计算方法

令　丹

数学与统计学院

邮箱：danling@xjtu.edu.cn

课程简介

计算方法 随着科学技术的发展和计算机的广泛应用而发展起来的一门学科

课程简介

计算方法　随着科学技术的发展和计算机的广泛应用而发展起来的一门学科

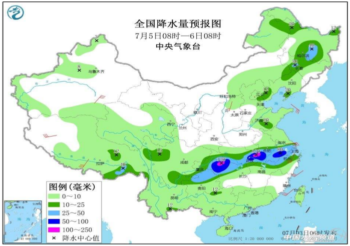
研究内容　借助计算机求解各种数学问题的数值方法及其理论，如

- 函数的插值、逼近
- 离散数据的拟合
- 线性方程组的求解　$Ax = b$
- 数值微分与积分　$f'(x) = g(f(x)),\ \int_a^b f(x)dx$
- 矩阵的特征值与特征向量
- 非线性方程　$x^7 + x^5 - 13 = 0$
- ……

为什么学习数值计算方法？

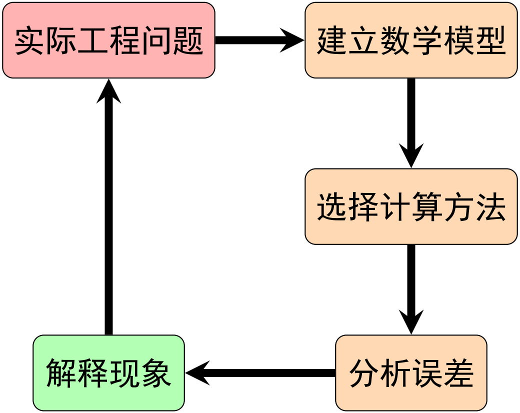
运载火箭与航天飞机

船舶

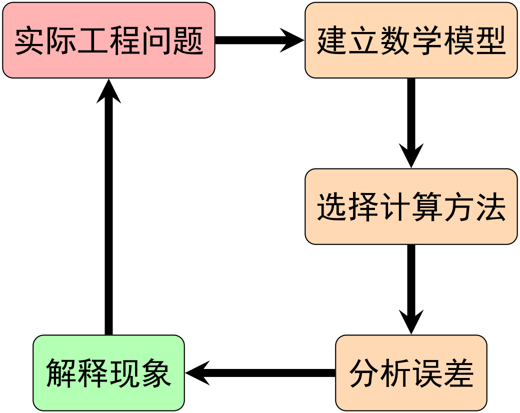


天气预报

数值计算



数值计算



数学抽象性、严密科学性、广泛应用性、高度技术性

数值计算方法

特点

① 可行性：面向计算机，四则运算和逻辑运算

特点

① 可行性：面向计算机, 四则运算和逻辑运算

② 可靠性：理论基础 (收敛性、稳定性、误差分析)

特点

① 可行性：面向计算机, 四则运算和逻辑运算

② 可靠性：理论基础 (收敛性、稳定性、误差分析)

③ 有效性：计算时间短, 占用内存小

特点

① 可行性：面向计算机，四则运算和逻辑运算

② 可靠性：理论基础 (收敛性、稳定性、误差分析)

