

第六章 线性方程组的解法

Methods for Solving Linear Systems

引论

Chapter 6 Methods for
solving linear systems

➤ 这一章介绍求解线性方程组(如下)的解法。

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

➤ 工程科学中的许多领域，如热传导，震动，气象学及数量经济学等中的问题解决必须求解下列数值计算问题：

微分方程组的差分方法，有限元法。
最小二乘拟合（最小二乘法）

} 求解线性方程组

➤ 解线性方程组的方法在计算数学与科学计算中尤为重要。

➤ 线性方程组表示为 $AX=b$

➤ 当 $D=|A| \neq 0$ 时，由Cramer法则，方程组有唯一解。

$$x_1 = \frac{D_1}{D}, x_2 = \frac{D_2}{D}, \dots, x_n = \frac{D_n}{D}.$$

➤ 注：用Cramer求解时，要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式，共做 $N=n!(n^2-1)+n$ 次乘除法。

➤ $n=20$ 时，用高性能计算机要计算几万年。

有效的解法：

➤ 直接法：有限步运算求精确解(由于舍入误差的影响，其解是近似的。)——Gauss消元法及其变形

➤ 迭代法：不是用有限步运算求精确解，而是通过迭代产生近似解序列逐步逼近精确解。

——Jacobi迭代， Gauss-Seidel迭代

6.1 向量和矩阵的范数 * Norms of Vectors and Matrices *

Chapter 6 Methods for solving linear systems

数值分析中,经常要用向量和矩阵,为了应用的需要(误差分析),引入衡量向量和矩阵大小的度量—范数.

对于实数 $x \in \mathbf{R}$, 我们定义了绝对值

$$\text{其满足 } |x| \geq 0 \text{ 非负性. } |x| = \begin{cases} x, & x \geq 0 \\ -x, & x < 0 \end{cases}$$

$$|ax| = |a| \cdot |x| \text{ 齐次性}$$

$$|x+y| \leq |x| + |y| \text{ 三角不等式}$$

类似,定义向量范数

Chapter 6 Methods for solving linear systems

Def 6.1 在实 n 维线性空间 \mathbf{R}^n 中定义一个映射,它使任意 $X \in \mathbf{R}^n$ 有一个非负实数与之对应,记为 $\|X\|$, 且该映射满足:

- (1) **正定性** 任意 $x \in \mathbf{R}^n$, $\|x\| \geq 0$, iff $X=0$ 时, $\|X\| = 0$
- (2) **齐次性** 任意 $x \in \mathbf{R}^n$, $\lambda \in \mathbf{R}$, 有 $\|\lambda X\| = |\lambda| \cdot \|X\|$
- (3) **三角不等式** 任意 $X, Y \in \mathbf{R}^n$, 有 $\|X+Y\| \leq \|X\| + \|Y\|$

则称该映射在 \mathbf{R}^n 中定义了一个**向量范数**.

注: \mathbf{R}^n 中的范数不唯一.

常用的范数有三种: 设 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbf{R}^n$, 则

$$\begin{aligned} \text{1—范数: } \|x\|_1 &= |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n| = \sum_{i=1}^n |x_i| \\ \text{2—范数: } \|x\|_2 &= \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2} = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ \infty\text{—范数: } \|X\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \end{aligned}$$

P-范数
$$\|X\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

注: (1) 根据范数的定义可验证上述皆为向量范数

(2) $p=1,2$, $\|X\|_p$ 即为 $\|X\|_1, \|X\|_2$.

(3) 任意 $x \in \mathbb{R}^n$:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \|X\|_p = \|X\|_\infty$$

例: $X = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix}$, $\|X\|_1 = 1 + 2 + 3 = 6$
 $\|X\|_\infty = 3$
 $\|X\|_2 = \sqrt{1^2 + (-2)^2 + 3^2} = \sqrt{14}$

向量范数的性质

(1) 任意 $X, Y \in \mathbb{R}^n$, 则 $|\|X\| - \|Y\|| \leq \|X - Y\|$

证: $\because \|X\| = \|X - Y + Y\| \leq \|X - Y\| + \|Y\|$

$$\|Y\| = \|Y - X + X\| \leq \|Y - X\| + \|X\| = \|X - Y\| + \|X\|$$

$$\therefore -\|X - Y\| \leq \|X\| - \|Y\| \leq \|X - Y\|$$

(2) \mathbb{R}^n 上向量范数的等价性:

即若 $\|X\|_a$ 与 $\|X\|_b$ 为 \mathbb{R}^n 上两种范数, 则存在正数 M 与 m ($M > m$) 对任意 $X \in \mathbb{R}^n$, 有

$$m\|X\|_b \leq \|X\|_a \leq M\|X\|_b$$

$$\frac{1}{n}\|X\|_1 \leq \|X\|_\infty \leq \|X\|_1$$

例: $\|X\|_\infty \leq \|X\|_1 \leq n\|X\|_\infty$

$$\|X\|_\infty \leq \|X\|_2 \leq \sqrt{n}\|X\|_\infty$$

注: \mathbb{R}^n 范数的等价性表明, 虽不同向量范数其值不同, 但考虑到向量序列收敛性时, 却有明显的一致性。

Def 6.2 R^n 中的向量序列 $\{X_k\}$, 即 $X_0, X_1, \dots, X_k, \dots$

其中 $X_k = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$, 若对任意 i ($i=1, 2, \dots, n$) 都有

