计 算 方 法

第三章 线性方程组的数值解法

线性方程组问题

问题

n阶线性方程组问题

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \Longleftrightarrow \quad AX = b$$

其中

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

且A为n阶**非奇异**方阵

线性方程组数值解法

问题 $\boxed{Ax=b}$ $A\in R^{n\times n}$， $b\in R^{n}$

- 科学和工程计算中,很多问题最终都需要求解线性方程组,且规模越来越大;
- Cramer法则: $\boxed{x_i = \det(A_i)/\det(A)}$

  乘法>$(n+1)!$ 次，千万亿次计算机解25阶问题至少1万3千年!

解决方法 **线性方程组数值解法**

(1) **直接法:** 适合低阶方程组或某些特殊大型稀疏方程组

(2) **迭代法:** 解大型稀疏方程组的主流算法

本章内容簡介

- § 3.1 Gauss 消元法
- § 3.2 特殊线性方程组的解法及敏度分析
- § 3.3 经典迭代方法

§ 3.1 Gauss消元法

150 BC
九章算术

Johann Carl Friedrich Gauss
(30 April 1777 – 23 February 1855)
German mathematician and physical scientist

1670
Newton

1811
Gauss

Gauss消元法示例

例：直接法解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + 2x_3 = -2 \\ 2x_1 - 3x_2 - 3x_3 = 4 \\ 4x_1 + x_2 + 6x_3 = 3 \end{cases}$$

解：

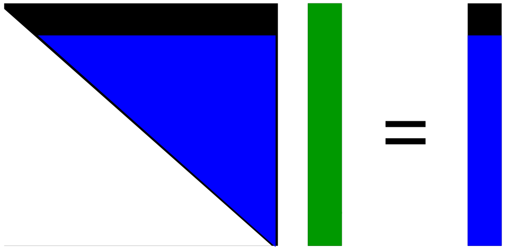
$$(A,b) = \left[\begin{array}{ccc:c} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \\ 4 & 1 & 6 & 3 \end{array}\right] \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 9 & -2 & 11 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 0 & 61 & -61 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{cases} x_3 = -1 \\ x_2 = 8 + 7x_3 = 1 \\ x_1 = -2 + 2x_2 - 2x_3 = 2 \end{cases}$$

§ 3.1.1 Gauss顺序消元法

❑ Gauss消元法

- 思想：化系数矩阵为下三角阵（或上三角阵），然后采用前推（或回代）过程求解



- 适用范围：中小规模（阶数不要太高，如<1000）且没有特殊结构的线性方程组

- Gauss顺序消元法，Gauss选主元消元法

Gauss顺序消元法计算流程

记 $A^{(1)}=(a_{ij}^{(1)})_{n\times n}=A,\ b^{(1)}=(b_1^{(1)},\dots,b_n^{(1)})^T=b$，即 $a_{ij}^{(1)}=a_{ij},\ b_i^{(1)}=b_i$。

Step 1：消去第一列

设 $a_{11}^{(1)}\neq 0$，计算 $m_{i1}=a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}\quad (i=2,\dots,n)$

依次将增广矩阵的第 i 行 $-m_{i1}\times$ 第 1 行，得

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & & A^{(2)} & & b^{(2)} \end{array}\right)$$

其中 $\boxed{\begin{aligned} a_{ij}^{(2)} &= a_{ij}^{(1)}-m_{i1}a_{1j}^{(1)} \\ b_i^{(2)} &= b_i^{(1)}-m_{i1}b_1^{(1)} \end{aligned}}$

$(i,j=2,\dots,n)$

Step 2：消去第二列

设 $a_{22}^{(2)}\neq 0$，计算 $m_{i2}=a_{i2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}\quad (i=3,\dots,n)$

依次将上述矩阵的第 i 行 $-m_{i2}\times$ 第 2 行，得

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & A^{(3)} & & b^{(3)} \end{array}\right)$$

其中 $\boxed{\begin{cases} a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)}-m_{i2}a_{2j}^{(2)} \\ b_i^{(3)} = b_i^{(2)}-m_{i2}b_2^{(2)} \end{cases}}$

$(i,j=3,\dots,n)$

Gauss顺序消元法计算流程

Step k：消去第 k 列

设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，计算 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} \quad (i = k+1, \ldots, n)$

