

计算方法大作业

Log Creative

2023 年 11 月 24 日

目 录

目 录	1
1 问题	1
2 约定	2
3 顺序 Guass 消元法	3
4 列主元 Guass 消元法	4
5 追赶法	6
6 Jacobi 迭代法	8
7 Guass-Seidel 迭代法	9
8 结果比较与总结	11

1 问题

解方程组 $Ax = b$ ，其中

$$A = \begin{pmatrix} 6 & 1 & & & \\ 8 & 6 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 8 & 6 & 1 \\ & & & 8 & 6 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 7 \\ 15 \\ \vdots \\ 15 \\ 14 \end{pmatrix}$$

显然精确解为 $x^* = (1, 1, \dots, 1)^\top$ 。



2 约定

基于 Python3 以及 numpy 库(下为 np)编写,所有矩阵的数据类型均为 64 位浮点数(np.float64)。下述解法均派生于一个公共类 Solver, 每个子类将会实现方法 solve():

```
class Solver:
    """
    求解线性方程 Ax=b
    """
    def __init__(self, A: np.array, b: np.array):
        """
        A: n x m 矩阵
        b: n x 1 矩阵
        """
        self.A = A
        self.b = b
        assert len(self.A) == len(self.b)
        self.n = len(self.A)
        self.m = len(self.A[0])

    def solve(self):
        raise NotImplementedError
```

考虑到输出每行均为 1, 输出将会使用 ∞ -范数与精确值 $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_\infty$ 进行比较。

```
def construct_input(n):
    """
    构造输入
    """
    A = np.diag([6]*n, 0)+np.diag([8]*(n-1), -1)+np.diag([1]*(n-1), 1)
    b = np.array([7]+[15]*(n-2)+[14])
    return np.asarray(A, np.float64), np.asarray(b, np.float64)

def compare_output(x, target):
    return np.linalg.norm(x - target, np.inf)
```

对于迭代法:Jacobi 迭代法(第 6 节)和 Gauss-Seidel 迭代法(第 7 节),均派生于 IterativeSolver 类。设定迭代初值为 $\mathbf{x}_0 = (0, 0, \dots, 0)^\top$, 最大迭代次数为 1000。迭代终止条件为 $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\|_\infty < 10^{-4}$ 或达到了最大迭代次数, 实现于 self.iter_manager()。

```
class IterativeSolver(Solver):
    """
    迭代法公共类
    """
    def __init__(self, A: np.array, b: np.array, x0 = None, maxiter = 1000, xnormthres = 1e-4):
        super().__init__(A, b)
        assert self.m == self.n
        if x0 is None:
            x0 = np.zeros(len(A))
        self.x0 = x0
        self.maxiter = maxiter
        self.xnormlist = []
        self.xnormthres = xnormthres

    def iter_manager(self, xnorm, iternum):
        if iternum > len(self.xnormlist) + 1:
            self.xnormlist.clear()
            self.xnormlist.append(xnorm)
        return xnorm >= self.xnormthres and iternum < self.maxiter
```



3 顺序 Guass 消元法

```
class SeqGuassSolver(Solver):  
    """  
    顺序 Guass 消元法  
    """  
    def solve(self):  
        A = np.copy(self.A)  
        b = np.copy(self.b)  
  
        # 消元过程  
        for k in range(self.m):  
            for i in range(k + 1, self.n):  
                coeff = A[i][k] / A[k][k]  
                for j in range(self.m):  
                    A[i][j] -= A[k][j] * coeff  
                b[i] -= b[k] * coeff  
  
        # 回代过程  
        x = np.empty(self.m)  
        for i in reversed(range(self.n)):  
            s = b[i]  
            for j in range(i + 1, self.m):  
                s -= A[i][j] * x[j]  
            x[i] = s / A[i][i]  
  
        return x
```

[illegible]

阶数 n	∞ -范数 $\ \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\ _\infty$
10	2.84×10^{-14}
30	2.98×10^{-8}
100	3.52×10^{13}

