

五对角线性方程组追赶法

王礼广^{1,2}, 蔡放^{1,3}, 熊岳山¹

(1. 国防科技大学 计算机学院, 湖南 长沙 410073; 2. 南华大学 数理学院, 湖南 衡阳 421001;
3. 长沙大学 科研处, 湖南 长沙 410003)

摘要: 利用三对角线性方程组追赶法思想, 推导出五对角线性方程组追赶法. 理论推导表明: 对于 n 阶五对角线性方程组求解, 该算法的运算量级为 $O(11n)$. 数值实验表明: 该算法比高斯消去法和其他一些迭代法有明显的速度和内存优势. 这极大地提高了线性方程的速度.

关键词: 五对角矩阵; 带状矩阵; 稀疏矩阵; 线性方程组

中图分类号: O221.2

文献标识码: A

A Forward Elimination and Backward Substitution Algorithm for Solutions of Linear Equations System with Quinary Diagonal Matrix

WANG Li-guang^{1,2}, CAI Fang^{1,3}, XIONG Yue-shan¹

(1. School of Computer Science, National University of Defense Technology, Changsha, Hunan 410073, China; 2. School of Mathematics and Physics, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China; 3. Science Research Department, Changsha University, Changsha, Hunan 410003, China)

Abstract: A forward elimination and backward substitution algorithm was derived for solutions of linear equations system with quinary diagonal matrix using ones with triune diagonal matrix. It is deduced theoretically that the operational amount is $O(11n)$ for a linear equation system with quinary diagonal matrix whose order is n . It is shown in the numerical experiments that this method has some advantages in computational cost and memory need evidently. It improves the calculational rates.

Key words: quinary diagonal matrix; band matrix; sparse matrix; system of linear equations

在现代科学与工程计算领域, 线性方程组的求解极为重要^[1-2]. 这些领域包括结构力学, 弹

性力学, 流体力学, 振动分析, 电路分析, 热传导, 电磁波, 生物学, 医学, 化学问题计算, 社会

收稿日期: 2007-12-29

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60773022); 湖南省教育厅科研资助项目(06C712)

作者简介: 王礼广(1961-), 男, 湖南省永兴人, 南华大学数理学院副教授, 硕士. 主要研究方向: 数值计算.

科学问题,商业,经济问题分析的定量分析与研究^[3].许多有效的数值方法,最终都将导致线性方程组的求解^[1,4].

线性方程组求解方法可分为直接法和迭代法.最基本的直接法是高斯消去法的变形,但是高斯消去法计算量比较大.而迭代法一般也要足够的迭代次数才能达到需要的精度,有时甚至发散.在实际中遇到的线性方程组系数大多数是稀疏矩阵或带状稀疏矩阵,而且往往是对角占优矩阵.前人对此已进行了大量的研究^[5-6].本文试图用追赶法的思想来求解五对角线性方程组,并与高斯消去法和其他一些迭代法进行比较.

1 五对角线性方程组追赶法的推导

设有五对角线性方程组

$$\begin{bmatrix} c_1 & d_1 & e_1 & & & \\ b_2 & c_2 & d_2 & e_2 & & \\ a_3 & b_3 & c_3 & d_3 & e_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & a_{n-2} & b_{n-2} & c_{n-2} & d_{n-2} & e_{n-2} \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & d_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n & c_n \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-2} \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_{n-2} \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix}, \quad (1)$$

简记为 $Ax = f$. 其中 A 为非奇异的五对角带状矩阵,系数满足 $|i-j| > 2$ 时, $a_{ij} = 0$. 特别地,当

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) |c_1| > |d_1| + |e_1| > 0, \\ \quad d_1, e_1 \neq 0 \\ (2) |c_2| > |b_2| + |d_2| + |e_2|, \\ \quad b_2, d_2, e_2 \neq 0 \\ (3) |c_i| \geq |a_i| + |b_i| + |d_i| + |e_i|, \\ \quad a_i, b_i, d_i, e_i \neq 0, i = 3, 4, \dots, n-2 \\ (4) |c_{n-1}| > |a_{n-1}| + |b_{n-1}| + |d_{n-1}|, \\ \quad a_{n-1}, b_{n-1}, d_{n-1} \neq 0, \\ (5) |c_n| > |a_n| + |b_n| > 0, \\ \quad a_n, b_n \neq 0. \end{array} \right. \quad (2)$$