③ 有效性：计算时间短，占用内存小

"不太严谨" 的严谨的数学课程！！！

学习重点

① 理解算法的设计原理和思路

学习重点

① 理解算法的设计原理和思路

② 掌握数值方法的相关理论基础

学习重点

① 理解算法的设计原理和思路

② 掌握数值方法的相关理论基础

③ 学会数值方法的计算机实现

学习重点

① 理解算法的设计原理和思路

② 掌握数值方法的相关理论基础

③ 学会数值方法的计算机实现

④ 分析数值方法的优缺点

数值计算方法

学习重点

① 理解算法的设计原理和思路

② 掌握数值方法的相关理论基础

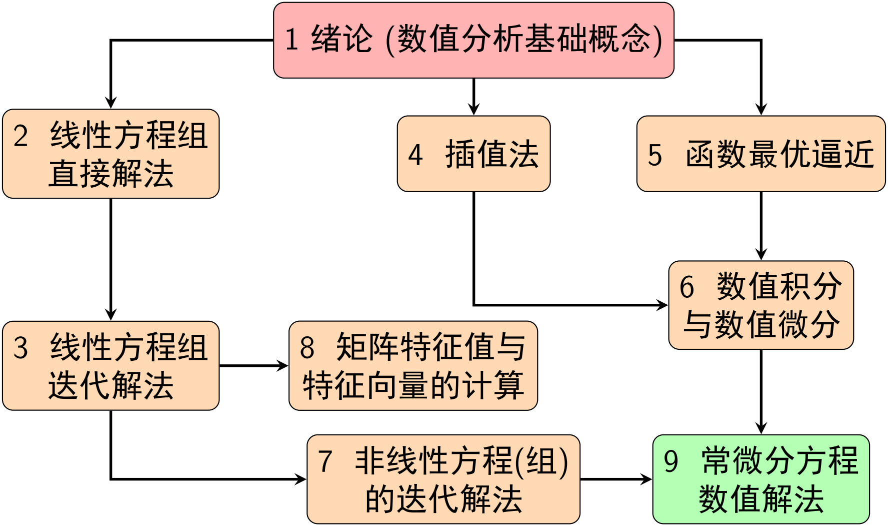
③ 学会数值方法的计算机实现

④ 分析数值方法的优缺点

数值计算方法

- 课程基础　高等数学、线性代数、计算机语言
- 参考教材
  1. 李乃成，梅立泉. 数值分析，科学出版社, 2010.
  2. A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, *Numerical Mathematics*, Springer Science Business Media Inc., 2000.
  3. 邓建中，刘之行. 计算方法，西安交通大学出版社, 2001.
- 考核方式　上机作业 20%，考试成绩 80%

内容大纲


1 绪论 (数值分析基础概念)
2 线性方程组直接解法
4 插值法
5 函数最优逼近
6 数值积分与数值微分
3 线性方程组迭代解法
8 矩阵特征值与特征向量的计算
7 非线性方程(组)的迭代解法
9 常微分方程数值解法

第一章 绪论

主要内容

1. 计算方法的一般概念

2. 误差、数据误差影响的估计

3. 算法的数值稳定性

1. 计算方法的一般概念

计算方法的一般概念

- 算法：由四则基本运算和逻辑运算构成

计算方法的一般概念

- 算法：由四则基本运算和逻辑运算构成
- 好算法：运算少，存储小，易编程、结果可靠

计算方法的一般概念

- 算法：由四则基本运算和逻辑运算构成
- 好算法：运算少，存储小，易编程、结果可靠
- 稳定性：误差可控，每一步误差不会对最终计算结果产生过大影响

计算方法的一般概念

- 算法：由四则基本运算和逻辑运算构成
- 好算法：运算少，存储小，易编程、结果可靠
- 稳定性：误差可控，每一步误差不会对最终计算结果产生过大影响
- 收敛性：增加计算量，近似解充分接近真解

计算方法的一般概念

- 算法：由四则基本运算和逻辑运算构成
- 好算法：运算少，存储小，易编程、结果可靠
- 稳定性：误差可控，每一步误差不会对最终计算结果产生过大影响
- 收敛性：增加计算量，近似解充分接近真解
- 计算复杂性：时间复杂性（运算次数）和空间复杂性（存储空间）

2. 误差、数据误差影响的估计

误差的来源与分类

(1) 模型误差

(2) 观测误差

(3) 截断误差

(4) 舍入误差

误差

设 x 是准确值, $\tilde{x}$ 是 x 的一个近似值,

- **绝对误差**: $\Delta x = x - \tilde{x}$ 或 $|\Delta x|$

  绝对误差界: $|\Delta x| \leq \varepsilon$

误差

设 x 是准确值, $\tilde{x}$ 是 x 的一个近似值,

- **绝对误差**: $\Delta x = x - \tilde{x}$ 或 $|\Delta x|$

  绝对误差界: $|\Delta x| \leq \varepsilon$

- **相对误差**: $\delta x = \frac{x-\tilde{x}}{x}$ 或 $|\delta x|$

  相对误差界: $|\delta x| \leq \varepsilon_r$

误差

设 x 是准确值, $\tilde{x}$ 是 x 的一个近似值,

- ✧ **绝对误差**：$\Delta x = x - \tilde{x}$ 或 $|\Delta x|$

  绝对误差界：$|\Delta x| \leq \varepsilon$
- ✧ **相对误差**：$\delta x = \frac{x-\tilde{x}}{x}$ 或 $|\delta x|$

