Шаблоны разреженности матриц

Закс Роберт
ИВМ РАН имени Г.И. Марчука,
ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова

Осень 2024

1 Постановка задачи

Пусть при решении некоторой задачи известно, что матрица, получаемая при решении этой задачи, имеет нулевые элементы в заранее известных позициях. Если число ненулевых элементов матрицы достаточно мало, то матрицу называют разреженной, для хранения такой матрицы нужно гораздо меньше места, ее легко умножать на вектор и решать с ней системы.

Зададимся следующими вопросами:

- Если матрица A разрежена, то насколько разреженной будет матрица A^{-1}?
- Если вектор b ненулевой, то насколько много будет ненулевых элементов у решения линейной системы $Ax = b$?

В дальнейшем будем работать с квадратными матрицами (в общем случае над комплексным полем) порядка n. Обозначим $\mathcal{N} = \overline{1, n}$.

Определение. Для матрицы $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ определим множество позиций ненулевых элементов $\mathrm{nz}(A) = \{(i, j) : a_{ij} \neq 0\} \subseteq \mathcal{N}^2$.

Определение. Множество $T \subseteq \mathcal{N}^2$ будем называть шаблоном разреженности матрицы, а через $M_T = \{A \in \mathbb{C}^{n\times n} : \mathrm{nz}(A) \subseteq T\}$ обозначим множество матриц, удовлетворяющих данному шаблону разреженности.

Как было сказано ранее, мы считаем, что шаблон разреженности T нам известен. Тогда для наших целей необходимо ввести следующее определение:

Определение. Для отображения f из $F \subseteq \mathbb{C}^{n\times n}$ в $\mathbb{C}^{m\times m}$ в случае $F \cap M_T \neq \varnothing$ определим $T(f) = \bigcup\limits_{A\in F\cap M_T} \mathrm{nz}\left(f(A)\right)$.

Теперь если $f : A \to A^{-1}$, то F — множество невырожденных матриц и наша первая задача может быть переформулирована так: по заданному T определить $T(f) = T(A^{-1})$.

К сожалению, ответить на поставленный вопрос в рамках семинара не получится, поэтому мы ограничимся верхними оценками для шаблонов разреженности LU-разложения и обратной матрицы, обсудим когда эти оценки достигаются, а также рассмотрим один из простейших случаев при котором возможно уменьшить число ненулевых элементов в шаблоне разложения Холецкого.

Определение. Шаблон разреженности T будем называть структурно невырожденным, если $F \cap M_T \neq \varnothing$, где F - множество невырожденных матриц.

2 Приводимые и неприводимые матрицы

Для решения постановленной задачи воспользуемся уже известным нам понятием приводимых и неприводимых матриц.

Определение. Будем говорить, что матрица $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ является приводимой, если найдется матрица перестановки P, что $P^T AP = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ O & A_{22} \end{bmatrix}$, где A_{11}, A_{22} — квадратные матрицы порядка k и $(n-k)$ соответственно. В противном случае матрицу A будем называть неприводимой.

Рассмотрим произвольную матрицу A. Если она приводима, то с помощью одновременной перестановки P_0 приведем ее к виду:
$P_0^T AP_0 = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ O & A_{22} \end{bmatrix}$. Если теперь какая-то из матриц A_{11}, A_{22} приводима, то переставим аналогичным образом строки и столбцы соответствующего блока, превратив его в квазиверхнетреугольную матрицу, а остальные строки и столбцы исходной матрицы оставим без изменений. Повторяя описанную процедуру мы приведем матрицу A к квазиверхнетреугольному виду, все ненулевые диагональные блоки которого неприводимы, т.е. найдется такая перестановка P, что

$$P^T AP = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1,b} \\ O & A_{22} & \dots & A_{2,b} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ O & O & \dots & A_{b,b} \end{bmatrix},$$

где $A_{i,i}$ либо равны нулю, либо неприводима.
Отметим без доказательства следующую теорему:

Теорема (Bruadi, Ryser 1991)**.** *Для невырожденной матрицы A элементы на диагонали в полученной квазиверхнетреугольной форме определены однозначно с точностью до перестановки блоков.*

Пусть A — невырожденная матрица, приводимая к квазиверхнетреугольному виду с двумя неприводимыми диагональными блоками, т.е. $P^TAP = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ O & A_{22} \end{bmatrix}$, где A_{11}, A_{22} — неприводимы. Тогда поскольку $A^{-1} = P(P^TAP)^{-1}P^T$ и $Ax = b \Leftrightarrow P^TAPx = P^TbP$, то из следующих тождеств

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ O & A_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1}A_{12}A_{22}^{-1} \\ O & A_{22}^{-1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ O & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} A_{22}x_2 = b_2 \\ A_{11}x_1 = b_1 - A_{12}x_2 \end{cases}$$

следует, что для ответа на наши вопросы нам достаточно понять насколько разрежена обратная к неприводимой матрице и насколько разрежены решения систем с неприводимой матрицей.

Упражнение. Вывести аналогичные тождества для квазиверхнетреугольной матрицы с большим числом диагональных блоков. Подсказка: использовать блочные элементарные преобразования.

3 Графы разреженности матриц

Для дальнейших рассуждений нам понадобиться использовать графы.

Определение. Пусть $G = (V, E)$ и $V \subseteq \mathcal{N}$. Тогда введем следующие обозначения:

1. $i \xrightarrow{G} j$, если $(i, j) \in E$;

2. $i \overset{G}{\Rightarrow} j$, если существует путь (простая цепь) в G из i в j, т.е.

$$\exists \{k_l\}_{l=0}^{p} \subseteq V : i = k_0, k_p = j, (k_l, k_{l+1}) \in E, k_l \overset{l \neq t}{\neq} k_t,$$

   причем будем считать, что $i, j : (i, j) \in E$ удовлетворяют этому определению с $p = 0$ или $p = 1$;

3. $i \underset{\min}{\overset{G}{\Longrightarrow}} j$, если существует путь (простая цепь) из вершин $\{k_l\}_{l=0}^{p}$ из i в j, вершины которого удовлетворяют соотношениям: $k_l < \min\{i, j\}$, $0 < l < p$, такой путь будем называть путем по меньшим вершинам.

Замечание. Отметим, что в русскоязычной литературе по теории графов путем называется последовательность вершин графа, соединенных дугами. Простая цепь — путь, в котором все вершины различны, причем петли образуют простую цепь, поскольку состоят только из одной вершины. В английской литературе чаще всего простую цепь называют path, реже — simple path, а путь называют walk. Мы же в дальнейшем под путем мы будем понимать простую цепь, а именно определение, введенное выше.

Определение. Граф $G(A) = (V(A), E(A))$ будем называть графом матрицы A, если $V(A) = \mathcal{N}$ и $E(A) = \mathrm{nz}(A)$.

Определение. Граф $G_T(f) = (V_T(f), E_T(f))$ будем называть графом шаблона разреженности $T(f)$, если $V_T(f) = \mathcal{N}$ и $E_T(f) = T(f)$.