时, A 为对角占优矩阵,利用矩阵的直接三角分

解,将矩阵 A 分解为两个三角矩阵的乘积

$$A = LU, \quad (3)$$

其中 L 为下三角阵, U 为上三角阵,它们有如下的形式

$$L = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & & \\ z_3 & \gamma_3 & \alpha_3 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & z_{n-1} & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\ & & & z_n & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix},$$

$$U = \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & q_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & q_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & \beta_{n-2} & q_{n-2} \\ & & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

根据式(3)比较式(1),式(4)中系数矩阵的系数,不难看出

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 = \alpha_1, d_1 = \alpha_1 \beta_1, e_i = \alpha_i q_i, \\ \quad i = 1, 2, \dots, n-2 \\ b_2 = \gamma_2, b_i = z_i \beta_{i-2} + \gamma_i, \\ \quad i = 3, 4, \dots, n \\ c_2 = \gamma_2 \beta_1 + \alpha_2, c_i = z_i q_{i-2} + \gamma_i \beta_{i-1} + \alpha_i, \\ \quad i = 3, 4, \dots, n \\ z_i = \alpha_i, i = 3, 4, \dots, n \\ d_i = \gamma_i q_{i-1} + \alpha_i \beta_i, i = 2, 3, \dots, n-1. \end{array} \right. \quad (5)$$

容易证明矩阵 A 非奇异当且仅当 $\alpha_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$. 因此当 A 非奇异时可以实现矩阵 A 的 LU 分解. 从而原方程(1)等价于下面两个方程关于 x 求解

$$Ly = f \quad (6)$$

$$Ux = y \quad (7)$$

首先如下递推地求出特定系数:

$$\alpha_1 = c_1, \beta_1 = d_1/\alpha_1, \quad (8a)$$

$$\gamma_2 = b_2, \alpha_2 = c_2 - \gamma_2 \beta_1 \quad (8b)$$

$$q_i = e_i/\alpha_i, i = 1, 2, \dots, n-2, \quad (8c)$$

$$\beta_i = (d_i - \gamma_i q_{i-1})/\alpha_i, i = 2, 3, \dots, n-1, \quad (8d)$$

$$z_i = \alpha_i, i = 3, 4, \dots, n, \quad (8e)$$

$$\gamma_i = b_i - z_i \beta_{i-2}, i = 3, 4, \dots, n \quad (8f)$$

$$\alpha_i = c_i - z_i q_{i-2} - \gamma_i \beta_{i-1}, i = 3, 4, \dots, n, \quad (8g)$$

1) 设 $Ly = f$, 求 y . 算法如下:

$$y_1 = f_1/\alpha_1, \quad (9a)$$

$$y_2 = (f_2 - \gamma_2 y_1) / \alpha_2, \quad (9b)$$

$$y_i = (f_i - z_i y_{i-2} - \gamma_i y_{i-1}) / \alpha_i, i = 3, 4, \dots, n. \quad (9c)$$

2) 设 $Ux = y$, 求 x . 算法如下:

$$x_n = y_n \quad (10a)$$

$$x_{n-1} = y_{n-1} - \beta_{n-1} x_n, \quad (10b)$$

$$x_i = y_i - q_i x_{i+2} - \beta_i x_{i+1}, i = n-2, n-3, \dots, \quad (10c)$$

1.

步骤1) 称为“追”过程, 步骤2) 称为“赶”过程, 因此这个算法仍然称为追赶法. 追赶法的本质还是高斯消去法, 只是利用了带状稀疏矩阵的非零系数分布特点, 达到提高运算速度的目的. 同时从(8)~(10)也可以看到, 追赶法需要的内存也相当的少, 也是线性的.

2 运算量和占用内存的估算

2.1 运算量的估计

估计用追赶法求解五对角线性方程组的运算量.

- 1) 计算(8c) 大约需要 n 个乘法;
- 2) 计算(8d) 大约需要 $2n$ 个乘法和 n 个加法;
- 3) 计算(8f) 大约需要 n 个乘法和 n 个加法;
- 4) 计算(8g) 大约需要 $2n$ 个乘法和 $2n$ 个加法;
- 5) 计算(9c) 大约需要 $3n$ 个乘法和 $2n$ 个加法;
- 6) 计算(10c) 大约需要 $2n$ 个乘法和 $2n$ 个加法.