  相对误差界：$|\delta x| \leq \varepsilon_r$

例 1：设 $a = -2.18, b = 2.1200$ 分别是由准确值 x 和 y 经过四舍五入得到的近似值，问：$\varepsilon(a), \varepsilon(b), \varepsilon_r(a), \varepsilon_r(b)$ 各是多少？

准确数字

设

$$x = \pm x_1 x_2 \cdots x_m . x_{m+1} \cdots x_{m+n} x_{m+n+1} \cdots ,$$

若 x 的近似值 $\widetilde{x}$ 取到小数点后第 n 位，即有

$$\widetilde{x} = \pm x_1 x_2 \cdots x_m . x_{m+1} \cdots \widetilde{x}_{m+n}$$

其中

$$\widetilde{x}_{m+n} = \begin{cases} x_{m+n}, & x_{m+n+1} \leq 4 \\ x_{m+n} + 1, & x_{m+n+1} \geq 5 \end{cases}$$

这时

$$|x - \widetilde{x}| \leq 0.\underbrace{00\cdots0}_{n\ 个}5 = 0.5 \times 10^{-n} = \frac{1}{2} \times 10^{-n},$$

则称近似值 $\widetilde{x}$ 准确到 n 位小数, 并将从该位起直到最左端的非零数字之间的一切数字称为近似值 $\widetilde{x}$ 的准确数字 (有效数字).

准确数字

例 2：2.140012 的两个近似值 2.14 和 2.1400 是不一样的.

① $|2.140012 - 2.14| < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$

准确到两位小数，有 3 位准确数字

② $|2.140012 - 2.1400| < 0.00005 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$

准确到 4 位小数，有 5 位准确数字

准确数字

例 2：2.140012 的两个近似值 2.14 和 2.1400 是不一样的.

① $|2.140012 - 2.14| < 0.005 = \frac{1}{2} \times 10^{-2}$

准确到两位小数，有 3 位准确数字

② $|2.140012 - 2.1400| < 0.00005 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$

准确到 4 位小数，有 5 位准确数字

例 3：π 的两个近似值 $\pi_1 = 3.142, \pi_2 = 3.14159$

① $|\pi - \pi_1| = 0.0004\cdots \leq 0.0005 = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$

准确到 3 位小数，有 4 位准确数字

① $|\pi - \pi_2| = 0.0000026\cdots \leq 0.000005 = \frac{1}{2} \times 10^{-5}$

准确到 5 位小数，有 6 位准确数字

计算机中数的表示

浮点表示法：将一个数分为指数和尾数两部分来表示.

设计算机采用 β 进制 (二进制、八进制、十进制或十六进制), 字长为 t 位. 按舍入原则, 非零实数 x 在计算机中表示为

$$fl(x) = \tilde{x} = \pm \underbrace{0.x_1x_2\cdots x_t}_{\text{尾数}} \times \underbrace{\beta^k}_{\text{指数}}$$

其中 $x_1 \in \{1, 2, \cdots, \beta - 1\}, x_i \in \{0, 1, \cdots, \beta - 1\}, i = 2, 3, \cdots, t$. $k \in \mathbb{Z}$ 为阶码. 若记阶码的取值范围为 $L \le k \le U$ $(L < 0, U > 0)$, 则

$$fl_{\min} = 0.1\underbrace{0\cdots0}_{t-1\text{ 个}} \times \beta^L = \beta^{L-1},$$

$$fl_{\max} = 0.\underbrace{(\beta-1)\cdots(\beta-1)}_{t\text{ 个}} \times \beta^U = \beta^U(1-\beta^{-t}).$$

计算机中数的表示

“上溢”： $|x| > fl_{\max}$, 计算机无法表示, 运行中断.

“下溢”： $|x| < fl_{\min}$, 计算机令 $fl(x) = 0$, 继续运行, 结果难预料.

计算机中数的表示

"上溢"： $|x| > fl_{\max}$，计算机无法表示，运行中断.

"下溢"： $|x| < fl_{\min}$，计算机令 $fl(x) = 0$，继续运行，结果难预料.

