

(对应矩阵的WZ分解或Q.L.F分解)^[2-3]。文献[4-7]以WZ分解为框架设计线性方程组求解的并行算法。文献[4]给出向量化并行算法及其实现;文献[5]给出基于对称矩阵Cholesky Q.L.F分解^[6]的三对角线性方程组的并行求解算法;文献[7]进一步改进适合对称三对角正定矩阵的WZ分解,并应用于并行算法设计。本文将式(1a)的矩阵结构一般化为定义1(式(1b)),并讨论其WZ分解式。

定义1 如果矩阵C为对称矩阵且C中非零元的位置为{(i,j)|i-j=0或|i-j|=p},那么,称正整数p为带宽,称矩阵C为对称p-三对角矩阵,记为C=pridiag{(b_i, a_i, b_{i+p}), p}ⁿ_{i=1},其中,b_i=0, i=1, ..., p; b_{i+p}=0, i=n-p+1, ..., n。如果C还是正定矩阵,则称C为对称正定p-三对角矩阵。

为方便讨论,先给出记号:矩阵A的第i行(列)向量记为a_i(a_i^T);向量α的第i个分量到第j个分量组成的子向量记为α_{i-j}(i≤j)。设a, b为整数且a<b,记[a, b]={x|x为整数且a≤x≤b}。设s为非负实数,令⌊s⌋(⌈s⌉)表示不超过(不小于)s的最大(小)整数。当p为整数,⌈p/2⌉记为ξ,⌊p/2⌋记为ε;且易得如下关系式:(1)ε+ξ=p;(2)当p为偶数时,p/2=ε=ξ;(3)当p为奇数时,ξ=ε+1, ξ=(p+1)/2, ε=(p-1)/2。

1 预备知识

设C为对称正定矩阵,且阶数n满足n=2m-2。假设存在结构如式(2)的矩阵W,使得C=WW^T,称该分解为WZ分解^[7],称分解得到的形如式(2)的矩阵为C的W因子。

$$W = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & & \dots & & w_{1,n} \\ 0 & \ddots & \ddots & \dots & \ddots & 0 \\ & 0 & w_{m-1,m-1} & w_{m-1,m} & 0 & \\ & & 0 & w_{m,m} & 0 & \\ & \ddots & w_{m+1,m-1} & w_{m+1,m} & w_{m+1,m+1} & 0 \\ & & \ddots & \dots & \ddots & 0 \\ 0 & w_{n,2} & & \dots & & w_{n,n} \end{bmatrix} \quad (2)$$

定义2 矩阵C的第m行将其分成上和下两部分,其中行号均小于m的部分称为上半矩阵,行号均大于m的部分称为下半矩阵。同理,由矩阵C的第m列将矩阵分成左半矩阵和右半矩阵。

定义3 对W因子,行中非零元的列号范围和列中非零元的行号范围统称为W因子边界。

由上述定义和式(2)知:上半矩阵第i行的W因子边界为[i, n+1-i];下半矩阵第i行的W因子边界为[n+2-i, i]。左半矩阵第j列的W因子边界为[1, j]∪[n+2-j, n];右半矩阵第j列的W因子边界为[1, n+1-j]∪[j, n]。

引理1 设对称p-三对角矩阵C的阶数n=2m-2。当C=WW^T时,设W因子第i行中非零元记为w_{i,x}。那么,下面各式成立:(1) i=m时, i-x=0;(2) i<m时, 0≤x-i≤2(m-i)-1;(3) i>m时, 0≤i-x≤2(i-m)。□

2 WZ分解式

定理1(WZ分解定理) 设C为n阶对称p-三对角矩阵,n为偶数(设n=2m-2)且可以被p整除(θ≠n/p)。如果C可以分解为C=WW^T,那么,W的结构按照标号①~⑤的分段顺序满足式(3),并且

- (1) 当θ为奇数,k的最大取值为k_{max}=⌊(θ-1)/2⌋,且W中列的结构按式(3)结束于④⑤
- (2) 当θ为偶数,k的最大取值为k_{max}=⌈(θ-1)/2⌉,且W中列的结构按式(3)结束于②③。

$$w_i^T = \begin{cases} \textcircled{4} \dots, w_{i-p,i}, \dots, w_{i,i}, \dots, w_{i+(2k+1)p,i}, \dots)^T, i = m - \varepsilon - kp, \dots, m - kp - 1 \\ \textcircled{2} \dots, w_{i-p,i}, \dots, w_{i,i}, \dots, w_{i+2kp,i}, \dots)^T, i = m - kp, \dots, m - \varepsilon - (k-1)p - 1 \\ \textcircled{1} \dots, w_{i-p,i}, \dots, w_{i,i}, \dots, w_{i+p,i}, \dots)^T, i = m - \varepsilon, m - \varepsilon + 1, \dots, m, \dots, m + \xi - 1, k = 1, 2, \dots \\ \textcircled{3} \dots, w_{i-2kp,i}, \dots, w_{i,i}, \dots, w_{i+p,i}, \dots)^T, i = m + \xi + (k-1)p, \dots, m + kp - 1 \\ \textcircled{5} \dots, w_{i-(2k+1)p,i}, \dots, w_{i,i}, \dots, w_{i+p,i}, \dots)^T, i = m + kp, \dots, m + \xi + kp - 1 \end{cases} \quad (3)$$

显然,当式(3)中元素的行号或列号 i 满足 $i > n$ 或 $i < 1$ 时,该元素为零。□

2.1 引理及其证明

引理 2 对 W 因子,设上半矩阵中行号记为 i ,下半矩阵中行号记为 j 。则:

(a) 对于第 i 行,如果已知 W 因子的第 i 到 $2m - i - 1$ 列的结构如式(3)所示,那么,该行中非零元

素 $w_{i,x}$ 的列号 x 满足: $x = i + \delta p$, δ 为整数且 $\delta \in [0, \lfloor \frac{2(m-i)-1}{p} \rfloor]$;

