



第4章 线性方程组的数值方法

4.1 高斯消去法

4.2 选主元素的高斯消去法

4.3 矩阵的三角分解法

4.4 平方根法与改进平方根法

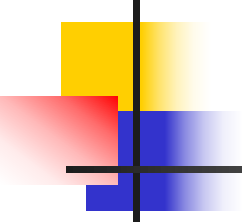
4.5 向量和矩阵的范数 

4.6 线性方程组的性态和解的误差分析

4.7 解线性方程组的迭代法

4.8 迭代法的收敛性及误差估计

引言



工程实际中，存在大量的解线性方程组的问题。很多数值方法到最后也会涉及到线性方程组的求解问题：如样条插值的 M 和 m 关系式，曲线拟合的法方程组，方程组的 $Newton$ 迭代等问题。

预备知识

- 1、线性方程组 $A_{m \times n} x = b$
- 2、线性方程组 $Ax = b$ 有解的充要条件

3、 $A_{n \times n}x=b$ 的逆矩阵解法及MATLAB程序

命令	相同功能命令	含义
$X=A \setminus C$	$X=\text{inv}(A)*C$	方程 $AX=C$ 的解
$Y=D/B$	$Y=D*\text{inv}(B)$	方程 $YB=D$ 的解
$Z=A \setminus F/B$	$Z=\text{inv}(A)*F*\text{inv}(B)$	方程 $AZB=F$ 的解

例

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 1 \\ 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 1/2 \\ x_1 + 3x_2 + 9x_3 = 5/2 \end{cases}$$

```

Command Window
>> A=[2 2 2;3 2 4;1 3 9];
>> b=[1;1/2;5/2]

b =

    1.0000
    0.5000
    2.5000

>> X=inv(A)*b

X =

   -0.5000
    1.0000
     0

>> X=A\b

X =

   -0.5000
    1.0000
     0.0000

>> |
  
```



问题的提出

求解线性方程组 $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$ ，其中 \mathbf{A} 是 n 阶非奇异的常系数方阵(n 比较大，其行列式不等于0)， \mathbf{x} 是待求的具有 n 维的解向量。

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



解决方法



① 直接法

$$\underline{Ax = b} \xleftrightarrow{\text{等价变换}} Gx = d$$

高斯消元法（三角形方程组回代法）

列主元素消去法

杜利特尔分解法（三角分解法）

追赶法

平方根法

解决方法

$$Ax = b \xleftrightarrow{\text{等价变换}} x = Bx + d$$

② 迭代法

$$\xrightarrow{\text{建立迭代格式}} \underline{x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f}$$

雅可比迭代法

高斯-塞德尔迭代法

超松弛迭代法

.....

注：克莱姆法则不能用于计算方程组的解。

4.1 高斯消去法

一、引例

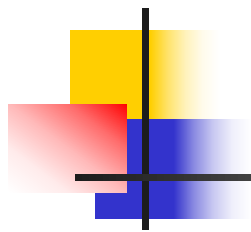
例. 用高斯消去法解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 1 \\ 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 1/2 \\ x_1 + 3x_2 + 9x_3 = 5/2 \end{cases}$$

\Rightarrow

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 1 \\ -x_2 + x_3 = -1 \\ 10x_3 = 0 \end{cases}$$

得到与原方程组等价的
三角形方程组



$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 1 \\ -x_2 + x_3 = -1 \\ 10x_3 = 0 \end{cases}$$

用回代的方法，可求得原方程组的解为：

$$x_3 = 0, x_2 = 1, x_1 = -1/2$$



用矩阵来描述消去法的 约化过程

$$[A, b] = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & \vdots & 1 \\ 3 & 2 & 4 & \vdots & 1/2 \\ 1 & 3 & 9 & \vdots & 5/2 \end{bmatrix} \xrightarrow{1} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & \vdots & 1 \\ 0 & -1 & 1 & \vdots & -1 \\ 0 & 2 & 8 & \vdots & 2 \end{bmatrix}$$

这种求解过程，称为
具有回代的高斯消去法

$$\xrightarrow{2} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & \vdots & 1 \\ 0 & -1 & 1 & \vdots & -1 \\ 0 & 0 & 10 & \vdots & 0 \end{bmatrix}$$



二、高斯消去法解方程组的基本思想

用矩阵行的初等变换将系数矩阵A
约化为具有简单形式的矩阵

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots\dots\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{array} \right.$$



三、高斯消去法

用矩阵形式表示 $Ax = b$

记 $A = A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)})_{n \times n}$ $b = b^{(1)} = (b_1^{(1)}, \dots, b_n^{(1)})^T$

假设A为**非奇异**矩阵.

第1步： 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$ 计算乘数

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \quad (i = 2, \dots, n)$$

施行行的初等变换 $r_i \leftarrow r_i - m_{i1} \cdot r_1 \quad (i = 2, \dots, n)$

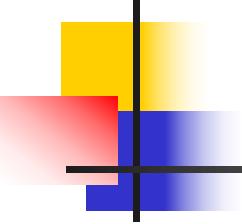
得到等价方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & \vdots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

记为

$$A^{(2)}x = b^{(2)}$$

$$A^{(2)}x = b^{(2)}$$



$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & \vdots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

其中

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)} \quad (i, j = 2, \cdots, n)$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)} \quad (i = 2, \cdots, n)$$

设第1步 ~ 第 $k-1$ 步计算已经完成,

得到与原方程组等价的方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

记为

$$A^{(k)} x = b^{(k)}$$



第 k 步

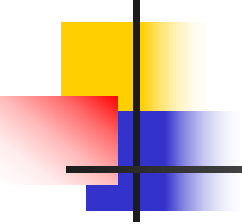
设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 计算乘数

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad (i = k + 1, \dots, n)$$

消去第 i 个方程 ($i = k + 1, \dots, n$) 的未知数 x_k

得到

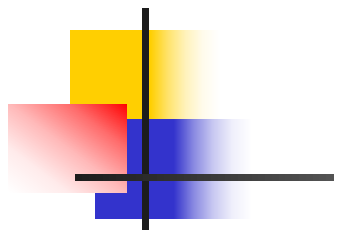
$$A^{(k+1)} X = b^{(k+1)}$$


$$A^{(k+1)} X = b^{(k+1)}$$

其中

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


最后，经 $n-1$ 步消元计算，得到三角形方程组



$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

回代求解得

$$\begin{cases} x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} \\ x_i = \frac{b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}} \end{cases} \quad (i = n-1, n-2, \dots, 1)$$



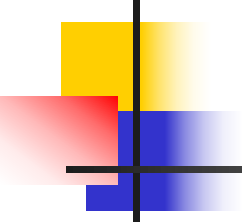
定理 4.1 (高斯消去法) P.63

设 $Ax = b$, 其中 $A \in R^{n \times n}$ 。如果约化的主元素 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, n$), 则可通过高斯消去法 (不进行交换两行的初等交换) 将方程组 $Ax = b$ 约化为三角形矩阵方程组, 且消元和求解公式为

① 消元计算 第 k 步消元 ($k = 1, 2, \dots, n-1$)

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

① 消元计算 第 k 步消元 ($k = 1, 2, \dots, n-1$)


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

② 回代计算

$$\begin{cases} x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} \\ x_i = \frac{b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}} & (i = n-1, n-2, \dots, 1) \end{cases}$$

注：如果 A 为非奇异矩阵时，但可能有某 $a_{kk}^{(k)} = 0$ ，则在第 k 列存在有元素 $a_{i_k, k}^{(k)} \neq 0, (k+1 \leq i_k \leq n)$ ，于是可通过交换 $(A:b)$ 的第 k 行和第 i_k 行元素将 $a_{i_k, k}^{(k)}$ 调到 (k, k) 位置，然后再进行消元计算。因此，在 A 为非奇异矩阵时，只要引进行交换，则高斯消去法可将 $Ax = b$ 约化为三角形方程组，且通过回代即可求得方程组的解。

高斯消去法的计算量：
$$T = \frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3}.$$

注：消元过程要保证 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$

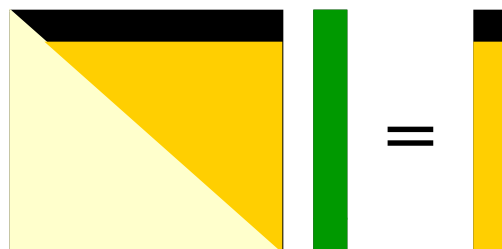
严格对角占优阵满足。

➤ 高斯消元法：小结



思路

首先将 A 化为上三角阵，再回代求解。



$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$



例1: 单精度解方程组
$$\begin{cases} 10^{-9}x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

/* 精确解为 $x_1 = \frac{1}{1-10^{-9}} = \overbrace{1.00 \dots 0100 \dots}^{8\uparrow}$ **和** $x_2 = 2 - x_1 = \overbrace{0.99 \dots 9899 \dots}^{8\uparrow}$ ***/**

