强主元稀疏阵的近似求逆*

雷 光 耀

(中国科学院应用数学研究所，北京 100080)

关键词 强主元稀疏阵、阶、消去法、逆矩阵

如何用较少的计算量得到高精度的近似逆矩阵，是数值计算的重要问题. 文献[1]给出了对称三对角阵的近似求逆法. 文献[2]进一步给出了对称五对角阵的近似求逆法. 文献[1]和[2]的方法只适用于对称的对角优势阵，且难以向多对角阵的情形推广. 文献[3]将求逆化成级数展开，并应用于椭圆型方程数值解的计算. 级数展开法是向量化算法，但其计算量较大. 本文应用文献[4]和[5]提出的矩阵元素阶的概念，在消去法计算中进行高阶截断，给出强主元稀疏阵的近似求逆法. 在强主元条件下，该法适用于任意稀疏结构的矩阵.

定义 1 $N\times N$ 实矩阵 $A=(a_{ij})$ 称为强主元阵，若 A 非奇且 $|a_{ii}|\geqslant\sum\limits_{j\neq i}|a_{ij}|$，$i=1,2,\cdots,N$.

强主元条件弱于对角强优和对角弱优. 强主元阵不必是对称阵或正定阵. 易证，消去法不改变强主元的性质.

引理 1 对强主元阵用行消去法消去其某个非主元，所得结果仍为强主元阵，且被变换行主元不变号.

在消去法计算过程中，每一步都有主元除法. 强主元阵的主元除法是使消去法增量绝对值变小的主要因素. 可以用主元除法次数来确定强主元阵各元素的阶及消去法增量的阶.

定义 2 若 $A=(a_{ij})$ 是强主元阵，则称其主元 $a_{ii}(i=1,2,\cdots,N)$ 为零阶量，其它非零元 $a_{ij}\neq 0(i\neq j)$ 为一阶量，零元素称为∞阶量.

定义 3 强主元阵二元素之商(或积)的阶为该二元素阶之差(或和)，二元素之和或差的阶为该二元素阶的极小值.

定义 4 矩阵 $C=(c_{ij})$ 称为矩阵 $B=(b_{ij})$ 的阶矩阵，若 c_{ij} 为 b_{ij} 的阶，i, $j=1,2,\cdots,N$.

在讨论消去法计算过程时，采用阶矩阵可以不必考虑元素的值，而只考虑元素的阶，从而使讨论简化. 作为例子我们考虑 Laplace 方程第一边值问题. 在单位正方形的等距网格上用五点格式，则差分方程系数矩阵 A 为熟知的五对角形式. 设 $N=n\times n$，则

$$A=\mathrm{tridiag}(I,A_i,I),\tag{1}$$

其中 $A_i=\mathrm{tridiag}(1,-4,1)$，$i=1,2,\cdots,n$. A的阶矩阵 C 为块三对角形式，

$$C=\mathrm{tridiag}(D_{i-1},C_i,D_{i+1}),\tag{2}$$

本文 1990 年 2 月 12 日收到. 1990 年 7 月 26 日收到修改稿.

* 国家自然科学基金资助项目.

$$C_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad D_i = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{bmatrix}, i = 1, 2, \cdots, n.$$

值得注意的是，写稀疏阵时一般不列出零元素．与此类似，稀疏阵的阶矩阵中零元素的阶也不列出．在 C_i 和 D_i 中未列出的元素均为∞．用消去法计算 A^{-1} 时，按定义 2 和定义 3 作相应的阶运算可得 A^{-1} 的阶矩阵．

引理 2　若 A^{-1} 的阶矩阵为 $E = (E_{ij}), i, j = 1, 2, \cdots, n$，则

$$E_{ii} = \begin{bmatrix} 2 & 3 & \cdots & n+1 \\ 3 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 3 \\ n+1 & \cdots & 3 & 2 \end{bmatrix}, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \tag{3}$$

$$E_{i,i+s} = E_{i+s,i} = \begin{bmatrix} s+2 & s+3 & \cdots & s+n+1 \\ s+3 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & s+3 \\ s+n+1 & \cdots & s+3 & s+2 \end{bmatrix}, \quad \begin{array}{l} i = 1, 2, \cdots, n, \\ s = 1, 2, \cdots, n-1, \\ 1 \leqslant i+s \leqslant n. \end{array} \tag{4}$$

文献[1]曾给出了(1)式中 A_i^{-1} 的一个计算结果(参见文献[1] p.231)．显然，每增加一阶，A_i^{-1} 的元素值衰减约 3.7 倍．

若强主元阵 A 的非零元为规则分布，则 A^{-1} 的阶矩阵与引理 2 给出的 E 类似．由于 A^{-1} 各子块的对角线由同阶量组成，从而可用只有少量非零对角线的规则带状阵作近似逆矩阵．若 A 的非零元为不规则分布，则 A^{-1} 的阶矩阵可用稀阵存储技术经过阶运算给出．对给定的正整数 $P > 1$，在消去法算 A^{-1} 的过程中忽略阶大于 P 的元素和增量，则可得 A^{-1} 的近似，本文称之为 P 阶近似逆矩阵．其各元素对于 A^{-1} 相应元素的绝对误差为 $O(t^{P-1}), 0 < t < 1, t$ 为 A^{-1} 相邻对角线元素的平均衰减率．若无舍入误差，则 P 足够大时 P 阶近似逆矩阵就是 A^{-1}，此时计算量为 $O(N^3)$．但当 P 为小正整数时，计算量仅为 $O(N)$．表 1 给出了(1)式中 A_i 的 P 阶近似逆矩阵所需的非零对角线数以及计算量(只计乘除法)．

