ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ и МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 2 Сентябрь 1962 Октябрь № 5

О НЕКОТОРЫХ ИТЕРАЦИОННЫХ ПРОЦЕССАХ СИММЕТРИЗАЦИИ МАТРИЦЫ

В. Н. КУБЛАНОВСКАЯ

(*Ленинград*)

В статье рассматриваются итерационные процессы, позволяющие преобразовать произвольную матрицу A путем умножения справа на ортогональную матрицу T_k в матрицу B_k, сколь угодно близкую при достаточно большом k к симметричной матрице. Ортогональная матрица T_k строится как произведение соответствующим образом подобранных элементарных матриц вращения.

В § 1 дается описание алгорифмов и доказывается их сходимость.

В § 2 алгорифмы применяются к извлечению квадратного корня из положительно определенной матрицы и к решению линейных систем, в частности к решению систем с прямоугольной матрицей.

В § 3 доказывается экстремальное свойство следа положительно определенной матрицы $\sqrt{AA'}$.

§ 1. Описание алгорифмов

Пусть A — произвольная квадратная матрица с вещественными элементами.

Будем строить последовательность матриц

$$B_0 = A,\ B_1,\ B_2, \ldots, B_k, \ldots, \tag{1}$$

каждая из которых получается из предыдущей путем умножения справа на элементарную матрицу вращения

$$B_{k+1} = B_k T_{ij}^{(k)}, \tag{2}$$

где

$$T_{ij}^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & \\ & & c^{(k)} & \cdots & s^{(k)} & & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & & & 1 & & \ddots & \\ & & -s^{(k)} & \cdots & c^{(k)} & & \\ & & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & & 1 \end{bmatrix},$$

$[c^{(k)}]^2 + [s^{(k)}]^2 = 1$. Коэффициенты $c^{(k)}$ и $s^{(k)}$ в матрице $T_{ij}^{(k)}$ будем находить из условия

$$b_{ji}^{(k+1)} = b_{ij}^{(k+1)}, \tag{3}$$

где $b_{mr}^{(k+1)}$ — элементы матрицы B_{k+1}.

Легко показать, что для выполнения (3) $c^{(k)}$ и $s^{(k)}$ должны вычисляться по формулам

$$c^{(k)} = \frac{1}{\pm\sqrt{1+\delta_k^2}}, \qquad s^{(k)} = c^{(k)}\delta_k, \qquad \delta_k = \frac{b_{ji}^{(k)} - b_{ij}^{(k)}}{b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}}. \tag{4}$$

Знак у $c^{(k)}$ будем брать всегда равным знаку $b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}$, т. е.

$$c^{(k)} = \frac{\operatorname{sign}(b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)})}{+\sqrt{1+\delta_k^2}}. \tag{5}$$

Выбор пар индексов (i_1, j_1), (i_2, j_2), . . . для последовательных шагов процесса будем осуществлять априорно или с управлением по ходу процесса, подобно тому как это делается в якобиевых процессах определения собственных значений симметричной матрицы (см. [1], гл. VIII, § 81).

Докажем, что так построенная последовательность матриц (1) сходится при $k \to \infty$ к симметричной матрице, квадрат которой равен матрице AA'.

В зависимости от выбора (i, j) будем различать три процесса.

1. *Процесс выравнивания максимально разнящейся по модулю пары элементов.* Процесс состоит в выравнивании на каждом шагу пары максимально разнящихся по модулю элементов, расположенных симметрично относительно главной диагонали, и является, в некотором смысле, аналогом классического процесса Якоби.

При переходе от k-го шага к $(k+1)$-му пару индексов (i, j) определяем из условия

$$|b_{ji}^{(k)} - b_{ij}^{(k)}| = \max_{m \neq r} |b_{mr}^{(k)} - b_{rm}^{(k)}|. \tag{6}$$

2. *Циклический процесс.* Выбирается определенная нумерация пар (i, j), и выравнивание внедиагональных элементов происходит по циклам, в течение каждого из которых выравниваются по очереди элементы в (i, j)-й и (j, i)-й позициях в порядке выбранной нумерации пар индексов.

Наиболее естественной нумерацией является нумерация по строкам слева направо и сверху вниз: $(1,2)$, $(1,3)$, ..., $(1,n)$, $(2,3)$, ..., $(n-1,n)$.

