Лекція 7. Операції над матрицями і прямі методи

План.

1. Метод Штрассена для швидкого множення матриць
2. Метод Вінограда для швидкого множення матриць
3. Знаходження оберненої матриць за методом Жордана.
4. Розв'язання системи рівнянь методом Хаусходера (обертання).
5. Розв'язання системи рівнянь методом Гівенса (відображення).
6. Розв'язання системи рівнянь модифікованим методом Грама–Шмідта.
7. Розв'язання системи рівнянь методом Холецького.
8. Знаходження спектру матриці методом Якобі (для симетричних додатно визначених матриць).

1. Метод Штрассена

Метод Штрассена застосовується для множення 2×2 блочних матриць. Легко збагнути, що до матриць іншої структури можна просто додати певну кількість нулів і стовпчиків, щоб привести її до вигляду 2×2 блочної матриці. Кожний блок вважається квадратним.

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$

У звичайному алгоритмі множення $C_{ij} = A_{i1}B_{1j} + A_{i2}B_{2j}$ виконуються 8 множень і 4 додавання блоків. Штрассен (1969) запропонував спосіб, в якому виконуються лише 7 множень і 18 додавань блоків.

$P_1 = (A_{11} + A_{22})(B_{11} + B_{22})$, $P_2 = (A_{21} + A_{22}) B_{11}$,

$P_3 = A_{11}(B_{12} - B_{22})$, $P_4 = A_{22}(B_{21} - B_{11})$,

$P_5 = (A_{11} + A_{12}) B_{22}$, $P_6 = (A_{21} - A_{11})(B_{11} + B_{12})$,

$P_7 = (A_{12} - A_{22})(B_{21} + B_{22})$, $C_{11} = P_1 + P_4 - P_5 + P_7$,

$C_{12} = P_3 + P_5$, $C_3 = P_2 + P_4$, $C_{22} = P_1 + P_3 - P_2 + P_6$.

Складність методу Штрассена. Поклавши $n = 2m$, де m — розмір блоку, маємо, що в звичайному алгоритмі множення виконуються $(2m)^3$ множень і $(2m)^3 - (2m)^2$ додавань дійсних чисел. За методом Штрассена маємо $7m^3$ множень і $7m^3 + 11m^2$ додавань чисел.

Покажемо, що для великих розмірів складність методу Штрассена становить приблизно 7/8 складності алгоритму звичайного множення. Якщо порядок матриці є степенем двійки, тобто $n = 2^q$, то алгоритм Штрассена можна записати рекурсивно (див. Голуб, ван Лоу, с. 43). Позначимо як d кількість кроків рекурсії, після яких можна переходити на алгоритм звичайного множення блочних матриць розмірності $n_{\min} = 2^d \times 2^d$. Виконаємо оцінку складності рекурсивного алгоритму Штрассена:

кількість рекурсивних переходів = *q*–*d*,

кількість стандартних множень матриць = 7^{q-d},

кількість множень чисел *s* = $\left(2^d\right)^3 7^{q-d}$,

стандартна кількість множень чисел *c* = $\left(2^q\right)^3$,

$$\frac{s}{c}=\left(\frac{2^d}{2^q}\right)^3 7^{q-d}=\left(\frac{7}{8}\right)^{q-d}.$$

При $d=0$ $n_{\min}=2^0=1$, тому

$$s=\left(\frac{7}{8}\right)^q c=7^q=n^{\log_2 7}\approx n^{2,807}.$$

Наприклад, при n = 1024 і $n_{\min}$=64, арифметичні затрати алгоритма Штрассена становлять $\left(\frac{7}{8}\right)^{10-6}\approx 0,6$ порівняно із стандартним алгоритмом.

Виграш завдяки методу Штрассена виникає лише для матриць, розмір яких перевищує 64×64.

2. Метод Винограда-Коперсміта

$$A_i=\sum_{k=1}^{n/2} a_{i,2k-1}a_{i,2k},$$

$$B_j=\sum_{k=1}^{n/2} b_{2k-1,j}b_{2k,j},$$

$$C_{ij}=\sum_{k=1}^{n/2}\left(a_{i,2k-1}+b_{2k,j}\right)\left(a_{i,2k}+b_{2k-1,j}\right)-A_i-B_j.$$

Складність методу Винограда-Коперсміта (1990) = $O\left(n^{2,376}\right)$. Була висунута гіпотеза про існування алгоритму множення матриць із складність $O\left(n^2\right)$, проте на даний час максимальним наближенням до цього бар'єра є алгоритм Уільямс (2011) із складністю $O\left(n^{2,3727}\right)$ [2].