计算

$$\boxed{\begin{aligned} a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \end{aligned}} \quad (\ i = k+1, \ldots, n\ )$$

依此类推，直到Step n-1，原方程化为

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

Step n: 回代求解：

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\ x_i = \left(b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j \right) \Big/ a_{ii}^{(i)} \end{cases} \quad (\ i = n\text{-}1, \ldots, 1\ )$$

Gauss顺序消元法的计算量

● 计算机中做乘除运算的时间远远超过做加减运算时间，故我们只估计 **乘除运算** 的次数

第 k 步：**消第 k 列**

计算 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$ $\quad (i = k+1, \ldots, n)$ $\quad$ $n-k$ 次

计算 $a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}$ $\quad (i, j = k+1, \ldots, n)$ $\quad$ $(n-k)^2$ 次

$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}$ $\quad$ $n-k$ 次

回代求解：

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\ x_i = \left(b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j \right) \Big/ a_{ii}^{(i)} \quad (i = n-1, \ldots, 1) \end{cases}$$

$n(n+1)/2$ 次

Gauss 消去法的乘除运算量为：$\boxed{\dfrac{n^3}{3} + n^2 - \dfrac{n}{3}}$

Gauss顺序消元法的主元

- 主元：$a_{ii}^{(i)} \quad (i=1, 2, \ ..., n)$
- Gauss 消元法能进行到底的条件：主元全不为 0

定理：$a_{ii}^{(i)} \neq 0$ （i=1, 2, ..., n）的充要条件是 A 的顺序主子式不为零，即

$$D_1 = a_{11} \neq 0, \quad D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

推论：$a_{11}^{(1)} = D_1, \quad a_{ii}^{(i)} = D_i / D_{i-1}, \quad i = 2, \ldots, n$

- 主元的绝对值不能过小

Gauss顺序消元法示例

例 4.1 利用 Gauss 顺序消元法求解线性方程组

$$\begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 \\ -2.000 & 1.070 & 5.643 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.000 \\ 2.000 \\ 3.000 \end{bmatrix}.$$

解： 对方程组的增广矩阵进行行变换得

$$(A|b) = \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ -2.000 & 1.070 & 5.643 & 3.000 \end{array}\right]$$

$$\Rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 4001 & 6006 & 2003 \end{array}\right]$$

$$\Rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 0 & 5.000 & 2.000 \end{array}\right]$$

Gauss顺序消元法示例

采用回代法计算上述最后一个矩阵对应的方程组

$$\begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 \\ 0 & 2004 & 3005 \\ 0 & 0 & 5.000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.000 \\ 1002 \\ 2.000 \end{bmatrix}$$

得其解

$$X = (0.000, -0.09980, 0.4000)^T.$$

而原方程组具 4 位有效数字的解是

$$X^* = (-0.4904, -0.05104, 0.3675)^T.$$

由此可知 Gauss 顺序消元法所得解X 的误差为

$$err := \|X - X^*\|_2 \approx 0.4939,$$

相对于原方程组系数阵中的元素而言，解X 的误差过大。其原因是在作消元时，用了小主元 0.001 作除数，致使其他元素的数量级大大地增加，在计算机字长有限的情况下，导致了较大的舍入误差。 ■

§3.1.2 Gauss选主元消元法

完全选主元法：

第 k 步消元时，在剩余的 n-k 阶子矩阵中选取主元

① 先选取全主元：$|a_{i_k j_k}^{(k)}| = \max\limits_{k \le i, j \le n} \left\{ |a_{ij}^{(k)}| \right\} \neq 0$

② if $i_k \neq k$ then 交换第 k 行和第 i_k 行

if $j_k \neq k$ then 交换第 k 列和第 j_k 列

③ 消元

- 列交换改变了 x_i 的顺序，须记录交换次序，解完后再换回来
- 全主元高斯消去法具有更好的稳定性，但很费时，在实际计算中很少使用

选列主元Gauss消元法

❑ 列主元 Gauss 消元法

在第 k 步消元时，在第 k 列的剩余部分选取主元

① 先选取列主元：$|a_{i_k k}^{(k)}| = \max\limits_{k \le i \le n} \left\{ |a_{ik}^{(k)}| \right\} \neq 0$