С учетом введенных определений, сформулируем следующую теорему:

Теорема (Теорема о графе неприводимой матрицы). *Матрица A неприводима тогда и только тогда, когда граф $G(A)$ является сильно связным, то есть $\forall i, j \in V(A)\ i \xRightarrow{G(A)} j$.*

> *Доказательство:*
> Заметим, что для любой матрицы перестановки P графы $G(A)$ и $G(P^TAP)$ изоморфны, поскольку это соответствует простой перенумировке вершин. Значит, сильная связность графа $G(A)$ равносильна сильной связности графа $G(P^TAP)$.
> Пусть граф сильно связен, но матрица A приводима. Тогда в графе $G(P^TAP)$ из вершин с номерами $\overline{k+1,n}$ дуги ведут только в вершины с номерами $\overline{k+1,n}$, значит и путей из вершин с номерами $\overline{k+1,n}$ в вершины с номерами $\overline{1,k}$ нет, что противоречит сильной связности графа, откуда следует неприводимость матрицы A.
> Если $G(A)$ не сильно связен, то найдется вершина $i \in V$, из которой нельзя попасть во все остальные. Пусть $\overline{I} = \{j : i \xRightarrow{G(A)} j\}$, $I = V \setminus \overline{I}$. Тогда, из сказанного выше, множества I, $\overline{I}$ не пусты и если $k = |I|$ и перестановка P переводит вершины из I в $\overline{1,k}$, то в графе $G(P^TAP)$ из вершин $\overline{k+1,n}$ не идут дуги в вершины $\overline{1,k}$ (иначе были бы дуги из вершин $\overline{I}$ в вершины I), значит, $(P^TAP)_{pq} = 0$, $p \in \overline{k+1,n}, q \in \overline{1,k}$, что означает приводимость матрицы A. Т.о. у неприводимой матрицы A граф $G(A)$ не может быть не сильно связным.

Замечание. Из доказанного следует, что упомянутая ранее квазиверхнетреугольная матрица соответствует выделению в произвольном графе сильно связных компонент.

Определение. Шаблон разреженности T будем называть структурно неприводимым, если $F \cap M_T \neq \varnothing$, где F - множество структурно неприводимых матриц.

Следствие. *Шаблон разреженности T структурно неприводим тогда и только тогда, когда $G_T(A)$ сильно связен.*

Доказательство:
Доказательство следует из доказанной теоремы о графе неприводимой матрицы и того факта, что для $A \in M_T$ граф $G(A)$ является остовным подграфом (множества вершин совпадают) графа $G_T(A)$.

4 Метод Гаусса и графы разреженности

Утверждение. Для матрицы A применимы k шагов метода Гаусса тогда и только тогда, когда все главные угловые миноры матрицы A порядка не превосходящего k отличны от нуля.

Обозначение. Пусть к матрице A применимы s шагов метода Гаусса. При $k \leqslant s$ обозначим через $A^{(k)}$ — матрицу, полученную из A, на k-м шаге метода Гаусса и $A^{(0)} = A$. Обозначим также $G^{(k)}(A) = G(A^{(k)}_{k+1:n,k+1:n}) = (V^{(k)}(A), E^{(k)}(A))$ — подграф $G(A^k)$, соответствующий главной подматрице, где $V^{(k)} = \overline{k+1, n}$.

Утверждение (О последовательности графов $G^{(k)}$)**.**
Пусть к матрице A применимы s шагов метода Гаусса. При $1 \leqslant k \leqslant s$ обозначим

$$E^{(k-1)\to k} = E^{(k-1)} \setminus \{(p,l) : k \in \{p,l\}\}$$

и

$$D^{(k)} = \{(i,j) : (i,j) \notin E^{(k-1)}, (i,k), (k,j) \in E^{(k-1)}\}.$$

Тогда $V^{(k)} = V^{(k-1)} \setminus \{k\}$ и

$$E^{(k-1)\to k} \cup D^{(k)} \setminus \{(i,j) : (i,j) \in E^{(k-1)}, (i,k), (k,j) \in E^{(k-1)}\} \subseteq E^{(k)} \subseteq \\ \subseteq E^{(k-1)\to k} \cup D^{(k)}.$$

Доказательство:
Ясно, что удаление части дуг происходит за счет удаления вершины k, а поскольку при $i,j > k$ $a^{(k)}_{ij} = a^{(k-1)}_{ij} - \dfrac{a^{(k-1)}_{ik}}{a^{(k-1)}_{kk}} a^{(k-1)}_{kj}$, то при $(i,j) \notin E^{(k-1)}$ добавление новой дуги произойдет только при $(i,k),(k,j) \in E^{(k-1)}$; если же $(i,j) \in E^{(k-1)}$, то дуга может исчезнуть только при $(i,k),(k,j) \in E^{(k-1)}$ в случае обнуления $a^{(k)}_{ij}$.

Утверждение (Связь графов $G(A)$ и $G^{(k)}(A)$)**.** Пусть к A применимы s шагов метода Гаусса. Тогда при $k < i,j$ и $k \leqslant s$ из $i \xrightarrow{G^{(k)}} j$ следует $i \xRightarrow[\min]{G(A)} j$.

Доказательство:
Доказательство утверждения проведем индукцией по k.
При $k = 0$ утверждение очевидно, поскольку $G^{(0)} = G(A)$.
Если же утверждение доказано при шаге не превосходящем $k - 1 \geqslant 0$, то осуществим переход к шагу k следующим образом: если $i, j > k$ и $i \xrightarrow{G^{(k)}} j$, т.е. $(i, j) \in E^{(k)}$, то согласно соотношению для $E^{(k)}$ либо $(i, j) \in E^{(k-1)\to k} \subset E^{(k-1)}$ и по предположению $i \overset{G(A)}{\underset{\min}{\Longrightarrow}} j$, либо $(i, k), (k, j) \in E^{(k-1)}$ и по предположению $i \overset{G(A)}{\underset{\min}{\Longrightarrow}} k$, $k \overset{G(A)}{\underset{\min}{\Longrightarrow}} j$, тогда, после объединения путей и выкидывания циклов, с учетом $i, j > k$, получим $i \overset{G(A)}{\underset{\min}{\Longrightarrow}} j$, что заканчивает доказательство утверждения.

Следствие. *Пусть к A применимы s шагов метода Гаусса. Тогда при $k < i, j$ и $k \leqslant s$ из $i \overset{G(A)}{\underset{\min}{\not\Longrightarrow}} j$ следует $i \overset{G^{(k)}}{\not\longrightarrow} j$.*

Определение. Матрицу A будем называть "плохой" на s шагах, если к ней применимы s шагов метода Гаусса и на каждом шагу выполнено равенство: $E^{(k)} = E^{(k-1)\to k} \cup D^{(k)}$.