Аналогично может быть выбрана нумерация по столбцам сверху вниз и слева направо.

Этот процесс по аналогии можно сравнить с циклическим процессом Якоби для определения собственных значений симметричной матрицы. Он имеет те же преимущества и недостатки. Именно, циклический процесс более прост при проведении вычислений на быстродействующих машинах по сравнению с первым процессом; недостатком циклического процесса является то, что по ходу процесса приходится выравнивать мало разнящиеся по модулю пары недиагональных элементов, хотя в матрице еще присутствуют пары элементов, модуль разности которых велик.

Этот недостаток устраняется третьим процессом.

3. *Циклический процесс с преградами.* Вводится монотонно убывающая последовательность положительных чисел, так называемых преград: $\pi_1 > \pi_2 > \cdots > \pi_k > \cdots$.

В отличие от второго процесса, здесь при последовательном выравнивании внедиагональных элементов пропускаются те шаги, при которых приходилось бы выравнивать пару элементов, разнящихся друг от друга по модулю меньше, чем рассматриваемая преграда π_i, которые последовательно меняются, начиная с π_1. Именно, после того как все пары выравнены с точностью до π_1, в качестве следующей преграды берется π_2 и т. д. Последняя из задаваемых преград зависит от точности, с которой нужно найти элементы симметричной матрицы.

Перейдем к доказательству сходимости первого из построенных процессов. Предварительно установим справедливость следующей леммы.

Лемма. *Последовательность следов матриц B_k при неограниченном увеличении k имеет конечный предел.*

Для доказательства этого достаточно установить, что следы матриц B_k образуют монотонно возрастающую ограниченную последовательность. Покажем, что

$$\operatorname{Sp} B_{k+1} \geqslant \operatorname{Sp} B_k, \qquad k = 0,1,\ldots \tag{7}$$

Так как $B_{k+1} = B_k T_{ij}^{(k)}$, то при переходе от шага k к шагу $(k+1)$ из диагональных элементов будут меняться только элементы в позициях (i, i) и (j, j). Имеем

$$\begin{aligned} b_{mm}^{(k+1)} &= b_{mm}^{(k)} \qquad \text{при } m \neq i, j, \\ b_{ii}^{(k+1)} &= c^{(k)} b_{ii}^{(k)} - s^{(k)} b_{ij}^{(k)}, \\ b_{jj}^{(k+1)} &= s^{(k)} b_{ji}^{(k)} + c^{(k)} b_{jj}^{(k)}, \end{aligned} \tag{8}$$

где $c^{(k)}$ и $s^{(k)}$ вычисляются по формулам (4).

Из (8) и (4) находим

$$\begin{aligned} b_{ii}^{(k+1)} + b_{jj}^{(k+1)} &= c^{(k)} (b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}) + s^{(k)} (b_{ji}^{(k)} - b_{ij}^{(k)}) = \\ &= c^{(k)} [(b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}) + \delta_k (b_{ji}^{(k)} - b_{ij}^{(k)})] = c^{(k)} (b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}) (1 + \delta_k^2) = \\ &= \frac{\operatorname{sign}(b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)})}{\sqrt{1 + \delta_k^2}} (1 + \delta_k^2) (b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}) = \frac{b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}}{c^{(k)}}. \end{aligned} \tag{9}$$

Так как

$$c^{(k)} = \frac{\operatorname{sign}(b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)})}{\sqrt{1 + \delta_k^2}}, \qquad |c^{(k)}| \leqslant 1,$$

то справедливость (7) очевидна.

Для завершения доказательства установим ограниченность последовательности $\operatorname{Sp} B_k$. С этой целью установим ограниченность всех элементов матриц B_k.

Имеем

$$B_k = B_{k-1} T_{ij}^{(k-1)} = B_{k-2} T_{ij}^{(k-2)} T_{ij}^{(k-1)} = \cdots = A T_k,$$

где $T_k = \prod_{r=1}^{k-1} T_{ij}^{(r)}$ — ортогональная матрица. Поэтому при любом k справедливо

$$B_k B_k' = A T_k T_k' A' = A A'.$$

Следовательно,

$$\sum_{m,\,r=1}^{n} [b_{mr}^{(k)}]^2 = \mathrm{Sp}\, AA', \tag{10}$$

откуда $|b_{mm}^{(k)}| \leqslant \alpha = \sqrt{\mathrm{Sp}\, AA'}$, так что следы матриц B_k тоже ограничены сверху.

