第三章　线性代数方程组的解法

- n 阶线性方程组的一般形式为：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{3.1}$$

用矩阵表示为：

$$Ax = b \tag{3.2}$$

其中 A 称为**系数矩阵**，x 称为**解向量**，b 称为**常数向量**（简称**方程组自由项**），它们分别为：

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

如果矩阵 A 非奇异，即 A 的行列式值 $\det(A) \neq 0$，则根据**克莱姆（Cramer）规则**，方程组有唯一解：

$$x_i = \frac{D_i}{D}, i = 1,2,\cdots,n$$

其中 $D = \det(A)$，D_i 表示 D 中第 i 列换 b 后所得的行列式值。但克莱姆规则不适用于求解线性方程组，因为计算工作量太大。

- **实际用于求解线性方程组的计算方法主要有两种：一是消元法，它属于直接解法；二是迭代法。消元法的优点是可**

以预先估计计算工作量，并且根据消元法的基本原理，可以得到矩阵运算（如矩阵求逆等）的求解方法。但是，由于实际计算过程总存在有误差，由消元法得到的结果并不是绝对精确的，存在数值计算的稳定性问题。**迭代法的优点**是简单，便于编制计算机程序。在迭代解法中，必须考虑迭收敛速度快慢的问题。

§1　高斯消元法与选主元技巧

求解线性方程组的直接解法主要是高斯消元法。

- **高斯消元法的基本思想：**通过**初等行变换**，将一个方程乘以某个常数，一个方程加上另一个方程的常数倍等，减少方程中的未知数数目，最终将线性方程组（3.2）化为**三角形方程组**，从而得到所需要的解。

1.1　三角形方程组及其解法

对上三角形方程组：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad \cdots\cdots \\ \qquad\qquad a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{3.3}$$

可以通过**回代的方法求解：**先从第 n 个方程求出 x_n，代入第 $n-1$ 个方程求出 x_{n-1}，依次类推，可以逐次回代求出所有 $x_i(i=n,n-1,\cdots,1)$，**计算公式如下：**

$$
\begin{cases}
x_n = \dfrac{b_n}{a_{nn}} \\[2ex]
x_i = \dfrac{b_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij} \cdot x_j}{a_{ii}}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1
\end{cases} \tag{3.5}
$$

注：要求 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 \ (i = 1,2,\cdots,n)$ 。

对下三角形方程组：

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1 & = b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 & = b_2 \\
\quad \cdots\cdots & \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n & = b_n
\end{cases}
$$

可以通过**前代的方法求解：**先从第 1 个方程求出 x_1，代入第 2 个方程求出 x_2，依次类推，可以逐次前代求出所有 $x_i(i = 1,2,\cdots,n)$，**计算公式如下：**

$$
\begin{cases}
x_1 = \dfrac{b_1}{a_{11}} \\[2ex]
x_i = \dfrac{b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} \cdot x_j}{a_{ii}}, \quad i = 2, 3, \cdots, n
\end{cases}
$$

- **回代法和前代法的计算量都是$\frac{1}{2}n(n+1)$次乘除运算。**

1.2 高斯消元法

- **高斯消元法**：将线性方程组等价地变换为一个上三角形方程组，然后用回代法求解，它包括**消元**和**回代**两个过程。

例 1 求解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 1 \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}$$

解 将该线性方程组写成增广矩阵的形式，并用**高斯法求解过程如下：**

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 1 & 3 & -2 & 1 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \overset{r_2 - r_1}{\underset{r_3 - 2r_1}{\sim}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 2 & -3 & -5 \\ 0 & -4 & -1 & -11 \end{pmatrix} \overset{r_3 + 2r_2}{\sim} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 2 & -3 & -5 \\ 0 & 0 & -7 & -21 \end{pmatrix}$$

得**同解的上三角形方程组：**

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ \qquad 2x_2 - 3x_3 = -5 \\ \qquad\qquad -7x_3 = -21 \end{cases}$$

回代求解得：

$$\boldsymbol{x_3 = 3,\ x_2 = 2,\ x_1 = 1.}$$

- **高斯消元法解线性方程组分为两大步：消元和回代。**

（1）将系数矩阵 A 经过一系列的初等行变换变成右上三角矩阵，其常向量 b 也同时作相应的变换，即

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{a_{11}} & \boldsymbol{a_{12}} & \cdots & \boldsymbol{a_{1n}} & \boldsymbol{b_1} \\ \boldsymbol{a_{21}} & \boldsymbol{a_{22}} & \cdots & \boldsymbol{a_{2n}} & \boldsymbol{b_2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{a_{n1}} & \boldsymbol{a_{n2}} & \cdots & \boldsymbol{a_{nn}} & \boldsymbol{b_n} \end{pmatrix} \triangleq \begin{pmatrix} \boldsymbol{a_{11}^{(1)}} & \boldsymbol{a_{12}^{(1)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{1n}^{(1)}} & \boldsymbol{b_1^{(1)}} \\ \boldsymbol{a_{21}^{(1)}} & \boldsymbol{a_{22}^{(1)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{2n}^{(1)}} & \boldsymbol{b_2^{(1)}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{a_{n1}^{(1)}} & \boldsymbol{a_{n2}^{(1)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{nn}^{(1)}} & \boldsymbol{b_n^{(1)}} \end{pmatrix}$$

$$\sim\begin{pmatrix} \boldsymbol{a_{11}^{(1)}} & \boldsymbol{a_{12}^{(1)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{1n}^{(1)}} & \boldsymbol{b_1^{(1)}} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{a_{22}^{(2)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{2n}^{(2)}} & \boldsymbol{b_2^{(2)}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{a_{n2}^{(2)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{nn}^{(2)}} & \boldsymbol{b_n^{(2)}} \end{pmatrix} \triangleq (\boldsymbol{A}^{(2)} \quad \boldsymbol{b}^{(2)})$$

其中第 i 行加上第 1 行的$-m_{i1}$倍（即 $r_i - m_{i1}r_1$ ）:

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)} \qquad (i,j = 2,3,\cdots,n)$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)} \qquad (i = 2,3,\cdots,n)$$

$$m_{i1} = a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)} \qquad (i = 2,3,\cdots,n)$$

对 $\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)}$ 再进行消元，可得:

$$(\boldsymbol{A}^{(3)} \quad \boldsymbol{b}^{(3)}) \triangleq \begin{pmatrix} \boldsymbol{a_{11}^{(1)}} & \boldsymbol{a_{12}^{(1)}} & \boldsymbol{a_{13}^{(1)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{1n}^{(1)}} & \boldsymbol{b_1^{(1)}} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{a_{22}^{(2)}} & \boldsymbol{a_{23}^{(2)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{2n}^{(2)}} & \boldsymbol{b_2^{(2)}} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{a_{33}^{(3)}} & & \boldsymbol{a_{3n}^{(3)}} & \boldsymbol{b_3^{(3)}} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{a_{n3}^{(3)}} & \cdots & \boldsymbol{a_{nn}^{(3)}} & \boldsymbol{b_n^{(3)}} \end{pmatrix}$$

其中第 i 行加上第 2 行的$-m_{i2}$倍（即 $r_i - m_{i2}r_2$ ）:

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - m_{i2}a_{2j}^{(2)} \qquad (i,j = 3,4,\cdots,n)$$

$$b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - m_{i2}b_2^{(2)} \qquad (i = 3,4,\cdots,n)$$

$$m_{i2} = a_{i2}^{(2)}/a_{22}^{(2)} \qquad (i = 3,4,\cdots,n)$$

重复上述过程，**在 $\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(k)}$的基础上，进行第 $\boldsymbol{k}$ 次消元:**

第 i 行加上第 $\boldsymbol{k}$ 行的$-m_{ik}$倍（即 $r_i - m_{ik}r_k$ ）:

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik}a_{kj}^{(k)} \qquad (i,j = k+1,\cdots,n)$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik}b_k^{(k)} \qquad (i = k+1,\cdots,n)$$

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} \qquad (i = k+1,\cdots,n)$$

得到与 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$同解的方程组: $\boldsymbol{A}^{(k+1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(k+1)}$ $(k = 1,\cdots,n-1)$。

$$\left(\boldsymbol{A}^{(n)}\quad \boldsymbol{b}^{(n)}\right) \triangleq \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_{11}^{(1)} & \boldsymbol{a}_{12}^{(1)} & \cdots & \boldsymbol{a}_{1n}^{(1)} & \boldsymbol{b}_{1}^{(1)} \\ & \boldsymbol{a}_{22}^{(2)} & \cdots & \boldsymbol{a}_{2n}^{(2)} & \boldsymbol{b}_{2}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & \boldsymbol{a}_{nn}^{(n)} & \boldsymbol{b}_{n}^{(n)} \end{pmatrix} \qquad (3.8)$$

- **保证高斯消元法能够顺利进行的条件：各次主元素** $a_{ii}^{(i)} \neq 0\,(i=1,2,\cdots,n)$。**主元** $a_{ii}^{(i)} \neq 0\,(i=1,2,\cdots,k)$ 的充要条件为主子矩阵 $A_i \neq 0\,(i=1,2,\cdots,k)$ 非奇异，$k \leq n$。

