数值计算方法

第三章　线性代数方程组的解法

ruiluo@outlook.com

n 阶线性方程组的一般形式

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots a_{nn}x_n = b_3 \end{cases}$$

或者常常写成矩阵的形式

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{23} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Cramer规则

- 线性方程组的解可以表示成

$$x_i = \frac{\det(A_i)}{\det(A)}$$

  A_i是A矩阵用b 置换第i列后得到的矩阵

- 时间复杂度为$\mathcal{O}(n^3)$
- http://mathworld.wolfram.com/CramersRule.html

高斯消元法

例：

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 1 \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}$$

消元的技巧

有时候矩阵 A 的形式会影响高斯消元的精度。例：

$$\begin{cases} 0.00001x_1 + 2x_2 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 = 2 \end{cases}$$

保留四位有效数字计算

消元的技巧

有时候矩阵 A 的形式会影响高斯消元的精度。例：

$$\begin{cases} 0.00001x_1 + 2x_2 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 = 2 \end{cases}$$

保留四位有效数字计算

- 列主元消元: 当变换到第 k 步时,从第 k 列 $a_{kk}^{(k)}$ 以下(包括 $a_{kk}^{(k)}$)的各元素中选出绝对值最大者,然后通过行变换将它交换到主元素 $a_{kk}^{(k)}$ 的位置 (k,k) 上
- 全主元消元：交换变量 x_i 的先后次序

三角分解法

思想是将问题

$$Ax = b$$

化作两个三角方程组

$$LY = b \qquad UX = Y$$

L 是下三角(lower)矩阵， U 是上三角(upper)矩阵

显然有

$$A = LU$$

Doolittle分解

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = LU$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

Doolittle分解

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = LU$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

如果L矩阵对角元不是1而是0可以不可以？如果U矩阵对角元是1而不是 u_{ii} 可以不可以？

Doolittle分解

矩阵乘法：

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$

实际上：

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} u_{kj}$$

Doolittle分解公式：

$$\begin{aligned} u_{ij} &= a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \qquad j \leqslant i \\ l_{ji} &= \left(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki} \right) / u_{ii} \qquad j > i \end{aligned}$$

追赶法

如果线性方程组 $Ax=b$ 有一种特殊的 A 矩阵的形式

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

这样的方程称为三对角线方程组

如果满足条件“对角元的绝对值都要大于其左右两个元的绝对值之和（没有左或者右元的认为是0）”（即书上条件3.21）则称为对角占优的三对角线方程组

这样的矩阵做LU分解得到的L矩阵和U矩阵的形式是：

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{2,1} & 1 & & & \\ 0 & l_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ & u_{22} & a_{23} & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ & & & & u_{n,n} \end{pmatrix}$$

追赶法

同样比较系数可以得到l_{ij}和u_{ij}的公式

$$\begin{cases} u_{11} = a_{11} \\ l_{i,i-1} = \frac{a_{i,i-1}}{u_{i-1,i-1}} \\ u_{ii} = a_{ii} - l_{i,i-1}a_{i-1,i} \end{cases}$$

同样解方程组 $Ly = b, Ux = y$ 可以得到

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - l_{i,i-1}y_{i-1} \\ i = 2, 3, \cdots, n \end{cases} \quad \begin{cases} x_n = \frac{y_n}{u_{nn}} \\ x_i = \frac{y_i - a_{i,i+1}x_{i+1}}{u_{ii}} \\ i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

追赶法的计算工作量是5n-4次乘除法

向量和矩阵的范数

向量范数是度量向量长度的一种形式

对向量 x 定义的范数 $\| x \|$ 一般需满足

- 正定性 $\| x \| \leqslant 0$ 且 $\| x \| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
- 齐次性 $\| ax \| = |a| \cdot \| x \|$
- 三角不等式 $\| x + y \| \leqslant \| x \| + \| y \|$

向量的范数

常见的向量 x 的范数

$$\| x \|_1 = \sum_{j=1}^{n} |x_j|$$

$$\| x \|_2 = \left(\sum_{j=1}^{n} |x_j|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\| x \|_\infty = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} |x_j|$$

