第二章

线性方程组的数值解法

（1）

第二节 Gauss 消去法 /* Gaussian Elimination */

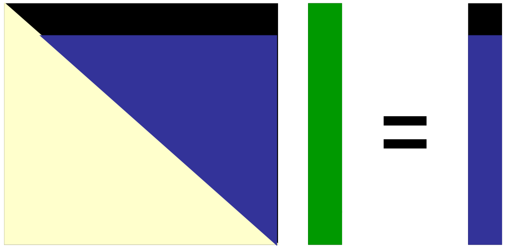
➢2.1 Gauss消去法

求解 $A\vec{x} = \vec{b}$ 方法： 高斯消元法

思路

首先将A化为上三角阵 /* upper-triangular matrix */，

再回代求解 /* backward substitution */。



n阶方程组的Guass消去法

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

写为矩阵形式$Ax = b$，其中

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

为非奇异阵，$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$，$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$

第一过程：消元 记：$A^{(1)} = A = \left(a_{ij}^{(1)}\right)_{n\times n}$, $\vec{b}^{(1)} = \vec{b} = \left(b_1^{(1)}, \cdots, b_n^{(1)}\right)^T$

Step 1：设$a_{11}^{(1)} \neq 0$，计算乘数$l_{i1} = a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$ $(i = 2, \ \ldots, \ n)$,

将增广矩阵$(A^{(1)}, \vec{b}^{(1)})$的$r_i - l_{i1} \times r_1$，得到

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & & A^{(2)} & & \vec{b}^{(2)} \end{array}\right]$$

其中
$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - l_{i1} a_{1j}^{(1)} \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - l_{i1} b_1^{(1)} \end{cases}$$
$(i, j = 2, \ \ldots, \ n)$

Step k： 设$a_{kk}^{(k)} \neq 0$，计算**乘数**$l_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} \quad (i = k+1, \ldots, n)$,

将增广矩阵$(A^{(k)}, b^{(k)})$的$r_i - l_{ik} r_k$，得到

$$\left(\begin{array}{cccccc:c}
a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & & b_1^{(1)} \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
0 & \cdots & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & & b_k^{(k)} \\
\bigcirc & & A^{(k+1)} & & & & \vec{b}^{(k+1)}
\end{array}\right)$$

其中

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{1j}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik} b_1^{(k)} \end{cases}$$

$$(i, j = k+1, \ldots, n)$$

定义1：称$a_{kk}^{(k)}, k = 1, 2, \cdots, n$为方程组的主元。

Step $n-1$：化为上三角

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

第二过程：回代

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}},$$

$$a_{n-1,n-1}^{(n-1)} x_{n-1} + a_{n,n-1}^{(n-1)} x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \Rightarrow x_{n-1} = \frac{b_{n-1}^{(n-1)} - a_{n,n-1}^{(n-1)} x_n}{a_{n-1,n-1}^{(n)}},$$

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

例1：用 Gauss 消去法解方程组 $\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\ 3x_1 + x_2 + 2x_3 = 6 \\ x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 5 \end{cases}$

解：对增广矩阵 $[A^{(1)}|b^{(1)}] = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 6 \\ 1 & 2 & 2 & 5 \end{bmatrix}$

$$[A^{(1)}|b^{(1)}] \xrightarrow[r_3-\frac{1}{2}r_1]{r_2-\frac{3}{2}r_1} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 3/2 & 3/2 & 3 \end{bmatrix} \xrightarrow{r_3-\frac{3/2}{-1/2}r_2} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

得方程组 $\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\ -\dfrac{1}{2}x_2 + \dfrac{1}{2}x_3 = 0 \\ 3x_3 = 3 \end{cases}$ 回代，$x_3 = 1, x_2 = 1, x_1 = 1.$

Gauss消去法的计算复杂度

1. 乘法/除法计算复杂度：$o(n^3)$

第k次消元法 $\underline{(n-k)}+(n-k)\underline{(n-k+1)}$

计算乘数的除法次数　　每行要用的乘法次数

总次数：$\frac{n(n-1)(2n+5)}{6}=o(n^3)$

第k次回代 $(n-k+1)$　总次数：$\frac{n(n+1)}{2}=o(n^2)$

2. 加法/减法计算复杂度：$o(n^3)$

注：在Gauss消去法中，始终要用到$a_{kk}^{(k)} \neq 0$，否则还需要对调两行才能保证方法的持续性，那么A在什么条件下才能保证$a_{kk}^{(k)} \neq 0$？

定理2.1 如果方程组的系数矩阵A的顺序主子式$D_i \neq 0$，则可通过高斯消去法将方程组化为三角形方程组，其中

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0, i = 1, 2, \cdots, n$$

此结论可由归纳法证得.