表 1　A_i 的 P 阶近似逆矩阵所需的非零对角线数及计算量

P	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
非零对角线数	1	3	5	7	9	11	13	15	17	19
计算量/n	3	6	11	19	29	42	59	80	105	134

设 A 为 $N \times N$ 强主元稀疏阵，I 为 $N \times N$ 单位阵．采用稀阵存储方法保存 A 的非零元、非零元位置及其阶．A 的 P 阶近似逆矩阵的算法由 $N \times 2N$ 矩阵 $[A|I]$ 开始并分成两步．

第一步：用 P 阶截断的行消去法把 $[A|I]$ 中的 A 变换成主元为 1 的上三角阵 A^*，同时把 I 变换成下三角阵 B^*．

第二步：用 P 阶截断的行消去法把 A^* 变换成单位阵，同时把 B^* 变换成 A 的 P 阶近似逆矩阵．

其中 P 阶截断表示在计算消去法增量之前先按定义 2 和定义 3 作整数运算以确定增量的

阶，当阶大于P时丢弃该增量。

本文对两类矩阵进行了P阶近似逆矩阵的计算．例 1 为(1)式中的 A_i，例 2 为文献 [6] 给出。

$$A=\begin{bmatrix} 24 & 18 & 3 & & & & \\ 8 & 30 & 19 & 3 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & 8 & 30 & 19 & 3 & \\ & & & & 8 & 30 & 18 \\ & & & & & 8 & 24 \end{bmatrix}.$$

计算结果列于表 2，其中 $f_{ij}^{(P)}$ 为 $F^{(P)}=A\cdot(A^{-1})^{(P)}$ 的元素，$(A^{-1})^{(P)}$ 为A的P阶近似逆矩阵.为简便起见，表 2 中将指标(P)省略，并将 0.2429×10^{-16} 简记为2429(-16)，其余类似。本文的数值计算是用双精度 FORTRAN 程序在 Micro-VAX 机上完成的。

表 2　P阶近似逆矩阵的计算结果

算例	N	P	$\mathrm{Max}\lvert f_{ii}-1\rvert$	$\sum_i \lvert f_{ii}-1\rvert/N$	$\mathrm{Max}_{i\neq j}\lvert f_{ij}\rvert$	$\sum_{i\neq j}\lvert f_{ij}\rvert/(N-1)^2$	CPU(sec.)
例 1	100	11	2429(−16)	2149(−16)	2055(−5)	6385(−7)	0.24
	500	11	2429(−16)	2373(−16)	2055(−5)	1365(−7)	1.21
	2500	11	2429(−16)	2417(−16)	2055(−5)	2765(−8)	7.04
	100	8	2429(−16)	5048(−17)	1068(−3)	3429(−5)	0.13
	500	8	2429(−16)	3785(−17)	1068(−3)	7139(−6)	0.69
	2500	8	2429(−16)	3533(−17)	1068(−3)	1439(−6)	3.81
	100	5	2429(−16)	2189(−16)	5551(−2)	1840(−3)	0.08
	500	5	2429(−16)	2381(−16)	5551(−2)	3733(−4)	0.34
	2500	5	2429(−16)	2419(−16)	5551(−2)	7487(−5)	1.89
例 2	100	11	2776(−16)	1943(−17)	6568(−2)	1666(−3)	0.24
	500	11	2776(−16)	3886(−18)	6568(−2)	3546(−4)	1.25
	2500	11	2776(−16)	7772(−19)	6568(−2)	7176(−5)	7.14
	100	8	2776(−16)	2692(−16)	5139(−1)	1391(−2)	0.14
	500	8	2776(−16)	2759(−16)	5139(−1)	2882(−3)	0.69
	2500	8	2776(−16)	2772(−16)	5139(−1)	5803(−4)	3.88
	100	5	1818(−1)	3654(−2)	3500(0)	8103(−2)	0.07
	500	5	1818(−1)	3509(−2)	3500(0)	1640(−2)	0.35
	2500	5	1818(−1)	3479(−2)	3500(0)	3288(−3)	1.86

参 考 文 献

[1] Concus, P., Golub, G.B. and Meurant, G., *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 6(1985), 220—252.

[2] Concus, P., Meurant, G., *BIT*, 26(1986), 493—504.

[3] Axelsson, O., Eijkhout, V., *Algorithms and Appl. on Vect r and Parallel Computers*, Elsevier Science Publishers, 1987, 279—306.

[4] Lei, G.Y., *Computational Methods in Flow Analysis* (Eds. Niki, H. and Kawahara, M.), Okayama Univ. of Science, 1988, 131—138.

[5] Lei, G.Y., *Computational Physics* (Eds. Li, D.Y. and Feng, D.H.), World Scientific, 1989, 474—477.

[6] Barrett, W.W., Feinsilver, P.J., *Lin. Alg. Appl.*, 41(1981), 111—130.