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^*$$

则向量 $X^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)^T$ 称为 $\{X_k\}$ 的极限。

记做 $\lim_{k \rightarrow \infty} X_k = X^*$

注: 向量序列收敛实际上是按分量收敛 (数列收敛)。

利用向量范数, 也可以说明向量序列收敛的概念。

Th. 向量序列 $\{X_k\}$ 依分量收敛于 X^* 的充要条件是:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|X_k - X^*\| = 0$$

注: (1) 数列 $\|X_k - X^*\|$ 收敛于0;

(2) 依范数收敛等价于依分量 (坐标) 收敛。

类似于向量范数, 给出矩阵范数的定义。

Def. 在线性空间 $R^{n \times n}$ 中定义一个映射, 使任意 $A \in R^{n \times n}$ 对应一个非负实数, 记做 $\|A\|$, 如果该映射满足:

1. 正定性: $\forall A \in R^{n \times n}, \|A\| \geq 0$, 且 $\|A\| = 0$ iff $A = 0$

2. 齐次性: $\forall \lambda \in R, A \in R^{n \times n}, \|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|$

3. 三角不等式: $\forall A, B \in R^{n \times n}, \|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$

4. 相容性: $\forall A, B \in R^{n \times n}, \|AB\| \leq \|A\| \|B\|$

(相容性是矩阵乘法的需要, 而**1. 2. 3.**为向量范数的推广)

在 $R^{n \times n}$ 中可定义多种范数。

例 $A = (a_{ij})_{n \times n} \in R^{n \times n}$, 则 $\|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$ 称为A的**Frobenius范数**。

例2. $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\|\dots\|$ 为 \mathbb{R}^n 中的向量范数, 则定义 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 中的范数为 $\|A\| = \sup_{\substack{\|x\|=1 \\ x \in \mathbb{R}^n}} \|Ax\|$.

易验证这样由向量范数导出的映射为矩阵范数, 称之为诱导范数 (或算子范数)。

诱导范数具有如下性质:

$$\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|, \forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}, x \in \mathbb{R}^n$$

证: (1) 当 $x = 0$ 时, 显然成立,

$$(2) \text{ 当 } x \neq 0 \text{ 时, } \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \left\| A \cdot \frac{x}{\|x\|} \right\| \leq \|A\|.$$

Def. 对于 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 中的矩阵范数 $\|\dots\|_a$ 与 \mathbb{R}^n 中的向量范数 $\|\dots\|_b$, 若任意 $x \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 都有 $\|Ax\|_b \leq \|A\|_a \cdot \|x\|_b$, 则称矩阵范数 $\|\dots\|_a$ 和向量范数 $\|\dots\|_b$ 相容 (协调)。

注: (1) 任何向量范数与其诱导范数是相容的。

(2) 给出一种向量范数 $\|x\|_p$, 就有对应的诱导范数 $\|A\|_p$ 。

(3) 向量范数 $\|\dots\|_1$, $\|\dots\|_2$, $\|\dots\|_\infty$ 的诱导矩阵范数仍记为 $\|\dots\|_1$, $\|\dots\|_2$, $\|\dots\|_\infty$ 。

定理: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 则 A 的诱导范数

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (\text{列和范数})$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_1} \quad \text{其中 } \lambda_1 \text{ 为 } A^T A \text{ 的最大特征值} \quad (\text{谱范数})$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (\text{行和范数})$$

证: 对谱范数 $\|A\|_2$ 来证明。 $\|AX\|_2^2 = (AX, AX) = X^T A^T A X \geq 0$

$A^T A$ 为对称半正定阵。

设 $A^T A$ 的特征值为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$,

相应的特征向量为 e_1, e_2, \dots, e_n 且 $(e_i, e_j) = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$

设 $X \in G = \{X \mid \|X\|_2 = 1, X \in \mathbb{R}^n\}$

$$X = x_1 e_1 + x_2 e_2 + \dots + x_n e_n.$$

则 $AX = \lambda_1 x_1 e_1 + \lambda_2 x_2 e_2 + \dots + \lambda_n x_n e_n.$

$$\text{从而, } \|AX\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i^2 \leq \lambda_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \lambda_1$$

$$\therefore \|AX\|_2 \leq \sqrt{\lambda_1}$$

当 $X = e_1$ 时, 上式等号成立, 故 $\|A\|_2 = \sup_{\|X\|=1} \|AX\|_2 = \sqrt{\lambda_1}$

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

$$\|A\|_1 = \max\{4, 5, 5\} = 5, \quad \|A\|_\infty = \max\{5, 4, 5\} = 5,$$

$$\|A\|_F = \sqrt{4+1+4+1+4+1+1+4+4} = \sqrt{24} = 2\sqrt{6}$$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 6 & -2 & 3 \\ -2 & 9 & 4 \\ 3 & 4 & 9 \end{pmatrix} \quad A^T A \text{ 的特征值为:}$$

$$\lambda_1 = 13.0902, \quad \lambda_2 = 9.0000, \quad \lambda_3 = 1.9098$$

$$\therefore \|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)} = \sqrt{13.092} \approx 3.6180$$

