病态线性方程组新解法:增广方程组法

胡圣荣, 戴纳新
(华南农业大学 工程学院,广东 广州,510642)

摘要:为了简便求解病态问题,先构造适当的增广形式,再用常规方法求解,这时问题的病态虽然导致总体增广解的巨大误差,但原问题解只是其中一个局部,却可获得很好的精度,数值算例表明了算法的有效性.

关键词:线性方程组; 病态方程; 增广方程组法
中图分类号:O241.6 **文献标识码**:A **文章编号**:1001-411X(2009)01-0119-03

A Novel Method for Solving Ill-Conditioned Linear System: Augmented System Method

HU Sheng-rong, DAI Na-xin
(College of Engineering, South China Agricultural University, Guangzhou 510642, China)

Abstract: Put an ill-conditioned system into a suitable augmented system, and solve it with ordinary methods. Although as a whole the augmented solution may be very erroneous, the original system solution is just a local part, and can be very precise. Numerical examples showed the presented method could solve extremely ill-conditioned linear systems simply and effectively.

Key words: linear systems; ill-conditioned; augmented system method

线性方程组

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \tag{1}$$

当系数矩阵的条件数$\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\boldsymbol{A}\|$很大时称为病态方程组,这时常规数值解法中浮点运算的舍入误差积累通常造成解的巨大误差,甚至连1位有效数字都没有[1]. 病态问题现在已有很多解法,如条件预优法、迭代校正法、投影法、奇异值分解、刚性常微分方程法、优化算法等,但若综合考虑简便性和有效性,则比较理想的并不多. 笔者曾注意到,用普通解法求解病态方程组,虽然计算解可能面目全非,但余量很小,即仍能很好地"满足"原方程组(用主元三角分解法求解后文的Hilbert病态问题),据此提出了简便有效的误差转移法[2]. 其有效性在大地测量中也得到了检验[3]. 笔者再次观察上述普通解法的结果,又看到虽然总体上解没有一位有效数字,但前几个分量却比较准确. 这是因为基于消元的解法在消元过程中误差逐渐向后传递,越往后误差越大,由此不难理解计算解中前部分的精度一般比后部分好. 据此,本文提出另一种解法,即将病态方程组放到一个增广的系统中考虑,这时原方程组的解只是增广解的一个局部,并处在增广解的前部,再适当构造增广方程组,就不难获得比较准确的解. 不妨称此方法为增广方程组法.

1 算法设计

1.1 基本形式

本文算法归结到如何构造增广方程组,这里考虑如下形式:

收稿日期:2007-12-10
作者简介:胡圣荣(1967—),男,教授,博士,E-mail:hushengrong@21cn.com
基金项目:国家自然科学基金(30600468);广东省自然科学基金(994151)

$$\begin{bmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{Bmatrix}, \tag{2}$$

其中 A_1、A_2、A_3 和 A_4 都为 $n\times n$ 矩阵，x_1、x_2、b_1 和 b_2 都为 n 维列向量.

增广方程组(2)的构造可考虑如下原则:1)增广解的前一个分量 x_1 为原方程组(1)的解 x;2)矩阵 A_1、A_2、A_3、A_4 和列向量 b_1、b_2 尽可能简单;3)增广矩阵前 n 行有良好的线性无关性，以减少矩阵前半部分的病态性;4)增广矩阵具有一定特殊性，如对称性、稀疏性等，以便利用特定解法以减少求解时间.

本文取如下形式:

$$\begin{bmatrix} D & A^T \\ A & O \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} x \\ y \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ b \end{Bmatrix}, \tag{3}$$

其中，D 为对角矩阵，O 为零矩阵，这时增广矩阵为对称稀疏矩阵，且前 n 行/列有很好的线性无关性[比如:即使 A^T 的各个行向量几乎线性相关，但增广向量组 $[D\ A^T]$ 线性无关].

由于系数矩阵对称，采用对称解法可以减少一半左右的时间，这里采用胡圣荣[4]提出的通用对称解法，考虑到增广矩阵的特殊性，分解还可简化，比如 $A_1=D$，前 n 行的分解实际不必进行,

1.2 实用形式

考虑到行均衡处理对病态问题常常有一定效果且比较简便(但也经常失效)，这里先对原方程组(1)进行1次行均衡处理，即

$$\begin{cases} \tilde{A}x = \tilde{b} \\ \tilde{A} = QA, \tilde{b} = Q\mathrm{b} \end{cases}, \tag{1a}$$

其中，$Q=\mathrm{diag}\{q_1^{-1}, q_2^{-1}, \cdots, q_n^{-1}\}$，$q_i$ 为 A 对应行上元素的最大绝对值. 方程组(3)变为:

$$\begin{bmatrix} D & \tilde{A}^T \\ \tilde{A} & O \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} x \\ y \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \tilde{b} \end{Bmatrix}. \tag{3a}$$

问题归结到 D 的选取. 最简单可取为单位矩阵 I，这时结果见表1，效果已相当好.

