Northeastern University

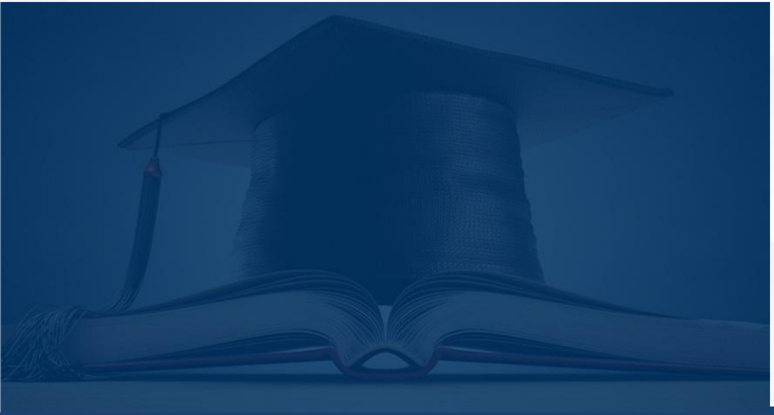
数值分析

理学院　　数学系

计算数学教研室

2017年12月13日

02 解线性方程组的直接方法



解线性方程组的直接方法

已有研究

- Gauss消去法
- 直接三角分解方法
- 平方根方法
- 追赶法
- 向量和矩阵的范数
- 线性方程组固有性态与误差分析

顺序Gauss消去法

现实意义

在工程技术、自然科学和社会科学中，
经常遇到的许多问题最终都可归结为解线性方程组

1 用最小二乘法求实验数据的曲线拟合问题

2 工程中的三次样条函数的插值问题

3 经济运行中的投入产出问题

4 大地测量、机械与建筑结构的设计计算问题

都可归结为求解线性方程组(或非线性方程组)的数学问题。因此线性方程组的求解对于实际问题是**极其重要**的

顺序Gauss消去法

本节讨论n元线性方程组

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

的直接解法。方程组(1)的矩阵形式为 **Ax=b**

其中

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

顺序Gauss消去法

若矩阵A非奇异,即$\det(A) \neq 0$,则方程组(1)有唯一解。

所谓直接解法是指，若不考虑计算过程中的舍入误差，经过有限次算术运算就能求出线性方程组的精确解的方法。但由于实际计算中舍入误差的存在，用直接解法一般也只能求出方程组的近似解。

Cramer法则是一种不实用的直接法，下面介绍几种实用的直接法。

Gauss消去法是一种规则化的加减消元法，其基本思想是通过逐次消元计算，把一般线性方程组的求解转化为等价的上三角形方程组的求解。

为了清楚起见,先看一个简单的例子.

顺序Gauss消去法

考虑线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 2 \\ x_1 - 3x_2 - 3x_3 = -1 \\ 4x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 3 \end{cases}$$

消去后两个方程中的x_1 →

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 2 \\ -5x_2 - 2x_3 = -2 \\ -6x_2 + 6x_3 = -1 \end{cases}$$

再消去最后一个方程的x_2 →

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 2 \\ -5x_2 - 2x_3 = -2 \\ \frac{42}{5}x_3 = \frac{7}{5} \end{cases}$$

消元结束，经过回代得解： →

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

顺序Gauss消去法

上述求解的消元过程可用矩阵表示为:

$$(A,b)=\begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 2 \\ 1 & -3 & -3 & -1 \\ 4 & 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\underset{r_3-2r_1}{\overset{r_2-\frac{1}{2}r_1}{\sim}}\begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 2 \\ 0 & -5 & -2 & -2 \\ 0 & -6 & 6 & -1 \end{pmatrix} \overset{r_3-\frac{6}{5}r_2}{\sim}\begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 2 \\ 0 & -5 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & \frac{42}{5} & \frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

这是Gauss消去法的计算形式, 新的增广矩阵对应的线性方程组就是上三角形方程组, 可进行回代求解。

顺序Gauss消去法

现在介绍求解线性方程组(1)的顺序Gauss消去法:

记 $$\mathbf{A}^{(1)}=\mathbf{A},\mathbf{b}^{(1)}=\mathbf{b},a_{ij}^{(1)}=a_{ij},b_i^{(1)}=b_i$$