由此得到：

定理 1 设 $A=\left[a_{ij}^{(1)}\right] \in R^{n\times n}, b=(b_1^{(1)}, b_2^{(1)}, \cdots, b_n^{(1)})^T \in R^n$。若约化主元 $a_{kk}^{(k)} \neq 0\ (k=1,2,\cdots,n)$，则可通过**高斯消元法**将方程组 $Ax=b$ 约化为三角形方程组（**3.8**）求解，其计算公式如下：

（1）**消元计算**：对 $k=1,2,\cdots,n-1$ 依次计算

$$\begin{cases} m_{ik}=a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} & (i=k+1,k+2\cdots,n) \\ a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-m_{ik}a_{kj}^{(k)} & (i,j=k+1,k+2\cdots,n) \\ b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-m_{ik}b_k^{(k)} & (i=k+1,k+2\cdots,n) \end{cases} \quad (\mathbf{3.9})$$

（2）**回代求解**：

$$\begin{cases} x_n=b_n^{(n)}/a_{nn}^{(n)} \\ x_i=(b_i^{(i)}-\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)}x_j)/a_{ii}^{(i)} \end{cases} \quad (\mathbf{3.10})$$

$$(i=n-1,n-2,\cdots,1)$$

- **高斯消元法求解线性方程组的算法分析：**

（1）算法的时间复杂度： 算法执行过程中所需乘除法次数。

消元过程中，第 k 次消元中，计算 m_{ik} 需 $n-k$ 次除法，计算

$a_{ij}^{(k+1)}$需$(n-k)^2$次乘法，计算$b_i^{(k+1)}$需$n-k$次乘法，所以共需乘除法运算总数为：

$$S_1 = 2\sum_{k=1}^{n-1}(n-k) + \sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2$$

回代过程中，共需乘除法运算总数为：

$$S_2 = 1 + 2 + \cdots + n = \frac{n(n+1)}{2}$$

故用**高斯消元法求解一个$\boldsymbol{n}$阶线性方程组共需乘除法运算的总数为**

$$\boldsymbol{S = S_1 + S_2 = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n = O(n^3)} \qquad \textbf{(3.11)}$$

（2）算法的空间复杂度：算法执行过程中所需存储空间。

在上述算法中，数据空间为系数矩阵、解向量与常数向量所占的存储空间，而所需要的额外空间（算法程序中的工作单元、循环控制变量等所占的存储空间）与数据空间无关。因此，上述算法符合**原地工作**的原则。

（3）数值计算的稳定性

第k次消元中，计算m_{ik}要用$a_{kk}^{(k)}$作除数。由此会带来以下**两个问题：**

当$\left|a_{kk}^{(k)}\right| = 0$，运算就会中断（因为出现分母为0的情况）；

即使$\left|a_{kk}^{(k)}\right| \neq 0$，但当$\left|a_{kk}^{(k)}\right|$很小时，一方面会损失精度，另一方面还可能会导致商太大而使计算产生溢出。所以，**高斯消元法对数值计算是不稳定的。**

1.3 列主元消元法

高斯消元法是按照方程及未知数给定的排列顺序依次进行消元计算，也称为**顺序消元法**。虽然 A 非奇异，但不能保证 A 的顺序主子矩阵非奇异；即使 A 的顺序主子矩阵非奇异，也可能因为 $\left|a_{kk}^{(k)}\right|$ 很小而使计算结果不可靠。例如：

$$\begin{cases} 0.00001x_1 + 2x_2 = 1 \\ \qquad\quad 2x_1 + 3x_2 = 2 \end{cases}$$

用顺序消元法求解（4 位浮点数进行运算），有

$$\begin{pmatrix} 0.00001000 & 2.000 & \vdots & 1.000 \\ 2.000 & 3.000 & \vdots & 2.000 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0.1000\times 10^{-4} & 2.000 & \vdots & 1.000 \\ 0.000 & -0.4000\times 10^{6} & \vdots & -0.2000\times 10^{6} \end{pmatrix}$$

回代求得：$x_2 = 0.5000$，$x_1 = 0.0000$

与方程组的准确解 $x_2 = 0.499998\cdots$，$x_1 = 0.250001\cdots$ 相比，严重失真。

为了避免上述高斯消元法中数值计算的不稳定性，一般要在每次消元之前增加一个选主元的过程，将绝对值最大或较大的元素交换到主元素的位置上。

- **列主元消元法**

列主元的思想是：当变换到第 k 步时，从第 k 列 $a_{kk}^{(k)}$ 以下（包括 $a_{kk}^{(k)}$）的各元素中选出绝对值最大者，然后通过行变换将它交换到主元素 $a_{kk}^{(k)}$ 的位置 (k,k) 上。即选取 $a_{i_k k}^{(k)}$，满足：$|a_{i_k k}^{(k)}| = \max\limits_{k\le i\le n} |a_{ik}^{(k)}|$，进行 k 行与 i_k 互换。

对于上例，我们有：

$$\begin{pmatrix} 0.00001000 & 2.000 \vdots & 1.000 \\ 2.000 & 3.000 \vdots & 2.000 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2.000 & 3.000 \vdots & 2.000 \\ 0.00001000 & 2.000 \vdots & 1.000 \end{pmatrix}$$

$$\to \begin{pmatrix} 2.000 & 3.000 \vdots & 2.000 \\ 0.0000 & 2.000 \vdots & 1.000 \end{pmatrix}$$

回代求得： $x_2 = 0.5000$，$x_1 = 0.2500$。

例 2 （参见教材 p. 40）。

采用列主元的高斯消元法是不影响求解结果的。

列主元保证了当前的主元素 $a_{kk}^{(k)}$ 是第 k 列中 $a_{kk}^{(k)}$ 以下元素中的绝对值最大者，但还不能保证它是同一行（即第 k 行）中的绝对值最大者。因此，经过列选主元后，虽然避免了 $a_{kk}^{(k)} = 0$，但其计算过程还是不稳定的，不适于求解大规模的线性方程组。

- **全选主元（简称为全主元）**

全主元的基本思想是：当变换到第 k 步时，从系数矩阵的右下角 $(n-k+1)$ 阶矩阵中选取绝对值最大的元素，然后通过行，列变换将它交换到主元素 $a_{kk}^{(k)}$ 的位置 (k,k) 上。

在求解线性方程组的高斯消元法的变换过程中，虽然行交换不影响最后求解的结果，但**列交换将会导致最后结果（即解向量）中对应未知数的次序混乱。即在进行列交换时，相应的两个未知数的次序也被交换了。**因此，**在使用全主元的高斯消元法时，必须在选主元过程中记住所进行的一切列交换，以便对最后结果进行恢复。**

§2　三角分解法

- **三角分解法的基本思想：**将A分解为上下两个三角形矩阵L与U的乘积：$A=LU$，则线性方程组$Ax=b$就归结为：

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

这两个方程组可以通过前代法和回代法求解。

本节主要介绍几个常用的三角分解法，包括杜利特尔（Doolittle）分解、克劳特（Crout）分解、追赶法、平方根法等。

2.1　矩阵的三角分解

常用的矩阵三角分解形式为：

$$A=LU \tag{3.12}$$

称为矩阵A的LU**分解**。若L是单位下三角阵，U是上三角阵，则称为**杜利特尔分解**；若L是下三角阵，U是单位上三角阵，则称为**克劳特分解**。

矩阵A的LU**分解**可以在高斯消元法的基础上得到其LU**分解**，也可以直接从矩阵出发进行LU**分解**。

- **从高斯消元法过程可知，高斯消元法就是对系数矩阵A左乘$n-1$个初等单位下三角矩阵：**

$$A^{(k+1)}=L_k A^{(k)},\ k=1,2,\cdots,n-1$$

其中（即 $m_{ik}=\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$，$\boldsymbol{a_{kk}^{(k)}}\neq\mathbf{0}$，$i=k+1,k+2,\cdots,n$ ）

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{nk} & & & 1 \end{pmatrix},\ k = 1,2,\cdots,n-1$$

得：

$$A^{(n)} = L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1 A \qquad (3.13)$$

（对应的：$b^{(n)} = L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1 b$ ）

即： $A = (L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1})A^{(n)} = LU$

其中

$$\begin{cases} L = L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1} \\ U = A^{(n)} \end{cases}$$

$$L_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & m_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & 1 & \\ m_{n1} & m_{n2} & & m_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

$$U = A^{(n)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots\cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots\cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \ddots & \cdots\cdots & \vdots \\ 0 & 0 \ \cdots & 0 & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}{}^{(k)} - a_{kj}{}^{(k)} \cdot \frac{a_{ik}{}^{(k)}}{a_{kk}{}^{(k)}}, \quad i, j = k+1, \cdots, n; \ k = 1, \cdots, n-1$$