由于计算机字长有限，实数 x 一般只能用最接近它的浮点数 $fl(x)$ 表示，由此产生舍入误差. 例如，

$$x = \pm 0.x_1x_2\cdots x_tx_{t+1}\cdots \times \beta^k, \quad fl(x) = \pm 0.x_1x_2\cdots \widetilde{x}_t \times \beta^k.$$

计算机中数的表示

"上溢"：$|x| > fl_{\max}$，计算机无法表示，运行中断.

"下溢"：$|x| < fl_{\min}$，计算机令 $fl(x) = 0$，继续运行，结果难预料.

由于计算机字长有限，实数 x 一般只能用最接近它的浮点数 $fl(x)$ 表示，由此产生舍入误差. 例如，

$$x = \pm 0.x_1x_2\cdots x_tx_{t+1}\cdots \times \beta^k, \quad fl(x) = \pm 0.x_1x_2\cdots \widetilde{x}_t \times \beta^k.$$

- 绝对误差：

$$|x - fl(x)| \le \frac{1}{2}\beta^{-t} \times \beta^k = \frac{1}{2}\beta^{k-t}$$

计算机中数的表示

- 相对误差：$$\boxed{\frac{|x - fl(x)|}{|x|} \le \frac{\frac{1}{2}\beta^{k-t}}{\beta^{k-1}} = \frac{1}{2}\beta^{1-t}}$$
- 相对误差界 $\frac{1}{2}\beta^{1-t}$ 只与计算机的进制和字长有关，称为计算机的相对精度.
- 对阶：计算机在运算时，先使阶小的数与阶大的数的阶码相同，再做运算，最后对结果进行规格化. 如 $a = 0.123 \times 10^3$, $b = 0.245 \times 10^{-1}$，则在三位十进制限制下

$$\begin{aligned} a + b &= 0.123 \times 10^3 + 0.245 \times 10^{-1} \\ &= 0.123 \times 10^3 + 0.0000245 \times 10^3 \\ &= 0.123 \times 10^3 + 0.000 \times 10^3 = 0.123 \times 10^3 = a. \end{aligned}$$

条件数

设原始数据 x 的计算结果为 $f(x)$, $\widetilde{x}$ 是 x 的一个近似值, 其对应的计算结果为 $f(\widetilde{x})$. 若存在常数 K 使得

$$\left|\frac{f(x)-f(\widetilde{x})}{f(x)}\right| \leq K\left|\frac{x-\widetilde{x}}{x}\right|,$$

则称 K 为问题 f 的条件数 $cond(f)=K$.

条件数与问题的性态

一般来说，所计算问题的原始数据发生小扰动时，问题的解也相应发生扰动.

条件数反映了数据变化对解的变化的影响程度.

- 条件数小：原始数据小扰动引起解的小扰动 $\Longrightarrow$ 良态问题
- 条件数大：原始数据小扰动引起解的大扰动 $\Longrightarrow$ 病态问题

3. 算法的数值稳定性

数值算法的稳定性

定义

如果一个算法在运算过程中舍入误差能够得到控制, 或者舍入误差的积累不影响产生可靠的计算结果, 则称该算法是数值稳定的; 否则, 称其是数值不稳定的.

例如：计算积分

$$I_k = \mathrm{e}^{-1}\int_0^1 x^k \mathrm{e}^x dx, \quad k = 0, 1, \cdots, 7.$$

数值算法的稳定性

例如：计算积分

$$I_k = \mathrm{e}^{-1}\int_0^1 x^k \mathrm{e}^x dx, \quad k = 0, 1, \cdots, 7.$$

算法 1：$I_k = 1 - kI_{k-1}, \quad k = 1, 2, \cdots, 7$

数值算法的稳定性

例如：计算积分

$$I_k = \mathrm{e}^{-1}\int_0^1 x^k \mathrm{e}^x dx, \quad k = 0, 1, \cdots, 7.$$

算法 1：$I_k = 1 - kI_{k-1}, \quad k = 1, 2, \cdots, 7$

算法 2：$I_{k-1} = \frac{1-I_k}{k}, \quad k = 7, 6, \cdots, 1$

数值算法的稳定性

例如：计算积分

$$I_k = \mathrm{e}^{-1}\int_0^1 x^k \mathrm{e}^x dx, \quad k = 0, 1, \cdots, 7.$$