② if $i_k \neq k$ then 交换第 k 行和第 i_k 行

③ 消元

- 没有列交换，不改变 x_i 的顺序
- 计算量较全主元法少，但稳定性不如全主元法

选列主元法示例

例 4.2 用选列主元法求解例 4.1 中的线性方程组。

解 对方程组的增广矩阵进行选列主元消元得

$$(A|b) \Rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.070 & 5.643 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \end{array}\right]$$

$$\Rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.070 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 2.001 & 3.003 & 1.002 \end{array}\right]$$

$$\Rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.070 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 0 & 1.868 & 0.6870 \end{array}\right]$$

解上述最后一个矩阵对应的方程组得原方程组的解

$$X = (-0.4900, -0.05113, 0.3678)^T$$

其与精确解 $X^* = (-0.4904, -0.05104, 0.3675)^T$ 比较，误差为

$$err := \|X - X^*\|_2 \approx 5.0804e-004. \quad \blacksquare$$

选主元法比较

例1：全主元/列主元

$$\left[\begin{array}{cc|c} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{array}\right] \Rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 10^{-9} & 1 & 1 \end{array}\right]$$

$$\Rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{array}\right]$$

$$\Rightarrow \quad x_2 = 1, \quad x_1 = 1 \quad \checkmark$$

例2：列主元法

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 & 10^9 & 10^9 \\ 1 & 1 & 2 \end{array}\right] \Rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 10^9 & 10^9 \\ 0 & -10^9 & -10^9 \end{array}\right]$$

$$\Rightarrow \quad x_2 = 1, \quad x_1 = 0 \quad \text{X}$$

例2：全主元法

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 & 10^9 & 10^9 \\ 1 & 1 & 2 \end{array}\right] \Rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 10^9 & 1 & 10^9 \\ 1 & 1 & 2 \end{array}\right] \Rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 10^9 & 1 & 10^9 \\ 0 & 1 & 1 \end{array}\right] \Rightarrow x_1 = 1, x_2 = 1 \checkmark$$

注1：列主元法计算量较少，但没有全主元法稳定。

注2：系数矩阵的性质（条件数）对方法有着很大影响。

§ 3.1.3 三角分解法

- Gauss消元过程其实就是一个矩阵的**三角分解**过程

将 Gauss 消去过程中第 $k-1$ 步消元后的系数矩阵记为：

$$A^{(k)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

$(\, k = 1, \ldots, n-1)$

则 $A^{(k)}$ 与 $A^{(k+1)}$ 之间的关系可以表示为：

$$\boxed{A^{(k+1)} = L_k A^{(k)}}$$

其中：

$$L_k=\begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$$

$(\, i = k+1, \ldots, n\,)$

LU分解

于是有： $A^{(n)} = L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A^{(1)}$

$$\boxed{A = A^{(1)} = (L_{n-1} \cdots L_2 L_1)^{-1} A^{(n)}}$$

容易验证：

$$L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \quad (k = 1, \ldots, n-1)$$

记： $L = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_n^{-1}$， $U = A^{(n)}$，则

$$\boxed{A = LU} \longrightarrow LU\text{ 分解}$$ (杜利特尔Doolittle分解)

其中：L --- 单位下三角矩阵，U --- 上三角矩阵

LU分解的存在唯一性

LU 分解存在 $\Longleftrightarrow$ Gauss消元法可以进行到底

$\Updownarrow$

所有顺序主子式不为零 $\Longleftrightarrow$ $a_{kk}^{(k)} \neq 0$

定理：若 *A* 的所有顺序主子式不为零，则 *A* 存在唯一的 *LU*分解

LU分解的计算

利用矩阵乘法直接计算 LU 分解

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$L \times U = A$$

①比较等式两边的第一行得：$u_{1j} = a_{1j}$ $(j = 1,\ldots,n$ $\boxed{U\text{ 的第一行}}$

比较等式两边的第一列得：$l_{i1} = a_{i1}/u_{11}$ $(i = 2,\ldots$ $\boxed{L\text{ 的第一列}}$

②比较等式两边的第二行得：$u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}$ $(j =$ $\boxed{U\text{ 的第二行}}$

比较等式两边的第二列得：$l_{i2} = \left(a_{i2} - l_{i1}u_{12}\right)/u_{22}$ $($ $\boxed{L\text{ 的第二列}}$