表1 解的有效数字位数($D=I$)

Tab.1 Number of significant digits($D=I$)

阶数	例1		例2	
	$x_i=1$	$x_i=i$	$x_i=1$	$x_i=i$
100	4	3	7	7

为了探讨 D 的更好取法，将(3a)展开:

$$\begin{cases} D\mathrm{x} + \tilde{A}^T y = 0 \\ \tilde{A}x = \tilde{b} \end{cases} \tag{3b}$$

消去 x:

$$\tilde{A}D^{-1} + \tilde{A}^T y = -\tilde{\mathrm{b}}, \tag{3c}$$

即 $$(\tilde{A}D^{-1/2})(\tilde{A}D^{-1/2})^T y = -\tilde{b}\,. \tag{3d}$$

可见，D 实际以 $\tilde{A}D^{-1/2}$ 形式出现，这是对 $\tilde{A}$ 进行列处理. 一种常用列处理是列均衡，故 $D^{1/2}$ 取为 $\tilde{A}$ 对应列元素的最大绝对值，相应地 D 取为该最大绝对值的平方.

最后得到如下解法:1)对方程组(1)行均衡处理化为(1a);2)构造增广方程组(3a)，其中 D 为 $\tilde{A}$ 对应列元素的最大绝对值的平方;3)采用通用对称三角分解法[4]解方程组(3a)，解的前 n 个分量即为方程组(1)的解.

1.3 与误差转移法的关系

从式(1a)、(3b)、(3d)可得

$$\begin{cases} (QAD^{-1/2})(QAD^{-1/2})^T(-y) = Qb \\ x = D^{-1}(QA)^T(-y) \end{cases}. \tag{4}$$

这个形式与文献[2]实际上是相同的:$(QAP)(QAP)^T z = Qb$，$x=P(QAP)^T z$，这里 $P=D^{-1/2}$. 可见前面给出的增广方程组法可看成文献[2]误差转移法的增广形式. 但2种算法建立的出发点或依据的思想是不同的，且实际计算过程也不同.

进一步，增广子矩阵的不同选取将获得不同的增广方程组法，相应地可转换成不同的误差转移法，反之亦然.

顺便指出，本文方法与方程组(1)的等价最小二乘问题

$$\min \| b - Ax \| \tag{5}$$

的等价增广形式

$$\left.\begin{aligned} r + Ax &= b \\ A^T r &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{5a}$$

和 $$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & O \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} r \\ x \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} b \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{5b}$$

似乎有些相似，但效果是完全不同的:方程组(5b)的解 x 的精度与直接求解原方程组(1)基本相同，对病态问题无效. 这是因为其解 x 没有放在增广方程组的前部. 若将方程组(5b)改写为如下形式:

$$\begin{bmatrix} O & A^T \\ A & I \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} x \\ r \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ b \end{Bmatrix}, \tag{5c}$$

这时虽然解 x 放在了增广方程组的前部，但其前 n 行/列的线性无关性没有得到改善，对病态问题仍然无效.

2　算例

本文选取常用的具有代表性的 3 个典型算例以检验算法的有效性.

例 1:$a_{ij}=\dfrac{1}{i+j-1}$, $i,j=1,2,\cdots,n$.

例 2:$a_{1j}=1$, $a_{j1}=1$, $j=1,2,\cdots,n$;

$a_{ij}=a_{i-1j}+a_{ij-1}$; $i,j=1,2,\cdots,n$.

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

以上 3 例的系数矩阵中,例 1 为 Hilbert 矩阵,例 2 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,常规解法基本无效;例 3 是非病态矩阵.

由于系数矩阵病态时,计算解并不一定总有很大误差(隐性病态),这要求右端项的取法不能太特殊,否则这样的算例难以说明病态算法的有效性[5].这里将 3 个例子分别取 $b_i=\sum\limits_{j=1}^{n}a_{ij}(i=1,2,\cdots,n)$ 和 $b_i=\sum\limits_{j=1}^{n}a_{ij}\times j(i=1,2,\cdots,n)$,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1)

Tab. 2　Number of significant digits

阶数	例 1		例 2		例 3	
	$x_i=1$	$x_i=i$	$x_i=1$	$x_i=i$	$x_i=1$	$x_i=i$
25	5	6	8	8	12	11
50	6	6	8	6	11	11
100	6	6	7	7	11	10

1) 随 CPU 和 Matlab 版本不同,数据会略有变动

从表 2 可见,对例 1 和例 2,随阶数成倍增长(病态程度急剧增长),解的精度非常稳定也非常高,算法表现出很强的抗病态能力,这在所见的一些算法中是少见的. 对于非病态问题例 3,解的精度很高,并与直接列主元三角分解法相当,表明算法并没有引入明显的额外计算误差.

3　小结

从以上算法和数值结果可见:(1)用增广方程组法解病态线性方程组具有简便、有效、新颖的特点;(2)增广方程组子矩阵的不同选取可获得不同的增广方程组法,相应地可获得各种不同的误差转移法,反之亦然;(3)增广方程组法和误差转移法建立的思想是不同的,但两者有对应形式,故对病态问题的有效性可一定程度地相互解释;但具体计算过程不同,两者的精度应是有区别的. 本文仅给出了增广方程组的一种具体的构造方法,其算法在 AMD XP 1800 + CPU 的微机上用 Matlab7. 4 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.

[2]　胡圣荣,罗锡文. 病态线性方程组的新解法:误差转移法[J]. 华南农业大学学报,2001,22(4):92-94.

[3]　张俊,文鸿雁,刘立龙. 大地测量中法方程病态性问题的初探[J]. 海洋测绘,2006,26(5):1-3

[4]　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.

[5]　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.

【责任编辑　周志红】