算法 1：$I_k = 1 - kI_{k-1}, \quad k = 1, 2, \cdots, 7$

算法 2：$I_{k-1} = \frac{1-I_k}{k}, \quad k = 7, 6, \cdots, 1$

I_k	I_0	I_1	$\cdots$	I_6	I_7
准确值	0.6321	0.3679	$\cdots$	0.1268	0.1124
算法 1	0.6321	0.3679	$\cdots$	0.1120	0.2160
算法 2	0.6321	0.3679	$\cdots$	0.1268	0.1124

总结

- 一般概念
- 误差
  - 来源与分类：舍入误差、截断误差
  - 绝对误差、相对误差、准确数字
  - 问题的条件数与性态
    - 条件数小 $\Longrightarrow$ 良态
    - 条件数大 $\Longrightarrow$ 病态
- 数值稳定性

总结

计算中应注意的原则

① 选择数值稳定性好的算法

总结

计算中应注意的原则

① 选择数值稳定性好的算法

② 尽量避免两个相近的数相减，避免损失有效数字 (变换算式)

总结

计算中应注意的原则

① 选择数值稳定性好的算法

② 尽量避免两个相近的数相减, 避免损失有效数字 (变换算式)

③ 合理安排运算顺序, 避免大数 “ 吃” 小数 (若干个数相加时绝对值较小者先加)

总结

计算中应注意的原则

① 选择数值稳定性好的算法

② 尽量避免两个相近的数相减，避免损失有效数字 (变换算式)

③ 合理安排运算顺序，避免大数“吃”小数 (若干个数相加时绝对值较小者先加)

④ 尽量避免绝对值很大的数作乘数和绝对值较小的数作除数，以免增加误差

总结

计算中应注意的原则

① 选择数值稳定性好的算法

② 尽量避免两个相近的数相减，避免损失有效数字 (变换算式)

③ 合理安排运算顺序，避免大数“吃”小数 (若干个数相加时绝对值较小者先加)

④ 尽量避免绝对值很大的数作乘数和绝对值较小的数作除数，以免增加误差

⑤ 尽量减少乘除法的运算次数，降低计算复杂性

第二章
解线性方程组的直接法

主要内容

在实际应用中，很多问题都归结为求解如下的线性方程组：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad\qquad \cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad Ax = b$$

其中

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

线性方程组

在实际应用中，很多问题都归结为求解如下的线性方程组：

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\
\qquad\qquad \cdots\cdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n,
\end{cases}
\quad \Longrightarrow \quad Ax = b
$$

其中

$$
A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.
$$

若 A 非奇异 ($|A| \neq 0$)，则方程组的解存在且唯一.

线性方程组的求解方法

- 直接法（A 稠密）：在无舍入误差的前提下，经过有限次运算可求得方程组的精确解

  基本原理：

  $$Ax = b\ (\text{一般形式}) \xRightarrow{\text{等价变换}} Gx = d\ (\text{简单形式})$$

  G：结构简单的矩阵，如对角矩阵、三角矩阵等

线性方程组的求解方法

- 直接法（A 稠密）：在无舍入误差的前提下，经过有限次运算可求得方程组的精确解

  基本原理：

  $Ax = b$ (一般形式) $\xRightarrow{\text{等价变换}}$ $Gx = d$ (简单形式)

  G：结构简单的矩阵，如对角矩阵、三角矩阵等

- 迭代法（A 稀疏）：构造向量序列，逐步逼近方程组的解

1. 高斯消去法

高斯消去法

例 1：求解下列线性方程组

$$(1)\ \begin{cases} x_1 + x_2 = 4, \\ x_1 - x_2 = 2, \end{cases} \qquad (2)\ \begin{cases} 2x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 2, \\ 2x_1 + x_2 - x_3 = 1, \\ x_1 + x_2 + x_3 = 6. \end{cases}$$

高斯消去法

核心思想：**降维**

主要步骤：

- 消元过程：对增广矩阵做初等行变换，使系数矩阵变成上三角矩阵
- 回代过程：由最后一个方程求解出 x_n，逐步回代，依次求解出 $x_{n-1}, \cdots, x_1$.