以上的 LU 分解，称为**杜利特尔（Doolittle）分解**，其中 L 是单位下三角阵，U 是上三角阵。

定理 2（矩阵三角分解基本定理） 设 $A \in R^{n\times n}$，若 A 的顺序主子式 $\det(A_k) \neq 0 \ (k = 1, 2, \cdots, n)$，则存在唯一的杜利特尔分解：$A = LU$。

证明 由定理 1 和:

$$\mathrm{Det}(A_k) = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{kk}^{(k)}$$

可得杜利特尔分解的存在性。

唯一性：若 A 存在两个杜利特尔分解：$A = L_1 U_1$ 和 $A = L_1 U_1$，则 $L_1 U_1 = L_2 U_2$，即 $L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1}$

由 $L_2^{-1} L_1$ 为单位下三角阵，$U_2 U_1^{-1}$ 为上三角阵，得

$$L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1} = I$$

即 $L_1 = L_2$，$U_1 = U_2$。

注： 在定理 2 的条件下，可得克劳特分解存在唯一。

2.2 （矩阵形式）杜利特尔分解法

设实矩阵 A 的各阶主子式 $\det(A_i)\neq 0\,(i=1,2,\cdots,n)$，则由定理 2 知，存在唯一的杜利特尔分解：

$$A=LU$$

其中

$$L=\begin{bmatrix}1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1\end{bmatrix},\quad U=\begin{bmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{nn}\end{bmatrix}$$

由矩阵相等条件，可通过 a_{ij} 导出计算 l_{ij} 和 u_{ij} 的公式：

（1）由 $a_{1i}=u_{1i}$， 得：

$$u_{1i}=a_{1i}\ \ (i=1,2,\cdots,n) \qquad \textbf{(3.14)}$$

由 $a_{i1}=l_{i1}u_{11}$，得：

$$l_{i1}=a_{i1}/u_{11}\ \ (i=2,3,\cdots,n) \qquad \textbf{(3.15)}$$

（2）由 $a_{2i}=l_{21}u_{1i}+u_{2i}$，得：

$$u_{2i}=a_{2i}-l_{21}u_{1i}\ \ (i=2,3,\cdots,n)$$

由 $a_{i2}=l_{i1}u_{12}+l_{i2}u_{22}$，得

$$l_{i2}=(a_{i2}-l_{i1}u_{12})/u_{22}\ \ (i=3,4,\cdots,n)$$

（3）一般地，在求出 U 的前 $k-1$ 行与 L 的前 $k-1$ 列后，U 的 k 行、L 的 k 列元为：

$$u_{ki}=a_{ki}-\sum_{j=1}^{k-1}l_{kj}u_{ji}\ \ (i=k,k+1,\cdots,n) \qquad \textbf{(3.16)}$$

$$l_{ik}=(a_{ik}-\sum_{j=1}^{k-1}l_{ij}u_{jk})/u_{kk}\quad(i=k+1,k+2,\cdots,n) \qquad \textbf{(3.17)}$$

- **杜利特尔分解的紧凑格式**

在杜利特尔分解到过程中，可以采用紧凑格式，节省存储空间，提高计算效率。

若令

$$Q=L+U-I_n=\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1k} & \cdots & u_{12} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2k} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ l_{k1} & l_{k2} & \cdots & u_{kk} & \cdots & u_{kn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nk} & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

则对矩阵 A 进行三角分解的问题化为 A 变成 Q 的问题了。

由前面的叙述可以看出，在消元过程中，通过 k 步的消元后，第 k 行的元素不变，即

$$u_{kj}=a_{kj}^{(k-1)},\quad j=k,k+1,\cdots,n$$

而初等矩阵 L_k 中的元素 l_{ik} 满足如下关系：

$$l_{ik}=a_{ki}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)},\quad i=k+1,\cdots,n$$

且第 k 行、第 k 列以后的元素也相应地作如下变换：

$$a_{ij}^{(k)}=a_{ik}^{(k-1)}-l_{ik}a_{kj}^{(k-1)},\quad i=k+1,\cdots,n;\ j=k,k+1,\cdots,n$$

但在实际计算过程中，为了节省存储空间和简化计算步骤，对于 Q 矩阵的各元素仍可以存放在原矩阵的空间中。这样，以上的三个计算步骤实际上变为

$$a_{ik}/a_{kk} \Rightarrow a_{ik},\quad i=k+1,\cdots,n$$

$$a_{ij}-a_{ik}a_{kj} \Rightarrow a_{ij},\quad i=k+1,\cdots,n;\ j=k+1,\cdots,n$$

求得Q矩阵后，就可以立即得到L和U矩阵了。

矩阵三角分解的计算工作量（乘除法次数）为$O(n^3)$。

下面举例说明矩阵三角分解的过程。

例 设矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3 & 3 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & -1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

求L和U。

解 首先求出Q矩阵，其计算过程如下：

$$A=\begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3 & 3 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & -1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \underset{\rightarrow}{k=1} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -5 & 0 \\ 2 & -6 & -7 & -3 \end{bmatrix}$$

（$l_{21}=\dfrac{3}{2},l_{31}=1,l_{41}=2;u_{11}=2,u_{12}=4,u_{13}=4,u_{14}=2$）

$$\underset{\rightarrow}{k=2} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -5 & 0 \\ 2 & 2 & -19 & -9 \end{bmatrix} \underset{\rightarrow}{k=3} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -5 & 0 \\ 2 & 2 & 19/5 & -9 \end{bmatrix}$$

（$l_{32}=0,l_{42}=2;u_{22}=-3,u_{23}=6,u_{24}=3$）

（$l_{43}=\dfrac{19}{5};u_{33}=-5,u_{34}=0;u_{44}=-9$）

由此可以分离出 L 和 U 如下：

$$L=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\3/2&1&0&0\\1&0&1&0\\2&2&19/5&1\end{bmatrix},\quad U=\begin{bmatrix}2&4&4&2\\0&-3&6&3\\0&0&-5&0\\0&0&0&-9\end{bmatrix}$$

例 3 （见教材 p.46）

2.3 解三对角线方程组的追赶法

如果 A 具有如下形式：

$$A=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&&&&\\a_{21}&a_{22}&a_{23}&&0&\\&a_{32}&a_{33}&a_{34}&&\\&&\ddots&\ddots&\ddots&\\&0&&a_{n-1,n-2}&a_{n-1,n-1}&a_{n-1,n}\\&&&&a_{n,n-1}&a_{nn}\end{pmatrix}\tag{3.20}$$

则称线性方程组 $Ax=b$ 为**三对角线方程组。**它在微分方程数值解等领域经常出现。

若 A 满足：

$$\begin{cases}|a_{11}|>|a_{12}|>0\\|a_{ii}|\geq|a_{i,i-1}|+|a_{i,i+1}|>0,\quad i=2,\cdots,n-1\\|a_{nn}|>|a_{n,n-1}|>0\end{cases}\tag{3.21}$$

则称 $Ax=b$ 为**对角占优的三对角线方程组。**

设 A 进行如下 LU 分解：$A=LU$

其中

$$L=\begin{bmatrix}1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ 0 & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & l_{n,n-1} & 1\end{bmatrix},\quad U=\begin{bmatrix}u_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ & u_{22} & a_{23} & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ & & & & u_{nn}\end{bmatrix}$$

（或教材中的克劳特分解 p.47 ）　　　　　　　　　　　　　　（3.22）

由矩阵乘法规则和相等条件，比较系数，可通过 a_{ij} 导出计算 l_{ij} 和 u_{ij} 的公式：

$$\begin{cases}u_{11}=a_{11} \\ l_{i,i-1}=\dfrac{a_{i,i-1}}{u_{i-1,i-1}} & (i=2,3,\cdots,n) \\ u_{ii}=a_{ii}-l_{i,i-1}\cdot a_{i-1,i}\end{cases} \tag{3.24}$$

当 A 有了 LU 分解后，就可以通过方程组：

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

得到线性方程组的解。计算公式如下：

$$\begin{cases}y_1=b_1 \\ y_i=b_i-l_{i,i-1}y_{i-1} \\ i=2,3,\cdots,n\end{cases} \qquad \begin{cases}x_n=\dfrac{y_n}{u_{nn}} \\ x_i=\dfrac{y_i-a_{i,i+1}\cdot x_{i+1}}{u_{ii}}, \quad i=n-1,n-2,\cdots,1\end{cases}$$

（3.26）　　　　　　　　　　　　　　（3.27）

上述求解三对角方程组的高斯消元法，通常称为“**追赶法**”，其中（3.26）称为“**追**”的过程，（3.27）称为“**赶**”的过程。整

个“追”的过程需要做 $4(n-1)$ 次乘除法，而“赶”的过程需要做 n 次乘除法。因此**“追赶法”计算工作量 $(5n-4)$ 次乘除法**。

- **“追赶法”本质上是没有选主元的高斯消元法。**如果采用选主元，则破坏了方程组的三对角性质，也就不能用“追赶法”来求解了，而只有按一般的方程来解。由于“追赶法”中没有采用选主元。因此，**对于一般的三对角方程组来说“追赶法”的计算过程是不稳定的。**但是，**当三对角方程组中的系数矩阵（三对角矩阵）满足条件严格对角占优时，“追赶法”的计算过程中不会出现中间结果数量级的巨大增长和舍入误差的严重积累。**而在工程实际中的许多三对角方程组一般是满足上述条件的，因此“追赶法”是有实用价值。

