国防科技大学学报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
第11卷第1期　1989年8月　Vol.11,No.1

对称矩阵性态数的并行计算

李晓梅　何新芳
（计算机系）

摘要　本文针对对称矩阵 A 建立起性态数的并行计算公式，并通过数值试验得到了矩阵性态数变化对方程组 $Ax=b$ 的解的误差影响，同时进行了向量和标量计算，计算结果表明：当 n 大于等于300时，向量计算速度比标量计算速度快17倍。

关键词　对称矩阵，条件数，并行处理
分类号　D151.21，O241.6

1　对称矩阵性态数公式建立

在科学和工程计算中，由偏微分方程离散化后，往往得到一个大型稀疏线性方程组，它的解有时误差较大，其原因是多方面的。但有时问题来自于方程组本身，即系数矩阵元素的微小改变就可能引起方程组性质上的重大变化，这就是方程组性态数问题。它对方程组的数值解起着十分重要作用。

假设 A 为任一 n 阶对称矩阵，A 的性态数是指 A 的条件数的倒数，它由下式给出：

$$\mathrm{RCOND}(A)=\frac{1}{\|A\|*\|A^{-1}\|} \tag{1}$$

由(1)式知，计算RCOND(A)的关键在计算 $\|A^{-1}\|$。通常情况下，先求出 A^{-1}，然后计算 $\|A^{-1}\|$ 值，但当 A 奇异时，这种算法就会失效。下面给出一种计算 $\|A^{-1}\|$ 的近似方法，它的根据是：

$$\|A^{-1}\|=\sup_{\|y\|\neq 0}\frac{\|z\|}{\|y\|} \tag{2}$$

其中 $Az=y$。若能适当选择 y，使 $\|z\|/\|y\|$ 尽可能大，这时将 $\|z\|/\|y\|$ 作为 $\|A^{-1}\|$ 的估计值。即

$$\|A^{-1}\|\text{估计值}=\frac{\|z\|}{\|y\|} \tag{3}$$

从而有

$$\mathrm{RCOND}(A)=1/\|A\|(\|A^{-1}\|\text{估计值}) \tag{4}$$

下面在给出合适的 y 之前，先给出二个定理。

定理 1　假设 A 为 n 阶矩阵，$B=A^TA$，且有正交分解：

$$B=V^T\Sigma V \tag{5}$$

B 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$，它们满足 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n\geqslant0$，则有

1987年10月7日收稿

$$\|A\|_2=\lambda_1^{\frac{1}{2}},\quad \|A^{-1}\|_2=\lambda_n^{-\frac{1}{2}} \tag{6}$$

其中V为正交矩阵，$\Sigma=\mathrm{diag}(\lambda_i)$．证明略。

当A为对称矩阵时，则$\|A^{-1}\|_2=\lambda_n^{-1}$．

定理 2 设A为对称矩阵，任取初始向量$x^{(0)}$，作序列

$$Ax^{(K)}=x^{(K-1)},\quad K=1,2,\cdots \tag{7}$$

则当$K\to+\infty$时，成立

$$\|x^{(K)}\|_2/\|x^{(K-1)}\|_2\to\lambda_n^{-1} \tag{8}$$

其中λ_n^{-1}如前所述。

证明 设$U^{(i)}$是A的相应于λ_i的标准化特征向量，对任一初始向量$x^{(0)}$，将$x^{(0)}$按$U^{(i)}$展开

$$x^{(0)}=\alpha_1U^{(1)}+\alpha_2U^{(2)}+\cdots+\alpha_nU^{(n)}$$

由(7)式，当$K=1,2,\cdots,k,\cdots$时有

$$x^{(1)}=A^{-1}x^{(0)}=\alpha_1\lambda_1^{-1}U^{(1)}+\alpha_2\lambda_2^{-1}U^{(2)}+\cdots+\alpha_n\lambda_n^{-1}U^{(n)}$$

$$x^{(2)}=A^{-1}x^{(1)}=\alpha_1\lambda_1^{-2}U^{(1)}+\alpha_2\lambda_2^{-2}U^{(2)}+\cdots+\alpha_n\lambda_n^{-2}U^{(n)}$$

$$\cdots\cdots$$

$$x^{(k)}=A^{-1}x^{(k-1)}=\alpha_1\lambda_1^{-k}U^{(1)}+\alpha_2\lambda_2^{-k}U^{(2)}+\cdots+\alpha_n\lambda_n^{-k}U^{(n)}$$

$$=\lambda_n^{-k}\left[\alpha_1\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^kU^{(1)}+\alpha_2\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_2}\right)^kU^{(2)}+\cdots+\alpha_nU^{(n)}\right]$$