Замечание. Из определения "плохой" на s шагах матрицы следует, что для всех матриц B, к которым применимы s шагов метода Гаусса, и для которых выполнено вложение $\mathrm{nz}(B) \subseteq \mathrm{nz}(A)$, графы $G(B)$, $G^{(k)}(B)$ будут остовными подграфами графов $G(A)$, $G^{(k)}(A)$ соответственно.

Утверждение. Рассмотрим шаблон разреженности T, в котором существует матрица A, к которой применимы s шагов метода Гаусса. Пусть $k < i, j$ и $k \leqslant s$, $(i, j), (i, k), (k, j) \in E^{(k-1)}(A)$.
Тогда если хотя бы одна пара индексов $(i, j), (i, k), (k, j), (k, k)$ принадлежит T, то для любого $\varepsilon > 0$ найдется матрица $B \in M_T$, что $\|A - B\|_C < \varepsilon$ и $G^{(m)}(A) \subseteq G^{(m)}(B)$, $0 \leqslant m \leqslant s$, причем $i \xrightarrow{G^{(k)}(B)} j$.

Доказательство:
Если $i \xrightarrow{G^{(k)}(A)} j$, то возьмем $B = A$, поэтому будем считать, что $a_{ij}^{(k)} = 0$.
Обозначим через Δ_m главный угловой минор матрицы A порядка m. По условию $\Delta_m \neq 0$ при $1 \leqslant m \leqslant s$.

Рассмотрим матрицу $S_{i,j}(A) = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} & a_{1j} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} & a_{kj} \\ a_{i1} & \dots & a_{ik} & a_{ij} \end{bmatrix}$. Обозначим через $S_{i,j}^{(m)}(A)$, матрицу полученную на m-м шаге метода Гаусса, примененного к матрице $S_{i,j}(A)$. Ясно, что эта матрица совпадает с подматрицей матрицы $A^{(m)}$, расположенной в строках с номерами $1, \dots, k, i$ и столбцах с номерами $1, \dots, k, j$. Значит, на k-м шаге матрица $S_{i,j}$ примет вид:

$$S_{i,j}^{(k)}(A) = \begin{bmatrix} \Delta_1 & a_{12}^{(k)} & \dots & a_{1k}^{(k)} & a_{1j}^{(k)} \\ 0 & \frac{\Delta_2}{\Delta_1} & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{k-1,k}^{(k)} & a_{k-1,j}^{(k)} \\ 0 & \dots & 0 & \frac{\Delta_k}{\Delta_{k-1}} & a_{kj}^{(k)} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & a_{ij}^{(k)} \end{bmatrix}$$

и т.к. определитель матрицы не меняется при элементарных преобразованиях строк, то $a_{ij}^{(k)} = \dfrac{\det S_{i,j}(A)}{\Delta_k}$.
Т.к. $(i,j),(i,k),(k,j) \in E^{(k-1)}(A)$ и $\Delta_k \neq 0$, то, применяя доказанную формулу для $a_{ik}^{(k-1)}$, $a_{kj}^{(k-1)}$, $a_{ij}^{(k-1)}$ поймем, что алгебраические дополнения элементов a_{kj}, a_{ik}, a_{kk} в матрице $S_{ij}(A)$ не равны нулю, заметим также, что алгебраическим дополнением к a_{ij} в S_{ij} является Δ_k, который также отличен от нуля.

Рассмотрим определитель Δ произвольной матрицы, выберем произвольный элемент матрицы, который обозначим через x, и разложим определитель по строке или столбцу, содержащему этот элемент. Тогда станет ясно, что $\Delta(x) = ax + b$, где a — алгебраическое дополнение нашего элемента. В случае $a = 0$ определитель не зависит от значения x, в частности, если $\Delta \neq 0$, то при любом x он не обратиться в ноль. Если же $a \neq 0$, то существует единственное значение x, при котором $\Delta(x) = 0$.

Пусть (p,q) — пара индексов из $(i,j),(i,k),(k,j),(k,k)$, принадлежащая шаблону T. Ясно, что в силу выписанной формулы для элементов матрицы на некотором шаге метода Гаусса, при изменении значения a_{pq} зануление элемента, который ранее в матрице $A^{(m)}$ был ненулевым, возможно только при конечном числе значений. Аналогично только при конечном числе значений a_{pq} возможно зануление какого-нибудь определителя Δ_m. С другой стороны за счет того, что алгебраическое дополнение элемента a_{pq} в матрице $S_{ij}(A)$ отлично от нуля и $a_{ij}^{(k)} = 0$, то любой выбор значения a_{pq}, отличного от упомянутого ранее конечного набора значений, даст требуемую матрицу B, полученную из A, изменением значения a_{pq}.

Замечание. Условие того, что хотя бы одна пара индексов $(i,j),(i,k),(k,j),(k,k)$ принадлежит T, существенно.

Доказательство:
Положим $k = 2$ и предположим $(i,j),(i,2),(2,j),(2,2) \notin T$. Тогда по до-

казанной формуле имеем: $a_{ij}^{(2)} = \dfrac{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{1j} \\ a_{21} & a_{22} & a_{1j} \\ a_{i1} & a_{i2} & a_{ij} \end{vmatrix}}{\Delta_2} = \dfrac{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{1j} \\ a_{21} & 0 & 0 \\ a_{i1} & 0 & 0 \end{vmatrix}}{\Delta_2} = 0$ вне зависимости от выбора других элементов. Осталось заметить, что матрицы A, удовлетворяющие условию теоремы в других отношениях существуют:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 4 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -2 \\ 0 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 2 & 2 & 3 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Следствие. *Не во всяком шаблоне разреженности T, в котором существует матрица A, к которой применимы s шагов метода Гаусса, существует "плохая" на s шагах матрица. Однако если $(k, k) \in T, k \leqslant s$, то "плохая" на s шагах матрица есть в любой окрестности матрицы $A \in M_T$, к которой применимы s шагов метода Гаусса.*

Из только что сказанного следует, что анализ поведения $G_T^{(k)}(A)$ является достаточно сложной задачей, поэтому в дальнейшем мы будем работать с его надграфом:

Определение. Обозначим через $\overline{G}_T^{(k)} = (V^{(k)}, \overline{E}^{(k)})$ граф, что $\overline{G}_T^{(0)} = G_T(A)$ и $\overline{E}^{(k)} = \overline{E}^{(k-1)} \setminus \{(p, l) : k \in \{p, l\}\} \cup \{(i, j) : (i, j) \notin \overline{E}^{(k-1)}, (i, k), (k, j) \in \overline{E}^{(k-1)}\}$, а остальные обозначения введены раньше.

Замечание. Из определения следует, что если в шаблоне T есть "плохая" на s шагах матрица A: $\mathrm{nz}(A) = T$, то $\overline{G}_T^{(k)} = G_T^{(k)}(A) = G^{(k)}(A)$. В общем же случае выполняется соотношение $G_T^{(k)}(A) \subseteq \overline{G}_T^{(k)}$. В некотором смысле $\overline{G}_T^{(k)}$ учитывает погрешности вычислений, при которых нулевой результат при сложении и вычитании ненулевых элементов никогда не получается (non-cancellation assumption).

