) на A_k находим

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ q_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_k \\ 0 \\ \dots \\ q_{k-1} \\ E_k \\ q_{k-1} + G_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ q_{k-1} d_k \\ E_k d_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ q_{k-1} \beta_k \\ G_{k-1} \beta_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \gamma_k \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ \delta_k \gamma_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_0^{(k)} (\delta_k - y_0^{(k-1)}) \\ u_1^{(k)} (\delta_k - y_0^{(k-1)}) \\ \dots \\ u_{k-2}^{(k)} (\delta_k - y_0^{(k-1)}) \\ u_{k-1}^{(k)} (\delta_k - y_0^{(k-1)}) \\ D_k \delta_k - u^{(k)} y_0^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

где

$$S_k = \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} x_j^{(k-1)}, \quad D_k = \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} \kappa_j^{(k-1)} \quad (5.3.7)$$

Понятно, что следует взять

$$\begin{aligned} \beta_k &= y_0^{(k-1)}, & \gamma_k &= -F_k, \\ \beta_k &= -q_{k-1}^{-1} q_{k-1}, & \Delta_k &= q_{k-1}^{-1} (E_k + E_{k-1} \beta_k), \\ q_k &= q_{k-1} + G_k + E_k \Delta_k + G_{k-1} \beta_k + S_k \gamma_k + (D_k - u_k^{(k)}) y_0^{(k-1)}. \end{aligned} \quad (5.3.8)$$

Вектор $y^{(k)}$, вычисленный в соответствии с (5.3.5), имеет своей последней компонентой $y_{k-1}^{(k-1)}$, которая, по индукции, совпадает с $y_0^{(0)}$. Если бы блок q_k оказался вырожденным, то мы смогли бы указать нетривиальное решение однородной системы с матрицей коэффициентов A_k . Это противоречит обратимости матрицы A_k ; следовательно, блок q_k , вычисленный в согласии с (5.3.8), обязательно будет невырожденным.

Таким образом, формулы (5.3.5)-(5.3.8) позволяют найти $y^{(k)}$ и q_k по $y^{(k-1)}$, $x^{(k-1)}$, $z^{(k-1)}$. В свою очередь, векторы $x^{(k)}$ и $z^{(k)}$ можно вычислить, используя конструкции метода окаймления. В итоге получаем такой алгоритм:

$$\begin{aligned} k=0, 1: & \quad y_0^{(0)} = y_1^{(1)} = I, \quad y_0^{(1)} = -a_{00}^{-1} a_{01}, \\ q_0 &= a_{00}, \quad q_1 = a_{11} + a_{10} y_0^{(1)}, \\ E_1 &= a_{10}, \quad G_1 = a_{20}, \\ z_0^{(0)} &= a_{00}^{-1} b_0, \end{aligned} \quad (5.3.9)$$

$$\begin{aligned} z_1^{(1)} &= q_1^{-1} (b_1 - a_{10} z_0^{(0)}), \quad z_1^{(1)} = z_0^{(0)} + y_0^{(1)} z_1^{(1)}; \\ k=2, \dots, n-1: & \quad F_k = \sum_{j=1}^{k-1} (h_{j-1} + t_{-1,j}) y_j^{(k-1)}, \\ & \quad G_k = \sum_{j=0}^{k-1} a_{k+1,j} y_j^{(k-1)}, \\ E_k &= \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} y_j^{(k-1)}, \quad \beta_k = \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} x_j^{(k-1)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_k &= \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} z_j^{(k-1)}, & P_k &= \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} z_j^{(k-1)}, \\ \beta_k &= -q_{k-1}^{-1} q_{k-1}, & \Delta_k &= -q_{k-1}^{-1} (E_k + E_{k-1} \beta_k), \\ q_k &= q_{k-1} + G_k + E_k \Delta_k + G_{k-1} \beta_k - S_k F_k + (D_k - t_{k+1} - t_{k-1}) y_0^{(k-1)}, \\ E_k &= -q_k^{-1} S_k, \quad \tau_k = -q_k^{-1} D_k, & \omega_k &= q_k^{-1} (b_k - P_k), \\ y^{(k)} &= Z_k \uparrow y^{(k-1)} + \uparrow y^{(k-1)} \Delta_k + \uparrow \uparrow y^{(k-1)} \beta_k - \\ & \quad - \uparrow x^{(k-1)} F_k + \uparrow z^{(k-1)} y_0^{(k-1)}, \\ x^{(k)} &= \uparrow x^{(k-1)} + y^{(k-1)} e_k, \\ z^{(k)} &= \uparrow z^{(k-1)} + y^{(k)} e_k, \\ z^{(k)} &= \uparrow z^{(k-1)} + y^{(k)} \omega_k. \end{aligned} \quad (5.3.9)$$