则, 线性方程组(1)的增广矩阵为

$$(\mathbf{A}^{(1)},\mathbf{b}^{(1)})=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

顺序Gauss消去法

第一步. 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 依次用 $-l_{i1} = -\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad (i = 2,3,\ldots,n)$

乘矩阵的第1行加到第i行, 得到矩阵:

$$(\mathbf{A}^{(2)},\mathbf{b}^{(2)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

顺序Gauss消去法

其中

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - l_{i1}a_{1j}^{(1)}, \quad i, j = 2,3,\dots,n$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - l_{i1}b_1^{(1)}, \quad i = 2,3,\dots,n$$

第二步. 设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$ ，依次用 $-l_{i2} = -\dfrac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \quad (i = 3,4,\dots,n)$

乘矩阵的第2行加到第i行, 得到矩阵:

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

顺序Gauss消去法

其中

$$a_{ij}^{(3)}=a_{ij}^{(2)}-l_{i2}a_{2j}^{(2)},\quad i,j=3,4,\dots,n$$

$$b_i^{(3)}=b_i^{(2)}-l_{i2}b_2^{(2)},\quad i=3,4,\dots,n$$

如此继续消元下去，第n-1步结束后得到矩阵：

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

这就完成了消元程。对应的方程组变成：

顺序Gauss消去法

$$
\begin{cases}
a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\
\qquad a_{22}^{(2)}x_2 + \ldots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\qquad\qquad a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)}
\end{cases}
$$

对此方程组进行回代，就可求出方程组的解。

$$
\begin{cases}
x_n = b_n^{(n)} \div a_{nn}^{(n)} \\
x_i = (b_i^{(i)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j) \div a_{ii}^{(i)}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1
\end{cases}
$$

顺序Gauss消去法求解n元线性方程组的乘除运算量是：

顺序Gauss消去法

$$n^2-1+(n-1)^2-1+\ldots+2^2-1+1+2+\ldots+n$$

$$=\sum_{k=1}^{n}(k^2-1)+\sum_{k=1}^{n}k=\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}-n+\frac{n(n+1)}{2}$$

$$=\frac{1}{3}(n^3+3n^2-n)$$

n=20时，顺序Gauss消去法只需3060次乘除法运算（$9.7*10^{20}$）

顺序Gauss消去法通常也简称为**Gauss消去法**.

顺序Gauss消去法中的 $a_{kk}^{(k)}(k=1,2,\ldots,n)$ 称为**主元素**.

主元素都不为零⇔矩阵A的各阶顺序主子式都不为零.

列主元Gauss消去法

例1 解线性方程组(用十进制四位浮点计算):

$$\begin{cases} 0.000100x_1 + 1.00x_2 = 1.00 \\ 1.00x_1 + 1.00x_2 = 2.00 \end{cases}$$

(用Cramer法则可得精确解$x_1^*=1.00010$，$x_2^*=0.99990$)

解 用顺序Gauss消去法，消元得

$$\begin{cases} 0.000100x_1 + 1.00x_2 = 1.00 \\ -10000x_2 = -10000 \end{cases}$$

回代得解:$x_2=1.00$，$x_1=0.00$

列主元Gauss消去法

若将方程组改写成:

$$\begin{cases}1.00x_1+1.00x_2=2.00\\0.000100x_1+1.00x_2=1.00\end{cases}$$

用顺序Gauss消去法，消元得

$$\begin{cases}1.00x_1+1.00x_2=2.00\\1.00x_2=1.00\end{cases}$$

回代得解: $x_2=1.00$, $x_1=1.00$

为了提高计算的数值稳定性, 在消元过程中采用选择主元的方法. 常采用的是**列主元消去法**和**全主元消去法**.

列主元Gauss消去法

给定线性方程组$Ax=b$，记$A^{(1)}=A$, $b^{(1)}=b$, 列主元Gauss消去法的具体过程如下：

首先在增广矩阵$B^{(1)}=(A^{(1)}, b^{(1)})$的第一列元素中，取

$$\left|a_{k1}^{(1)}\right| = \max_{1\le i\le n}\left|a_{i1}^{(1)}\right|$$ 为主元素，$r_k \leftrightarrow r_1$.

