

三对角矩阵求逆的算法*

冉瑞生¹, 黄廷祝², 刘兴平³, 谷同祥³

(1. 中冶赛迪工程技术股份有限公司 自动化事业部, 重庆 400013;

2. 电子科技大学 应用数学学院, 成都 610054;

3. 北京应用物理与计算数学研究所 计算物理国家级重点实验室, 北京 100088)

(刘曾荣推荐)

摘要: 研究了一般的非奇三对角矩阵的求逆, 并给出了一个求逆矩阵的简单算法. 首先研究了具有 Doolittle 分解的三对角矩阵的求逆, 得到一个求逆的算法, 然后将该算法推广到一般的非奇三对角矩阵上. 最后给出了该算法与其它求逆方法的比较, 可以看到该算法一方面计算量低, 另一方面适用于不需任何附加条件的一般的非奇三对角矩阵.

关键词: 三对角矩阵; 逆矩阵; Doolittle 分解

中图分类号: O241.6 **文献标识码:** A

引言

三对角矩阵经常出现在许多数学和物理问题中. 如在数值分析中的三次样条插值、三项差分方程, 以及热传导方程的数值解等问题都涉及到三对角矩阵. 在三对角矩阵的有关问题中, 如何求出三对角矩阵的逆矩阵, 一直是研究者们关注的问题. 目前已有一些研究三对角矩阵求逆的成果^[1-4].

文中, 为了讨论的方便, 记三对角矩阵为

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & \\ & & & a_n & b_n & \end{pmatrix}, \quad (1)$$

且定义 n 个数:

$$\alpha_1 = b_1, \quad \alpha_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \quad (i = 2, \dots, n).$$

* 收稿日期: 2008-05-12; 修订日期: 2008-11-27

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10771030); 教育部科学技术研究资助重点项目(107098); 高校博士点专项科研基金资助项目(20070614001); 四川省应用基础研究资助项目(2008JY0052)

作者简介: 冉瑞生(1976—), 男, 重庆人, 工程师, 博士(联系人. Tel: + 86-23-63547281; E-mail: RuiSheng.Ran@cisdi.com.cn);
黄廷祝(Tel: + 86-28-83202673; E-mail: tzhuang@uestc.edu.cn).

$$\begin{cases} \alpha_1 p_{1k} + \beta_1 p_{2k} = 0, \\ \alpha_2 p_{2k} + \beta_2 p_{3k} = 0, \\ \vdots \\ \alpha_{k-1} p_{k-1,k} + \beta_{k-1} p_{kk} = 0. \end{cases}$$

并将 $p_{kk} = 1/\alpha_k$ 代入上方程组并递推可得

$$p_{ik} = (-1)^{k-i} \prod_{l=i}^{k-1} \frac{\beta_l}{\alpha_l} p_{kk} = (-1)^{k-i} \alpha_k^{-1} \prod_{l=i}^{k-1} \tau_l \quad (i = 1, \dots, k-1).$$

当固定脚标 i 而让 k 分别取值为 $1, \dots, i, \dots, n$ 时, 矩阵 P 的第 i 行的元素即可得到.

引理 1.3 设 L 是形如引理 1.1 中的非奇下二对角矩阵, 记 $Q = (q_{ij}) = L^{-1}$, 则 Q 的第 j ($j = 1, 2, \dots, n$) 列元素可表示为

$$q_{kj} = 0 \quad (k < j), \quad q_{kj} = (-1)^{k-j} \prod_{l=j}^{k-1} \gamma_{l+1} \quad (k \geq j).$$

引理 1.4^[1] 设 $\alpha_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$), 则 $\det(A) = \prod_{i=1}^n \alpha_i$.