(b) 对于第 j 行,如果已知 W 因子的第 $2m - j$ 到 j 列的结构如式(3)所示,那么,该行中非零元素

$w_{j,y}$ 的列号 y 满足: $y = j - \tau p$, τ 为整数且 $\tau \in [0, \lfloor \frac{2(i-m)}{p} \rfloor]$ 。

证明:令 $k = m - i$,则 $i = m - k$, $2m - i - 1 = m + (k - 1)$;令 $h = j - m$,则 $j = m + h$, $2m - j = m - h$ 。于是,(a)和(b)的题设变为:(a)已知第 $m - k$ 到 $m + (k - 1)$ 列的结构;(b)已知第 $m - h$ 到 $m + h$ 列的结构。这里仅以(a)为例进行证明。

由(a)的题设已知第 $m - k$ 和 $m + (k - 1)$ 列的结构。第 $m - k$ 行中列号取值范围为 $[m - k, m + k - 1]$,恰落在已知结构的列中。因此,由式(3)立即可得第 $m - k$ 行的结构。由式(3),对于 W 因子中的任意第 x 列,其中非零元的行号 i 形式为 x , $x - p$ (或 $x + p$), $x + \beta p$,其中 $\beta = 2l$ (或 $2l + 1$ ($l \geq 1$))。所以,第 i 行中非零元 $w_{i,x}$ 的列号满足: $x = i$, $x - i = p$ (或 $-p$), $x - i = -\beta p$ 。再由引理 1 中(2)知 $0 \leq x - i \leq 2(m - i) - 1$ 。因此,有如下结论:

$x = i$ 时, $w_{i,i}$ 非零; $x = i + p$ 时, $w_{i,i+p}$ 非零。 $x = i - \beta p$ 时,有 $0 \leq -\beta p \leq 2(m - (i - \beta p)) - 1$,即 $0 \leq (-\beta) \leq \lfloor \frac{2(m-i)-1}{p} \rfloor = \lfloor \frac{2k-1}{p} \rfloor$ 。综上所述,第 i 行的非零元为 $w_{i,i+\delta p}$,其中 δ 的取值范围为 $[0, \lfloor \frac{2k-1}{p} \rfloor]$ 。□

在引理 2 的基础上,详细讨论 δ 的取值,得引理 3:

引理 3 对 W 因子,设上半矩阵中行号记为 i ,下半矩阵中行号记为 j 。则:

(a) 对第 i 行,若已知 W 因子的第 i 到 $2m - i - 1$ 列的结构如式(3)所示,则该行中非零元素的列号为 $x = i + \delta p$,并且: $i \in [m - \varepsilon - kp, m - kp - 1]$ 时, $\delta \in \{0, 1, 2k\}$; $i \in [m - (k + 1)p, m - \varepsilon - kp - 1]$ 时, $\delta \in \{0, 1, 2k + 1\}$ 。

(b) 对第 j 行,若已知 W 因子的第 $2m - j$ 到 j 列的结构如式(3)所示,则该行中非零元素的列号为 $y = j - \tau p$,并且: $j \in [m + kp, m + \xi + kp - 1]$ 时, $\tau \in \{0, 1, 2k\}$; $j \in [m + \xi + kp, m + (k + 1)p - 1]$ 时, $\tau \in \{0, 1, 2k + 1\}$ 。

证明:1)对式(3),先证:当 $x \in [m - (l + 1)p, m - lp - 1]$ ($l \geq 1$) 时,该列中的元素 $w_{x+(2l+1)p,x}$ (或 $w_{x+2p,x}$) 的行号为 $r = x + (2l + 1)p$ (或 $x + 2p$) 均不小于 m ;并且对任意的两列 x_1, x_2 ,当 $x_1 \neq x_2$ 时有 $r_1 \neq r_2$ 。事实上,前半部分显然成立,只证明后半部分。

(1) 当 $x_1 \neq x_2$ 且 $x_1 \in [m - \varepsilon - l_1 p, m - l_1 p - 1]$, $x_2 \in [m - \varepsilon - l_2 p, m - l_2 p - 1]$ 时,有 $r_1 = x_1 + (2l_1 + 1)p$, $r_2 = x_2 + (2l_2 + 1)p$ 。如果 $l_1 = l_2 + \Delta$ ($\Delta > 0$),那么 $r_2 - r_1 = x_2 - x_1 + 2(l_2 - l_1)p \leq m - l_2 p - 1 - (m - \varepsilon - l_1 p) - 2\Delta p = \varepsilon - \Delta p - 1 < 0$,显然成立 $r_2 \neq r_1$ 。如果 $l_1 = l_2$,由 $x_1 \neq x_2$ 即知 $r_1 \neq r_2$ 。

(2) 当 $x_1 \neq x_2$ 且 $x_1 \in [m - (l_1 + 1)p, m - \varepsilon - l_1 p - 1]$, $x_2 \in [m - (l_2 + 1)p, m - \varepsilon - l_2 p - 1]$ 时,类似于(1)的证明过程,可证得结论成立。

(3) 当 $x_1 \neq x_2$ 且 $x_1 \in [m - \varepsilon - l_1 p, m - l_1 p - 1]$, $x_2 \in [m - (l_2 + 1)p, m - \varepsilon - l_2 p - 1]$ 时,有 $r_1 = x_1 + (2l_1 + 1)p$, $r_2 = x_2 + 2(l_2 + 1)p$ 。如果 $l_1 = l_2 + \Delta$ ($\Delta > 0$),那么 $r_2 - r_1 = x_2 - x_1 + 2(l_2 - l_1)p + p \leq m - \varepsilon - l_2 p - 1 - (m - \varepsilon - l_1 p) - 2\Delta p + p = (1 - \Delta)p - 1 < 0$,显然有 $r_2 \neq r_1$ 。如果 $l_2 = l_1 + \Delta$ ($\Delta \geq 0$),那么, $r_2 - r_1 = x_2 - x_1 + 2(l_2 - l_1)p + p \geq m - (l_2 + 1)p - (m - l_1 p - 1) + 2\Delta p + p = \Delta p + 1 > 0$,显然有 $r_2 \neq r_1$ 。