对于线性方程组 $Ax=b$, 当 $|A| \neq 0$ 时, 可用消去法求数值解。
一般, A, b 都是由观测数据而得, 存在误差, 那么原始数据的误差, 对解的结果有什么影响呢? ——稳定性分析

(1) 若 A 精确, b 有微小误差 δb , 所得解的误差为 δX ,

而精确解 X 满足 $Ax=b$

即 $A(X+\delta X)=b+\delta b$.

$$\therefore A\delta X=\delta b$$

$$\delta X=A^{-1}\delta b$$

$$\|\delta X\| = \|A^{-1}\delta b\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\delta b\|$$

$$\therefore \frac{\|\delta X\|}{\|X\|} \leq \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\delta b\|}{\|X\|} = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\delta b\|}{\|A\|\|X\|}$$

$$\therefore \|A\|\|X\| \geq \|AX\| = \|b\|$$

$$\frac{\|\delta X\|}{\|X\|} \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

X 的相对误差为 b 的相对误差的 $\|A\| \|A^{-1}\|$ 倍。

(2) 若 b 精确, A 有微小误差 δA , 所得解的误差为 δX

即 $(A+\delta A)(X+\delta X)=b$

$$\therefore AX+A\delta X+(\delta A)X+\delta A\delta X=b$$

$$\therefore A\delta X+(\delta A)X+\delta A\delta X=0$$

假设 A 可逆, 且 $(A+\delta A)$ 非奇异 (当 $\|A^{-1}\| \cdot \|\delta A\| < 1$), 则

$$\delta X = -A^{-1}(\delta A)X - A^{-1}\delta A\delta X$$

$$\therefore \|\delta X\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\delta A\| \cdot \|X\| + \|A^{-1}\| \|\delta A\| \|\delta X\|$$

$$(1 - \|A^{-1}\| \|\delta A\|) \|\delta X\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta A\| \|X\|$$

$$\therefore \frac{\|\delta X\|}{\|X\|} \leq \frac{\|A^{-1}\| \|\delta A\|}{1 - \|A^{-1}\| \|\delta A\|} = \frac{\|A^{-1}\| \|A\| \cdot \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1 - \|A^{-1}\| \|A\| \cdot \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$$

解的相对误差近似等于原始数据相对误差的 $\|A\| \|A^{-1}\|$ 倍, 若 $\|A\| \|A^{-1}\|$ 较大, 解会对舍入误差很敏感。

Def 6.4 设 A 为非奇异矩阵, 称 $\|A\| \|A^{-1}\|$ 为矩阵 A 的条件数, 记为 $\text{cond}(A)$ 。

条件数的性质:

- $\text{cond}(A) \geq 1$
- $\text{cond}(kA) = \text{cond}(A), k \neq 0$
- 若 $\|A\| = 1$, 则 $\text{cond}(A) = \|A^{-1}\|$

若 $\text{cond}(A)$ 很大, 称方程组 $AX = b$ 是**病态的**(不稳定); 否则, 是**良态的**。

例 $\begin{pmatrix} 1.000 & 0.25 \\ 0.25 & 0.06 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.501 \\ 0.375 \end{pmatrix}$ 精确解 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$

原始数据微小变化

$\begin{pmatrix} 1.000 & 0.25 \\ 0.25 & 0.06 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 0.37 \end{pmatrix}$ 其解为 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ -10 \end{pmatrix}$

原始数据的绝对误差限 $\leq 0.5 \times 10^{-2}$, 而解的误差很大。

$$A = \begin{pmatrix} 1.000 & 0.25 \\ 0.25 & 0.06 \end{pmatrix}, A^{-1} = \begin{pmatrix} 1000 & 4000 \\ -4000 & 16016 \end{pmatrix}$$

$$\therefore \|A\|_{\infty} = 1.251, \|A^{-1}\|_{\infty} = 20016$$

$$\therefore \text{cond}(A) = 25040$$

$\therefore AX = b$ 是病态方程组。

6.2 迭代法

Chapter 6 Methods for solving linear systems

思想:由某初始近似解向量 \mathbf{X}_0 ,按一迭代格式产生向量序列 $\{\mathbf{X}_k\}$,
 \mathbf{X}_k 为准确解 \mathbf{X}^* 的近似值,但其逐步逼近 \mathbf{X}^* ,即

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{X}_k = \mathbf{X}^*$$

➤ 怎样建立迭代格式 ➤ 迭代格式的收敛性 ➤ $\|\mathbf{X}^* - \mathbf{X}_k\| = ?$

将 $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{b}$, \mathbf{A} 非奇异,变换为一个等价的方程组:

$$\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{f} \quad (\mathbf{B} \text{ 为 } n \text{ 阶方阵, } \mathbf{f} \text{ 为 } n \text{ 维向量}).$$

$$\text{有迭代格式} \quad \begin{cases} \mathbf{X}_0 \\ \mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{X}_k + \mathbf{f} \quad k=0,1,\dots \end{cases}$$