用Gaussian 消元法计算:

$$m_{21} = a_{21} / a_{11} = \underbrace{10^9}_{8\uparrow}$$

$$a_{22} = 1 - m_{21} \times 1 = \underbrace{0.0 \dots 01}_{8\uparrow} \times 10^9 - 10^9 \doteq -10^9$$

$$b_2 = 2 - m_{21} \times 1 \doteq -10^9$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \underbrace{10^{-9}}_{\text{小主元}} & 1 & 1 \\ 0 & -10^9 & -10^9 \end{bmatrix}$$

**小主元可能导致
计算失败**

$$\Rightarrow x_2 = 1, \quad x_1 = \underbrace{0}_{\text{计算失败}}$$

4.2 选主元素的高斯消去法

在*Gauss*消元第*k*步之前，做如下的事情：

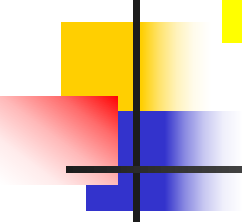
若 $\max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}| = |a_{jk}^{(k)}|$ 交换*k*行和*j*行

行的交换，不改变方程组的解，同时又有效地克服了*Gauss*消元的缺陷

例1:
$$\begin{bmatrix} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 10^{-9} & 1 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x_2 = 1, \quad x_1 = 1 \quad \checkmark$$

一、全主元素消去法


$$(A, b) = \left(\begin{array}{cccccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \cdots & & a_{i_1 j_1} & & \cdots & \cdots \\ \vdots & & & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

第1步($k=1$) : 首先在 A 中选主元素, 即选择 i_1, j_1

使 $|a_{i_1 j_1}| = \max_{i,j} |a_{ij}| \neq 0$;

再交换 (A, b) 的第 1 行与第 i_1 行元素, 交换 A 的第 1 列与第 j_1 列元素,

将 $a_{i_1 j_1}$ 调到 (1,1) 位置 (为简单起见, 交换后增广阵仍记为 (A, b));

然后, 进行消元计算。

第 k 步: 继续上述过程, 设已完成第1步到第 $k-1$ 步计算

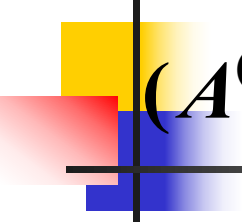
回代求解



二、列主元素消去法

完全主元消去法是解低阶稠密矩阵方程组的有效方法,但完全主元素方法在选主元时要花费一定的计算机时间,在实际计算中常用的是部分选主元(即列主元)消去法.列主元消去法在每次选主元时,仅依次按列选取绝对值最大的元素作为主元素,且仅交换两行,再进行消元计算.

设列主元素消去法已经完成第1步到第 $k-1$ 步的按列选主元,交换两行,消元计算得到与原方程组等价的方程组 $A^{(k)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k)}$, 其中为简单起见,增广矩阵的元素仍记为 a_{ij}, b_i , 即



$$(A^{(k)}, b^{(k)}) = \left(\begin{array}{cccc|ccc} a_{11} & a_{12} & & \cdots & & a_{1n} & b_1 \\ & a_{22} & & \cdots & & a_{2n} & b_2 \\ & & \ddots & & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & b_k \\ & & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{nk} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

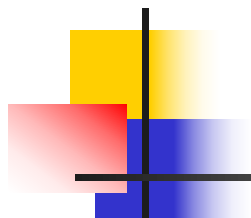
于是第 k 步计算:

第 k 步选主元区域

对于 $k = 1, 2, \dots, n-1$ 做到 (4)

(1)按列选主元: 选取 i_k , 使 $|a_{i_k k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}| \neq 0$

(2)如果 $a_{i_k k} = 0$, 则交换 A 为奇异矩阵, 停止计算;



(3) 如果 $i_k \neq k$, 则交换 (A, b) 第 k 行与第 i_k 行元素;

(4) 消元计算:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{ik} \leftarrow m_{ik} = a_{ik} / a_{kk} \quad (i = k + 1, \dots, n) \\ a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{ik} a_{kj} \quad (i, j = k + 1, \dots, n) \\ b_i \leftarrow b_i - m_{ik} b_k \quad (i = k + 1, \dots, n) \end{array} \right.$$

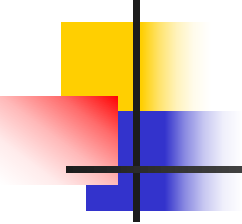


(5) 回代求解

$$\begin{cases} b_n \rightarrow b_n / a_{nn} \\ b_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} b_j \right) / a_{ii} \end{cases} \quad (i = n-1, \dots, 2, 1)$$

计算解 x_1, x_2, \dots, x_n 在常数项 $b(n)$ 内得到.

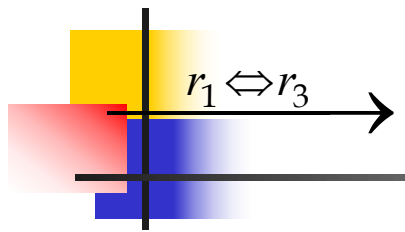
例2. 解线性方程组(用8位十进制尾数的浮点数计算)


$$\begin{pmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 \\ -2 & 1.072 & 5.643 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

解: 这个方程组和例1一样,若用Gauss消去法计算会有小数作除数的现象,若采用换行的技巧,则可避免

$$\overline{A} = (A, b) = \left(\begin{array}{ccc|c} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{array} \right)$$

10^{-8} 很小,绝对值最大的列元素为 $a_{13} = -2$,因此1,3行交换



$$r_1 \Leftrightarrow r_3 \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \end{array} \right)$$

$= (A^{(1)}, b^{(1)})$

绝对值最大
不需换行

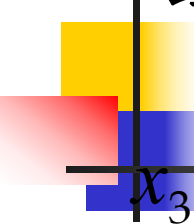
$$\xrightarrow{\begin{matrix} m_{21}=0.5 \\ m_{31}=-0.5 \times 10^{-8} \end{matrix}} \left(\begin{array}{ccc|c} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176 \times 10 & 0.18015 \times 10 & 0.5 \\ 0 & 0.2 \times 10 & 0.3 \times 10 & 0.1 \times 10 \end{array} \right)$$

$= (A^{(2)}, b^{(2)})$

$$\xrightarrow{m_{32}=0.629\,722\,92} \left(\begin{array}{ccc|c} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176 \times 10 & 0.18015 \times 10 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0.186\,555\,41 \times 10 & 0.685\,138\,54 \end{array} \right)$$

$= (A^{(3)}, b^{(3)})$

经过回代后可得


$$x_3 = \frac{b_3^{(3)}}{a_{33}^{(3)}} = \frac{0.685\ 138\ 54}{0.186\ 555\ 41 \times 10} = 0.367\ 257\ 39$$

$$x_2 = \frac{b_2^{(2)} - a_{23}^{(2)} x_3}{a_{22}^{(2)}} = \frac{0.5 - 0.18015 \times 10 \times x_3}{0.3176 \times 10} = -0.05088607$$

$$x_1 = \frac{b_1^{(1)} - a_{12}^{(1)} x_2 - a_{13}^{(1)} x_3}{a_{11}^{(1)}} = -0.49105820$$

事实上, 方程组的准确解为

$$x^* = (-0.491058227, -0.050886075, 0.367257384)^T$$

4.3 矩阵的三角分解法

一、直接三角分解法

*Gauss*消元法的第1步：设 $A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$

$$\text{若 } a_{11}^{(1)} \neq 0, \text{ 令 } l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, i = 2, 3, \dots, n \quad L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -l_{n1} & & & 1 \end{pmatrix}$$

施行第一步消元，得到

$$A^{(2)} = L_1 A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$



*Gauss*消元法的第 k 步:

$$\text{第}k\text{行} \times \frac{-a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} + \text{第}i\text{行}, i = k + 1, \dots, n$$

从矩阵理论来看, 相当于左乘矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & 1 & & \\ & & l_{k+1k}^{(k)} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ & & l_{nk}^{(k)} & & & 1 \end{pmatrix}, l_{ik}^{(k)} = \frac{-a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, i = k + 1, \dots, n$$

因此，整个**Gauss**消元法相当于左乘了一个单位下三角阵

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ l_{21} & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ \vdots & & l_{k+1k}^{(k)} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{nk}^{(k)} & \cdots & l_{nn-1}^{(n)} & 1 \end{pmatrix}$$

所以有 $\Rightarrow \exists L \quad s.t. \quad A = LU$ L 为单位下三角阵， U 为上三角阵

因此

$$Ax = b \Rightarrow LUx = b \Rightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$



注:

$$Ax = b \Rightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

1. 我们可以通过**2次回代过程**求解方程组.
2. 分解的理论由 *Gauss* 消元得出, 因此**分解**能够进行的条件与 *Gauss* 消元一样.

定理 4.2 (矩阵的 LU 分解) 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$.

如果 A 的顺序主子式 $\det(A_i) \neq 0, (i = 1, 2, \dots, n-1)$, 则 A 可分解为一个单位下三角阵 L 与一个上三角阵 U 的乘积, 即 $A = LU$, 且分解是惟一的.

