4.3 方程组的性态和误差估计

4.3.1 矩阵的条件数

4.3.2 方程组的误差估计

4.3.1　矩阵的条件数

先看一个例子，说明方程组的解对或的扰动的敏感性问题。

例4.9　方程组

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 3.0001 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 4 \\ 4.0001 \end{pmatrix}$$

的准确解是（1，1）^{T}。若A及b作微小的变化，考扰动后的方程组

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 2.9999 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 4 \\ 4.0002 \end{pmatrix}$$

其准确解为（-2，10）^{T}

解$Ly=b$得$y=(6,1,-1)^T$, 解$L^Tx=D^{-1}y$得$x=(2,1,-1)^T$

在上例中， A和b的微小变化引起x很大的变化， x对A和b的扰动是敏感的。这种现象的出现完全是有方程组的性态决定的。

定义4.1　如果方程组Ax= b中，矩阵A和b右端的微小变化，引起解向量x的很大变化，则称A为关于解发才组和矩阵求逆的病态矩阵，称相应的方程组为病态方程组。否则， 称A为良态矩阵，称相应的方程组为良态方程组。

我们需要一种能刻画矩阵和方程组病态程度的标准。暂且不考虑矩阵A的扰动，仅须考虑b 的扰动对方程组的影响，设方程组Ax= b的扰的方程组为A（x+δx）= b +δb 则

$$\delta x = A^{-1}\delta b,\quad \|\delta x\| \le \|A^{-1}\|\|\delta b\|$$

又由于 $\|b\| \le \|A\|\|x\|$ ， 即得

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \|A^{-1}\|\|A\|\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

可见，量 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 是相对误差 $\|\delta b\|/\|b\|$ 的倍增因子，该量越大，

方程组右端所引起的解向量的相对误差就可能越大。

定义4.2 设$A\in R^{n\times n}$为可逆矩阵，按算子范数，称

$$\mathrm{cond}(A) = \|A^{-1}\|\|A\|$$

为矩阵A的条件数。

如果矩阵范数取2范数，则记 $\mathrm{cond}_2(A)=\|A^{-1}\|_2\|A\|_2$ 。按（4.3.1），同样可以定义cond_∞（A）和cond_1（A）。

设A^{-1}存在，条件数有如下一些性质：

（1）其中cond（A）≧1， cond（A）= cond（A^{-1}）， cond（ α A）= cond（A）， 其中$\alpha \in R$，$\alpha \neq 0$

（2）若U为正交矩阵，即$U^T U=I$则

$cond_2$（U）=1， $cond_2$（A）= $cond_2$（AU）= $cond_2$（UA）。

（3）设λ_1与λ_n为A按绝对值最的和最小的特征值，则

$$\text{cond}(A) \geqq \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$$

若A对称，则$cond_2$（A） = $|\lambda_1| / |\lambda_n|$

例4.10 下列Hilbert矩阵是一族著名的病态矩阵：

$$H_n = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/n \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1/n & 1/(n+1) & \cdots & 1/(2n-1) \end{pmatrix}$$

它是一个n×n的对称矩阵，可以证明是正定的。计算条件数有$cond_2$（H_4）= 1.5514×10^4， $cond_2$（H_6）=1.4951×10^7，$cond_2$（H_8）= 1.525×10^{10}。由此可见，随着n的增加，H_n的病态可能越严重。H_n常常在数据拟合和函数逼近中出现 。

对于实际问题，条件数一般是很难计算的。下列现象可能表示方程组Ax=b是病态的。

（1）如果矩阵A的按绝对值最大特征值和最小特征值之比很大，则A是病态的。

（2）如果系数矩阵A的元素间数量级很大，并且无一定规则，则A可能病态。

（3）如果系数矩阵A的莫些行或列是近似相关的，或系数矩阵的行列式值相对说很小，则A可能病态。

（4）如果在A的三角化过程中出现小指元或采用选用选主远技术，主元素数量级相差悬除时，则A可能病态。

对于病态方程组，数值求解必须小心进行，否则达不到所要求的准确度。有时可以用高精度（如双精度或扩充精度）的运算，以改善或减轻方程组的病态程度，有时也可以对圆方程组作预处理，以降低

系数矩阵的条件数，即选择非奇异矩阵P和Q，一般选着为对角阵或三角矩阵，使

$$\mathrm{cond}(PAQ) < \mathrm{cond}(A)$$

然后，求解等价方程组PAQ y=P y， y =Q^{-1}x。

例如，对矩阵

$$A=\begin{pmatrix}1 & 10^5\\ 1 & 1\end{pmatrix}, A^{-1}=\frac{1}{1-10^5}\begin{pmatrix}1 & -10^5\\ -1 & 1\end{pmatrix}.$$

有$\mathrm{cond}_\infty \approx 10^5$。若进行预处理

$$B=PA=\begin{pmatrix}10^{-5} & \\ 0 & 1\end{pmatrix}A=\begin{pmatrix}-10^5 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}.$$

则cond_∞（B）=4，条件数的改善。

4.3.2 方程组的误差估计

由于舍入误差，我们解方程组往往得到的是近似解。下面利用条件数给出近似解的事前误差估计，即计算之前和计算之后的误差估计。

定理4.9 设**Ax=b**，**A**为非奇异矩阵，**b**为非零向量，**A**和**b**分别有扰动，δ **A**和 δ **b**，$(A+\delta A)(x+\delta x)=b+\delta b$。若 $\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1$，则有误差估计式

