文章编号: 1001－411X(2001)04－0092－03

病态线性方程组的新解法: 误差转移法

胡圣荣, 罗锡文
(华南农业大学 工程技术学院, 广东 广州 510642)

摘要: 提出了一种求解病态线性方程组的简便有效的新算法, 它的主要思想是将直接求解法中的计算误差转移到一个中间量上, 从而使得最终解获得很好的精度, 因此可极大地缓解一般算法条件预优的困难以及病态方程组的求解难度. 数值计算的结果表明, 算法对极其病态的线性方程组也可获得较好的精度和稳定性.

关键词: 线性方程组; 病态方程; 误差分析
中图分类号: O241.6　　文献标识码: A

对于线性方程组

$$\boldsymbol{A}x = b, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{A}=[a_{ij}]$ 为 $n\times n$ 非奇异矩阵, x、b 为 n 维列向量. 当系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数很大时, 计算中的舍入误差常常造成解的巨大误差, 这时方程组(1)为病态方程组. 常规的一些方法, 如均衡处理、选主元法等, 对病态问题几乎无能为力. 方程组的病态问题严重影响了计算结果的准确性和可靠性, 人们一直在寻找有效的解法. 现在已有的很多解法, 如条件预优法、迭代校正法、投影法、递推法、刚性常微分方程法、遗传算法等等, 从算法的简便性、有效性上看, 很多并不理想, 如有的算法有效性较好但比较复杂; 有的算法实际上只能处理病态程度不太严重、问题规模较小的问题, 当问题的规模增大、病态程度加剧时, 解的精度会十分明显甚至急剧下降等等.

本文提出了一种求解病态线性方程组的新思想, 它不是主要依靠降低直接求解中的误差来提高解的精度, 而是将主要误差转移到另一中间量上, 而所需最终解有较好的精度, 并给出了一个具体的算法, 整个过程仅仅用到了常规的均衡处理、选主元法等技巧.

1　算法思想

为介绍算法的思想, 首先分析一个典型病态问题(见后文例 1), 取阶数 $n=20$, 采用常规列主元三角分解法求解, 计算结果列于表 1, 其中余量的定义为

$$r = b - \boldsymbol{A}x, \tag{2}$$

从表 1 可见, 与准确解 $x=\{1, 1, \cdots 1\}^T$ 相比, 计算解一位有效数值都没有; 但尽管如此, 余量却很小,

表 1　计算解和误差

Tab. 1　Numerical solution and its error

i	x_i	r_i
1	0.100 0E+01	－0.444 1E－15
2	0.100 0E+01	－0.177 6E－14
3	0.997 6E+00	－0.444 1E－15
4	0.102 9E+01	0.133 2E－14
5	0.850 7E+00	0.222 0E－15
6	0.973 9E+00	0.244 2E－14
7	0.490 7E+01	0.155 4E－14
8	－0.192 1E+02	0.888 2E－15
9	0.530 5E+02	0.177 6E－14
10	－0.764 2E+02	－0.444 1E－15
11	0.732 1E+02	－0.222 0E－15
12	－0.578 9E+02	－0.666 1E－15
13	0.539 7E+02	0.333 1E－15
14	0.146 4E+01	－0.111 0E－15
15	－0.812 9E+02	0.333 1E－15
16	0.491 7E+02	－0.333 1E－15
17	0.944 1E+02	－0.888 2E－15
18	－0.150 0E+03	－0.111 0E－14
19	0.847 6E+02	－0.333 1E－15
20	－0.160 0E+02	－0.111 0E－15

$\| r \| = 0.244\,2E-14$, 这说明虽然计算解的误差很大, 但它却能比较准确地满足原方程组(1). 这一现象可从事后误差估计式[1]

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leqslant \| \boldsymbol{A}^{-1} \| \| \boldsymbol{A} \| \frac{\| r \|}{\| \boldsymbol{A} \|}, \tag{3}$$

得到解释: 计算解的误差界不仅依赖于余量的大小, 还依赖于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数, 对病态问题, 即使余量很小, 但条件数很大, 所得解误差仍可能很大. 本例的系数矩阵为 Hilbert 矩阵, 这是一个典型的病态矩阵,

收稿日期: 2001－04－19　　作者简介: 胡圣荣(1967－), 男, 副教授, 博士.
基金项目: 广东省自然科学基金资助项目(994151)

其谱条件数 $\mathrm{cond}(H_n)_2 \approx e^{3.5n}$[2]，随阶数成指数增长，即使阶数不高就已极其病态了，对此例 $\mathrm{cond}(H_{20})_2 \approx O(10^{30})$，计算中的舍入误差被条件数作用后导致解的巨大误差，所得解是无效的.