4. Метод Жордана

$$L_{k+1} = \begin{pmatrix} 1 & & & -\dfrac{a_{1,k+1}^{(k)}}{a_{k+1,k+1}^{(k)}} & & & \\ & 1 & & \dots & & 0 & \\ & & \dots & -\dfrac{a_{k,k+1}^{(k)}}{a_{k+1,k+1}^{(k)}} & \dots & & \\ & & & \dfrac{1}{a_{k+1,k+1}^{(k)}} & & & \\ & & & -\dfrac{a_{k+2,k+1}^{(k)}}{a_{k+1,k+1}^{(k)}} & & & \\ & 0 & & \dots & & 1 & \\ & & & -\dfrac{a_{n,k+1}^{(k)}}{a_{k+1,k+1}^{(k)}} & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$A_{k+1} = L_{k+1}A_k\,, \quad A_0 = A\,. \qquad A^{-1} = L_n L_{n-1} \dots L_1$$

5. Метод Гівенса (обертань) (QR-розклад)

В методах Гівенса і Хаусхолдера використовується QR-розклад

$$A = QR,$$

де Q — ортогональна матриця, а R — верхня трикутна матриця.

Нехай

$$
\begin{aligned}
&a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1m}x_m = f_1,\\
&a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2m}x_m = f_2,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mm}x_m = f_m.
\end{aligned}
$$

Помножимо перше рівняння на c_1, друге на s_1, складемо їх і замінимо перше рівняння системи. Потім перше рівняння вихідної системи множимо на $-s_1$, друге на c_1, складаємо і замінюємо друге рівняння. Таким чином, перші два рівняння заміняються рівняннями

$$
\begin{aligned}
&(c_1a_{11} + s_1a_{21})x_1 + (c_1a_{12} + s_1a_{22})x_2 + \ldots\\
&\qquad + (c_1a_{1m} + s_1a_{2m})x_m = c_1f_1 + s_1f_2,\\
&(-s_1a_{11} + c_1a_{21})x_1 + (-s_1a_{12} + c_1a_{22})x_2 + \ldots\\
&\qquad + (-s_1a_{1m} + c_1a_{2m})x_m = -s_1f_1 + c_1f_2.
\end{aligned}
$$

Щоб виключити із другого рівняння змінну x_1, параметри c_1 і s_1 повинні задовольняти рівняння

$$-s_1a_{11} + c_1a_{21} = 0$$

$$c_1^2 + s_1^2 = 1$$

Звідси $c_1 = \dfrac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}$, $s_1 = \dfrac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}$. Ці числа можна інтерпретувати як косинус і синус деякого кута α_1. Тому метод називається методом обертання, або Гівенса).

У результаті перетворень одержимо систему

$$
\begin{aligned}
&a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{1m}^{(1)}x_m = f_1^{(1)},\\
&\qquad\quad a_{22}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{2m}^{(1)}x_m = f_2^{(1)},\\
&a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + \ldots + a_{3m}x_m = f_3,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mm}x_m = f_m,
\end{aligned}
$$

де

$$
\begin{aligned}
&a_{1j}^{(1)} = c_1 a_{1j} + s_1 a_{2j} \qquad j = 1, 2, \ldots, m, \quad f_1^{(1)} = c_1 f_1 + s_1 f_2;\\
&a_{2j}^{(1)} = -s_1 a_{1j} + c_1 a_{2j} \qquad j = 1, 2, \ldots, m, \quad f_2^{(1)} = -s_1 f_1 + c_1 f_2.
\end{aligned}
$$

Далі перше рівняння системи заміняється новим, отриманим додаванням результатів множення першого і третього рівнянь відповідно на

$$
c_2 = \frac{a_{11}^{(1)}}{\sqrt{(a_{11}^{(1)})^2 + a_{31}^2}}, \qquad s_2 = \frac{a_{31}}{\sqrt{(a_{11}^{(1)})^2 + a_{31}^2}},
$$