定义2：如果矩阵中主对角元素a_{ii}的绝对值“$\geq (>)$”其所在行的其他元素绝对值之和，则称该矩阵为对角占优（严格对角占优）矩阵。

例如：矩阵$A=\begin{pmatrix} 4 & 1 & -2 \\ 2 & 5 & -2 \\ 2 & -3 & 6 \end{pmatrix}$

$|4| > |1| + |-2|;$
$|5| > |2| + |-2|;$
$|6| > |2| + |-3|.$

该矩阵主对角严格占优.

定义3：如果矩阵A为对称矩阵$(A = A^T)$，对任意非零向量$\vec{x}$,恒有$\vec{x}^T A\vec{x} > 0$,则称为A正定矩阵。

定理3：如果矩阵A为**严格对角占优**的或**正定**的，则方程组$A\vec{x}=\vec{b}$可通过Gauss消去法求解，即Gauss消去法中主元$a_{kk}^{(k)}\neq 0$. 同时该方法还可以**保证计算结果的舍入误差**的增长是稳定的。

说明：如果A正定，则顺序阶主子式大于零，由定理1知可用Gauss消去法；

如果A严格对角占优，则顺序阶主子式不等于零【反证法可证，百度查询即可】，由定理1知可用Gauss消去法；

Guass法的问题： 在消元过程中出现$a_{kk}^{(k)}=0$消去法将无法进行；即使**主元$a_{kk}^{(k)}\neq 0$,但$a_{kk}^{(k)}$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：限精度解方程组$\begin{cases}10^{-9}x_1+x_2=1\\ \quad\quad\ x_1+x_2=2\end{cases}$

/* 精确解为$x_1^*=\frac{1}{1-10^{-9}}=1.\overbrace{00\cdots0}^{8\text{个}0}100\cdots$和$x_2^*=2-x_1=0.\overbrace{99\ \cdots\ 9}^{8\text{个}9}899\cdots$*/

利用Gauss消去法求解：$l_{21}=\frac{a_{21}}{a_{11}}=\frac{1}{10^{-9}}=10^9$

$$a_{22}=1-l_{21}\times 1=0.\overbrace{0\ldots0}^{8}1\times 10^9-10^9\approx -10^9$$

$$b_2=2-l_{21}\times 1\doteq -10^9\Rightarrow\begin{bmatrix}10^{-9} & 1 & 1\\ 0 & -10^9 & -10^9\end{bmatrix}\Rightarrow x_2=1,x_1=0$$

➢2.2 列主元消去法 /* maximal column pivoting */

列主元消去法的思想：在进行第k次行变换消元时，依据列选取最大主元，并交换两行，即

$$(A^{(1)},b^{(1)}) \xrightarrow{r_i+l_{ij}r_j} (A^{(k)}|b^{(k)}) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_k^{(k)} \end{bmatrix}$$

比较$a_{kk}^{(k)}, a_{k+1,k}^{(k)}, \cdots, a_{nk}^{(k)}$，若$a_{pk}^{(k)} \geq a_{ik}^{(k)}, i = k,\cdots,n$，则对换第$p,k$行，

并继续消元，直到化为上三角，然后回代，求解。

2.3 追赶法解三对角方程组

/* Crout Reduction for Tridiagonal System of Equations */

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

三对角方程组

追赶法的三步：

1. **系数矩阵的LU分解：**$A\vec{x} = \vec{d} \sim LU\vec{x} = \vec{d} \sim L\vec{y} = \vec{d}, U\vec{x} = \vec{y}$.

矩阵行变换为上三角(U)，行变换是左乘初等矩阵，构成可逆阵（L）

2. **“追”——解方程组：**$L\vec{y} = \vec{d}$ 3. **“赶”——解方程组：**$U\vec{x} = \vec{y}$。

$$Ax=b:\quad \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 \\ 0 & 0 & a_4 & b_4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & u_1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & u_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & u_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix}$$

第一步：行变换化三角

第二步：追

$$\begin{cases} u_1=c_1/b_1 \\ u_2=c_2/(b_2-u_1a_2) \\ u_3=c_3/(b_3-u_2a_3) \end{cases}\qquad \begin{cases} y_1=d_1/b_1 \\ y_2=(d_2-y_1a_2)/(b_2-u_1a_2) \\ y_3=(d_3-y_2a_3)/(b_3-u_2a_3) \\ y_4=(d_4-y_3a_4)/(b_4-u_3a_4) \end{cases}$$

第三步：赶

$$\begin{cases} x_4=y_4 \\ x_3=y_3-u_3x_4 \\ x_2=y_2-u_2x_3 \\ x_1=y_1-u_1x_2 \end{cases}$$