证: P.67

1、Doolittle分解法

L为单位下三角阵，U为上三角阵

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$

比较第1行: $a_{1j} = u_{1j} \quad j = 1, \cdots, n \quad \Rightarrow u_{1j} = a_{1j}$

比较第1列: $a_{i1} = l_{i1} u_{11} \quad i = 2, \cdots, n \quad \Rightarrow l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}$

比较第2行: $a_{2j} = l_{21}u_{1j} + u_{2j} \quad j = 2, \dots, n \Rightarrow u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}$

比较第2列: $a_{i2} = l_{i1}u_{12} + l_{i2}u_{22} \quad i = 3, \dots, n \Rightarrow l_{i2} = \frac{a_{i2} - l_{i1}u_{12}}{u_{22}}$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$

比较第k行:

$$a_{kj} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj} + u_{kj} \quad j = k, \dots, n \quad \Rightarrow u_{kj} = a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}$$

K-1次

比较第k列:

$$a_{ik} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk} + l_{ik} u_{kk} \quad i = k+1, \dots, n \quad \Rightarrow l_{ik} = \frac{a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}}{u_{kk}}$$

K-1+1次



分解过程完毕，加上两次回代过程

$$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \quad , \quad i = 1, \dots, n$$

$$x_i = \frac{y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij} x_j}{u_{ii}} \quad , \quad i = n, \dots, 1$$

总运算量为：

$$\sum_{k=1}^{n-1} ((n-k+1)(k-1) + (n-k)k) + \frac{n(n-1)}{2} + \frac{n(n+1)}{2} = \frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3}$$



注：存储在矩阵的原来位置，且不影响计算

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

紧凑格式

综合以上分析,有

$$a_{1j} = u_{1j} \quad j = 1, 2, \dots, n$$

$$a_{i1} = l_{i1} u_{11} \quad i = 2, 3, \dots, n$$

$$a_{rj} = \sum_{k=1}^r l_{rk} u_{kj} \quad \begin{matrix} j = r, \dots, n \\ r = 1, 2, \dots, n \end{matrix}$$

$$a_{ir} = \sum_{k=1}^r l_{ik} u_{kr} \quad \begin{matrix} i = r+1, \dots, n \\ r = 1, 2, \dots, n-1 \end{matrix}$$

$$a_{rj} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{kj} + 1 \cdot u_{rj}$$

$$a_{ir} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} + l_{ir} u_{rr}$$

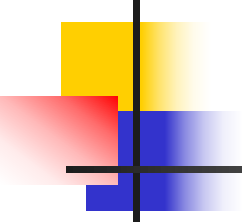
因此可以推导出

$$u_{1j} = a_{1j} \quad j = 1, 2, \dots, n$$

U的第一行 -----(1)

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}} \quad i = 2, 3, \dots, n$$

L的第一列 -----(2)



$$u_{rj} = a_{rj} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{kj} \quad \begin{matrix} r = 1, 2, \dots, n \\ j = r, \dots, n \end{matrix} \quad \text{U的第r行} \quad \text{-----}(3)$$

$$l_{ir} = \frac{a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr}}{u_{rr}} \quad \begin{matrix} r = 1, 2, \dots, n-1 \\ i = r+1, \dots, n \end{matrix} \quad \text{L的第r列} \quad \text{-----}(4)$$

称各式所表示的分解过程为**Doolittle**分解.

2、Crout分解法

设 $A = LU$ 为如下形式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} l_{i1} = a_{i1} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \\ u_{1j} = a_{1j} / l_{11} \quad (j = 2, 3, \dots, n) \end{cases} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{对于 } k = 2, 3, \dots, n, \text{ 循环计算} \\ l_{ik} = a_{ik} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{im} u_{mk} \quad (i = k, k+1, \dots, n) \\ u_{kj} = (a_{kj} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{km} u_{mj}) / l_{kk} \quad (j = k+1, k+2, \dots, n) \end{array} \right.$$

实现了矩阵的克劳特分解后，求解 $Ax=b$ 的问题就等价于求解两个三角形方程组。

比较第k列:

$$a_{ik} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk} + l_{ik} \quad i = k, \dots, n \Rightarrow l_{ik} = a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}$$

比较第k行:

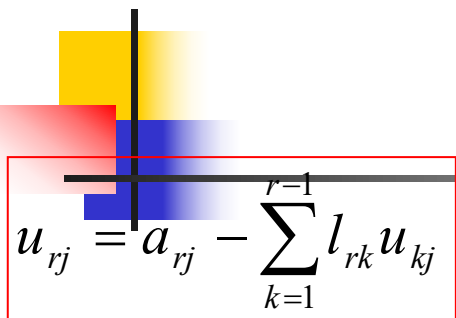
$$a_{kj} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj} + l_{kk} u_{kj} \quad j = k+1, \dots, n \Rightarrow u_{kj} = \frac{a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}}{l_{kk}}$$

两次回代过程

$$y_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j}{l_{ii}} \quad , \quad i = 1, \dots, n$$

$$x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij} x_j \quad , \quad i = n, \dots, 1$$

例4.4 利用三角分解法解方程组



The diagram shows a 3x3 matrix with a horizontal line separating the upper triangular part (yellow) from the lower triangular part (blue). The diagonal elements are 1, 1, and 1. The lower triangular part contains elements l_{21}, l_{31}, l_{32} . The upper triangular part contains elements $u_{11}, u_{12}, u_{13}, u_{22}, u_{23}, u_{33}$. The equation $u_{rj} = a_{rj} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{kj}$ is shown in a red box, with $j = r, r+1, \dots, n$ in a red box below it.

$$u_{rj} = a_{rj} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{kj}$$

$$j = r, r+1, \dots, n$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -3 & -4 & -12 \\ 2 & 10 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 5 \\ 10 \end{pmatrix}$$

$$l_{ir} = (a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr}) / u_{rr}$$

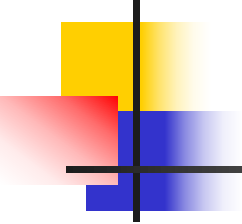
$$i = r+1, \dots, n$$

解 进行杜利特尔三角分解

$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3 & 1 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

求解 $Ly = b$ 得到 $y_1 = -2, y_2 = -1, y_3 = 17$

再求解 $Ux = y$ 得到 $x_1 = -35, x_2 = 8, x_3 = \frac{17}{3}$



解 进行克劳特三角分解

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3 & 2 & 0 \\ 2 & 6 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -3/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = LU$$

求解 $Ly=b$, 即

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3 & 2 & 0 \\ 2 & 6 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 5 \\ 10 \end{pmatrix} \Rightarrow y_1 = -2, y_2 = -1/2, y_3 = 17/3$$

求解 $Ux=y$, 即

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -3/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ -1/2 \\ 17/3 \end{pmatrix} \Rightarrow x_3 = \frac{17}{3}, x_2 = 8, x_1 = -35$$



二、解三对角线方程组的追赶法

预备知识

对角占优矩阵:

若矩阵 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 满足 $|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \quad i = 1, 2, \dots, n$

则称 A 为严格对角占优矩阵.

若矩阵 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 满足 $|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \quad i = 1, 2, \dots, n$

则称 A 为弱对角占优矩阵.



有一类方程组,在前面学习的插值问题中有着重要的作用,即三对角线方程组,其形式为:

$$Ax = f \quad \text{-----}(4.16)$$

其中

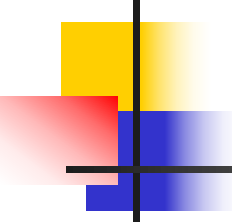
$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

A 称为三对角线矩阵,并且满足

$$(1) \quad |b_1| > |c_1| > 0$$



稀疏
矩阵


$$(1) \quad |b_1| > |c_1| > 0$$

$$(2) \quad |b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \quad a_i \cdot c_i \neq 0 \quad i = 2, \dots, n-1$$

$$(3) \quad |b_n| > |a_n| > 0$$

A 称为对角占优的三对角线矩阵.

显然, A 非奇异, 即 $\det A \neq 0$

证 用归纳法证明。显然, 当 $n=2$ 时有 $\det(A) = \begin{vmatrix} b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} = b_1 b_2 - c_1 a_2 \neq 0$

由 $b_1 \neq 0$ 和消去法, 有

$$A \rightarrow \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2 & c_2 & \vdots & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$



设对 $n-1$ 阶三对角线阵结论成立

显然, $\det(A) = b_1 \det(B)$, 其中

$$B = \begin{pmatrix} \alpha_2 & c_2 & & \\ a_3 & b_3 & c_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & a_n & b_n \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2$$

且有

$$|\alpha_2| = \left| b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2 \right| \geq |b_2| - \left| \frac{c_1}{b_1} \right| |a_2| > |b_2| - |a_2| \geq |c_2| \neq 0$$

于是由归纳法假定有 $\det(B) \neq 0$

$$\Rightarrow \det(A) \neq 0$$



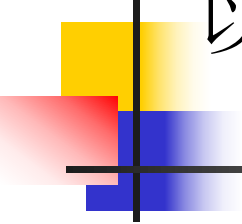
因此 A 的任意 k 阶顺序主子式非零,即 $\det A_k \neq 0$

所以,可以将 A 进行 LU 分解

定理4.3 设矩阵 A 满足条件 (4.17) , 则它可分解为

$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_2 & \ddots & & \\ & \ddots & 1 & \\ & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & u_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & u_n \end{pmatrix}$$