2 三对角矩阵的逆

定理 2.1 设 A 是形如式(1)的三对角矩阵, 且满足 $\alpha_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 则 A 是可逆的. 记 $C = (c_{ij}) = A^{-1}$, 则 c_{ij} 可表达为

$$c_{ij} = (-1)^{i+j} \sum_{k=\max(i,j)}^n [\alpha_k^{-1} (\prod_{l=i}^{k-1} \tau_l) (\prod_{l=j}^{k-1} \gamma_{l+1})] \quad (i, j = 1, 2, \dots, n). \quad (2)$$

证明 由引理 1.4 知, 矩阵 A 是可逆的. 由引理 1.1 至引理 1.3, 有 $C = A^{-1} = PQ$. 注意到 P, Q 分别是上、下三角矩阵, P 的第 i 行和 Q 的第 j 列可分别写作

$$p_i = (0, \dots, 0, p_{i\bar{i}}, \dots, p_{in}), \quad q_j = (0, \dots, 0, q_{j\bar{j}}, \dots, q_{nj})^T.$$

根据引理 1.2 和引理 1.3, 若 $i \geq j$, 可知

$$\begin{aligned} c_{ij} &= \sum_{k=i}^n p_{ik} q_{kj} = \sum_{k=i}^n [(-1)^{k-i} \alpha_k^{-1} \prod_{l=i}^{k-1} \tau_l] [(-1)^{k-j} \prod_{l=j}^{k-1} \gamma_{l+1}] = \\ &(-1)^{i+j} \sum_{k=i}^n [\alpha_k^{-1} (\prod_{l=i}^{k-1} \tau_l) (\prod_{l=j}^{k-1} \gamma_{l+1})]. \end{aligned}$$

对 $i < j$ 的情形可以类似证明.

考虑表达式(2)的结构特征, 我们可以发现逆元素之间的简单递推关系式.

定理 2.2 设 A 是形如式(1)的三对角矩阵, 且 $\alpha_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$). 记 $C = (c_{ij}) = A^{-1}$, 则逆元素 c_{ij} 具有下面的递推关系式:

$$\begin{aligned} c_{nn} &= \frac{1}{\alpha_n}, \quad c_{ii} = \frac{1}{\alpha_i} + \tau_i \gamma_{i+1} c_{i+1, i+1} \quad (i = n-1, \dots, 2, 1), \\ c_{ij} &= -\gamma_{j+1} c_{i, j+1} \quad (j = i-1, \dots, 2, 1; i = n, \dots, 2), \\ c_{ji} &= -\tau_j c_{j+1, i} \quad (j = i-1, \dots, 2, 1; i = n, \dots, 2). \end{aligned}$$

证明 1) 因 $C = A^{-1} = PQ$, 显然有 $c_{nn} = 1/\alpha_n$. 由定理 3.1 有

$$\begin{aligned} c_{ii} &= \sum_{k=i}^n [\alpha_k^{-1} (\prod_{l=i}^{k-1} \tau_l) (\prod_{l=i}^{k-1} \gamma_{l+1})] = \frac{1}{\alpha_i} + \sum_{k=i+1}^n [\alpha_k^{-1} (\prod_{l=i}^{k-1} \tau_l) (\prod_{l=i}^{k-1} \gamma_{l+1})] = \\ &\frac{1}{\alpha_i} + \tau_i \gamma_{i+1} \sum_{k=i+1}^n [\alpha_k^{-1} (\prod_{l=i+1}^{k-1} \tau_l) (\prod_{l=i+1}^{k-1} \gamma_{l+1})] = \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\alpha_i} + \tau_i \gamma_{i+1} c_{i+1, i+1} \quad (i = n-1, \dots, 2, 1).$$

2) 由定理 2.1, 对于 C 的第 i 行且位于主对角线元素 c_{ii} 左边的元素 c_{ji} ($j < i$), 有下面的递推关系式:

$$\begin{aligned} c_{ji} &= (-1)^{i+j} \sum_{k=i}^n \left[\alpha_k^{-1} \left(\prod_{l=i}^{k-1} \tau_l \right) \left(\prod_{l=j}^{k-1} \gamma_{l+1} \right) \right] = \\ &= -(-1)^{i+(j+1)} \sum_{k=i}^n \left[\alpha_k^{-1} \left(\prod_{l=i}^{k-1} \tau_l \right) \left(\prod_{l=j+1}^{k-1} \gamma_{l+1} \cdot \gamma_{j+1} \right) \right] = \\ &= -\gamma_{j+1} \left\{ (-1)^{i+(j+1)} \sum_{k=i}^n \left[\alpha_k^{-1} \left(\prod_{l=i}^{k-1} \tau_l \right) \left(\prod_{l=j+1}^{k-1} \gamma_{l+1} \right) \right] \right\} = \\ &= -\gamma_{j+1} c_{i, j+1} \quad (j = i-1, \dots, 2, 1; i = n, \dots, 2). \end{aligned}$$