Этот алгоритм требует выполнения (в главном члене) $(5,5p^3 + p^2)n^2$ умножений и $(5,5p^3 + 2,5p^2)n^2$ сложений-вычитаний (здесь учитывается, что z_0, z_1, \dots - это векторы размерности p , и что исходными данными являются блоки h_i и t_i , и каждый блок a_{kj} получается путем сложения двух блоков). Если считать, что z_0, z_1, \dots - суть $p \times p$ -блоки, то потребуется $6,5n^2$ умножений и $(6,5p^3 + 1,5p^2)$ сложений-вычитаний.

Подчеркнем, что в алгоритме (5.3.9) используется единственное

ограничение на матрицу A, а именно, обратимость ведущих подматриц. В этом отличие нашего алгоритма от других, предлагавшихся в /16, 47, 95, 103/.

5.4. Решение систем и теплицевого разложения

Рассмотрим (блочную) матрицу A, заданную своим (блочным) теплицевым разложением (4.1.3). Тогда для любого k в силу (4.1.2) находим

$$A_k - Z_k A_k Z_k' = \sum_{s=1}^t \begin{bmatrix} d_{s0} \\ \dots \\ d_{sk} \end{bmatrix} [\beta_{s0} \dots \beta_{sk}], \quad (5.4.1)$$

где

$$Z_k = \begin{bmatrix} 0 & & & & & & \\ I & 0 & & & & & 0 \\ & & I & 0 & & & \\ & & & & & \dots & \\ & & & & 0 & & \\ & & & & & & I & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.4.2)$$

Рассмотрим системы

$$A w_s = d_s = \begin{bmatrix} d_{s0} \\ \dots \\ d_{s, n-1} \end{bmatrix}, \quad w_s = \begin{bmatrix} w_{s0} \\ \dots \\ w_{s, n-1} \end{bmatrix}, \quad s = 1, \dots, t, \quad (5.4.3)$$

а также отвечающие им усеченные системы

$$A_k w_s^{(k)} = d_s^{(k)} = \begin{bmatrix} d_{s0} \\ \dots \\ d_{sk} \end{bmatrix}, \quad w_s^{(k)} = \begin{bmatrix} w_{s0}^{(k)} \\ \dots \\ w_{sk}^{(k)} \end{bmatrix}, \quad s = 1, \dots, t. \quad (5.4.4)$$

Будем считать, что последний (блочный) столбец в A_k⁻¹ имеет вид y^(k) q_k^(k), где q_k^(k) - невырожденный нормировочный блок. Тогда согласно

методу окаймления (см. § 5.1) запишем

$$w_s^{(k)} = I w_s^{(k-1)} + y^{(k)} q_k^{(k)} \mu_{sk}^{(k)}, \quad (5.4.5)$$

$$\mu_{sk}^{(k)} = d_{sk} - \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} w_{sj}^{(k-1)}, \quad s = 1, \dots, t.$$

Обе части равенства (5.4.1) умножим справа на вектор I y^(k-1). Легко видеть, что

$$Z_k A_k Z_k' I y^{(k-1)} = [0 \dots 0 q_{k-1}^{-1}]'. \quad (5.4.6)$$

Поэтому, принимая во внимание (5.4.4), находим

$$y^{(k)} q_k^{(k)} q_{k-1}^{-1} = I y^{(k-1)} - \sum_{s=1}^t w_s^{(k)} v_{sk}^{(k)}, \quad (5.4.7)$$

