
线性方程组的数值解法

Lucian Xu (appleDog)

2023 年 5 月 25 日

线性方程组的数值解法

Gauss 消去法, Gauss 列主元消去法

Cramer 法则

考虑一般的线性方程组

$$Ax = b,$$

如果 $\det A \neq 0$ 则上述方程有唯一解 $x_i = \frac{|A_i|}{|A|}$.

Gauss 消去法

将线性方程组

$$Ax = b,$$

用增广矩阵表示, 记为

$$\bar{\mathbf{A}}^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & a_{1,n+1}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & a_{2,n+1}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & a_{n,n+1}^{(1)} \end{pmatrix},$$

接着进行 $n - 1$ 步消元将其化为上三角矩阵. 例如

$$\bar{\mathbf{A}}^{(1)} \rightarrow \bar{\mathbf{A}}^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & a_{1,n+1}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & a_{2,n+1}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{i2}^{(2)} & \cdots & a_{in}^{(2)} & a_{i,n+1}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & a_{n,n+1}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

最后得到

$$\bar{\mathbf{A}}^{(1)} \rightarrow \bar{\mathbf{A}}^{(2)} \rightarrow \bar{\mathbf{A}}^{(3)} \rightarrow \cdots \rightarrow \bar{\mathbf{A}}^{(k)} \rightarrow \cdots \rightarrow \bar{\mathbf{A}}^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1n}^{(1)} & a_{1,n+1}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2,n-1}^{(2)} & a_{2n}^{(2)} & a_{2,n+1}^{(2)} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} & a_{n-1,n+1}^{(n-1)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{nn}^{(n)} & a_{n,n+1}^{(n)} \end{pmatrix}.$$

如果记

$$U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2,n-1}^{(2)} & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} a_{1,n+1}^{(1)} \\ a_{2,n+1}^{(2)} \\ \vdots \\ a_{n-1,n+1}^{(n-1)} \\ a_{n,n+1}^{(n)} \end{pmatrix},$$

那么原方程等价于 $Ux = y$, 回代可求解.

整个计算过程时间复杂度为 $O(n^3)$.

Th 3.1

对于给定的线性方程组 $Ax = b$, 如果 A 的各阶顺序主子式非零, 那么 Gauss 消去法中的各阶主元 $a_{kk}^{(k)} (k = 1, 2, \dots, n)$ 均非零.

三对角方程组的追赶法

考虑三对角方程组

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix},$$

其中系数矩阵方程满足

1. $|b_1| > |c_1| > 0$;
2. $b_i \geq |a_i| + |c_i|, a_i c_i \neq 0 (i = 2, 3, \dots, n-1)$;
3. $|b_n| > |a_n| > 0$.

这是系数矩阵非奇异, 利用 Gauss 消去法每一步消元只需要消去一个元素, 计算量较小.

Gauss 列主元消去法

在第 k 次消元

$$\bar{A}^{(k)} \rightarrow \bar{A}^{(k+1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1,k}^{(1)} & a_{1,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & a_{1,n+1}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2,k}^{(2)} & a_{2,k+1}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & a_{2,n+1}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3,k}^{(3)} & a_{3,k+1}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & a_{3,n+1}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & a_{k,n+1}^{(k)} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k+1)} & a_{k+1,n+1}^{(k+1)} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k+2,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+2,n}^{(k+1)} & a_{k+2,n+1}^{(k+1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{i,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{i,n}^{(k+1)} & a_{i,n+1}^{(k+1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{nn}^{(k+1)} & a_{n,n+1}^{(k+1)} \end{pmatrix}$$

时, 从第 k 列位于对角线一下的元素中选绝对值最大者作为主元, 例如, 如果 $|a_{sk}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$, 则交换第 s 行和第 k 行在进行消元.

矩阵的 LU 分解

Gauss 消去法第一步消元相当于计算 $L_1 \bar{A}^{(1)} = \bar{A}^{(2)}$, 其中矩阵

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -I_{21} & 1 & & & \\ -I_{31} & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ -I_{n1} & 0 & & \cdots & 1 \end{pmatrix}, I_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, 2 \leq i \leq n.$$

以此类推有 $L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_1 \bar{A}^{(1)} = \bar{A}^{(n)}$, 记 $L = L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1}$ 可得 $A = LU$.

Th 3.2

对于给定的线性方程组 $Ax = b$, 如果 A 的各阶顺序主子式非零, 那么可以对 A 作唯一的 LU 分解.

方程组的性态与误差分析**Def 3.1**

范数.

常用的三个范数:

1. 1-范数: $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$;
2. ∞ -范数: $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$;
3. 2-范数: $\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$.

Th 3.3

范数连续.

Def 3.2

范数等价.

Th 3.4

\mathbb{R}^n 上任意两个范数等价.

Def 3.3

设 $\|\cdot\|$ 是 \mathbb{R}^n 上的范数, x^* 是精确值, x 是近似值. 称 $\|x^* - x\|$ 为 x^* 绝对误差, $\frac{\|x^* - x\|}{\|x^*\|}$ 或 $\frac{\|x^* - x\|}{\|x\|}$ 为 x^* 绝对误差.

Def 3.4

(依范数) 收敛.

矩阵范数

称

$$\max_{x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

为矩阵 A 的范数, 记为 $\|A\|$.