因此, 用追赶法求解 n 阶五对角线性方程组大约共需要 $11n$ 个乘法和 $8n$ 个加法, 其运算量级完全是线性的, 为 $O(11n)$. 已知高斯消去法的运算量是 $O(n^3/3)$. 可见当 n 较大时追赶法比高斯消去法的运算量大为减少. 对于迭代法, 追赶法同样有很大的优势, 以共轭梯度法为例, 估算用它求解一个 n 阶的线性方程组至少需要 $4n^3 + 6n^2 + 2n$ 个乘法和 $4n^3 + 6n^2 + n$ 个加法. 这样它的运算量级同样是 $O(4n^3)$ 的. 从原则上讲, 共轭梯度法经过 n 步的迭代一定能够得到精确解. 但是由于舍入误差的存在, 多步迭代将导致其基向量线性相关, 共轭梯度法并不能在 n 步时给出精确解. 可见追赶法比共轭梯度法速度要快. 对于其他的迭代法同样是这样.

2.2 占用内存的估计

由式(1), 存储 n 阶五对角线性方程组的系

数和右边向量需要 $6n$ 个存储单元, 由式(8), 计算系数 $\alpha_i; \beta_i; \gamma_i; q_i$ 需要 $4n$ 个存储单元, 由式(9), (10), 计算中间结果 y 和最终结果 x 需要 n 个存储单元. 这样, 解 n 阶五对角线性方程组共需要 $11n$ 个存储单元. 解方程所需的存储单元为线性的.

3 数值实验及与其他算法的比较

本文用 MATLAB 编程实现五对角线性方程组的求解, 用两个示例进行了数值实验, 并且将追赶法(febs)与高斯消去法(gauss), lu 分解法(lu), 不完全 lu 分解法(luinc), qr 分解法(qr), 最小残余法(minres), 广义最小残余法(gmres), 最小二乘法(lsqr), 高斯塞得尔迭代法(gseidel), 雅可比迭代法(jacobi), 共轭梯度法(cgs), 双共轭梯度法(bicgs), 稳定双共轭梯度法(bicgstab), 预处理共轭梯度法(pcg), 拟最小残余法(qmr)等进行了比较.

例1 设 n 阶五对角线性方程组(1)中系数矩阵对角占优但非对称, $a_i = 1; b_i = 2; c_i = 13; d_i = 4; e_i = 5; f_i = 10\ 000$, 此时系数矩阵的条件数为4. 用追赶法及以上各种算法对比实验, 计算结果见表1.

例2 设 n 阶五对角线性方程组(1)中系数矩阵是Grcar型的, $a_i = 0; b_i = -1; c_i = 1; d_i = 1; e_i = 1; f_i = 10\ 000$, 此时系数矩阵的条件数为7.0315. 用追赶法及各种算法对比实验. 在对比算法中, 使用了稀疏矩阵的算法, 因此这些算法的运算量比相应的稠密矩阵已经大为减少. 计算结果见表2.

从以上例子中, 看到追赶法的精度和速度都较好. 其普适性也较好. 尽管在例2中 $n = 10\ 000, 100\ 000$ 时最小二乘法的计算速度比追赶法快, 但精度却较低.

4 结论

从理论分析上看, 追赶法求解 n 阶五对角线性方程组的运算量已经达到了线性量级 $O(11n)$, 比典型的高斯消去法运算量级 $O(n^3/3)$ 大为减少. 比典型的共轭梯度法的运算效率同样有优势. 追赶法也极大地节约内存. 数值实验表明运算的速度与理论估计基本一致. 同时, 追赶法有较好的普适性, 当迭代法不收敛时追赶法仍有良好的计算性能. 计算精度达到 10^{-10} 量级. 此外算法实现也较容易.

表1 n 阶五对角非对称线性方程组的计算时间及绝对误差比较Table 1 The comparison of the computational time and the absolute errors for linear equations system with n order quinary diagonal asymmetric matrix