где

$$v_{sk}^{(k)} = \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{s, j+1} y_j^{(k-1)}, \quad s = 1, \dots, t. \quad (5.4.8)$$

Учитывая (5.4.5), получаем

$$y^{(k)} q_k^{(k)} \left(I + \left(\sum_{s=1}^t \mu_{sk}^{(k)} v_{sk}^{(k)} \right) q_{k-1}^{-1} \right) q_{k-1}^{-1} = I y^{(k-1)} - \sum_{s=1}^t I w_s^{(k-1)} v_{sk}^{(k-1)}. \quad (5.4.9)$$

В силу основного предположения об обратимости подматриц A_k блоки y_k^(k) невырожденные для всех k. Последняя блочная компонента правой части (5.4.9) есть y_{k-1}^(k-1). Следовательно, блок I + (∑ μ_{sk}^(k) v_{sk}^(k)) q_{k-1}⁻¹ невырожденный, и ничто не мешает провести нормировку следующим образом:

$$q_k = q_{k-1} \left(I + \left(\sum_{s=1}^t \mu_{sk}^{(k)} v_{sk}^{(k)} \right) q_{k-1}^{-1} \right)^{-1}. \quad (5.4.10)$$

8957

Формулы (5.4.9), (5.4.10) позволяют найти y^(k), q_k^(k), если известны

$y^{(k-1)}$, q_{k-1} и $w_s^{(k-1)}$ ($s=1, \dots, t$).
Заметим, что нужны нам элементы (блоки) k -й строки матрицы A можно вычислять рекуррентно с помощью элементов (блоков) k -й строки (это важно, так как A задается в компактной форме - трёхдиагональным разложением, а не полным массивом из n^2 элементов). Действительно, согласно (4.1.3) находим

$$a_{k0} = \sum_{s=1}^t d_{sk} \beta_{s0}, \quad (5.4.II)$$

$$a_{kj} = a_{k-1, j-1} + \sum_{s=1}^t d_{sk} \beta_{sj}, \quad j=1, \dots, k-1.$$

Объединяя (5.4.5), (5.4.8)-(5.4.II) и еще раз используя конструкцию метода окаймления, для решения системы (5.1.1) получаем следующий алгоритм:

$$k=0: a_{00} = \sum_{s=1}^t d_{s0} \beta_{s0},$$

$$y_0^{(0)} = I, \quad q_0 = a_{00}^{-1}, \quad z_0^{(0)} = q_0 b_0,$$

$$w_{s0}^{(0)} = q_0 d_{s0}, \quad s=1, \dots, t;$$

$$k=1, \dots, n-1: a_{k0} = \sum_{s=1}^t d_{sk} \beta_{s0},$$

$$a_{kj} = a_{k-1, j-1} + \sum_{s=1}^t d_{sk} \beta_{sj}, \quad j=1, \dots, k-1, \quad (5.4.I2)$$

$$\mu_{sk} = d_{sk} - \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} w_{sj}^{(k-1)}, \quad s=1, \dots, t,$$

$$v_{sk} = \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{s, j+1} y_j^{(k-1)}, \quad s=1, \dots, t,$$

$$\epsilon_k = I + \left(\sum_{s=1}^t \mu_{sk} v_{sk} \right) q_{k-1}, \quad q_k = q_{k-1} \epsilon_k^{-1},$$

$$\omega_k = q_k \left(b_k - \sum_{j=0}^k a_{kj} z_j^{(k-1)} \right),$$

$$\zeta_{sk} = q_k \mu_{sk}, \quad s=1, \dots, t,$$

$$y^{(k)} = I y^{(k-1)} - \sum_{s=1}^t \zeta_{sk} w_s^{(k-1)} v_{sk}, \quad (5.4.I2)$$

$$w_s^{(k)} = I w_s^{(k-1)} + y^{(k)} \zeta_{sk}, \quad s=1, \dots, t,$$

$$z^{(k)} = I z^{(k-1)} + y^{(k)} \omega_k.$$

Этот алгоритм содержит $\frac{1}{2}(5t^3 + 2t^2)n^2$ умножений и столько же сложений-вычитаний. Заметим, что его вывод родственен описанному в /92/ выводу алгоритма для скалярных матриц, причем от последнего имеются два отличия: 1) в нашем алгоритме матрицы могут быть блочными; 2) уменьшен главный член числа арифметических операций.