若$\alpha_n\neq0$，则在k充分大时有

$$x^{(k)}\approx\lambda_n^{-k}(\alpha_nU^{(n)}+\varepsilon_k) \tag{9}$$

其中ε_k是一个分量很小向量，于是有

$$\frac{\|x^{(k)}\|_2}{\|x^{(k-1)}\|_2}\approx\frac{\lambda_n^{-k}(\alpha_nU^{(n)}+\varepsilon_k)}{\lambda_n^{-k+1}(\alpha_nU^{(n)}+\varepsilon_{k-1})}\to\lambda_n^{-1} \tag{10}$$

当$\alpha_n=0$时，由于计算中舍入误差影响，在多次迭代后，也会出现$\alpha_n\neq0$，上述结论仍成立。定理 2 证毕。

定理 2 给出求λ_n^{-1}的一个近似方法。如果使用$\|x^{(k)}\|_2/\|x^{(k-1)}\|_2$作为$\lambda_n^{-1}$近似值，则需经过多次迭代。但是如果选择适当初始向量$x^{(0)}$，则不必经过多次迭代就可求得λ_n^{-1}较为理想近似值。若取

$$x^{(0)}=U^{(n)}$$

则由

$$Ax^{(1)}=x^{(0)}$$

有

$$x^{(1)}=\lambda_n^{-1}U^{(n)}$$

所以

$$\frac{\|x^{(1)}\|_2}{\|x^{(0)}\|_2}=\lambda_n^{-1} \tag{11}$$

因此可采用二步迭代过程求出$\|A^{-1}\|_2$近似值。

第一步：解方程

$$Ay=E \tag{12}$$

其中初始向量E的选择原则是使$\|y\|$尽可能大。

第二步：解方程

$$Az=y \tag{13}$$

这样就取$\|z\|_2/\|y\|_2$作为$\|A^{-1}\|_2$近似值。考虑到l_1范数与l_2范数的等价性，为计算方便，采用l_1范数，于是由(4)式有

$$\mathrm{RCOND}(A)=\frac{\|y\|_1}{(\|z\|_1*\|A\|_1)} \tag{14}$$

根据(12)式和(13)式，计算RCOND(A)按下面步骤实现。

第一步：计算ANORM$=\|A\|_1$.

第二步：分解$A=UDU^T$.

第三步：确定E，并解方程组$UDW=E$.

第四步：解方程组$U^Ty=W$.

然后将y归一化，1⇒YNORM.

第五步：解方程组 $UDV=y$，然后将V归一化，$1/\sum|V_i|$⇒YNORM.

第六步：解方程组 $U^Tz=V$，再将z归一化，$1/(\sum|V_i|*\sum|z_i|)$⇒YNORM.

第七步：计算 $\mathrm{RCOND}(A)=\dfrac{\mathrm{YNORM}}{\mathrm{ANORM}}$

将y、V、z归一化目的是为了避免计算过程中出现上溢。

2 对称矩阵性态数并行计算

2.1 求解方程组$UDW=E$并行计算

在分解式$A=UDU^T$中，U为上三角矩阵和排列矩阵的乘积

$$U^{-1}=U_1PU_2P_2\cdots U_nP_n$$

D为1×1或2×2块对角阵：$D=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$，$d_i$为1×1或2×2 矩阵，$U_i$是在分解过程中用到的上三角阵，它的形式是：

$$U_i=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & U_{1i} & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & \cdots & U_{2i} & 0 & \cdots & 0 \\ & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & 1 & 0 & & \vdots \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & & \vdots \\ & & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

或为

$$U_i=\begin{bmatrix}1 & 0 & \cdots & U_{1,i-1} & U_{1,i} & 0 & \cdots & 0\\ & 1 & \cdots & U_{2,i-1} & U_{2,i} & 0 & \cdots & 0\\ & & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots\\ & & 1 & & \vdots & \vdots & & \vdots\\ & & & & U_{i-1,i} & \vdots & & \vdots\\ & & & & 1 & 0 & & \vdots\\ & & & & & 1 & \ddots & 0\\ & & & & & & & 1\end{bmatrix}$$

