第四章 线性方程组数值解法（1） 直接法、J迭代法，G-S迭代法

线性方程组数值求解—直接法

就是求解线性方程组 $Ax = b$，直接法包括 高斯消去法、列主元高斯消去法 和 三角分解法（LU 或 PLU 分解）。

高斯消去法

通过 **初等行变换** 将增广矩阵 $[A \mid b]$ 化为 **上三角矩阵**，由此可以得到最后一行的数值，之后不断回代到上一行即可求解所有数值。

具体步骤：

1. 选取当前主元行；
2. 用主元消去其所在列下面的元素（全部化为 0）；
3. 重复步骤 1、2 直到 A 变为上三角矩阵；
4. 从最后一行开始进行回代求解。

注意：如果出现主元为 0，需要换行（采用带换行的高斯消去法，也就是 **列主元高斯消去法**）。

列主元高斯消去法

和高斯消去法的区别就是，每步消元前，**在该列中选择绝对值最大的数作为主元，并交换到当前行。**

$$|a_{kk}| = \max_{i \geq k} |a_{ik}|$$

三角分解法（LU 或 PLU 分解）

将矩阵 A 通过 LU 分解为：

$$A = LU$$

求解 $Ax = b$ 转换为：

$$Ly = b, \quad Ux = y$$

或者将矩阵 A 通过 PLU 分解为：

$$PA = LU$$

求解 $Ax = b$ 转换为：

$$\text{先求}Pb,\quad Ly = Pb,\quad Ux = y$$

LU 分解、PLU 分解可见 3 矩阵分解与广义逆矩阵（1）LU分解，PLU分解，满秩分解.

线性方程组数值求解—迭代法

从方程组：

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

可以解出每个变量：

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

这个公式是 Jacobi 和 G-S 方法的基础，只是使用**旧值**还是**更新值**不同。

Jacobi 迭代法（Jacobi Method）

迭代格式：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j\neq i} a_{ij}x_j^{(k)}\right)$$

特点：

- **所有变量在第 $k+1$ 步均用第 k 步的值计算**
- 更新时不能立即替换，必须 **整行计算完后统一更新**

步骤流程：

1. 给定初值 $x^{(0)}$，通常默认初值为 0
2. 按公式计算 $x^{(k+1)}$
3. 检查误差是否满足：

$$|x^{(k+1)} - x^{(k)}| < \epsilon$$

4. 若不满足继续迭代。

Gauss–Seidel 迭代法（G-S Method）

迭代公式：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j<i} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij}x_j^{(k)})$$

特点：

- 前面的已经计算好的变量（$x_j,\ j<i$）使用 $k+1$ 轮 **刚更新的新值**
- 后面的还没算出的变量（$x_j,\ j>i$）仍使用上一轮 k 的旧值

通常 Gauss–Seidel 迭代法 相较于 Jacobi 迭代法 会更快一些。

例题 1

> 用 Jacobi 迭代法求解方程组
>
> $$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 5 \end{cases}$$

解答:

- 将方程组写成 Jacobi 迭代格式

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

  取初值 $x^{(0)} = (0,0,0)^T$.

- 第 1 次迭代

  $$\begin{aligned} x_1 &= 1, \\ x_2 &= 3, \\ x_3 &= 5. \end{aligned}$$

  $$x^{(1)} = (1,3,5)^T$$

- 第 2 次迭代

  $$\begin{aligned} x_1 &= -2 \times 3 + 2 \times 5 + 1 = 5, \\ x_2 &= -1 - 5 + 3 = -3, \\ x_3 &= -2 \times 1 - 2 \times 3 + 5 = -3. \end{aligned}$$

  $$x^{(2)} = (5,-3,-3)^T$$

- 第 3 次迭代

  $$\begin{aligned} x_1 &= -2 \times (-3) + 2 \times (-3) + 1 = 1, \\ x_2 &= -5 - (-3) + 3 = 1, \\ x_3 &= -2 \times 5 - 2 \times (-3) + 5 = 1. \end{aligned}$$

  $$x^{(3)} = (1,1,1)^T$$

继续迭代 x^k 保持不变，由此 Jacobi 迭代后得到的解为:

$$\boxed{x_1 = 1, \quad x_2 = 1, \quad x_3 = 1}$$

例题 2

> 用 G-S 法求解方程组
>
> $$\begin{cases} 9x_1 - x_2 - x_3 = 7 \\ -x_1 + 8x_2 = 7 \\ -x_1 + 9x_3 = 8 \end{cases}$$

解答:

- 将方程组写成 G-S 迭代格式

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{9}(x_2^{(k)} + x_3^{(k)} + 7) \\
x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{8}(x_1^{(k+1)} + 7) \\
x_3^{(k+1)} = \dfrac{1}{9}(x_1^{(k+1)} + 8)
\end{cases}
$$

取初值 $x^{(0)} = (0,0,0)^T$

- 第 1 次迭代

$$
x_1^{(1)} = \frac{7+0+0}{9} = \frac{7}{9} \approx 0.778,
$$
$$
x_2^{(1)} = \frac{7+x_1^{(1)}}{8} = \frac{7+\frac{7}{9}}{8} = \frac{35}{36} \approx 0.972,
$$
$$
x_3^{(1)} = \frac{8+x_1^{(1)}}{9} = \frac{8+\frac{7}{9}}{9} = \frac{79}{81} \approx 0.975.
$$
$$
x^{(1)} \approx (0.778, 0.972, 0.975)^T
$$

- 第 2 次迭代

$$
x_1^{(2)} = \frac{7+x_2^{(1)}+x_3^{(1)}}{9} \approx \frac{7+0.972+0.975}{9} \approx 0.994,
$$
$$
x_2^{(2)} = \frac{7+x_1^{(2)}}{8} \approx \frac{7+0.994}{8} \approx 0.999,
$$
$$
x_3^{(2)} = \frac{8+x_1^{(2)}}{9} \approx \frac{8+0.994}{9} \approx 0.999.
$$
$$
x^{(2)} \approx (0.994, 0.999, 0.999)^T
$$

- 第 3 次迭代

$$
x_1^{(3)} \approx \frac{7+0.999+0.999}{9} \approx 0.9998,
$$
$$
x_2^{(3)} \approx \frac{7+0.9998}{8} \approx 1.0000,
$$
$$
x_3^{(3)} \approx \frac{8+0.9998}{9} \approx 1.0000.
$$

已经非常接近稳定值，因此可认为

$$
x \approx (1,1,1)^T.
$$

由此 G-S 迭代后得到的解为：

$$
\boxed{x_1 = 1, \quad x_2 = 1, \quad x_3 = 1.}
$$