证: P.71



以下以Doolittle分解导出三对角线方程组的解法

设 $A = LU$

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \xrightarrow{r=1} \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ l_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

$$u_{1j} = a_{1j} \quad l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}$$

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ l_2 & u_2 & c_2 & & \\ & l_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \xrightarrow{\dots \xrightarrow{r=n-1}} \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ l_2 & u_2 & c_2 & & \\ & l_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & u_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & l_n & u_n \end{pmatrix}$$

$$u_{rj} = a_{rj} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{kj}$$

$$l_{ir} = \frac{a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr}}{u_{rr}}$$

因此

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix}$$

二对角阵



由 $A = LU$ 可得 L 和 U 的元素的计算公式

$$\begin{cases} u_1 = b_1 \\ l_i = \frac{a_i}{u_{i-1}} & u_i = b_i - l_i c_{i-1} \end{cases} \quad i = 2, \dots, n$$

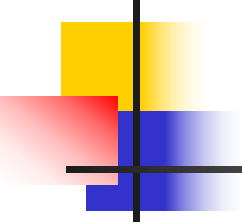
将系数矩阵 A 分解成两对角阵 LU 的乘积后

解三对角线方程组 $Ax = f$ 可化为求解两个三角形方程组

$$Ly = f$$

$$Ux = y$$

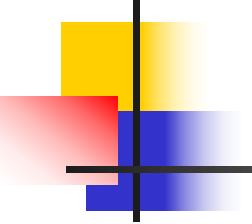
(1) 解 $Ly = f$


$$(L, f) = \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & & & & f_1 \\ l_2 & 1 & & & f_2 \\ & l_3 & \ddots & & f_3 \\ & & \ddots & 1 & \vdots \\ & & & l_n & 1 \\ & & & & f_n \end{array} \right)$$

得

$$\begin{cases} y_1 = f_1 \\ y_i = f_i - l_i \cdot y_{i-1} \quad i = 2, 3, \dots, n \end{cases}$$

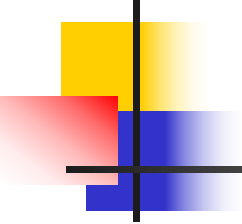
(2) 解 $Ux = y$


$$\begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

得
$$\begin{cases} x_n = \frac{y_n}{u_n} \\ x_i = \frac{y_i - c_i \cdot x_{i+1}}{u_i} \quad i = n-1, \dots, 2, 1 \end{cases}$$

以上得到解 $Ax = f$ 的追赶法.

例4. 用追赶法解三对角线方程组


$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & & \\ 2 & 3 & 1 & \\ & 2 & 3 & 1 \\ & & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} u_1 &= b_1 \\ l_i &= \frac{a_i}{u_{i-1}} \\ u_i &= b_i - l_i c_{i-1} \\ y_1 &= f_1 \end{aligned}$$

解: 设 $a = (a_2, a_3, a_4)^T = (2, 2, 1)^T$

$$b = (b_1, b_2, b_3, b_4)^T = (3, 3, 3, 3)^T$$

$$c = (c_1, c_2, c_3)^T = (1, 1, 1)^T$$

$$f = (f_1, f_2, f_3, f_4)^T = (1, 0, 1, 0)^T$$

$$y_i = f_i - l_i \cdot y_{i-1}$$



(1) 作 A 的 LU 分解

$$u_1 = b_1 = 3$$

$$l_2 = \frac{a_2}{u_1} = \frac{2}{3}$$

$$u_2 = b_2 - l_2 c_1 = 3 - \frac{2}{3} = \frac{7}{3}$$

$$l_3 = \frac{a_3}{u_2} = \frac{6}{7}$$

$$u_3 = b_3 - l_3 c_2 = 3 - \frac{6}{7} = \frac{15}{7}$$

$$l_4 = \frac{a_4}{u_3} = \frac{7}{15}$$

$$u_4 = b_4 - l_4 c_3 = 3 - \frac{7}{15} = \frac{38}{15}$$



(2) 解 $Ly = f$

$$y_1 = f_1 = 1$$

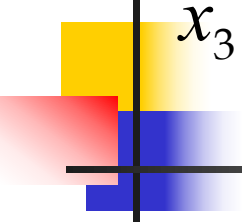
$$y_2 = f_2 - l_2 \cdot y_1 = 0 - \frac{2}{3} \cdot 1 = -\frac{2}{3}$$

$$y_3 = f_3 - l_3 \cdot y_2 = 1 - \frac{6}{7} \left(-\frac{2}{3}\right) = \frac{11}{7}$$

$$y_4 = f_4 - l_4 \cdot y_3 = 0 - \frac{7}{15} \frac{11}{7} = -\frac{11}{15}$$

(3) 解 $Ux = y$

$$x_4 = \frac{y_4}{u_4} = -\frac{11}{38}$$


$$x_3 = \frac{y_3 - c_3 \cdot x_4}{u_3} = \left(\frac{11}{7} + \frac{11}{38}\right) \frac{7}{15} = \frac{33}{38}$$

$$x_2 = \frac{y_2 - c_2 \cdot x_3}{u_2} = \left(-\frac{2}{3} - \frac{33}{38}\right) \frac{3}{7} = -\frac{25}{38}$$

$$x_1 = \frac{y_1 - c_1 \cdot x_2}{u_1} = \left(1 + \frac{25}{38}\right) \frac{1}{3} = \frac{21}{38}$$

因此原线性方程组的解为

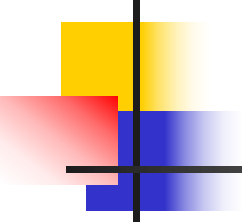
$$x = \left(\frac{21}{38}, -\frac{25}{38}, \frac{33}{38}, -\frac{11}{38}\right)^T$$

三对角阵的追赶法小结

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & \\ c_2 & a_2 & & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & c_n & a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} \gamma_i = c_i, & i = 2, \dots, n \\ \alpha_i = a_i - c_i \beta_{i-1}, & i = 1, \dots, n, \quad c_1 = 0 \\ \beta_i = b_i / \alpha_i, & i = 1, \dots, n \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_i = (f_i - c_i y_{i-1}) / \alpha_i, & i = 1, \dots, n \\ x_i = y_i - \beta_i x_{i+1}, & i = n, \dots, 1 \quad (\beta_n = 0) \end{cases}$$



所以，有计算过程如下：

$$\begin{cases} \alpha_i = a_i - c_i \beta_{i-1} \\ \beta_i = b_i / \alpha_i \\ y_i = (f_i - c_i y_{i-1}) / \alpha_i \end{cases} \quad i = 1, \dots, n$$

$$x_k = y_k - \beta_k x_{k+1} \quad , \quad k = n, \dots, 1$$



4.4 平方根法与改进平方根法

0 预备知识

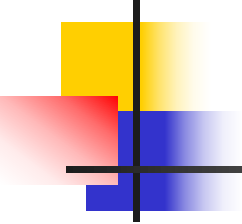
对称正定矩阵的概念与性质

一、平方根法

若 n 阶矩阵 A 为对称正定矩阵，则 $\det(A) > 0, A^T = A$.

且 A 的顺序主子式 $\det A_k > 0, k = 1, 2, \dots, n$

因此 A 可以进行 LU 分解(或 $Doolittle$ 分解)



$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$

将 U 再分解为 $U = DU_0$

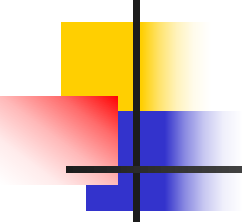
其中, $D = \begin{pmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$ $U_0 = \begin{pmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & \cdots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & 1 & \frac{u_{23}}{u_{22}} & \cdots & \frac{u_{2n}}{u_{22}} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & 1 & \vdots \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$

于是 $A = LU = LDU_0$ (4.22)

由于 $A^T = A$, 因此 $A = U_0^T (DL^T)$

由矩阵三角分解的唯一性, 则 $L = U_0^T$

故 $A = LDL^T$ (4.23)



对角阵 D 还可以分解为

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \text{diag}(\sqrt{u_{11}}, \sqrt{u_{22}}, \dots, \sqrt{u_{nn}}) \cdot \text{diag}(\sqrt{u_{11}}, \sqrt{u_{22}}, \dots, \sqrt{u_{nn}}) \\ &\equiv \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{D}^{1/2} \end{aligned}$$

则有 $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} \mathbf{L}^T = (\mathbf{L} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}})(\mathbf{L} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}})^T \equiv \hat{\mathbf{L}} \hat{\mathbf{L}}^T$

其中 $\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{L} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}}$ 为非奇异下三角阵