高斯消去法—消元过程

记

$$A^{(0)} = A,\quad a_{ij}^{(0)} = a_{ij},\quad b^{(0)} = b,\quad b_i^{(0)} = b_i.$$

① 设 $a_{11}^{(0)} \neq 0$，第 1 个方程保留不动，将第 $2 \sim n$ 个方程中 x_1 的系数消为零，即第 1 个方程乘以 $-a_{i1}^{(0)}/a_{11}^{(0)}$ $(i = 2, \cdots, n)$ 加到第 i 个方程上去，得到

$$\left\{\begin{array}{r} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(0)}x_n = b_1^{(0)}, \\ a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)}, \\ \cdots\cdots \\ a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)}, \end{array}\right. \quad \Longrightarrow \quad A^{(1)}x = b^{(1)}$$

高斯消去法—消元过程

其中

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & a_{32}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} \\ & \vdots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad b^{(1)} = \begin{pmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

若记 $l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, \quad i = 2, \cdots, n$, 则

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(1)} &= a_{ij}^{(0)} - l_{i1} a_{1j}^{(0)}, \quad i = 2, \cdots, n;\ j = 2, \cdots, n, \\ b_i^{(1)} &= b_i^{(0)} - l_{i1} b_1^{(0)}, \quad i = 2, \cdots, n. \end{aligned}$$

高斯消去法—消元过程

② 设 $a_{22}^{(1)} \neq 0$，第 2 个方程保留不动，将第 $3 \sim n$ 个方程中 x_2 的系数消为零，即第 2 个方程乘以 $-a_{i2}^{(1)}/a_{22}^{(1)}$ $(i = 3, \cdots, n)$ 加到第 i 个方程上去，得到

$$\left\{\begin{aligned} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + a_{13}^{(0)}x_3 + \cdots + a_{1n}^{(0)}x_n &= b_1^{(0)}, \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n &= b_2^{(1)}, \\ a_{33}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(2)}x_n &= b_3^{(2)}, \\ \cdots\cdots \\ a_{n3}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n &= b_n^{(2)}, \end{aligned}\right. \quad \Longrightarrow \quad A^{(2)}x = b^{(2)}$$

高斯消去法—消元过程

其中

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad b^{(2)} = \begin{pmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

若记 $l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}, \quad i = 3, \cdots, n,$ 则

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - l_{i2} a_{2j}^{(1)}, \quad i = 3, \cdots, n; \; j = 3, \cdots, n,$$
$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - l_{i2} b_2^{(1)}, \quad i = 3, \cdots, n.$$

高斯消去法—消元过程

重复以上过程，进行 $k-1$ 次消元后得到

$$\begin{cases} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + \cdots + a_{1k}^{(0)}x_k + \cdots + a_{1n}^{(0)}x_n = b_1^{(0)}, \\ \qquad\quad a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2k}^{(1)}x_k + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \cdots\cdots \\ \qquad\qquad\quad a_{kk}^{(k-1)}x_k + \cdots + a_{kn}^{(k-1)}x_n = b_k^{(k-1)}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \cdots\cdots \\ \qquad\qquad\quad a_{nk}^{(k-1)}x_k + \cdots + a_{nn}^{(k-1)}x_n = b_n^{(k-1)}, \end{cases}$$

用矩阵表示为

$$A^{(k-1)}x = b^{(k-1)}$$

高斯消去法—消元过程

其中

$$A^{(k-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{pmatrix},$$

以及

$$b^{k-1} = \left(b_1^{(0)}, b_2^{(1)}, \cdots, b_k^{(k-1)}, \cdots, b_n^{(k-1)}\right)^T.$$

高斯消去法—消元过程

第 k 步：设 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$，第 k 个方程保留不动，将第 $k+1 \sim n$ 个方程中 x_k 的系数消为零，即第 k 个方程乘以 $-a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)}$ 加到第 i $(i = k+1, \cdots, n)$ 个方程上去，得到

$$
\left\{
\begin{aligned}
a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + \cdots + a_{1k}^{(0)}x_k + a_{1,k+1}^{(0)}x_{k+1} + \cdots + a_{1n}^{(0)}x_n &= b_1^{(0)}, \\
a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2k}^{(1)}x_k + a_{2,k+1}^{(1)}x_{k+1} + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n &= b_2^{(1)}, \\
\cdots\cdots \\
a_{kk}^{(k-1)}x_k + a_{k,k+1}^{(k-1)}x_{k+1} + \cdots + a_{kn}^{(k-1)}x_n &= b_k^{(k-1)}, \\
a_{k+1,k+1}^{(k)}x_{k+1} + \cdots + a_{k+1,n}^{(k)}x_n &= b_k^{(k)}, \\
\cdots\cdots \\
a_{n,k+1}^{(k)}x_{k+1} + \cdots + a_{nn}^{(k)}x_n &= b_n^{(k)},
\end{aligned}
\right.
$$