例 4 （见教材 p.49）

2.4 解对称正定矩阵方程组的平方根法

平方根法又称**楚列斯基**（Cholesky）**分解法**，**是求解对称正定线性方程组的常用方法之一。**

定理 3 设 $A \in R^{n\times n}$ 是对称正定矩阵，则存在唯一分解（称为**楚列斯基分解**）：

$$A = \tilde{L}\tilde{L}^T \qquad \textbf{(3.28)}$$

其中 $\tilde{L}$ 是对角元为正的下三角阵：

$$\tilde{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

可以通过待定系数法来确定 l_{ij}：

$$a_{ij} = \sum_{p=1}^{j} l_{ip} l_{jp}，\ 1 \le j \le i \le n$$

- 由 $a_{11} = l_{11}^2$，得 $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$；
- 由 $a_{i1} = l_{11} l_{i1}$，得

$$l_{i1} = a_{i1} / l_{11}，\ i = 1, 2, \cdots, n \qquad \textbf{(3.30)}$$

- 假设已算出 L 的前$j-1$列元素，由

$$a_{jj} = \sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2$$

得 $$l_{jj} = (a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2)^{1/2} \qquad \textbf{(3.31)}$$

再由 $$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} + l_{ij} l_{jj}$$

得 $$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}}，\ i = j+1, \cdots, n; j \ne n \qquad \textbf{(3.31)}$$

由归纳法知，可以求出 L 的所有元素 l_{ij}。

例 5 （见教材 p.51）。

§3 向量和矩阵的范数

用一个数来表示一个向量或一个矩阵的大小，对于研究向量序列和矩阵序列的收敛性具有重要作用。

3.1 向量的范数

在一维空间中，实轴上任意两点a, b距离用两点差的绝对值$|a-b|$表示。**绝对值是一种度量形式的定义。**

- **范数**（或称**模**）**是对函数、向量和矩阵定义的一种度量形式**。**任何对象的范数值都是一个非负实数。**使用范数可以测量两个函数、向量或矩阵之间的距离。**向量范数是度量向量长度的一种定义形式。同一向量，采用不同的范数定义，可得到不同的范数值。**

定义 1 对任一向量$x \in C^n$，称**实数** $N(x) \triangleq \|x\|$ **为向量** x **的范数**，若$\|\cdot\|$满足下列关系式：

（1）**正定性（非负性）**：$\forall x \in C^n$，有 $\|x\| \geq 0$，且

$\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$。

（2）**齐次性**：$\forall x \in C^n$和$\alpha \in C$，有 $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$。

（3）**三角不等式**：$\forall x, y \in C^n$，有$\|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|$。

- **几个常用的向量范数**：

$$\|x\|_1 = \sum_{j=1}^{n} |x_j| \tag{3.34}$$

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{j=1}^{n} |x_j|^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.35}$$

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq n} |x_j| \tag{3.36}$$

分别称为向量 x 的 **1 范数**、**2 范数**和∞ **范数**。更一般地，称：

$$\|x\|_p = \left(\sum_{j=1}^{n} |x_j|^p\right)^{1/p}$$

为 $p\,(1 \leq p \leq +\infty)$ **范数**。

例　计算向量 $x=(1,3,-5)^T$，$p=1,2,\infty$ 的三种范数。

解　$\|x\|_1=1+3+5=9$；

$\|x\|_2=(1^2+3^2+5^2)^{\frac{1}{2}}\approx 5.9161$；

$\|x\|_\infty=\max\{1,3,|-5|\}=5$。

3.2　矩阵的范数

定义 2　对任一矩阵 $A\in C^{n\times n}$，称**实数**$N(A)\triangleq\|A\|$**为矩阵** A **的范数**，若$\|\cdot\|$满足下列关系式：

（1）正定性（非负性）：$\forall A\in C^{n\times n}$，有 $\|A\|\geq 0$，且

$\|A\|=0 \Leftrightarrow A=0$；

（2）齐次性：$\forall A\in C^{n\times n}$ 和 $\alpha\in C$，有 $\|\alpha A\|=|\alpha|\cdot\|A\|$；

（3）三角不等式：$\forall A,B\in C^{n\times n}$，有 $\|A+B\|\leq\|A\|+\|B\|$；

（4）矩阵乘法不等式：$\forall A,B\in C^{n\times n}$，有 $\|AB\|\leq\|A\|\cdot\|B\|$。

- **矩阵的算子范数**：由于矩阵范数需满足的条件较多，**利用向量范数来定义矩阵范数是一种有效的途径**，并要求满足**矩阵、向量乘法的相容性**：

$$\|Ax\|\leq\|A\|\cdot\|x\|$$

称：

$$\|A\|_r=\max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_r}{\|x\|_r} \qquad (3.37)$$

为**从属于向量的范数**，或称为**由向量范数导出的范数**。

$\|A\|_r$满足矩阵、向量乘法的相容性：$\|Ax\|_r\leq\|A\|_r\cdot\|x\|_r$.

- **几个常用的矩阵范数**（教材 p.54，表 3-1）**：**

$$\|A\|_1=\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$

$$\|A\|_2=[\lambda_{max}(A^TA)]^{1/2}$$

$$\|A\|_\infty=\max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

$$\|A\|_F=(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2)^{\frac{1}{2}}$$

分别称为矩阵 A **的 1 范数（列模）、2 范数（谱模）、∞ 范数（行模）**和 F **范数**。

注：

$$\|Ax\|_1=\sum_{i=1}^{n}|(Ax)_i|=\sum_{i=1}^{n}|\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j|\le\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}||x_j|=\sum_{j=1}^{n}(\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|)|x_j|$$

$$\le(\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|)\sum_{j=1}^{n}|x_j|=(\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|)\|x\|_1$$

即：$\|A\|_1\le\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$

另一方面，设极大值在 k 列达到，即 $\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|=\sum_{i=1}^{n}|a_{ik}|$

取 $x=e_k=(0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)^T$（$e_k$ 除第 k 个分量为 1 外，其余分量均为 0），于是有

$$\|Ae_k\|_1=\|(a_{1k},a_{2k},\cdots,a_{nk})^T\|_1=\sum_{i=1}^{n}|a_{ik}|=\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$

而 $\|e_k\|_1=1$，故 $\|A\|_1 \ge \dfrac{\|Ae_k\|_1}{\|e_k\|_1}=\max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{n}|a_{ij}|$

因此有：$\|A\|_1=\max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{n}|a_{ij}|$ 。

例 $A=\begin{pmatrix}-1 & 2\\ 3 & 7\end{pmatrix}$，求 $\|A\|_1,\|A\|_2,\|A\|_\infty,\|A\|_F$ 。

解 $\|A\|_1=\max\{|-1|+3,2+7\}=9$

$\|A\|_2=\sqrt{60.19}\ \because A^TA=\begin{pmatrix}-1 & 3\\ 2 & 7\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 2\\ 3 & 7\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}10 & 19\\ 19 & 53\end{pmatrix},\lambda_1=60.19,\lambda_2=2.81$

$\|A\|_\infty=\max\{|-1|+2,3+7\}=10$

$\|A\|_F=\sqrt{1+4+9+49}=\sqrt{63}$

例 7 （见教材 p.54）。

§4 迭代法

求解线性方程组

$$Ax=b \tag{3.38}$$

其中为 A 非奇异矩阵，b 为 n 元非零向量。

将方程组（**3.38**）等价地转化为方程组

$$x=Bx+f \tag{3.39}$$

选取**初始向量** $\boldsymbol{x}^{(0)}=(x_1^{(0)},x_2^{(0)},\cdots,x_n^{(0)})^T$，则可构造**迭代法：**

$$x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+f,\ k=0,1,2,\cdots \tag{3.40}$$

得到迭代向量序列 $\{x^{(k)}\}$，其中 $x^{(k)}=(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)})^T$ 。若 $x^{(k)}$ 收敛于 x^*（即 $\lim_{k\to\infty}x^{(k)}=x^*$，即 $\lim_{k\to\infty}x_i^{(k)}=x_i^*$ ），则由（**3.40**）知：

$$x^* = Bx^* + f$$

即$x^{(k)}$的极限x^*就是方程组（**3.38**）的解。称 B为**迭代矩阵**，称$\{x^{(k)}\}$为**迭代序列**。若迭代序列收敛，则称**迭代法**（**3.40**）**收敛**，否则称**迭代法发散**。

例 8 （见教材 p.55）。

例 求解方程组

$$\begin{cases} 10x_1 \quad -x_2 - 2x_3 = 7.2 \\ -x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 8.3 \\ -x_1 \quad -x_2 + 5x_3 = 4.2 \end{cases}$$