再类似证得结论: 当列号 $x \in [m + lp, m + (l + 1)p - 1] (l \geq 1)$ 时, x 列中元素 $w_{x - (2l + 1)p, x}$ (或 $w_{x - 2p, x}$) 的行号均不大于 m ; 并且对任意的两列 x_1, x_2 , 当 $x_1 \neq x_2$ 时有 $r_1 \neq r_2$ 。

2) 由引理 2 知: (i) $i \in [m - \varepsilon - kp, m - kp - 1]$ 时, $\delta \in [0, 2k]$; (ii) $i \in [m - (k + 1)p, m - \varepsilon - kp - 1]$ 时, $\delta \in [0, 2k + 1]$; (iii) $j \in [m + kp, m + \xi + kp - 1]$ 时, $\tau \in [0, 2k]$; (iv) $j \in [m + \xi + kp, m + (k + 1)p - 1]$ 时, $\tau \in [0, 2k + 1]$ 。以(i)为例:

(1) $\delta \in [0, k]$ 时, $x = i + \phi \leq (m - kp - 1) + kp < m$ 。由式(3)中④②知 x 列中非零元为 $w_{x - p, x}$, $w_{x, x}, w_{x + \beta p, x} (\beta = 2l \text{ 或 } 2l + 1 (l \geq 1))$ 。由 1), $w_{x + \beta p, x}$ 行号 $x + \beta p \geq m > i$ 。故只存在 $x - p = i$ 和 $x = i$, 即 δ 取值 0 和 1。

(2) $\delta \in [k + 1, 2k]$ 时, $x = i + \phi \geq m$, 且 $x + p \geq m$ 。由式(3)中③⑤知 x 列中非零元素的结构为 $w_{x - \beta p, x}, w_{x, x}, w_{x + p, x} (\beta = 2l \text{ 或 } 2l + 1 (l \geq 1))$ 。再由 1) 知只有 $x - \beta p \leq m$, 因此, $i = x - \beta p$ 且 $\delta = \beta$ 。由 $x = i + \phi$ 得 $x \in [m + \xi + (\lambda - 1)p, m + \lambda p - 1]$ (令 $\lambda = \delta - k$), $\lambda = 1, 2, \dots$, 再由式(3), $i = x - 2\lambda p \in [m - \varepsilon - \lambda p, m - \lambda p - 1]$ 。根据题设条件, 知 $k = \lambda$, 即 $\beta = \delta = 2k$ 。因此, 由 1) 知存在唯一的列 $x = i + 2kp$ 使得 $w_{x - \beta p, x}$ 的行号为 i , 即得 $\delta = 2k$ 。综上所述, (i) 中结论得证。 □

由引理 2 和引理 3 立即得到如下引理, 它是证明定理 1 的基础。

引理 4 对形如式(3)的 W 因子, 设上半矩阵中行号记为 i , 下半矩阵中行号记为 j 。则:

(a) 对于第 i 行, 若已获得第 $i + 1$ 到 $2m - i - 1$ 列的元素, 则该行中除 $w_{i, i}$ 未知外, 其它元素均已知。具体地, 在已知元素中, 除下述元素外, 其它元素均为零: 当 $i \in [m - \varepsilon - kp, m - kp - 1]$ 时, 已获得了该行的非零元素 $w_{i, i + p}$ 和 $w_{i, i + 2kp}$; 当 $i \in [m - (k + 1)p, m - \varepsilon - kp - 1]$ 时, 已获得了该行的非零元素 $w_{i, i + p}$ 和 $w_{i, i + (2k + 1)p}$ 。

(b) 对于第 j 行, 若已获得第 $2m - j$ 到 $j - 1$ 列的元素, 则该行中除 $w_{j, j}$ 未知外, 其它元素均已知。具体地, 在已知元素中, 除下述元素外, 其它元素均为零: 当 $j \in [m + kp, m + \xi + kp - 1]$ 时, 已获得了该行的非零元素 $w_{j, j - p}$ 和 $w_{j, j - 2kp}$; 当 $j \in [m + \xi + kp, m + (k + 1)p - 1]$ 时, 已获得了该行的非零元素 $w_{j, j - p}$ 和 $w_{j, j - (2k + 1)p}$ 。 □

2.2 WZ 分解定理的证明

矩阵 W 具有式(2)的结构; 由第 m 行将矩阵 W (或 C) 分成上半矩阵和下半矩阵。

第一步: 证明 i 取值从 $m - \varepsilon - p$ 到 $m + \xi + p - 1$ 时 (即式①和式②~③的 $k = 1$ 情况) 结论正确。

1) 考查 $i = m, m + 1, \dots, m + \xi - 1$ 和 $i = m - 1, m - 2, \dots, m - \varepsilon$: 从中间第 m 行开始, 交替的考查 C 的上半矩阵和下半矩阵。①矩阵 C 的第 m 行: $a_m = w_{m, m}^2, b_{m + p} = w_{m, m}w_{m + p, m}, b_m = w_{m, m}w_{m - p, m}$; 其它元素为 0。由此算得矩阵 W 中第 m 列的元素 $w_{m, m}, w_{m + p, m}, w_{m - p, m}$ 。因此, 矩阵 W 的 m 列 $w_{m, m}^T$ 中除元素 $w_{m, m}, w_{m + p, m}, w_{m - p, m}$ 外, 其它元素均为 0, 即满足式(3)。②矩阵 C 的第 $m - 1$ 行: 由引理 4 知 $w_{m - 1, m} = 0$, 故 $a_{m - 1} = w_{m - 1, m - 1}^2, b_{m - 1} = w_{m - 1, m - 1}w_{m - p - 1, m - 1}, b_{m + p - 1} = w_{m - 1, m - 1}w_{m + p - 1, m - 1}$; 其它元素为 0。由此得矩阵 W 的 $m - 1$ 列 $w_{m - 1, m - 1}^T$ 中, 除元素 $w_{m - 1, m - 1}, w_{m + p - 1, m - 1}, w_{m - p - 1, m - 1}$ 外其它元素为 0, 即满足式(3)。③矩阵 C 的第 $m + 1$ 行: 由引理 4 知 $w_{m + 1, m} = w_{m + 1, m - 1} = 0$ 故 $a_{m + 1} = w_{m + 1, m + 1}^2, b_{m + 1} = w_{m + 1, m + 1}w_{m + 1 - p, m + 1}, b_{m + 1 + p} = w_{m + 1, m + 1}w_{m + 1 + p, m + 1}$; 其它元素为 0。从而 $w_{m + 1, m + 1}^T$ 满足式(3)。④交替的考查 C 中第 $i = m - 2, \dots, m - \varepsilon$ 和 $i = m + 2, \dots, m + \xi - 1$ 行, 得到 W 的列向量 w_i^T 满足式(3)。

