现代数值计算方法

第三章 解线性方程组的直接法

第三章 解线性方程组的直接法

§3.2 列主元 Gauss 消去法及程序实现

顺序 Gauss 消去法的计算过程是不可靠的, 一旦出现 $a_{kk}^{(k)}=0$, 计算就无法进行下去. 即使对所有 $k=1,2,\cdots,n$, $a_{kk}^{(k)}\neq 0$, 也不能保证计算过程是数值稳定的.

例 3.4 设有线性方程组

$$\begin{cases} 0.0001x_1+1.0x_2=1.0, \\ 1.0x_1+1.0x_2=2.0. \end{cases}$$

其精确解为

$$x_1=\frac{10000}{9999}\approx 1.00010,\quad x_2=\frac{9998}{9999}\approx 0.99990$$

现在假定用尾数为 4 位十进制字长的浮点数来求解.

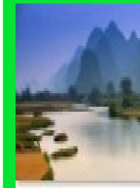
解 消元过程: 根据 4 位浮点数运算规则 $1.0 - 10000.0 = (0.00001 - 0.1)10^5 = (0.0000 - 0.1)10^5 = -10000.0$ (舍入), 同理, $2.0 - 10000.0 = -10000.0$,

$$\begin{pmatrix} 0.0001 & 1.0 & 1.0 \\ 1.0 & 1.0 & 2.0 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2 - 10^4 r_1} \begin{pmatrix} 0.0001 & 1.0 & 1.0 \\ 0 & 1.0 - 10000.0 & 2.0 - 10000.0 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{舍入}} \begin{pmatrix} 0.0001 & 1.0 & 1.0 \\ 0 & -10000.0 & -10000.0 \end{pmatrix}.$$

回代过程:

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + 1.0x_2 = 1.0, \\ \qquad -10000.0x_2 = -10000.0. \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} x_2 = 1.0, \\ x_1 = 0.0. \end{cases}$$



代入原方程组验算, 发现结果严重失真.

分析结果失真的原因发现, 由于第一列的主元素 0.0001 绝对值过于小, 当它在消元过程中作分母时把中间过程数据放大 10000 倍, 使中间结果 "吃" 掉了原始数据, 从而造成数值不稳定.

针对以上问题, 考虑选用绝对值大的数作为主元素.

消元过程:

$$\begin{pmatrix} 0.0001 & 1.0 & 1.0 \\ 1.0 & 1.0 & 2.0 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} 1.0 & 1.0 & 2.0 \\ 0.0001 & 1.0 & 1.0 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 - 0.0001 r_1} \begin{pmatrix} 1.0 & 1.0 & 2.0 \\ 0 & 1.0 - 0.0001 & 1.0 - 0.0002 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{舍入}} \begin{pmatrix} 1.0 & 1.0 & 2.0 \\ 0 & 1.0 & 1.0 \end{pmatrix}.$$

这里, 舍入过程 $1.0-0.0001=(0.1-0.00001)10^1$ (舍入), 同理 $1.0-0.0002=1.0$.

回代过程:

$$\left\{\begin{aligned} 1.0x_1+1.0x_2&=2.0,\\ 1.0x_2&=1.0. \end{aligned}\right. \Longrightarrow \left\{\begin{aligned} x_2&=1.0,\\ x_1&=1.0. \end{aligned}\right.$$

代入原方程组验算, 发现结果基本合理.

上述例子说明了选主元素的重要性. 下面阐述列主元 Gauss 消去法的基本思想. 记 $A^{(1)}=A$, 在 Gauss 消元过程的第 1 步, 取的第 1 列中绝对值最大的元素 $a_{r_1 1}^{(1)}$, 即

$$|a_{r_1 1}^{(1)}|=\max_{1\le i\le n}|a_{i1}^{(1)}|$$

作为主元素. 若 $r_1>1$, 交换第 r_1 行和第 1 行.

