第五章 线性方程组的数值解法

5.1 基本问题

求解线性方程组的问题是数值分析研究中的一个重要问题.这主要是因为在许多科学与工程中，它们一般最终都要归结为一个线性方程组的求解问题.尽管在数学上已有求解线性方程组的十分漂亮的 Cramer 法则，但在实践求解时，它并不适用．原因在于当用 Cramer 法则求解 n 元线性方程组时，需要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式，每个 n 阶行列式由 $n!$ 项相加，而每项包含 n 个因子相乘，乘法运算次数为 $(n-1)n!$ 次.

所以，在仅考虑乘（除）法运算的情况下，利用 Cramer 法则求解 n 元线性方程组时，乘（除）法运算的次数为 $N=(n+1)(n-1)n!+n$.

当 $n=8$ 时， $N\approx 200$ 万次．当 $n=20$ 时， $N\approx 9.7073\times 10^{20}$ 次．这样大的计算量的计算方法是没有实用价值的.

本章主要介绍求解线性方程组的两类实用方法：直接法和迭代法.

1. 直接法

直接法就是经过有限步算术运算，可求得方程组精确解的方法（若计算过程中没有舍入误差）．但实际计算中由于舍入误差的存在和影响，这种方法也只能求得线性方程组的近似解.

本章介绍适合解系数矩阵稠密、低阶的线性方程组的直接方法：Gauss 消去法及三角分解法，这两种方法本质上是一样的．直接法的优点是：计算量小、精度高，是一种精确地求线性方程组的方法（如果每步计算没有舍入误差）；缺点是：程序较复杂，占用内存大，所以它适用于解中小型（ $n<1000$ ）线性方程组．在实际应用中 Gauss 列主元消去法是一种稳定的算法．当方程组的系数矩阵是三对角阵时，特别是严格对角占优，追赶法是一种既稳定、又快速的方法.

2. 迭代法

迭代法就是用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解的方法.迭代法具有需要计算机的存储单元较少、程序设计简单、原始系数矩阵在计算过程中始终不变等优点，但存在收敛性及收敛速度问题.

本章介绍的迭代法是一种逐次逼近的方法，它的优点是：算法简单、占用内存小，便于在计算机上实现，因此它适合求解大型稀疏线性方程组．常用的迭代法有：Jacobi 迭代法、Gauss-Seidel 迭代法及 SOR 迭代法．Jacobi 迭代法简单，并且有很好的并行性，很适合并行计算，但收敛速度较慢；Gauss-Seidel 迭代法是典型的串行算法，在 Jacobi 迭代法与 Gauss-Seidel 迭代法同时收敛的情况下，后者比前者收敛速度快，但两种迭代收敛域互不包含，不能互相代替．实际应用较多的是 SOR 迭代法，Gauss-Seidel 迭代法是 SOR 迭代法的特例，SOR 迭代法实际上是 Gauss-Seidel 迭代法的一种加速，但选取最佳松弛因子比较困难.

不论是直接法还是迭代法，了解方程组的性态是很重要的，而判别方程组的性态的矩阵条件数是一个重要的概念．对于迭代法来说，判别收敛的充分条件应该掌握好．对于良态方程组，根据系数矩阵的特性，可选取有效可靠的算法，得到满意的结果；而对病态方程组，

实际计算时多数采用扩大运算字长，如采用双精度的方法，也能得到较精确的结果.

5.2 Gauss 消去法

设有线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases} \tag{2.1}$$

记系数矩阵 $A = (a_{ij}) \in R^{n\times n}$ 是非奇异的，$b = (b_1,\ b_2, \cdots, b_n)^T \in R^n$，令 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$，则（2.1）可写为矩阵形式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}, \tag{2.2}$$

简记为 $Ax = b$.

首先举一个简单的例子来说明 Gauss（高斯）消去法的基本思想.

例 1 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, \\ 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3, \\ x_1 + 3x_2 + 2x_3 = 2, \end{cases} \tag{2.3}$$

解 依次将第一个方程的 -2 倍加到第二个方程，将第一个方程的 -1 倍加到第三个方程，从而消去方程组（2.3）第二个和第三个方程中的变量 x_1，得到同解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, \\ \quad -2x_2 + x_3 = 3, \\ \qquad\ x_2 + x_3 = 2, \end{cases} \tag{2.4}$$

同样，将方程组（2.4）的第二个方程的 $\frac{1}{2}$ 倍加到第三个方程，从而消去方程组（2.4）中的变量 x_2，得到同解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, \\ \quad -2x_2 + x_3 = 3, \\ \qquad\quad \dfrac{3}{2}x_3 = \dfrac{7}{2}, \end{cases} \tag{2.5}$$

这就完成了消元过程.

显然，方程组（2.5）是容易求解的，解为

$$x^* = \left(-\frac{5}{3}, -\frac{1}{3}, \frac{7}{3}\right)^T ,$$

上述过程相当于

$$(A \mid b) = \left(\begin{array}{ccc:c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 3 & 2 & 2 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{ccc:c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{ccc:c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 3/2 & 7/2 \end{array}\right),$$

由此看出，用消去法解方程组的基本思想是用逐次法消去未知数的方法把原方程组 $Ax = b$ 化为与其等价的三角形方程组，而求解三角形方程组可用回代的方法求解．换句话说，上述过程就是用行的初等变换将原方程组的增广矩阵化为简单形式（上三角阵），从而求解原方程组（2.1）的问题转化为求解简单方程组的问题．

上述对增广矩阵的化简过程，就是对系数矩阵 A 实施一些左变换（用一些简单矩阵）将其约化为上三角矩阵．即

$$L_2 L_1 (A \mid b) = \left(\begin{array}{ccc:c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 3/2 & 7/2 \end{array}\right),$$

其中 $$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix},\quad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix},$$

下面我们讨论求解一般线性方程组的 Gauss 消去法．

5.2.1 Gauss 消去法

将（2.1）记为 $A^{(1)}x = b^{(1)}$，其中

$$A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)}) = (a_{ij}),\quad b^{(1)} = b .$$

第 1 次消元：设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，首先计算乘数

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

用 $-m_{i1}$ 乘（2.1）的第一个方程，加到第 i 个 $(i = 2,3,\cdots,n)$ 方程上，消去（2.1）的从第二个方程到第 n 个方程中的未知数 x_1，得到与（2.1）等价的方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{pmatrix}, \tag{2.6}$$

简记为 $$A^{(2)}x = b^{(2)},$$

其中 $A^{(2)}$，$b^{(2)}$ 的元素计算公式为

$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)} & (i = 2,\cdots,n; j = 2,\cdots,n), \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)} & (i = 2,\cdots,n), \end{cases}$$

第 k 次消元：设上述第 1 步，⋯，直至第 $k-1$ 次消元过程计算已经完成，即已计算好与 (2.1) 等价的方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{pmatrix}, \tag{2.7}$$

简记为 $A^{(k)}x = b^{(k)}$.

设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 计算乘数

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

用一 m_{ik} 乘 (2.8) 的第 k 个方程加到第 i 个方程 $(i = k+1,\cdots m)$，消去从第 $k+1$ 个方程到第 n 个方程中的未知数 x_k，得到与 (2.1) 等价的方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & a_{1k+1}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & a_{2k+1}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & a_{kk+1}^{(k)} & & a_{kn}^{(k)} \\ & & & & a_{k+1\,k+1}^{(k+1)} & & a_{k+1\,n}^{(k+1)} \\ & & & & \vdots & & \vdots \\ & & & & a_{n\,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{nn}^{(k+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ b_{k+1}^{(k+1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k+1)} \end{pmatrix}, \tag{2.8}$$

记为 $A^{(k+1)}x = b^{(k+1)}$.

$A^{(k+1)}$，$b^{(k+1)}$元素的计算公式为

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} & (i = k+1, \cdots, n; j = k+1, \cdots, n), \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} & (i = k+1, \cdots, n), \end{cases} \tag{2.9}$$

显然$A^{(k+1)}$中从第 1 行到第k行与 $A^{(k)}$相同.

继续上述过程，经过$n-1$次消元后，得到与原方程组等价的方程组为$A^{(n)}x = b^{(n)}$，即

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}. \tag{2.10}$$

由（2.1）约化为（2.10）的过程称为**消元**过程.

对于方程组（2.10），容易求出其解

$$\begin{cases} x_n = b^{(n)} / a_{nn}^{(n)}, \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) / a_{kk}^{(k)} \quad (k = n-1, n-2, \cdots, 1), \end{cases} \tag{2.11}$$

（2.10）的求解过程（2.11）称为**回代**过程. 通过消元和回代两个过程求解方程组（2.1）的解的方法称为 **Gauss 消去法**. 数$a_{kk}^{(k)}$在 Gauss 消去法中有着突出的作用，称为**约化的主元素**.

总结上述讨论有

定理 1 设$Ax = b$，其中$A \in R^{n\times n}$，如果$a_{kk}^{(k)} \neq 0\ (k = 1,2,\cdots,n)$，则可通过高斯消去法将$Ax = b$约化为等价的三角形方程组（2.10），且计算公式为：

（a）消元计算$(k = 1,2,\cdots,n-1)$

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

（b）回代计算

$$\begin{cases} x_n = b^{(n)} / a_{nn}^{(n)}, \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) / a_{kk}^{(k)} \quad (k = n-1, n-2, \cdots, 1), \end{cases}$$

下面进一步说明对于方程组（2.1），当系数矩阵符合什么要求时，才可以保证 Gauss 消去法能够顺利进行.

定理 2 约化的主元素$a_{kk}^{(k)} \neq 0\ (k = 1,2,\cdots,n)$的充分必要条件是系数矩阵$A$的各顺序主子式均不为 0，

即 $$D_1 = a_{11} \neq 0,$$

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0,\ \left(i = 1, 2, \cdots,\ n\right), \tag{2.12}$$

证明 首先利用归纳法证明定理 2 的充分性．显然，当 $k = 1$ 时，定理 2 成立，现设定理 2 充分性对 $k-1$ 是成立的，求证定理 2 充分性对 k 亦成立．

设 $D_i \neq 0\ \left(i = 1, 2, \cdots,\ n\right)$，于是有归纳法假设有 $a_{ii}^{(k)} \neq 0\ \left(i = 1, 2, \cdots,\ k-1\right)$，可用高斯消去法将 $A^{(1)}$ 约化到 $A^{(k)}$，即

$$A^{(1)} \to A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix},$$

且有

$$D_2 = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)},$$

$$\cdots \qquad \cdots$$

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ & \cdots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{kk}^{(k)}, \tag{2.13}$$

因为 $D_i \neq 0\ \left(k = 1, 2, \cdots,\ k\right)$，利用（2.13）式，则有 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，定理 2 充分性对 k 成立．

证明必要性，因为 $a_{kk}^{(k)} \neq 0\ (k = 1,2,\cdots,n)$，利用（2.13）式亦可以推出

$$D_k \neq 0\ \left(k = 1, 2, \cdots,\ n\right).$$

证毕．

推论 如果 A 的顺序主子式 $D_k \neq 0 (i = 1,2,\cdots,n-1)$，则

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} = D_1, \\ a_{kk}^{(k)} = D_k / D_{k-1} \qquad (k = 2, 3, \cdots,\ n). \end{cases}$$

容易计算出 Gauss 消去法的运算次数．

在第 1 次消元，计算 $m_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$，$(i = 2, 3, \cdots,\ n)$，有 $n-1$ 次除法运算．使 $a_{ij}^{(1)}$ 变

成 $a_{ij}^{(2)}$ 以及使 $b_i^{(1)}$ 变为 $b_i^{(2)}$ 有 $n(n-1)$ 次乘法运算和 $n(n-1)$ 次加（减）法运算.