3) 类似地可以证明, 对于 C 的第 i 列且位于主对角线上元素 c_{ii} 上方的元素 c_{ji} ($j < i$), 有

$$c_{ji} = -\tau_j c_{j+1, i} \quad (j = i-1, \dots, 2, 1; i = n, \dots, 2).$$

由定理 2.2, 我们可给出如下三对角矩阵求逆的算法.

算法 2.1

步骤 1 输入三对角矩阵 A 的元素

$$a_i (i = 2, \dots, n), b_i (i = 1, 2, \dots, n), c_i (i = 1, \dots, n-1).$$

步骤 2 赋初值 $\alpha_1 = b_1$; 计算

$$\tau_{i-1} = \frac{c_{i-1}}{\alpha_{i-1}}, \alpha_i = b_i - a_i \tau_{i-1}, \gamma_i = \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} \quad (i = 2, \dots, n),$$

如果对某个 $i (1 \leq i \leq n-1)$ $\alpha_i = 0$, 输出“失败”, 停机;

否则, 如果 $\alpha_n = 0$, 输出“矩阵是奇异的”, 停机;

否则转到步骤 3.

步骤 3 设逆矩阵为 $C = (c_{ij})$, 赋初值 $c_{nn} = 1/\alpha_n$.

步骤 4 计算逆矩阵 C 的主对角线上的元素

$$c_{ii} = \frac{1}{\alpha_i} + \tau_i \gamma_{i+1} c_{i+1, i+1} \quad (i = n-1, \dots, 2, 1).$$

步骤 5 计算第 i 行且位于主对角线元素 c_{ii} 左边的元素

$$c_{ij} = -\gamma_{j+1} c_{i, j+1} \quad (i = n, n-1, \dots, 2; j = i-1, \dots, 1)$$

及第 i 列且位于主对角线上元素 c_{ii} 上方的元素

$$c_{ji} = -\tau_j c_{j+1, i} \quad (i = n, n-1, \dots, 2; j = i-1, \dots, 1).$$

步骤 6 输出逆矩阵 C .

算法 2.1 的乘除计算量估计如下: A 的 LU 分解的乘除计算量约为 $3n-3$; 计算逆矩阵主对角线上的元素的乘除计算量约为 $3n-2$; 计算主对角线上方和下方的元素的乘除计算量分别约为 $(n-1) + \dots + 2 + 1 = n(n-1)/2$, 所以该算法的乘除计算总量约为 $n^2 + 5n - 5$. 注意到上述的讨论局限在条件 $\alpha_i \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$ 下. 然而当对某个 $i (1 \leq i \leq n-1)$, $\alpha_i = 0$ 时, 矩阵 A 的 LU 分解不存在, 但矩阵 A 仍然可能是非奇的. 此时, 算法 2.1 也不成立. 对于这样的情形, 文献[1]给出了一个技巧并建立了求逆矩阵的方法. 这里, 利用文献[1]的方法, 对算法 2.1 作适当的改进, 我们可以建立一个一般的非奇三对角矩阵求逆的算法.

算法 2.2

步骤 1 按算法 2.1 的步骤 2 计算数列 $\{\tau_i\}$, $\{\alpha_i\}$ 和 $\{\gamma_i\}$ 的值, 如果对某 $i (i \leq n-1)$ 有

$\alpha_i = 0$, 设 $\alpha_i = x$ 并继续计算剩下的 $\tau_k, \alpha_k, \gamma_k (i < k \leq n)$.

步骤 2 计算并简化多项式 $P(x) = \prod_{i=1}^n \alpha_i$. 如果多项式 $P(x)$ 的常数项为 0, 停机(此时矩阵 A 是奇异的); 否则转到步骤 3.

