第三章　线性方程组的数值解法（一）

--线性方程组的直接解法

3.1 线性方程组的直接解法

- 引言
- Gauss消元法
- 列主元素消元法
- 矩阵三角分解法
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析

3.1.1　　引言

小行星轨道问题：

天文学家要确定一小行星的轨道，在轨道平面建立以太阳为原点的直角坐标系. 在坐标轴上取天文测量单位(一天文单位为地球到太阳的平均距离：9300万英里，约1.5亿千米)，对小行星作5次观察，测得轨道上5个点的坐标数据如下：

x	5.7640	6.2860	6.7590	7.1680	7.4800
y	0.6480	1.2020	1.8230	2.5260	3.3600

椭圆的一般方程：　$a_1x^2 + a_2xy + a_3y^2 + a_4x + a_5y + 1 = 0$

将数据逐个代入，可得五个方程的方程组，求解该线性方程组即可得行星轨道方程.

对一般线性方程组: $Ax = b$, 其中

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \qquad b=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \qquad x=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

由以前所学内容知, 当且仅当矩阵A行列式不为0时, 即A非奇异时, 方程组存在唯一解, 可根据Cramer法则求解.

其算法设计如下：

（1） 输入系数矩阵A和右端向量b;

（2）计算系数矩阵A的行列式值D，如果$D=0$，则输出错误信息，结束，否则进行第(3)步；

（3） 对$k=1,2,\cdots,n$，用b替换A的第k列数据，并计算替换后矩阵的行列式值D_k;

（4） 计算并输出$x_1 = D_1 / D$，$x_2 = D_2 / D$，$\cdots$，$x_n=D_n/D$， 结束.

但Cramer法则只适用于低阶方程组，高阶方程组工作量太大，故一般用数值方法求解. 数值方法分两类：

1. 直接法
2. 迭代法

3.1.2 Gauss消元法

基本思想： 逐步消去未知元，将方程组化为与其等价的上三角方程组求解.

分两步：

第一步：消元过程，将方程组消元化为等价的上三角形方程组;

第二步: 回代过程， 解上三角形方程组，得原方程组的解.

Gauss消元的目的：

原始方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

约化方程组

$$\Rightarrow \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)} \end{cases}$$

消元过程（化一般方程组为上三角方程组）

以四阶为例：
$$\begin{cases} a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3+a_{14}x_4=b_1 \\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3+a_{24}x_4=b_2 \\ a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3+a_{34}x_4=b_3 \\ a_{41}x_1+a_{42}x_2+a_{43}x_3+a_{44}x_4=b_4 \end{cases}$$

其系数增广矩阵为：

$$\bar{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & b_3 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & b_4 \end{bmatrix}$$

第一轮消元： $(a_{11} \neq 0)$

- 计算3个数: $[m_{21}\ \ m_{31}\ \ m_{41}]^T = [a_{21}\ \ a_{31}\ \ a_{41}]^T / a_{11}$
- 用 $-m_{21}$ 乘矩阵第一行后加到矩阵第二行;
- 用 $-m_{31}$ 乘矩阵第一行后加到矩阵第三行;
- 用 $-m_{41}$ 乘矩阵第一行后加到矩阵第四行;

其系数增广矩阵变为：

$$\bar{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} & a_{44}^{(1)} & b_4^{(1)} \end{bmatrix}$$

第二轮消元： $(a_{22}^{(1)} \neq 0)$

计算2个数：$[m_{32} \;\; m_{42}]^T = [a_{32}{}^{(1)} \;\; a_{42}{}^{(1)}]^T / a_{22}{}^{(1)}$

- 用$-m_{32}$乘矩阵第二行后加到矩阵第三行;
- 用$-m_{42}$乘矩阵第二行后加到矩阵第四行;

其系数增广矩阵变为：

$$\overline{A}^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ & & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ & & a_{43}^{(2)} & a_{44}^{(2)} & b_4^{(2)} \end{bmatrix}$$

第三轮消元： $(a_{33}^{(2)} \neq 0)$

- 计算： $m_{43}=a_{43}^{(2)}/a_{33}^{(2)}$
- 用 $-m_{43}$ 乘矩阵第三行后加到矩阵第四行;

其系数增广矩阵变为：

$$\bar{A}^{(3)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ & & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ & & & a_{44}^{(3)} & b_4^{(3)} \end{bmatrix}$$

其对应的上三角方程组为

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 = b_1 \\ \qquad a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + a_{24}^{(1)}x_4 = b_2^{(1)} \\ \qquad\qquad a_{33}^{(2)}x_3 + a_{34}^{(2)}x_4 = b_3^{(2)} \\ \qquad\qquad\qquad a_{44}^{(3)}x_4 = b_4^{(3)} \end{cases}$$

若对于一般的线性方程组$Ax=b$，其消元过程的计算公式为：（$k=1,2,\ldots,n-1$）　　（记$a_{ij}^{(0)}=a_{ij}$）

$$\begin{cases} m_{ik}=\dfrac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}} & (i=k+1,\cdots,n) \\ a_{ij}^{(k)}=a_{ij}^{(k-1)}-m_{ik}a_{kj}^{(k-1)} & (i,j=k+1,\cdots,n) \\ b_i^{(k)}=b_i^{(k-1)}-m_{ik}b_k^{(k-1)} & (i=k+1,\cdots,n) \end{cases}$$

回代过程（解上三角方程组）

上三角方程组的一般形式为：（其中$a_{11}\dots a_{nn}\neq 0$）

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad\qquad a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

回代过程的计算公式：
$$\begin{cases} x_n = \dfrac{b_n}{a_{nn}} \\ x_i = \dfrac{(b_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j)}{a_{ii}} \qquad (i = n-1, \cdots, 2, 1) \end{cases}$$

工作量计算：

$$\begin{cases} m_{ik}=\dfrac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}} & (i=k+1,\cdots,n) \\ a_{ij}^{(k)}=a_{ij}^{(k-1)}-m_{ik}a_{kj}^{(k-1)} & (i,j=k+1,\cdots,n) \\ b_i^{(k)}=b_i^{(k-1)}-m_{ik}b_k^{(k-1)} & (i=k+1,\cdots,n) \end{cases}$$

消去过程：（$k=1,2,\ldots,n-1$）

"÷"：第k步，$n-k$次，共

$$(n-1)+(n-2)+\ldots\ldots+1=n(n-1)/2$$

"×"：第k步，$(n-k)(n-k+1)$次，共

$$(n-1)n+(n-2)(n-1)+\ldots\ldots+1\times 2=(n^3-n)/3$$

消去过程总工作量： $S_1=n(n-1)/2+(n^3-n)/3$

回代过程：

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}, x_i = \frac{(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j)}{a_{ii}} \qquad (i = n-1, \cdots, 2, 1)$$

"÷"： n

"×"： $1+2+\ldots\ldots+(n-1)=n(n-1)/2$

回代过程总工作量： $S_2=n+n(n-1)/2=n(n+1)/2$

故Gauss消元法的总工作量为：

$$S=S_1+S_2=n(n-1)/2+(n^3-n)/3+n(n+1)/2$$

$$= n^2+(n^3-n)/3$$

若用克莱姆法则求解，则工作量为：

“×”：（$n+1$个n阶行列式的值）$(n+1)(n-1)n!$

“÷”：n

故总工作量为：$[(n+1)(n-1)]\,n!+n$

n	2	3	4	5	6
高斯	6	17	36	65	106
克莱姆	8	51	364	2885	25206