类似地，在第 2 次消元，有 $n-2$ 次除法运算、$(n-1)(n-2)$ 次乘法运算和 $(n-1)(n-2)$ 次加（减）法运算.

一般地，在第 k 次消元，有 $n-k$ 次除法运算、 $(n-k+1)(n-k)$ 次乘法运算和相同次加（减）法运算.

则乘法运算的总次数为

$$n(n-1)+(n-1)(n-2)+\cdots+3\cdot 2+2\cdot 1=\frac{n(n-1)(n+1)}{3};$$

相应的加（减）法运算总次数也为 $\dfrac{n(n-1)(n+1)}{3}$；

除法运算的总次数为 $(n-1)+(n-2)+\cdots+1=\dfrac{n(n-1)}{2}$.

在回代过程中，除法运算次数为 n 次，乘法和加法运算的总次数都为 $\dfrac{n(n-1)}{2}$.

不难算出，当 $n=8$ 时，乘法和除法运算总共为 232 次．当 $n=20$ 时，乘法和除法运算总共 3060 次．相对于 Gramer 法则的计算量要好很多.

综合上面讨论，对一般的 n，Gauss 消去法的运算次数与 n^3 成正比，通常也说 Gauss 消去法的运算次数与 n^3 同阶，记为 $O(n^3)$.

5.2.2 Gauss 列主元消去法

由 Gauss 消去法知道，在消去过程中可能出现 $a_{kk}^{(k)}=0$ 的情况，这时消去法将无法进行；即使主元素 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$，但很小时，用其做除数，会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，最后也使得计算解不可靠.

例 2　求解方程组

$$\begin{pmatrix} 0.3\times 10^{-11} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0.7 \\ 0.9 \end{pmatrix},$$

$$x^*=(0.20000\,00000\,,\,0.70000\,00000)^T.$$

解 （方法 1 ）用 Gauss 消去法求解.

$$(A\,|\,b)=\begin{pmatrix}0.3\times10^{-11} & 1 & 0.7\\ 1 & 1 & 0.9\end{pmatrix},\qquad m_{ik}=0.33333\,33333\times10^{12}$$

$$\to\begin{pmatrix}0.3\times10^{-11} & 1 & 0.7\\ 0 & -0.3333333333\times10^{12} & -0.2333333333\times10^{12}\end{pmatrix}$$

计算解为 $\bar{x}=(0.0000000000\quad 0.7000000000)^T$.

显然计算解 $\bar{x}$ 是一个很坏的结果，不能作为方程组的近似值解. 其原因是我们在消元计算时用了小主元 0.3×10^{-11}，使得约化后的方程组元素数量级大大增长，经再舍入就使得计算不可靠.

（方法 2）交换行，避免绝对值小的主元作除数.

$$(A\,|\,b)\to\begin{pmatrix}1 & 1 & 0.9\\ 0.3\times10^{-11} & 1 & 0.7\end{pmatrix},\quad m_{ik}=0.3\times10^{-11}$$

$$\to\begin{pmatrix}1 & 1 & 0.9\\ 0 & 1 & 0.7\end{pmatrix}$$

得计算解为 $x=(0.2000000000,\ 0.7000000000)^T$.

这是一个较好的计算结果，这个例子告诉我们，在采取 Gauss 消去法解方程组时，小主元可能产生麻烦，故应避免采用绝对值小的主元素 $a_{kk}^{(k)}$. 对一般矩阵来说，最好保持 m_{ik} 的绝对值小于或等于 1. 因此，在 Gauss 消去法中应该引进选主元技巧，以便减少计算过程中舍入误差对求解的影响，目前主要使用的是列主元消去法.

设方程组 (2.1) 的增广矩阵为

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

首先在 A 的第一列中选取绝对值最大的元素作为主元素，例如

$$\left|a_{i_1,1}\right|=\max_{1\le i\le n}\left|a_{i1}\right|\ne0,$$

然后交换 B 的第 1 行与第 i_1 行，经第 1 次消元计算得 $\left(A\,|\,b\right)\to\left(A^{(2)}b^{(2)}\right)$，重复上述过程，设已完成第 $k-1$ 步的选主元素，交换两行及消元计算，$\left(A\,|\,b\right)$ 化为

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

其中 $A^{(k)}$ 的元素仍记为 $a_{ij}, b^{(k)}$ 的元素仍记为 b_i .

第 k 步选主元素（在 $A^{(k)}$ 右下角方阵的第 1 列内选），即确定 i_k ,使

$$\left|a_{i_k,k}\right| = \max_{k \le i \le n}\left|a_{ik}\right| \ne 0 .$$

交换 $\left(A^{(k)} \mid b^{(k)}\right)$ 第 k 行与 i_k 行的元素，再进行消元计算，最后将原方程组回代求解为

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

Gauss 列主元消去法降低了对系数矩阵 A 的要求，不需要 A 的各顺序主子式不为 0，只要 A 非奇异就可计算．Gauss 列主元消去法是求解线性方程组的常用方法之一.

5.3 矩阵的三角分解法

Gauss 消去法实质上是将系数矩阵 A 分解为两个三角矩阵相乘，从而求解方程组 $Ax = b$ 的问题就等价于求解两个三角形方程组.

5.3.1 LU 分解方法

借助矩阵理论对 Gauss 消去法作分析，从而建立 Gauss 消去法与矩阵因式分解的关系.

设（2.1）的系数矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 的各顺序主子式均不为零．由于对 A 施行行的初等变换相当于用初等矩阵左乘 A ，于是对（2.1）施行

第 1 次消元 $A^{(1)}$ 化为 $A^{(2)}$，$b^{(1)}$ 化为 $b^{(2)}$，即

$$L_1A^{(1)} = A^{(2)}, \quad L_1b^{(1)} = b^{(2)},$$

其中

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & \\ -m_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

一般第 k 步消元，$A^{(k)}$ 化为 $A^{(k+1)}$，$b^{(k)}$ 化为 $b^{(k+1)}$，相当于

$$L_k\ A^{(k)} = A^{(k+1)}, \quad L_k\ b^{(k)} = \ b^{(k+1)},$$

其中

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

重复这过程，经过 $n-1$ 次消元，最后得到

$$\begin{aligned} &L_{n-1}\cdots L_2L_1A^{(1)} = A^{(n)}, \\ &L_{n-1}\cdots L_2L_1b^{(1)} = b^{(n)}, \end{aligned} \tag{3.1}$$

注意到

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

将上三角矩阵 $A^{(n)}$ 记为 U，由(3.1）得到

$$A = \ L_1^{-1}\,L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}\,U = LU,$$

其中

$$L=\begin{pmatrix}1&&&&\\m_{21}&1&&&\\m_{31}&m_{32}&1&&\\\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\\m_{n1}&m_{n2}&m_{n3}&\cdots&1\end{pmatrix},\quad U=\begin{pmatrix}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}&\cdots&a_{1n}^{(1)}\\&a_{22}^{(2)}&\cdots&a_{2n}^{(2)}\\&&\ddots&\vdots\\&&&a_{nn}^{(n)}\end{pmatrix}. \tag{3.2}$$

这就是说，高斯消去法实质上产生了一个将 A 分解为两个三角矩阵相乘的因式分解，于是我们得到如下重要定理，它在解方程组的直接法中起着重要作用.

定理 3（矩阵的 LU 分解） 设 A 为 n 阶矩阵，如果 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0$（$i=1,2,\cdots,n-1)$，则 A 可分解为一个单位下三角矩阵 L 和一个上三角矩阵 U 的乘积，且这种分解式唯一的.

证明 根据以上高斯消去法的矩阵分析，$A=LU$ 的存在性已得到证明，现仅在 A 为非奇异矩阵的假定下来证明唯一性，当 A 为奇异矩阵的情况留作练习.

设

$$A=LU=L_1U_1,$$

其中 L 和 L_1 为单位下三角矩阵，U 和 U_1 为上三角矩阵.

由于 U_1^{-1} 存在，故

$$L^{-1}L_1=UU_1^{-1}.$$

上式右边为上三角矩阵，左边为下三角矩阵，从而上式两边都必须等于单位矩阵，故 $U=U_1, L=L_1$. 证毕.

例 3 将矩阵 $A=\begin{pmatrix}1&2&-1\\3&7&1\\1&1&-3\end{pmatrix}$ 进行 LU 分解.

解 由 Gauss 消去法得到

$$L_1=\begin{pmatrix}1&&\\-3&1&\\-1&&1\end{pmatrix},\quad L_2=\begin{pmatrix}1&&\\&1&\\&1&1\end{pmatrix},$$

且有

$$L_2L_1A=U=\begin{pmatrix}1&2&-1\\&1&4\\&&2\end{pmatrix},$$

从而

$$A=\begin{pmatrix}1 & & \\ 3 & 1 & \\ 1 & -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & -1 \\ & 1 & 4 \\ & & 2\end{pmatrix}=LU.$$

在上述过程中，要求系数矩阵 A 的各顺序主子式都不为 0．若 A 只是非奇异矩阵，那么 Gauss 消去法将不可避免要应用两行对换的初等变换．下面用矩阵运算来描述方程组（2.1）的列主元消去法．

第一次消元，将第一行与第 i_1 行交换，相当于方程组 $Ax=b$ 左乘初等置换阵 I_{1,i_1}，即

$$I_{1,i_1}A^{(1)}x=I_{1,i_1}b^{(1)},$$

经第一次消元得

$$L_1I_{1,i_1}A^{(1)}x=L_1I_{1,i_1}b^{(1)},$$

从而得到

$$L_1I_{1,i_1}A^{(1)}=A^{(2)},\quad L_1I_{1,i_1}b^{(1)}=b^{(2)},$$

类似地，经 $n-1$ 次消元，有

$$L_{n-1}I_{n-1,i_{n-1}}\cdots L_2I_{2,i_2}L_1I_{1,i_1}A^{(1)}=A^{(n)},\quad L_{n-1}I_{n-1,i_{n-1}}\cdots L_2I_{2,i_2}L_1I_{1,i_1}b^{(1)}=b^{(n)},$$

其中 L_k 的元素满足 $|m_{ik}|\le 1(k=1,2,\cdots,n-1)$，$I_{k,i_k}$ 是初等置换阵，$A^{(n)}$ 为上三角矩阵．

如果预先知道每一个 $I_{k,i_k}\ (k=1,2,\cdots,n-1)$，则相当于在消元之前就全部作交换，得

$$\widetilde{A}=I_{n-1,i_{n-1}}I_{n-2,i_{n-2}}\cdots I_{1,i_1}A=PA,$$

其中，$P=I_{n-1,i_{n-1}}I_{n-2,i_{n-2}}\cdots I_{1,i_1}$．即原方程变为

$$PAx=Pb,$$

然后再消元，相当于对 PA 作 LU 分解．

总结以上的讨论有

定理 4 (列主元素的三角分解定理)　如果 A 为非奇异矩阵，则存在排列矩阵 P 使

$$PA=LU,$$

其中 L 为单位下三角阵，U 为上三角阵．

5.3.2 Doolittle 分解方法

Doolittle（杜里特尔）方法就是直接从矩阵 A 的元素得到计算 L、U 元素的递推公式，而不需要任何中间步骤，这就是所谓**直接三角分解法**. 因为 Gauss 消去法实质上就是得到 A 的一个三角分解，所以直接三角分解法实质上还是 Gauss 消去法的思想，但它在计算步骤上与 Gauss 消元过程不同，它不需要计算和存储中间矩阵 $A^{(1)},A^{(2)},\cdots,A^{(n-1)}$，而直接得到三角矩阵 L 和 U，因此它也称为紧凑的 Gauss 消元过程．