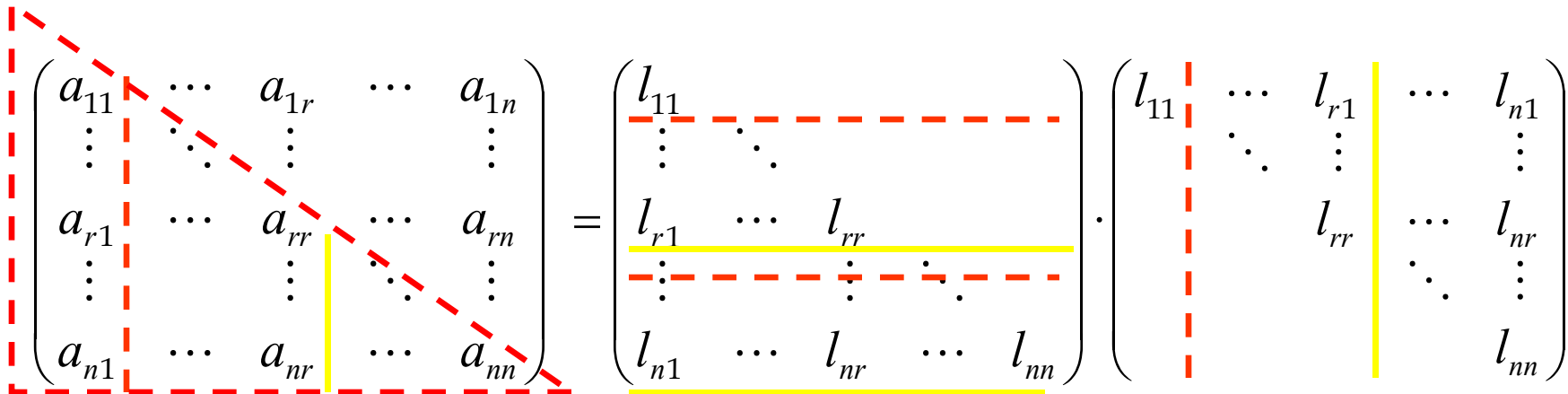
定理 4.4 (对称正定阵的三角分解)

设 A 为 n 阶对称正定矩阵, 则有三角分解:

① $A = LDL^T$, 其中 L 为单位下三角阵, D 为对角阵, 或

② $A = LL^T$, 其中, L 为下三角阵且当限定 L 的对角元素为正时, 这种分解是惟一的。这种矩阵分解称为乔里斯基 (Cholesky) 分解。

$$\text{设 } A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1r} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ a_{r1} & \cdots & a_{rr} & \cdots & a_{rn} \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nr} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad a_{ij} = a_{ji}, \quad L = \begin{pmatrix} l_{11} & & & & \\ \vdots & \ddots & & & \\ l_{r1} & \cdots & l_{rr} & & \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{nr} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1r} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{r1} & \cdots & a_{rr} & \cdots & a_{rn} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nr} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & \cdots & l_{1r} & \cdots & l_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{r1} & \cdots & l_{rr} & \cdots & l_{rn} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & \cdots & l_{nr} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} l_{11} & \cdots & l_{r1} & \cdots & l_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{rr} & \cdots & l_{nr} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

$$a_{11} = l_{11} \cdot l_{11} \quad a_{21} = l_{21} \cdot l_{11} \quad a_{i1} = l_{i1} \cdot l_{11} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

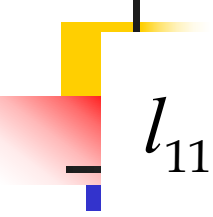
L 的第一列元素 l_{i1} 可以求出

假设 L 的第 $1 \sim r-1$ 列已求出, 考察 A 的第 r 列元素 a_{ir}

$$a_{rr} = \sum_{k=1}^r l_{rk} \cdot l_{rk} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}^2 + l_{rr}^2$$

$$a_{ir} = \sum_{k=1}^r l_{ik} \cdot l_{rk} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} \cdot l_{rk} + l_{ir} \cdot l_{rr} \quad i = r, r+1, \dots, n$$

可得 L 的元素的计算公式


$$l_{11} = \sqrt{a_{11}} \quad l_{i1} = \frac{a_{i1}}{l_{11}} \quad i = 2, 3, \dots, n$$

$$l_{rr} = \sqrt{a_{rr} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}^2} \quad r = 2, \dots, n$$

$$l_{ir} = \frac{a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} \cdot l_{rk}}{l_{rr}} \quad i = r + 1, \dots, n$$

从公式中可以看出,在计算机上运算时,
当 l_{ij} 求出后, a_{ij} 的储存地址可以用来存放 l_{ij}

对称正定线性方程组的解法

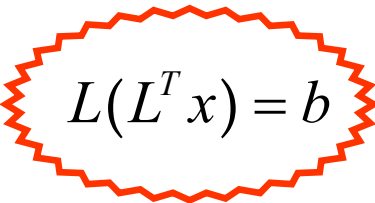


线性方程组 $Ax = b$ 其中 A 为 n 阶对称正定矩阵

则存在主对角元为正数 的下三角阵 L , 使得

$$A = LL^T$$

于是线性方程组可化为两个三角形方程组


$$L(L^T x) = b$$

$$Ly = b$$

$$L^T x = y$$

1. 解 $Ly = b$

$$\begin{cases} y_1 = \frac{b_1}{l_{11}} \\ y_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} \cdot y_k}{l_{ii}} \quad i = 2, 3, \dots, n \end{cases}$$

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & & & & \\ \vdots & \ddots & & & \\ l_{i1} & \cdots & l_{ii} & & \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{ni} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

2. 解 $L^T x = y$

$$\begin{cases} x_n = \frac{y_n}{l_{nn}} \\ x_i = \frac{y_i - \sum_{k=i+1}^n l_{ki} \cdot x_k}{l_{ii}} \quad i = n-1, \dots, 2, 1 \end{cases}$$

$$L^T = \begin{pmatrix} l_{11} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & l_{ii} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & l_{nn} \end{pmatrix}$$

对称正定方程
组的平方根法



二、改进平方根法

A 为对称矩阵且所有顺序主子式均不为零时,
它可分解成 $A = LDL^T$

记

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ l_{21} & 1 & \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \text{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$$

由矩阵乘法运算导出 LDL^T 分解的计算公式:

对 $j=1, 2, \cdots, n$ 有

$$\begin{cases} d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 d_k \\ l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk}) / d_j \quad (i = j+1, j+2, \cdots, n) \end{cases} \quad (4.24)$$



计算顺序:

计算量?

$$\underline{d_1 \rightarrow l_{i1} (i=2,3,\dots,n) \rightarrow d_2 \rightarrow l_{i2} (i=3,4,\dots,n) \rightarrow \dots \rightarrow l_{n,n-1} \rightarrow d_n}$$

若记: $A = LDL^T = LU$, 其中 $U = DL^T$

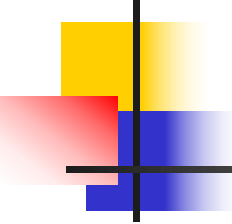
则(4.24)改为

$$\begin{cases} d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} u_{jk} l_{jk} & (j=1,2,\dots,n) \\ u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} u_{ik} l_{jk} & (i=j+1, j+2, \dots, n) \\ l_{ij} = u_{ij} / d_j \end{cases} \quad (4.25)$$

计算量?

计算顺序:

$$d_1 \rightarrow u_{i1} (i=2,3,\dots,n) \rightarrow l_{i1} (i=2,3,\dots,n) \rightarrow d_2 \rightarrow u_{i2} (i=3,4,\dots,n) \rightarrow l_{i2} (i=3,4,\dots,n) \rightarrow d_3 \dots$$



按式(4.25)对矩阵 A 作 LDL^T 分解,
乘法运算量与乔里斯基分解相当.

相应地求解方程组 $Ax=b$ 可分两步进行:

(1)解方程组 $Ly=b$,

(2)由 $L^Tx=D^{-1}y$ 求出 x .

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} y_k \quad (i = 2, 3, \dots, n) \\ x_n = y_n / d_n \\ x_i = \frac{y_i}{d_i} - \sum_{k=i+1}^n l_{ik} x_k \quad (i = n-1, n-2, \dots, 1) \end{cases} \quad (4.26)$$



例4.7 用改进平方根法求解方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}$$

解 按式(4.25)对矩阵A作LDL^T分解

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ -3 & 1 & \frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 9 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & 1 & \frac{2}{3} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$



由式(4.26)计算得

$$y_1 = b_1 = 1, \quad y_2 = b_2 - l_{21}y_1 = 0, \quad y_3 = b_3 - \sum_{k=1}^2 l_{3k}y_k = 15, \quad y_4 = b_4 - \sum_{k=1}^3 l_{4k}y_k = 1;$$

$$x_4 = \frac{y_4}{d_4} = 1, \quad x_3 = \frac{y_3}{d_3} - l_{43}x_4 = 1, \quad x_2 = \frac{y_2}{d_2} - \sum_{k=3}^4 l_{k2}x_k = 1, \quad x_1 = \frac{y_1}{d_1} - \sum_{k=2}^4 l_{k1}x_k = 1.$$



4.5 向量和矩阵的范数

二维向量和三维向量都可以度量其大小和长度.

高维向量的"长度"能否定义呢?

"范数"是对向量和矩阵的一种度量, 实际上是二维和三维向量长度概念的一种推广

数域: 数的集合,对加法和乘法封闭

线性空间: 可简化为向量的集合,对向量的加法和数量乘法封闭,

也称为向量空间

一、向量的范数

定义4.1 对于 n 维向量空间 R^n 中任意一个向量 x ,

若存在唯一的一个实数 $\|x\| \in R$ 与 x 对应, 且满足

- (1) (正定性) $\|x\| \geq 0$, 且 $\forall x \in R^n, \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$;
- (2) (齐次性) $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|, \forall x \in R^n, \alpha \in R$;
- (3) (三角不等式) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \forall x, y \in R^n$.