2 算法设计

由于方程组的计算解即使精度不高，也可获得相对较小的余量，本文利用这一特点，设计如下病态问题的解法. 设方程组(1)的计算解为 x^r，既然

$$b = \boldsymbol{A}x^r. \tag{4}$$

对误差很大的解 x^r 也能比较准确地成立，因而如果求解

$$x^* = \boldsymbol{C}y^r, \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{C}$ 为 $n\times n$ 非奇异矩阵，则即使计算解 y^r 误差较大，也能通过(5)式得到比较准确的 x^*. 由于 x^* 未知，(5)式并不能直接求解，但从(1)式有

$$\boldsymbol{A}x^* = b. \tag{6}$$

(5)式可转化为求解

$$\boldsymbol{A}x^* = b = \boldsymbol{AC}y^r. \tag{7}$$

于是可求出 y^r，再由(5)式得到原问题的解.

在这种解法中，问题的病态性固然会导致解的巨大误差，但这种误差直接反映在 y^r 上，对 x^* 的影响则小得多，如同主要误差从原来的 x^* 转移到中间量 y^r 上了，故不妨称该算法为"误差转移法".

在式(5)、(7)中矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的选取将直接影响到算法的有效性，例如，如果取 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{I}$，则相当于直接求解原方程组(1)，所得解将不会有任何改进；如果取 $\boldsymbol{C}=\mathrm{diag}\{d_1^{-1}, d_2^{-1}, \cdots d_n^{-1}\}$，$d=\sum_{i=1}^{n}\max(a_{i,j})$，则相当于对系数矩阵进行列均衡(条件预优)，这通常有一定的效果(但也经常失效). 本文取 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}^T$ 实际效果较好.

此时方程组(7)的系数为 $\boldsymbol{AA}^T$，由于对称，实际只需计算对角线以上(或以下)的元素，另外，求解时还可利用对称解法以提高求解效率.

在计算 $\boldsymbol{AA}^T$ 时可能由于矩阵元素较大而出现溢出，以及考虑到均衡处理常常有一定的效果，故在具体计算前，先对原方程组(1)分别进行一次行列均衡处理，由此得到如下算法:

(a)对方程组(1)进行一次行均衡处理:

$$QAx = Qb, \tag{8a}$$

其中，$Q=\mathrm{diag}\{q_1^{-1}, q_2^{-1}, \cdots, q_n^{-1}\}$，$q_i=\sum_{j=1}^{n}\max(\boldsymbol{A})_{i,j}$.

(b)对方程组(8a)进行一次列均衡处理:

$$\begin{cases}(\boldsymbol{QA})\boldsymbol{P}y = (\boldsymbol{Q}b) \\ x = \boldsymbol{P}y\end{cases}, \tag{8b}$$

其中，$\boldsymbol{P}=\mathrm{diag}\{p_1^{-1}, p_2^{-1}, \cdots, p_n^{-1}\}$，$p_j=\sum_{i=1}^{n}\max(\boldsymbol{QA})_{i,j}$.

(c)形成方程组

$$\begin{cases}(\boldsymbol{QAP})(\boldsymbol{QAP})^T z = \boldsymbol{Q}b \\ y = (\boldsymbol{QAP})^T z\end{cases}, \tag{8c}$$

(d)采用通用对称分解法[3]解方程组(8c)，

(e)计算

$$x = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{QAP})^T z. \tag{9}$$

上面对方程组(8c)的求解采用了笔者提出的对任意对称线性方程组都有效的通用对称解法，因为常见的对称解法，如对称高斯消元法、改进平方根法等，有时在计算中会遇到对角元为零的情况而中断.

在以上算法中，行、列均衡的计算量为 $O(n^2)+O(n^2)$，求系数矩阵 $\boldsymbol{AA}^T$ 的计算量为 $O(n^3/2)$，方程组对称分解法的计算量为 $O(n^3/6)$，故整个算法算量约为 $O(n^2)+O(n^2)+O(n^3/2)+O(n^3/6)\approx O(2n^3/3)$，比普通直接法如高斯消元、三角分解等大 1 倍左右.