设矩阵 A 不需要进行行交换，且三角分解是惟一的，设 $A = LU$ ，其中 L 为单位下三角阵，U 为上三角阵，即

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}. \tag{3.3}$$

下面说明 L,U 的元素可以由 n 步直接计算定出，其中第 r 步定出 U 的第 r 行和 L 第 r 列元素．由（3.3）有：

$u_{1i} = a_{1i}(i = 1, 2, \cdots,\ n)$，得 U 的第 1 行元素；

$l_{i1} = {a_{i1}}/{u_{11}}\ (i = 2, \cdots,\ n)$，得 L 的第 1 列元素．

设已经定出 U 的第 1 行到第 $r-1$ 行元素与 L 的第 1 列到第 $r-1$ 列元素．下面计算 U 的第 r 行元素和 L 的第 r 列元素．由 L 的 r 行分别乘 U 的第 i 列 $(i = r, r+1, \cdots, n)$，得

$$a_{ri} = \sum_{k=1}^{n} l_{rk} u_{ki} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki} + u_{ri},$$

故

$$u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki}\ ,\ \ (i = r, r+1, \cdots,\ n)$$

再由 L 的第 i 行 $(i = r, r+1, \cdots, n)$ 分别乘 U 的第 r 列，得

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

故

$$l_{ir} = \left[a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} \right] \Big/ u_{rr},\ \ (i = r+1, \cdots, n\ ;\ 且\ \ r \neq n).$$

总结上述讨论，得到用直接三角分解法解 $Ax = b$（要求 A 的所有顺序主子式都不为零）的计算公式：

（1）计算 U 的第 1 行元素，L 的第一列元素

$$u_{1i} = a_{1i}\ , \qquad i = 1, 2, \cdots,\ n$$

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

（2）计算 U 的第 r 行元素，L 的第 r 列元素；（$r = 2, 3, \cdots,\ n$）

$$u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki}\ , \qquad\qquad i = r,\ r+1, \cdots,\ n\ ; \tag{3.4}$$

$$l_{ir}=\left[a_{ir}-\sum_{k=1}^{r-1}l_{ik}u_{kr}\right]\Big/u_{rr},\qquad i=r+1,\ r+2,\cdots,\ n\text{；且 }r\neq n. \tag{3.5}$$

利用计算机实现 Doolittle 分解法时，可将计算好 L，U 的元素就存放在 A 的相应位置．因为从式（3.4）和式（3.5）可以看出，一旦 l_{ir} 和 u_{ri} 算出来，a_{ir} 和 a_{ri} 就不再使用了，所以 l_{ir}、u_{ri} 就可直接存储在 a_{ir}、a_{ri} 的单元上．存储形式如下

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

由直接三角分解计算公式，需要计算形如 $\sum a_ib_i$ 的式子，可采用“双精度累加”，以提高精度．直接分解法大约需要 $n^3\big/3$ 次乘除法，和高斯消去法计算量基本相同．

选主元的三角分解法：从直接三角分解公式可看出当 $u_{rr}=0$ 时计算将中断，或者当 u_{rr} 绝对值很小时，按分解公式计算可能引起舍入误差的累积，但如果 A 非奇异，我们可通过交换 A 的行实现矩阵 PA 的 LU 分解，因此可采用与列主元消去法类似的方法（可以证明下述方法与列主元消去法等价），将直接三角分解法修改为（部分）选主元的三角分解法．

设第 $r-1$ 步分解已完成，这时有

$$A\to\begin{pmatrix}u_{11}&u_{12}&\cdots&u_{1,r-1}&u_{1r}&\cdots&u_{1n}\\l_{21}&u_{22}&\cdots&u_{2,r-1}&u_{2r}&\cdots&u_{2n}\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\l_{r-1,1}&l_{r-1,2}&\cdots&u_{r-1,r-1}&u_{r-1,r}&\cdots&u_{r-1,n}\\l_{r1}&l_{r2}&\cdots&l_{r,r-1}&a_{rr}&\cdots&a_{rn}\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\l_{n1}&l_{n2}&\cdots&l_{n,r-1}&a_{nr}&\cdots&a_{nn}\end{pmatrix}.$$

第 r 步分解计算时，为了避免用小的数作除数，引进量

$$s_i=a_{ir}-\sum_{k=1}^{r-1}l_{ik}u_{kr}\,(i=r,r+1,\cdots,n).$$

于是有

$$u_{rr}=s_r,l_{ir}=s_i\big/s_r\ ,\ \ (i=r+1,\cdots,\ n) \tag{3.6}$$

取 $\left|s_{i_r}\right|=\max\limits_{r\le i\le n}\left|s_i\right|$，交换 A 的第 r 行与 i_r 行元素，将 s_{i_r} 调到（r,r）位置（将（i,j）位置的新元素仍记为 l_{ij} 及 a_{ij}），于是有 $\left|l_{ir}\right|\le 1(i=r+1,\cdots,n)$. 由此再进行第 r 步分解计算．

一旦实现了矩阵 A 的 LU 分解，那么求解 $Ax=b$ 问题就等价于求解两个三角形方程组

$$
\begin{aligned}
&Ly=b, \quad \text{求} y, \\
&Ux=y, \quad \text{求} x,
\end{aligned}
$$

求解 $Ly=b$，$Ux=y$ 的计算公式

$$
\begin{cases}
y_1=b_1, \\
y_i=b_i-\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k, \qquad i=2,3,\cdots,n
\end{cases}
\tag{3.7}
$$

$$
\begin{cases}
x_n=y_n / u_{nn}, \\
x_i=\left(y_i-\sum_{k=i+1}^{n} u_{ik} x_k\right) \Big/ u_{ii}, \quad i=n-1,\ n-2,\ldots,1
\end{cases}
\tag{3.8}
$$

例 4 用直接三角分解法解

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

$-2=2-1-4+1$

$\frac{1}{2}=(-3-1$

解 我们用箭头表示 A 作 LU 分解的过程

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

.

3311 3143

则求得

$$
L=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}, \quad
U=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.
$$

求解 $Ly=\begin{pmatrix} 0 & 3 & 2 \end{pmatrix}^T$，得 $y=\begin{pmatrix} 0 & 3 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^T$，

$Ux=\begin{pmatrix} 0 & 3 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^T$，得 $x=\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}^T$.

如果已经实现了 $A=LU$ 的分解计算，且 L 和 U 保存在 A 的相应位置，则用直接三角分解法解具有相同系数矩阵的方程组 $Ax=(b_1,b_2,\ldots,b_m)$ 是相当方便的，每解一个方程 $Ax=b_i$ 仅需要增加 n^2 次乘除法运算.

5.3.3 解三对角线方程组的追赶法

在一些实际问题中，例如解常微分方程边值问题，解热传导方程以及船体数学放样中建立三次样条函数等，都会要求解系数矩阵为对角占优的三对角线方程组

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}, \tag{3.9}$$

简记为 $Ax = f$. 其中，当 $|i-j|>1$ 时，$a_{ij}=0$ ，且：

（a）$|b_1|>|c_1|>0$；

（b）$|b_i|\ge|a_i|+|c_i|$，$a_i,c_i\neq 0 \quad (i=2,3,\cdots,n-1)$；

（c） $|b_n|>|a_n|>0$.

我们利用矩阵的直接三角分解法来推导解三对角线方程组（3.24）的计算公式．由系数阵 A 的特点，可以将 A 分解为两个三角阵的乘积，即

$$A = LU,$$

其中 L 为下三角矩阵，U 为单位上三角矩阵（这种方法也称为 Crout 分解法）．下面我们来说明这种分解是可能的．设

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \tag{3.10}$$

其中 $\alpha_i,\beta_i,\gamma_i$ 为待定系数．比较（3.10）两边即得

$$\begin{cases} b_1=\alpha_1, c_1=\alpha_1\beta_1, \\ a_i=r_i, b_i=r_i\beta_{i-1}+\alpha_i \quad (i=2,3,\cdots,n), \\ c_i=\alpha_i\beta_i \ (i=2,3,\cdots,n-1), \end{cases} \tag{3.11}$$

由 $\alpha_1=b_1\neq 0, |b_1|>|c_1|>0, \beta_1=c_1/b_1$ ，得 $0<|\beta_1|<1$.

下面我们用归纳法证明

$$|\alpha_i| > |c_i| \neq 0, \qquad (i = 1, 2, \cdots, \ n-1) \tag{3.12}$$

即 $0 < |\beta_i| < 1$，从而由（3.11）可求出 β_i .

（3.12）对 $i=1$ 是成立的．现设（3.12）对 $i-1$ 成立，求证对 i 亦成立．

由归纳法假设 $0 < |\beta_{i-1}| < 1$，又由（3.12）及 A 的假设条件有

$$|\alpha_i| = |b_i - a_i\beta_{i-1}| \geq |b_i| - |a_i\beta_{i-1}| > |b_i| - |a_i| \geq |c_i| \neq 0,$$

也就是 $0 < |\beta_i| < 1$．由（3.11）得到

$$\alpha_i = b_i - a_i\beta_{i-1}, \qquad (i = 2, \cdots, n)$$

$$\beta_i = c_i / (b_i - a_i\beta_{i-1}), \qquad (i = 2,3\cdots, n-1)$$

这就是说，由 A 的假设条件，我们完全确定了$\{\alpha_i\}$，$\{\beta_i\}$，$\{\gamma_i\}$，实现了 A 的 LU 分解.

求解 $Ax = f$ 等价于解两个三角形方程组

$$\begin{cases} Ly = f, \\ Ux = y, \end{cases}$$

从而得到解三对角线方程组的追赶法公式

1. 计算$\{\beta_i\}$的递推公式

$$\beta_1 = c_1 / b_1,$$

$$\beta_i = c_i / (b_i - a_i\beta_{i-1}), \qquad (i = 2,3\cdots, n-1);$$

2．解 $Ly = f$

$$y_1 = f_1 / b_1,$$

$$y_i = (f_i - a_i y_{i-1}) / (b_i - a_i\beta_{i-1}), \qquad (i = 2,3\cdots, n);$$

3. 解 $Ux = y$

$$x_n = y_n,$$

$$x_i = y_i - \beta_i x_{i+1}, \qquad (i = n-1, n-2, \cdots, 2,1).$$

我们将计算系数 $\beta_1 \to \beta_2 \to \cdots \to \beta_{n-1}$ 及 $y_1 \to y_2 \to \cdots \to y_n$ 的过程称为追的过程，

将计算方程组的解 $x_n \to x_{n-1} \to \cdots \to x_1$ 的过程称为赶的过程.