则称 $\|x\|$ 为向量 x 的范数.

对于复线性空间 C^n 中的向量范数可以类似定义

在向量空间 $R^n(C^n)$ 中, 设 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$

常用的向量 x 的范数有

$$\|x\|_2 = (|x_1|^2 + |x_2|^2 + \dots + |x_n|^2)^{1/2} \quad \text{-----}(1)$$

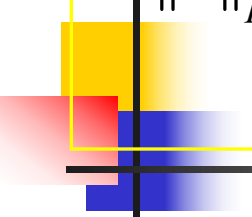
x 的 2-范数或欧氏范数

$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n| \quad \text{-----}(2)$$

x 的 1-范数

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \quad \text{-----}(3)$$

x 的 ∞ -范数或最大范数


$$\|x\|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_n|^p)^{1/p} \quad \text{-----}(4)$$

x 的 p -范数, $p \geq 1$

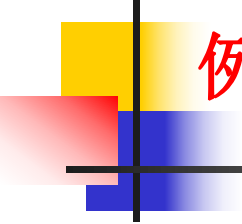
显然 $\|x\|_1$ 和 $\|x\|_2$ 是 $\|x\|_p$ 在 $p = 1$ 和 $p = 2$ 时的特例

并且由于

$$\begin{aligned} \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| &\leq (|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_n|^p)^{1/p} \leq (n \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|^p)^{1/p} \\ &= n^{1/p} \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \rightarrow \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \quad (p \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

$\|x\|_p \rightarrow \|x\|_\infty$ ($p \rightarrow \infty$ 时), 所以 $\|x\|_\infty$ 也是 $\|x\|_p$ 的特例

$$\text{且 } \|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1$$



例6.求向量 $x = (1, 4, 3, -1)^T$ 的各种常用范数.

解: $\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_4| = 9$

$$\|x\|_2 = (|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_4|^2)^{1/2} = \sqrt{27} = 3\sqrt{3}$$

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq 4} |x_i| = 4$$



二、矩阵的范数

定义 4.3 若 $A \in R^{n \times n}$ 的某个非负实值函数 $N(A) \equiv \|A\|$ 满足下述条件

- ① 正定性: $\|A\| \geq 0$, 且 $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = O$;
- ② 齐次性: $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$, α 为实数或复数;
- ③ 三角不等式: $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$, 对任意矩阵 $A, B \in R^{n \times n}$;
- ④ 相容性: $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$;

则称 $N(A) \equiv \|A\|$ 是 $R^{n \times n}$ 上一个矩阵范数 (或模)。



二、矩阵的范数

定理 4.7 （矩阵的算子范数） P.80

设 $x \in R^n$, $A \in R^{n \times n}$, 且给出一种向量范数 $\|x\|_v$,

则相应的定义一个矩阵的非负函数 $N(A) \equiv \|A\|_v$ 。即

$$\|A\|_v = \max_{\substack{x \neq 0 \\ x \in R^n}} \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}.$$

注: 由定理 4.7 知, 算子范数 $\|A\|_v$ 还满足下面的不等式⁺

$$\text{对任意 } x \in R^n, A \in R^{n \times n} \text{ 有 } \|Ax\|_v \leq \|A\|_v \|x\|_v \quad (4.28) \quad +$$



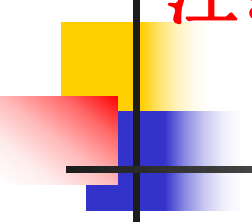
定理 4.8 （矩阵范数计算公式） 设 $x \in R^n$, $A \in R^{n \times n}$, 则

① $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$ （称为 A 的列范数）;

② $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ （称为 A 的行范数）;

③ $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$ （称为 A 的 2-范数），其中 $\lambda_{\max}(A^T A)$

表示 $A^T A$ 的最大特征值。



注： 设 n 阶方阵 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 类似向量的 2-范数

$$\text{设 } \|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2}$$

不难验证其满足定义2的4个条件

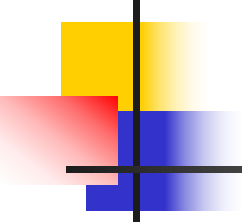
因此 $\|A\|_F$ 是一种矩阵范数

称为Frobenius范数,简称**F-范数**

而且可以验证 $\|A\|_F = \left(\text{tr}(A^T A) \right)^{1/2} = \left(\text{tr}(AA^T) \right)^{1/2}$

tr为矩阵的**迹**

例7. 求矩阵A的各种常用范数


$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$


Column sums: 3, 4, 2
Row sums: 2, 5, 2

解: $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| = \max\{2, 5, 2\} = 5$

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| = \max\{3, 4, 2\} = 4$$

由于 $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$

因此先求 $A^T A$ 的特征值

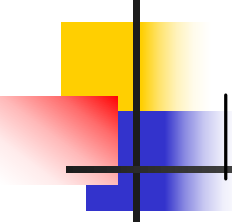

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 9 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

特征方程为

$$\det(\lambda I - A^T A) = \begin{vmatrix} \lambda - 2 & 0 & -1 \\ 0 & \lambda - 9 & 1 \\ -1 & 1 & \lambda - 2 \end{vmatrix} = 0$$

可得 $A^T A$ 的特征值为

$$\lambda_1 = 9.1428, \lambda_2 = 2.9211, \lambda_3 = 0.9361$$



$$\lambda_{\max}(A^T A) = 9.1428$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)} = 3.0237$$

$$\|A\|_F = \sqrt{\text{tr}(A^T A)} = \sqrt{2 + 9 + 2} = 3.6056$$

$$\|A\|_1$$

$$\|A\|_{\infty}$$

$$\|A\|_2$$

$$\|A\|_F$$

容易计算

计算较复杂

对矩阵元素的变化比较敏感

较少使用

性质较好

使用最广泛



4.7 解线性方程组的迭代法

在用直接法解线性方程组时,要对系数矩阵不断变换.

如果方程组的阶数很高,则运算量将会很大,并且大量占用计算机资源.

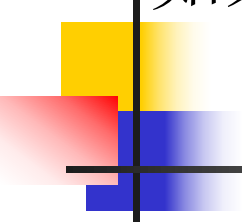
因此对线性方程组 $Ax = b$ -----(4.2)

其中 $A \in R^{n \times n}, b \in R^n, x \in R^n$

要求:找寻更经济、适用的数值解法.

$$Ax = b \xleftarrow{\text{等价变换}} x = Bx + d$$

$$\xrightarrow{\text{建立迭代格式}} x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$$



如果能将线性方程组(1)变换为

$$x = Bx + f \quad \text{-----}(4.31)$$

其中 $B \in R^{n \times n}$, $f \in R^n$, $x \in R^n$

显然,(4.2)式和(4.31)式同解,我们称两者**等价**.

对线性方程组(4.31),采用以下步骤:

取初始向量 $x^{(0)}$,代入(4.31),可得

$$x^{(1)} = Bx^{(0)} + f$$

依此类推


$$x^{(2)} = Bx^{(1)} + f$$

$$\vdots$$

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f \quad \text{-----}(4.32)$$

$$(k = 0, 1, 2, \dots)$$

迭代矩阵B

这种方式就称为**迭代法**, 以上过程称为迭代过程

迭代法产生一个序列 $\{x^{(k)}\}_0^\infty$

如果其极限存在, 即 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*$

则称迭代法**收敛**, 否则称为**发散**.

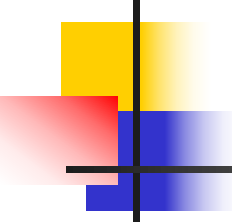
一、雅可比迭代法

设线性方程组(1)的一般形式为

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

设 $a_{ii} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 则可从上式解出 x_i

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}}[b_1 - (a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n)]$$

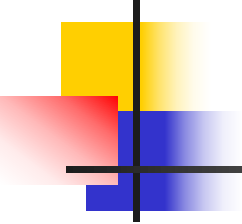


$$x_2 = \frac{1}{a_{22}} [b_2 - (a_{21}x_1 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n)]$$

依此类推,线性方程组(1)可化为

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = \frac{1}{a_{11}} (b_1 - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n a_{1j} x_j) = x_1 + \frac{1}{a_{11}} (b_1 - \sum_{j=1}^n a_{1j} x_j) \\ x_2 = \frac{1}{a_{22}} (b_2 - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n a_{2j} x_j) = x_2 + \frac{1}{a_{22}} (b_2 - \sum_{j=1}^n a_{2j} x_j) \\ \dots\dots\dots \\ x_i = \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j) = x_i + \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j) \\ \dots\dots\dots \\ x_n = \frac{1}{a_{nn}} (b_n - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n a_{nj} x_j) = x_n + \frac{1}{a_{nn}} (b_n - \sum_{j=1}^n a_{nj} x_j) \end{array} \right. \quad \text{-----} (*)$$