Чтобы воспользоваться алгоритмом (5.4.I2), необходимо получить трёхдиагональное разложение матрицы A . В общем случае это может оказаться трудоемкой задачей, но если известно, что трёхдиагональный ранг мал по сравнению с порядком, то затраты на получение трёхдиагонального разложения вполне приемлемы и будут окупаться за счет эффективности алгоритма (5.4.I2).

Нередко естественным образом возникают такие трёхдиагональные разложения, в которых

$$\beta_{10} = I, \quad \beta_{ij} = 0, \quad j=1, \dots, n-1; \quad (5.4.I3)$$

$$d_{20} = I, \quad d_{2j} = 0, \quad j=1, \dots, n-1.$$

В этом случае целесообразно модифицировать (5.4.I2) следующим образом. В силу (5.4.I3) $v_{1k} = 0$; поэтому при вычислении $y^{(k)}$ вектор $w_1^{(k-1)}$ не нужен, а при вычислении ϵ_k не нужно иметь μ_{1k} . Значит, можно отказаться от вычисления блоков v_{1k} , μ_{1k} и векторов $w_1^{(k)}$; кроме того, очевидно упрощаются формулы для a_{kj} . В результате мо-

дифицированный алгоритм будет содержать $\frac{1}{2}(5t-6)t^2n^2 + t^2n^2$ умножений и столько же сложений-вычитаний. Если матрица A трёхдиагональна, то такое разложение с $t=2$ строится очевидным образом и, как видим, полученный алгоритм имеет те же характеристики, что и (5.2.5).

Теперь предположим, что требуется найти трёхдиагональное разложение матрицы A^{-1} . Как уже отмечалось (см. § 4), для этого достаточно иметь скелетное разложение матрицы $A^{-1}Z - ZA^{-1}$ и первый столбец в A^{-1} (обозначим его через $x^{(n-1)}$). Очевидно, векторы $x^{(k)}$ можно найти с помощью метода окаймления, используя также (5.4.12). Далее, в силу (4.1.2)

$$\begin{aligned} AZ - ZA &= (A - ZAZ')Z - ZA(I - Z'Z) = \\ &= \sum_{s=1}^t d_s \beta_s' Z - \begin{bmatrix} 0 \\ a_{0n-1} \\ \dots \\ a_{n-2, n-1} \end{bmatrix} [0 \dots 0 I]. \end{aligned} \quad (5.4.14)$$

Таким образом, для получения трёхдиагонального разложения матрицы A^{-1} нам достаточно иметь, кроме $x^{(n-1)}$, векторы w_s, u_s ($s=0, 1, \dots, t$), удовлетворяющие уравнениям

$$Aw_s = d_s, \quad s=1, \dots, t; \quad Aw_0 = [0 \ a_{0n-1} \ \dots \ a_{n-2, n-1}]'; \quad (5.4.15)$$

$$u_s' A = \beta_s' Z, \quad s=1, \dots, t; \quad u_0' A = [0 \ \dots \ 0 \ I]. \quad (5.4.16)$$

Векторы w_s находятся по методу окаймления с использованием (5.4.12). Векторы u_s находятся с помощью метода окаймления для систем вида $Z'A = \beta_s'$, который вполне аналогичен рассмотренному нами.