算法	$n = 1\ 000$			$n = 3\ 000$			$n = 5\ 000$		
	时间/s	L_{∞} 模	L_2 模	时间/s	L_{∞} 模	L_2 模	时间/s	L_{∞} 模	L_2 模
febs	0.019	$1.8e-12$	$5.5e-11$	0.04	$1.8e-12$	$9.8e-12$	0.14	$1.8e-12$	$1.3e-10$
gauss	2.73	$7.3e-12$	$5.8e-11$	119.72	$7.3e-12$	$1.0e-10$	716.93	$7.3e-12$	$1.3e-9$
lu	0.791	$1.8e-12$	$5.8e-12$	18.71	$1.8e-12$	$5.8e-12$	343.98	$1.8e-12$	$5.8e-12$
qr	6.27	$7.3e-12$	$9.4e-11$	171.21	$7.3e-12$	$1.7e-10$	838.25	$7.3e-12$	$2.2e-10$
gmres	1.23	$1.0e-5$	$2.8e-5$	7.62	$1.0e-5$	$2.8e-5$	46.39	$2.2e-5$	$5.6e-5$
lsqr	1.18	$6.6e-6$	$2.6e-5$	9.55	$1.1e-5$	$4.4e-5$	28.46	$1.1e-5$	$4.4e-5$
gseidel	3.21	$2.0e-11$	$4.9e-10$	65.91	$1.1e-11$	$5.9e-10$	内存溢出		
jacobi	3.23	$1.1e-3$	$3.2e-2$	245	$1.1e-3$	$5.9e-2$	内存溢出		
minres		发散			发散		发散		
cgs	1.96	$8.4e-6$	$1.5e-5$	5.7	$8.4e-6$	$1.5e-5$	10.25	$3.3e-5$	$6.3e-5$
bicg	1.69	$8.1e-6$	$1.7e-5$	11.14	$1.6e-5$	$3.3e-5$	55.2	$3.2e-5$	$6.5e-5$
bicgstab	1.1	$8.1e-6$	$1.7e-5$	7.39	$1.5e-5$	$3.2e-5$	26.46	$3.1e-5$	$6.3e-5$
pcg		发散			发散		发散		
qmr	0.89	$1.1e-5$	$2.0e-5$	13.53	$1.1e-5$	$4.4e-5$	28.46	$1.1e-5$	$4.4e-5$

表2 n 阶五对角 Grcar 线性方程组的计算时间及绝对误差比较Table 2 The comparison of the computational time and the absolute errors for linear equations system with n order quinary diagonal Grcar matrix

算法	$n = 1\ 000$			$n = 10\ 000$			$n = 100\ 000$		
	时间/s	L_{∞} 模	L_2 模	时间/s	L_{∞} 模	L_2 模	时间/s	L_{∞} 模	L_2 模
febs	0.019	$4.4e-11$	$5.7e-10$	0.56	$4.4e-11$	$1.8e-9$	61.67	$4.4e-11$	$5.6e-9$
gauss	0.48	$9.1e-13$	$1.4e-11$		内存溢出			内存溢出	
lu	0.030	$4.4e-11$	$6.3e-10$	0.99	$4.4e-11$	$2.1e-9$	91.17	$5.7e-13$	$7.9e-11$
luinc	0.07	$4.4e-11$	$6.3e-11$	4.24	$4.4e-11$	$2.1e-9$	420.87	$4.4e-11$	$6.5e-9$
qr	0.12	$4.4e-11$	$3.5e-10$	10.31	$4.4e-11$	$1.0e-9$	1106.66	$4.4e-11$	$3.3e-9$
gmres	0.82	$3.4e-6$	$2.9e-5$	4.86	$1.2e-5$	$9.8e-5$	175.45	$3.6e-5$	$2.9e-4$
lsqr	0.31	$1.2e-5$	$3.0e-5$	0.34	$2.8e-5$	$6.3e-5$	4.14	$1.1e-4$	$2.9e-4$
gseidel		发散			发散			发散	
jacobi		发散			发散			发散	
minres		发散			发散			发散	
cgs		发散			发散			发散	
bicg		发散			发散			发散	
bicgstab		发散			发散			发散	
pcg		发散			发散			发散	
qmr		发散			发散			发散	

参考文献:

- [1] 蔡大用, 白峰杉. 高等数值分析[M]. 北京: 清华大学出版社, 1997.
- [2] 李庆扬, 王能超, 易大义. 数值分析[M]. 北京: 施普林格出版社, 2001.
- [3] 李大潜. 物理学与偏微分方程[M]. 北京: 高等教育出版社, 2000.

- [4] 李立康, 於崇华, 朱政文. 微分方程数值解法[M]. 上海: 复旦大学出版社, 1999.
- [5] 李晓梅, 迟利华. 并行求解大型稀疏线性方程组的研究概况[J]. 指挥技术学院学报, 1999(6): 1-8.
- [6] 陈志, 高旅端. 求解大规模稀疏线性方程组的算法[J]. 北京工业大学学报, 2001(9): 262-265.