P_i是在选主元过程中用到的排列矩阵。于是求解$UDW=E$就转化为求解

$$W=d_1^{-1}U_1P_1d_2^{-1}U_2P_2\cdots d_n^{-1}U_nP_nE \tag{15}$$

设$E=(e_1,e_2,\cdots,e_n)^T$，e_i取±1，其符号的决定与求解W同时进行，并遵循使W_{i1}尽可能大的原则。$Z=(z_1,z_2,\cdots,z_n)^T$为中间变量，用来记录已求出的W值，Z的初值为零。

设

$$Z^{(K)}=d_{K+1}^{-1}U_{K+1}P_{K+1}\cdots d_n^{-1}U_nP_nE \tag{16}$$

(15)式计算过程为：当K为n时，取$e_n=1$，计算

$$\begin{cases}\tilde{Z}^{(n)}=Z^{(n)}+\begin{bmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ e_n\end{bmatrix}\\ Z^{(n-1)}=U_nP_n\tilde{Z}^{(n)}\\ W_n=d_n^{-1}Z_n^{(n-1)}\end{cases} \tag{17}$$

一般情况下，假定已确定了$e_{K+1},e_{K+2},\cdots,e_n$的符号，并计算出了$W_{K+1},W_{K+2},\cdots,W_n$的值，再利用它们来确定$e_K$的符号，并计算$W_K$的值。即

$$e_K=\mathrm{sing}(Z_K^{(K)}),$$
$$\begin{cases}\tilde{Z}^{(K)}=Z^{(K)}+[0\ \cdots\ 0\ e_K\ 0\ \cdots\ 0]^T\\ Z^{(K-1)}=U_KP_K\tilde{Z}^{(K)}\\ W_K=d_K^{-1}Z_K^{(K-1)},\quad K=n,n-1,\cdots,1\end{cases} \tag{18}$$

实际计算中要考虑d_K阶数。若d_K为2×2阶矩阵，U_K为$K\times2$矩阵，这时d_{K-1},U_{K-1},P_{K-1}均不存在。因此在一次循环中要同时确定e_K，e_{K-1}的符号，并同时计算出W_K和W_{K-1}值。

设KPVT(K)为一个一维数组，KS表示步长，公式(18)并行计算步骤为下：

第一步：$n\Rightarrow K$，$1.\Rightarrow e_n$，$0\Rightarrow Z^{(n)}$.

第二步：若$K=0$，则$Z/\sum|Z_i|\Rightarrow Z$转出。

第三步：若KPVT(K)>0，则步长KS为1，否则KS为2.

第四步：若|KPVT(K)|$\neq K+1-KS$，计算$P_KZ^{(K)}$.

第五步：决定e_K符号，计算下列值

$$\begin{cases} \tilde{Z}_K^{(K)} = Z_K^{(K)} + e_K \\ \begin{bmatrix} Z_1^{(K-1)} \\ Z_2^{(K-1)} \\ \vdots \\ Z_{K-KS}^{(K-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_1^{(K)} \\ Z_2^{(K)} \\ \vdots \\ Z_{K-KS}^{(K)} \end{bmatrix} + \tilde{Z}_K^{(K)} \begin{bmatrix} U_{K,1} \\ U_{K,2} \\ \vdots \\ U_{K,K-KS} \end{bmatrix} \\ W_K = d_K^{-1} Z_K^{(K-1)} \end{cases} \tag{19}$$

第六步：若$KS=1$转第八步。

第七步：决定e_{K-1}符号，计算下列值：

$$\begin{cases} \tilde{Z}_{K-1}^{(K-1)} = Z_{K-1}^{(K-1)} + e_{K-1} \\ \begin{bmatrix} Z_1^{(K-2)} \\ Z_2^{(K-2)} \\ \vdots \\ Z_{K-KS}^{(K-2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_1^{(K-1)} \\ Z_2^{(K-1)} \\ \vdots \\ Z_{K-KS}^{(K-1)} \end{bmatrix} + \tilde{Z}_{K-1}^{(K-1)} \begin{bmatrix} U_{K-1,1} \\ U_{K-1,2} \\ \vdots \\ U_{K-1,K-KS} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} W_{K-1} \\ W_K \end{bmatrix} = d_K^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{Z}_{K-1}^{(K-2)} \\ \tilde{Z}_K^{(K-1)} \end{bmatrix} \end{cases} \tag{20}$$