Заметим также, что w_0 можно вычислить, зная $y^{(n-1)}$ и w_1, \dots, w_t , именно:

$$w_0 = -\frac{1}{y^{(n-1)}} + \sum_{s=1}^t w_s \beta_s. \quad (5.4.17)$$

Это вытекает из следующих соотношений:

$$\begin{aligned} A(-\frac{1}{y^{(n-1)}}) &= \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \dots & & A_{n-2} & \\ 0 & & & \end{bmatrix} + \sum_{s=1}^t d_s \beta_s' \right) \begin{bmatrix} 0 \\ -y_0^{(n-1)} \\ \dots \\ -y_{n-2}^{(n-1)} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 0 \\ a_{0n-1} \\ \dots \\ a_{n-2, n-1} \end{bmatrix} - \sum_{s=1}^t d_s \beta_s. \end{aligned}$$

5.5. Матрицы типа Коши

Предположим, что блочная матрица A удовлетворяет соотношению

$$\begin{bmatrix} x_0 & & 0 \\ & \dots & \\ 0 & & x_{n-1} \end{bmatrix} A - A \begin{bmatrix} y_0 & & 0 \\ & \dots & \\ 0 & & y_{n-1} \end{bmatrix} = \sum_{l=1}^n \begin{bmatrix} \varphi_{l0} \\ \dots \\ \varphi_{l, n-1} \end{bmatrix} [\psi_{l0} \ \dots \ \psi_{l, n-1}], \quad (5.5.1)$$

где $x_i, y_j, \varphi_{li}, \psi_{lj}$ - некоторые заданные блоки, причем блоки $x_0, \dots, x_{n-1}, y_0, \dots, y_{n-1}$ таковы, что никакие два из них не имеют общих собственных значений. Такую матрицу A будем называть блочной матрицей типа Коши. Заметим, что из теории матричных уравнений (см., например, [31]) вытекает, что A из (5.5.1) определяется однозначно.

После умножения обеих частей (5.5.1) слева и справа на A^{-1} получаем

$$A^{-1} \begin{bmatrix} x_0 & & 0 \\ & \dots & \\ 0 & & x_{n-1} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} y_0 & & 0 \\ & \dots & \\ 0 & & y_{n-1} \end{bmatrix} A^{-1} = \sum_{l=1}^n \begin{bmatrix} u_{l0} \\ \dots \\ u_{l, n-1} \end{bmatrix} [\varphi_{l0} \ \dots \ \varphi_{l, n-1}], \quad (5.5.2)$$

где

$$Au_l = \varphi_l, \quad l=1, \dots, n, \quad (5.5.3)$$

$$u_l = [u_{l0} \ \dots \ u_{l, n-1}]', \quad \varphi_l = [\varphi_{l0} \ \dots \ \varphi_{l, n-1}]'$$

$$v_l' A = \psi_l', \quad l = 1, \dots, n, \quad (5.5.4)$$

$$v_l = [v_{l0} \dots v_{l,n-1}]', \quad \psi_l = [\psi_{l0} \dots \psi_{l,n-1}]'$$

Таким образом, A^{-1} тоже есть блочная матрица типа Коши.

В частном случае, когда блоки x_i, y_i ($0 \leq i \leq n-1$) суть скалярные матрицы, имеем

$$a_{ij} = (x_i - y_j)^{-1} \sum_{l=1}^n v_{li} \psi_{lj}; \quad (5.5.5)$$

$$a_{ij}^{(-1)} = (x_j - y_i)^{-1} \sum_{l=1}^n u_{li} v_{lj}. \quad (5.5.6)$$

Несколько отклоняясь от главной темы параграфа, заметим, что если x_i, y_i - числа, т.е. $p=1$, то невырожденность матрицы типа Коши может получена как следствие существования решений $n+1$ систем с этой матрицей и специально выбранными правыми частями / 94 /. Ниже приводится обобщение этого результата на блочный случай. Чтобы его сформулировать, нам понадобятся еще две системы:

$$A u_0 = [1 \dots 1]', \quad (5.5.7)$$

$$v_0' A = [1 \dots 1]. \quad (5.5.8)$$

Лемма 5.5.1. Пусть A - блочная матрица типа Коши, и предположим, что разрешимы системы (5.5.3), (5.5.7) и блоки $\{x_i\}$ коммутируют (или же разрешимы системы (5.5.4), (5.5.8) и блоки $\{y_i\}$ коммутируют). Тогда матрица A обратима.