2) 考查 $i = m + \xi, \dots, m + p - 1$ 和 $i = m - \varepsilon - 1, \dots, m - p$ 列。接着 1) 进行讨论, 仍交替考查 C 的上半矩阵和下半矩阵。令 $l_1 = (m - 1) - (m - \varepsilon - 1) = \varepsilon, l_2 = (m + \xi) - (m + 1) = \xi - 1$ 。当 p 为偶数时 $l_1 = l_2 + 1$, 说明 1) 中最后讨论的行位于上半矩阵; 同理, 当 p 为奇数时, 1) 中最后讨论的行位于下半矩阵。因此, 在本步讨论中: p 为偶数时, 先考查下半矩阵; 反之, 考查上半矩阵。

(a) 当 p 为偶数。①考查矩阵 C 第 $s = m + \xi$ 行 (下半矩阵): 由引理 4 知, 第 s 行中 $w_{s, s - p} \neq 0, w_{s, s}$ 未知, 其它元素均为 0。故 $a_s = w_{s, s}^2 + w_{s, s - p}^2$, 从而得到 $w_{s, s}^0 b_s = w_{s, s}w_{s - p, s} + w_{s, s - p}w_{s - p, s - p} = w_{s, s - p}w_{s - p, s - p}$, 与之前 ($s - p$ 行) 的计算公式一致。 $b_{s + p} = w_{s, s}w_{s + p, s} + w_{s, s - p}w_{s + p, s - p} = w_{s, s}w_{s + p, s} (w_{s + p, s - p} =$

0), 得到 $w_{s+p, s}$ 。已知 $w_{s-2p, s-p} \neq 0$, 所以由计算公式 $0 = w_{s, s}w_{s-2p, s} + w_{s, s-p}w_{s-2p, s-p}$ 得 $w_{s-2p, s}$; W 的 s 列中其它元素都为 0。由此得 w_s^T 列满足式(3)。②考查矩阵 C 第 $m - \varepsilon - 1$ 行(上半矩阵), 类似于 $s = m + \xi$ 行的推导过程, 得到 W 的 $m - \varepsilon - 1$ 列满足式(3)。③交替的讨论矩阵 C 的上下半矩阵中第 $m + \xi + 1, \dots, m + p - 1$ 和 $m - \varepsilon - 2, \dots, m - p$ 行, 依次得到 W 的第 $m + \xi, \dots, m + p - 1$ 和 $m - \varepsilon - 1, \dots, m - p$ 列满足式(3)。

(b) 当 p 为奇数, 与 p 为偶数的不同之处仅在于考查次序不同。先考查 C 的第 $m - \varepsilon - 1$ 行, 再考查第 $m + \xi$ 行。最终, 交替依次得到 W 的第 $m - \varepsilon - 1, \dots, m - p$ 和 $m + \xi, \dots, m + p - 1$ 列满足式(3)。

3) 考查第 $i = m + p, \dots, m + \xi + p - 1$ 和 $i = m - p - 1, \dots, m - \varepsilon - p$ 列: 接着 2) 进行讨论, 依次考查 C 的上半矩阵和下半矩阵中这些行。令 $l_3 = (m - 1) - (m - p - 1) = p, l_4 = (m + p) - (m + 1) = p - 1$ 。

当 p 为偶数和奇数时都成立 $l_3 > l_4$, 说明 2) 中最后讨论的行位于上半矩阵。因此, 本步中先考查下半矩阵的 $m + p \mid e$ 行。①由引理 4, e 行中 $w_{e, e}$ 未知, 已知 $w_{e, e-p}, w_{e, e-2p} \neq 0$, 其它元素均为 0。故, 由 $a_e = w_{e, e}^2 + w_{e, e-p}^2 + w_{e, e-2p}^2$ 得 $w_{e, e}$ 。由 $b_{e+p} = w_{e, e}w_{e+p, e} + w_{e, e-p}w_{e+p, e-p} + w_{e, e-2p}w_{e+p, e-2p} = w_{e, e}w_{e+p, e}$ ($w_{e+p, e-p} = 0, w_{e+p, e-2p} = 0$), 得到 $w_{e+p, e}$ 。 b_e 的计算公式在第 $e - p$ 行的计算中已得。此外, 已知 $w_{e-3p, e-p} = 0, w_{e-3p, e-2p} \neq 0$, 所以, 由计算公式 $w_{e, e}w_{e-3p, e} + w_{e, e-p}w_{e-3p, e-p} + w_{e, e-2p}w_{e-3p, e-2p} = 0$ 即得 $w_{e-3p, e}$ 。 W 中第 s 列的其它元素都为 0。由此得 w_e^T 列满足式(3)。②考查上半矩阵中的第 $m - p - 1$ 行, 同样得到 w_{m-p-1}^T 满足式(3)。③同理, 交替的依次得到 W 的第 $m + p, \dots, m + \xi + p - 1$ 和 $m - p - 1, \dots, m - \varepsilon - p$ 列满足式(3)。

第二步: 归纳法证明 $\forall (\theta - 1)/2 \geq k \geq 2$ 时结论成立。 p 为奇偶数的区别仅在于讨论顺序不同, 但讨论方法完全相同。因此, 以 p 为偶数为例。设式(3)中 $k \leq n_0$ 时结论成立, 则当 $k = n_0 + 1$ 时:

先考查下半矩阵中第 $i (i = m + \xi + n_0 p)$ 行: 由归纳假设和引理 4 可以判断: i 行中, $w_{i, i}$ 未知, $w_{i, i-p} \neq 0, w_{i, i-(2n_0+1)p} \neq 0$; 且当 $x \neq i, i - p, i - (2n_0 + 1)p$ 时, $w_{i, x} = 0$ 。同时, 由归纳假设: $i - p$ 列中 $w_{i-(2n_0+1)p, i-p} \neq 0, w_{i-p, i-p} \neq 0, i - (2n_0 + 1)p$ 列中 $w_{i-(2n_0+1)p, i-(2n_0+1)p} \neq 0, w_{i-2(n_0+1)p, i-(2n_0+1)p} \neq 0$; 其它元素均为 0。

由 $a_i = w_{i, i}^2 + w_{i, i-p}^2 + w_{i, i-(2n_0+1)p}^2$ 得 $w_{i, i} \neq 0$ 。 $b_{i+p} = w_{i, i}w_{i+p, i} + w_{i, i-p}w_{i+p, i-p} + w_{i, i-(2n_0+1)p}w_{i+p, i-(2n_0+1)p}$, 由归纳假设 $w_{i+p, i-p} = w_{i+p, i-(2n_0+1)p} = 0$, 故 $b_{i+p} = w_{i, i}w_{i+p, i}$, 得 $w_{i+p, i}$ 。由 $c_{i, i-2(n_0+1)p} = 0 = w_{i, i}w_{i-2(n_0+1)p, i} + w_{i, i-p}w_{i-2(n_0+1)p, i-p} + w_{i, i-(2n_0+1)p}w_{i-2(n_0+1)p, i-(2n_0+1)p} = w_{i, i}w_{i-2(n_0+1)p, i} + w_{i, i-(2n_0+1)p}w_{i-2(n_0+1)p, i-(2n_0+1)p}$ ($w_{i-2(n_0+1)p, i-p} = 0$), 即得 $w_{i-2(n_0+1)p, i}$ 。

同时, 由归纳假设, 在第 $i - p$ 行计算时已得 $b_i = w_{i-p, i-p}w_{i, i-p} + w_{i-p, i-(2n_0+1)p}w_{i, i-(2n_0+1)p} = w_{i-p, i-p}w_{i, i-p}$ ($w_{i-p, i-(2n_0+1)p} = 0$)。因此, 由第 i 行计算 b_i 时可知 $w_{i, i}w_{i-p, i} = 0$, 从而 $w_{i-p, i} = 0$ 。其它 $x (x \neq i, i + p, i - 2(n_0 + 1)p$ 和 $i - p)$ 有通式 $c_{i, x} = 0 = w_{i, i}w_{x, i} + w_{i, i-p}w_{x, i-p} + w_{i, i-(2n_0+1)p}w_{x, i-(2n_0+1)p}$ 。再由归纳假设知: 当 $x = i - (2n_0 + 1)p$ 时, $c_{i, i-(2n_0+1)p, i} = 0 = w_{i, i-p}w_{i-(2n_0+1)p, i-p} + w_{i, i-(2n_0+1)p}w_{i-(2n_0+1)p, i-(2n_0+1)p}$ 。因此, 由对称性即知 $c_{i, i-(2n_0+1)p} = w_{i, i}w_{i-(2n_0+1)p, i} = 0$, 从而 $w_{i-(2n_0+1)p, i} = 0$ 。当 $x \neq i - (2n_0 + 1)p$ 时, 有 $w_{x, i-p} = w_{x, i-2(n_0+1)p} = 0$, 从而由 $c_{i, x}$ 的计算式知 $w_{x, i} = 0$, 即 w_i^T 中的其它元素均为 0。

综上所述, 列向量 $w_i^T (i = m + \xi + n_0 p)$ 满足式(3)。

接着, 考查上半矩阵中的第 $i (i = m - \xi - n_0 p - 1)$ 行, 类似于前面的讨论, 同样得到 w_i^T 满足式(3)。最后, 交替、依次得到 W 因子中第 $m + \xi + n_0 p + 1, \dots, m + \xi + (n_0 + 1)p - 1$ 和 $m - \varepsilon - n_0 p - 2, \dots, m - \varepsilon - (n_0 + 1)p$ 列满足式(3)。由此, 归纳法证明结论正确。

第三步: 式(3)中分成以 p 列为单位的块: 式①共有 p 列, 式②和③合在一起共有 p 列, 式④和⑤也共有 p 列。因此, θ 为分得的总块数, $\theta - 1 \mid d$ 表示除去①外的总块数。式(3)中 k 取值同一个整数值时, 包含公式②③和④⑤即 2 个块。从而, $\lceil d/2 \rceil$ 表示了包含公式②③和④⑤的个数, 恰对应于式(3)中

k 的最大取值。同时,由前面的证明过程可知,当固定 k 的取值时,块的计算顺序为先 ②③再 ④⑤。综上所述,立即可得如下结论:当 θ 为奇数时, $d/2$ 为整数,说明计算式结束于 $k = \lceil d/2 \rceil$ 的式 ④⑤。当 θ 为偶数时, $(d-1)/2 = \lceil d/2 \rceil$ 为整数,计算结束于 ④⑤但此时还剩余一块(p 列),由计算顺序知该块为 $k = \lceil d/2 \rceil$ 时的 ②③。□

注:因该证明采用归纳法,故 n 不能被 p 整除时结论仍正确。同样,超出 W 因子边界的元素为 0。

2.3 WZ 分解的性质

由定理 1 的证明过程,可以归纳出 W 因子非零元的计算公式,统一由性质 1 表示。

性质 1 式(3)中,1)当 $k \geq 1$ 时,第 i ($i > 0$ 且为整数)列中非零元为 $w_{i,i}, w_{i+p,i}, w_{i-(k_0-1)p,i}$, 计算式如下:

$$a_i = w_{i,i}^2 + w_{i,i-p}^2 + w_{i,i-k_0p}^2, b_{i+p} = w_{i,i} w_{i+p,i}, c_{i-(k_0+1)p} = 0 = w_{i,i} w_{i-(k_0+1)p,i} + w_{i,i-k_0p} w_{i-(k_0+1)p,i-k_0p} \quad (4)$$