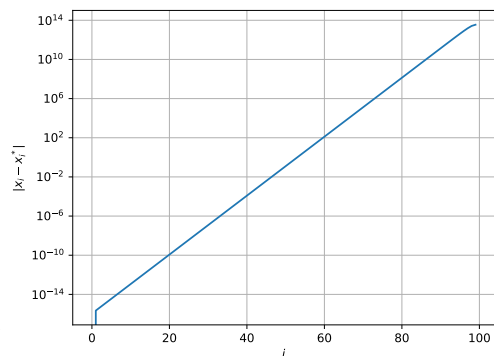


图 2 顺序 Gauss 消元法 $n = 100$ 时结果每个坐标与精确值的差值绝对值

4 列主元 Guass 消元法

蓝色部分为列主元 Guass 消元法相较于顺序 Guass 消元法增加的代码部分。

```
class PivotGuassSolver(Solver):
    """
    选主元 Guass 消元法
    """
    def solve(self):
        A = np.copy(self.A)
        b = np.copy(self.b)

        # 消元过程
        for k in range(self.m):
            # 选主元
            max_pivot = abs(A[k][k])
            max_line = k
            for p in range(k + 1, self.n):
                if abs(A[p][k]) > max_pivot:
                    max_pivot = abs(A[p][k])
                    max_line = p

            # 交换行元素
            for j in range(self.m):
```

```

        tmp = A[k][j]
        A[k][j] = A[max_line][j]
        A[max_line][j] = tmp
    tmp = b[k]
    b[k] = b[max_line]
    b[max_line] = tmp

    for i in range(k + 1, self.n):
        coeff = A[i][k] / A[k][k]
        for j in range(self.m):
            A[i][j] -= A[k][j] * coeff
            b[i] -= b[k] * coeff

# 回代过程
x = np.empty(self.m)
for i in reversed(range(self.n)):
    s = b[i]
    for j in range(i + 1, self.m):
        s -= A[i][j] * x[j]
    x[i] = s / A[i][i]

return x

```

表 2 列主元 Guass 消元法结果与精确值的比较

[illegible]

图 3 列主元 Guass 消元法结果

阶数 n	∞ -范数 $\ \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\ _\infty$
10	0.000
30	0.000
100	0.183

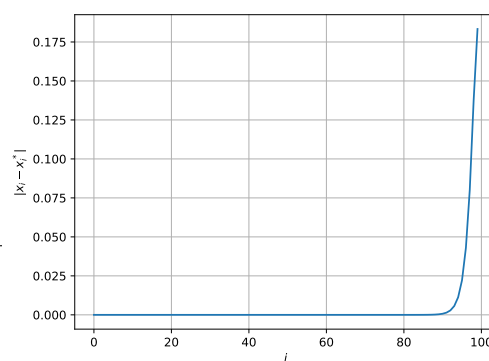


图 4 列主元 Gauss 消元法 $n = 100$ 时结果每个坐标与精确值的差值绝对值



5 追赶法

追赶法增加了对是否是三对角矩阵以及对角占优矩阵的检查。

```
class ThomasSolver(Solver):
    """
    追赶法
    """
    def solve(self):
        A = np.copy(self.A)
        b = np.copy(self.b)

        # 检查是否是三对角矩阵以及对角占优
        is_square = self.m == self.n
        is_lower_zero = np.array_equal(np.tril(A, -2), np.zeros([self.n, self.m]))
        is_upper_zero = np.array_equal(np.triu(A, 2), np.zeros([self.n, self.m]))
        if not (is_square and is_lower_zero and is_upper_zero):
            print(" 不是三对角矩阵!")

        is_dominant = (abs(A[0][0]) > abs(A[0][1]) > 0)
        for i in range(self.n - 1):
            is_dominant &= (abs(A[i][i]) >= abs(A[i][i-1]) + abs(A[i][i+1]))
        is_dominant &= (abs(A[self.n-1][self.n-1]) > abs(A[self.n-1][self.n-2]) >
            ↪ 0)
        if not is_dominant:
            print(" 不是对角占优!")

        # 计算 beta
        beta = np.empty(self.n - 1)
        beta[0] = A[0][1] / A[0][0]
        for i in range(1, self.n - 1):
            beta[i] = A[i][i+1] / (A[i][i] - A[i][i-1] * beta[i-1])

        # 解 Ly=f
        y = np.empty(self.n)
        y[0] = b[0] / A[0][0]
        for i in range(1, self.n):
            y[i] = (b[i] - A[i][i-1] * y[i-1]) / (A[i][i] - A[i][i-1] * beta[i-1])

        # 解 Ux=y
        x = np.empty(self.n)
        x[self.n - 1] = y[self.n - 1]
        for i in reversed(range(self.n - 1)):
            x[i] = y[i] - beta[i] * x[i+1]

        return x
```