总结上述讨论有：

定理 5 设有三对角线方程组 $Ax=f$，其中 A 满足条件（a），（b），（c），则 A 为非奇异矩阵，且追赶法计算公式中的$\{\alpha_i\}$，$\{\beta_i\}$满足

1^0 $0<|\beta_i|<1$，$(i=1,2,\cdots,\ n-1)$；

2^0 $0<|c_i|\le|b_i|-|a_i|<|\alpha_i|<|b_i|+|a_i|$ $(i=2,3,\cdots,\ n-1)$；

$$0<|b_n|-|a_n|<|\alpha_n|<|b_n|+|a_n|.$$

追赶法公式实际上就是把高斯消去法用到求解三对角线方程组的结果中．这时由于 A 特别简单，因此使得求解的计算公式非常简单，而且计算量仅为 $5n-4$ 次乘除法，而另外增加解一个方程组 $Ax=f_2$，仅增加 $3n-2$ 次乘除运算．易见追赶法的计算量是比较小的．

由定理 5 的1^0，2^0 说明追赶法计算公式中不会出现中间结果数量级的巨大增加和舍入误差的严重累积．在计算机实现时我们只需用三个一维数组分别存储 A 的三条线元素$\{a_i\}$，$\{b_i\}$，$\{c_i\}$，此外还需要用两组工作单元保存$\{\beta_i\}$，$\{y_i\}$或$\{x_i\}$.

5.4 矩阵的条件数及误差分析

考虑线性方程组

$$Ax=b$$

其中设 A 为非奇异矩阵，x 为方程组的精确解.

由于 A（或 b）元素是测量得到的，或者是计算的结果．在第一种情况下 A（或 b）带有某些观测误差；在后一种情况下 A（或 b）又包含有舍入误差．因此我们处理的实际矩阵是 $A+\delta A$(或 $b+\delta b$)，下面我们来研究数据 A（或 b）的微小误差对解的影响．首先考察一个例子．

例 6 设有方程组

$$\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2\\ 2\end{pmatrix}, \tag{4.1}$$

记为 $Ax=b$，它的精确解为 $x=(2,0)^T$.

现在考虑常数项的微小变化对方程组解的影响，即考察方程组

$$A(x+\delta x)=b+\delta b,$$

或

$y_1+y_2=2$

$y_1+1.0001y_2=2.0001$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix},$$

其中

$$\delta b=\begin{pmatrix} 0 \\ 0.0001 \end{pmatrix},\quad y=x+\delta x\,.$$

显然有

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = x+\delta x=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

可见方程组（4.1）的常数项 b 的第二个分量只有 $\dfrac{1}{10000}$ 的微小变化，方程组的解却变化很大．也就是说方程组解对 A 和 b 非常敏感．这样的方程组称为病态方程组．

定义 1 如果矩阵 A 或常数项 b 的微小变化，引起方程组 $Ax=b$ 解的巨大变化，则称此方程组为“病态”方程组，矩阵 A 称为**“病态”矩阵**（相对于方程组而言）；否则称方成组为“良态”方程组，A 称为**良态矩阵**．

应该注意，矩阵的“病态”性质是矩阵本身的特性，下面我们希望找出刻画矩阵“病态”性质的量．

设有方程组 $Ax=b$，其中 A 为非奇异矩阵，x 为精确解．下面分别研究方程组的常数列 b 和系数矩阵 A 的微小误差对解的影响．

设 b 有误差 δb，考虑对方程组解的影响，即 $b\to b+\delta b$，A 是精确的．

方程组 $Ay=b+\delta b$ 的解记为 $y=x+\delta x$，即

$$A(x+\delta x)=b+\delta b\,. \tag{4.2}$$

于是 $A(\delta x)=\delta b$，得到 $\delta x=A^{-1}(\delta b)$，从而得到 $\|\delta x\|\le\|A^{-1}\|\,\|\delta b\|$，

又由 $\|b\|=\|Ax\|\le\|A\|\,\|x\|$，

得到
$$\frac{1}{\|x\|}\le\frac{\|A\|}{\|b\|}\quad（设\ b\ne 0\ ），\tag{4.3}$$

由式（4.2）及式（4.3）有如下结果．

定理 6 设 A 是非奇异阵，$Ax=b\ne0$，且 $A(x+\delta x)=b+\delta b$，则 b 的微小误差引起解 x 的相对误差有估计式：

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\|A^{-1}\|\,\|A\|\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\,.$$

上式说明，常数项 b 的相对误差在解中可能放大 $\|A^{-1}\|\,\|A\|$ 倍．

10

2.

证明：设 A 有微小误差（扰动）δA，考虑对方程组解的影响．即 $A \to A+\delta A$，b 是精确的，方程组 $(A+\delta A)y=b$ 的解记为 $y=x+\delta x$，则 $(A+\delta A)(x+\delta x)=b$，化简得 $(A+\delta A)\,\delta x=-(\delta A)x$.

如果 δA 不受限制，$A+\delta A$ 可能奇异，而 $(A+\delta A)=A(I+A^{-1}\delta A)$，当 $\|A^{-1}\delta A\|<1$ 时，可得 $\rho(A^{-1}\delta A)<1$，从而 $(I+A^{-1}\delta A)^{-1}$ 存在．故

$$\delta x=-(I+A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}(\delta A)x, \tag{4.4}$$

在限制 $\|A^{-1}\delta A\|<1$ 的条件下，容易得到

$$\left\|(I+A^{-1}\delta A)^{-1}\right\|\le\frac{1}{1-\|(A^{-1}\delta A)\|}, \tag{4.5}$$

因此，设 $\|A^{-1}\|\|\delta A\|\le 1$，由式（4.4）和式（4.5）既得

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\left\|(I+A^{-1}\delta A)^{-1}\right\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\|\le\frac{\|A^{-1}\|\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A^{-1}\|\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}. \tag{4.6}$$

总结上述论述得如下结论：

定理 7 设 A 为非奇异矩阵，$Ax=b\neq 0$，$(A+\delta A)(x+\delta x)=b$，如果 $\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1$，则（4.6）式成立．

如果 δA 充分小，且在条件 $\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1$ 下，（4.6）式说明矩阵 A 的相对误差在解中可能放大 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 倍．

总之，量 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 愈小，由 A 的相对误差引起的解相对误差就愈小；量 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 越大，解的相对误差就越大．所以量 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 实际上刻画了解对原始数据变化的灵敏程度，即刻画了方程组的病态程度，于是引进了下述定义：

定义 2 设 A 为非奇异矩阵，称数 $cond(A)_v=\|A^{-1}\|_v\|A\|_v\,(v=1,2$ 或 $\infty)$ 为矩阵 A 的**条件数**.

由此看出矩阵的条件数与范数有关.

矩阵的条件数是一个十分重要的概念．由上述讨论知，当 A 的条件数相对较大，即 $cond(A)$ 远大于 1 时，方程组 $Ax=b$ 是病态的；当 A 的条件数相对较小，则方程组 $Ax=b$

是良态的．注意，方程组病态性质是方程组本身的性质． A 的条件数越大，方程组的病态数越严重，也就越难用一般的方法求得比较准确的解．

通常使用的条件数有

（1） $cond(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty$；

（2） A 的谱条件数

$$cond(A)_2 = \|A^{-1}\|_2 \|A\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}};$$

当 A 为对称阵时

$$cond(A)_2 = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|},$$

其中 λ_1, λ_n 为 A 的绝对值最大和绝对值最小的特征值．

条件数的性质：

1. 对任何非奇异矩阵 A，都有 $cond(A)_v \ge 1$．事实上，

$$cond(A)_v = \|A^{-1}\|_v \|A\|_v \ge \|A^{-1}A\|_v = 1;$$

2. 设 A 为非奇异矩阵且 $c \ne 0$ (常数)，则

$$cond(cA)_v = cond(A)_v;$$

3. 如果 A 为正交阵，则 $cond(A)_2 = 1$；如果 A 为非奇异矩阵，P 为正交阵，则

$$cond(PA)_2 = cond(AP)_2 = cond(A)_2 .$$

矩阵的条件数是方程组 $Ax = b$ 的解 x 对问题的数据 A 及 b 扰动敏感性的一个度量，或说是 $Ax = b$ 好条件或坏条件的一种度量．

例 7 计算例 6 中方程组系数矩阵的条件数 $cond(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty$.

解 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}$， $A^{-1} = \dfrac{1}{0.0001}\begin{pmatrix} 1.0001 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$；

容易计算

$$\|A\|_\infty = 2.0001, \quad \|A^{-1}\|_\infty = 2.0001 \times 10^4,$$

所以

$$cond(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty \approx 4 \times 10^4 .$$

从而可见，方程组（4.1）是病态方程组.

.

例 8 已知 Hilbert（希尔伯特）矩阵

$$H_n=\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1}\end{bmatrix},$$

计算 H_3 的条件数.

解

$$H_3=\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4}\\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5}\end{bmatrix},\quad H_3^{-1}=\begin{bmatrix}9 & -36 & 30\\ -36 & 192 & -180\\ 30 & -180 & 180\end{bmatrix}.$$

$\frac{1}{2}+\frac{1}{3}+\frac{1}{6}=\frac{7+6}{12}=\frac{13}{12}$

$1+\frac{1}{2}+\frac{1}{3}=\frac{5+6}{6}$

（1） 计算 H_3 条件数 $cond(H_3)_\infty$.

$\|H_3\|_\infty=11/6$， $\|H_3\|_\infty^{-1}=408$，所以 $cond(H_3)_\infty=748$.

同样可计算 $cond(H_6)_\infty=2.9\times10^{7}$， $cond(H_7)_\infty=9.85\times10^{8}$. 当 n 愈大时， H_n 矩阵病态愈严重.

（2）考虑方程组

$$H_3x=(11/6,13/12,47/60)^T=b,$$

$$\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4}\\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{11}{6}\\ \frac{13}{12}\\ \frac{47}{60}\end{bmatrix}$$

设 H_3 及 b 有微小误差（取 3 位有效数字）有

$$\begin{bmatrix}1.00 & 0.500 & 0.333\\ 0.500 & 0.333 & 0.250\\ 0.333 & 0.250 & 0.200\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1+\delta x_1\\ x_2+\delta x_2\\ x_3+\delta x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.83\\ 1.08\\ 0.783\end{bmatrix}, \tag{4.7}$$

简记为 $(H_3+\delta H_3)(x+\delta x)=a+\delta b$. 方程组 $H_3x=b$ 与（4.7）的精确解分别为：

$$x=(1,1,1)^T\ ,\quad x+\sigma x=(1.089512538,0.487967062,1.491002798)^T.$$

于是

δ 向量

$$\delta x=(0.0895,-0.5120,0.4910)^T,$$

$$\frac{\|\delta H_3\|_\infty}{\|H_3\|_\infty}\approx0.18\times10^{-3}<0.02\%\ ,$$

$$\frac{\|\delta b\|_\infty}{\|b\|_\infty} \approx 0.182\%,\quad \frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty} \approx 51.2\%.$$

这就是说 H_3 与 b 相对误差不超过 0.3%，而引起解的相对误差超过 50%.

5.5 线性方程组的迭代解法

在实际应用中，线性方程组的系数矩阵往往是高阶稀疏矩阵. 如果用直接法去求解，显然浪费了许多工作量. 本节研究另一种常用的求解方法——迭代法.

5.5.1 迭代法基本思想

迭代法的基本思想是将求解方程组变为求一个向量序列极限的过程，而这个向量序列是由具有同一形式的迭代过程产生的.

设有

$$Ax = b, \tag{5.1}$$

其中，$A = (a_{ij}) \in R^{n\times n}$ 为非奇异矩阵. 下面研究如何建立 $Ax = b$ 的各种迭代法.