高斯消去法—消元过程

用矩阵表示为 $$A^{(k)}x = b^{(k)}$$

其中

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

高斯消去法—消元过程

以及

$$b^{(k)} = \left(b_1^{(0)}, b_2^{(1)}, \cdots, b_k^{(k-1)}, b_{k+1}^{(k)}, \cdots, b_n^{(k)}\right)^T.$$

若记 $l_{i,k} = \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}, \quad i = k+1, \cdots, n$, 则

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik}a_{kj}^{(k-1)}, \quad i = k+1, \cdots, n; \;\; j = k+1, \cdots, n,$$
$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - l_{ik}b_k^{(k-1)}, \quad i = k+1, \cdots, n.$$

高斯消去法—消元过程

如此重复 $n-1$ 次后，得到上三角方程组

$$\begin{cases} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(0)}x_n = b_1^{(0)}, \\ \qquad\qquad a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \cdots\cdots \\ \qquad\qquad a_{n,n-1}^{(n-2)}x_{n-1} + a_{nn}^{(n-2)}x_n = b_{n-1}^{(n-2)}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)}, \end{cases}$$

用矩阵表示为

$$A^{(n-1)}x = b^{(n-1)}$$

高斯消去法—消元过程

其中

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

以及

$$b^{(n-1)} = \left(b_1^{(0)}, b_2^{(1)}, \cdots, b_{n-1}^{(n-2)}, b_n^{(n-1)}\right)^T.$$

高斯消去法—回代过程

求解上述上三角线性方程组，由最后一个方程解出 $x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}$，将 x_n 代入倒数第2个方程，则可求出 x_{n-1}, 同理依次求得 $x_{n-2}, \cdots, x_1$.

高斯消去法—回代过程

求解上述上三角线性方程组，由最后一个方程解出 $x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}$，将 x_n 代入倒数第2个方程，则可求出 x_{n-1}，同理依次求得 $x_{n-2}, \cdots, x_1$.

因此得到回代过程的计算公式如下：

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}, \\ x_k = \dfrac{b_k^{(k-1)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k-1)} x_j}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad k = n-1, \cdots, 1. \end{cases}$$

高斯消去法中的乘除法运算量

① 消去过程 $$\begin{cases} l_{i,k} = a_{i,k}^{(k-1)}/a_{k,k}^{(k-1)}, & i = k+1,\cdots,n, \\ a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik}a_{kj}^{(k-1)}, & i,j = k+1,\cdots,n, \\ b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - l_{ik}b_k^{(k-1)}, & i = k+1,\cdots,n. \end{cases}$$

$$N_1 = \sum_{k=1}^{n-1}\left[(n-k)^2 + 2(n-k)\right] = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n$$

高斯消去法中的乘除法运算量

② 回代过程

$$
\begin{cases}
x_n = b_n^{(n-1)} / a_{nn}^{(n-1)}, \\
x_k = \left(b_k^{(k-1)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k-1)} x_j \right) / a_{kk}^{(k-1)}, \ \ k = n-1, \cdots, 1.
\end{cases}
$$

$$
N_2 = \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) + n = \frac{1}{2} n^2 + \frac{1}{2} n
$$

高斯消去法中的乘除法运算量

高斯消去法：

$$N = N_1 + N_2 = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n \implies N \sim O(n^3)$$

Cramer 法则：

$$x_i = \frac{|A_i|}{|A|}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

$$N = (n+1)!(n-1) + n \implies N \sim O((n+1)!)$$

当 $n = 10$ 时，

$$n^3 = 1000, \quad (n+1)! = 39916800, \quad \frac{(n+1)!}{n^3} = 39916.8$$

高斯消去法顺利进行的条件

由消元过程可知，高斯消去法得以顺利进行的前提是

$$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0, \quad k = 1, 2, \cdots, n.$$

定理

$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0 \ (k = 1, 2, \cdots, n)$ 的充分必要条件是线性方程组的系数矩阵 A 的各阶顺序主子式不等于零，即

$$D_1 = a_{11} \neq 0, \quad D_k = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \neq 0, k = 2, \cdots, n$$

高斯消去法顺利进行的条件

条件 1 系数矩阵 A 的各阶顺序主子式不等于零.