没有使用 sup 的原因是一定能保证最大值能取到. 事实上 $\|A\| = \max_{x \in \mathbb{R}^n, \|x\|=1} \|Ax\|$, 根据范数的连续性, 在闭球上一定能取到最大值.

矩阵范数的性质:

1. $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \|A\| \geq 0$, 且 $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$,
2. $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \lambda \in \mathbb{R}$, 有 $\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|$,
3. $\forall A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 有 $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$,
4. $\forall A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 有 $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$,
5. $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}, x \in \mathbb{R}^n$, 有 $\|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$.

Def 3.6

对于 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 为 A 的 n 个特征值. 称

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

为矩阵 A 的谱半径.

Th 3.5

设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则

1. $\|A\|_1 = \max_{x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0} \frac{\|Ax\|_1}{\|x\|_1} = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|,$
2. $\|A\|_\infty = \max_{x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0} \frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|,$
3. $\|A\|_2 = \max_{x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \sqrt{\rho(AA^T)}.$

Th 3.6

$\mathbb{R}^{n \times n}$ 中的矩阵的谱半径被其范数控制.

Th 3.7

$\mathbb{R}^{n \times n}$ 中的矩阵的谱半径等于其 2 - 范数.

Def 3.7

矩阵范数等价.

Th 3.8

$\mathbb{R}^{n \times n}$ 上任意两个矩阵范数都等价.

Def 3.8

矩阵依范数的距离.

Def 3.9

矩阵的 (依范数) 收敛.

Th 3.9

设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^k = 0 \Leftrightarrow \rho(A) < 1$.

(条件数: 先挖坑, 过几天再填)

线性方程组的迭代法

迭代格式的构造

将方程 $Ax = b$ 改写成等价的方程

$$x = Bx + f,$$

进而产生迭代格式

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

如果产生的序列 $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ 收敛于 \bar{x} , 对迭代格式两侧取极限即得 \bar{x} 是原方程的解.

接着问题就是如何构造迭代格式, 以及迭代格式何时收敛.

Jacobi 迭代格式

$$\begin{aligned}x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)} \right), \\x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)} \right), \\x_3^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{33}} \left(b_3 - a_{31}x_1^{(k)} - a_{32}x_2^{(k)} - \cdots - a_{3n}x_n^{(k)} \right), \\&\dots \\x_n^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{nn}} \left(b_n - a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)} \right).\end{aligned}$$

给出其矩阵形式, 记

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ a_{21} & 0 & & & & \\ a_{31} & a_{32} & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & a_{n-1,3} & \cdots & 0 & \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix},$$

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & & & & \\ & a_{22} & & & \\ & & a_{33} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & a_{nn} \end{pmatrix},$$

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

有

$$x^{(k+1)} = Jx^{(k)} + f_J, \text{ 其中 } J = -D^{-1}(L + U), f_J = D^{-1}b.$$

Gauss - Seidel 迭代格式

在 Jacobi 迭代中将已经求出的分量直接参与下一个分量的计算, 得到的就是 Gauss - Seidel 迭代.

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{11}} (b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}), \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{22}} (b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}), \\ x_3^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{33}} (b_3 - a_{31}x_1^{(k+1)} - a_{32}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{3n}x_n^{(k)}), \\ &\dots \\ x_n^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{nn}} (b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}). \end{aligned}$$

给出其矩阵形式

$$x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + f_G, \text{ 其中 } G = -(D + L)^{-1}U, f_G = (D + L)^{-1}b.$$

SOR 迭代格式

将 Gauss - Seidel 迭代得到的 $x^{(k+1)}$ 与 $x^{(k)}$ 加权平均, 得到 SOR 迭代.

$$\begin{aligned}x_1^{(k+1)} &= (1 - \omega)x_1^{(k)} + \frac{\omega}{a_{11}} (b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}), \\x_2^{(k+1)} &= (1 - \omega)x_2^{(k)} + \frac{\omega}{a_{22}} (b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}), \\x_3^{(k+1)} &= (1 - \omega)x_3^{(k)} + \frac{\omega}{a_{33}} (b_3 - a_{31}x_1^{(k+1)} - a_{32}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{3n}x_n^{(k)}), \\&\dots \\x_n^{(k+1)} &= (1 - \omega)x_n^{(k)} + \frac{\omega}{a_{nn}} (b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}).\end{aligned}$$

其中 ω 为松弛因子.

给出其矩阵形式

$$x^{(k+1)} = Sx^{(k)} + f_S, \text{ 其中 } S = -(D + \omega L)^{-1}((1 - \omega)D - \omega U), f_S = \omega(D + \omega L)^{-1}b.$$

迭代格式的收敛性**Th 3.11**

迭代格式收敛等价于迭代矩阵的谱半径小于 1.

Def 3.12

按行严格对角占优, 按列严格对角占优, 严格对角占优.

Lemma

严格对角占优矩阵的行列式不为 0.

一些迭代格式的判别方法.

1. 如果 A 是严格对角占优矩阵, 那么 Jacobi 迭代格式和 Gauss - Seidel 迭代格式收敛.
2. 如果 A 是对称正定且 $\omega \in (0, 2)$, 那么 SOR 迭代格式收敛.
3. 如果 A 是对称正定 Gauss - Seidel 迭代格式收敛.

幂法与反幂法

幂法可用于求模最大的特征值以及其对应的特征向量. 当特征值非零时, 反幂法可用于求模最小的特征值以及其对应的特征向量.

(先挖坑, 之后再填.)