将 A 分裂为

$$A = M - N,$$

其中，M 为可选择的非奇异矩阵，且使 $Mx = d$ 容易求解，一般选择为 A 的某种近似，称 M 为**分裂矩阵**.

于是求解 $Ax = b$，转化为求解 $Mx = Nx + b$，即

$$Ax = b \Leftrightarrow \text{求解 } x = M^{-1}Nx + M^{-1}b.$$

容易得到 $M^{-1}N = M^{-1}(M - A) = I - M^{-1}A$，设 $f = M^{-1}b$，称 $B = I - M^{-1}A$ 为迭代法的**迭代矩阵**， 由此可构造**一阶定常迭代法**

$$\begin{cases} x^{(0)} & (\text{初始向量}), \\ x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f, & (k = 0, 1, 2, \cdots) \end{cases} \tag{5.2}$$

选取不同的分裂矩阵 M，就可以得到不同的迭代矩阵 B 和 f，从而得到解方程组 $Ax = b$ 的各种迭代法.

5.5.2 一阶定常迭代法的收敛性

记 x^* 为方程组（5.1）的精确解. 由式（5.2）得到求解方程组的迭代公式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f, \tag{5.3}$$

其中 B 为迭代矩阵.

如果 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)}$ 存在(记为 x^*)，称此**迭代法收敛**，显然 x^* 就是方程组的解，否则称此**迭代**

法发散. 当迭代法收敛时有

$$x^* = Bx^* + f. \tag{5.4}$$

现在需要解决的问题是：迭代矩阵 B 满足什么条件时，由迭代法产生的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛到 x^*.

引进误差向量

$$\varepsilon^{(k)} = x^{(k)} - x^*, \quad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

由式（5.3）减式（5.4）得到误差向量的递推公式

$$\varepsilon^{(k+1)} = B\varepsilon^{(k)},$$

$$\varepsilon^{(k)} = B^k \varepsilon^{(0)} \quad k = (0,1,\cdots),$$

从而迭代法（5.3）收敛性问题就归结为迭代矩阵 B 满足什么条件时，有 $B^k \to 0$ (零矩阵)($k \to \infty$).

定义 3 设有矩阵序列 $A_k = (a_{ij}^{(k)}) \in R^{n\times n}$ 及 $A = (a_{ij}) \in R^{n\times n}$，如果 n^2 个数列极限存在且有

$$\lim_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij} \quad (i, j = 1,2,\cdots,n),$$

则称 $\{A_k\}$ 收敛于 A，记为 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = A$.

例 9 设有矩阵序列

$$A = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad A^k = \begin{pmatrix} \lambda^k & k\lambda^{k-1} \\ 0 & \lambda^k \end{pmatrix}, \quad (k = 2, 3\cdots),$$

且设 $|\lambda| < 1$，讨论其极限.

解 显然，当 $|\lambda| < 1$ 时，则有 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = \lim\limits_{k\to\infty} A^k = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

矩阵序列极限概念可以用矩阵算子范数来描述.

定理 8 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = A \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty} \|A_k - A\| = 0$，其中 $\|\cdot\|$ 为矩阵的任意一种算子范数.

证明 显然有

$$\lim_{k\to\infty} A_k = A \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty} \|A_k - A\|_\infty = 0.$$

再利用矩阵范数的等价性，可证定理对其他算子范数亦对. 证毕.

定理 9 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = A \Leftrightarrow$ 是对任何向量 $x \in R^n$ 都有 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k x = Ax$.

证明 必要性是显然的.

现证充分性．由对任何向量 $x \in R^n$ 都有 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k x = Ax$，则取 $x = e_j\ (j = 1,2,\cdots,n)$，则有

$$\begin{pmatrix} a_{1j}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{ij}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{nj}^{(k)} \end{pmatrix} = A_k e_j \to A e_j = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ \vdots \\ a_{ij} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{pmatrix}，（当 k \to \infty）$$

或对 i，j 都有 $\lim\limits_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}$，即 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = A$．证毕.

定理 10　设 $B = (b_{ij}) \in R^{n\times n}$，则 $\lim\limits_{k\to\infty} B^k = 0$(零矩阵) $\Leftrightarrow$ 矩阵 B 的谱半径 $\rho(B) < 1$.

证明　只就 B 为可对角化矩阵证明（一般情况可利用矩阵 B 的 Jordan 标准型证明），即存在非奇异矩阵 P 使

$$P^{-1}BP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} = D,$$

其中 λ_i 为 B 的特征值.

从而可得

$$B^k = PD^kP^{-1},$$

其中

$$D^k = \begin{pmatrix} \lambda_1^k & & & \\ & \lambda_2^k & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n^k \end{pmatrix},$$

于是，$\lim\limits_{k\to\infty} B^k = 0 \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty} D^k = 0 \Leftrightarrow \rho(B) < 1$.

定理 11　(迭代法基本定理)　设有方程组 $x = Bx + f$，及一阶定常迭代法

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f. \tag{5.5}$$

则对任意选取初始向量 $x^{(0)}$，迭代法（5.5）收敛 $\Leftrightarrow$ 矩阵 B 的谱半径 $\rho(B) < 1$.

证明　充分性．设 $\rho(B) < 1$，易知 $A = I - B$ 可逆，从而 $Ax = f$ 有唯一解，记为 x^*，则

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

误差向量

$$\varepsilon^{(0)} = x^{(0)} - x^*,\quad \varepsilon^{(k)} = x^{(k)} - x^* = B^k \varepsilon^{(0)}.$$

由于 $\rho(B) < 1$，应用定理 10，有 $\lim_{k\to\infty} B^k = 0$．于是对任意 $x^{(0)}$，有 $\lim_{k\to\infty} \varepsilon^{(k)} = 0$，即

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*.$$

必要性． 设对任意 $x^{(0)}$ 有

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*,$$

其中 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$．从而 $x^* = Bx^* + f$，且对任意 $x^{(0)}$ 有

$$\varepsilon^{(k)} = x^{(k)} - x^* = B^k \varepsilon^{(0)}.$$

又由对任意 $x^{(0)}$（相应得到任意的 $\varepsilon^{(0)}$）都有

$$\lim_{k\to\infty} B^k \varepsilon^{(0)} = 0 = 0\varepsilon^{(0)},$$

由定理 9 知

$$\lim_{k\to\infty} B^k = 0,$$

再由定理 10，即得 $\rho(B) < 1$．证毕．

定理 11 是一阶定常迭代法的基本理论．

例 10 讨论用迭代法

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

的收敛性，其中 $B = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

解 特征方程为 $\det(\lambda I - B) = (\lambda - 1)(\lambda - 2) = 0$，特征根 $\lambda_1 = 1$，$\lambda_2 = 2$，即 $\rho(B) > 1$．这说明用迭代法解此方程组不收敛．

迭代法基本定理在理论上是重要的，它是迭代法收敛性的基本准则，但在实际计算中要验证 $\rho(B) < 1$，当矩阵的阶数 n 比较大时，这种方法计算困难．考虑到 $\rho(B) < \|B\|$，下面给出利用矩阵 B 的范数建立判别迭代法收敛的充分条件．

定理 12 (迭代法收敛的充分条件) 设有方程组 $x = Bx + f, B \in R^{n\times n}$，及一阶定常迭代法

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

如果有 B 的某种算子范数 $\|B\|=q<1$，则

（1） 迭代法收敛，即对任取 $x^{(0)}$ 有

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)}=x^*，且 x^*=Bx^*+f；$$

（2） $\left\|x^*-x^{(k)}\right\|\le q^k\left\|x^*-x^{(0)}\right\|$；

（3） $\left\|x^*-x^{(k)}\right\|\le \dfrac{q}{1-q}\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\|$；

（4） $\left\|x^*-x^{(k)}\right\|\le \dfrac{q^k}{1-q}\left\|x^{(1)}-x^{(0)}\right\|$.

证明

（1） $\rho(B)\le\|B\|<1$，由基本定理 13 结论成立.

（2） 显然有关系式

$$x^*-x^{(k)}=B(x^*-x^{(k-1)})，$$

则

$$\left\|x^*-x^{(k)}\right\|\le q\left\|x^*-x^{(k-1)}\right\|\le q^2\left\|x^*-x^{(k-2)}\right\|\le\cdots\le q^k\left\|x^*-x^{(0)}\right\|.$$

（3） 由（2）可知 $\left\|x^*-x^{(k+1)}\right\|\le q\left\|x^*-x^{(k)}\right\|$.

考查

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

即

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

（4）由关系式

$$x^{(k+1)}-x^{(k)}=B(x^{(k)}-x^{(k-1)})，$$

得

$$\left\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\right\|\le q\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\|\le q^2\left\|x^{(k-1)}-x^{(k-2)}\right\|\le\cdots\le q^k\left\|x^{(1)}-x^{(0)}\right\|，$$

由（3）知

$$\left\|x^* - x^{(k)}\right\| \le \frac{q}{1-q}\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\| \le \frac{q^k}{1-q}\left\|x^{(1)} - x^{(0)}\right\|，证毕.$$

下面介绍几种常用的迭代公式.

5.5.3 Jacobi 迭代法

设有 $Ax = b$，其中 $A = (a_{ij}) \in R^{n\times n}$ 为非奇异矩阵，且 $a_{ii} \ne 0 (i = 1,2,\cdots,n)$，将 A 分解为三部分

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ -a_{21} & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ -a_{n-1,1} & -a_{n-1,2} & \cdots & 0 & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}$$

$$- \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1,n-1} & -a_{1n} \\ & 0 & \cdots & -a_{2,n-1} & -a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & 0 & -a_{n-1,n} \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \equiv D - L - U \qquad (5.6)$$

其中 D 为对角阵，L 和 U 分别为对角线元素为 0 的下三角矩阵和上三角矩阵.

选取分裂矩阵 $M = D$，令迭代矩阵 $B = I - D^{-1}A = D^{-1}(L+U) \equiv J$．由此得到解 $Ax = b$ 的 Jacobi（雅可比）迭代法

$$\begin{cases} x^{(0)}(\text{初始向量}), \\ x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f \quad (k = 0, 1, \cdots), \end{cases} \qquad (5.7)$$

D(E-B)=A

其中称 J 为解 $Ax = b$ 的 Jacobi 迭代法的迭代阵，$f = D^{-1}b$.

Ax=b

由定理 11 可得下面定理.

定理 13 解方程组的 Jacobi 迭代法收敛 $\Leftrightarrow$ $\rho(J) < 1$，其中 $J = D^{-1}(L+U)$.

推论 如果有 J 的某种算子范数 $\|J\| = q < 1$，则 Jacobi 迭代法收敛.

记 $x^{(k)} = \left(x_1^{(k)},\cdots,x_i^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}\right)^T$，由 Jacobi 迭代公式（5.7）得

$$Dx^{(k+1)} = (L+U)x^{(k)} + b,$$

或

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

于是，得到求解 $Ax = b$ 的 Jacobi 迭代法的计算公式为

$$\begin{cases} x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)}\right)^T, \\ x_i^{(k+1)} = (b_i - \sum\limits_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}) / a_{ii} \\ (i = 1, 2, \cdots, n) \quad (k = 0, 1, \cdots \text{表示迭代次数}). \end{cases} \tag{5.8}$$

由（5.8）式可知，雅可比迭代法计算公式简单，每迭代一次只需计算一次矩阵和向量的乘法，且计算过程中原始矩阵 A 始终不变.