Утверждение (Связь графов $G_T(A)$ и $\overline{G}_T^{(k)}$).
Пусть $i \underset{\min}{\xrightarrow{G_T(A)}} j$, т.е. $\exists \{k_l\}_{l=0}^{p} \subseteq V_T(A) : i = k_0, k_p = j; (k_l, k_{l+1}) \in E_T(A)$; $k_l < \min\{i, j\}, 0 < l < p$. Тогда если $k = \max\limits_{0<l<p} k_l$ в случае $p > 1$ и $k = 0$ при $p = 0$ (петля в i) и $p = 1$ (дуга из i в j), то при всех m: $k \leqslant m < \min\{i, j\}$ выполнено $i \xrightarrow{\overline{G}^{(m)}} j$.

Доказательство:
Проведем доказательство индукцией по p. Заметим, что из определения графа $\overline{G}_T^{(m)}$ следует, что при увеличении m, дуги исчезают только за счет удаления вершины m.
Пусть $p = 0$ и $p = 1$, тогда поскольку $\overline{G}^{(0)} = G_T(A)$, то в графах $\overline{G}_T^{(m)}$ будет

дуга из i в j, пока ее не выкинут при $m = \min\{i, j\}$, т.е. для всех $k < i, j$ дуга еще будет в графе.
Если же уже доказали при длине пути не превосходящем $p \geqslant 1$, то переход осуществим следующим образом: т.к. k — максимальная внутренняя вершина, то $i \xRightarrow[\min]{G_T(A)} k$, $k \xRightarrow[\min]{G_T(A)} j$ и по предположению индукции $i \xrightarrow{\overline{G}_T^{(\min\{i,k\}-1)}} k$, $k \xrightarrow{\overline{G}_T^{(\min\{k,j\}-1)}} j$, откуда поскольку $k < i, j$ имеем:
$\min\{i, k\} - 1 = \min\{k, j\} - 1 = k - 1$, т.е. $(i, k), (k, j) \in \overline{E}_T^{(k-1)}$. Тогда из определения графа $\overline{G}_T^{(m)}$ следует, что в $\overline{E}_T^{(k)}$ этих дуг уже не будет, но появится дуга между i и j, которая будет в графах $\overline{G}_T^{(m)}, m > k$ до тех пор, пока не уберут одну из вершин i или j, т.е. пока $m < \min\{i, j\}, m \leqslant s$, а значит в графах $\overline{G}_T^{(m)}$ будет требуемая дуга.

5 LU-разложение

Начиная с этой части, мы докажем несколько утверждений, впервые рассмотренные в [2], [3] Роузом и Тарьяном (Rose, Tarjan) в 1976г., и 1978г. Часть результатов для более узкого случая были получены ранее Parter [1] в 1961г.

В основном мы будем сводить различные задачи к доказанным теоремам про графы разреженности, упомянутые при рассмотрении метода Гаусса, предполагая, что разность и сумма ненулевых элементов ненулевая (non-cancellation assumption). Таким образом будет получена верхняя оценка на графы разреженности рассматриваемых отображений, которая достигается при рассмотренных ранее условиях существования "плохих" матриц в шаблоне.

Определение. Матрица A называется строго регулярной, если все главные угловые миноры матрицы A отличны от нуля.

Замечание. Из определения ясно, что строго регулярная матрица — невырожденная матрица, к которой применим $(n-1)$ шаг метода Гаусса.

Определение. LU-разложением матрицы $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ называется разложение вида $A = LU$, где L — нижняя треугольная матрица с единичной диагональю, а U — верхняя треугольная матрица с ненулевой диагональю.

Теорема. *LU-разложение матрицы A существует тогда и только тогда, когда A строго регулярна. Если LU-разложение существует, то оно единственно.*

Определение. Шаблон разреженности T будем называть структурно строго регулярным, если $F \cap M_T \neq \varnothing$, где F - множество строго регулярных матриц.

Теорема (Связь графов разреженностей матрицы и компонентов ее LU-разложения).

Пусть A — строго регулярная матрица, $A = LU$ — ее LU-разложение. Тогда из $i \xrightarrow{G(L+U)} j$ следует $i \underset{\min}{\overset{G(A)}{\Longrightarrow}} j$.

Пусть T — структурно строго регулярный шаблон разреженности. Рассмотрим отображение $A \to L + U$ определенное на строго регулярных матрицах, где $A = LU$ — LU-разложение матрицы A.
Тогда $i \underset{\min}{\overset{G_T(A)}{\Longrightarrow}} j \Leftrightarrow i \xrightarrow{\overline{G}_T(L+U)} j$, где $\overline{G}_T(L+U)$ — граф полученный в предположении, что нулевой результат при сложении и вычитании ненулевых элементов в методе Гаусса не получается, т.е. $G_T(L+U) \subseteq \overline{G}_T(L+U)$.

> *Доказательство:*
> Пусть A — строго регулярная матрица, а $A = LU$ — ее LU-разложение, тогда $u_{ij} \overset{i\leqslant j}{=} a_{ij}^{(i-1)}$, $l_{ij} \overset{i\geqslant j}{=} \dfrac{a_{ij}^{(j-1)}}{a_{jj}^{(j-1)}}$, откуда $i \xrightarrow{G(L+U)} j \Leftrightarrow i \xrightarrow{G^{(\min\{i,j\}-1)}} j$.
> Значит, первое утверждение следует из доказанных ранее соотношений для графов матриц, к которым применим метод Гаусса, в которых положили $k = \min\{i,j\} - 1$, а второе следует из свойства графов $\overline{G}_T^{(m)}$, в котором положили $m = \min\{i,j\} - 1$.

Следствие. *Пусть A — строго регулярная матрица, $A = LU$ — ее LU-разложение. Тогда из $i \underset{\min}{\overset{G(A)}{\not\Longrightarrow}} j$ следует $i \overset{G(L+U)}{\not\longrightarrow} j$.*

Следствие. *Из доказанной теоремы следует, что $G_T(A)$ — остовный подграф графа $\overline{G}_T(L+U)$, а, как было упомянуто ранее, чаще всего граф $G_T(L+U)$ не сильно отличается от $\overline{G}_T(L+U)$. Позже будет показано как в некоторых случаях можно бороться с ростом числа ненулевых элементов.*

6 Обратная матрица

Теорема (Связь графов разреженностей матрицы и ее обратной)**.**
Пусть A — строго регулярная матрица. Тогда из $i \xrightarrow{G(A^{-1})} j$ следует $i \overset{G(A)}{\Longrightarrow} j$.
Пусть T — структурно строго регулярный шаблон разреженности матрицы. Тогда $i \overset{G_T(A)}{\Longrightarrow} j \Leftrightarrow i \xrightarrow{\overline{G}_T(A^{-1})} j$, где $G_T(A^{-1}) \subseteq \overline{G}_T(A^{-1})$.