步骤 3 按算法 2.1 的步骤 3~5 继续计算, 可给出与 x 有关的矩阵 $C(x)$.

步骤 4 对矩阵 $C(x)$, 令 $x = 0$, 得矩阵 $C = C(0)$, 则 C 即为所求的逆矩阵.

从算法 2.2 的实现过程可知, 其乘除计算量与算法 2.1 相同, 仍为 $n^2 + 5n - 5$. 下面的算例给出了算法 2.2 对一般的非奇三对角矩阵求逆的过程. 设

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & & & \\ 1 & 3 & 2 & & \\ & -1 & -1 & 1 & \\ & & & -1 & 1 \\ & & & & -1 & 1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -2 & 2 & 1 & & \\ & 1 & 2 & 3 & \\ & & & -1 & -3 \end{pmatrix}.$$

由算法 2.2, 当计算 $\alpha_i, \tau_i, \gamma_i$ 时, 对于矩阵 $A, \alpha_3 = 0$. 令 $\alpha_3 = x$, 继续计算余下的 $\alpha_4, \tau_4, \gamma_4$, 并且可得矩阵 A 的多项式为 $P(x) = 2(x+1)$; 对于矩阵 $B, \alpha_4 = x$, 可得 B 的多项式为 $P(x) = 2x$. 于是可以断定矩阵 A 是非奇的且 $\det(A) = 2$, 而矩阵 B 奇异.

对于矩阵 A , 继续执行算法 2.2 中的第 3 步可以给出矩阵 $C(x)$,

$$C(x) = \frac{1}{2(1+x)} \begin{pmatrix} 2+3x & -x & 2 & -2 \\ -x & x & -2 & 2 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & 2x \end{pmatrix}.$$

令 $x = 0$, 可得矩阵 A 的逆

$$A^{-1} = C(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ -0.5 & 0.5 & 1 & -1 \\ -0.5 & 0.5 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

3 数值例子及比较

文献[1]的算法的计算复杂度为 $n^3/6 + O(n^2)$. 对于大型矩阵, 其计算量是相当大的. 本文算法的计算复杂度约为 $n^2 + 5n - 5$. 一般说来, 三对角矩阵的逆矩阵是一个满矩阵, 其 n^2 个元素均需要计算, 故该算法的计算复杂度为最小. 可见, 虽然两种算法均适用于没有限制条件的一般三对角矩阵, 但本文提出的算法所需的计算量是很小的.

近年来所提出的三对角矩阵求逆的方法, 一般说来都必须满足一定的限制条件. 如文献[3]的方法要求矩阵 A 的所有顺序主子式均非零; 文献[4]的求逆方法要求矩阵必须是不可约的. 与这些方法相比, 本文的方法不需要任何限制条件, 适用于一般的三对角矩阵. “追赶法”是三对角矩阵求逆的常用方法, 且易知追赶法的乘除计算量约为 $5n^2/2 + 3n/2 - 3$.

对 $\alpha_i \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$ 的情形, 我们用 MATLAB 对算法 2.1 和追赶法编程做数值计算, 见下面的例 3.1; 对于某个 $i (1 \leq i \leq n-1), \alpha_i = 0$ 的情形, 我们可用算法 2.2 计算. 此时, 因 LU 分解不能执行, “追赶法”也失效. 但可类似算法 2.2 对“追赶法”做改进. 我们采用 MATLAB 的“符号计算”对算法 2.2 和“追赶法”编程并做了比较, 见下面的例 3.2. 由于 MATLAB 的符号计算相对数值计算所需的运行时间较长, 该例中测试矩阵的阶数较小. 此外, 由于文献

[1]中算法的计算量远大于本文方法和“追赶法”的计算量,所以文中并未列出比较。

为方便起见,我们约定表1、表2的记号为: T_{LU} 和 $T_{Catchup}$ 分别表示本文的算法和“追赶法”求逆所需的计算时间, $T = T_{LU}/T_{Catchup}$ 表示两种方法的计算时间比, e_{LU} 和 $e_{Catchup}$ 分别表示两种方法求逆的误差。