矩阵的范数

对矩阵 A 定义的范数 $\| A \|$ 一般需满足

- 正定性
- 齐次性
- 三角不等式
- 矩阵乘法不等式

$$\| AB \| \leqslant \| A \| \cdot \| B \|$$

矩阵的范数

常见的矩阵 A 的范数

$$\| A \|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

$$\| A \|_2 = \left(\lambda_{\max}(A^T A)\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\| A \|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

$$\| A \|_F = \left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

例1：计算向量 $x=(1,3,-5)^T$，$p=1,2,\infty$ 三种范数

例2：

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 3 & 7 \end{pmatrix}$$

求 $\| A \|_1$ ， $\| A \|_2$ ， $\| A \|_\infty$ 和 $\| A \|_F$

迭代法

假设我们要求解方程：

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 = 5 \\ x_1 + 2x_2 = 5 \end{cases}$$

迭代法

假设我们要求解方程：

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 = 5 \\ x_1 + 2x_2 = 5 \end{cases}$$

我们可以将 x_1, x_2 从两式中分别解出，写成

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

迭代法

假设我们要求解方程：

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 = 5 \\ x_1 + 2x_2 = 5 \end{cases}$$

我们可以将 x_1, x_2 从两式中分别解出，写成

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

或者矩阵的形式：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1/3 \\ -1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5/3 \\ 5/2 \end{bmatrix}$$

迭代法

我们先无脑的写成一个迭代形式进行尝试：

$$\begin{bmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1/3 \\ -1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5/3 \\ 5/2 \end{bmatrix}$$

迭代法

我们先无脑的写成一个迭代形式进行尝试：

$$\begin{bmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1/3 \\ -1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5/3 \\ 5/2 \end{bmatrix}$$

结果收敛！

迭代法

前面的迭代形式太复杂了，还不如写成

$$\begin{cases} x_1 = -2x_2 + 5 \\ x_2 = -3x_1 + 5 \end{cases}$$

或者矩阵的形式：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

即迭代形式：

$$\begin{bmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

迭代法

前面的迭代形式太复杂了，还不如写成

$$\begin{cases} x_1 = -2x_2 + 5 \\ x_2 = -3x_1 + 5 \end{cases}$$

或者矩阵的形式：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

即迭代形式：

$$\begin{bmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

结果发散！！！说明：迭代格式不能随便写

Jacobi迭代法

如果迭代的格式是将第 i 个方程中的第 i 个分量分离到等号左边去：

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

可以写出对应的迭代格式：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1,\, j\neq i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right) \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

这样的方法称做雅可比（Jacobi）迭代法

Jacobi迭代法

雅可比迭代法可以写成简洁的形式：将矩阵 A 简单拆解为

$$A = D - L - U$$

则

$$Dx = (U + L)x + b$$

方程 $Ax = b$ 的迭代格式

$$x^{(k+1)} = B_J\, x^{(k)} + f_J$$

其中

$$B_J = D^{-1}(L + U), \qquad f_J = D^{-1}b$$

其中：

$$
\begin{aligned}
D &= \mathrm{Diag}(a_{11}, a_{22}, \cdots, a_{nn}) \\
U &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_{21} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_{31} & -a_{32} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & -a_{n3} & \cdots & 0 \end{pmatrix} \\
L &= \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & -a_{13} & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Jacobi迭代法

需要考虑的的问题：

- 计算复杂度
- 对角元 D 为零

高斯-赛德尔(Gauss-Seidel)迭代法

方程 $Ax=b$ 同样按照”对角－上三角－下三角“的方法拆解，整理得到一个形式：

$$(D-L)x = Ux + b$$

对应有迭代格式：

$$x^{(k+1)} = B_G\, x^{(k)} + f_G$$

其中

$$B = (D-L)^{-1}U\,, \qquad f = (D-L)^{-1}b$$

高斯-赛德尔迭代法

Gauss-Seidel迭代法的分量形式：

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

高斯-赛德尔迭代法

Gauss-Seidel迭代法的分量形式：

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

- 高斯-赛德尔迭代法在每个分量的迭代计算中都用到了最新的迭代计算结果
- 高斯-赛德尔迭代法的收敛情况和Jacobi方法可能不一样

例题

用Jacobi方法和Gauss-Seidel方法求解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 0 \\ 3 & 10 & 3 \\ 0 & 4 & 20 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \end{pmatrix}$$