Сходимость первого процесса следует непосредственно из леммы.

Действительно, из равенств (4), (8) и (9) имеем

$$\mathrm{Sp}\, B_{k+1} - \mathrm{Sp}\, B_k = \sqrt{(b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)})^2 + (b_{ji}^{(k)} - b_{ij}^{(k)})^2} - (b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}). \tag{11}$$

В силу леммы, $\mathrm{Sp}\, B_k$ при достаточно большом k сколь угодно близок к $\mathrm{Sp}\, B_{k+1}$, а потому из (11) следует

$$|b_{ji}^{(k)} - b_{ij}^{(k)}| \to 0 \qquad \text{при } k \to \infty. \tag{12}$$

Следовательно, в силу (6), $\max |b_{mr}^{(k)} - b_{rm}^{(k)}| \to 0$ при $k \to \infty$, что и доказывает стремление последовательности матриц B_k к симметричной матрице B. Квадрат матрицы B равен AA', так как при любом k $B_k B_k' = AA'$.

Докажем теперь сходимость циклического процесса с преградами. За каждый шаг процесса $\mathrm{Sp}\, B_k$ увеличивается на величину, определяемую равенством (11). Имеем, в силу леммы, $|b_{ii}^{(k)} + b_{jj}^{(k)}| \leqslant 2\alpha$ при любом i, j и k. Учитывая, что функция $f(x) = \sqrt{x^2 + a^2} - x$ монотонно убывающая, получаем из (11)

$$\mathrm{Sp}\, B_{k+1} - \mathrm{Sp}\, B_k \geqslant \sqrt{4\alpha^2 + \pi_1^2} - 2\alpha. \tag{13}$$

Отсюда следует, что первая преграда π_1 будет пройдена за конечное число шагов. Аналогично, за конечное число шагов будут пройдены преграды π_2, π_3 и т. д. Так как $\pi_k \to 0$, то через достаточно большое число шагов матрица B_k будет сколь угодно близка к симметричной матрице B. Как и выше, устанавливается, что квадрат B равен AA'. Это и доказывает сходимость процесса.

Доказательство сходимости циклического процесса значительно сложнее и здесь не рассматривается.

З а м е ч а н и я. 1. Если описанные выше алгорифмы применить к матрице $B_0 = A'$, то при достаточно большом k получим матрицу B_k, квадрат которой сколь угодно близок к матрице $A'A$.

2. Описанные алгорифмы могут быть применены для приведения произвольной комплексной матрицы к эрмитовой матрице, квадрат которой равен AA^* (или A^*A), если заменить ортогональные матрицы вращения на унитарные.

3. Все алгорифмы легко программируются при минимальном использовании памяти машины и могут проводиться в режиме фиксированной запятой при соответствующей нормировке первоначальной матрицы. Следует ожидать устойчивость их к ошибкам округления, так как каждый элементарный шаг сводится к умножению на числа, меньшие единицы.

§ 2. Применение алгорифмов

1. Извлечение квадратного корня из положительно определенной матрицы

Если исходная матрица A положительно определенная, то, применяя описанные алгорифмы к матрице $B_0 = C$ такой, что

$$CC' = A, \tag{14}$$

придем к симметричной матрице B, квадрат которой равен матрице A:

$$B^2 = A.$$

В качестве матрицы C можно взять, например, левую треугольную матрицу L, полученную по методу квадратного корня (см. [1], гл. II, § 20).

Автору не удалось доказать, что построенная матрица B является положительно определенной, и потому вопрос о том, каким корнем из A является матрица B, остается открытым.

2. Применение алгорифмов к решению линейных систем

Алгорифмы § 1 могут быть применены для перехода от линейной системы уравнений с произвольной матрицей коэффициентов к равносильной ей системе уравнений с симметричной матрицей коэффициентов.

Пусть

$$AX = f, \tag{15}$$

где A — неособенная произвольная матрица.

Применим к матрице A какой-либо из алгорифмов § 1.