要求准确到小数点后第五位。

解 首先，分别从方程组的第一、二、三个方程中分离出 x_1, x_2, x_3，将方程组变成如下等价形式：

$$\begin{cases} x_1 = \qquad\quad 0.1x_2 + 0.2x_3 + 0.72 \\ x_2 = 0.1x_1 \qquad\quad + 0.2x_3 + 0.83 \\ x_3 = 0.2x_1 + 0.2x_2 \qquad\quad + 0.84 \end{cases}$$

然后任取一组近似值 $x_1^{(k)}$，$x_2^{(k)}$，$x_3^{(k)}$代入上述方程组中各方程的右端，从而可以得到一组新的近似值 $x_1^{(k+1)}$，$x_2^{(k+1)}$，$x_3^{(k+1)}$，即

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \qquad\quad 0.1x_2^{(k)} + 0.2x_3^{(k)} + 0.72 \\ x_2^{(k+1)} = 0.1x_1^{(k)} \qquad\quad + 0.2x_3^{(k)} + 0.83 \\ x_3^{(k+1)} = 0.2x_1^{(k)} + 0.2x_2^{(k)} \qquad\quad + 0.84 \end{cases}$$

这样，可以从任意的初始近似值$(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})$出发，利用迭代格式进行计算，从而可以得到一个近似解的序列

$$(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}),\ k=0,1,2,\cdots$$

取初值 $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})=(0,0,0)$ **，然后利用迭代格式进行计算，其计算结果如下表所示。**

表　简单迭代格式计算结果

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0.00000	0.00000	0.00000
1	0.72000	0.83000	0.84000
2	0.97100	1.07000	1.15000
3	1.05700	1.15710	1.24282
4	1.08535	1.18534	1.28282
5	1.09510	1.19510	1.2914
6	1.09834	1.19834	1.29504
7	1.09944	1.9944	1.29934
8	1.09981	1.19981	1.29978
9	1.09994	1.1994	1.29992
10	1.09998	1.9998	1.29998
11	1.09999	1.19999	1.29999
12	1.10000	1.20000	1.30000
13	1.10000	1.20000	1.30000

由上表可以看出，通过 13 次的迭代计算，已经满足了预先所规定的精度要求，即对于每一个 $x_i(i=1,2,3)$，前后两次迭代值之差的绝对值均小于 $\mathbf{0.5\times10^{-5}}$。因此，**原方程组的近似解为：** $x_1\approx1.10000$， $x_2\approx1.20000$， $x_3\approx1.30000$

该方程组的准确解为：$x_1=1.1$， $x_2=1.2$， $x_3=1.3$

由上表可以看出，当迭代次数增加时，迭代得到的近似值越

来越逼近方程组的准确解。在这种情况下，称迭代格式是**收敛的**，其迭代近似值序列 $x_1^{(k)}$， $x_2^{(k)}$， $x_3^{(k)}$ 收敛于方程组的准确解。

- **对于一个线性方程组，建立的简单迭代格式所计算得到的迭代序列是否一定收敛于方程组的准确解呢？**只有当建立的迭代格式满足一定条件时，其迭代序列才会收敛于方程组的准确解，并且与选取的迭代初值无关。

在上例中，如果不是从方程组的第一、二、三个方程中分别分离出 x_1， x_2， x_3，而是从方程组的第二个方程中分离出 x_1，第三个方程中分离出 x_2，第一个方程中分离出 x_3，则就得到**另一个迭代格式如下：**

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = 10x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)} - 8.3 \\ x_2^{(k+1)} = -x_1^{(k)} + 5x_3^{(k)} - 4.2 \\ x_3^{(k+1)} = 5x_1^{(k)} - 0.5x_2^{(k)} - 3.6 \end{cases}$$

若仍取迭代初值 $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}) = (0,0,0)$，则**用上述迭代格式计算得到的迭代序列如下：**

$x_1^{(0)}$=0.0， $x_2^{(0)}$=0.0， $x_3^{(0)}$=0.0

$x_1^{(1)}$=−8.3, $x_2^{(1)}$=−4.2, $x_3^{(1)}$=−3.6

$x_1^{(2)}$=−43.1, $x_2^{(2)}$=−13.9, $x_3^{(2)}$=−43.0

如果继续计算下去，其绝对值会越来越大，不可能趋近于一个常数。称**迭代格式是发散的**。

4.1 雅可比迭代法

上例给出的迭代法就是**雅可比（Jacobi）迭代法。**

将 A 分解为：

$$A = D - L - U \qquad (3.49)$$

其中 $D = diag(a_{11}, a_{22}, \cdots, a_{nn})$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & & & 0 \\ -a_{21} & 0 & & & \\ -a_{31} & -a_{32} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & -a_{13} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & 0 & -a_{n-1,n} \\ 0 & & & & 0 \end{pmatrix}$$

由 $Dx = (L + U)x + b$，可得

- **雅可比迭代公式：**

$$x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + f_J,\ \ k = 0,1,2,\cdots \qquad (3.50)$$

其中雅可比迭代矩阵 $B_J = D^{-1}(L + U)$，$f_J = D^{-1}b$

- **雅可比迭代公式的分量形式：**

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

$$i = 1,2,\cdots,n;\ \ k = 0,1,2,\cdots \qquad (3.47)$$

(注：第i个方程解出x_i：$x_i = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1,j\neq i}^{n} a_{ij} x_j\right)$)

4.2 高斯-赛德尔迭代法

由 $(D-L)x=Ux+b$，可得

- **高斯-赛德尔（Gauss-Seidel）迭代公式：**

$$x^{(k+1)}=B_G x^{(k)}+f_G,\quad k=0,1,2,\cdots \qquad (3.52)$$

其中高斯-赛德尔矩阵 $B_G=(D-L)^{-1}U$，$f_G=(D-L)^{-1}b$

- **高斯-赛德尔迭代公式的分量形式：**

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

$$i=1,2,\cdots,n;\quad k=0,1,2,\cdots \qquad (3.51)$$

高斯-赛德尔迭代将最新得到的 $x_1^{(k)},\cdots,x_{i-1}^{(k)}$ 直接应用到求 $x_i^{(k)}$ 中。

例 设线性方程组为

$$\begin{pmatrix}5&2&0\\3&10&3\\0&4&20\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3\\5\\7\end{pmatrix}$$

写出 J 迭代公式和 G-S 迭代公式，并对 $x^{(0)}=(1,2,3)^T$ 为初值迭代 10 次。

解 J 迭代公式为：

$$\begin{cases}x_1^{(k+1)}=\frac{1}{5}\left(-2x_2^{(k)}+3\right)\\ x_2^{(k+1)}=\frac{1}{10}\left(-3x_1^{(k)}-3x_3^{(k)}+5\right)\\ x_3^{(k+1)}=\frac{1}{20}\left(-4x_2^{(k)}+7\right)\end{cases}$$

可得：

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}-0.2\\-0.7\\-0.05\end{pmatrix},\ x^{(5)}=\begin{pmatrix}0.4726\\0.23102\\0.2863\end{pmatrix},\ x^{(10)}=\begin{pmatrix}0.49552598\\0.26252349\\0.29776299\end{pmatrix}$$

精确解为：

$$x^{*}\approx\begin{pmatrix}0.49512195\\0.26219512\\0.29756098\end{pmatrix}$$

经过 10 次 J 迭代后，近似解 $x^{(10)}$ 有 3 位有效数字。

（注：$\|B_J\|_\infty=\|D^{-1}(L+U)\|_\infty=0.6<1$ ）

G-S 迭代公式为：

$$\begin{cases}x_1^{(k+1)}=\frac{1}{5}\left(-2x_2^{(k)}+3\right)\\x_2^{(k+1)}=\frac{1}{10}\left(-3x_1^{(k+1)}-3x_3^{(k)}+5\right)\\x_3^{(k+1)}=\frac{1}{20}\left(-4x_2^{(k+1)}+7\right)\end{cases}$$

可得：

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix}-0.2\\-0.34\\0.418\end{pmatrix},\ x^{(5)}=\begin{pmatrix}0.496527\\0.261563\\0.297687\end{pmatrix},\ x^{(10)}=\begin{pmatrix}0.49512222\\0.26219500\\0.29756100\end{pmatrix}$$

与精确解比较：

$$x^{*}\approx\begin{pmatrix}0.49512195\\0.26219512\\0.29756098\end{pmatrix}$$

得：经过10次G-S迭代后，近似解$x^{(10)}$有5位有效数字。

（**注：**$\|B_G\|_\infty = \|(D-L)^{-1}U\|_\infty = 0.42 < 1$ ）

可以看出，在收敛的情况下，G-S迭代比J迭代法的收敛速度要快。但**必须指出，J迭代法与G-S迭代法的收敛范围并不重合，只是部分相交。**也就是说，可能有J迭代法收敛而G-S迭代法发散的情形发生，G-S迭代法并不是总比J迭代法收敛法。在都收敛的情况下，也不能保证G-S迭代法比J迭代法收敛快。

例9 （参见教材p.58）。

4.3　迭代收敛条件与误差估计

定义3　设矩阵$A \in C^{n\times n}$的特征值为$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$，称

$$\rho(A) = \max_{1\le j\le n} |\lambda_j| \qquad \textbf{(3.53)}$$

为A**的谱半径**。

- **矩阵谱半径与范数关系**

定理 4　矩阵A的谱半径不大于矩阵A的任一算子范数$\|A\|_r$。

证明　若λ是矩阵A的特征值（即存在非零向量x使得：$Ax = \lambda x$），则

$$|\lambda| \cdot \|x\|_r = \|\lambda x\|_r = \|Ax\|_r \le \|A\|_r \cdot \|x\|_r$$

得：

$$|\lambda| \le \|A\|_r$$

故：　$\rho(A) \le \|A\|_r$.