阶数 n	∞ -范数 $\ \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\ _\infty$
10	2.84×10^{-14}
30	2.98×10^{-8}
100	3.52×10^{13}

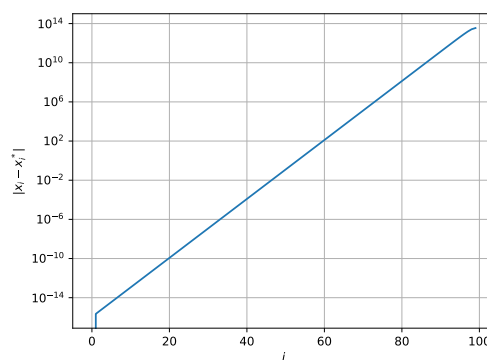


图 6 追赶法 $n = 100$ 时结果每个坐标与精确值的差值绝对值

图 5 追赶法结果

6 Jacobi 迭代法

```
class JacobiSolver(IterativeSolver):
    """
    Jacobi 迭代法
    """
    def solve(self):
        x = np.copy(self.x0)
        A = np.copy(self.A)
        b = np.copy(self.b)
        xnorm = np.inf
        iternum = 0

        while self.iter_manager(xnorm, iternum):
            newx = np.empty(self.n)
            for i in range(self.n):
                s = 0
                for j in range(self.n):
                    if j == i:
                        continue
                    s += A[i][j] * x[j]
                newx[i] = (b[i] - s) / A[i][i]
            xnorm = np.linalg.norm(newx - x, np.inf)
            x = newx
            iternum += 1

        print(" 迭代次数: {}".format(iternum))
        return x
```

```
迭代次数: 159
Jacobi 迭代法: n=10      inf-norm=5.590596764126765e-05
[1.      1.00000003  1.00000006  1.00000035  1.00000065  1.00000307
 1.00000481  1.00001875  1.00002288  1.00005591]
迭代次数: 526
Jacobi 迭代法: n=30      inf-norm=3.96780056398649e-05
[1.      1.      1.      1.      1.      1.
 1.      1.      1.      1.      1.      1.
 1.      1.      1.      1.      1.      1.
 0.99999999 0.99999999 0.99999999 0.99999999 0.99999997 0.99999995
 0.99999824 0.99999736 0.99999028 0.99998695 0.99996032 0.99996473]
迭代次数: 1000
Jacobi 迭代法: n=100      inf-norm=1.64270699135404e-05
[ 1.00000000e+00  1.00000000e+00  1.00000000e+00  1.00000000e+00
 1.00000000e+00  1.00000000e+00  1.00000000e+00  1.00000000e+00
 1.00000000e+00  1.00000000e+00  1.00000000e+00  1.00000000e+00
 1.00000000e+00  1.00000000e+00  1.00000000e+00  1.00000000e+00
 1.00000000e+00  9.99999999e-01  1.00000000e+00  9.99999998e-01
 1.00000000e+00  9.99999990e-01  1.00000000e+00  9.99999960e-01
 1.00000000e+00  9.99999841e-01  1.00000000e+00  9.99999364e-01
 1.00000000e+00  9.99997457e-01  1.00000000e+00  9.99989827e-01
 1.00000000e+00  9.99959310e-01  1.00000000e+00  9.99837240e-01
 1.00000000e+00  9.99348958e-01  1.00000000e+00  9.97395833e-01
 9.99999998e-01  9.99583330e-01  9.99999984e-01  9.5833307e-01
 9.99999878e-01  8.33333129e-01  9.99999058e-01  3.33331753e-01
 9.99992800e-01  -1.66667876e+00  9.99945490e-01  -9.66675830e+00
 9.99590932e-01  -4.16667354e+01  9.96954343e-01  -1.69671787e+02
 9.77488166e-01  -6.81704497e+02  8.34728890e-01  -2.72994420e+03
 -2.05590268e-01  -1.09236892e+04  -7.74050676e+00  -4.37043123e+04
 -6.19921240e+01  -1.74867068e+05  -4.50325166e+02  -6.99803623e+05
 -3.21374724e+03  -2.80156210e+06  -2.27610092e+04  -1.12226838e+07
 -1.60165748e+05  -4.50050936e+07  -1.11954274e+06  -1.80809861e+08
 -7.76799062e+06  -7.28639006e+08  -5.34436267e+07  -2.95106032e+09
 -3.63968007e+08  -1.20473284e+10  -2.44716291e+09  -4.97743327e+10
 -1.61761911e+10  -2.09109892e+11  -1.04402949e+11  -8.96432177e+11
 -6.50054534e+11  -3.90993802e+12  -3.81532093e+12  -1.69730829e+13
 -2.00233770e+13  -6.76384210e+13  -7.93116926e+13  -1.64270699e+14]
```