Если $B_k = AT_k$, то при достаточно большом k получим систему

$$B_kY = f, \qquad X = T_kY \tag{16}$$

с матрицей B_k, сколь угодно близкой к матрице $\sqrt{AA'}$.

Если $\hat{B}_k = A'\hat{T}_k$, то при достаточно большом k получим систему

$$\hat{B}_kX = \hat{T}'_kf \tag{17}$$

с матрицей $\hat{B}_k$, сколь угодно близкой к матрице $\sqrt{A'A}$.

Нетрудно показать, что обусловленность матриц B_k и $\hat{B}_k$ систем (16) и (17) не больше обусловленности исходной матрицы A.

Действительно, P-число обусловленности для матрицы B_k (матрицы $\hat{B}_k$) совпадает с H-числом обусловленности для матрицы A:

$$\rho(B_k) = \rho(\hat{B}_k) = \eta(A), \tag{18}$$

где $\rho(M) = \max|\lambda_i| / \min|\lambda_i|$, $\eta(M) = \sqrt{\mu_1/\mu_n}$, λ_i — собственные значения M, μ_i — собственные значения MM' (см. [1], гл. II, § 15).

В случае положительно определенной матрицы $A = CC'$ P-число обусловленности для матрицы B_k $(B_0 = C)$ равно корню квадратному из P-числа обусловленности для матрицы A:

$$\rho(B_k) = \sqrt{\rho(A)}. \tag{19}$$

3. О решении переопределенных систем

При обработке наблюдений приходится иметь дело с так называемыми переопределенными системами, число уравнений которых значительно больше числа неизвестных.

Пусть

$$CX = f \tag{20}$$

есть система линейных уравнений с прямоугольной матрицей C размеров $n \times m$ ранга n, где n — число неизвестных, m — число уравнений и $n \ll m$.

Вместо системы (20) будем решать систему

$$BX = g \tag{21}$$

с симметричной матрицей $B = \sqrt{C'C}$ размеров $n \times n$.

Переход от системы (20) к системе (21) может быть осуществлен с помощью одного из алгорифмов § 1. Именно, матрицу C' дополним до квадратной матрицы нулями и полученную матрицу

$$\widetilde{B}_0 = \begin{bmatrix} C' \\ \cdots \\ 0 \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{c|c} n \times n & (m-n) \times n \\ \hline n \times (m-n) & (m-n) \times (m-n) \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c:c} \mathrm{I} & \mathrm{II} \\ \hline \mathrm{III} & \mathrm{IV} \end{array}\right]$$

симметризуем, умножая справа на соответствующим образом подобранные матрицы вращения.

Нетрудно видеть, что при последовательном проведении процесса преобразованию подвергаются только элементы клеток I и II, т. е. элементы матрицы C'. Элементы клеток III и IV сохраняют свое первоначальное значение, т. е. остаются тождественными нулями.

Имеем

$$\widetilde{B}_k = \widetilde{B}_0 T_k = \begin{bmatrix} C' T_k \\ \cdots\cdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

В силу сходимости процесса элементы клетки II при $k \to \infty$ стремятся к нулю, и в пределе придем к матрице вида

$$\widetilde{B} = \begin{bmatrix} B & 0 \\ \cdots & \cdots \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Так как при любом k справедливо соотношение

$$\widetilde{B}_k \widetilde{B}_k' = \begin{bmatrix} C' T_k T_k' C \\ \cdots\cdots\cdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C'C & 0 \\ \cdots & \cdots \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

то и при $k \to \infty$ справедливо

$$\widetilde{B}\widetilde{B}' = \widetilde{B}^2 = \begin{bmatrix} B^2 & 0 \\ \cdots & \cdots \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C'C & 0 \\ \cdots & \cdots \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Отсюда

$$B^2 = C'C, \quad B = C'\widetilde{T} = \widetilde{T}'C, \tag{22}$$

где B — симметричная матрица порядка n, $\widetilde{T}$ — прямоугольная матрица

$n \times m$, полученная из матрицы T вычеркиванием $(m - n)$ последних столбцов.

Из (22) находим, что

$$C = \widetilde{T}B.$$

Подставляя это значение C в (20), получим

$$\widetilde{T}BX = f \text{ или } BX = \widetilde{T}'f = g.$$

Так как матрица C имеет ранг, равный n, то матрица $C'C$ — положительно определенная, а следовательно, матрица $B = \sqrt{C'C}$ системы (21) неособенная.