由于矩阵范数计算要比矩阵谱半径计算简单得多，所以常用矩阵范数来估计矩阵特征值的上界。

- **迭代公式收敛的充要条件**

定理 8 迭代公式 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 对任何初始向量 $x^{(0)}$ 都收敛的充要条件是 $\rho(B) < 1$；收敛时，$\rho(B)$ 越小，则收敛速度越快。

证明 记 x^* 为方程的解，即 $x^* = Bx^* + f$，则有

$$x^{(k)} - x^* = B\left(x^{(k-1)} - x^*\right) = B^k\left(x^{(0)} - x^*\right),\ k = 1,2,\cdots$$

所以，迭代公式对任何初始向量 $x^{(0)}$ 都收敛的充要条件是 $B^k \to 0,\ k \to \infty$，即 $\rho(B) < 1$。

（注：若存在矩阵范数 $\|\cdot\|_r$，使得 $\|B\|_r < 1$，则由 $\rho(B) \le \|B\|_r$ 知，迭代法收敛。）

例 10 （参见教材 p.64）。

- **迭代法收敛的充分条件**

定理 5 若迭代过程 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 中迭代矩阵 B 满足 $\|B\|_r = q < 1$，则

（1）对任意初始向量 $x^{(0)}$，该迭代过程均收敛于方程 $x = Bx + f$ 的唯一解 x^*；

（2）$\left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r \le \frac{1}{1-q}\left\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right\|_r$ **（3.54）**

（3）$\left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r \le \frac{q^k}{1-q}\left\|x^{(1)} - x^{(0)}\right\|_r$ **（3.55）**

证明 （1）由定理 4 知，对 B 的任一特征值 λ，都有：

$|\lambda| \leq \rho(B) \leq \|B\|_r = q < 1$

得 $\det(I-B) \neq 0$，故方程 $(I-B)x = f$ 有唯一解，即 $x = Bx + f$ 有唯一解 x^*。

又 $x^* - x^{(k+1)} = (Bx^* + f) - \left(Bx^{(k)} + f\right) = B(x^* - x^{(k)})$

故

$\left\|x^* - x^{(k+1)}\right\|_r \leq \|B\|_r \left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r = q\left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r$（**3.56**）

得

$$0 \leq \left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r \leq q^k \left\|x^* - x^{(0)}\right\|_r$$

由 $0 < q < 1$，得 $\lim_{k\to\infty}\left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r = 0$

从而 $\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*$。

（2）由范数性质和（**3.56**）得

$$\begin{aligned}
\left\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right\|_r &= \left\|(x^* - x^{(k)}) - (x^* - x^{(k+1)})\right\|_r \\
&\geq \left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r - \left\|x^* - x^{(k+1)}\right\|_r \\
&\geq \left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r - q\left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r \\
&= (1-q)\left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r
\end{aligned}$$

即：$\left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r \leq \frac{1}{1-q}\left\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right\|_r$

（3）由（**3.56**）及

$$\begin{aligned}
\left\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right\|_r &= \left\|\left(Bx^{(k)} + f\right) - \left(Bx^{(k-1)} + f\right)\right\|_r \\
&= \left\|\left(Bx^{(k)} - Bx^{(k-1)}\right)\right\|_r \leq q\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_r
\end{aligned}$$

得 $\left\|x^* - x^{(k)}\right\|_r \leq \frac{q}{1-q}\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_r$

$$\leq \cdots \leq \frac{q^k}{1-q}\left\|x^{(1)} - x^{(0)}\right\|_r.$$

注： 定理 5 为 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 收敛的充分条件。在前例中，$\|B_J\|_\infty = 0.6 < 1$，$\|B_G\|_\infty = 0.42 < 1$ 。

- **雅可比迭代法与高斯-赛德尔迭代法收敛的充分条件**

定理 6 若方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵 $A = (a_{ij})_{n\times n}$ 按行（或按列）严格对角占优，即

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{3.57}$$

或

$$|a_{jj}| > \sum_{i=1,i\neq j}^{n} |a_{ij}|, \quad j = 1,2,\cdots,n \tag{3.58}$$

则方程组 $Ax = b$ 有唯一解，且对任意初始向量 $x^{(0)}$，雅可比迭代法和高斯-赛德尔迭代法都收敛。

（证明见教材 p.62）。

定理 7 若方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵 $A = (a_{ij})_{n\times n}$ 为对称正定矩阵，则对任意初始向量 $x^{(0)}$，高斯-赛德尔迭代法收敛。

（此定理可作为定理 10 的推论）

4.4 逐次超松驰（SOR）迭代法

在使用迭代法求解线性方程组时，除了要考虑迭代格式的收敛性以外，**在收敛的情况下，还要考虑尽量加快迭代的收敛速度，减少迭代的次数。**作为一种线性加速收敛的方法，**逐次超松驰（SOR）迭代法**实际上是对**高斯-赛德尔迭代法**的**加权平均**，即

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega\tilde{x}_i^{(k+1)}, \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{3.63}$$

其中 $\tilde{x}_i^{(k+1)}$ 为高斯-赛德尔的迭代解：

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

- SOR **迭代法的矩阵形式为：**

$$x^{(k+1)} = B_\omega x^{(k)} + f_\omega,\ \ k = 0,1,2,\cdots \qquad \textbf{(3.64)}$$

其中 **SOR** 迭代矩阵 $B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U$

$$f_\omega = \omega(D-\omega L)^{-1}b$$

注：

$$\begin{aligned}
x_i^{(k+1)} &= (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega\tilde{x}_i^{(k+1)} \\
&= (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega\cdot\frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right) \\
&= \frac{1}{a_{ii}}\left((1-\omega)a_{ii}x_i^{(k)} + \omega(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + b_i)\right)
\end{aligned}$$

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

得：

$$\begin{aligned}
(D-\omega L)x^{(k)} &= (1-\omega)Dx^{(k-1)} + \omega Ux^{(k-1)} + \omega b \\
&= [(1-\omega)D + \omega U]x^{(k-1)} + \omega b
\end{aligned}$$

由于 $\det(B_\omega) = (1-\omega)^n$，得

$$\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n = \det(B_\omega) = (1-\omega)^n$$

得 $\quad |1-\omega|^n = |\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n| \le (\rho(B_\omega))^n$

所以有

定理 9 若方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵 $A=(a_{ij})_{n\times n}$ 主对角线上元 $a_{ii}\neq 0$，则 **SOR** 法收敛的必要条件是 $0<\omega<2$ 。

当 $\omega=1$ 时，SOR 方法就是高斯−赛德尔迭代法，SOR 方法是高斯−赛德尔迭代法的推广。在实际应用时，**可以根据系数矩阵 A 的性质以及计算的经验来选定合适的松驰因子 ω ，以加快收敛的速度。**

例 设线性方程组为

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 0 \\ 3 & 10 & 3 \\ 0 & 4 & 20 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \end{pmatrix}$$

写出 SOR 迭代公式，取 $\omega=1.1$ ，并对 $x^{(0)}=(1,2,3)^T$ 为初值迭代 10 次。

解 SOR 迭代公式为：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)}=(1-\omega)x_1^{(k)}+\frac{1}{5}\omega\left(-2x_2^{(k)}+3\right) \\ x_2^{(k+1)}=(1-\omega)x_2^{(k)}+\frac{1}{10}\omega(-3x_1^{(k+1)}-3x_3^{(k)}+5) \\ x_3^{(k+1)}=(1-\omega)x_3^{(k)}+\frac{1}{20}\omega\left(-4x_2^{(k+1)}+7\right) \end{cases}$$

取 $\omega=1.1$ ，可得：

$$x^{(1)}=\begin{pmatrix} -0.32 \\ -0.5344 \\ 0.202568 \end{pmatrix},\ x^{(5)}=\begin{pmatrix} 0.49495773 \\ 0.26212904 \\ 0.29755262 \end{pmatrix},\ x^{(10)}=\begin{pmatrix} 0.49512196 \\ 0.26219512 \\ 0.29756098 \end{pmatrix}$$

与精确解比较：

$$x^* \approx \begin{pmatrix} 0.49512195 \\ 0.26219512 \\ 0.29756098 \end{pmatrix}$$