例 11 用 Jacobi 迭代法解方程组

$$\begin{cases} 4x_1 - x_2 = 2 \\ -x_1 + 4x_2 - x_3 = 6 , \\ -x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases}$$

取初始值 $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$，精确解为 $x^* = (1, 2, 1)^T$，

解 Jacobi 迭代矩阵

$$J = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix},$$

容易计算 $\|J\|_\infty = \frac{1}{2}$，故 Jacobi 迭代法收敛.

Jacobi 迭代公式为

$$\begin{cases} x_1^{(i+1)} = \frac{1}{4}(2 + x_2^{(i)}) \\ x_2^{(i+1)} = \frac{1}{4}(6 + x_1^{(i)} + x_3^{(i)}), \quad i = 0, 1, 2, \cdots \\ x_3^{(i+1)} = \frac{1}{4}(2 + x_2^{(i)}) \end{cases}$$

迭代 4 次的结果如下

$$x^{(1)} = (0.5, 1.5, 0.5)^T,$$

$$x^{(2)} = (0.875, 1.75, 0.875)^T,$$

$$x^{(3)} = (0.938, 1.938, 0.938)^T,$$

$$x^{(4)} = (0.984, 1.969, 0.984)^T.$$

5.5.4 Gauss—Seidel 迭代法

对于 $Ax = b$，其中 $A = (a_{ij}) \in R^{n\times n}$ 为非奇异矩阵，与 Jacobi 迭代法类似，同样要求对

角线元素 $a_{ii} \neq 0(i=1, 2, \cdots, n)$.

选取分裂矩阵 M 为 A 的下三角部分，即 $M = D - L$，则迭代矩阵

$$B = I - (D-L)^{-1} A = (D-L)^{-1} U \equiv G .$$

由此得到求解 $Ax = b$ 的 Gauss—Seidel（高斯-赛德尔）迭代法.

$$\begin{cases} x^{(0)}(\text{初始向量}), \\ x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f,\ (k = 0,1,\cdots), \end{cases} \tag{5.9}$$

称 $G = (D-L)^{-1}U$ 为解 $Ax = b$ 的 Gauss—Seidel 迭代法的迭代矩阵，$f = (D-L)^{-1}b$. 由定理 11 可得下面定理.

定理 14 解方程组的 Gauss—Seidel 迭代法收敛 $\Leftrightarrow$ $\rho(G) < 1$，其 $G = (D-L)^{-1}U$.

推论 如果有 G 的某种算子范数 $\|G\| = q < 1$，则 Gauss—Seidel 迭代法收敛.

记 $x^{(k)} = \left(x_1^{(k)}, \cdots, x_i^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)}\right)^T$，由 Gauss—Seidel 迭代公式（5.9）式得

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

或

$$Dx^{(k+1)} = Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)} + b ,$$

即

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} ,\ (i=1,2,\cdots,n).$$

于是，得到求解 $Ax = b$ 的 Gauss—Seidel 迭代法的计算公式为

$$\begin{cases} x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)}\right)^T \quad (\text{初始向量}), \\ x_i^{(k+1)} = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}) / a_{ii} , \\ (i = 1, 2, \cdots, n;\ k = 0, 1, 2, \cdots) \end{cases} \tag{5.10}$$

或

$$\begin{cases} x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)}\right)^T , \\ x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \Delta x_i , \\ \Delta x_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}) / a_{ii} , \\ (i = 1, 2, \cdots, n;\ k = 0, 1, 2, \cdots) \end{cases} \tag{5.11}$$

在 Jacobi 迭代法中，每次迭代用的是前一次迭代的全部分量 $x_i^{(k)}(i=1,2,\cdots,n)$. 实际上，在计算 $x_i^{(k+1)}$ 时，最新的分量 $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 已经算出，但没有利用. 而 Gauss—Seidel 迭代法在计算 $x^{(k+1)}$ 的第 i 个分量 $x_i^{(k+1)}$ 时，则充分利用了已经计算出的最新分量

$x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$，因此 Gauss—Seidel 迭代法可看作是 Jacobi 迭代法的一种改进．由式（5.10）可知，Gauss—Seidel 迭代法每迭代一次只需计算一次矩阵与向量的乘法．

例 12　用 Gauss—Seidel 迭代法求解例 11 中的线性方程组．

解　Gauss—Seidel 迭代法的迭代矩阵

$$G = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{16} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{64} & \frac{1}{16} \end{pmatrix},$$

容易计算 $\|G\|_\infty = \frac{5}{16}$，故 Gauss—Seidel 迭代法收敛．

Gauss—Seidel 迭代公式为

$$\begin{cases} x_1^{(i+1)} = \frac{1}{4}(2 + x_2^{(i)}) \\ x_2^{(i+1)} = \frac{1}{4}(6 + x_1^{(i+1)} + x_3^{(i)}), \quad i = 0, 1, 2, \cdots \\ x_3^{(i+1)} = \frac{1}{4}(2 + x_2^{(i+1)}) \end{cases}$$

迭代 4 次的结果如下

$$x^{(1)} = (0.5, 1.625, 0.9063)^T,$$

$$x^{(2)} = (0.9063, 1.9532, 0.9883)^T,$$

$$x^{(3)} = (0.9883, 2.0, 0.9985)^T,$$

$$x^{(4)} = (0.99885, 1.999, 0.9998)^T.$$

由此例可知，用 Gauss—Seidel 迭代法、Jacobi 迭代法求解例 11 中的线性方程组 (且取 $x^{(0)} = 0$)均收敛，而 Gauss—Seidel 迭代法比 Jacobi 迭代法收敛更快（即取 $x^{(0)}$ 相同，达到同样精度所需迭代次数较少），但这结论并不是对所有的系数矩阵 A 都成立．

5. 5. 5 超松弛迭代法

设已知 $x^{(k)}$ 及已知计算 $x^{(k+1)}$ 的分量 $x_j^{(k+1)}\left(j = 1, 2, \cdots, i-1\right)$

(1)首先用高斯-赛德尔迭代法定义辅助量 $\tilde{x}_j^{(k+1)}$

$$\tilde{x}_j^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\right) \Big/ a_{ii} \tag{5.12}$$

(2)再由 $x_i^{(k)}$ 与 $\tilde{x}_j^{(k+1)}$ 加权平均定义 $x_i^{(k+1)}$ 即

$$x_i^{(k+1)}=(1-\omega)x_i^{(k)}+\omega\tilde{x}_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}+\omega\left(\tilde{x}_i^{(k+1)}-x_i^{(k)}\right) \tag{5.13}$$

将(5.12)代入(5.13)得到解 $Ax=b$ 的 SOR 迭代式:

$$\begin{cases} x^{(0)} \ (\text{初始向量}) \\ x^{(k+1)}=L_\omega x^{(k)}+f \quad (k=0,1,\cdots) \end{cases} \tag{5.14}$$

其中 $L_\omega=(D-\omega L)^{-1}\left((1-\omega)D+\omega U\right)$，$f=\omega(D-\omega L)^{-1}b$

下面给出解 $Ax=b$ 的 SOR 迭代法的分量计算公式.记

$$x^{(k)}=\left(x_1^{(k)},\cdots,x_i^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}\right)^T$$

由(2.10)式可得 $(D-\omega L)^{-1}x^{(k+1)}=\left((1-\omega)D+\omega U\right)x^{(k)}+\omega b$

或

$$Dx^{(k+1)}=Dx^{(k)}+\omega\left(b+Lx^{(k+1)}+Ux^{(k)}-Dx^{(k)}\right)$$

SOR 方法的计算公式

$$\begin{cases} x^{(0)}=\left(x_1^{(0)},\cdots,x_n^{(0)}\right)^T, \\ x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}+\omega\left(b_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{(k+1)}-\sum_{j=i}^{n}a_{ij}x_j^{(k)}\right)/a_{ii}, \\ (i=1,2,\cdots,n;\ k=0,1,\cdots), \\ \omega\text{为松弛因子}. \end{cases} \tag{5.15}$$

或

$$\begin{cases} x^{(0)}=\left(x_1^{(0)},\cdots,x_n^{(0)}\right)^T, \\ x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}+\Delta x_i, \\ \Delta x_i=\omega\left(b_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{(k+1)}-\sum_{j=i}^{n}a_{ij}x_j^{(k)}\right)/a_{ii}, \\ (i=1,2,\cdots,n;;\ k=0,1,\cdots), \\ \omega\text{为松弛因子}. \end{cases} \tag{5.16}$$

（1） 显然，当 $\omega=1$ 时，SOR 方法即为 Gauss—Seidel 迭代法.

（2） SOR 方法每迭代一次主要运算量是计算一次矩阵与向量的乘法.

（3） 当 $\omega>1$ 时，称为超松弛法；当 $\omega<1$ 时，称为低松弛法.

（4） 在计算机实现时可用

$$\left\|x_i^{(k+1)}-x_i^{(k)}\right\|_\infty=\max_{1\le i\le n}|\Delta x_i|<\varepsilon$$

控制迭代终止，或用 $\left\|r^{(k)}\right\|_\infty=\left\|b-Ax^{(k)}\right\|_\infty<\varepsilon$ 控制迭代终止。

例 13 用 SOR 方法解方程组

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

它的精确解为$x^* = (-1,-1,-1,-1)^T$.

解 取$x^{(0)} = 0$, 迭代公式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \omega\left(1 + 4x_1^{(k)} - x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - x_4^{(k)}\right)/4, \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \omega\left(1 - x_1^{(k+1)} + 4x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - x_4^{(k)}\right)/4, \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - \omega\left(1 - x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)} + 4x_3^{(k)} - x_4^{(k)}\right)/4, \\ x_4^{(k+1)} = x_4^{(k)} - \omega\left(1 - x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)} - x_3^{(k+1)} + 4x_4^{(k)}\right)/4, (k = 0, 1, \cdots) \end{cases}$$

取$\omega = 1.3$，第 11 次迭代结果为

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

且满足 $\left\|x^{(11)} - x^*\right\| = \left\|\varepsilon^{(11)}\right\|_2 \le 0.46\times10^{-5}$.

对ω取其它值，迭代次数如下表．从此例看到，松弛因子选择得好，会使 SOR 迭代法的收敛大大加速．本例中$\omega = 1.3$是最佳松弛因子．

表 5-1 松弛因子对比

松弛因子 ω	满足误差 $\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_2 < 10^{-5}$ 的迭代次数	松弛因子 ω	满足误差 $\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_2 < 10^{-5}$ 的迭代次数
1.0	22	1.5	17
1.1	17	1.6	23
1.2	12	1.7	33
1.3	11(最少迭代次数)	1.8	53
1.4	14	1.9	109

5.5.6 关于解某些特殊方程组迭代法的收敛性

定义 4（对角占优阵） 设$A = (a_{ij})_{n\times n}$，

（1） 如果A的元素满足

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j\ne i}}^{n} |a_{ij}|, \quad (i = 1, 2, \cdots, n),$$

称A为**严格对角占优阵**（或**强占优阵**）；

（2） 如果A的元素满足

$$|a_{ii}| \geqslant \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|, \quad (i=1,2,\cdots, \ n)$$

且上式至少有一个不等式严格成立，称 A 为**弱对角占优阵**.

定理 15 (对角占优定理) 如果 $A=(a_{ij})_{n\times n}$ 为严格对角占优矩阵或 A 为不可约的弱对角占优矩阵，则 A 为非奇异矩阵.