从而产生向量序列 $\{\mathbf{X}_k\}$: $\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k, \dots$, 称为简单迭代法,
 \mathbf{B} 为迭代矩阵, $\{\mathbf{X}_k\}$ 为迭代序列。

若 $\{\mathbf{X}_k\}$ 收敛: $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{X}_k = \mathbf{X}^*$

则有 $\mathbf{X}^* = \mathbf{B}\mathbf{X}^* + \mathbf{f}$, 即 \mathbf{X}^* 为 $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{b}$ 的解。

Chapter 6 Methods for solving linear systems

若 $\mathbf{B} = (\mathbf{b}_{ij})_{n \times n}$, $\mathbf{f} = (\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_n)^T$, 则上式可用分量形式:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = b_{11}x_1^{(k)} + b_{12}x_2^{(k)} + \dots + b_{1n}x_n^{(k)} + f_1 \\ x_2^{(k+1)} = b_{21}x_1^{(k)} + b_{22}x_2^{(k)} + \dots + b_{2n}x_n^{(k)} + f_2 \\ \dots \\ x_n^{(k+1)} = b_{n1}x_1^{(k)} + b_{n2}x_2^{(k)} + \dots + b_{nn}x_n^{(k)} + f_n \end{cases} \quad k=0,1,2,\dots, \quad \mathbf{X}_k = \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

$$\text{或 } x_i^{(k+1)} = \sum_{j=1}^n b_{ij}x_j^{(k)} + f_i, \quad i=1,2,\dots,n; \quad k=0,1,2,\dots$$

那么,如何由 $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{b}$ 等价变形为 $\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{f}$?

例: $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$. (\mathbf{M} 非奇异)

例: $\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$.

则有 $(\mathbf{M} - \mathbf{N})\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

$$\therefore \mathbf{M}\mathbf{x} = \mathbf{N}\mathbf{x} + \mathbf{b}$$

$$\therefore \mathbf{X} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}\mathbf{X} + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$$

从而,迭代矩阵 $\mathbf{B} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$, $\mathbf{f} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$.

对某一迭代过程: $X_{k+1}=BX_k+f$. 其产生的序列 $\{X_k\}$ 是否收敛呢? 它和迭代矩阵 B 相关.

Def 6.5 已知 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 为 A 的全体特征值, A 的谱半径为:

$$\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$$

Th. 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则 A 的谱半径不超过 A 的任何一种范数:

$$\rho(A) \leq \|A\|$$

证明: 设 λ 是 A 的任意特征值, x 为对应的特征向量 ($x \neq 0$), 则

$$Ax = \lambda x$$

$$\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\| = \|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\| \quad \because \|x\| > 0 \quad \therefore |\lambda| \leq \|A\|$$

$$\therefore \rho(A) \leq \|A\|$$

引理 设 $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则 $B^k \rightarrow O_{n \times n} (k \rightarrow \infty)$ 的充要条件是 $\rho(B) < 1$.

证明: (参考 Th6.13, 引理 6.3, Jordan 标准型)

Th6.14 对于任意的初始向量 X_0 , 迭代过程 $X_{k+1}=BX_k+f$ 收敛于 $AX=b$ 的解 X^* 的充要条件是 $\rho(B) < 1$, 此时 $AX=b$ 有唯一解 X^* .

证: (1) $\because X^*=BX^*+f$

$$X_{k+1}=BX_k+f$$

$$\therefore X_{k+1}-X^*=B(X_k-X^*)$$

$$\therefore X_{k+1}-X^*=B^{k+1}(X_0-X^*), \text{ 从而:}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X_k = X^* \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} B^k (X_0 - X^*) = 0_n \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} B^k = O_{n \times n} \Leftrightarrow \rho(B) < 1$$

(2) $X=BX+f$, 即为 $(I-B)X=f$

$$\rho(B) < 1 \text{ 则 } |I-B| \neq 0,$$

从而 $X=BX+f$ 有唯一解。

Th 6.15 当 $\|B\| < 1$ 时, 迭代过程 $X_{k+1} = BX_k + f$ 收敛于 $X = BX + f$ 的解 X^* , 且 $\|X_k - X^*\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|} \|X_k - X_{k-1}\|$ (6.59)

$$\|X_k - X^*\| \leq \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|X_1 - X_0\| \quad (6.60)$$

证明: (1) $\because \rho(B) \leq \|B\| < 1$

\therefore 迭代过程收敛

(2) $\because X_k - X^* = B(X_{k-1} - X^*)$

$$\therefore \|X_k - X^*\| \leq \|B\| \|X_{k-1} - X^*\| \quad \therefore \|X_k - X^*\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|} \|X_k - X_{k-1}\|$$

$$= \|B\| \|X_{k-1} - X_k + X_k - X^*\|$$

$$\leq \|B\| (\|X_{k-1} - X_k\| + \|X_k - X^*\|)$$

$$\therefore (1 - \|B\|) \|X_k - X^*\| \leq \|B\| \|X_{k-1} - X_k\|$$

(3) $\because X_k - X_{k-1} = B(X_{k-1} - X_{k-2}) = \dots = B^{k-1}(X_1 - X_0)$

$$\therefore \|X_k - X_{k-1}\| \leq \|B\|^{k-1} \|X_1 - X_0\|; \text{ 将其代入(6.59)即得(6.60)}$$

停机准则: 用户精度要求 $\|X_k - X^*\| < \varepsilon$.