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\frac{cond(A)}{1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right)$$

证. 将代入扰动方程组 $(A+\delta A)(x+\delta x)=b+\delta b$ ，整理后有

$$\delta x=A^{-1}\left[\delta b-(\delta A)x-(\delta A)(\delta x)\right]$$

将上式两端取范数，则有

$$\|\delta x\|\le\|A^{-1}\|\left(\|\delta b\|+\|\delta A\|\|x\|+\|\delta A\|\|\delta x\|\right)$$

经整理后得

$$(1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|)\|\delta x\| \le \|A^{-1}\|(\|\delta b\| + \|\delta A\|\|x\|)$$

由于 $\|A^{-1}\|\|\delta A\| < 1$ ，则有

$$\|\delta x\| \le \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|}(\|\delta b\| + \|\delta A\|\|x\|)$$

再利用 $\|b\| \le \|A\|\|x\|$ ，即得所证。

若 $\|\delta A\| \ne 0, \|\delta b\| = 0$ 时，则由（4.3.2）有

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{cond(A)}{1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|}\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} = cond(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}(1+o\|\delta A\|)$$

定理4.10 设Ax=b， b≠0，则对方程组的近似解 $\tilde{x}$ 有误差估计式

$$\frac{1}{cond(A)}\frac{\|r\|}{\|b\|} \le \frac{\|\tilde{x}-x\|}{\|x\|} \le cond(A)\frac{\|r\|}{\|b\|}$$

其中 $r=b-A\tilde{x}$ 为剩余向量。

证　由 $Ax=b$ 有 $r=Ax-A\tilde{x}=A(x-\tilde{x})$

$$\frac{\|\tilde{x}-x\|}{\|x\|}\le\|A^{-1}r\|\bullet\frac{\|A\|}{\|b\|}\le cond(A)\frac{\|r\|}{\|b\|}$$

又由 $x=A^{-1}b$，有

$$\frac{\|\tilde{x}-x\|}{\|x\|}\ge\frac{\|r\|}{\|A\|}\frac{1}{\|A^{-1}\|\|b\|}=\frac{1}{cond(A)}\frac{\|r\|}{\|b\|}$$

定理得证。

该定理说明，当cond(A)很大时，即使方程组余量r 的相对误差已经很小，但近似解的相对误差仍然可能很大。

如果用直接解法得到的近似解　误差很大，我们可以用迭代改善的办法对近似解 $\tilde{x}$ 进行修正。设 $r=b-A\bar{x}$，$\triangle x$ 为修正量，$\bar{x}=\tilde{x}+\Delta x$ 为新的近似解。这样，我们可以通过求解 $A\triangle x=r$ 得到 $\tilde{x}$，显然，在准确运算下有

$$A\bar{x}=A(\tilde{x}+\Delta x)=b-r+A\Delta x \tag{4.3.3}$$

然而，再实际计算时，方程组（4.3.3）不大可能求解，所以解（4.3.3）只能提供有限的修正。因此，需要反复求解为（4.3.3）的方程组，不断对所得的近似解进行改进。这种近似值逐进接近真解的过程称为迭代解法。为了节省计算量，可事先对矩阵A进行LU分解，把反复解形为（4.3.3）的方程组改为反复解形为Ly=r，U△x=y 的方程组。为了保证计算精度，计算剩余向量r可采用高精度计算。

方程组直接解法的稳定性是应当注重的问题。如果通过直接计算每一步设入误差对解的影响来获得近似解的误差界，那将是非常困难的 。J.H.Wilkinson等人提出了“向后误差分析法”，其基本思想是把计算过程中设入误差对解的影响归结为原始数据对解的影响。下面给出一个定理来说明这方面的结果。

定理4.11 设$A\in R^{n\times n}$，A为非奇异矩阵，用列主元法或全主元法解方程组 Ax=b，其计算解 $\tilde{x}$ 满足 $(A+\delta A)\tilde{x}=b$ 。记计算机尾数字长为t，且n2-t ≤0.01 。$\rho=\max\limits_{1\le i,j\le n}\left|a_{ij}^{(k)}\right|/\|A\|_\infty$，$a_{ij}^{(k)}$ 是消去过程中$A^{(k)}$中的元素，则有

（1）若A的LU分解计算结果为 $\tilde{L},\tilde{U}$,则有

$$\tilde{L}\tilde{U} = A + E,$$

$$\|E\|_\infty \le \rho n^2 \|A\|_\infty 2^{-t}$$

（2） $\|\delta A\|_\infty \le 1.01\rho(n^3+3n^2)\|A\|_\infty 2^{-t}$

（3）计算解有精度估计：

$$\frac{\|x-\tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty} \le \frac{cond_\infty(A)}{1-\|A^{-1}\|_\infty\|\delta A\|_\infty}\left[1.01\rho(n^3+3n^2)2^{-t}\right]$$

该定理说明，矩阵A的阶数越高条件数越大矩阵元素的增长因子越大和计算机字长越短，则舍入误差对解的影响越严重。因此计算精度取决于矩阵的规模、方程组的性态、所选取的算法和计算机字长。