条件 2 系数矩阵 A 是对称正定矩阵.

条件 3 系数矩阵 A 是严格对角占优矩阵.

高斯消去法顺利进行的条件

条件 1　系数矩阵 A 的各阶顺序主子式不等于零.

条件 2　系数矩阵 A 是对称正定矩阵.

条件 3　系数矩阵 A 是严格对角占优矩阵.

定义

若矩阵 A 的元素满足

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| < |a_{ii}|, \quad i = 1, 2, \cdots, n,$$

则称矩阵 A 为严格对角占优矩阵.

列主元高斯消去法

高斯消去法要求 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0 \ (k = 1, 2, \cdots, n)$

- A 非奇异并不能保证 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$
- 即使 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, 但 $|a_{kk}^{(k-1)}|$ 很小，计算 $\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$ 时会引起舍入误差剧增，导致数值不稳定

列主元高斯消去法

高斯消去法要求 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0 \ (k = 1, 2, \cdots, n)$

- A 非奇异并不能保证 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$
- 即使 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, 但 $|a_{kk}^{(k-1)}|$ 很小，计算 $\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$ 时会引起舍入误差剧增，导致数值不稳定

避免出现小主元

选主元技术 $\Longrightarrow$ 选主元的高斯消去法

列主元高斯消去法

例 2：用选主元的高斯消去法求解下列线性方程组

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

列主元高斯消去法

基本思想：在第 k 步消元之前, 从 $A^{(k-1)}$ 的第 k 列元素 $a_{ik}^{(k-1)}$ $(i=k,k+1,\cdots,n)$ 中选出绝对值最大的元素 $a_{mk}^{(k-1)}$, 交换第 m 个方程与第 k 个方程, 使新的 $a_{kk}^{(k-1)}$ (即 $a_{mk}^{(k-1)}$) 绝对值最大, 然后开始消元.

列主元高斯消去法

基本思想：在第 k 步消元之前，从 $A^{(k-1)}$ 的第 k 列元素 $a_{ik}^{(k-1)}$ $(i=k,k+1,\cdots,n)$ 中选出绝对值最大的元素 $a_{mk}^{(k-1)}$，交换第 m 个方程与第 k 个方程，使新的 $a_{kk}^{(k-1)}$ (即 $a_{mk}^{(k-1)}$) 绝对值最大，然后开始消元.

算法优势：

- 只需 A 非奇异即可，并不要求 A 的各阶顺序主子式不为零. 实用性强
- $|a_{ik}^{(k-1)}|/|a_{kk}^{(k-1)}| \leqslant 1 \ (i=k+1,\cdots,n)$ 有利于控制舍入误差. 稳定性好

列主元高斯消去法

例 3：在四位十进制的限制下，分别用高斯消去法和列主元高斯消去法求解如下线性方程组

$$\begin{cases} 0.012x_1 + 0.01x_2 + 0.167x_3 = 0.6781 \\ x_1 + 0.8334x_2 + 5.91x_3 = 12.1 \\ 3200x_1 + 1200x_2 + 4.2x_3 = 981 \end{cases}$$

列主元高斯消去法

例 3：在四位十进制的限制下，分别用高斯消去法和列主元高斯消去法求解如下线性方程组

$$\begin{cases} 0.012x_1 + 0.01x_2 + 0.167x_3 = 0.6781 \\ x_1 + 0.8334x_2 + 5.91x_3 = 12.1 \\ 3200x_1 + 1200x_2 + 4.2x_3 = 981 \end{cases}$$

① 高斯消去法：$x_1 = -104.0,\ x_2 = 100.0,\ x_3 = 5.546$

② 列主元高斯消去法：$x_1 = 17.46,\ x_2 = -45.77,\ x_3 = 5.546$

③ 精确解：$x_1 = 17.46,\ x_2 = -45.76,\ x_3 = 5.546$