I. 先验估计法: $\frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|X_1 - X_0\| < \varepsilon$

$$\text{则迭代次数 } k > \frac{\ln \frac{\varepsilon(1 - \|B\|)}{\|X_1 - X_0\|}}{\ln \|B\|}$$

取 k 为满足上式的最小正整数(保守估计)

II. 后验估计法:

$$\|X_k - X_{k-1}\| < \varepsilon$$

6.3 简单迭代法

Chapter 6 Methods for
solving linear systems

对 $AX=b$ 的 A 作如下分解:

若 A 的主对角线元素都不为 0 , 即 $a_{ii} \neq 0, i=1 \sim n$.

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

若 $A = D - N$.

则 $(D - N)X = b$, 即 $X = D^{-1}NX + D^{-1}b$

则迭代格式为:

$$X_{k+1} = D^{-1}NX_k + D^{-1}b$$

此称为 **Jacobi** 迭代, 迭代矩阵 $B = D^{-1}N$, 其主对角线元素全为 0 .

下面讨论: **Jacobi** 迭代的收敛性

充要条件—— $\rho(D^{-1}N) < 1$, 充分条件—— $\|D^{-1}N\| < 1$

Chapter 6 Methods for
solving linear systems

Def 6.6 若 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 的各行元素满足 $|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|, i = 1, 2, \dots, n$
则称 A 是**对角占优阵**,

若上各式严格不等号成立, 则称 A 为**严格对角占优阵**。

Th 6.17 严格对角占优阵是可逆的。

Th 6.18 若 A 严格对角占优阵, 则其 **Jacobi** 迭代收敛。

分析: $A = D - N$

迭代矩阵 $B = D^{-1}N$

只需证: $\|B\|_{\infty} = \|D^{-1}N\|_{\infty} < 1$

例6.7 用Jacobi迭代法解下列方程组(精确到 10^{-3})

$$\begin{pmatrix} 4 & 0.24 & -0.08 \\ 0.09 & 3 & -0.15 \\ 0.04 & -0.08 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 9 \\ 20 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0.06 & -0.02 \\ 0.03 & 1 & -0.05 \\ 0.01 & -0.02 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}$$

解: 原方程组可变形为右上形式, 记为 $\mathbf{AX}=\mathbf{b}$

$\because A$ 为严格对角占优阵, \therefore 其Jacobi迭代收敛。

令 $A=D-N$, $D=I$, 则

$$B=D^{-1}N = \begin{pmatrix} 0 & -0.06 & 0.02 \\ -0.03 & 0 & 0.05 \\ -0.01 & 0.02 & 0 \end{pmatrix} \quad D^{-1}\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}$$

$$\therefore \text{Jacobi迭代格式为} \quad \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ x_3^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.06 & 0.02 \\ -0.03 & 0 & 0.05 \\ -0.01 & 0.02 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ x_3^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.06 & 0.02 \\ -0.03 & 0 & 0.05 \\ -0.01 & 0.02 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}$$

取 $X_0=(2,3,5)^T$ 迭代得:

$$X_1=(1.92, 3.19, 5.04)^T$$

$$X_2=(1.909, 3.194, 5.045)^T \quad \text{又} \|X_3 - X_2\|_{\infty} < 10^{-3}$$

$$\because \|X_2 - X_1\|_{\infty} > 10^{-3}$$

取 $X^* \approx X_3$

\therefore 进一步迭代

$$X_3=(1.909, 3.194, 5.045)^T$$

Algorithm: (Jacobi迭代法)

Step 1 取 \mathbf{X}_0 , 置精度要求和最大迭代次数 N , $k=0$

Step 2 计算 $\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{X}_k + \mathbf{f}$

Step 3 if ($\max_{i=1}^n |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| < \varepsilon$) stop ($\mathbf{X}^* \approx \mathbf{X}_{k+1}$)

else if ($k=N$) stop (不收敛)

else $k=k+1$;

goto **Step 2**

Jacobi迭代公式的分量形式

设方程组 $\mathbf{AX} = \mathbf{b}$, 其分量形式为

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, \quad a_{ii} \neq 0 \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

$$a_{ii}x_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij}x_j = b_i$$

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

由此我们可以得到 **Jacobi** 迭代公式:

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

雅可比迭代法的另一种矩阵表示

Chapter 6 Methods for solving linear systems

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \dots \dots \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad a_{ii} \neq 0 \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} x_1 = \frac{1}{a_{11}}(-a_{12}x_2 - \dots - a_{1n}x_n + b_1) \\ x_2 = \frac{1}{a_{22}}(-a_{21}x_1 - \dots - a_{2n}x_n + b_2) \\ \dots \dots \dots \dots \\ x_n = \frac{1}{a_{nn}}(-a_{n1}x_1 - \dots - a_{nn-1}x_{n-1} + b_n) \end{cases}$$