3 算例及计算结果

为了检验计算法的有效性，本文计算了如下 3 个典型问题:

例 1. $a_{ij}=1/(i+j-1)$ $(i, j=1, 2, \cdots, n)$,

例 2. $a_{1j}=1, a_{j1}=1$ $(j=1, 2, \cdots, n)$,

$a_{ij}=a_{i-1j}+a_{ij-1}$ $(i, j=2, 3, \cdots, n)$,

例 3. $a_{ij}=\max(i, j)$ $(i, j=1, 2, \cdots, n)$.

以上 3 例中，例 1 的系数矩阵为 Hilbert 矩阵，例 2 的系数矩阵为 Pascal 矩阵，它们是典型的病态矩阵，当阶数不太高时(如 10 阶内)病态程度就已相当严重，并且随阶数的增加，病态程度的增长非常剧烈；例 3 是非病态方程组. 由于系数矩阵病态时，方程组的计算解不是一定会有很大误差，这要求右端项的取法不能太特殊[4]，否则这样的算例难以说明病态算法的有效性. 这里将 3 个例子分别取 $b_i=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}(i=1, 2, \cdots, n)$和 $b_i=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}\times j(i=1, 2, \cdots, n)$，显然准确解分别为 $x=\{1, 1, \cdots, 1\}^T$ 和 $x=\{1, 2, \cdots, n\}^T$. 计算结果见表 2.

表 2　解的有效数字位数

Tab. 2　Number of significant digits

阶数 order	例 1 example 1 $x_i=1$	例 1 example 1 $x_i=i$	例 2 example 2 $x_i=1$	例 2 example 2 $x_i=i$	例 3 example 3 $x_i=1$	例 3 example 3 $x_i=i$
20	7～8	7	8～9	7～8	13～14	12～13
60	6～7	6	8～9	6～7	11～12	10～11
100	7～8	6	8～9	7	10～12	10

从表 2 可见, 对非病态问题 3, 解的精度很高(与普通解法如列主元三角分解法精度一致), 对极度病态的问题例 1 和例 2, 当阶数从 20 增加到 100 时(此时原方程组的病态程度已大得难以估量), 仍有 6 位以上的有效数字, 精度很高; 并且随阶数的增加、病态程度的加剧, 精度非常稳定, 算法表现出很强的抗病态能力, 这是所见算法中结果最好的之一.

4　结束语

从以上算法和算例的数值结果可见, 本文算法有如下特点:

(a)简便性. 算法原理及实现都十分简捷, 仅运用了常规的行列均衡处理和对称三角分解.

(b)有效性. 高阶 Hilbert 矩阵和 Pascal 矩阵是极度病态的, 本文算法对相应的病态问题也能比较准确地求解, 并且解的精度非常稳定, 表明了算法对病态问题的高度有效性.

(c)新颖性. 本文构造的方程组, 系数矩阵为 $\boldsymbol{AA}^T$ 形式, 条件数增大了, 按常规思想是不可取的, 因为计算误差会更大, 但本文却获得了相当好的结果. 这是因为本算法的主要思想不是单纯对计算中的误差进行直接控制, 而是将误差转移到另一中间量上, 可以说, 本文给出了一种对付病态问题的全新方法.

本文算法用 Fortran 语言编定, 用双精度 6x86L 微机上实现.

参考文献:

[1]　李庆扬, 易大义, 王能超. 现代数值分析[M]. 北京: 高等教育出版社, 1995. 184.

[2]　冯　康. 数值计算方法[M]. 北京: 国防工业出版社, 1978. 39.

[3]　胡圣荣, 罗锡文, 蒋炎坤. 对称线性方程组的一种实用对称三角分解法[J]. 武汉工业大学学报, 1999, 21(1): 92—94.

[4]　胡圣荣, 罗锡文. 病态线性方程组的一种特殊情况[J]. 华中农业大学学报, 1999, 18(1): 98—99.

A New Method for Solving Ill—Conditioned Linear Systems

HU Sheng-rong, LUO Xi-wen

(College of Polytechnic, South China Agric. Univ., Guangzhou 510642, China)

Abstract: A new simple and effective method for solving ill-conditioned linear systems is presented in this paper. This method tried mainly not to decrease the error caused in direct solving, instead, it tried to transfer this error to a medium variable. An algorithm based on this method was presented, and examples showed that this algorithm could solve extremely ill-conditioned linear systems correctly and stably.

Key words: linear systems; ill-conditioned; error analysis

【责任编辑　柴　焰】

第 22 卷卷终