а третє рівняння, отримується при додаванні результатів множення тих самих рівнянь на $-s_2$ і c_2. Отримуємо систему

$$
\begin{aligned}
&a_{11}^{(2)}x_1 + a_{12}^{(2)}x_2 + \ldots + a_{1m}^{(2)}x_m = f_1^{(2)},\\
&\qquad\quad a_{22}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{2m}^{(2)}x_m = f_2^{(1)},\\
&\qquad\quad a_{32}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{3m}^{(1)}x_m = f_3^{(1)},\\
&a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + \ldots + a_{4m}x_m = f_4,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mm}x_m = f_m,
\end{aligned}
$$

де

$$
\begin{aligned}
&a_{1j}^{(2)} = c_2 a_{1j}^{(1)} + s_2 a_{3j} \qquad j = 1, 2, \ldots, m, \qquad f_1^{(2)} = c_2 f_1^{(1)} + s_2 f_3;\\
&a_{3j}^{(1)} = -s_2 a_{1j}^{(1)} + c_2 a_{3j} \qquad j = 2, 3, \ldots, m, \qquad f_3^{(1)} = -s_2 f_1^{(1)} + c_2 f_3.
\end{aligned}
$$

Виконавши перетворення m–1 раз, прийдемо до системи

$$
\begin{aligned}
&a_{11}^{(m-1)}x_1 + a_{12}^{(m-1)}x_2 + \ldots + a_{1m}^{(m-1)} = f_1^{(m-1)},\\
&\qquad\qquad a_{22}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{2m}^{(1)}x_m = f_2^{(1)},\\
&\qquad\qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&\qquad\qquad a_{m2}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{mm}^{(1)}x_m = f_m^{(1)}.
\end{aligned}
$$

Далі за цим алгоритмом перетвориться матриця

$$
\begin{aligned}
&a_{22}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{2m}^{(1)}x_m = f_2^{(1)},\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&a_{m2}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{mm}^{(1)}x_m = f_m^{(1)}.
\end{aligned}
$$

тощо.

У результаті m–1 етапів прямого ходу система буде приведена до трикутного виду.

$$\begin{aligned}
a_{11}^{(m-1)}x_1 + a_{12}^{(m-1)}x_2 + \ldots + a_{1m}^{(m-1)}x_m &= f_1^{(m-1)}, \\
a_{22}^{(m-2)}x_2 + \ldots + a_{2m}^{(m-2)}x_m &= f_2^{(m-2)}, \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \\
a_{mm}^{(1)}x_m &= f_m^{(1)}.
\end{aligned}$$

Введемо в розгляд матрицю

$$U_{p,q} = \begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & & \\
 & \ldots & & & & & & \\
 & & \cos\varphi & & & \sin\varphi & & \\
 & & & \ldots & & & & \\
 & 0 & & & 1 & & 0 & \\
 & & & & \ldots & & & \\
 & & -\sin\varphi & & & \cos\varphi & & \\
 & & & & & & \ldots & \\
 & & & & & & & 1
\end{pmatrix} &
\begin{array}{l}
\\ \\ \leftarrow p \\ \\ \\ \\ \leftarrow q \\ \\ \\
\end{array} \\
\begin{array}{ccccccccc}
 & & \uparrow & & & \uparrow & & & \\
 & & p & & & q & & &
\end{array} &
\end{array}$$

Описаний процес еквівалентний множенню матриць

$$PA = P_{n,n\text{-}1} \ldots\ P_{1,2}A = R,$$

де R – трикутна матриця. Отже, розв’язок можна отримати за допомогою процедури зворотного ходу: $Rx = P_{n,n\text{-}1} \ldots\ P_{1,2}f$.

6. Метод Хаусхолдера (QR-розклад)

Перетворенням Хаусхолдера називається матриця вигляду E - ww^T, де w — вектор-стовбець, для якого $ww^T = 2$. Матриця Хаусхолдера є симетричною і ортогональною. Щоб отримати розклад Хаусхолдера зробимо так. Нехай a_1 — перший стовпчик матриці A. Покладемо

$$u^T = (a_{11} - s, a_{21}, ..., a_{n1}),\ w = \mu u,$$

де $s = \pm\left(a_1^T a_1\right)^{1/2}$, $\gamma = \left(s^2 - a_{11}s\right)^{-1}$, $\mu = \gamma^{1/2}$.

$$P_1 = I - ww^T,$$

$$A_1 = P_1 A = \begin{bmatrix} s & a'_{12} & ... & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & ... & a'_{2n} \\ ... & ... & ... & ... \\ 0 & a'_{n2} & ... & a'_{nn} \end{bmatrix}.$$

Застосуємо цей алгоритм для квадратної підматриці, розміру $(n-1)\times\ (n-1)$ тощо. Продовжуючи таким чином, можна анулювати всі піддіагональні елементи матриці. Таким чином,

$$P_{n\text{-}1}\ ...\ P_1 A = R,$$

де R — верхня трикутна матриця. Розв'язок знаходимо зворотнім ходом знаходимо, як в методі Гівенса.