对(*)作迭代过程



$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) \text{-----(**)}$$


$$(i = 1, 2, \dots, n; k = 0, 1, 2, \dots)$$

设 $D = \text{diag} (a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn})$

则(**)式转化为矩阵形式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + D^{-1} (b - Ax^{(k)})$$


$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - D^{-1} Ax^{(k)} + D^{-1} b$$


$$x^{(k+1)} = D^{-1} (D - A)x^{(k)} + D^{-1} b \text{-----}(4.33)$$

令

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

A 的下三角部分
的负矩阵

$$U = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

A 的上三角部分
的负矩阵

$$A = D - L - U$$

$$D - A = L + U$$

选取 $M = D$ ，则 $N = M - A = L + U$ 。

$$\Rightarrow D\mathbf{x} = (L + U)\mathbf{x} + \mathbf{b}$$

故迭代过程(4.33)化为

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(L + U)x^{(k)} + D^{-1}b$$

令 $B_J = D^{-1}(L + U)$, $f = D^{-1}b$, 于是

$$x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + f \quad \text{-----}(4.34)$$

$$(k = 0, 1, 2, \dots)$$

等价线性方程组为 $x = B_J x + f \iff Ax = b$

称 (4.34) 式为解线性方程组(4.2)的 **Jacobi** 迭代法

B_J 为 *Jacobi* 迭代法的迭代矩阵

Jacobi迭代法小结

将非奇异矩阵 A 分裂成 $A = D - L - U$

$$Ax = b \Rightarrow x = D^{-1}(L + U)x + D^{-1}b$$

由此构造雅可比迭代法

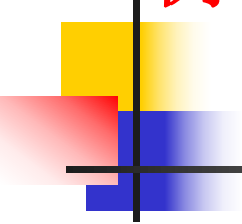
$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(0)} \text{ (初始向量)} \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = B_J \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f} \end{cases} \text{-----}(4.34)$$

其中迭代矩阵 $B_J = D^{-1}(L + U)$, 而 $\mathbf{f} = D^{-1}b$.

分量形式

$$x_i^{(k+1)} = (b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)}) / a_{ii}, i = 1, 2, \dots, n \text{-----}(4.35)$$

例1. 用Jacobi迭代法求解方程组,误差不超过1e-4.



$$\begin{pmatrix} 8 & -3 & 2 \\ 4 & 11 & -1 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 33 \\ 12 \end{pmatrix}$$

解:

$$A = \begin{pmatrix} 8 & -3 & 2 \\ 4 & 11 & -1 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

2

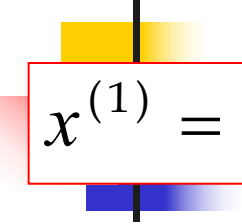
$$D = \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 \\ 0 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 0 & 3 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -4 & 0 & 0 \\ -2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$


$$B_J = D^{-1}(L + U) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{3}{8} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{4}{11} & 0 & \frac{1}{11} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix}$$

$$f = D^{-1}b = \begin{pmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

取初值 $x^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T$, 使用 *Jacobi* 迭代法

$$x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + f \quad (k = 0, 1, 2, \dots, n, \dots)$$



$$x^{(1)} = B_J x^{(0)} + f = \begin{pmatrix} 0 & \frac{3}{8} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{4}{11} & 0 & \frac{1}{11} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$= [2.5, 3, 3]^T \quad \|x^{(1)} - x^{(0)}\|_2 = 4.924$$

$$x^{(2)} = B_J x^{(1)} + f = \begin{pmatrix} 0 & \frac{3}{8} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{4}{11} & 0 & \frac{1}{11} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$= [2.875, 2.3636, 1]^T \quad \|x^{(2)} - x^{(1)}\| = 2.1320$$

$$x^{(3)} = B_J x^{(2)} + f = \begin{pmatrix} 0 & \frac{3}{8} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{4}{11} & 0 & \frac{1}{11} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2.875 \\ 2.3636 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$= [3.1364, 2.0455, 0.9716]^T \quad \|x^{(3)} - x^{(2)}\| = 0.4127$$

依此类推,得方程组满足精度的解为 x_{12}

x4 =	3.0241	1.9478	0.9205	d =	0.1573
x5 =	3.0003	1.9840	1.0010	d =	0.0914
x6 =	2.9938	2.0000	1.0038	d =	0.0175
x7 =	2.9990	2.0026	1.0031	d =	0.0059
x8 =	3.0002	2.0006	0.9998	d =	0.0040
x9 =	3.0003	1.9999	0.9997	d =	7.3612e-004
x10 =	3.0000	1.9999	0.9999	d =	2.8918e-004
x11 =	3.0000	2.0000	1.0000	d =	1.7669e-004
x12 =	3.0000	2.0000	1.0000	d =	3.0647e-005

迭代次数
为12次

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.0000 \\ 2.0000 \\ 1.0000 \end{pmatrix}$$

二、高斯-塞德尔迭代法

分析Jacobi迭代法(**)的迭代过程,将(**)式细化

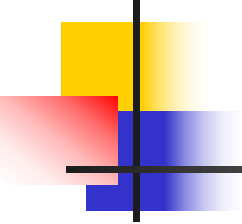
$$x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} + \frac{1}{a_{11}}(b_1 - \sum_{j=1}^n a_{1j}x_j^{(k)})$$

$$x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} + \frac{1}{a_{22}}(b_2 - \sum_{j=1}^n a_{2j}x_j^{(k)})$$

发现在 $x_i^{(k+1)}$ 之前, $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 已经求出

但当求 $x_i^{(k+1)}$ 时, 仍用 $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ 进行迭代

能否求 $x_i^{(k+1)}$ 时, 利用 $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 进行迭代呢 ?


$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)}), i = 1, 2, \dots, n \quad \text{-----}(4.36)$$

选取 $M = D - L$ (下三角矩阵), 于是 $N = M - A = U$ 。

方程组 $Ax=b$ 转化为 $(D - L)x = Ux + b$

于是得到高斯—塞德尔迭代公式:

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(0)} (\text{初始向量}) \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_G \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f} \end{cases} \quad (4.38)$$

其中, $\mathbf{B}_G = (D - L)^{-1} U$, $\mathbf{f} = (D - L)^{-1} \mathbf{b}$ 。

称 \mathbf{B}_G 为解 (4.38) 的高斯-塞德尔迭代法的迭代矩阵。

Gauss-Seidel迭代法也可表示成

$$x_1^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{11}} \sum_{j=2}^n a_{1j} x_j^{(k)} + \frac{1}{a_{11}} b_1$$

$$x_2^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{22}} \sum_{j=1}^1 a_{2j} x_j^{(k+1)} - \frac{1}{a_{22}} \sum_{j=3}^n a_{2j} x_j^{(k)} + \frac{1}{a_{22}} b_2$$

$$x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{33}} \sum_{j=1}^2 a_{3j} x_j^{(k+1)} - \frac{1}{a_{33}} \sum_{j=4}^n a_{3j} x_j^{(k)} + \frac{1}{a_{33}} b_3$$

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{ii}} \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \frac{1}{a_{ii}} \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}} b_i$$

$$x_n^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{nn}} \sum_{j=1}^{n-1} a_{nj} x_j^{(k+1)} + \frac{1}{a_{nn}} b_n$$



例2. 用Gauss-Seidel迭代法求解**例1**.

$$\begin{pmatrix} 8 & -3 & 2 \\ 4 & 11 & -1 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 33 \\ 12 \end{pmatrix}$$

解： 取初值 $x^{(0)} = [0,0,0]^T$, 使用 *Gauss - Seidel* 迭代法

$$x_1^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{11}} \sum_{j=2}^3 a_{1j} x_j^{(k)} + \frac{1}{a_{11}} b_1 = -\frac{1}{8} (-3x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)}) + 2.5$$



例2.

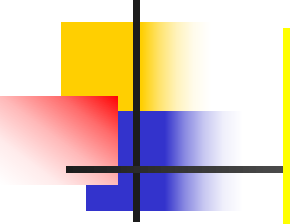
$$\begin{pmatrix} 8 & -3 & 2 \\ 4 & 11 & -1 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 33 \\ 12 \end{pmatrix}$$

$$x_1^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{11}} \sum_{j=2}^3 a_{1j} x_j^{(k)} + \frac{1}{a_{11}} b_1 = -\frac{1}{8} (-3x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)}) + 2.5$$

$$\begin{aligned} x_2^{(k+1)} &= -\frac{1}{a_{22}} \sum_{j=1}^1 a_{2j} x_j^{(k+1)} - \frac{1}{a_{22}} \sum_{j=3}^3 a_{2j} x_j^{(k)} + \frac{1}{a_{22}} b_2 \\ &= -\frac{4}{11} x_1^{(k+1)} + \frac{1}{11} x_3^{(k)} + 3 \end{aligned}$$

$$x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{33}} \sum_{j=1}^2 a_{3j} x_j^{(k+1)} + \frac{1}{a_{33}} b_3 = -\frac{1}{4} (2x_1^{(k+1)} + 1x_2^{(k+1)}) + 3$$