Доказательство. Предположим разрешимость систем (5.5.3) и (5.5.7). Рассмотрим вектор $\gamma = [\gamma_0 \dots \gamma_{n-1}]'$, такой, что $\gamma' A = 0$. Тогда в силу (5.5.1) $\gamma' X^m A = 0$ для всех $m = 0, 1, \dots$; $X = \text{diag}(x_0, \dots, x_{n-1})$. Умножая эти равенства справа на u_0 и учитывая (5.5.7), получаем

$$\gamma' W = 0,$$

где

$$W = \begin{bmatrix} I & x_0 & \dots & x_0^{n-1} \\ I & x_1 & \dots & x_1^{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ I & x_{n-1} & \dots & x_{n-1}^{n-1} \end{bmatrix}.$$

Поскольку, по условию, блоки $\{x_i\}$ коммутируют, все они имеют общий базис Шура, т.е. для некоторой унитарной P и верхних треугольных $\Delta_0, \dots, \Delta_{n-1}$ имеем

$$x_i = P \Delta_i P^*, \quad i = 0, 1, \dots, n-1.$$

Следовательно,

$$W = \begin{bmatrix} P & 0 \\ 0 & P \end{bmatrix} \Delta \begin{bmatrix} P^* & 0 \\ 0 & P^* \end{bmatrix},$$

где

$$\Delta = \begin{bmatrix} I & \Delta_0 & \dots & \Delta_0^{n-1} \\ I & \Delta_1 & \dots & \Delta_1^{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ I & \Delta_{n-1} & \dots & \Delta_{n-1}^{n-1} \end{bmatrix}.$$

Если обозначить G_n тип матриц общего вида порядка n , а U_p - тип верхних треугольных матриц порядка p , то, очевидно, матрица Δ имеет тип $G_n U_p$. По лемме о перестановках уровней (см. § I.1) она перестановочно подобна матрице типа $U_p G_n$, причем в данном случае каждый блок на диагонали будет матрицей Вандермонда - невырожденной в силу условий на собственные значения. Поэтому матрица W невырожденная. Значит, $\gamma' = 0$, т.е. матрица A обратима. Лемма доказана.

Вернемся к нашему основному предположению об обратимости подматриц A_k для всех k и рассмотрим систему (5.1.1). Следуя техни-

не метода окаймления, введем в рассмотрение также k -й столбец $c^{(k)}$ и k -ю строку $s^{(k)}$ в A_k^{-1} . Тогда

$$u_l^{(k)} = 1 u_l^{(k-1)} + c^{(k)} d_{lk},$$

$$d_{lk} = \psi_{lk} - \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} u_j^{(k-1)}, \quad l=1, \dots, n; \quad (5.5.9)$$

$$w_l^{(k)} = (1 v_l^{(k-1)})' + \beta_{lk} s^{(k)}, \quad (5.5.10)$$

$$\beta_{lk} = \psi_{lk} - \sum_{j=0}^{k-1} v_j^{(k-1)} a_{jk}, \quad l=1, \dots, n.$$

Принимая во внимание равенства $a_{kk}^{(k-1)} = c_k^{(k)} = s_k^{(k)}$ и (5.5.2), (5.5.9), (5.5.10), получаем

$$a_{kk}^{(k-1)} x_k - y_k a_{kk}^{(k-1)} = a_{kk}^{(k-1)} f_k a_{kk}^{(k-1)} \quad (5.5.11)$$

или, после умножения обеих частей справа и слева на $(a_{kk}^{(k-1)})^{-1}$,

$$x_k (a_{kk}^{(k-1)})^{-1} - (a_{kk}^{(k-1)})^{-1} y_k = \sum_{l=1}^n d_{lk} \beta_{lk}, \quad (5.5.12)$$

где

$$f_k = \sum_{l=1}^n d_{lk} \beta_{lk}. \quad (5.5.13)$$

В силу условий на собственные значения блоков x_k и y_k , это матричное уравнение однозначно разрешимо относительно $(a_{kk}^{(k-1)})^{-1}$.