证明 只就 A 为严格对角占优矩阵证明此定理. 采用反证法，如果 $\det(A)=0$，则 $Ax=0$ 有非零解，记为 $x=(x_1,\cdots,x_n)^T$，则 $|x_k|=\max\limits_{1\le i\le n}|x_i|\neq 0$.

由齐次方程组第 k 个方程

$$\sum_{j=1}^{n} a_{kj}x_j = 0,$$

则有

$$|a_{kk}x_k| = \left|\sum_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n} a_{kj}x_j\right| \le \sum_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n} |a_{kj}||x_j| \le |x_k| \sum_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n} |a_{kj}|,$$

即
$$|a_{kk}| \le \sum_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n} |a_{kj}|,$$

与假设矛盾，故 $\det(A)\neq 0$. 证毕.

定理 16 设 $Ax=b$，其中 $A=(a_{ij})_{n\times n}$，如果 A 为严格对角占优阵，则解 $Ax=b$ 的 Jacobi 迭代法，Gauss—Seidel 迭代法均收敛.

证明 由已知可得，$a_{ii}\neq 0(i=1,2,\cdots,n)$，解 $Ax=b$ 的 Gauss—Seidel 迭代法的迭代矩阵为 $G=(D-L)^{-1}U$，其中 $A=D-L-U$.

下面考察 G 的特征值的情况：

$$\det(\lambda I-G)=\det\left(\lambda I-(D-L)^{-1}U\right)=\det\left((D-L)^{-1}\right)\cdot\det\left(\lambda(D-L)-U\right)=0.$$

由于 $\det\left((D-L)^{-1}\right)\neq 0$，于是 G 特征值即为 $\det\left(\lambda(D-L)-U\right)=0$ 的根. 记

$$C\equiv\lambda(D-L)-U=\begin{pmatrix}\lambda a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nn}\end{pmatrix},$$

假设 $|\lambda|\ge 1$，则有

$$|c_{ii}| = |\lambda a_{ii}| > |\lambda| \left(\sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^{n} |a_{ij}| \right) \geq \sum_{j=1}^{i-1} |\lambda a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^{n} |a_{ij}| = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |c_{ij}|,\quad (i = 1,2,\cdots,n),$$

这说明，当$|\lambda| \geq 1$时，矩阵C为严格对角占优阵，再由对角占优定理有$\det(C) \neq 0$．这与λ为G的特征值矛盾，所以$|\lambda| < 1$，从而 Gauss—Seidel 迭代法收敛．证毕。

下面研究对于解方程组$Ax = b$的 SOR 方程中松弛因子ω在什么范围内取值， 方法才有可能收敛。

定理 17 (SOR 方法收敛的必要条件) $A = (a_{ij})_{n \times n}$，设解方程组$Ax = b$的 SOR 迭代法收敛，则$0 < \omega < 2$.

证明 SOR 迭代法的迭代阵为

$$L_\omega = (D - \omega L)^{-1} [(1 - \omega) D + \omega U],$$

由 SOR 迭代法收敛，则有$\rho(L_\omega) < 1$，设L_ω的特征值为$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$，则

$$\det(L_\omega) = |\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n| \leq (\rho(L_\omega))^n,$$

或

$$|\det(L_\omega)|^{\frac{1}{n}} \leq \rho(L_\omega) < 1,$$

另一方面

$$\det(L_\omega) = \det\left((D - \omega L)^{-1}\right) \det\left((1 - \omega) D + \omega U\right)$$

$$= (1 - \omega)^n,$$

从而

$$\left|(1 - \omega)^n\right|^{\frac{1}{n}} = |1 - \omega| < 1,$$

即

$$0 < \omega < 2.$$

证毕.

定理 17 说明解$Ax = b$的 SOR 迭代法，只有在$(0,2)$范围内取松弛因子ω，才有可能收敛。

5.6 数值实验及程序

5.6.1 Gauss 列主元消去法实验

Gauss 消去法求解线性方程组$Ax = b$，分消元和回代两个计算步骤：

（a）消元计算$(k = 1,2,\cdots,n-1)$

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

（b）回代计算

$$\begin{cases} x_n = b^{(n)} / a_{nn}^{(n)}, \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) / a_{kk}^{(k)} \quad (k = n-1, n-2, \cdots, 1) \end{cases}$$

Gauss 列主元消去法在消元过程中，要进行选元步骤，即选择$\left|a_{i_k,k}^{(k)}\right| = \max\limits_{k \le i \le n} \left|a_{ik}^{(k)}\right|$，交换增广矩阵$(A,b)$的第$k$行与第$i_k$行，然后再进行消元计算，从而避免误差增大的情形．当系数矩阵A可逆时，Gauss 列主元消去法就可以进行．

下面就高斯列主元消去法编写 matlab 程序如下：（Gauss_L.m）

```
% 高斯列主元消去法
% A 为 n 阶方阵，b 为 n*1 的列向量，求解方程组 Ax=b

function x=Gauss_L(A，b)
n=length(b);
x=zeros(n，1);
for k=1:n-1
    % 选主元
    max=abs(A(k，k));
    ik=k;
    for i=k+1:n
        if max<abs(A(i，k))
            max=abs(A(i，k));
            ik=i;
        end
    end
    if ik~=k  %交换第 k 行与第 ik 行
        A(k，:)=A(k，:)+A(ik，:);
        A(ik，:)=A(k，:)-A(ik，:);
        A(k，:)=A(k，:)-A(ik，:);
        b(k)=b(k)+b(ik);
        b(ik)=b(k)-b(ik);
        b(k)=b(k)-b(ik);
    end

    % 消元计算
    if A(k，k)==0
        fprintf('矩阵 A 不可逆\n');
        return
```

```
    else
        for i=k+1:n
            m=A(i, k)/A(k, k);
            A(i, :)=A(i, :)-m*A(k, :);
            b(i)=b(i)-m*b(k);
        end

        % 回代计算
        if A(n, n)==0
            fprintf('矩阵A不可逆\n');   return
        end
        x(n)=b(n)/A(n, n);
        for i=n-1:-1:1
            x(i)=( b(i)-sum(A(i, i+1:n).*x(i+1:n)') )/ A(i, i);
        end
    end
end
```

例 14　利用高斯列主元消去法解法求解方程组

$$\begin{pmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 \\ -1.000 & 3.172 & 4.623 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1.000 \\ 2.000 \\ 3.000 \end{pmatrix}.$$

解　计算过程如下：

输入：

```
A=[0.001, 2, 3;-1, 3.172, 4.623;-2, 1.072, 5.643];
b=[1;2;3];
x=Gauss_L(A, b)
```

输出：

```
x =
    -0.464604678030754
    -0.0702292648844302
    0.380307711482297
```

5.6.2 Doolittle 分解

Doolittle 方法直接三角分解法，即直接从系数矩阵 A 的元素得到计算 L 、U 元素的递推公式，而不需要任何中间步骤，其计算公式：

（1）计算 U 的第 1 行元素，L 的第一列元素

$$u_{1i}=a_{1i} \qquad i=1,2,3,\cdots,n$$

$$l_{i1}={a_{i1}}/{u_{11}} \qquad i=2,3,\cdots,n\,;$$

（2）计算 U 的第 r 行元素，L 的第 r 列元素；　（$r=2,3,\cdots,n$）

$$u_{ri}=a_{ri}-\sum_{k=1}^{r-1}l_{rk}u_{ki} \qquad i=r,r+1,\cdots,n\text{；}$$

$$l_{ir}=\left[a_{ir}-\sum_{k=1}^{r-1}l_{ik}u_{kr}\right]\Big/u_{rr} \qquad i=r+1,\cdots,n\text{；且 } r\neq n\,.$$

当系数矩阵 A 的各阶顺序主子式都不等于 0 时，则 A 可进行 Doolittle 分解.

matlab 程序如下：（nalu_.m）

```
%矩阵的 LU 分解解方程组
%A 为可逆矩阵，b 为常数列. Ax=b.
%L 返回单位下三角矩阵，U 返回上三角矩阵，x 为方程组的解.
function [L, U, x]=nalu(A, b)
n=length(A);
U=zeros(n, n);
L=eye(n, n);
U(1, :)=A(1, :);
x=zeros(n, 1);
L(2:n , 1)= A(2:n , 1) / U(1, 1);
for r=2 : n
  U(r , r: n)=A(r, r: n)-L(r , 1: r-1)* U(1: r-1, r: n);
  L(r+1: n, r)=(A(r+1: n, r)-L(r+1: n, 1: r-1) *U (1: r-1, r)) / U(r,
r);
end    %LU 分解结束
y(1)=b(1);    %求解 Ly=b
for i=2:n
    sum=0;
    for k=1:i-1
        sum=sum+L(i, k)*y(k);
    end
    y(i)=b(i)-sum;
end     %求解 Ly=b 结束

x(n)=y(n)/U(n, n);  %计算 Ux=y
for i=n-1:-1:1
    sum=0;
    for k=i+1:n
        sum=sum+U(i, k)*x(k);
    end
    x(i)=(y(i)-sum)/U(i, i);
end      %计算 Ux=y 结束
```

例 15 利用矩阵 Doolittle 分解法求解方程组

$$\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 5 & 2\\ 3 & 1 & 5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}14\\ 18\\ 20\end{pmatrix}$$

解 计算过程如下：

输入：

```
A=[1，2，3;2，5，2;3，1，5];
b=[14;18;20];
[L，U，x]=nalu(A，b)
```

输出：

```
L =
     1     0     0
     2     1     0
     3    -5     1
U =
     1     2     3
     0     1    -4
     0     0   -24
x =
     1
     2
     3
```

由于在计算机实现时当u_{ri}计算好后a_{ri}就不用了，因此计算好L、U的元素后就可以存放在A的相应位置，从而节省存储空间．另外，完整的程序还应加入判断A的顺序主子式是否为 0 的语句．因此可以对程序进行相应的修改．

```
matlab程序如下：(decomp_LU.m)
function x=decomp_LU(A，b)
% 矩阵的 LU 分解求解方程组 Ax=b.
% A 为各阶顺序主子式不为 0 的方阵，b 为常数列.
% 为了节省存储空间，将 L、U 的元素存放在 A 的相应位置.
n=length(A);
x=zeros(n，1);
y=zeros(n，1);
% LU 分解
if A(1，1)==0
    fprintf('矩阵顺序主子式有为 0 的，无法直接 LU 分解\n')
    return
end
A(2:n ， 1)= A(2:n ， 1)  / A(1，1);
for r=2 : n
  A(r ，r: n)=A(r， r: n)-A(r ， 1: r-1)* A(1: r-1， r: n);%利用矩阵乘法避免循环
```

```
  if A(r, r)==0
      fprintf('矩阵顺序主子式有为 0 的，无法直接 LU 分解\n')
      return
  end
  A(r+1: n,  r)=(A(r+1: n,  r)-A(r+1: n,  1: r-1) *A (1: r-1,  r)) / A(r,
r);
end    %LU 分解结束
fprintf('显示 LU 分解的结果（L、U 的元素存放在 A 的相应位置）:\n')
A
% 求解方程组
y(1)=b(1);    %求解 Ly=b
for i=2:n
    y(i)=b(i)-A(i, 1:i-1)*y(1:i-1);
end     %求解 Ly=b 结束

x(n)=y(n)/A(n, n);  %计算 Ux=y
for i=n-1:-1:1
    x(i)=( y(i)-A(i, i+1:n)*x(i+1:n) ) / A(i, i);
end      %计算 Ux=y 结束
```

类似与选主元的高斯法，也可以考虑选主元的 LU 分解．这时条件变为 A 可逆时，就可以进行 LU 分解．

5.6.3 Jacobi 迭代法

Jacobi 迭代法选取分裂矩阵 $M = D$，迭代矩阵 $J = I - D^{-1}A = D^{-1}(L+U)$.