其中,1和 k_0 为具相同符号的整数。1 表示 ± 1 , 符号由 k_0 确定; k_0 的表达式由式(3)中各种情况确定。

$$k_0 = \begin{cases} -(2n_0+1), & i = m - \varepsilon - n_0p, \dots, m - n_0p - 1 \\ -2n_0, & i = m - n_0p, \dots, m - \varepsilon - (n_0-1)p - 1 \\ 2n_0, & i = m + \xi + (n_0-1)p, \dots, m + n_0p - 1 \\ 2n_0+1, & i = m + n_0p, \dots, m + \xi + n_0p - 1 \end{cases} \quad n_0 \geq 1$$

2)当 $i \in [m - \varepsilon, m + \xi - 1]$ 时,计算式为 $a_i = w_{i,i}^2, b_{i+p} = w_{i,i} w_{i+p,i}, b_i = w_{i,i} w_{i-p,i}$ 。□

式(3)为 W 因子的列向量表示法;由引理 3 即得其行向量表示,如定理 2。

$$w_i = \begin{cases} (\dots, w_{m,m}, \dots), i = m - \varepsilon, \dots, m, \dots, m + \xi - 1 \\ (\dots, w_{i,i}, \dots, w_{i,i+p}, \dots), i = m - p, \dots, m - \varepsilon - 1 \\ (\dots, w_{i,i-p}, \dots, w_{i,i}, \dots), i = m + \xi, \dots, m + p - 1 \\ (\alpha.1) (\dots, w_{i,i}, \dots, w_{i,i+p}, \dots, w_{i,i+2p}, \dots), i = m - \varepsilon - kp, \dots, m - kp - 1 \\ (\alpha.2) (\dots, w_{i,i-2p}, \dots, w_{i,i-p}, \dots, w_{i,i}, \dots), i = m + kp, \dots, m + \xi + kp - 1 \\ (\beta.1) (\dots, w_{i,i}, \dots, w_{i,i+p}, \dots, w_{i,i+(2k+1)p}, \dots), i = m - (k+1)p, \dots, m - \varepsilon - kp - 1 \\ (\beta.2) (\dots, w_{i,i-(2k+1)p}, \dots, w_{i,i-p}, \dots, w_{i,i}, \dots), i = m + \xi + kp, \dots, m + (k+1)p - 1 \end{cases} \quad (5)$$

$k = 1, 2, \dots, \lceil (\theta-1)/2 \rceil$

定理 2 设 p -三对角对称矩阵 C , 其阶数 n 为偶数(设 $n = 2m - 2$)且可以被 p 整除。那么,式(5)给出 w_i 的结构。当 k 固定时,式(α) (包含(α.1)和(α.2)) 必须在式(β)之前计算(包含(β.1)和(β.2))。当 n/p 为偶数时,结束于(β)式;当 n/p 为奇数时,结束于(α)式。□

定理 1 给出 n 为偶数时的情况,当 n 为奇数时,由定理 2 和式(4)、(5) 易得如下推论:

推论 1 设对称 p -三对角矩阵 C 的阶数 n 为奇数。如果 C 中去掉第 n 行和第 n 列后的 $n-1$ 阶矩阵 C_{n-1} 存在 WZ 分解式,那么, C 存在 WZ 分解式。此外,式(3) 仍然成立,并且其中 $m = (n+1)/2$ 。□

性质 2 式(3)中 W 因子的第 i 列向量为 w_i^T , 且令 $t = \lceil (\theta-1)/2 \rceil, r = \lfloor (\theta-1)/2 \rfloor$ 。那么,

(1)当 θ 为偶数时,对于 $i \in [1, \xi]$ 和 $i \in [n - \varepsilon + 1, n]$, 成立 $w_i^T = (\dots, w_{i,i}, \dots)^T$; 对于 $i \in [\xi + 1, p]$ 和 $i \in [n - p + 1, n - \varepsilon]$ 时, 成立

$$w_i^T = \begin{cases} (\dots, w_{i,i}, \dots, w_{i+(2r+1)p,i}, \dots)^T, i \in [\xi + 1, p] \\ (\dots, w_{i-(2r+1)p,i}, \dots, w_{i,i}, \dots)^T, i \in [n - p + 1, n - \varepsilon] \end{cases}$$

(2)当 θ 为奇数时,对于 $i \in [1, \varepsilon]$ 和 $i \in [n - \xi + 1, n]$, 成立 $w_i^T = (\dots, w_{i,i}, \dots)^T$; 对于 $i \in [\varepsilon + 1, p]$ 和 $i \in [n - p + 1, n - \xi]$ 时, 成立

$$w_i^T = \begin{cases} (\dots, w_{i,i}, \dots, w_{i+2p,i}, \dots)^T, i \in [\varepsilon + 1, p] \\ (\dots, w_{i-2p,i}, \dots, w_{i,i}, \dots)^T, i \in [n - p + 1, n - \xi] \end{cases}$$

证明: 仅对结论的前半部分证明, 后半部分证明类似。只要证明第 i 列中除 $w_{i,i}$ 外, 其它可能非零元的行下标满足大于 n 或小于 1。分 θ 的奇偶性进行讨论。

(1) θ 为偶数。由式(3): $i \in [1, \xi]$ 时, 由 $i - p \leq \xi - p < 1$ 和 $i + 2p \geq 2(\theta - 1)/2p + 1 = 1 + n$ 知 $w_{i-p,i}$ 和 $w_{i+2p,i}$ 的列号超出了 W 因子边界, 从而 $w_{i-p,i} = w_{i+2p,i} = 0$ 。同理, 当 $i \in [n - \varepsilon + 1, n]$ 时, 有 $i + p > n, i - 2p < 1$ 。

(2) θ 为奇数。由式(3): 当 $i \in [1, \varepsilon]$ 时, 有 $i - p \leq \varepsilon - p < 1, i + (2r + 1)p \geq 1 + (2(\theta - 1)/2 + 1)p > n$; 当 $i \in [n - \xi + 1, n]$ 时, 有 $i + p > n, i - (2r + 1)p < 1$ 。 □