图 7 Jacobi 迭代法结果

表 4 Jacobi 迭代法结果与精确值的比较

阶数 n	迭代次数 T	∞ -范数 $\ x - x^*\ _\infty$
10	159	5.59×10^{-5}
30	526	3.97×10^{-5}
100	1000	1.64×10^{-4}

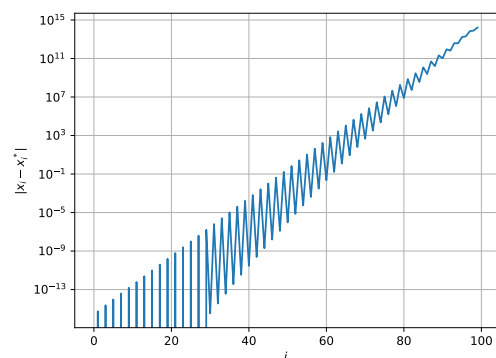


图 8 Jacobi 迭代法 $n = 100$ 时结果每个坐标与精确值的差值绝对值



7 Guass-Seidel 迭代法

```
class GuassSeidelSolver(IterativeSolver):  
    """  
    Guass-Seidel 迭代法  
    """  
    def solve(self):  
        x = np.copy(self.x0)  
        A = np.copy(self.A)  
        b = np.copy(self.b)  
        xnorm = np.inf  
        iternum = 0  
  
        while self.iter_manager(xnorm, iternum):  
            newx = np.empty(self.n)  
            for i in range(self.n):  
                s = 0  
                for j in range(i):  
                    s += A[i][j] * newx[j]  
                for j in range(i + 1, self.n):  
                    s += A[i][j] * x[j]  
                newx[i] = (b[i] - s) / A[i][i]  
            xnorm = np.linalg.norm(newx - x, np.inf)  
            x = newx  
            iternum += 1  
  
        print(" 迭代次数: {}".format(iternum))  
        return x
```



迭代次数: 52
Guass-Seidel 迭代法: n=10 inf-norm=0.0004310713408720579
[1.00000009 0.99999955 1.00000161 0.99999504 1.00001381 0.99996466
1.00008309 0.99982337 1.0003233 0.99956893]
迭代次数: 208
Guass-Seidel 迭代法: n=30 inf-norm=0.000689943484630029
[1. 1. 1. 1. 1. 1.
1. 1. 1. 1. 1. 1.
1. 1. 1. 0.99999999 1.00000002 0.99999995
1.00000014 0.99999964 1.00000089 0.99999978 1.00000535 0.99998725
1.00002966 0.99993317 1.00014405 0.99970992 1.00051746 0.99931006]
迭代次数: 722
Guass-Seidel 迭代法: n=100 inf-norm=93824992236886.06
[1.00000000e+00 1.00000000e+00 1.00000000e+00 1.00000000e+00
1.00000000e+00 1.00000000e+00 1.00000000e+00 1.00000000e+00
1.00000000e+00 1.00000000e+00 1.00000000e+00 1.00000000e+00
1.00000000e+00 1.00000000e+00 1.00000000e+00 1.00000000e+00
1.00000000e+00 9.99999999e-01 1.00000000e+00 9.99999998e-01
1.00000000e+00 9.99999990e-01 1.00000002e+00 9.99999960e-01
1.00000008e+00 9.99999841e-01 1.00000032e+00 9.99999364e-01
1.00000127e+00 9.99997457e-01 1.00000050e+00 9.99989827e-01
1.00002035e+00 9.99993101e-01 1.00008138e+00 9.99837240e-01
1.00032552e+00 9.99348958e-01 1.00130208e+00 9.97395833e-01
1.00520833e+00 9.89583333e-01 1.02083333e+00 9.58333333e-01
1.08333333e+00 8.33333333e-01 1.33333333e+00 3.33333333e-01
2.33333333e+00 -1.66666667e+00 6.33333333e+00 -9.66666667e+00
2.33333333e+01 -4.16666667e+01 8.63333333e+01 -1.69666667e+02
3.42333333e+02 -6.81666667e+02 1.36633333e+03 -2.72966667e+03
5.46233333e+03 -1.09216667e+04 2.18463333e+04 -4.36896667e+04
8.73823333e+04 -1.74761667e+05 3.49526333e+05 -6.99049665e+05
1.39810233e+06 -2.79620165e+06 5.59240625e+06 -1.11848093e+07
2.23696210e+07 -4.47392363e+07 8.94784650e+07 -1.78956884e+08
3.57913601e+08 -7.15826516e+08 1.43165031e+09 -2.86328968e+09
5.72653568e+09 -1.14528966e+10 2.29050941e+10 -4.58073921e+10
9.16035994e+10 -1.83162459e+11 3.66145962e+11 -7.31576096e+11
1.46028888e+12 -2.90912452e+12 5.77243605e+12 -1.13616202e+13
2.19902326e+13 -4.10484341e+13 7.03687442e+13 -9.38249922e+13]