然后转第九步执行。

第八步：若$|d_K|<|Z_K^{(K-1)}|$，则计算：

$$\begin{cases} S = |d_K| / |Z_k^{(k-1)}| \\ Z^{(k-1)} \Leftarrow S * Z_{\llcorner}^{(k-1)} \\ e_{K-1} = S * e_K \end{cases}$$

第九步：若$d_K=0$，则$Z_K^{(K-1)}=1$，否则 $Z_K^{(K-1)} \Leftarrow Z_K^{(K-1)}/d_K$

第十步：$K-KS \Rightarrow K$转第二步执行。

2.2　求解$U^T y = W$的并行计算

方程组$U^T y = W$的求解可转化为下式计算

$$y = (U^{-1})^T W = P_n^T U_n^T \cdots P_2^T U_2^T P_1^T U_1^T W \tag{21}$$

其中W为前一部份计算结果，并存放在中间向量Z中；P_i, U_i意义如前。公式(21)执行步骤如下：

第一步：$1 \Rightarrow K$.

第二步：若$K>n$，则转出。

第三步：若KPVT(K)>0，则$KS=1$，否则$KS=2$.

第四步：若$K=1$，则转第八步执行。

第五步：计算

$$Z_K^{(K)} = Z_K^{(K-1)} + (U_{K,1}, \cdots, U_{K,K-1}) [Z_1^{(K-1)} \ Z_2^{(K-1)} \ \cdots \ Z_{K-1}^{(K-1)}]^T$$

第六步：若$KS<2$则转第七步，否则计算

$$Z_{K+1}^{(K)} = Z_{K+1}^{(K-1)} + (U_{K+1,1}, \cdots, U_{K+1,K-1}) [Z_1^{(K-1)} \ Z_2^{(K-1)} \ \cdots \ Z_{K-1}^{(K-1)}]^T$$

第七步：若$|\mathrm{KPVT}(K)| \neq K$，计算$P_K^T Z^{(K)}$.

第八步：$K+KS \Rightarrow K$，转第二步。

y的结果值存放在中间向量z中，并将其归一化。

方程$UDV=y$和$U^TZ=V$的并行计算与方程$UDW=E$和$U^Ty=W$并行计算基本一致，不再重述。

3 数值试验分析

根据上面建立的对称矩阵性态数并行计算公式，作者相应地编制了标量和向量程序，并用希尔伯特矩阵作为例子进行数值试验，试验结果列在表1至表4中。

表1表明：当$n\geqslant300$时，希尔伯特矩阵的性态数RCOND(A)向量运算时间比标量运算时间快17倍以上。

表2表明：希尔伯特矩阵的性态数与方程组解的相对误差的关系。当$n\leqslant9$，RCOND(A)$\geqslant0.1237124\times10^{-11}$时，方程组的近似解$x^*$与精确解$x$的相对误差较小。当$n\geqslant11$，RCOND($A$)$\leqslant0.11\times10^{-14}$时，方程组的近似解$x^*$与精确解$x$相对误差较大。

表3与表4表明：当$n=15$和$n=20$时，希尔伯特矩阵对角元素的微小变化对其性态数和方程组解的相对误差的影响。从表中可以看出，对于病态方程组，可以在病态矩阵的对角元素上加上或减去一个较小的数ε，可改变病态矩阵的性态，使其对应的方程组的近似解接近于精确解。

表1 希尔伯特矩阵性态数的标量运算时间与向量运算时间的比较

N	标量运算时间(秒)	向量运算时间(秒)	速度增长倍数	N	标量运算时间(秒)	向量运算时间(秒)	速度增长倍数
50	0.301518	0.057908	5.2068	200	9.687889	0.692917	13.9813
100	1.566060	0.183914	9.5152	250	17.738898	1.104975	16.0537
150	4.169552	0.390361	11.4498	300	29.483760	1.644355	17.9303