> *Доказательство:*
> Пусть A — строго регулярная матрица. Пусть $B = \begin{bmatrix} A & I_n \\ I_n & O \end{bmatrix}$. Обозначим через $B^{(k)}$ матрицу на k-м шаге метода Гаусса, примененном к матрице B и $B^{(0)} = B$. Поскольку A строго регулярна, то можно сделать минимум n шагов метода Гаусса. Собрав нижние треугольные матрицы в одну на n

шаге, получим:

$$\begin{bmatrix} U & L^{-1} \\ O & B^{(n)}_{n+1:2n,n+1:2n} \end{bmatrix} = B^{(n)} = \begin{bmatrix} L^{-1} & O \\ C & I_n \end{bmatrix} B = \begin{bmatrix} L^{-1} & O \\ C & I_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & I_n \\ I_n & O \end{bmatrix},$$

откуда $O = CA + I_n$ и $B^{(n)}_{n+1:2n,n+1:2n} = C$, т.е. $B^{(n)}_{n+1:2n,n+1:2n} = -A^{-1}$. Тогда если $G^{(k)} = G(B^{(k)}_{k+1:2n,k+1:2n})$, то графы $G^{(n)}$, $G(A^{-1})$ отличаются только нумеровкой вершин, откуда $i \xrightarrow{G(A^{-1})} j \Leftrightarrow (n+i) \xrightarrow{G^{(n)}} (n+j)$. Заметим, что поскольку у B на блочной побочной диагонали стоят единичные матрицы, то при $k \geqslant 1$ в $n+k$ строке и в $n+k$ столбце только k-й элемент не ноль, т.е. в $G(B)$ в $n+k$ вершину можно попасть только из k вершины, а выйти только в k, что говорит о том, что никакой путь не может содержать $n+k$ в качестве внутренней вершины (иначе в пути должна два раза встретиться вершина k, что противоречит различности вершин в пути). Значит, любой путь из $n+i$ в $n+j$ содержит путь из i в j и, поскольку на пути не могли встретиться $n+k$, такой путь проходит только через вершины с номерами не превосходящими n, т.е. лежащими в графе $G(A)$. Значит, $(n+i) \underset{\min}{\overset{G(B)}{\Longrightarrow}} (n+j) \Leftrightarrow (n+i) \overset{G(B)}{\Longrightarrow} (n+j) \Leftrightarrow i \overset{G(A)}{\Longrightarrow} j$. Поскольку $(n+i),(n+j) > n$, то из соотношений для графов матриц, к которым применим метод Гаусса, примененным к матрице B, имеем: из $(n+i) \xrightarrow{G^{(n)}} (n+j)$ следует $(n+i) \underset{\min}{\overset{G(B)}{\Longrightarrow}} (n+j)$ и с учетом выписанных ранее соотношений первая часть теоремы доказана.

Докажем теперь утверждение для структурно строго регулярного шаблона разреженности T. Из свойства графов $\overline{G}^{(m)}_T$, примененном к матрице B, имеем: из $(n+i) \underset{\min}{\overset{G_T(B)}{\Longrightarrow}} (n+j)$ следует $(n+i) \xrightarrow{\overline{G}^{(m)}_T} (n+j)$ при $k \leqslant m < \min\{n+i, n+j\}, m \leqslant n$, где k — наибольшая внутренняя вершина в пути, которая, согласно вышесказанному для графа $G_T(B)$, не превосходит n. В частности, при $m = n$ из $(n+i) \underset{\min}{\overset{G_T(B)}{\Longrightarrow}} (n+j)$ следует $(n+i) \xrightarrow{\overline{G}^{(n)}} (n+j)$, а т.к. первое соотношение равносильно $i \overset{G_T(A)}{\Longrightarrow} j$, а второе — $i \xrightarrow{\overline{G}_T(A^{-1})} j$, то утверждение доказано.

Следствие. *Пусть A — строго регулярная матрица. Тогда из $i \overset{G(A)}{\not\Longrightarrow} j$ следует $i \overset{G(A^{-1})}{\not\longrightarrow} j$.*

Замечание. Отметим, что условие строгой регулярности можно ослабить: поскольку для произвольной перестановки P граф $G(A)$ отличается от графа $G(P^TAP)$ только перенумировкой вершин и $(P^TAP)^{-1} = P^{-1}A^{-1}P$, то теорема верна и для произвольной матрицы (шаблона разреженности), которую с помощью одновременной перестановки строк и столбцов можно привести к строго регулярной (структурно строго регулярной).

Следствие. *В условиях последних двух теорем имеем: $\overline{G}_T(L+U)$ — остовный подграф $\overline{G}_T(A^{-1})$, поскольку всякий путь по меньшим вершинам, очевидно, является путем. Из этого следует, что хранение обратной матрицы для структурно строго регулярных шаблонов в общем случае обходится дороже, чем хранение LU-разложения.*

Следствие. *Пусть T — структурно строго регулярный и неприводимый шаблон разреженности матрицы A. Тогда $\overline{T}(A^{-1}) = \mathcal{N}^2$, где $\overline{T}(A^{-1})$ — множество дуг графа $\overline{G}_T(A^{-1})$.*

> *Доказательство:*
> Т.к. T структурно неприводим, то $G_T(A)$ сильно связен, т.е. в $G_T(A)$ из любой вершины есть путь в любую вершину, что, в силу доказанной теоремы, говорит о том, что любые две вершины $\overline{G}_T(A^{-1})$ соединены дугой, что доказывает $\overline{T}(A^{-1}) = \mathcal{N}^2$.

Пример (Для произвольных неприводимых шаблонов разреженности все не так плохо)**.** Пусть $T = \{(1,2),(2,3),(3,1)\}$, тогда T задает матрицы $A = \begin{bmatrix} 0 & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 \\ a_3 & 0 & 0 \end{bmatrix}$, которые являются невырожденными только при $a_1a_2a_3 \neq 0$ и $A^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{a_3} \\ \frac{1}{a_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_2} & 0 \end{bmatrix}$ ни при каких значениях a_1, a_2, a_3 не является полной, несмотря на неприводимость матриц A. Отметим также, что матрицу A нельзя привести к строго регулярной одновременной перестановкой строк и столбцов; перестановкой строк строгой регулярности добиться можно, однако при этом мы потеряем свойство неприводимости.

Следствие. *Для вектора $x \in \mathbb{C}^n$ определим множество индексов ненулевых элементов $\mathrm{nz}(x) = \{i : x_i \neq 0\} \subseteq \mathcal{N}$. Множество $P \subseteq \mathcal{N}$ будем называть шаблоном разреженности вектора, а через $V_P = \{x \in \mathbb{C}^n : \mathrm{nz}(x) \subseteq P\}$ обозначим множество векторов, удовлетворяющих данному шаблону разреженности.*
Тогда для структурно строго регулярного и неприводимого шаблона разреженности T матриц A, в котором существует "плохая" матрица, и шаблона $P \neq \varnothing$ векторов b, решение системы $Ax = b$ с невырожденной матрицей A является структурно полным, т.е. найдутся невырожденная матрица $A \in M_T$ и вектор $b \in V_P$, что решение $Ax = b$ является полным.