Jacobi 迭代法的计算公式为

$$\begin{cases} x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)}\right)^T, \\ x_i^{(k+1)} = (b_i - \sum\limits_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}) / a_{ii} \\ (i = 1,2,\cdots,n) \quad (k = 0,1,\cdots \text{表示迭代次数}). \end{cases}$$

当相邻两向量 $x^{(k)}$ 与 $x^{(k+1)}$ 之间的无穷范数 $\left\|x^{(k)} - x^{(k+1)}\right\| < \varepsilon$ 时，迭代停止．

matlab 程序如下：（Jacobi.m）

```
function [x, it]=Jacobi(A, b, x0, ep, it_max)
% jacobi 迭代法求方程组 Ax=b 的解.
% A 为系数矩阵，b 为常数列，x0 为初始化列向量；
% ep 为误差系数，it_max 为最大迭代次数；
% x 为方程组的解，it 记录迭代次数.
n=length(b);
if nargin<5
    it_max=100;    % 默认最大迭代次数
end
```

```
if nargin<4
    ep=1e-6;       % 默认误差
end
if nargin<3
    x0=zeros(n, 1); % 默认初始向量
end

x=zeros(n, 1);
it=0;
% 迭代开始
for k=1:it_max
    it=it+1;  %记录迭代次数.
    for i=1:n
        x(i)=(b(i)-A(i, [1:i-1, i+1:n])*x0([1:i-1, i+1:n]))/A(i, i);
    end
    err=abs(norm(x-x0, inf));% 计算相邻两个向量 x_k+1 与 x_k 差的无穷范数.
    x0=x; %迭代, x0=x_(k+1),  x=x_k
    if(err<ep)   %相邻两个向量 x_k+1 与 x_k 差的无穷范数充分小（小于 ep 精度）
        fprintf('\n 相邻两次迭代向量 x_k 与 x_k+1 差的无穷范数 < %f\n', ep);
        break;   %精度符合要求, 结束计算.
    end
end
```

例 16 求解方程组：$\begin{pmatrix} 8 & -1 & 1 \\ 2 & 10 & -1 \\ 1 & 1 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 11 \\ -3 \end{pmatrix}$，初始 $x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

解 计算过程如下：

输入：

```
A=[8, -1, 1;2, 10, -1;1, 1, -5];
b=[8;11;-3];
[x, it]=Jacobi(A, b);
```

输出：

```
相邻两次迭代向量 x_k 与 x_k+1 差的无穷范数 < 0.000001
x =
     1.00000000763594
     1.00000007536375
     0.99999991235125
it =
     11
```

5.6.4 Gauss—Seidel 迭代法

Gauss-seidel 迭代法选取分裂矩阵 $M = D - L$，迭代矩阵 $G = (D-L)^{-1}U$.

Gauss—Seidel 迭代法计算公式为

$$\begin{cases} x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)}\right)^T \quad (\text{初始向量}), \\ x_i^{(k+1)} = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}) / a_{ii} \\ (i = 1,2,\cdots,n;\ k = 0,1,2\cdots) \end{cases}$$

或

$$\begin{cases} x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)}\right)^T \\ x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \Delta x_i \\ \Delta x_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}) / a_{ii} \\ (i = 1,2,\cdots,n;\ k = 0,1,2\cdots) \end{cases}$$

下面利用第一个公式编写 matlab 程序.

matlab 程序如下：（Gauss_S.m）

```
function [x，it]=Gauss_S(A，b，x0，ep，it_max)
% Gauss-Seidel 迭代法求方程组 Ax=b 的解.
% A 为系数矩阵，b 为常数列，x0 为初始列向量；
% ep 为误差系数，it_max 为最大迭代次数；
% x 为方程组的解，it 记录迭代次数.
n=length(b);
if nargin<5
    it_max=100;        % 默认最大迭代次数
end
if nargin<4
    ep=1e-6;           % 默认误差
end
if nargin<3
    x0=zeros(n，1);    % 默认初始向量
end

it=0;
x=zeros(n，1);

% 迭代开始
for k=1:it_max
    it=it+1;  %记录迭代次数.
    for i=1:n
        s1=0;s2=0;
        for j=1:i-1
            s1=s1+A(i，j)*x(j);
        end
        for j=i+1:n
```

```
            s2=s2+A(i，j)*x0(j);
        end
        x(i)=(b(i)-s1-s2)/A(i，i);
    end
    err=abs(norm(x-x0，inf));% 计算相邻两个向量 x_k+1 与 x_k 差的无穷范数.
    x0=x;
    if(err<ep)   %相邻两个向量 x_k+1 与 x_k 差的无穷范数充分小（小于 ep 精度）
        fprintf('\n 相邻两次迭代向量 x_k 与 x_k+1 差的无穷范数 < %f\n'，ep);
        break;   %精度符合要求，结束计算.
    end
end
```

例 17 求解方程组：$\begin{pmatrix} 8 & -3 & 2 \\ 4 & 11 & -1 \\ 6 & 3 & 12 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 20 \\ 33 \\ 36 \end{pmatrix}$，初始 $x^{(0)}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

解 计算过程如下：

输入：

```
A=[8，-3，2;4，11，-1;6，3，12];
b=[20;33;36];
[x，it]=Gauss_S(A，b);
```

输出：

```
相邻两次迭代向量 x_k 与 x_k+1 差的无穷范数 < 0.000001
x =
      2.9999999836705
      2.00000001911644
      1.00000000338564
it =
      9
```

习 题 五

1．利用 Gauss 消去法求解下列方程组并写出系数矩阵相应的三角分解.

（1）$\begin{cases} x_1+x_2-x_3=1 \\ x_1+2x_2-2x_3=0 \\ -2x_1+x_2+x_3=1 \end{cases}$；（2）$\begin{cases} 2x_1+3x_2+5x_3=5 \\ 3x_1+4x_2+7x_3=6 \\ x_1+3x_2+3x_3=5 \end{cases}$.

2．根据解线性方程组的 Gauss 消去法，试设计一方法求可逆矩阵 A 的逆，且计算其所需的乘除法运算量.

3．设 A 是 n 阶矩阵，且经过 Gauss 消去法一步消去后变为

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \alpha_1^T \\ 0 & A_2 \end{pmatrix},$$

证明：（1）如果 A 是实对称阵，那么 A_2 也是对称的；

（2）如果 A 是严格对角占优阵，那么 A_2 也是严格对角占优阵.

4．设 A 的所有顺序主子式都不为 0，试推导 Crout 分解公式，即将 A 分解为

$$A = LR,$$

其中，L 为一般下三角阵，R 为单位上三角阵.

5．下述矩阵能否进行 LU 分解（其中 L 为单位下三角阵，U 为上三角阵）？若能分解，那么分解是否唯一？

$$A=\begin{bmatrix}1&2&3\\2&4&1\\4&6&7\end{bmatrix},\quad B=\begin{bmatrix}1&1&1\\2&2&1\\3&3&1\end{bmatrix},\quad C=\begin{bmatrix}1&2&6\\2&5&15\\6&15&46\end{bmatrix}.$$

6．设 $Ax=b$，其中

$$A=\begin{pmatrix}5&7&9&10\\6&8&10&9\\7&10&8&7\\5&7&6&5\end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\end{pmatrix},$$

用 Doolittle 分解方法求解此方程.

7．求下列矩阵的 Cholesky 分解

（1）$A=\begin{pmatrix}1&-1&2\\-1&5&4\\2&4&22\end{pmatrix}$；　　（2）三阶 Hilbert 矩阵 $H_3=\begin{pmatrix}1&\frac{1}{2}&\frac{1}{3}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\frac{1}{4}\\\frac{1}{3}&\frac{1}{4}&\frac{1}{5}\end{pmatrix}$.

8．分别用 Cholesky 分解法和改进 Cholesky 分解法求解对称正定方程组 $Ax=b$，其中

$$A=\begin{pmatrix}4&-1&1\\-1&4.75&2.75\\1&2.75&3.5\end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix}4\\6\\7.25\end{pmatrix}.$$

8．用追赶法求解三对角方程组 $Ax=b$，其中

（1）$A=\begin{pmatrix}5&1&0\\1&5&1\\0&1&5\end{pmatrix}$，$b=\begin{pmatrix}17\\14\\7\end{pmatrix}$；　　（2）$A=\begin{pmatrix}2&1&0&0\\1&4&1&0\\0&1&4&1\\0&0&1&2\end{pmatrix}$，$b=\begin{pmatrix}1\\-2\\3\\0\end{pmatrix}$.

9．矩阵第一行乘以一数，成为

$$A=\begin{pmatrix}2\lambda&\lambda\\1&1\end{pmatrix},$$

证明：当 $\lambda=\pm\frac{2}{3}$ 时，$cond(A)_\infty$ 有最小值.

10．设 $A=\begin{pmatrix}100&99\\99&98\end{pmatrix}$,

（1）计算 $\|A\|_\infty$ 和 $\|A\|_2$；（2）计算 $cond(A)_\infty$ 和 $cond(A)_2$.

11．设 $Ax=b$，其中 $A\in R^{n\times n}$ 为非奇异阵，证明：

（1）A^TA 为对称正定矩阵；（2）$cond(A^TA)_2=[cond(A)_2]^2$.

12．求证：（1）$cond(A)\ge 1$；（2）$cond(AB)\le cond(A)cond(B)$；

（3）$cond(\lambda A)=\lambda\cdot cond(A)$，其中 λ 为任意非零常数.

13．设线性方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵为

$$A=\begin{pmatrix}5&1&4\\0&1&0\\1&1&2\end{pmatrix},$$

（1）矩阵 A 是否为不可约对角占优矩阵？

（2）讨论分别用 Jacobi 迭代法和 Gauss—Seidel 迭代法解此方程组是否收敛？

14．设有方程组 $Ax=b$，其中

$$A=\begin{pmatrix}10&4&4\\4&10&8\\4&8&10\end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix}13\\11\\25\end{pmatrix},$$

试分别写成 Jacobi 迭代法、Gauss—Seidel 迭代法和 SOR（取 $\omega=1.35$）的计算式；并问上述三种方法是否收敛，为什么？

15．分别用 Jacobi 迭代法和 Gauss—Seidel 迭代法计算方程组 $Ax=b$，其中

$$A=\begin{pmatrix}4&-1&0&-1&0&0\\-1&4&-1&0&-1&0\\0&-1&4&0&0&-1\\-1&0&0&4&-1&0\\0&-1&0&-1&4&-1\\0&0&-1&0&-1&4\end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix}2\\1\\2\\2\\1\\2\end{pmatrix},$$

初始向量取 $x_0=(0,0,0,0,0)^T$，求精度满足 $\|b-Ax\|_2<0.0001$ 的近似解.

16．设

$$A=\begin{pmatrix}1&a&a\\a&1&a\\a&a&1\end{pmatrix},$$

（1）若 A 为正定阵，a 应为哪些值？

（2）对 a 取哪些值，求解 $Ax=b$ 的 Jacobi 迭代法收敛？

（3）对 a 取哪些值，求解 $Ax=b$ 的 Gauss—Seidel 迭代法收敛？