由性质 2、引理 3 和式(5), 立即可得性质 3。

性质 3 式(3)所示 W 因子, 除去最前面 p 列和最后面的 p 列外, 每列中非零元个数为 3; 式(5)所示 W 因子, 当 $k \geq 1$ 时, 各行中非零元素个数均为 3。

3 实对称正定 p -三对角矩阵的 WZ 分解

定理 3 实 p -三对角矩阵 C , 如果它是对称正定的, 那么, 矩阵 C 的 WZ 分解式的 W 因子为实矩阵且对角线元素均可以为正实数。

证明 矩阵 C 为对称正定矩阵等价于主子式 > 0 。以 p 为偶数为例, 有 $\varepsilon = \xi$ 。

(1) 设 C 的 i 行到 j 行及 i 列到 j 列组成子矩阵为 $C_{i \rightarrow j}$, 其行列式为 $D_{i \rightarrow j}$ 。易证明: 当 $k = 1, 2, \dots, m - 1$ 时成立: (a) $D_{m-k \rightarrow m+k} = w_{m-k, m-k}^2 w_{m-k+1, m-k+1}^2 \cdots w_{m+k, m+k}^2$; (b) $D_{m-k-1 \rightarrow m+k} = w_{m-k-1, m-k-1}^2 w_{m-k, m-k}^2 \cdots w_{m+k, m+k}^2$ 。

先证(a): 对 $C_{m-k \rightarrow m+k}$ 中 k 用归纳法。当 $k = 1$ 时, 由 2.2 节中证明过程, 令 $W_{m-1 \rightarrow m} = \text{diag}(w_{m-1, m-1}, w_{m, m})$, 则有 $C_{m-1 \rightarrow m} = W_{m-1 \rightarrow m} W_{m-1 \rightarrow m}^T$, 从而 $D_{m-1 \rightarrow m} = w_{m-1, m-1}^2 w_{m, m}^2$ 。令 $W_{m-1 \rightarrow m+1} = \text{diag}(w_{m-1, m-1}, w_{m, m}, w_{m+1, m+1})$, 则有 $C_{m-1 \rightarrow m+1} = W_{m-1 \rightarrow m+1} W_{m-1 \rightarrow m+1}^T$, 从而 $D_{m-1 \rightarrow m+1} = w_{m-1, m-1}^2 w_{m, m}^2 w_{m+1, m+1}^2$ 。

当 $k = l (< \varepsilon - 1)$ 时结论成立, 则 $k = l + 1 (< \varepsilon)$ 时, 令 $W_{m-l+1 \rightarrow m+l-1} = \text{diag}(w_{m-l-1, m-l-1}, w_{m-l, m-l}, w_{m+l-1, m+l-1})$, 有

$$C_{m-l-1 \rightarrow m+l+1} = W_{m-l+1 \rightarrow m+l-1} W_{m-l+1 \rightarrow m+l-1}^T D_{m-l-1 \rightarrow m+l+1} = w_{m-l-1, m-l-1}^2 D_{m-l \rightarrow m+l} w_{m+l+1, m+l+1}^2$$

当 $k = \varepsilon$ 时, $D_{m-\varepsilon+1 \rightarrow m+\varepsilon-1}$ 已知, 由式(5)知:

$$C_{m-\varepsilon \rightarrow m+\varepsilon} = \begin{bmatrix} w_{m-\varepsilon, m-\varepsilon} & & & \\ & W_{m-l \rightarrow m+l} & & \\ & & w_{m+\varepsilon, m+\varepsilon} & \\ w_{m+\varepsilon, m-\varepsilon} & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{m-\varepsilon, m-\varepsilon} & & & \\ & W_{m-l \rightarrow m+l} & & \\ & & w_{m+\varepsilon, m+\varepsilon} & \\ w_{m+\varepsilon, m-\varepsilon} & & & w_{m+\varepsilon, m+\varepsilon} \end{bmatrix}^T,$$

$$D_{m-\varepsilon \rightarrow m+\varepsilon} = w_{m-\varepsilon, m-\varepsilon}^2 w_{m+\varepsilon, m+\varepsilon}^2 D_{m-\varepsilon+1 \rightarrow m+\varepsilon-1}$$

当 k 依次取值 $\varepsilon + 1, \varepsilon + 2, \dots, p - 1$ 时结论成立: 令 $W_{m-k \rightarrow m+k} =$

$$\begin{bmatrix} w_{m-k, m-k} & (\dots, w_{m-k+p, m-k+p}, \dots) \\ & W_{m-k+1 \rightarrow m+k-1} \\ (\dots, w_{m+k-p, m+k-p}, \dots) & w_{m+k, m+k} \end{bmatrix}, \text{有}$$

$$C_{m-k \rightarrow m+k} = W_{m-k \rightarrow m+k} W_{m-k \rightarrow m+k}^T, D_{m-k \rightarrow m+k} = w_{m-k, m-k}^2 w_{m+k, m+k}^2 D_{m-k+1 \rightarrow m+k-1}$$

$$\text{当 } k = p \text{ 时, 令 } W_{m-p \rightarrow m+p} = \begin{bmatrix} w_{m-p, m-p} & (\dots, w_{m-p, m}, \dots) \\ & W_{m-p+1 \rightarrow m+p-1} \\ w_{m+p, m-p} & (\dots, w_{m+p, m}, \dots) & w_{m+p, m+p} \end{bmatrix}, \text{有}$$

$$C_{m-p \rightarrow m+p} = W_{m-p \rightarrow m+p} W_{m-p \rightarrow m+p}^T, D_{m-p \rightarrow m+p} = w_{m-p, m-p}^2 w_{m+p, m+p}^2 D_{m-p+1 \rightarrow m+p-1}$$