写成矩阵形式:

$$A = \begin{matrix} & & & & \\ & & & & U \\ & & D & & \\ & L & & & \\ & & & & \end{matrix}$$

Jacobi 迭代阵

$$\begin{aligned} Ax = b &\Leftrightarrow (D + L + U)x = b \\ &\Leftrightarrow Dx = -(L + U)x + b \\ &\Leftrightarrow x = \underbrace{-D^{-1}(L + U)}_B x + \underbrace{D^{-1}b}_f \end{aligned}$$

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

高斯-塞德尔迭代法 (AX=b)

Chapter 6 Methods for solving linear systems

注意到利用 **Jacobi** 迭代公式计算 $x_i^{(k+1)}$ 时, 已计算好下述值:

$$x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}$$

而 **Jacobi** 迭代公式并不利用这些最新的近似值计算, 仍用

$$x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$$

这启发我们可以对其加以改进, 即在每个分量的计算中尽量利用最新的迭代值, 得到

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

上式称为 **Gauss-Seidel** 迭代法.

高斯-塞德尔迭代法

Chapter 6 Methods for
solving linear systems

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} (-a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - a_{14}x_4^{(k)} - \dots - a_{1n}x_n^{(k)} + b_1)$$

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}} (-a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - a_{24}x_4^{(k)} - \dots - a_{2n}x_n^{(k)} + b_2)$$

$$x_3^{(k+1)} = \frac{1}{a_{33}} (-a_{31}x_1^{(k+1)} - a_{32}x_2^{(k+1)} - a_{34}x_4^{(k)} - \dots - a_{3n}x_n^{(k)} + b_3)$$

... ..

$$x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}} (-a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - a_{n3}x_3^{(k+1)} - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}^{(k+1)} + b_n)$$

写成矩阵形式:

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

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

$$\Leftrightarrow x^{(k+1)} = \underbrace{-(D + L)^{-1}U}_{B}x^{(k)} + \underbrace{(D + L)^{-1}b}_f$$

Gauss-Seidel
迭代阵

高斯-塞德尔迭代法算例

Chapter 6 Methods for
solving linear systems

考虑解方程组

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

其准确解为 $X^* = \{1.1, 1.2, 1.3\}$ 。

高斯-塞德尔迭代格式

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

迭代次数	x_1	x_2	x_3
0	0	0	0
1	0.72	0.902	1.1644
2	1.04308	1.167188	1.282054
3	1.09313	1.195724	1.297771
4	1.099126	1.199467	1.299719
5	1.09989	1.199933	1.299965
6	1.099986	1.199992	1.299996
7	1.099998	1.199999	1.299999
8	1.1	1.2	1.3

高斯-塞德尔迭代法算法

For the matrix equation $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ with an initial guess \vec{x}^0 .

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}, \vec{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}, \vec{x}_0 = \begin{bmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ \vdots \\ x_n^0 \end{bmatrix}$$

Steps	
1.	While $\frac{\ \vec{x}^k - \vec{x}^{k-1}\ _{L\infty}}{\ \vec{x}^k\ _{L\infty}} > tolerance$ do Step 2
2.	For $i = 1, 2, \dots, n$ do Step 3
3.	$x_i^k = \left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^k - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{k-1} + b_i \right) / a_{ii}$

Python/NumPy implementation of Gauss-Seidel iteration

Chapter 6 Methods for solving linear systems

Import numpy as np

```
def gauss_seidel(A, b, tolerance=1e-10, max_iterations=10000):
    x = np.zeros_like(b, dtype=np.double)

    for k in range(max_iterations):
        x_old = x.copy()
        #Loop over rows
        for i in range(A.shape[0]):
            x[i] = (b[i] - np.dot(A[i,:i], x[:i]) - np.dot(A[i,(i+1):], x_old[(i+1):])) / A[i, i]
        #Stop condition
        if np.linalg.norm(x - x_old, ord=np.inf) / np.linalg.norm(x, ord=np.inf) < tolerance:
            break
    return x
```

Chapter 6 Methods for solving linear systems

定理 设 $Ax = b$, 如果:

A 为严格对角占优, 则解 $Ax = b$ 的 **Jacobi** 迭代法,
Gauss-Seidel 迭代法均收敛。

例：设方程组为

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + x_3 = -12 \\ -x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 20 \\ 2x_1 - 3x_2 + 10x_3 = 3 \end{cases}$$

试分别写出其 Jacobi 和 Gauss-Seidel 的迭代格式以及相应的迭代矩阵。

解：Jacobi 迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{5}(-12 - 2x_2^{(k)} - x_3^{(k)}) = -\frac{2}{5}x_2^{(k)} - \frac{1}{5}x_3^{(k)} - \frac{12}{5} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{4}(20 + x_1^{(k)} - 2x_3^{(k)}) = \frac{1}{4}x_1^{(k)} - \frac{1}{2}x_3^{(k)} + 5 \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{10}(3 - 2x_1^{(k)} + 3x_2^{(k)}) = -\frac{1}{5}x_1^{(k)} + \frac{3}{10}x_2^{(k)} + \frac{3}{10} \end{cases}$$

