

求逆矩阵的并行 CH 法数值不稳定性*

邓 健 新

(中国科学院计算中心, 北京 100080)

一、引 言

任何方阵均满足它的特征方程(Cayley—Hamilton 定理)意味着任何非奇异方阵的逆均可用该方阵的幂和其特征多项式系数表出^[7]. (以下简称 CH 定理, CH 法), 这种方法的计算量高达 $O(n^4)$, 不宜用于实际计算. 自从并行计算机出现之后, 有时一项工作的计算时间比计算量更为重要, 快速算法应运而生, Csanky 提出以并行观点重新研究 CH 法^[2], 他在逆阵计算复杂性理论上给出一个惊人的结果, 用 $O(\log^2 n)$ 步可解任何非奇 n 阶方阵的求逆问题. 此后, 许多人注意 CH 法、或研究新算法或改善其性能或扩充其使用范围等等. 但是, 因为 CH 法固有的不稳定性决定了它不能用于并行机的实际计算. 本文描述一个纯粹的 CH 法, 然后给出这个方法的数值不稳定性分析.

二、CH 法

设 n 阶方阵 A 的特征值为 $\lambda_i \neq 0, i=1, 2, \dots, n$. A 的特征多项式可记为

$$f(\lambda) = \det(\lambda I - A) = \prod_{i=1}^n (\lambda - \lambda_i) = \sum_{i=0}^n C_i \lambda^{n-i}, C_0 = 1. \quad (2.1)$$

矩阵幂的迹记为 t_m , 于是

$$t_m = \text{trace}(A^m) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^m, \quad m = 1, 2, \dots, n. \quad (2.2)$$

根据多项式系数与零点的 Newton 公式有

$$TC = t \quad (2.3)$$

$$T = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ t_1 & 2 & & \\ t_2 & t_1 & 3 & \\ \dots & \dots & \dots & \\ t_{n-1} & t_{n-2} & \dots & t_1 & n \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_n \end{pmatrix}, t = \begin{pmatrix} -t_1 \\ -t_2 \\ \dots \\ -t_n \end{pmatrix}.$$

上式可改写为

$$BC = b, \quad (2.4)$$

其中 $B = (b_{ij}), b_{i,j} = t_{i-j}/i$, (当 $i > j$), $b_{i,j} = 0$, (当 $i \leq j$), $b_n = 1, b_i = -t_i/i$, ($i, j = 1, 2, \dots, n$).

从 B 的特点可知, 其特征多项式是 $g(\lambda)$,

* 1990年3月5日收到. 本文工作得到国家自然科学基金资助.

$$g(\lambda) = \det(\lambda I - B) = \sum_{m=0}^n (-1)^m C_n^m \lambda^{n-m},$$

其中

$$C_n^m = n! / (m!(n-m)!).$$

由 CH 定理有 $g(B)=0$, 得到

$$B^{-1} = \sum_{m=0}^{n-1} (-1)^{n+m+1} C_n^m B^{n-m-1}, \quad (2.5)$$

于是

$$C = \left(\sum_{m=0}^{n-1} (-1)^{n+m+1} C_n^m B^{n-m-1} \right) b. \quad (2.6)$$

再由(2.1)式及 CH 定理有 $f(A)=0$, 得到

$$A^{-1} = -\frac{1}{C_n} (A^{n-1} + C_1 A^{n-2} + \dots + C_{n-2} A + C_{n-1} I), \quad (2.7)$$

因为 $C_n = \prod_{i=1}^n \lambda_i \neq 0$, 所以上式恒成立.

以上所述是一个纯粹的 CH 算法. 由于(2.3)可以用各式各样的快速算法求解, 因此, 可构造不同的许多 CH 算法. 但是这类算法在计算时间上都不能使 CH 法有实质性的发展.

从并行计算观点来看, CH 法只涉及矩阵乘法和乘幂等简单运算, 其计算复杂性仅需考虑下列基本运算及所需处理机台数和时间:

用 n 台处理机, $[\log n] + 1$ 步可从 a_i, b_i 计算 $\sum_{i=1}^n a_i b_i$;

用 $[n/2]$ 处理机, $[\log n]$ 步可从 x 计算 $x^m, (i=1, 2, \dots, n)$;

用 $[n^4/2]$ 处理机, $[\log n]([\log n] + 1)$ 步可从 A 计算 $A^m, (i=1, 2, \dots, n)$.