第4节 向量和矩阵的范数

*Norms of Vectors and Matrices *\

➢4.1 向量范数 /* Vector norms */

用R^n表示n 维实向量的空间。

定义1 如果向量$X \in R^n$的某个实值函数$N(X) = \|X\|$满足条件

1. $\|X\| \geq 0$ ($\|X\| = 0$当且仅当 $X = 0$)（正定性 /* positive definite */)
2. $\|\alpha X\| = |\alpha|\|X\|, \forall \alpha \in R$ (齐次性 /* homogeneous */)
3. $\|X + Y\| \leq \|X\| + \|Y\|$（三角不等式 /* triangle inequality */)

则称$N(X)$是向量 X 的范数。

几种常用的向量范数

l_∞ –范数（最大范数） $\|X\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n}|x_i|$

l_1 –范数 $\|X\|_1 = \sum_{i=1}^{n}|x_i|$

l_2 –范数（长度） $\|X\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{1/2}$

l_p –范数 $\|X\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{1/p}$

例　计算向量$X=(1,-2,3)^T$的各种范数

解：$\|X\|_1 = |1|+|-2|+|3| = 6$　　$\|X\|_\infty = \max(|1|,|-2|,|3|) = 3$

$\|X\|_2 = \sqrt{1^2+(-2)^2+3^2} = \sqrt{14}$

定义2 如果向量$X, Y \in R^n$, 则两个向量之间的l_1, l_2, l_∞定义为：

$$\|X-Y\|_1=\sum_{i=1}^{n}|x_i-y_i|, \quad \|X-Y\|_2=\left[\sum_{i=1}^{n}(x_i-y_i)^2\right]^{1/2}$$

$$\|X-Y\|_\infty=\max_{1\le i\le n}|x_i-y_i|$$

定义3 R^n中向量序列$\{X^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$，向量$X\in R^n$，$\|\cdot\|$表示向量范数，若对$\forall\varepsilon>0$，存在$N(\varepsilon)$，当$k>N(\varepsilon)$时，有

$$\|X^{(k)}-X\|<\varepsilon,$$

则称向量序列$\{X^{(k)}\}$关于范数$\|\cdot\|$收敛于向量X.

定理1 向量序列$\{X^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$收敛于向量$X$的充分必要条件为

对每一个$1 \le i \le n$ 都有 $\lim\limits_{k\to\infty} x_i^{(k)} = x_i$。

定理2 对任意向量$X \in R^n$恒有：$\|X\|_\infty \le \|X\|_2 \le \sqrt{n}\|X\|_\infty$。

证明：$\|X\|_\infty^2 = \left(\max\limits_{1\le i\le n}|x_i|\right)^2 = |x_j|^2 \le \sum_{i=1}^n x_i^2 = \|X\|_2^2$

$\|X\|_2^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 \le n|x_j|^2 = n\|X\|_\infty^2$

➢4.2 矩阵范数 /* Matrix norms */

定义4 $R^{m\times n}$空间的**矩阵范数**$\|\cdot\|$对任意$A,B\in R^{m\times n}$满足：

（1）$\|A\|\geq 0, \|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$ （正定性 /* positive definite */)

（2）$\|\alpha A\| = |\alpha|\cdot\|A\|$对任意$\alpha\in R^1$ (齐次性 /* homogeneous */)

（3）$\|A+B\|\leq\|A\|+\|B\|$ (三角不等式 /* triangle inequality */)

（4）$\|A\cdot B\|\leq\|A\|\cdot\|B\|$ (施瓦茨不等式 /* Schwarz inequality */)

常用矩阵范数：

佛罗贝尼乌斯范数 /*Frobenius norm*/

$$||A||_F = \left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{1/2}$$ —— 向量$||\cdot||_2$的直接推广

算子范数 /* operator norm*/

$$||A||_p = \max_{\vec{x}\neq\vec{0}}\frac{||A\vec{x}||_p}{||\vec{x}||_p} = \max_{||\vec{x}||_p=1}||A\vec{x}||_p$$

特别有： $$||A||_\infty = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$ （行范数）

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

$$||A||_2 = \sqrt{\lambda_{Max}(A^TA)}$$ （谱范数 /* spectral norm */ ）

定义5 设λ_i为$A_{n\times n}$的特征值，称$\rho(A)=\max\limits_{1\le i\le n}\{|\lambda_i|\}$为$A$的谱半径。

定理3 对任意方阵A $\in R^{n\times n}$恒有：$\rho(A)\le\|A\|_*$ 。

证明：设$Ax=\lambda x$，则有$\|\lambda x\|=\|Ax\|$

即$|\lambda|\cdot\|x\|=\|Ax\|\le\|A\|\cdot\|x\|$, $\|x\|\neq 0$

故$|\lambda|\le\|A\|$, 从而$\rho(A)\le\|A\|_*$