故 Jacobi 迭代矩阵为

$$B_J = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{2}{5} & -\frac{1}{5} \\ \frac{1}{4} & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{5} & \frac{3}{10} & 0 \end{bmatrix}$$

Seidel 迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -\frac{2}{5}x_2^{(k)} - \frac{1}{5}x_3^{(k)} - \frac{12}{5} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{4}x_1^{(k+1)} - \frac{1}{2}x_3^{(k)} + 5 \\ x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{5}x_2^{(k+1)} + \frac{3}{10}x_3^{(k+1)} + \frac{3}{10} \end{cases}$$

从式中解出

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -\frac{2}{5}x_2^{(k)} - \frac{1}{5}x_3^{(k)} - \frac{12}{5} \\ x_2^{(k+1)} = -\frac{1}{10}x_2^{(k)} - \frac{11}{20}x_3^{(k)} + \frac{22}{5} \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{20}x_2^{(k)} - \frac{1}{8}x_3^{(k)} + \frac{21}{10} \end{cases}$$

故可得 Seidel 迭代矩阵为 $B_s = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{2}{5} & -\frac{1}{5} \\ 0 & -\frac{1}{10} & -\frac{11}{20} \\ 0 & \frac{1}{20} & -\frac{1}{8} \end{bmatrix}$

Jacobi 迭代矩阵 B_J 的主对角线为零，而 Seidel 迭代矩阵 B_s 的第 1 列都是零，这对一般情况也是成立的。

Jacobi迭代的收敛性

Chapter 6 Methods for solving linear systems

已知线性方程组为：

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 6x_1 + 3x_2 + 12x_3 = 36 \end{cases}$$

首先将原方程组写为迭代形式的方程组，即：

$$\begin{cases} x_1 = 20/8 - 0 + 3/8 x_2 - 2/8 x_3 \\ x_2 = 33/11 - 4/11 x_1 - 0 + 1/11 x_3 \\ x_3 = 36/12 - 6/12 x_1 - 3/12 x_2 - 0 \end{cases}$$

由于：

$$\|B\|_{\infty} = \max\{5/8, 5/11, 9/12\} = 9/12 < 1$$

或任一列和的最大值<1,即：

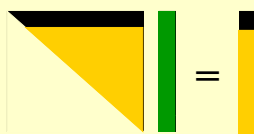
$$\|B\|_1 = \max\{114/132, 60/96, 30/88\} = 114/132 < 1$$

结论：该方程组采用Jacobi迭代法计算是收敛的。

直接法：高斯消元法解 $AX=b$

Chapter 6 Methods for solving linear systems

首先将A化为上三角阵，再回代求解。



$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ \dots &= \dots \\ a_{n-1,n-1}x_{n-1} + a_{n-1,n}x_n &= b_{n-1} \end{aligned}$$

$$a_{nn}x_n = b_n$$

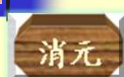
其中 $a_{ii} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$)

(一) 高斯消去法的求解过程, 可分为两个阶段:

首先, 把原方程组化为上三角形, 称之为“消元”过程;

然后, 用逆次序逐一求出三角方程组的解, 并称之为“回代”过程.

下面分别写出“消元”和“回代”两个过程的计算步骤.



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

Step 1: 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 计算因子 $m_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$ ($i = 2, \dots, n$)

将增广矩阵第 i 行 $- m_{i1} \times$ 第1行, 得到

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ \mathbf{O} & & & A^{(2)} & b^{(2)} \end{array} \right] \quad \text{其中} \quad \begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)} \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)} \end{cases} \quad (i, j = 2, \dots, n)$$

Step k : 设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 计算消元因子:

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

且计算
$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \end{cases}$$

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

共进行? $n-1$
步



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

回代

$$x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}$$

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

若 A 的所有顺序主子式均不为 0, 则高斯消元
无需换行即可进行到底, 得到惟一解。

利用高斯消元法求解方程组:

$$\begin{cases} 6x_1 - 2x_2 + 2x_3 + 4x_4 = 12 \\ 12x_1 - 8x_2 + 6x_3 + 10x_4 = 34 \\ 3x_1 - 13x_2 + 9x_3 + 3x_4 = 27 \\ -6x_1 + 4x_2 + x_3 - 18x_4 = -38 \end{cases}$$

解:

$$\begin{cases} 6x_1 - 2x_2 + 2x_3 + 4x_4 = 12 \\ 12x_1 - 8x_2 + 6x_3 + 10x_4 = 34 \\ 3x_1 - 13x_2 + 9x_3 + 3x_4 = 27 \\ -6x_1 + 4x_2 + x_3 - 18x_4 = -38 \end{cases} \quad (1)$$

利用 $r_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}}r_1, i=2,3,4$. 得

$$\begin{cases} 6x_1 - 2x_2 + 2x_3 + 4x_4 = 12 \\ -4x_2 + 2x_3 + 2x_4 = 10 \\ -12x_2 + 8x_3 + x_4 = 21 \\ 2x_2 + 3x_3 - 14x_4 = -26 \end{cases} \quad (2)$$

