

一种求解病态复线性方程组的混合算法

陈凤坤,雷秀仁

(华南理工大学 数学学院,广东 广州 510640)

摘要:病态复线性方程的求解是现代应用数学和很多工程应用面临的难题,用一般算法进行求解时,得到的误差较大,因此在一些高精度的工程应用上,其结果往往不是特别理想。而随着科技的发展,现代很多工程应用对数据具有越来越高的精度要求(尤其是国家航天航空),因此一个能求解病态复线性方程组的高精度算法是很有必要的。从病态复线性方程组求解的特点出发,对模拟退火法进行改进,并将其全局的收敛能力与双共轭梯度法的高精度求解能力结合起来,提出了一种 BCG-SA 混合算法。数据实验表明,模拟退火法能对双共轭梯度法求出的解进行微调,帮助双共轭梯度法在概率意义上跳出局部极小值点,从而提高求解精度。

关键词:病态复线性方程组;模拟退火算法;双共轭梯度法;混合算法;希尔伯特矩阵

中图分类号:O24

文献标识码:A

文章编号:1673-629X(2017)05-0016-04

doi:10.3969/j.issn.1673-629X.2017.05.004

A Hybrid Algorithm of Ill-conditioned Complex Linear Equations

CHEN Feng-kun, LEI Xiu-ren

(School of Mathematics, South China University of Technology,
Guangzhou 510640, China)

Abstract: Solving ill-conditioned complex linear equations is difficult in modern applied mathematics and many engineering application, and it is easy to produce significant error and bad result for general algorithms in some high-accuracy application with a usual algorithm. With the development of science and technology, there is more and more restrictions on data accuracy for modern industry especially space flight and aviation. Therefore, it is necessary and impending to find a high accuracy algorithm for ill-conditioned complex linear equations. According to the characteristics of ill-conditioned complex linear equations, a hybrid algorithm of BCG-SA improved with simulated annealing algorithm has been proposed with the advantages of global convergence and high precision solution for bi-conjugate gradient algorithm. The experimental results show that the hybrid algorithm has promoted the precision of solution for bi-conjugate gradient algorithm which can jump out of the neighborhoods of local minimum points in the sense of probability.

Key words: ill-conditioned complex linear equations; simulated annealing algorithm; bi-conjugate gradient algorithm; hybrid algorithm; Hilbert matrix

0 引言

求解复线性方程组是很多工程实际应用常遇到的问题,当方程组的规模较大或者系数矩阵的条件数很大时,系数矩阵易呈现病态特性。当前求解病态方程组效果较好的有预处理 ILUCG^[1]、主元加权迭代法^[2]、新 Jacobi 迭代法^[3]、粒子群算法^[4]等,但用它们求解病态的复线性方程组的效果不是很理想。目前求解病态复线性方程组效果较好的有双共轭梯度法,但其存在不收敛或者收敛速度慢的潜在问题,且在搜索的过程中可能陷入局部极小值。

现代很多高科技的工程应用对数据具有越来越高的精度要求(尤其是国家航天航空),因此一个能求解病态复线性方程组的高精度算法是很有必要的。为此,在分析研究双共轭梯度算法和模拟退火法的基础上,根据复线性方程组求解的特点对模拟退火法进行了适当改进,将双共轭梯度法高精度求解的特性和模拟退火法的全局搜索能力有机结合,提出了 BCG-SA 混合算法。实验结果表明,该算法虽然增加了迭代次数,但明显提高了计算精度,对于一些有较高精度要求的工程应用具有重要的现实意义。

收稿日期:2016-06-02

修回日期:2016-09-09

网络出版时间:2017-03-13

基金项目:国家自然科学基金天元基金(B13-B5071130);国家教育部高校博士点基金(B13-C7070170)

作者简介:陈凤坤(1990-),男,硕士研究生,研究方向为群智能算法;雷秀仁,副教授,通信作者,研究方向为科学与工程计算。

网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/61.1450.tp.20170313.1545.036.html>

1 双共轭梯度法 (BCG) 原理

双共轭梯度法是 C. Lanczos^[5]提出的一种用于求解一般复线性方程组的方法,具有计算量少、收敛速度快等优点。在求解规模较大或者条件数较大的复线性方程组时往往效果较好,是目前求解病态方程组较为常用的方法之一。

记 (\cdot, \cdot) 为通常复内积。若 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$, $x_i, y_i \in C, i = 1, 2, \cdots, n$, 则