迭代收敛条件与误差估计

- ［定义］谱半径： $n\times n$ 的矩阵 A 的特征向量分别为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$

$$\rho(A)\equiv\max_{1\leqslant i\leqslant n}|\lambda_i|$$

- ［定理］矩阵 A 的谱半径不大于矩阵 A 的任一算子范数 $\|A\|_r$

迭代收敛条件与误差估计

- ［定理］若迭代过程中 $X^{(k+1)} = BX^{(k)} + f$ 某迭代矩阵 B 的某算子范数 $\| B \|_r = q < 1$ 则
  - 对任意初始向量 $X^{(0)}$,该迭代过程收敛于方程 $X = BX + f$ 的唯一解 X^*
  - 有

$$\| X^* - X^{(k)} \|_r \leqslant \frac{1}{1-q} \| X^{(k+1)} - X^{(k)} \|_r$$

  - 有

$$\| X^* - X^{(k)} \|_r \leqslant \frac{q^k}{1-q} \| X^{(1)} - X^{(0)} \|_r$$

迭代收敛条件与误差估计

［定理］若方程组 $AX=b$ 的系数矩阵满足 行严格对角占优 或 列严格对角占优，即

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1,j\neq i} |a_{ij}|$$

或

$$|a_{ii}| > \sum_{i=1,j\neq i} |a_{ij}|$$

则方程组有唯一解，对任意初始向量 $X^{(0)}$,Jacobi迭代和Gauss − Seidel迭代都收敛

迭代收敛条件与误差估计

- ［定理］若方程组 $AX=b$ 的系数矩阵为正定对称矩阵，对任意初始向量 $X^{(0)}$,Gauss-Seidel迭代过程收敛
- ［定理］若迭代过程中 $X^{(k+1)}=BX^{(k)}+f$ 对任何初始向量 $X^{(0)}$ 收敛的充要条件是迭代矩阵谱半径 $\rho(B)<1$ ，且当 $\rho(B)<1$ 时， $\rho(B)$ 越小，收敛速度越快。

例题

考察线性方程组 $AX = b$ 的采用Jacobi方法和Gauss – Seidel方法的收敛情况

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

逐次超松弛迭代法

Gauss-Seidel迭代法的分量形式：

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

做一点改进

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

其中 ω 是松弛因子

例题

用松弛法求解线性方程组（取 $\omega = 1.46$ ）

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & -4 \\ -2 & 17 & 10 \\ 4 & 10 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 3 \\ -7 \end{pmatrix}$$

常用的超松弛迭代收敛条件

- ［定理］若方程组 $AX = b$ 的系数矩阵为正定对称矩阵，松弛系数($0 < \omega < 2$) 对任意初始向量 $X^{(0)}$,迭代过程收敛

方程组的状态与解的迭代改善

- 如果在 $Ax = b$ 中的初始数据 A, b 有一个小的扰动,对解的结果有什么影响?

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 1.0001x_2 = 2 \end{cases} \qquad \begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 0.9999x_2 = 1.9999 \end{cases}$$

对应的解:

$$\begin{cases} x_1 = 2 \\ x_2 = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

很小的方程系数的差别导致了解的巨大差异 – –病态矩阵

方程组的状态与解的迭代改善

对方程 $Ax=b$，

- 假设 b 有一个绕动 δb，造成x的相对误差不超过 b 的相对误差的$\| A^{-1} \| \| A \|$倍

- 假设 A 有一个绕动 δA 造成x的相对误差不超过 A 的相对误差的$\| A^{-1} \| \| A \|$倍

即定义矩阵A的条件数

$$\mathrm{cond}(A) \equiv \| A^{-1} \| \| A \|$$

方程组的状态与解的迭代改善

方程组可能出现病态的情况:

- 用选主元消元法消元过程中出现小主元
- 系数行列式的绝对值相对很小
- 系数矩阵元素间在数量级上相差很大且无一定规律
- 出现了相对很大的解

通过计算其残余向量 $r = A\tilde{x} - b$考察解的准确性，这样并不可靠

方程组的状态与解的迭代改善

可用如下方法改进:

- 计算残量 $r^{(1)} = b - Ax^{(1)}$
- 用列主元消元法解方程组$Ax = r^{(1)}$,得到近似解$d^{(1)}$
- 用$d^{(1)}$修正$x^{(1)}$,得到$Ax = b$ 的新近似值$x^{(2)} = x^{(1)} + d^{(1)}$
- 计算

$$e = \frac{\| d^{(1)} \|_\infty}{\| x^{(1)} \|_\infty}$$

若$e < \epsilon$,（ϵ为自定义的允许误差）则取$x^* \approx x^{(2)}$;否则视$x^{(2)}$ 为$x^{(1)}$,重复上述过程,直到满足条件$e < \epsilon$

方程组的状态与解的迭代改善

预条件处理方法:

通过选取矩阵P, Q将$Ax = b$转化为$PAQ(Q^{-1}x) = Pb$求解