利用 $r_i - \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}r_2, i=3,4$. 得

$$\begin{cases} 6x_1 - 2x_2 + 2x_3 + 4x_4 = 12 \\ -4x_2 + 2x_3 + 2x_4 = 10 \\ 2x_3 - 5x_4 = -9 \\ 4x_3 - 13x_4 = -21 \end{cases} \quad (3)$$

利用 $r_i - \frac{a_{i3}^{(3)}}{a_{33}^{(3)}} r_3, i=4$. 得

$$\begin{cases} 6x_1 - 2x_2 + 2x_3 + 4x_4 = 12 \\ -4x_2 + 2x_3 + 2x_4 = 10 \\ 2x_3 - 5x_4 = -9 \\ -3x_4 = -3 \end{cases} \quad (4)$$

显然, 方程组 (4) 与 (1) 是等价的, 其系数矩阵为上三角状的, 易于求解. 称以上过程为高斯消去法的**消去过程**. 通过方程组 (4) 的回代求解, 可以得到准确解为

$$x^* = [1 \ -3 \ -2 \ 1]^T$$

这一过程为高斯消去法的**回代过程**.

高斯消元法-选主元消去法

主元素及其选取问题

Gauss消元法第 k 次消元是用第 k 个方程

$$a_{kk}^{(k)} x_k + \cdots + a_{kn}^{(k)} x_n = b_k^{(k)}$$

来消去第 $k+1, \dots, n$ 个方程中的 x_k , 条件是 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$.

$a_{kk}^{(k)}$ 是实现第 k 次消元的关键元素, 称为第 k 次消去的主元.

Gauss消元法存在的问题是: **零主元, 小主元引起不稳定**

高斯消元法-选主元消去法

Chapter 6 Methods for solving linear systems

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

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

用 Gaussian Elimination 计算：

$$m_{21} = a_{21} / a_{11} = \overbrace{10^{-9}}^{8\text{个}}$$

$$a_{22} = 1 - m_{21} \times 1 = 0.\overbrace{0 \dots 01}^{8\text{个}} \times 10^9 - 10^9 \doteq -10^9$$

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

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \overbrace{10^{-9}}^{8\text{个}} & 1 & 1 \\ 0 & -10^9 & -10^9 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x_2 = 1, \quad x_1 \doteq 0$$

用小主元 10^{-9} 作除数，致使其它元素的数量级大大增加，舍入误差的扩散将准确解淹没了。

全主元消去法与列主元消去法

Chapter 6 Methods for solving linear systems

全主元：每一步选绝对值最大的元素为主元素，保证 $|m_{ik}| \leq 1$ 。

Step k : ① 选取 $|a_{i_k j_k}| = \max_{k \leq i, j \leq n} |a_{ij}| \neq 0$;

② If $i_k \neq k$ then 交换第 k 行与第 i_k 行;
If $j_k \neq k$ then 交换第 k 列与第 j_k 列;

③ 消元

注：列交换改变了 x_i 的顺序，须记录交换次序，解完后再换回来。

选全主元需要相当多的比较计算时间，因此常采用局部选主元的方法，省去换列的步骤。

列主元：每次仅选一列中最大的元 $|a_{i_k, k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}| \neq 0$

算法: 1. 消元过程, 对 $k=1, 2, \dots, n-1$

(1) 选主元, 找 $i_k \in \{k, k+1, \dots, n\}$ 使得

$$|a_{i_k k}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$$

(2) 若 $a_{i_k k}^{(k)} = 0$, 则停止, 退出; $\det A = 0$

(3) 若 $i_k \neq k$, 则换行, $a_{kj}^{(k)} \leftrightarrow a_{i_k j}^{(k)} \quad (j = k, \dots, n+1)$

(4) 消元, 对 $i = k+1, \dots, n$ 有 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{i_k k}^{(k)}$

$j = k+1, \dots, n+1$ 有

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{i_k j}^{(k)}$$

回代过程:

(1) 若 $a_{nn}^{(n)} = 0$, 则停止 $\det A = 0$

(2) 对 $i = n, \dots, 1$

$$x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}$$

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

列主元消去法的效果

Chapter 6 Methods for
solving linear systems

$$|a_{i_k, k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}| \neq 0$$

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

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

注: 列主元法没有全主元法稳定。

例: $\begin{bmatrix} 1 & 10^9 & 10^9 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 10^9 & 10^9 \\ 0 & -10^9 & -10^9 \end{bmatrix} \Rightarrow x_2 = 1, \quad x_1 = 0 \quad \times$

小结

Chapter 6 Methods for
solving linear systems

高斯消去法是解线性方程组直接方法的基础。将线性方程组化为等价的三角形方程组再求解是直接法的基本解法。为保证方法的数值稳定性, 引进选主元的技巧; 如列选主元消元法等。

迭代法是一种逐次逼近方法, 收敛性是迭代法的前提, 针对不同的问题, 分析并采用适当的数值算法, 如Jacobi方法、Guass-Seidel方法等。