得：经过 10 次 SOR 迭代后，近似解 $x^{(10)}$ 有 7 位有效数字。

例 11 （参见教材 p. 65）。

定理 10 若系数矩阵 A 是实对称正定矩阵，且松弛因子 $0 < \omega < 2$，则对任意初始向量 $x^{(0)}$，SOR 迭代法收敛。

定理 11 若系数矩阵 A 为弱对角占优矩阵，且为不可约矩阵，则雅可比迭代法、高斯–赛德尔迭代法均收敛。

定理 12 若系数矩阵 A 为严格对角占优矩阵（或为弱对角占优不可约矩阵），且 $0 < \omega \leq 1$，则 SOR 迭代法收敛。

定义 4 （收敛速度）称 $R(B) = -ln\rho(B)$ 为迭代法的收敛速度，其中 B 为迭代矩阵。

(*) 共轭梯度法

共轭梯度（斜量）法从理论上讲属于直接法：当计算过程没有误差时，它能在 n 步内得到精确解。但在实际计算过程中，由于不可避免地会出现舍入误差，使得在 n 步内不能得到精确解。因此，它往往作为迭代法来使用。当方程组的阶数很高时，利用这种方法往往只要经过比阶数小得多的迭代次数，就能得到满足精度要求的近似解。

- **几个基本概念**

（1）对称正定矩阵

设矩阵 $$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

中的元素满足下列关系：

$$a_{ij}=a_{ji}，\ j=1,2,\cdots,n$$

则称矩阵 A 为**对称矩阵**，即对称矩阵中的元素关于主对角线对称。

由一个对称矩阵 A 和向量 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，可以构造一个二次函数：

$$H(x)=x^T Ax=(x_1,x_2,\cdots,x_n)A\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

$$=a_{11}x_1^2+\cdots+a_{nn}x_n^2+2a_{12}x_1x_2+\cdots+2a_{n-1,n}x_{n-1}x_n$$

如果对于任意的 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，有

$$H(x)\geq 0$$

且只有当 $x=(0,0,\cdots,0)^T$ 时，才有 $H(x)=0$，则称矩阵 A 为**对称正定矩阵**。

二次函数：$H(x)=x^T Ax$ 也可以写成**向量内积形式**，即

$$H(x)=(x,Ax)$$

（2）向量的正交

设有两个互异的向量

$$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T,\quad y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^T$$

如果它们的内积为零，即

$$(x,y)=0$$

则称向量 x 与 y 是**正交的**。

（3）共轭变换

对于两个任意向量 x 与 y

$$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T,\quad y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^T$$

如果矩阵 A 与 A^* 满足关系 $(x,Ay)=(A^*x,y)$，则称 A^* 为 A 的**共轭变换**。如果 $A^*=A$，则 A 为**自共轭的**。

显然，根据向量内积的定义，**对称矩阵 A 是自共轭的。**即对于任意的向量量 x 与 y，有

$$(x,Ay)=(Ax,y)$$

其中，A 为对称矩阵。

定义　设矩阵 A 对称正定，x,y 是两个列向量，若

$$(Ax,y)=0$$

则称向量 x,y 是 A **共轭正交的**。

- **共轭梯度法的推导：通过将求解线性方程组 $Ax=b$ 的问题转化为求一个向量函数的极小化问题。**

设矩阵 A **对称正定，共轭梯度法**求解方程组 $Ax=b$ 的**基本思想如下：**

对于任意一个初始向量 $x^{(0)}$，依次构造一组 A 共轭的正交的向量 $p^{(k)}$ 以及系数 α_k，经过迭代公式：

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)},\ k = 0,1,\cdots$$

计算得到的迭代值序列

$$x^{(0)}, x^{(1)}, \cdots, x^{(k)}, \cdots$$

收敛于方程组的准确解 x^*。

- **共轭梯度法的关键是：如何根据系数矩阵 A 的对称正定性，逐步构造 A 共轭正交的向量 $p^{(i)}$ 以及系数 α_i。**

假设 x^* 为线性方程组的精确解。构造一个二次函数

$$H(x) = (x^* - x, A(x^* - x))$$

显然，由 A 的对称正定性，有 $H(x) \geq 0$，并且只有当 $x = x^*$（即 $x^* - x = 0$）时，才有 $H(x) = 0$，此时 x 即为方程组的准确解。

对于给定的常数 c，方程 $H(x) = c$ 表示 R^n 中的一个椭球面。当 $x = x^*$ 时，相应的常数 $c = 0$，表示椭球面退化为一个点，即为所求方程组的解。因此，**求解方程组可以通过找一系列向量 $\{x^{(i)}\}$，使 $\{H(x^{(i)})\}$ 逐步减少到零。**

记

$$r^{(i)} = A(x^* - x^{(i)}) = b - Ax^{(i)}$$

为向量 $x^{(i)}$ 的剩余向量。

设 x 是椭球面 $H(x) = c$ 上一点，则 $H(x)$ 在点 x 的梯度是

$$\nabla H(x) = -2r$$

即$H(x)=c$在x的梯度方向是x的剩余向量r的负方向。

- **共轭梯度法构造：从任意初始向量$x^{(0)}$出发，逐次利用剩余向量$\{r^{(i)}\}$来构造一组A共轭正交的向量$\{p^{(i)}\}$和近似解向量$\{x^{(i)}\}$。**因为$r^{(i)}$相应于$H(x)$在$x=x^{(i)}$的梯度，所以$\{p^{(i)}\}$也称**共轭梯度**，称此方法为**共轭梯度法**。

记$x^{(0)}$**是初始向量，作剩余向量**

$$r^{(0)}=b-Ax^{(0)}$$

取 $$p^{(0)}=r^{(0)}$$

然后取 $$x^{(1)}=x^{(0)}+\alpha_0 p^{(0)}$$

其中α_0**的选取为：令**

$$H(x^{(0)}+\alpha_0 p^{(0)})=\min_{\alpha\in R} H(x^{(0)}+\alpha p^{(0)})$$

$$\begin{aligned}H(x^{(0)}+\alpha p^{(0)})&=(x^*-x^{(0)}-\alpha p^{(0)},A(x^*-x^{(0)}-\alpha p^{(0)}))\\&=H(x^{(0)})-2\alpha(p^{(0)},A(x^*-x^{(0)}))+\alpha^2(p^{(0)},Ap^{(0)})\end{aligned}$$

由 $$\frac{dH(x^{(0)}+\alpha p^{(0)})}{d\alpha}=0$$

得 $$\alpha_0=\frac{(r^{(0)},p^{(0)})}{(p^{(0)},Ap^{(0)})}$$

计算 $$r^{(1)}=b-Ax^{(1)}$$

取 $$p^{(1)}=r^{(1)}+\beta_0 p^{(0)}$$

由 $(p^{(1)},Ap^{(0)})=0$（取$p^{(1)}$与$p^{(0)}$共轭正交），得

$$\beta_0=-\frac{(r^{(1)},Ap^{(0)})}{(p^{(0)},Ap^{(0)})}$$

这样，就得到了 $x^{(1)}$ 和 $p^{(1)}$ 。

类似地，设已经得到了 $x^{(k)}$ 和 $p^{(k)}$，计算 $x^{(k+1)}$ 和 $p^{(k+1)}$：

取 $$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$$

其中 α_k 的选取为：令

$$H(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}) = \min_{\alpha \in R} H(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})$$

由 $$\frac{dH(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})}{d\alpha} = 0$$

得 $$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

计算 $$r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)}$$

取 $$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

由 $$(p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) = 0$$

（取 $p^{(k+1)}$ 与 $p^{(k)}$ 共轭正交），得

$$\beta_k = -\frac{(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

这样，就得到了 $x^{(k+1)}$ 和 $p^{(k+1)}$。

- **共轭梯度法的递推公式：**

取初始向量 $x^{(0)}$，计算

$$r^{(0)} = p^{(0)} = b - Ax^{(0)}$$

对 $k = 0, 1, \cdots, n$

若 $\| r^{(k)} \| = 0$，则 $x^{(k)}$ 就是线性方程组的解，停止。

否则，计算

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$$

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

$$\beta_k = -\frac{(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

共轭梯度法有下列性质：

定理 设$\{r^{(0)}, r^{(1)}, \cdots, r^{(k)}\}$和$\{p^{(0)}, p^{(1)}, \cdots, p^{(k)}\}$是由共轭梯度法产生的向量序列，并且$\| r^{(k)} \| > 0$，则有

$$(r^{(i)}, r^{(j)}) = 0,\ \ 0 \le i, j \le k,\ i \ne j$$

$$(p^{(i)}, Ap^{(j)}) = 0,\ \ 0 \le i, j \le k,\ i \ne j$$

由此可知，共轭梯度法最多在n步得到方程的精确解。

但在实际计算过程中，由于舍入误差的存在，而上述递推公式强烈地依赖于向量组的正交性，对舍入误差比较敏感，因此，可能迭代n次后还不能得到准确解，只能得到一个近似解。对于高阶方程组，利用共轭梯度法，可能只要迭代比阶数小得多的次数，就能得到满足精度要求的解。