Договоримся о следующем обозначении. Пусть задано матричное уравнение

$$x\alpha - \alpha y = f, \quad (5.5.14)$$

где матрицы x и y не имеют общих собственных значений. Тогда α однозначно выражается через x, y, f , и мы будем писать

$$\alpha = \text{sol}(x, y, f). \quad (5.5.15)$$

(Об алгоритмах вычисления α см. [31].)

Таким образом, согласно (5.5.2),

$$c_k^{(k)} = s_k^{(k)} = (\text{sol}(x_k, y_k, f_k))^{-1}. \quad (5.5.16)$$

Далее, при $0 \leq i \leq k-1$ находим

$$a_{ik}^{(k-1)} x_k - y_i a_{ik}^{(k-1)} = \sum_{l=1}^n u_{li}^{(k)} v_{lk}^{(k)} =$$

$$= \sum_{l=1}^n u_{li}^{(k-1)} \beta_{lk} c_k^{(k)} + a_{ik}^{(k-1)} \sum_{l=1}^n d_{lk} \beta_{lk} c_k^{(k)}.$$

Последнее слагаемое преобразуем с учетом (5.5.11):

$$a_{ik}^{(k-1)} (c_k^{(k)})^{-1} (c_k^{(k)} f_k c_k^{(k)}) = a_{ik}^{(k-1)} (c_k^{(k)})^{-1} (c_k^{(k)} x_k - y_k c_k^{(k)}).$$

Следовательно,

$$a_{ik}^{(k-1)} \left((c_k^{(k)})^{-1} y_k c_k^{(k)} \right) - y_i a_{ik}^{(k-1)} = \sum_{l=1}^n u_{li}^{(k-1)} \beta_{lk} c_k^{(k)}.$$

В силу условий на собственные значения матриц y_k и y_i , полученное матричное уравнение однозначно разрешимо:

$$a_{ik}^{(k-1)} = \text{sol} \left(-y_i, (c_k^{(k)})^{-1} y_k c_k^{(k)}, \sum_{l=1}^n u_{li}^{(k-1)} \beta_{lk} c_k^{(k)} \right), \quad (5.5.17)$$

$i=0, 1, \dots, k-1.$

Для блоков $a_{kj}^{(k-1)}$ при $0 \leq j \leq k-1$ получаем такие соотношения:

$$a_{kj}^{(k-1)} x_j - y_k a_{kj}^{(k-1)} = \sum_{l=1}^n u_{lk}^{(k)} v_{lj}^{(k)} =$$

$$= c_k^{(k)} \sum_{l=1}^n d_{lk} v_{lj}^{(k-1)} + c_k^{(k)} \sum_{l=1}^n d_{lk} \beta_{lk} a_{kj}^{(k-1)}.$$

С учетом (5.5.11), (5.5.13) выводим

$$a_{kj}^{(k-1)} x_j - (c_k^{(k)} x_k (c_k^{(k)})^{-1}) a_{kj}^{(k-1)} = c_k^{(k)} \sum_{l=1}^n d_{lk} v_{lj}^{(k-1)},$$

откуда

$$a_{kj}^{(k-1)} = \text{sol} \left(-c_k^{(k)} x_k (c_k^{(k)})^{-1}, x_j, \sum_{l=1}^n d_{lk} v_{lj}^{(k-1)} \right), \quad (5.5.18)$$

$j=0, 1, \dots, k-1.$

8967

Формулы (5.5.9), (5.5.10), (5.5.16) и (5.5.18) позволяют, в частности, вести рекуррентное вычисление векторов $c^{(k)}$ - последних столбцов матриц A_k^{-1} , которые и нужны для реализации метода окаймления. В случае, когда блоки x_i, y_i суть скалярные матрицы, построенный нами алгоритм упрощается и может быть записан следующим образом:

$$k=0: \quad u_{l0}^{(0)} = a_{00}^{-1} \varphi_{l0}, \quad v_{l0}^{(0)} = \psi_{l0} a_{00}^{-1}, \quad l=1, \dots, r, \\ z_0^{(0)} = a_{00}^{-1} b_0;$$