Пример (Для произвольных неприводимых шаблонов разреженности решение не всегда будет полным.)**.** Рассмотрим предыдущий пример.

Пусть $T = \{(1,2),(2,3),(3,1)\}$, тогда T задает матрицы $A = \begin{bmatrix} 0 & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 \\ a_3 & 0 & 0 \end{bmatrix}$, которые являются невырожденными только при $a_1a_2a_3 \neq 0$ и $P = \{1\}$ задает структурно ненулевой вектор $b = \begin{bmatrix} b_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, тогда $x = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{b_1}{a_1} \\ 0 \end{bmatrix}$ и ни при каких значениях a_1, a_2, a_3, b_1 вектор x не является полным.

7 Как бороться с ростом числа ненулевых элементов в разложении Холецкого для некоторого класса матриц

Далее будем работать с вещественными матрицами $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Для комплексных матриц все определения и утверждения переносятся заменой условия $A^T = A > 0$ на $A > 0$.

Определение. Разложением Холецкого матрицы $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ называется разложение вида $A = LL^T$, где L — нижняя треугольная матрица с положительной диагональю.

Теорема. *Разложение Холецкого матрицы A существует тогда и только тогда, когда $A^T = A > 0$. Если разложение Холецкого существует, то оно единственно.*

Замечание. Из критерия Сильвестра все главные угловые миноры матрицы A положительны: $\Delta_k > 0$. Значит для нее существует LU-разложение $A = \tilde{L}\tilde{U}$. Положим $\Delta_0 = 1$, тогда $\tilde{u}_{kk} = a_{kk}^{(k-1)} = \dfrac{\Delta_k}{\Delta_{k-1}} > 0$ и определена $D = \mathrm{diag}(\sqrt{u_{11}}, \ldots, \sqrt{u_{nn}})$. Т.к. $\tilde{L}\tilde{U} = A = A^T = (\tilde{U}^T D^{-2})(D^2\tilde{L}^T)$, где $\tilde{U}^T D^{-2}$ — нижняя треугольная матрица с единичной диагональю, $D^2\tilde{L}^T$ — верхняя треугольная матрица с ненулевой диагональю, то в силу единственности LU-разложения, $\tilde{L} = \tilde{U}^T D^{-2}$, $\tilde{U} = D^2\tilde{L}^T$. Тогда если $L = \tilde{L}D$ — нижняя треугольная матрица с неотрицательной диагональю, то $L^T = D\tilde{L}^T = D^{-1}(D^2\tilde{L}^T) = D^{-1}\tilde{U}$, откуда $A = \tilde{L}\tilde{U} = (\tilde{L}D)(D^{-1}\tilde{U}) = LL^T$ — разложение Холецкого. Т.о. получили связь между компонентами LU-разложения и разложения Холецкого: $L = \tilde{L}D$, $L^T = D^{-1}\tilde{U}$.

Замечание. Т.к. $A > 0$, то $a_{kk} = e_k^T A e_k > 0$, что, согласно доказанной ранее теореме, говорит о том, что в любом симметричном структурно положительно определенном шаблоне разреженности существует "плохая" симметричная положительно определенная матрица. Кроме того, за счет изменения диагональных элементов матрицы A, можно добиться того, чтобы матрица B из доказательства теоремы об обратной матрицы была "плохой" симметричной матрицей, к которой применимы n шагов метода Гаусса.

Определение. Шаблон разреженности T будем называть симметричным, если $(i,j) \in T \Leftrightarrow (j,i) \in T$ и в качестве матриц, удовлетворяющих такому шаблону, будем рассматривать только симметричные:

$$M_T = \{A \in \mathbb{R}^{n \times n} : A = A^T, \mathrm{nz}(A) \subseteq T\}.$$

С учетом этих замечаний можно переформулировать доказанные раннее теорему о графе компонентов LU-разложения и теорему о графе разреженности обратной матрицы, учтя, что граф разреженности симметричной матрицы не ориентирован.

Теорема (Связь графов разреженностей матрицы и множителя ее разложения Холецкого)**.**

Пусть A — симметричная положительно определенная матрица, $A = LL^T$ — ее разложение Холецкого. Тогда из $i \xleftrightarrow{G(L+L^T)} j$ следует $i \overset{G(A)}{\underset{\min}{\Longleftrightarrow}} j$.

Пусть T — симметричный структурно положительно определенный шаблон разреженности. Рассмотрим отображение $A \to L + L^T$ определенное на симметричных положительно определенных матрицах, где $A = LL^T$ — разложение Холецкого матрицы A. Тогда $i \overset{G_T(A)}{\underset{\min}{\Longleftrightarrow}} j \Leftrightarrow i \xleftrightarrow{G_T(L+L^T)} j$.

Теорема (Связь графов разреженностей матрицы и к ней обратной)**.**
Пусть A — симметричная положительно определенная матрица. Тогда из $i \xleftrightarrow{G(A^{-1})} j$ следует $i \overset{G(A)}{\Longleftrightarrow} j$.
Пусть T — симметричный структурно положительно определенный шаблон разреженности матрицы. Тогда $i \overset{G_T(A)}{\Longleftrightarrow} j \Leftrightarrow i \xleftrightarrow{G_T(A^{-1})} j$.

Следствие. *Из этих теорем следует, что $G_T(A)$ — остовный подграф $G_T(L + L^T)$, который является остовным подграфом $G_T(A^{-1})$, причем число ненулевых элементов может сильно отличаться.*
Ясно, что можно попробовать найти перестановку P, что $G_T(P^TAP)$ будет содержать меньшее число путей по меньшим вершинам, тогда, если $A \to L + L^T$ — отображение, определенное на симметричных положительно определенных матрицах, где $P^TAP = LL^T$ — разложение Холецкого, то в графе $G_T(L + L^T)$ будет меньше дуг (отметим, что поскольку $A > 0 \Leftrightarrow P^TAP > 0$, то для P^TAP применимы наши теоремы).

Существует множество подходов в выборе такой перестановки P, однако мы рассмотрим самый простой случай, а именно будем искать перестановку P, что если $P^TAP = LL^T$ — разложение Холецкого, то $L+L^T$ имеет ненулевые элементы только в позициях, где соответствующие элементы P^TAP тоже не равны нулю. Ясно, что такая ситуация возможна в случае "хороших" (не "плохих") матриц, однако для нахождения достаточного условия рассмотрим "плохие" матрицы.