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^H \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n \bar{x}_i * y_i \tag{1}$$

并记

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} \tag{2}$$

考虑如下形式的线性方程组:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \tag{3}$$

其中, $\mathbf{A} \in C^{n \times n}, \mathbf{x}, \mathbf{b} \in C^n$ 。

则具体双共轭梯度算法^[6](算法1)如下:

Step1:输入矩阵 \mathbf{A} 、右端向量 \mathbf{b} 、初始值 x_0 、误差精度 ε 和最大迭代次数 k_{\max} ,置 $k = 1$ 并计算 $r_0 = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_0$,取 $\hat{r}_0 = r_0^*, p_0 = r_0, \hat{p}_0 = \hat{r}_0$ 。

Step2:计算

$$\alpha_k = \frac{(\hat{r}_k, r_k)}{(\hat{p}_k, \mathbf{Ap}_k)}, \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k, \mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{Ap}_k$$
$$\beta_k = \frac{(\hat{r}_{k+1}, r_{k+1})}{(\hat{r}_k, r_k)}, \mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$$

并置 $k = k + 1$ 。

Step3:若 $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|_2 < \varepsilon$ 或 $k > k_{\max}$,则算法终止,转到 Step4,否则转入 Step2 继续计算。

Step4:输出数值解 \mathbf{x}_{k+1} 和迭代次数 k 。

其中, \mathbf{r}^* 表示余向量 \mathbf{r} 的共轭向量, $\hat{\mathbf{r}}$ 和 $\hat{\mathbf{p}}$ 分别表示对余向量 \mathbf{r} 和搜索方向向量 \mathbf{p} 取共轭。

2 模拟退火法 (SA) 原理

模拟退火算法是由 N. Metropolis^[7]等于 1953 年提出的,它是基于 Monte-Carlo 迭代求解策略的一种随机寻优算法,其出发点是基于物理中固体物质的退火过程与一般组合优化问题之间的相似性。模拟退火算法从某一较高初温出发,伴随温度参数的不断下降,结合概率突跳特性在解空间中随机寻找目标函数的全局最优解,是一种通用的优化算法,具有概率性地跳出局部最优解,并最终趋于全局最优的特性。1982 年 Kirkpatrick 等将内能 E 模拟为目标函数 f ,温度 T 演化成控制参数 t ,首次将模拟退火算法用于解决组合优化问题。

通过变分原理将式(3)转化为求解如下无约束条件的多元非线性方程组。

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2^2 \tag{4}$$

则模拟退火法应用于求解病态线性方程组的算法(算法2)^[8-9]如下:

Step1:输入矩阵 \mathbf{A} 、右端向量 \mathbf{b} 、初始值 \mathbf{x} 和最高温度 $T_{\max} (> 0)$,最低温度 T_{\min} ,每个温度的迭代次数 L_{\max} ,领域规模因子 scale 或正态分布标准差 σ ,温度下降因子 α ,误差精度 ε ,置当前温度 $t = T_{\max}$,算法迭代次数 $k = 0$,当前温度下迭代次数 $i = 0$,并计算相应的目标函数值 $E(\mathbf{x}) = \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2^2$ 。

Step2:给 \mathbf{x} 一个扰动 $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$,其中 $\Delta\mathbf{x}$ 是整个实轴上服从 $N(0, \sigma^2)$ 的随机变量,或者限制当前解的一个邻域 $\Delta\mathbf{x} = \text{scale} \times (\text{rand} - 0.5)$,其中 rand 是 0 到 1 之间的随机数,计算相应的目标函数值 $E(\mathbf{x}')$,得到 $\Delta E = E(\mathbf{x}') - E(\mathbf{x})$ 。

Step3:若 $\Delta E \leq 0$,则令 $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$;否则若 $\exp(-\Delta E/t) > \text{rand}$,令 $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$, $i = i + 1$ 。

Step4:若 $i < L_{\max}$,转 Step2;否则,缓慢降低温度 t ,令 $k = k + 1, t = T_0 \alpha^k$,其中 $0.7 \leq \alpha \leq 0.99$ 。

Step5:若 $t < T_{\min}$ 或 $\|\Delta E\| < \varepsilon$,算法结束,输出数值解 \mathbf{x} ;否则置 $i = 0$,转 Step2。

3 混合算法 (BCG-SA)