表2 希尔伯特矩阵性态数与方程组解的相对误差关系

N	RCOND(A)	$\|(x-x^*)/x\|$范围
3	0.1460265×10^{-2}	$0.405\times10^{-12}\sim0.113\times10^{-11}$
4	0.1616086×10^{-4}	$0.597\times10^{-12}\sim0.752\times10^{-11}$
5	0.1110743×10^{-5}	$0.166\times10^{-10}\sim0.555\times10^{-9}$
6	0.4119433×10^{-7}	$0.227\times10^{-9}\sim0.302\times10^{-7}$
7	0.1347711×10^{-8}	$0.157\times10^{-8}\sim0.776\times10^{-6}$
8	0.4089836×10^{-10}	$0.148\times10^{-7}\sim0.353\times10^{-4}$
9	0.1237124×10^{-11}	$0.614\times10^{-8}\sim0.740\times10^{-4}$
10	0.3730658×10^{-13}	$0.1830\times10^{-6}\sim0.1019\times10^{-1}$
11	0.1081757×10^{-14}	$0.8952\times10^{-6}\sim0.2444$
12	0.1636616×10^{-16}	$0.5596\times10^{-4}\sim0.5584\times10^{2}$
13	0.1635942×10^{-16}	$0.1844\times10^{-4}\sim0.4087\times10^{2}$
14	0.5813181×10^{-17}	$0.3559\times10^{-5}\sim0.6571\times10^{2}$
15	0.2431533×10^{-17}	$0.1005\times10^{-3}\sim0.1833\times10^{3}$
20	0.1565312×10^{-16}	$0.3915\times10^{-5}\sim0.1133\times10^{2}$

表 3　$N=15$时，希尔伯特矩阵对角元素的变化对矩阵性态数和解的相对误差影响

$A(1,1)-\Delta$	RCOND(A)	$\lvert(x-x^*)/x\rvert$的范围
$\Delta=0.1$	0.1224247×10^{-2}	$0.203\times10^{-13}\sim0.909\times10^{-12}$
$\Delta=0.01$	0.3399790×10^{-4}	$0.380\times10^{-12}\sim0.276\times10^{-10}$
$\Delta=0.001$	0.3062721×10^{-4}	$0.490\times10^{-12}\sim0.397\times10^{-10}$
$\Delta=0.0001$	0.2486255×10^{-4}	$0.426\times10^{-13}\sim0.755\times10^{-10}$
$\Delta=0.00001$	0.2792027×10^{-5}	$0.915\times10^{-11}\sim0.549\times10^{-9}$
$\Delta=0.000001$	0.2880620×10^{-6}	$0.580\times10^{-10}\sim0.826\times10^{-8}$
$\Delta=0.0000001$	0.8762202×10^{-8}	$0.156\times10^{-8}\sim0.207\times10^{-6}$

表 4　$N=20$时，希尔伯特矩阵对角元素的变化对矩阵性态数和解的相对误差影响

$\Delta(1,1)-\Delta$	RCOND(A)	$\lvert(x-x^*)/x$的范围
$\Delta=0.1$	0.6930386×10^{-2}	$0.598\times10^{-14}\sim0.284\times10^{-12}$
$\Delta=0.01$	0.1247747×10^{-2}	$0.766\times10^{-12}\sim0.881\times10^{-10}$
$\Delta=0.001$	0.5665486×10^{-4}	$0.214\times10^{-12}\sim0.118\times10^{-10}$
$\Delta=0.0001$	0.3169041×10^{-6}	$0.890\times10^{-10}\sim0.394\times10^{-8}$
$\Delta=0.00001$	0.9845966×10^{-6}	$0.1882654\times10^{-10}\sim0.175\times10^{-8}$
$\Delta=0.000001$	0.1423549×10^{-6}	$0.629\times10^{-10}\sim0.151\times10^{-7}$
$\Delta=0.0000001$	0.2413323×10^{-7}	$0.319\times10^{-9}\sim0.675\times10^{-7}$

参考文献

[1] J R Bunch and L Kautman. Some Stable Methods for calculating Inertia and Solving Symmetrie Liner Systems, Math. Comp., 1977; 31: 163～179

[2] 齐治昌. 数值分析及其应用. 国防科技大学出版社, 1987

Parallel Computation for the Conditional number of Symmetric Matrix

Li Xiaomei　He Xinfang

Abstract

A parallel computing formula for the conditional number of symmetric matrix A is presented. the facts for The change of the conditional number of symmetric matrix A affecting the solution of $Ax=b$ are observed. The results of the computation show that the velocity for vector compututìon is 17 times faster than that of scalar computation with $n\geqslant300$.

key words: symmetric matrix, condition number, parallel processing