例 3.1 设测试矩阵为

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 4 & 1 \\ & & & 2 & 4 \end{pmatrix},$$

矩阵 A 的阶数为 n 。这种矩阵经常出现在满足某种边值条件的样条插值问题中^[6]。这里,我们分别令 $n = 200, 500, 800, 1\ 000$, 用算法 2.1 和追赶法求其逆矩阵。表 1 给出了两种方法的计算时间和误差的比较。

表 1 计算时间和误差的比较

n	T_{LU}/s	$T_{Catchup}/s$	T/s	e_{LU}	$e_{Catchup}$
200	0.010 0	0.020 0	0.500 0	2.228 6 E-16	2.273 4 E-16
500	0.055 1	0.100 0	0.551 0	2.565 9 E-16	2.731 4 E-16
800	0.140 0	0.251 0	0.560 0	2.863 2 E-16	2.532 5 E-16
1 000	0.240 0	0.430 0	0.558 1	2.754 6 E-16	2.636 9 E-16

例 3.2 本例中我们构造了如下的测试矩阵:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 1 & 2 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix},$$

构造的目的在于使某个 $\alpha_i = 0, i \leq n-1$ 。其中,省略号部分的主对角线上方、下方的元素分别取自区间 $[-2, -1], [1, 2]$ 的随机数,主对角线上的元素大于该行非主对角线上元素的和。当用算法 2.2 计算 $\alpha_i, \tau_i, \gamma_i$ 的值时, $\alpha_3 = 0$ 。在 MATLAB 中,我们用“符号计算”编程,分别取 $n = 30, 50, 80, 100$ 。实验结果见表 2。

表 2 计算时间和误差的比较

n	T_{LU}/s	$T_{Catchup}/s$	T/s	e_{LU}	$e_{Catchup}$
30	23.335	41.182	0.566 6	2.259 9 E-16	2.221 4 E-16
50	109.13	218.08	0.500 4	2.267 6 E-16	2.136 5 E-16
80	648.11	1 128.9	0.574 1	2.243 5 E-16	2.221 3 E-16
100	1 460.7	2 978.6	0.490 4	2.263 8 E-16	2.122 5 E-16

[参 考 文 献]

- [1] El-Mikkawy M E A. On the inverse of a general tridiagonal matrix[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2004, 150(3): 669-679.
- [2] Ranjan K M. The inverse of a tridiagonal matrix[J]. *Linear Algebra and Its Applications*, 2001, 325

- (1/3):109-139.
- [3] Meurant G. A review on the inverse of symmetric tridiagonal and block tridiagonal matrices[J]. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 1992, 13(3):707-728.
- [4] Nabben R. Decay rates of the inverse of nonsymmetric tridiagonal and band matrix[J]. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 1999, 20(3):820-837.
- [5] El-Mikkawy M E A. An algorithm for solving tridiagonal systems[J]. *Journal of Institute of Mathematics and Computer Sciences*, 1991, 4(2):205-210.
- [6] 丁丽娟. 数值计算方法[M]. 北京:北京理工大学出版社, 1997, 113-115.

Algorithm for the Inverse of a General Tridiagonal Matrix

RAN Rui-sheng¹, HUANG Ting-zhu², LIU Xing-ping³, GU Tong-xiang³

(1. Automation Department, CISDI Engineering Co., Ltd., Chongqing 400013, P. R. China;

2. School of Applied Mathematics, University of Electronic Science and
Technology of China, Chengdu 610054, P. R. China;

3. Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational
Mathematics, Beijing 100088, P. R. China)

Abstract: An algorithm for the inverse of a general tridiagonal matrix is presented. First, for the tridiagonal matrix having Doolittle factorization, an algorithm for the inverse was established. Then the algorithm was generalized to a general tridiagonal matrix without any restrictive condition. Some comparison with other methods for the inverse was discussed in the end. It is shown that the arithmetic operations of the algorithm are low and it is applicable to a general tridiagonal matrix.

Key words: tridiagonal matrix; inverse; Doolittle factorization