双共轭梯度法是一种收敛速度快,且精度较高的算法,在实践中表明双共轭梯度法的效果非常好,但由于其在搜索过程中可能陷入局部极小值,所以在一些对于数据精度有较高要求的实际应用中,需对双共轭梯度法进行一些改进,以帮助它跳过局部极小值点。

模拟退火算法^[10]具有良好的全局优化性,虽然它在解决病态方程组方面效果不是特别好,但它能够以随机搜索技术从概率意义上找出目标函数的全局最小值点。

当双共轭梯度算法达到较高精度后会出现收敛速度慢或者不再继续收敛的情况,这表明算法陷入了局部极小值,而模拟退火在搜索过程引入了随机因素,以一定的概率来接受一个比当前解要差的解,因此有可能跳出这个局部最优解。所以为了得到更高精度的解,可以在双共轭梯度算法陷入局部极小值时,引入模拟退火法来帮助其跳出局部极小值点。由此受到启发,将双共轭梯度法和模拟退火法各自的优点结合起来,提出了混合算法。具体的混合算法(算法3)^[11-12]如下:

Step1:输入矩阵 \mathbf{A} 、右端向量 \mathbf{b} 、误差精度 ε 、 $\varepsilon_0 (\varepsilon_0 > \varepsilon)$,最大迭代次数 k_{\max} ,SA 算法最大调用次数 N_{\max} (不宜设置过大,可取 6 ~ 10),置算法迭代次数 $k = 0$,SA 算法调用次数 $N = 0$ 。

Step2:输入当前解 \mathbf{x}_k ,计算 $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_k$,取 $\hat{\mathbf{r}}_k = \mathbf{r}_k^*, \mathbf{p}_k = \mathbf{r}_k, \hat{\mathbf{p}}_k = \hat{\mathbf{r}}_k$ 。

Step3:计算

$$\alpha_k = \frac{(\hat{r}_k, r_k)}{(\hat{p}_k, A p_k)}, x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k,$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$$

$$\beta_k = \frac{(\hat{r}_{k+1}, r_{k+1})}{(\hat{r}_k, r_k)}, p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

并置 $k = k + 1$ 。

Step4:若 $\|x_{k+1} - x_k\|_2 < \varepsilon$ 或 $k > k_{\max}$ 或 $N > N_{\max}$, 则算法终止, 转到 Step5; 若 $\|x_{k+1} - x_k\| < \varepsilon_0$, 调用 SA 算法, 置 $N = N + 1$, 转入 Step2, 否则转入 Step3 继续计算。

Step5:输出数值解 x_{k+1} 和迭代次数 k 。

4 实验及分析

为了说明算法 BCG-SA 的有效性和优越性, 进行了数据模拟仿真实验。实验所用到的矩阵均从经典的病态矩阵演变而来, 并且已经证明演变后的矩阵一方面保留了原矩阵的病态性, 另一方面拥有复线性, 可以代表病态复线性方程组。

将算法 BCG-SA 与在求解病态方程组上性能优越的共轭梯度法 (CG)、预处理共轭梯度法 (IC-CG)、双共轭梯度法 (BCG)、预处理双共轭梯度法 (IC-CB-CG)、模拟退火法 (SA) 进行比较。数值实验结果表明, BCG-SA 是有效的且在精度上更优越。需要指出的是进行数值实验时, 也将 BCG-SA 混合算法与蚁群算法、粒子群算法、神经网络算法进行了比较, 但这些群智能算法的实验效果并不好, 随着矩阵阶数的增加, 误差太大, 甚至出现了解的失真。

算例 1: 考查 Hilbert 演变矩阵, 对于具有病态方程组代表性的 Hilbert 矩阵 B , 其中

$$b_{kl} = \frac{1}{k+l-1}, k, l = 1, 2, \dots, n \quad (5)$$

令演变矩阵 $A = B + B * j$ (j 是复数单位, $j^2 = -1$), 并取方程组右端项 b 为:

$$b_k = \sum_{l=1}^n a_{kl} \times j (k = 1, 2, \dots, n) \quad (6)$$

算例 2: 考查 Pascal 演变矩阵, 对于具有病态方程组代表性的 Pascal 矩阵 C ^[13-14], 其中

$$c_{kl} = \begin{cases} c_{ll} = c_{ll} = 1, l = 1, 2, \dots, n \\ c_{kl} = c_{k-1,l} + c_{k,l-1}, k, l = 2, 3, \dots, n \end{cases} \quad (7)$$