一般地，在 Gauss 消元过程的第 k 步，取

$$|a_{r_k k}^{(k)}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k)}| \tag{3.6}$$

作为主元素. 若 $r_k > k$, 交换第 r_k 行和第 k 行.

列主元 Gauss 消去法算法步骤如下：

算法 3.2 (列主元 Gauss 消去法)

步 1　输入系数矩阵 A, 右端项 b, 置 $k := 1$;

步 2　对 $k = 1, \cdots, n-1$ 进行如下操作：

(1)　选列主元，确定 r_k, 使

$$|a_{r_k k}^{(k)}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k)}|,$$

若 $a_{r_k k}^{(k)} = 0$, 则停止计算，否则，进行下一步；

(2)　若 $r_k > k$, 交换 $(A^{(k)}, b^{(k)})$ 的第 k, r_k 两行；

(3)　消元：对 $i, j = k+1, \cdots, n$, 计算

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, \quad a_{ik}^{(k+1)} = 0,$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, \quad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}.$$

步 3 回代

$$x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)},$$

对 $k = n-1, \cdots, 1$, **计算**

$$x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) / a_{kk}^{(k)}.$$

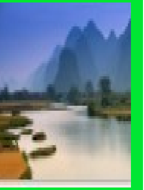
根据算法 3.2, **给出** MATLAB **程序如下**:

- 列主元 Gauss 消去法 MATLAB 程序

```
%magauss2.m
function x=magauss2(A,b,flag)
%用途: 列主元Gauss消去法解线性方程组Ax=b
```

```
%格式: x=magauss(A,b,flag), A为系数矩阵, b为右端项,
%        若flag=0,则不显示中间过程, 否则显示中间过程,
%        默认为0, x为解向量
if nargin<3,flag=0;end
n=length(b);
for k=1:(n-1)
   %选主元
   [ap,p]=max(abs(A(k:n,k)));
   p=p+k-1;
   if p>k
      t=A(k,:); A(k,:)=A(p,:); A(p,:)=t;
      t=b(k); b(k)=b(p); b(p)=t;
   end
```

```
    %消元
    m=A(k+1:n,k)/A(k,k);
    A(k+1:n,k+1:n)=A(k+1:n,k+1:n)-m*A(k,k+1:n);
    b(k+1:n)=b(k+1:n)-m*b(k);
    A(k+1:n,k)=zeros(n-k,1);
    if flag~=0, Ab=[A,b], end
end
% 回代
x=zeros(n,1);
x(n)=b(n)/A(n,n);
for k=n-1:-1:1
    x(k)=(b(k)-A(k,k+1:n)*x(k+1:n))/A(k,k);
end
```



例 3.5 利用程序 magauss2.m 计算下列线性方程组的解

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 4 & -3 & 1 \\ -1 & 1 & 2 & 1 & 3 \\ 4 & 2 & 3 & 3 & -1 \\ -3 & 1 & 3 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & -1 & 4 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 14 \\ 4 \\ 16 \\ 18 \end{pmatrix}$$

解 在 MATLAB 命令窗口执行

```
>> A=[2 -1 4 -3 1;-1 1 2 1 3;4 2 3 3 -1;
      -3 1 3  2 4; 1 3 -1 4 4];
>> b=[11 14 4 16 18]';
>> x=magauss2(A,b); x'
```

得计算结果：

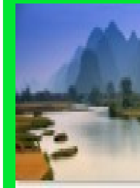
```
x =

   1.0000   2.0000   1.0000  -1.0000   4.0000
```