因此(2.1)–(2.7)表示的 CH 法可用 $O(n^4)$ 台处理机在 $O(\log^2 n)$ 并行步算完, 并且可以看出启用处理机台数和计算时间均本质上限于 A^n 的计算上. 因此, 虽然解(2.3)有比 CH 法更快一点的方法^[3-5], 但对整个 CH 法不会发生实质性的影响. 到现在为止, 还没有发现一个方法能用少于 $O(\log^2 n)$ 并行步求解逆矩阵问题.

显然, CH 法已计算了行列式 $C_n = \det(A)$, 也可以用来解线代方程组, 求广义逆、投影、矛盾方程最小二乘解等等. 对于 Moore–Penrose 广义逆, 周知有下述公式:

当 $A \in C_r^m \times n$, $A^+ = C^+ B^+$, $B \in C_r^m \times n$, $C \in C_r^r \times n$;

当 $A \in C_r^m \times n$, $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$;

当 $A \in C_r^m \times n$, $A^+ = A^T (A A^T)^{-1}$.

因此, 计算 A^+ 的 CH 法只是多若干矩阵乘法, 和一些准备工作. 其他类型的广义逆及有关问题原则上都不难用 CH 法解. 但是, 这种种工作在计算复杂性的研究上没有前进一步, 而在实际计算上又毫无价值.

三、稳定性分析

首先我们考虑 CH 法的舍入误差影响, 用 $fl(\quad)$ 表示用精度为 ε 运算的计算值. CH 法计算过程的舍入误差可表示如下.

从 A 计算的 $fl(A^n) \equiv A^n + E$, $E = (e_{ij})$, $\|E\| \leq (n-1)([\log n] + 1)\varepsilon \|A\|^n$;

从 A 计算的 $\text{fl}(l_m) \equiv l_m(1+e_m)$, $|e_m| \leq [\log n] \varepsilon$;
 从 l_m 计算的 $\text{fl}(B) \equiv B+F$, $F=(f_{ij})$, $|f_{ij}| \leq \varepsilon |b_{ij}|$;
 从 B 计算的 $\text{fl}(b^m) \equiv B^m+G$, $G=(g_{ij})$, $\|G\| \leq (m-1)([\log n]+1)\varepsilon \|B\|^m$;
 从 l_m 计算的 $\text{fl}(B) \equiv b+e$, $|e_i| \leq \varepsilon |b_i|$;
 从 B^m 计算的 $\text{fl}(B^{-1}) \equiv B^{-1}+H$, $H=(h_{ij})$, $\|H\| \leq ([\log n]+2)\varepsilon \|B^{-1}\|$;
 从 B^m 计算的 $\text{fl}(C) \equiv C+P$, $|P_i| \leq ([\log n]+1)\varepsilon |C_i|$;
 从 C, A^m 算的 $\text{fl}(A^{-1}) \equiv A^{-1}+K$, $K=(k_{ij})$, $\|K\| \leq ([\log n]+2)\varepsilon \|A^{-1}\|$;
 综上所述, 从 A 计算 A^{-1} , 其计算值 $\text{fl}(A^{-1})$, 满足
 $\text{fl}(A^{-1}) \equiv A^{-1}+Q$, $Q=(q_{ij})$, $\|Q\| \leq 7n([\log n]+1)\varepsilon \|A^{-1}\|$.