表 5 Gauss-Seidel 迭代法结果与精确值比较

阶数 n	迭代次数 T	∞ -范数 $\ x - x^*\ _\infty$
10	52	0.000431
30	208	0.000690
100	722	9.38×10^{13}

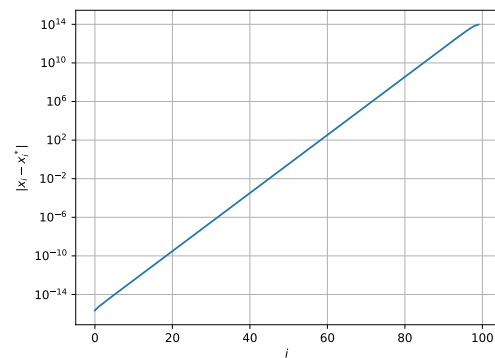


图 9 Gauss-Seidel 迭代法结果

图 10 Gauss-Seidel 迭代法 $n = 100$ 时结果
每个坐标与精确值的差值绝对值

蓝色部分为 Gauss-Seidel 迭代法相较于 Jacobi 迭代法修改的部分。

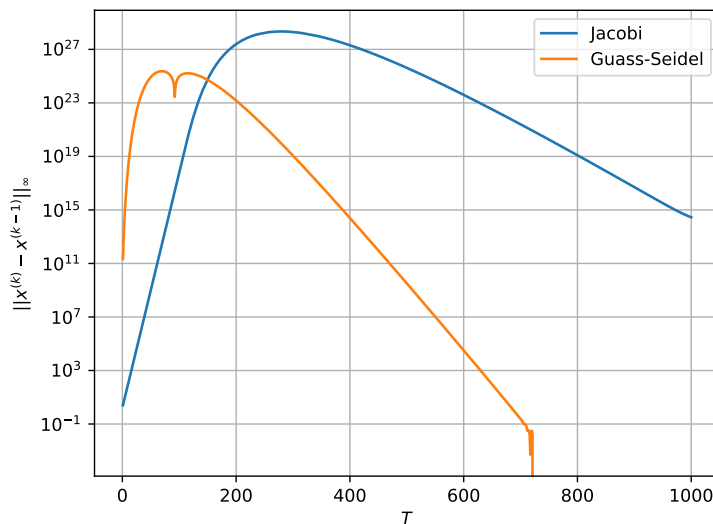


图 11 $n = 100$, Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法 $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_\infty$ 与迭代次数 T 的关系