§3.3 解三对角方程组的追赶法

在科学与工程计算中，经常遇到求解三对角方程组的问题：

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}
\tag{3.7}
$$

将 Gauss 消去法应用于三对角方程组得到所谓“追赶法”. 具体操作过程为：



Back
Close

追：

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & & d_1 \\
a_2 & b_2 & c_2 & & & d_2 \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\
 & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & d_{n-1} \\
 & & & a_n & b_n & d_n
\end{pmatrix}
$$

$$
\to \begin{pmatrix}
\bar{b}_1 & c_1 & & & & \bar{d}_1 \\
 & \bar{b}_2 & c_2 & & & \bar{d}_2 \\
 & & \ddots & \ddots & & \vdots \\
 & & & \bar{b}_{n-1} & c_{n-1} & \bar{d}_{n-1} \\
 & & & & \bar{b}_n & \bar{d}_n
\end{pmatrix}
$$

其中

$$\begin{cases} \bar{b}_1 = b_1, \quad \bar{d}_1 = d_1, \\ \bar{b}_k = b_k - \dfrac{a_k}{\bar{b}_{k-1}} c_{k-1}, \quad (k = 2, \cdots, n) \\ \bar{d}_k = d_k - \dfrac{a_k}{\bar{b}_{k-1}} \bar{d}_{k-1} \end{cases} \tag{3.8}$$

赶：

$$x_n = \frac{\bar{d}_n}{\bar{b}_n}, \quad x_k = \frac{\bar{d}_k - c_k x_{k+1}}{\bar{b}_k}, \quad k = n-1, \cdots, 2, 1. \tag{3.9}$$

追赶法不需要对零元素计算, 只有 $6n - 5$ 次乘除法计算量, 且当系数矩阵对角占优时数值稳定, 是解三对角方程组的优秀算法.

下面给出追赶法的 MATLAB 程序

- 追赶法 MATLAB 程序

```
%machase.m
```

Back
Close

```
function x= machase(a,b,c,d)
%用途：追赶法解三对角方程组Ax=d
%格式：x= machase(a,b,c,d)  a为次下对角线元素向量，
%      b为主对角元素向量，c为次上对角线元素向量，
%      d为右端向量,x返回解向量
n=length(a);
for k=2:n
  b(k)=b(k)-a(k)/b(k-1)*c(k-1);
  d(k)=d(k)-a(k)/b(k-1)*d(k-1);
end
x(n)=d(n)/b(n);
for k=n-1:-1:1
  x(k)=(d(k)-c(k)*x(k+1))/b(k);
```

```
end
```

例 3.6 用追赶法通用程序 machase.m 计算下列三对角方程组的解

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & 4 & 1 \\ & & & & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{49} \\ x_{50} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \\ 6 \\ \vdots \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix}$$

解 在 MATLAB 命令窗口执行：

```
>> a=ones(50,1); b=4*ones(50,1); c=ones(50,1);
>> d=6*ones(50,1); d(1)=5; d(50)=5;
>> x=machase(a,b,c,d)
```

得到计算结果：$x = (x_1, x_2, \cdots, x_{50}) = (1.0, 1.0, \cdots, 1.0).$

例 3.7 若方程组 (3.7) 的系数矩阵的元素满足条件:

$$|b_1| > |c_1| > 0,\ \ |b_n| > |a_n| > 0,$$

$$|b_i| > |a_i| + |c_i|,\ \ a_i c_i \neq 0, \quad i = 2, \cdots, n-1,$$

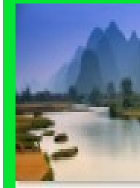
则追赶法是可行的.

证 由 (3.8)-(3.9) 可知, 只需证明 $\bar{b}_k \neq 0$, $(k = 1, 2, \cdots, n)$ 即可. 显然 $\bar{b}_1 = b_1 \neq 0$, 且 $|\bar{b}_1| = |b_1| > |c_1|$. 设 $|\bar{b}_{k-1}| > |c_{k-1}|$, 则

$$|\bar{b}_k| \geq |b_k| - |a_k| \cdot \left|\frac{c_{k-1}}{\bar{b}_{k-1}}\right| > |b_k| - |a_k| > |c_k|,$$

故 $b_k \neq 0$, $k = 2, \cdots, n$. 从而, 追赶法是可行的. $\square$

作业: P58: 3.1; 3.10.



Back

Close