由此可见, 舍入误差对于 CH 的影响是不少的, 但绝不是严重的. 实际上, CH 法的致命性弱点不在于舍入而在于大数相约. 下面我们观察计算过程中相约的情况. 用 Wilkinson 的一个 20 阶对角阵为例^[8], 设 $A=\text{diag}(1, 2, \dots, 20)$, 这是一个非常普通的阵, 特征值分布也简单. (2.7) 式的最后一行可记为

$$1/20 = -(20^{19}/20! + 20^{18}C_1/20! + \dots + C_{19}/20!), \quad (3.2)$$

上式右边第一项的数量级为 2×10^6 , 是左边的 4×10^7 倍, 第二项的数量级比左边的大 2×10^7 倍而符号相反. 其他的项, 有的更大, 因此大数相约必然发生. 也就是说, 假定有精度为 10^{-6} 的 $C_1, C_2, \dots$, 用十进制 6 位数学运算, 计算结果将不会有任何正确的有效数字. 这种计算类似于在零点附近的特征多项式赋值, 是数值极端不稳的. 这是 CH 法的一个实质性弱点. 另一个同样的弱点是从矩阵 A 不能有效地计算特征多项式系数 C_m , ($m=1, 2, \dots, n$). 我们仍用上述例子, (2.6) 的最后一行可记为

$$20! = \sum_{m=1}^{19} (-1)^{21+m} C_{20}^m \sum_{j=1}^{20} b_{20,j} b_j, \quad (3.3)$$

上式左边的各项的数量级很高. 有的为 10^{27} , 而右边的量级仅为 2×10^{18} , 因此相约的严重性更为突出. 即使用舍入或相约影响都可能是最小的向前回代法解 (2.3), 即 Le Verrier 方法) 是数值不稳, 不能保证计算结果原任何精度, 这在 Wilkinson 的专著^[8]中已有详尽的论述. 事实上, 问题不在于使用什么算法, 而是因为有关的量及其高次幂在数量级上相差极为悬殊. 还没有一个企图计算或利用显式特征多项式计算的算法取得成功, 而失败的例子则不少, 例如一些熟知的算法, 化矩阵为 Frobenius 型的 Danilevsky 方法; 先化矩阵为 Hessenberg 型然后产生 C_m 的逆推算法; 直接计算 $\det(\lambda I - A)$ 在 λ_i 上的 n 个值然后解一组范达蒙方程组的插值法; 类似于 CH 法的 Krylov 方法和那些用显式特征多项式的迭代算法等等. 这些方法都不能避免相约的危害.

的确可以举出极为特殊的例子, CH 法也许可能成功, 比如特征值为环形分布 $\lambda_m = e^{im\pi/n}$ 的矩阵, 其特征多项式为 $\lambda^n - 1$. 但是对于很平常的矩阵 CH 法均会失败.

综上所述, CH 法的两个致命性弱点使计算严重失稳, 不可能用于并行机的实际计算.

参考文献

- [1] A. Borodin and L. Munro, *The Computational Complexity of Algebraic and Numerical Problems*, 1975 American Elsevier, New York.

- [2] L. Csanky, *Fast parallel matrix inversion algorithms*, SIAM, J. Comput. 5(1976), pp. 618—620.
- [3] S. C. Chen and D. J. Kuck, *Time and parallel processor bounds for linear recurrence systems*, IEEE Trans. Computers, C—24 (1975) pp. 710—717.
- [4] D. Heller, *A Survey of parallel algorithms in numerical Linear Algebra*, SIAM Review 20(1978), pp. 740—776.
- [5] D. Heller, *On The Efficient Computation of Recurrence Relations*, ICASE, Hampton, VA, Dept. of Computer Science, Carnegie—Mellon University Pittsburgh, PA. 1974.
- [6] A. H. Sameh and R. P. Brent, *Solving Triangular Systems on a Parallel Computer*, Dept. of Computer Sci. Univ. of Illinois, Urbana 1975.
- [7] Ф. П. 甘特马赫尔, 矩阵论, 1955 高等教育出版社.
- [8] J. H. 威尔金森, 代数特征值问题, 1987 科学出版社.

On the Numerical Unstability of Cayley-Hamilton Method for Matrix Inversion

Deng Jianxin

(Academia Sinica, Computing Center, Beijing, China)

Abstract

The Cayley-Hamilton method for matrix inversion interests many research work, since using parallel computers. Our present intention is to describe a simplest C-H algorithm and to provide a more complete analysis of the unstability of the method. We consider that C-H method will not be an usable numerical method for real parallel computers.