§5　方程组的状态与解的迭代改善

判断一个计算方法的好坏，主要通过分析**算法是否稳定、解的精度、计算量和存储量大小**等衡量，但是，**同一方法应用于不**

同问题，效果却可能很不一样，主要原因在于问题本身。就线性方程组求解问题，由于进行了大量的四则运算，舍入误差会不断积累，所以就有这样的问题：**如果在 $Ax=b$ 中的初始数据 A,b 有一个小的扰动，对解的结果有什么影响？**

5.1 方程组的状态与矩阵的条件数

比较两个方程组：

$$\begin{cases} x_1+x_2=2 \\ x_1+1.0001x_2=2 \end{cases}, \quad \begin{cases} x_1+x_2=2 \\ x_1+0.9999x_2=1.9999 \end{cases}$$

对应的解分别为：

$$\begin{cases} x_1=2 \\ x_2=0 \end{cases}, \quad \begin{cases} x_1=1 \\ x_2=1 \end{cases}$$

即：初始数据 A,b 的微小变化引起了解的很大变化，称这样的方程组为**病态方程组**。

（1）b 有一个扰动 δb

设相应方程组的解为 $\tilde{x}$ ($\tilde{x}=x+\delta x$), 其中 x 为 $Ax=b$ 的精确解，即 $A\tilde{x}=b+\delta b$，或

$$A(x+\delta x)=b+\delta b \tag{3.68}$$

得

$$\|\delta x\|=\|A^{-1}\delta b\|\le\|A^{-1}\|\cdot\|\delta b\| \tag{3.69}$$

而 $\|b\|=\|Ax\|\le\|A\|\cdot\|x\|$，即

$$\frac{1}{\|x\|}\le\frac{\|A\|}{\|b\|} \tag{3.70}$$

所以

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\|A^{-1}\|\cdot\|A\|\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \tag{3.71}$$

即：**解的相对误差不超过向量 b 的相对误差的 $\|A^{-1}\|\cdot\|A\|$ 倍。**

（2）A 有一个扰动 δA（设 $A+\delta A$ 仍可逆）

设相应方程组的解为 $\tilde{x}$（$\tilde{x}=x+\delta x$），其中 x 为 $Ax=b$ 的精确解，即 $(A+\delta A)\tilde{x}=b$，或

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b \tag{3.72}$$

有 $\delta A(x+\delta x)+A\delta x=0$

得 $\delta x=-A^{-1}\delta A(x+\delta x)$

故 $\|\delta x\|\le\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\|\cdot\|x+\delta x\|$

所以

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x+\delta x\|}\le\|A^{-1}\|\cdot\|A\|\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \tag{3.73}$$

即：**解的相对误差不超过系数矩阵相对误差的 $\|A^{-1}\|\cdot\|A\|$ 倍。**

这表明：量 $\|A^{-1}\|\cdot\|A\|$ 反映了方程组 $Ax=b$ 的解对初始数据 A,b 扰动的灵敏度，从而可以用来刻画方程组的**病态程度**。称 $\|A^{-1}\|\cdot\|A\|$ 为**矩阵 A 的条件数**，记作 $\mathrm{Cond}(A)$ 或 $\kappa(A)$，即

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

- **条件数与所取的矩阵范数有关，常用的有：**

$$\mathrm{Cond}_\infty(A)=\|A^{-1}\|_\infty\cdot\|A\|_\infty$$

$$\mathrm{Cond}_2(A)=\|A^{-1}\|_2\cdot\|A\|_2=\sqrt{\frac{\lambda_{max}(A^TA)}{\lambda_{min}(A^TA)}}$$

其中 $\mathrm{Cond}_2(A)$ 称为**谱条件数**。

定义 5 设 A 是非奇异矩阵，若 $\mathrm{Cond}(A)\gg 1$，则称方程组 $Ax=b$ 为**病态方程组**；若 $\mathrm{Cond}(A)$ 相对较小，则称方程组

$Ax=b$ 为**良态方程组**。

前例中，

$$A=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{pmatrix}, A^{-1}=\begin{pmatrix}10001 & -10000\\ -10000 & 10000\end{pmatrix}$$

则：

$$\mathrm{Cond}_{\infty}(A)=\|A^{-1}\|_{\infty}\cdot\|A\|_{\infty}=20001\times 2.0001\approx 40004\,.$$

即该方程组为病态方程组。

例 求下列矩阵的∞范数条件数：

$$A=\begin{pmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{pmatrix},\quad B=\begin{pmatrix}2 & 1.999\\ 2.001 & 2\end{pmatrix}$$

解 计算得：$A^{-1}=\dfrac{1}{3}\begin{pmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{pmatrix}$，$B^{-1}=10^{6}\begin{pmatrix}2 & -1.999\\ -2.001 & 2\end{pmatrix}$

所以：$\mathrm{Cond}_{\infty}(A)=\|A\|_{\infty}\cdot\|A^{-1}\|_{\infty}=3\times 1=3$

$$\mathrm{Cond}_{\infty}(B)=\|B\|_{\infty}\cdot\|B^{-1}\|_{\infty}=4.001\times 4.001\times 10^{6}\approx 1.601\times 10^{7}\,.$$

由于矩阵的条件数计算涉及计算逆矩阵，工作量很大，所以在实际计算中，常通过一些容易得到的信息来判断方程组是否病态。**方程组可能出现病态的情况：**

（1）用选主元消元法消元过程中出现小主元；

（2）系数行列式的绝对值相对很小；

（3）系数矩阵元素间在数量级上相差很大且无一定规律；

（4）出现了相对很大的解。

5.2 方程组近似解可靠性判别法

定理 13 设 x^* 是方程组 $Ax=b$（A 非奇异且 $b\neq 0$）的精确解。若 $\tilde{x}$ 是该方程组的近似解，其残余向量 $r=b-A\tilde{x}$ ，则有

$$\frac{\|x^*-\tilde{x}\|}{\|x^*\|}\leq \mathrm{Cond}(A)\frac{\|r\|}{\|b\|} \tag{3.74}$$

证明 由 $x^*-\tilde{x}=A^{-1}b-\tilde{x}=A^{-1}r$ 知

$$\|x^*-\tilde{x}\|\leq \left\|A^{-1}\right\|\cdot\|r\| \tag{3.75}$$

又由 $b=Ax^*$ 有 $\|b\|\leq\|A\|\cdot\|x^*\|$

由 A 非奇异且 $b\neq 0$，得 $x^*\neq 0$，故可得

$$\frac{\|1\|}{\|x^*\|}\leq\frac{\|A\|}{\|b\|} \tag{3.76}$$

所以 $$\frac{\|x^*-\tilde{x}\|}{\|x^*\|}\leq \mathrm{Cond}(A)\frac{\|r\|}{\|b\|}.$$

定理 13 表明：近似解 $\tilde{x}$ 的精度不仅依赖于残余向量 r 的大小，而且还依赖于矩阵 A 的条件数。所以，对于病态方程组，即使 r 很小，也不能保证 $\tilde{x}$ 的可靠性。

5.3 近似解的迭代改善法

设用某种方法得到方程组 $Ax=b$（A非奇异且 $b\neq 0$）的某个近似解 $\tilde{x}=x^{(1)}$后，若 $x^{(1)}$未达到精度要求，可采用如下方法获得较好的近似值:

- **误差的改进：如果数值解的精度太低，可用如下方法改进：**

（1）计算残量 $r^{(1)}=b-Ax^{(1)}$（用双精度计算）。

（2）用列主元消元法解方程组 $Ax = r^{(1)}$，得到近似解 $d^{(1)}$。

（3）用 $d^{(1)}$修正 $x^{(1)}$，得到 $Ax = b$的新近似值 $x^{(2)} = x^{(1)} + d^{(1)}$。

（4）计算 $e = \frac{\|d^{(1)}\|_\infty}{\|x^{(1)}\|_\infty}$，若 $e < \varepsilon$（ε 为精度控制常数），则取 $x^* \approx x^{(2)}$；否则视 $x^{(2)}$为 $x^{(1)}$，重复上述过程，直到满足条件 $e < \varepsilon$。

一般地，当 A 的病态程度不是十分严重，用上述方法对数值解进行改进的效果是不错的。

5.4 预条件处理方法

对于病态方程组$Ax = b$，A的条件数 $\mathrm{Cond}(A)$ 比较大，为此，寻找可逆矩阵（一般为对角矩阵）P, Q，使得 $\mathrm{Cond}(PAQ) < \mathrm{Cond}(A)$，将 $Ax = b$ 转化为 $PAQ(Q^{-1}x) = Pb$。

例如，对方程组$\begin{pmatrix} 1 & 10000 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10000 \\ 2 \end{pmatrix}$，此时：

$$\mathrm{Cond}_\infty(A) = \|A^{-1}\|_\infty \cdot \|A\|_\infty = \frac{(10000+1)^2}{10000-1} \approx 10000$$

为**病态方程组**。取$P = \begin{pmatrix} 0.0001 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, Q = I$，则

$\mathrm{Cond}_\infty(PAQ) = \frac{4}{1-0.0001} \approx 4$，就转化为**良态方程组**。