7. Модифікований метод Грама-Шмідта (QR-розклад)

Метод обчислює QR-розклад матриці $A = QR$, де Q – унітарна, а R – верхня трикутна матриця. Отже, $x = R^{-1}Q^{T}f$.

for $i = 1$ to n *// Обчислити i-ті стовбці матриць Q і R*

$q_i = a_i$

for $j = 1$ to $i - 1$ // Відняти від a_i компоненту в напрямку q_i

$r_{ij} = q_j^T q_i$

$q_i = q_i - r_{ij}q_j$

end for

$r_{ii} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} q_i^2}$

if $r_{ii} = 0$ // a_i лінійно залежить від $a_1, ..., a_{i-1}$

stop

end if

$q_i = q_i / r_{ii}$

end for

8. Метод Холецького (LU-розклад)

Якщо A – симетрична позитивно визначена матриця, то існує дійсна невироджена нижня трикутна матриця L, так що

$$LL^T = A.$$

Якщо $l_{ii} > 0$, то розклад єдиний.

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}}, \; j = 1, 2, \ldots i-1;$$

$$l_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \right)^{1/2}.$$

Розв'язання системи

$$Ax = b$$

зводиться до розв'язання систем з трикутними матрицями

$$Ly = b,$$
$$L^T x = y.$$

10. Метод Якобі

Метод Якоби – це ітераційна процедура, що приводить вихідну симетричну матрицю до діагонального виду за допомогою послідовності елементарних ортогональних обертань, називаних *обертаннями Якобі*, чи *плоскими обертаннями*. На (k+1)-кроці процедури здійснюється перетворення виду:

$$A_{K+1} = U_k^T A_k U_k \;,$$

де матриця U_k являє собою ортогональну матрицю обертань. На кожній ітерації анулюється максимальний по модулю позадіагональний елемент a_{pq}.

$$U_{k+1} = \begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & & & \\
 & \dots & & & & & & & \\
 & & \cos\varphi & & & & \sin\varphi & & \\
 & & & \dots & & & & & \\
 & 0 & & & 1 & & & 0 & \\
 & & & & & \dots & & & \\
 & & -\sin\varphi & & & & \cos\varphi & & \\
 & & & & & & & \dots & \\
 & & & & & & & & 1
\end{pmatrix} & \begin{matrix} \\ \\ \leftarrow p \\ \\ \\ \\ \leftarrow q \\ \\ \\ \end{matrix} \\
\begin{matrix} & & \uparrow & & & & \uparrow & & \\ & & p & & & & q & & \end{matrix} &
\end{array}$$

$$u_{pp} = u_{qq} = \cos\varphi,\ u_{pq} = -u_{qp} = \sin\varphi$$

$$u_{ij} = \begin{cases} 1,\ i = j,\ i \neq p,\ i \neq q, \\ 0,\ i \neq j,\ i \neq p,\ i \neq q. \end{cases}$$

Для того щоб анулювати елемент у позиції (p,q) , кут φ вибирають у такий спосіб: спочатку обчислюють величину

$$\theta = ctg 2\varphi = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}} \ ,$$

а потім визначають $tg\varphi$ або як найменший по модулю корінь квадратного рівняння $t^2 + 2t\theta = 1$, або по формулі $tg\varphi = \frac{1}{2\theta}$, якщо значення θ є достатньо великим.

У результаті застосування методу Якобі матриця *A* перетвориться до вигляду $D = V^T AV$, де D – діагональна матриця, на діагоналі якої стоять власні числа матриці *A*. Матриця D є границею послідовності матриць A_k, а $V = U_0 U_1 U_2 \ldots$.

Література

1. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. — М.: Мир, 1991.
2. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. — М.: Мир, 1999.
3. http://en.wikipedia.org/wiki/Matrix_multiplication#cite_note-12