方程组求解

St Maxwell

2018年10月1日

1 Gauss 消元法

$$\begin{cases} 2x - 2y - z &= -2\\ 4x + y - 2z &= 1\\ -2x + y - z &= -3 \end{cases}$$

对于以上的线性方程组,可以将其写成(增广)矩阵的形式:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc}
2 & -2 & -1 & -2 \\
4 & 1 & -2 & 1 \\
-2 & 1 & -1 & -3
\end{array}\right)$$

使用 Gauss 消元法,首先通过矩阵初等变换进行消去,将左边变成上三角矩阵。

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc}
2 & -2 & -1 & -2 \\
0 & 5 & 0 & 5 \\
0 & 0 & -2 & -4
\end{array}\right)$$

之后进行回代,并将主元约化为1。

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc}
1 & 0 & 0 & 1 \\
0 & 1 & 0 & 1 \\
0 & 0 & 1 & 2
\end{array}\right)$$

由此得到方程组的解。

$$\begin{cases} x = 1 \\ y = 1 \\ z = 2 \end{cases}$$

2 fortran 代码细节与 LAPACK 包

代码中的增广矩阵是使用reshape函数生成的。

```
real(kind=8) :: mat(4,3) = reshape( (/ 2,-2, -1,-2, & 4, 1, -2, 1, & -2, 1, -1,-3 /), (/ 4,3 /) )
```

所以矩阵元(数组元素)的下标和通常是相反的。例如,上面的增广矩阵中 $a_{21} = 4$,而在数组中,它对应于mat(1,2)。

要说明这一点的主要原因是,这个数组的定义方式与 LAPACK 包的dgesv子程序对输入数组的要求是相反的。

```
PROCRAM Main
IMPLICIT NONE
REAL :: A(3,3), b(3)
INTEGER :: i, j, pivot(3), ok

** Initialize A(:,:)
** Initialize b(:)

CALL SGESV(3, 1, A, 3, pivot, b, 3, ok)

PRINT *, b !! Print solution
END PROCRAM
```

以上代码中的A(i,j)即对应矩阵元 A_{ij} 。此时若依然使用reshape函数,其矩阵元应按列依次定义。

正式的项目中应该还是考虑使用 LAPACK 包,所以以后定义矩阵就选择第二种方式,而且也符合数学上的习惯。