令演变矩阵 $A = \frac{1}{C} + \frac{1}{C} * j$, 并取方程组右端项 b 为:

$$b_k = \sum_{l=1}^n a_{kl} \times j (k = 1, 2, \dots, n) \quad (8)$$

当矩阵的阶数 $n = 20$ 时, Hilbert 演变矩阵的条件

数为 $1.453\ 609 \times 10^{18}$, Pascal 演变矩阵的条件数为 $8.077\ 406 \times 10^{17}$, 已是高度病态的矩阵。实验时均取初始解 x_0 为零向量, 初始温度 $T_{\max} = 1\ 000$, $L_{\max} = n$ (n 为矩阵 A 的阶), 最大的试探次数 $N_{\max} = 8$, 最低温度 $T_{\min} = 1 \times 10^{-4}$, 邻域范围 $\text{scale} = 1 \times 10^{-2}$, 温度下降因子 $\alpha = 0.9$ 。并在算例 1 取误差精度 $\varepsilon = 1 \times 10^{-10}$, $\varepsilon_0 = 1 \times 10^{-12}$; 算例 2 取误差精度 $\varepsilon = 1 \times 10^{-11}$, $\varepsilon_0 = 1 \times 10^{-12}$, 实验结果如图 1 和图 2 所示 (其中 IC-CG 在求解算例 2 时失真)。

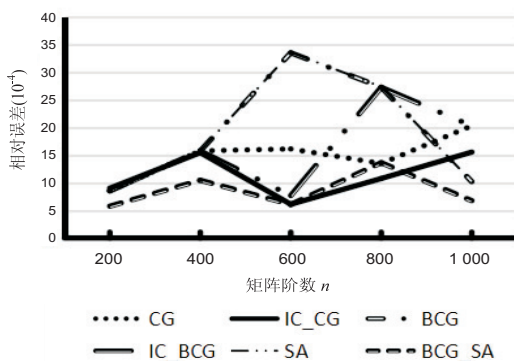


图 1 Hilbert 演变矩阵在不同阶数下算法求解误差的比较

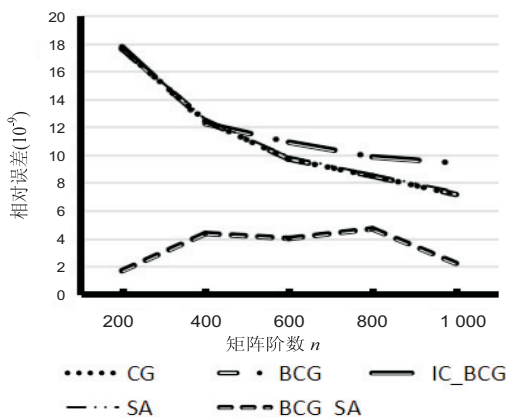


图 2 Pascal 演变矩阵在不同阶数下算法求解误差的比较

数据实验表明:

(1) 与 BCG-SA 混合算相比, 蚁群算法、粒子群算法等智能算法在求解高阶病态方程组上效果并不理想。

(2) 相比于算例 1, 各类算法在求解算例 2 时能得到更高的精度。

(3) 在算例 2 中, 对 CG、BCG 进行预处理的效果并不理想。

(4) 相对于其他算法, 混合算法能得到较高精度的解, 从而表明引入模拟退火法对于双共轭梯度法的改进是有效的, 它能够帮助双共轭梯度法在概率意义上跳过局部极小值点, 从而得到较高精度的解。

5 结束语

为了提高病态复线性方程组的求解精度,在研究分析病态复线性方程的特性和求解方法的基础上,提出了一种高精度混合算法。该算法是在对模拟退火法进行适当改进的基础上,将双共轭梯度法高精度求解的能力和模拟退火法的全局搜索能力有机结合。实验结果表明,提出的混合算法,虽然增加了计算的迭代次数,但明显提高了计算精度,对于一些对数据有较高精度要求的工程应用具有重要的现实意义。下一步的工作是进一步优化模拟退火算法的参数。

参考文献:

[1] 于春肖,苑润浩,穆运峰. 新预处理 ILUCG 法求解稀疏病态线性方程组[J]. 数值计算与计算机应用,2014,35(1): 21-27.

[2] 唐 丽,李鹏飞. 主元加权迭代法求解病态线性方程组[J]. 科学技术与工程,2012,12(2):381-383.