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

$$d_{lk} = \varphi_{lk} - \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} u_{lj}^{(k-1)}, \quad l=1, \dots, r,$$

$$\beta_{lk} = \psi_{lk} - \sum_{j=0}^{k-1} v_{lj}^{(k-1)} a_{jk}, \quad l=1, \dots, r,$$

$$\gamma_k = b_k - \sum_{j=0}^{k-1} a_{kj} z_j^{(k-1)},$$

$$c_k^{(k)} = s_k^{(k)} = (x_k - y_k)^{-1} \sum_{l=1}^r d_{lk} \beta_{lk}, \quad (5.5.19)$$

$$c_i^{(k)} = (y_k - y_i)^{-1} \sum_{l=1}^r u_{li}^{(k-1)} \beta_{lk} c_k^{(k)}, \quad i=0, 1, \dots, k-1,$$

$$s_j^{(k)} = (x_j - x_k)^{-1} c_k^{(k)} \sum_{l=1}^r d_{lk} v_{lj}^{(k-1)}, \quad j=0, 1, \dots, k-1,$$

$$u_l^{(k)} = 1 \cdot u_l^{(k-1)} + c_k^{(k)} d_{lk}, \quad l=1, \dots, r,$$

$$v_l^{(k)} = (1 \cdot v_l^{(k-1)}) + \beta_{lk} s_l^{(k)}, \quad l=1, \dots, r,$$

$$z_k^{(k)} = 1 \cdot z_k^{(k-1)} + c_k^{(k)} \gamma_k.$$

При подсчете числа операций следует учесть, что a_{lk} и a_{jk} также вычисляются согласно (5.5.5). При $p=1$ общее число операций умножения-деления составляет $(4r+1)r^2$ (в главном члене). Число сложений-вычитаний такое же.

§ 6. Методы векторизации

6.1. Последовательные и векторные алгоритмы

Пусть фиксирован конечный запас типов операций с конечным числом входов и выходов. Тогда последовательный алгоритм будем считать заданным, если каким-либо образом определена последовательность операций из имеющегося запаса и отвечающих им операций.

Предположим, что множество операций в алгоритме разбито на непересекающиеся подмножества M_1, \dots, M_h , и при этом если в M_i используется какой-либо результат, полученный в M_j , то $i \leq j$. Такое разбиение называется обобщенной параллельной формой алгоритма и просто параллельной формой, если для всех i внутри M_i операции не обмениваются результатами. Подмножества M_i называются ярусами, а их число h - высотой обобщенной параллельной формы.

В действительности обычно рассматривается некоторое семейство последовательностей и отвечающих им разбиений. Предположим, что для каждой из них любой из ярусов имеет параллельную форму, высота которой, вообще говоря, зависит от особенностей рассматриваемого семейства, но не может зависеть от характеристик конкретной последовательности, например от числа операций в ней или в ее ярусах. Введем укрупненные операции соответственно ярусам M_1, \dots, M_h . Для каждой из них входные и выходные данные представим в виде совокупностей векторов, число которых не должно зависеть от их размерностей, и, более того, предположим, что для всего рассматриваемого семейства последовательностей удастся выделить лишь несколько типов таких укрупненных операций - будем называть их векторными операциями. Алгоритм, представленный как последовательность векторных операций, будем называть векторным алгоритмом, а процесс его получения - векторизацией.

С точки зрения максимального распараллеливания следует добиваться наименьшей высоты параллельной формы. Однако обычно стремятся не к максимальной, а к некоторой "разумной" параллельности, обеспечивающей определенные структурные качества. Поэтому в последнее время усиленное внимание уделяется разработке векторных алгоритмов,