当 $k = p + 1, \dots, p + \varepsilon - 1$ 时, 令 $W_{m-k \rightarrow m+k} =$

$$\begin{bmatrix} w_{m-k, m-k} & (\dots, w_{m-k, m-1}, \dots, w_{m-k, m+p-1}, \dots) \\ & W_{m-k+1 \rightarrow m+k-1} \\ (\dots, w_{m-k, m-p+1}, \dots, w_{m+k, m+1}, \dots) & w_{m+k, m+k} \end{bmatrix}, \text{有}$$

$$C_{m-k}^{-\rightarrow m+k} = W_{m-k}^{-\rightarrow m+k} W_{m-k}^{-\rightarrow m+k T}, D_{m-k}^{-\rightarrow m+k} = w_{m-k, m-k}^2 w_{m+k, m+k}^2 D_{m-k-1}^{-\rightarrow m+k+1} \quad (6)$$

当 $k = p + \epsilon$ 时, 令 $W_{m-x}^{-\rightarrow m+x} = \begin{bmatrix} w_{m-x, m-x} & & & \\ & \dots & & \\ & & w_{m-x, m-x+p} & & \\ & & & \dots & \\ & & & & w_{m-x, m-x+2p} & & \\ & & & & & & \dots \end{bmatrix}$, 有

$$C_{m-x}^{-\rightarrow m+x} = W_{m-x}^{-\rightarrow m+x} W_{m-x}^{-\rightarrow m+x T}, D_{m-x}^{-\rightarrow m+x} = w_{m+x, m+x}^2 w_{m-x, m-x}^2 D_{m-x-1}^{-\rightarrow m+x-1} \quad (7)$$

当 $k > x$ 时, 归纳假设: $k = k_0$ 时结论成立, 即 $D_{m-k_0}^{-\rightarrow m+k_0} = w_{m-k_0, m-k_0}^2 w_{m-k_0+1, m-k_0+1}^2 \dots w_{m, m}^2 \dots w_{m+k_0, m+k_0}^2$ 。那么, 当 $k = k_0 + 1$ 时, 由上述分析和式(5)知, $C_{m-k}^{-\rightarrow m+k} = W_{m-k}^{-\rightarrow m+k} W_{m-k}^{-\rightarrow m+k T}$, 其中 $W_{m-k}^{-\rightarrow m+k}$ 与 $W_{m-k_0}^{-\rightarrow m+k_0}$ 的关系式结构类似式(6)或式(7)。从而由归纳假设知 $D_{m-k}^{-\rightarrow m+k} = w_{m-k, m-k}^2 w_{m+k, m+k}^2 D_{m-k_0}^{-\rightarrow m+k_0}$ 。即(a)得证。

对(b): 由式(2)知第 $m-k-1$ 列中非零元的行下标范围为 $[1, m-k-1]$ 和 $[m+k+1, n]$, 因此 $w_{m-k-1, m+k} = 0$ 。再由式(5)知 $C_{m-k-1}^{-\rightarrow m+k} = \begin{bmatrix} w_{m-k-1, m-k-1} & & * \\ & & W_{m-k}^{-\rightarrow m+k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{m-k-1, m-k-1} & 0 \\ & *^T \\ & & W_{m-k}^{-\rightarrow m+k T} \end{bmatrix}$, $D_{m-k-1}^{-\rightarrow m+k} = w_{m-k-1, m-k-1}^2 D_{m-k}^{-\rightarrow m+k}$ 。其中, * 表示任意列向量。而由(a)已证得 $D_{m-k}^{-\rightarrow m+k}$ 的表达式, 从而(b)正确。

(2) 由(1)结论得 $w_{m-k, m-k}^2 = D_{m-k}^{-\rightarrow m+k-1} / D_{m-k+1}^{-\rightarrow m+k-1}$, $w_{m+k, m+k}^2 = D_{m-k}^{-\rightarrow m+k} / D_{m-k}^{-\rightarrow m+k-1}$ ($k = 1, \dots, m-1$)。即得 W 因子对角线元素的计算式。由于矩阵 C 对称正定, 所以上式中每个主子式 D_{i-j} 为正实数, 从而每个 $w_{m-k, m-k}^2$ 和 $w_{m+k, m+k}^2$ 为正实数, 且可以选择每个 $w_{m-k, m-k}$ 和 $w_{m+k, m+k}$ 为正实数。

(3) 由式(4)知其它非零元素计算均是实数间的运算, 故 W 因子中每个非零元素都是实数。□
 由定理3知, W 因子的正实数对角元素被 C 的各子式的行列式惟一确定, 因此可得如下定理:
 定理4 实对称正定 p -三对角矩阵 C , 当对角线上元素均为正实数时, WZ 分解式被 C 惟一确定。

4 总结

针对对称 p -三对角矩阵, 提出并证明了该类典型结构矩阵的 WZ 分解及其性质。针对对称正定 p -三对角矩阵, 证明了 WZ 分解中 W 因子的元素均为实数, 从而保证 WZ 分解在矩阵求解的算法设计中的有效性。此外, 还证明了 WZ 分解式的惟一性。

参考文献:

[1] 骆志刚. 典型结构大型线性方程组的分布式并行算法研究[D]. 长沙: 国防科技大学, 2001.
 [2] Evans D J. Implicit Matrix Elimination Schemes[J]. International Journal of Computer Mathematics, 1993, 48: 229- 237.
 [3] Chandra S R S. Existence and Uniqueness of WZ Factorization[J]. Parallel Computing, 1997, 23: 1129- 1139.
 [4] Bylina B. Solving Linear Systems with Vectorized WZ Factorization[J]. Annales UMCS Informatica, 2003, 1(1): 5- 13.
 [5] Chawla M M, Khazal R R. A New WZ Factorization for Parallel Solution of Tridiagonal Systems[J]. International Journal of Computer Mathematics, 2003, 80(1): 123- 131.
 [6] Evans D J. The Cholesky Q. I. F. Algorithm for Solving Symmetric Linear Systems[J]. International Journal of Computer Mathematics, 1999, 72: 283- 288.
 [7] Chandra S R S, Sarita. Parallel Solution of Large Symmetric Tridiagonal Linear Systems[J]. Parallel Computing, 2008, 34: 177- 197.