通过迭代,至第7步得到满足精度的解 x_7



x1 =2.5000	2.0909	1.2273	d =3.4825
x2=2.9773	2.0289	1.0041	d =0.5305
x3 =3.0098	1.9968	0.9959	d =0.0465
x4 =2.9998	1.9997	1.0002	d =0.0112
x5 =2.9998	2.0001	1.0001	d =3.9735e-004
x6 =3.0000	2.0000	1.0000	d =1.9555e-004
x7 =3.0000	2.0000	1.0000	d =1.1576e-005

从例1和例2可以看出,Gauss-Seidel迭代法的收敛速度比Jacobi迭代法要高。

但一般情况不一定成立！ P.86



三、超松弛迭代法

逐次超松弛迭代法,简称SOR方法

选取分裂矩阵 M 为带参数的下三角阵 $M = \frac{D - \omega L}{\omega}$

其中, $\omega > 0$ 为可选择的松弛因子。


于是可得迭代矩阵

$$B_s = I - M^{-1}A = (D - \omega L)^{-1}((1 - \omega)D + \omega U)。$$

得到解 $Ax = b$ 的逐次超松弛迭代公式:

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(0)} \text{ (初始向量)} \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = B_s \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f} \end{cases} \quad (4.41)$$

其中, $\mathbf{f} = \omega(D - \omega L)^{-1} \mathbf{b}$ 。



SOR 方法的分量形式:

已知: 第 k 次近似 $\mathbf{x}^{(k)}$ 及第 $k+1$ 次近似的

分量 $x_j^{(k+1)}$ ($j = 1, 2, \dots, i-1$)

(1) 用 G-S 迭代法计算一个**辅助量** $\tilde{x}_i^{(k+1)}$:

$$\tilde{x}_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) \quad (4.42)$$

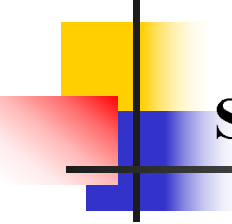


(2) 由 $\mathbf{x}^{(k)}$ 的第 i 个分量 $x_i^{(k)}$ 与 $\tilde{x}_i^{(k+1)}$ 加权平均,

定义 $x_i^{(k+1)}$:

$$x_i^{(k+1)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} + \omega\tilde{x}_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega(\tilde{x}_i^{(k+1)} - x_i^{(k)})$$

(4.43)



SOR 方法的分量形式:

$$\left\{ \begin{array}{l} x^{(0)} = (x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T \\ x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}} \quad \text{-----}(4.44) \\ (i = 1, 2, \dots, n) \\ \text{其中 } x^{(k)} = (x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T, \omega \text{ 称为松弛因子} \end{array} \right.$$

注：迭代过程收敛，要求 $0 < \omega < 2$.

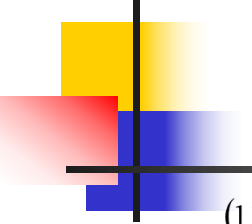


例 4.15 用 SOR 方法解方程组

$$\begin{pmatrix} -4 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -4 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -4 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

解 取初始向量 $\mathbf{x}^{(0)} = (0.0, 0.0, 0.0, 0.0)^T$, SOR 迭代公式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{\omega}{4}(1 + 4x_1^{(k)} - x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - x_4^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{\omega}{4}(1 - \underline{x_1^{(k+1)}} + 4x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - x_4^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - \frac{\omega}{4}(1 - \underline{x_1^{(k+1)}} - \underline{x_2^{(k+1)}} + 4x_3^{(k)} - x_4^{(k)}) \\ x_4^{(k+1)} = x_4^{(k)} - \frac{\omega}{4}(1 - \underline{x_1^{(k+1)}} - \underline{x_2^{(k+1)}} - \underline{x_3^{(k+1)}} + 4x_4^{(k)}) \end{cases} \quad (k = 0, 1, \dots)$$



① 当取松弛因子 $\omega = 1.3$ 时，计算结果为

$$\mathbf{x}^{(11)} = (-0.99999646, -1.00000310, -0.99999953, -0.99999912)^T$$

且
$$\|\boldsymbol{\varepsilon}^{(11)}\|_{\infty} = \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(11)}\|_{\infty} \leq 3.54 \times 10^{-6}$$

迭代次数 $k = 11$ 。

② 当取 $\omega = 1.0$ 时，初始向量相同，达到同样精度，所需迭代次数 $k = 22$

③ 当取 $\omega = 1.7$ 时，初始向量相同，达到同样精度，则需迭代次数 $k = 33$

○
○
○
松弛因子?



4.8 迭代法的收敛性及误差估计

一、迭代法的收敛性

定义 4.6 矩阵 A 的所有特征值 λ_i ($i = 1, \dots, n$) 的模的最大值称为它的谱半径,

记为 $\rho(A)$, 即 $\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$ 。 -----(4.45)

一、迭代法的收敛性

定理 4.11 迭代过程 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 对任给初始向量 $x^{(0)}$ 收敛的充分必要条件是矩阵 B 的谱半径 $\rho(B) < 1$ 。

略证 证 必要性: 若 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*$, 则 $x^* = Bx^* + f$. 因为

$$x^{(k)} - x^* = Bx^{(k-1)} + f - (Bx^* + f) = B(x^{(k-1)} - x^*) = \cdots = B^k(x^{(0)} - x^*)$$

所以
$$\lim_{k \rightarrow \infty} B^k(x^{(0)} - x^*) = \lim_{k \rightarrow \infty} (x^{(k)} - x^*) = 0$$

由 $x^{(0)}$ 的任意性知 $\lim_{k \rightarrow \infty} B^k = O$. 再由引理得 $\rho(B) < 1$.

充分性: 若 $\rho(B) < 1$, 则 $\lim_{k \rightarrow \infty} B^k = O$; 另一方面, $\lambda = 1$ 不是 B 的特征值, 从而

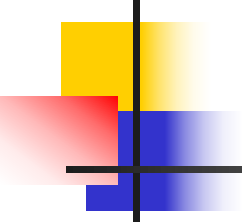
$I - B$ 是非奇异矩阵, $(I - B)x = f$ 有唯一解, 记为 x^* , 即 $x^* = Bx^* + f$. 于是有

$$x^{(k)} - x^* = B^k(x^{(0)} - x^*). \text{ 进一步地有, } \lim_{k \rightarrow \infty} (x^{(k)} - x^*) = \lim_{k \rightarrow \infty} B^k(x^{(0)} - x^*) = 0$$

因此序列 $\{x^{(k)}\}$ 是收敛的, 且收敛于 x^* .

推论 4.1

推论 4.2



定理 Jacobi 迭代法收敛的充分必要条件是 $\rho(B_J) < 1$;

G-S 迭代法收敛的充分必要条件是 $\rho(B_G) < 1$.

定义 4.8 设 $A = (a_{ij})_{n \times n}$, 如果 A 满足

(1) $|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 且至少有一个 $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ 使得式中的

不等号成立, 则称 A 为按行弱对角占优矩阵;

(2) $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \geq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 则称 A 为按行严格对角占优矩阵.



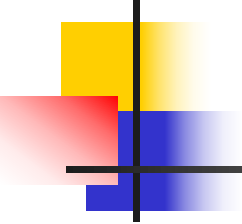
几个常用的判别法

定理 4.12 若 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 为严格对角占优阵，则 A 为非奇异矩阵。

定理 4.13 设 $Ax = b, A \in R^{n \times n}$ 。如果 A 为严格对角占优阵，则

解 $Ax = b$ 的 Jacobi 方法，G-S 迭代法都收敛；

且 G-S 迭代法收敛比 Jacobi 方法快。

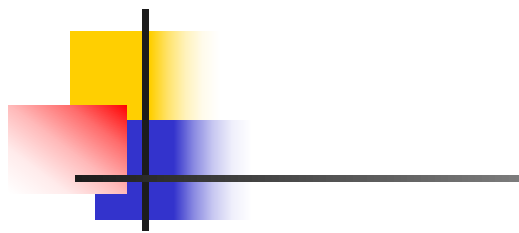


定理 4.14 设 $Ax = b$, 其中 A 为对称正定阵, 则解

$Ax = b$ 的 SOR 方法收敛 $\Leftrightarrow 0 < \omega < 2$.

推论 4.3 设 $Ax = b$, 其中 A 为对称正定阵,
则 G—S 迭代法收敛。

例 试考察用Jacobi方法,G-S迭代法解下面方程组的**收敛性**.


$$\begin{cases} 6x_1 + x_2 - 3x_3 = 17.5 \\ x_1 + 8x_2 + 3x_3 = 10 \\ -x_1 + 4x_2 + 12x_3 = -12 \end{cases}$$

解 由于

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 1 & -3 \\ 1 & 8 & 3 \\ -1 & 4 & 12 \end{bmatrix}$$

为严格对角占优阵.

于是可知解方程组 $Ax=b$ 的Jacobi迭代法, G-S迭代法均收敛。



4.10 数值实验

部分命令	含义
trial(A)	提取 A 的下三角部分
triu(A)	提取 A 的上三角部分
norm(A,p)	p 范数
cond(A,p)	条件数
[L,U,P]=lu(A)	选列主元 LU 分解
R=chol(X)	平方根分解

$[L, U] = \text{lu}(A)$;

%矩阵A的LU分解，输出矩阵L和U，其中L是下三角矩阵，U是上三角矩阵。