Покажем, что решение X^* системы (21) совпадает с приближенным решением исходной системы (20), полученным по методу наименьших квадратов, т. е. доставляет минимум функционалу

$$V = (r, r), \tag{23}$$

где $r = f - CX$ — вектор невязки для системы (20).

Для этого достаточно показать (см. [2], гл. VIII, § 132), что система (21) равносильна системе

$$C'CX = C'f. \tag{24}$$

Пусть $X = X^*$ — решение системы (24); покажем, что X^* есть решение системы (21). Для этого в равенство

$$C'CX^* = C'f$$

подставим $C'C = B^2$ и $C' = B\widetilde{T}'$, получим

$$B^2X^* = BT'f. \tag{25}$$

Умножая обе части (20) на B^{-1}, получим

$$BX^* = \widetilde{T}'f = g, \tag{26}$$

т. е. X^* есть решение системы (21).

Пусть X^* — решение (21); покажем, что X^* удовлетворяет системе (24). Для этого обе части (26) умножим на B. Тогда из (22) будет следовать справедливость сделанного утверждения. Равносильность систем (21) и (24) доказана.

Замечания. 1. При практическом получении матрицы $B_k \approx \sqrt{C'C}$ по прямоугольной матрице C размеров $n \times m$ $(n \ll m)$ целесообразно весь процесс разбить на 2 этапа.

На первом этапе матрицу C' путем цепочки умножений справа на матрицы вращения (или отражения) (см. [3], стр. 555—570) привести к матрице $\overline{S} = C'\tau = C'T_{12}T_{13} \cdots T_{1m}T_{23} \cdots T_{nm}$ вида

$$\overline{S} = \left[S \;\vdots\; 0\right],$$

где $S = (s_{ij})$ — левая треугольная матрица порядка n: $s_{ij} = 0$ для $i = 1, 2, \ldots, n-1$; $j = i+1, \ldots, n$.

На втором этапе матрицу $\overline{S}$ подвергнуть симметризации одним из итерационных процессов § 1. Здесь фактически достаточно симметризовать только левую треугольную матрицу S. В результате проведения второго этапа при достаточно большом k получим матрицу $B_k = C'\tau T_k$, сколь угодно близкую к квадратной симметричной матрице $\sqrt{C'C}$.

При проведении вычислений на быстродействующей машине целесообразно одновременно с матрицей C' преобразовать и свободный член f системы (20) для образования вектора $g = \widetilde{T}'f$ — свободного члена системы (21).

2. Система (21) по своим качествам лучше равносильной ей системы (24), ибо P-число обусловленности матрицы системы (21) равно корню квадратному из P-числа обусловленности матрицы системы (24).

§ 3. Об одном экстремальном свойстве

Покажем, что след положительно определенной матрицы $\sqrt{AA'}$ является максимальным среди следов матриц AU, где A — неособенная, а U пробегает множество всех ортогональных матриц.

Действительно, из леммы § 1 следует, что максимальный след у матриц AU достигается на симметричной матрице. Пусть это будет матрица $M = AU$. Имеем

$$MM' = M^2 = AUU'A' = AA'.$$

Пусть $\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n$ — собственные значения AA'. Тогда собственными значениями M будут $\pm\sqrt{\mu_1}, \pm\sqrt{\mu_2}, \ldots, \pm\sqrt{\mu_n}$. Отсюда следует, что экстремальным свойством будет обладать положительно определенная матрица $\sqrt{AA'}$, которая является единственной среди множества матриц AU.

Автор пользуется случаем поблагодарить В. Н. Фаддееву и Д. К. Фаддеева за замечания и советы, сделанные при чтении рукописи.

Поступила в редакцию
31.03.1962

Цитированная литература

1. Д. К. Фаддеев, В. Н. Фаддеева. Вычислительные методы линейной алгебры. М., Физматгиз, 1960.
2. А. Н. Крылов. Лекции о приближенных вычислениях. М., Гостехиздат, 1950.
3. В. Н. Кублановская. О некоторых алгорифмах для решения полной проблемы собственных значений. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1961, 1, № 4, 555—570.