Определение. Граф G называется триангулированным (хордальным), если для каждого цикла $(x_1x_2 \dots x_kx_1)$, содержащего не меньше четырех вершин, найдется ребро, соединяющее две несоседние вершины цикла x_i, x_j.

Утверждение. Пусть T — симметричный структурно положительно определенный шаблон разреженности и $A \to L + L^T$ — отображение, определенное на симметричных положительно определенных матрицах, где $P^TAP = LL^T$ — разложение Холецкого.

Тогда для существования перестановки P, что $i \xleftrightarrow{G_T(P^TAP)} j \Leftrightarrow i \xleftrightarrow{G_T(L+L^T)} j$, необходима триангулированость графа $G_T(A)$.

> *Доказательство:*
> По условию $\forall i, j \in \mathcal{N}$ $i \xleftrightarrow{G_T(L+L^T)} j \Leftrightarrow i \xleftrightarrow{G_T(P^TAP)} j$. Т.к. $P^TAP > 0$, то из доказанных раннее теорем $i \xleftrightarrow{G_T(L+L^T)} j \Leftrightarrow i \underset{\min}{\overset{G_T(P^TAP)}{\Longleftrightarrow}} j$, откуда $i \underset{\min}{\overset{G_T(P^TAP)}{\Longleftrightarrow}} j \Leftrightarrow i \xleftrightarrow{G_T(P^TAP)} j$.
> Заметим, что поскольку $G_T(A)$ и $G_T(P^TAP)$ отличаются только перенумировкой вершин, то триангулированность графа $G_T(A)$ равносильна триангулированности графа $G_T(P^TAP)$.
> Пусть в графе $G_T(P^TAP)$ существует цикл $(x_1x_2 \dots x_kx_1)$, $k \geqslant 4$, обозначим через $(1), (2), (3)$ индексы вершин, имеющих три наибольших значения (возможно, одинаковые) среди вершин этого цикла. Заметим, что т.к. $x_k < x_{(3)}, k \notin \{(1), (2), (3)\}$, то
>
> 1. $x_{(1)} \underset{\min}{\overset{G_T(P^TAP)}{\Longleftrightarrow}} x_{(2)}$ (т.к. все остальные вершины не превосходят $x_{(2)}$),
> 2. $x_{(2)} \underset{\min}{\overset{G_T(P^TAP)}{\Longleftrightarrow}} x_{(3)}$ (путь через часть цикла, не содержащую индекс (1), содержит вершины не превосходящие $x_{(3)}$),
> 3. $x_{(3)} \underset{\min}{\overset{G_T(P^TAP)}{\Longleftrightarrow}} x_{(1)}$ (путь через часть цикла, не содержащую индекс (2), содержит вершины не превосходящие $x_{(3)}$),
>
> откуда, из соотношения ранее:
> $x_{(1)} \xleftrightarrow{G_T(P^TAP)} x_{(2)} \xleftrightarrow{G_T(P^TAP)} x_{(3)} \xleftrightarrow{G_T(P^TAP)} x_{(1)}$, т.е. вершины $x_{(1)}, x_{(2)}, x_{(3)}$ попарно соединены ребром и т.к. $k \geqslant 4$, то среди этих вершин найдутся две

несоседние вершины, что означает триангулированность графа $G_T(P^TAP)$, а значит и графа $G_T(A)$.

Покажем, что условие триангулированности графа $G(A)$ является достаточным для существования искомой перестановки для произвольной симметричной положительно определенной матрицы A.

Для дальнейших рассуждений нам необходимо познакомиться с лексикографическим поиском в ширину (lexicographic breadth-first search, LBFS, Lex-BFS).

Определение. Для вершины v графа $G(V, E)$ обозначим через $N(v) = \{u \in V : v \overset{G}{\leftrightarrow} u\}$ множество ее соседей.

Определение. $x = (x_1, \dots, x_k) \in \mathbb{N}^k$ будем называть конечной последовательностью длины k над упорядоченным алфавитом $\mathbb{N}$. При $k = 0$ пустую последовательность будет обозначать $\varnothing$. Иными словами конечные последовательности — элементы $\mathbb{N}^* = \bigcup\limits_{k=0}^{\infty} \mathbb{N}^k$.

Определение. Пусть $x = (x_1, \dots, x_k), y = (y_1, \dots, y_l) \in \mathbb{N}^*$. Будем говорить, что x лексикографически больше y и писать $x \succ y$, если либо $k > l$ и $x_i = y_i, \forall i \in \overline{1, l}$, либо $\exists m \leqslant \min\{k, l\} : x_m > y_m, x_i = y_i, \forall i \in \overline{1, m-1}$.

Упражнение. Показать, что любые различные конечные последовательности сравнимы.

Определение. Пусть M — набор конечных последовательностей. Тогда под лексикографическим максимумом в M будем понимать $u = \operatorname*{lexmax}\limits_{v \in M}(v)$: для всех $v \in M$ либо $u = v$, либо $u \succ v$.

Упражнение. Показать, что в любом конечном наборе M конечных последовательностей существует и единственен лексикографический максимум.

Определение. Пусть $l : L \to M$, где M — набор конечных последовательностей. Обозначим через $\operatorname*{Arglexmax}\limits_{v \in L}(l(v))$ множество $\{u \in L : l(u) = \operatorname*{lexmax}\limits_{v \in L}(l(v))\}$.

Определение. Рассмотрим произвольный граф $G = (V, E)$.
Сопоставим каждой вершине v конечную последовательность $\mathrm{label}(v)$, которую будем в дальнейшем называть меткой. Под записью $\mathrm{label}(v) \leftarrow \varnothing$ будем понимать, что $\mathrm{label}(v)$ инициализирована пустой последовательностью. А под записью $\mathrm{label}(v) \leftarrow \mathrm{label}(v) \cup \{a\}$ будем понимать, что в конец конечной последовательности $\mathrm{label}(v)$ был добавлен новый элемент a.
Рассмотрим следующий алгоритм, называемый лексикографическим поиском в ширину (lexicographic breadth-first search, LBFS, Lex-BFS), строящий по заданному графу G перестановку σ, которую будем называть LBFS-упорядочиванием:

Input: a graph $G = (V, E)$
Output: σ — LBFS-ordering
$V' \leftarrow V$
for all $v \in V'$ **do**
  label$(v) \leftarrow \varnothing$
end for
for $i = |V|, \dots, 1$ **do**
  $v \leftarrow \operatorname*{Arglexmax}_{v \in V'} \mathrm{label}(v)$
  $\sigma(i) \leftarrow v$
  $V' \leftarrow V' \setminus \{v\}$
  for all $u \in V' \cap N(v)$ **do**
    label$(u) \leftarrow$ label$(u) \cup \{i\}$
  end for
end for

Замечание. Т.к. мы просматриваем каждую вершину в качестве v только один раз и каждое ребро $v \overset{G}{\leftrightarrow} u$ в $N(v)$ только один раз, то сложность алгоритма является линейной: $O(|V| + |E|)$

Теорема (Основное свойство LBFS-упорядочивания [4])**.** *Если* $1 \leqslant a < b < c$: $\sigma(c) \in N(\sigma(a)) \setminus N(\sigma(b))$, *то* $c < |V|$ *и* $\exists d : c < d, \sigma(d) \in N(\sigma(b)) \setminus N(\sigma(a))$.