[3] 孔祥强. 病态线性方程组新的 Jacobi 迭代解法[J]. 大学数学,2013,29(5):50-54.

[4] 贺天宇,李国望. 病态线性方程组的粒子群算法[J]. 科技资讯,2012(8):15.

[5] 张永杰,孙 泰. 大型复线性方程组预处理双共轭梯度法[J]. 计算机工程与应用,2007,43(36):19-20.

[6] Garcia N. Parallel power flow solutions using a bigconjugate gradient algorithm and a Newton method: a GPU-based approach[C]//Power & energy society general meeting. [s. l.]:[s. n.],2010:1-4.

(上接第 15 页)

[4] 杜 江,曹 岩,白 瑀. 面向知识管理的产品设计资源库研究[J]. 西北工业大学学报,2006,26(6):511-514.

[5] Strang T, Linnhoff-Popien C. A context modeling survey [C]//First international workshop on advanced context modeling, reasoning and management as part of ubicomp. [s. l.]:[s. n.],2004:33-40.

[6] Tung Y H, Tseng S S, Weng J F, et al. A rule-based CBR approach for expert finding and problem diagnosis[J]. Expert Systems with Applications,2010,37(3):2427-2438.

[7] Stone R B, Wood K L. Development of a functional basis for design[J]. Journal of Mechanical Design,2002,122(4):359-370.

[8] Szykman S, Sriram R, Bochenek C, et al. Design repositories: engineering design's new knowledge base[J]. IEEE Intelligent Systems,2000,15(3):48-55.

[9] Sriram R, Szykman S. Design repositories and product representation for collaborative product development[J]. Computer Supported Cooperative Work in Design,2001,12(6):3-4.

[10] 余 旭,刘继红,何 苗. 基于领域本体的复杂产品设计知

[7] Steinbrunn M, Moerkotte G, Kemper A. Heuristic and randomized optimization for the join ordering problem[J]. The VLDB Journal,1997,6(3):191-208.

[8] Keikha M M. Improved simulated annealing using momentum terms[C]//Second international conference on intelligent systems, modelling and simulation. [s. l.]:[s. n.],2011:44-48.

[9] Wang Shengli, Zuo Xingquan, Liu Xueqing, et al. Solving dynamic double row layout problem via combining simulated annealing and mathematical programming[J]. Applied Soft Computing,2015,37:303-310.

[10] Lin Zhenhai. Mission planning for electromagnetic environment monitors satellite based on simulated annealing algorithm [C]//28th Canadian conference on electrical and computer engineering. [s. l.]:IEEE,2015:530-535.

[11] 郑洲顺,黄光辉,杨晓辉. 求解病态线性方程组的混合算法[J]. 贵州工业大学学报:自然科学版,2008,37(3):12-15.

[12] Bellio R, Ceschia S, Gaspero L D, et al. Feature-based tuning of simulated annealing applied to the curriculum-based course timetabling problem [J]. Computers & Operation Research, 2016,65:83-92.

[13] Srisangnam P, Chivapreecha S, Dejhan K. Even order bi-quadratic filter using pascal matrix[C]//International symposium on communications and information technologies. [s. l.]:[s. n.],2008:327-330.

[14] 杨胜良. Pascal 三角形与 Pascal 矩阵[J]. 数学的实践与认识,2003,33(2):96-100.

识检索技术[J]. 计算机集成制造系统,2011,17(2):225-231.

[11] Sang M J, Lee J H, Hahn G J, et al. Automatic CAD model retrieval based on design documents using semantic processing and rule processing[J]. Computers in Industry,2016,77:29-47.

[12] Balasubramaniam K. Hybrid fuzzy-ontology design using FCA based clustering for information retrieval in semantic web[J]. Procedia Computer Science,2015,50:135-142.

[13] 徐光佑,史元春,谢伟凯. 普适计算[J]. 计算机学报,2003,26(9):1042-1050.

[14] Dey A K, Abowd G D, Salber D. A conceptual framework and a toolkit for supporting the rapid prototyping of context-aware applications [J]. Journal of Human - Computer Interaction, 2001,16(2):97-166.

[15] 张 烁,段 富. 基于智能移动平台的情景感知技术研究[J]. 计算机应用与软件,2013,30(8):166-169.

[16] 曾子明,李 鑫. 移动环境下基于情境感知的个性化信息推荐[J]. 情报杂志,2012,31(8):166-170.