8 结果比较与总结

首先，分析问题本身的情况。讨论在 $n = 10, 30, 100$ 时矩阵 A 的条件数，有表 6 的结果。

表 6 矩阵条件数

n	$\text{cond}(A)$
10	1727.556025
30	1.83702×10^9
100	2.95670×10^{16}

可以看到这个问题本身就是病态的，在 $n = 30, 100$ 时已经非常病态，容易产生累积误差，也就越难得到方程组准确的解。

表 7 不同方法结果与准确值的 ∞ -范数 $\|x - x^*\|_\infty$ 比较表

n	顺序 Guass 迭代法	列主元 Guass 迭代法	追赶法	Jacobi 迭代法	Guass-Seidel 迭代法
10	2.84×10^{-14}	0.000	2.84×10^{-14}	5.59×10^{-5}	0.000431
30	2.98×10^{-8}	0.000	2.98×10^{-8}	3.97×10^{-5}	0.000690
100	3.52×10^{13}	0.183	3.52×10^{13}	1.64×10^{14}	9.38×10^{13}

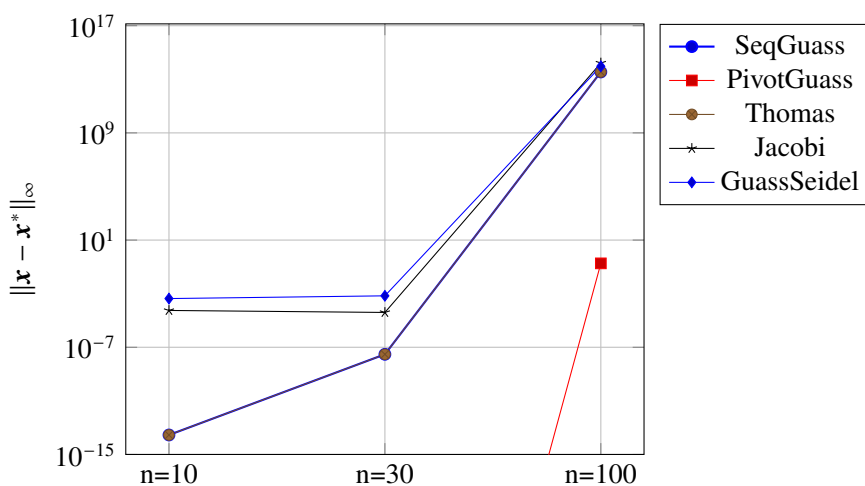


图 12 不同方法结果与准确值的 ∞ -范数 $\|x - x^*\|_\infty$ 比较图

表 7 和图 12 展示了不同方法结果与准确值的 ∞ -范数 $\|x - x^*\|_\infty$ 的比较，在 $n = 10, n = 30$ 时，这些方法结果与准确值的误差都是可以接受的。

对于直接法（顺序 Guass 消元法、列主元 Guass 消元法、追赶法），列主元 Guass 消元法是最优的，尽可能避免了大数除以小数的现象；顺序 Guass 消元法和追赶法结果与准确解的误差一致，但

是对于这种特殊的三对角矩阵，追赶法的复杂度为 $O(n)$ ，比顺序 Guass 消元法、列主元 Guass 消元法的 $O(n^3)$ 下降了不少。

对于迭代法 (Jacobi 迭代法、Guass-Seidel 迭代法)，图 11 显示了两种方法迭代过程，可见 Guass-Seidel 迭代法比 Jacobi 迭代法收敛更快，Jacobi 迭代法在 $n = 100$ 的 1000 轮迭代后仍未收敛。迭代法的时间复杂度为 $O(Tn)$ ， T 为迭代次数。

从每种方法 $n = 100$ 时每个坐标与精确值的差值与绝对值图来看，下标越大，累计的误差越大，呈指数增长。最开始的一些值误差仍在控制范围之内。这就意味着对于这种大型矩阵而言，应当把重要的、精度要求高的变量放在前面（比如主成分分析中的主要成分），以达到更理想的效果。

总之，对于本题，列主元 Guass 消元法的结果是最优的。

- 对于大规模矩阵，尽可能地把重要的变量放在前面，
 - 对于三对角矩阵这种特殊情况，追赶法可能是运行速度最快的，如果是对角占优的，误差也会被控制；
 - 当不是三对角矩阵时，为了求解大规模矩阵可以考虑迭代法更快求解；
 - 合理时间范围内更精确的精度应该超过了这几种方法的范畴，需要进一步地根据实际问题优化；
- 对于小规模矩阵，由于顺序 Guass 消元法误差较大且要求对角线元素不为 0、追赶法误差与顺序 Guass 消元法一致，所以一般使用列主元 Guass 消元法精确求解。