> *Решение:*
> Заметим, что если на некотором шаге вершины u_1, u_2 имеют метки l_1, l_2: $l_1 \succ l_2$, то непосредственно из определения лексикографического порядка следует, что поскольку добавляемый в метку элемент i с каждым шагом только уменьшается, то это соотношение будет выполнено для всех последующих шагов, а значит $\sigma^{-1}(u_1) > \sigma^{-1}(u_2)$.
> Докажем утверждение от противного: пусть утверждение не выполнено для заданных a, b, c. Тогда при $i = n, \dots, c$ для меток l_b, l_a вершин $\sigma(b)$, $\sigma(a)$ выполнено: $l_b \preccurlyeq l_a$ (т.к. на каждом шаге либо добавляется индекс в обе метки, либо только в метку l_a, либо не добавляется вообще), тогда с учетом того, что при $i = c$ индекс добавляется только в метку l_a, то после этого шага получим $l_b \prec l_a$ и, в силу вышесказанного, $b < a$, противоречие.

Замечание. Свойство называется основным, поскольку можно показать, что для любое упорядочивание, удовлетворяющее данному свойству, является результатом применения лексикографического поиска в ширину.

Утверждение. Пусть $A^T = A > 0$ и граф разреженности $G(A)$ триангулирован. Тогда существует перестановка P, что если $P^T AP = LL^T$ — разложение Холецкого, то $L + L^T$ имеет ненулевые элементы только в позициях, где соответствующие элементы $P^T AP$ тоже не равны нулю.

Решение:
Покажем, что существует перестановка P: $i \underset{\min}{\overset{G(P^TAP)}{\Longleftrightarrow}} j \Rightarrow i \xleftrightarrow{G(P^TAP)} j$. Тогда поскольку из $i \xleftrightarrow{G(L+L^T)} j$ следует $i \underset{\min}{\overset{G(A)}{\Longleftrightarrow}} j$, то из $i \xleftrightarrow{G(L+L^T)} j$ будет следовать $i \xleftrightarrow{G(P^TAP)} j$ и теорема будет доказана.

Докажем существование такой перестановки. Применим алгоритм лексикографического поиска в ширину к графу $G = G(A)$ и рассмотрим $P = \begin{bmatrix} e_{\sigma(1)} & \ldots & e_{\sigma(n)} \end{bmatrix}$. Пусть существуют $i, j \; : \; i < j$, $i \underset{\min}{\overset{G(P^TAP)}{\Longleftrightarrow}} j$, $i \overset{G(P^TAP)}{\not\longleftrightarrow} j$, рассмотрим кратчайший из путей $i \underset{\min}{\overset{G(P^TAP)}{\Longleftrightarrow}} j$: $\{k_l\}_{l=0}^p$, $i = k_0$, $j = k_p$, $k_l < \min\{i, j\}$, $0 < l < p$. Тогда $k_{p-1} < k_0 < k_p$, $k_p \in N(k_{p-1}) \setminus N(k_0)$, значит, согласно основному свойству LBFS-упорядочивания, $k_p < n$ и существует $k_{p+1} \; : \; k_p \; < \; k_{p+1}, k_{p+1} \; \in \; N(k_0) \setminus N(k_{p-1})$. Обозначим через $q = \max\{l' \in \overline{0, p-1} \; : \; k_{p+1} \in N(k_{l'})\}$, тогда $0 \leqslant q < p - 1$. Заметим, что среди $\{k_l\}_{l=q}^p$ ребром соединены только соседние элементы, а k_{p+1} соединен с $k_l, q \leqslant l < p$ только при $l = q$.
Пусть $k_{p+1} \in N(k_p)$, тогда у нас образовался цикл $(k_q, \ldots, k_{p-1}, k_p, k_{p+1})$ в котором несоседние вершины не соединены ребром и т.к. $q < p-1$, то длина цикла не меньше 4, откуда, в силу триангулированности графа $G(P^TAP)$, какие-то две несоседние вершины все-таки должны быть соединены ребром - получили противоречие.
Пусть теперь $k_{p+1} \notin N(k_p)$, тогда $k_{p+1}, k_q, \ldots, k_p$ образует путь по меньшим вершинам, в котором несоседние вершины не соединены ребром. Тогда положим $i \leftarrow k_p$, $j \leftarrow k_{p+1}$, в этом случае $i < j$ и мы можем повторить вышесказанное, но т.к. индекс j при таких операциях только возрастает, то в какой-то момент мы получим $j = n$, а такое, как было сказано выше, невозможно.

Т.о. доказана

Теорема.

Пусть $A^T = A > 0$ и $G(A)$ триангулирован. Тогда существует перестановка P, такая что L из разложения Холецкого матрицы $P^TAP = LL^T$ имеет ненулевые элементы только в позициях, где соответствующие элементы P^TAP тоже не равны нулю.

Пусть T — симметричный структурно положительно определенный шаблон разреженности. Тогда следующие утверждения эквивалентны

- *Существует перестановка P, такая что $i \xleftrightarrow{G_T(P^TAP)} j \Leftrightarrow i \xleftrightarrow{G_T(L+L^T)} j$, где $P^TAP = LL^T$ — разложение Холецкого.*

- *Граф $G_T(A)$ триангулирован.*

Решение:
Доказательство следует из доказанных раннее утверждений и существования в шаблоне T "плохой" симметричной положительно определенной матрицы, а также того факта, что для "плохой" матрицы из $i \xleftrightarrow{G_T(P^TAP)} j$ следует $i \xleftrightarrow{G_T(L+L^T)} j$.

Замечание. Можно показать, что по результату применения лексикографического поиска в ширину за линейное время можно понять является ли граф триангулированным, поэтому можно применить к графу LBFS, проверить является ли он триангулированным и если является, то найденная перестановка будет исходной.

Список литературы

[1] S. Parter The use of linear graphs in Gauss elimination, // SIAM Reu. 3 (1961), 119-130.

[2] Rose, D. J., Tarjan, R. E., & Lueker, G. S. (1976). Algorithmic aspects of vertex elimination on graphs // SIAM Journal on Computing, 5(2), 266–283.

[3] Rose, D. J. & Tarjan, R. E. (1978). Algorithm aspects of vertex elimination on directed graphs // SIAM Journal on Applied Mathematics, 34(1), 176–197.

[4] F.F. Dragan, F. Nicolai, and A. Brandstädt (1997) LexBFS-orderings and powers of graphs // LNCS 1197 166–180.

[5] Jennifer Scott, Miroslav Tůma (2023) Algorithms for Sparse Linear Systems // Nečas Center Series.