LU分解的计算

第 r 步：此时 U 的前 r-1 行和 L 的前 r-1 列已经求出

比较等式两边的第 r 行得：

$$\boxed{u_{ri} = a_{ri} - \left(l_{r1}u_{1i} + \cdots + l_{r,r-1}u_{r-1,i}\right) = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}u_{ki}}$$

$(\, i = r, \ldots, n \,)$

比较等式两边的第 r 列得：

$$\boxed{l_{ir} = \left(a_{ir} - l_{i1}u_{1r} - \cdots - l_{i,r-1}u_{r-1,r}\right) \Big/ u_{rr} = \left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}u_{kr}\right) \Bigg/ u_{rr}}$$

$(\, i = r, \ldots, n \,)$

直到第 n 步，便可求出矩阵 L 和 U 的所有元素。

运算量：$(n^3 - n)/3$

LU分解法流程

Step 1. LU分解，即计算$L=(l_{ij}), U=(u_{ij})$中的元素：

$$\begin{cases} u_{1i}=a_{1i}, \quad i=1,2,\cdots,n, \\ l_{i1}=a_{i1}/u_{11}, \quad i=2,3,\cdots,n, \\ u_{ri}=a_{ri}-\sum\limits_{k=1}^{r-1} l_{rk}u_{ki}, \quad i=r,r+1,\cdots,n; \quad r=2,3,\cdots,n, \\ l_{ir}=\left(a_{ir}-\sum\limits_{k=1}^{r-1} l_{ik}u_{kr}\right)/u_{rr}, \quad i=r,r+1,\cdots,n, \quad r=2,3,\cdots,n; \end{cases}$$

Step 2. 利用前推过程解方程组$LY=b$:

$$\begin{cases} y_1=b_1, \\ y_i=b_i-\sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k, \quad i=2,3,\cdots,n; \end{cases}$$

Step 3. 利用回代过程解方程组$UX=Y$:

$$\begin{cases} x_n=y_n/u_{nn}, \\ x_i=\left(y_i-\sum\limits_{k=i+1}^{n} u_{ik}x_k\right)/u_{ii}, \quad i=n-1,n-2,\cdots,1. \end{cases}$$

算法3.1 LU分解法

```
function x=lux(A,b)
[n,n]=size(A); L=zeros(n);
U=zeros(n);x=zeros(n,1); y=zeros(n,1);
for r=1:n
   for i=r:n
U(r,i)=A(r,i)-sum(L(r,1:r-1).*U(1:r-1,i)');
L(i,r)=(A(i,r)-sum(L(i,1:r-1).*U(1:r-1,r)'))/U(r,r);
   end
end;
L, U
for i=1:n
y(i)=b(i)-sum(L(i,1:i-1).*y(1:i-1)');
end
for j=n:-1:1
x(j)=(y(j)-sum(U(j,j+1:n).*x(j+1:n)'))/U(j,j);
end
```

为了节省存储空间，可用 A 的绝对下三角部分来存放 L (对角线元素无需存储)，用 A 的上三角部分来存放 U

LU分解法示例

例 4.3 用三角分解法求解线性方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & -1 \\ 4 & -1 & -2 & 2 \\ 3 & 2 & -1 & 1 \\ 2 & 5 & 2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 8 \\ 10 \end{bmatrix}.$$

解 运行算法 4.1，可计算出方程组系数阵A 的三角分解: $A = LU$，其中

$$L = \begin{bmatrix} 1.0000 & 0 & 0 & 0 \\ 4.0000 & 1.0000 & 00 & \\ 3.0000 & 1.1429 & 1.00000 & \\ 2.0000 & 1.2857 & 2.3333 & 1.0000 \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} 1.0000 & -2.0000 & 3.0000 & -1.0000 \\ 0 & 7.0000 & -14.0000 & 6.0000 \\ 0 & 0 & 6.0000 & -2.8571 \\ 0 & 0 & 0 & -1.0476 \end{bmatrix}.$$

且可得方程组的解

$$x = (x_1, x_2, x_3, x_4)^T = (1, 2, 3, 4)^T. \quad \blacksquare$$

本节内容小结

- **线性方程组问题，直接法，迭代法**
- **Gauss消元法，顺序消元，**

  全主元消元，列主元消元
- **三角分解法，LU分解**