再在矩阵$B^{(2)}=(A^{(2)}, b^{(2)})$的第二列元素中，取

$$\left|a_{k2}^{(2)}\right| = \max_{2\le i\le n}\left|a_{i2}^{(2)}\right|$$ 为主元素，$r_k \leftrightarrow r_2$.

按此方法继续进行下去，经过n-1步选主元和消元运算，得到增广矩阵$\mathbf{B}^{(n)}=(\mathbf{A}^{(n)},\mathbf{b}^{(n)})$. 则方程组$\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{x}=\mathbf{b}^{(n)}$是与原方程组等价的上三角形方程组，可进行回代求解.

易证，只要$|A|\neq 0$，列主元Gauss消去法就可顺利进行.

例2. 采用十进制四位浮点计算，分别用顺序Gauss消去法和列主元Gauss消去法求解线性方程组：

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

方程组具有四位有效数字的精确解为

$$x_1^* = 17.46, \quad x_2^* = -45.76, \quad x_3^* = 5.546$$

列主元Gauss消去法

解 1. 用顺序Gauss消去法求解, 消元过程为

$$
\begin{pmatrix} 0.0120 & 0.0100 & 0.167 & 0.6781 \\ 1.000 & 0.8334 & 5.910 & 12.10 \\ 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \end{pmatrix}
$$

$$
\sim \begin{pmatrix} 0.0120 & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \\ 0 & 0.1000\times10^{-3} & -8.010 & -44.41 \\ 0 & -1467 & -4453\times10 & -1798\times10^{2} \end{pmatrix}
$$

$$
\sim \begin{pmatrix} 0.0120 & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \\ 0 & 0.1000\times10^{-3} & -8.010 & -44.41 \\ 0 & 0 & -1175\times10^{5} & -6517\times10^{5} \end{pmatrix}
$$

回代得： $x_3=5.546$， $x_2=100.0$， $x_1=-104.0$

列主元Gauss消去法

用列主元Gauss消去法求解，消元过程为

$$\begin{pmatrix} 0.0120 & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \\ 1.000 & 0.8334 & 5.910 & 12.10 \\ 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \underset{r_1 \leftrightarrow r_3}{\overset{\text{选主元}}{\sim}} \begin{pmatrix} 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 1.000 & 0.8334 & 5.910 & 12.10 \\ 0.0120 & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \end{pmatrix} \Rightarrow \sim \begin{pmatrix} 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 0 & 0.4584 & 5.909 & 11.79 \\ 0 & 0.55\times 10^{-2} & 0.1670 & 0.6744 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \sim \begin{pmatrix} 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 0 & 0.4584 & 5.909 & 11.79 \\ 0 & 0 & 0.0961 & 0.5329 \end{pmatrix} \Rightarrow \sim \begin{pmatrix} 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 0 & 0.4584 & 5.909 & 11.79 \\ 0 & 0 & 0.0961 & 0.5329 \end{pmatrix}$$

回代得：$x_3=5.545$，$x_2=-45.77$，$x_1=17.46$

列主元Gauss消去法

可见，列主元Gauss消去法是在每一步消元前，在主元所在的一列选取绝对值最大的元素作为主元素. 而全主元Gauss消去法是在每一步消元前，在所有元素中选取绝对值最大的元素作为主元素. 但由于运算量大增，实际应用中并不经常使用.

矩阵三角分解法

Gauss消去法的矩阵运算

对矩阵 $$\mathbf{A}^{(1)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

若 $a_{11}^{(1)}\neq 0$, 令 $l_{i1}=a_{i1}^{(1)}\div a_{11}^{(1)}, i=2,3,\cdots,n$, 记

$$\mathbf{L}_1=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & 1 & & & \\ -l_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -l_{n1} & & & & 1 \end{pmatrix}$$

矩阵三角分解法

则有

$$\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{L}_1\mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$

若 $a_{22}^{(2)} \neq 0$, 令 $l_{i2} = a_{i2}^{(2)} \div a_{22}^{(2)}, i = 3,4,\cdots,n$, 记

$$\mathbf{L}_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & -l_{32} & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & \\ & -l_{n2} & & & 1 \end{pmatrix}$$

则有

矩阵三角分解法

$$\mathbf{A}^{(3)} = \mathbf{L}_2\mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} \end{pmatrix}$$

如此进行下去, 第n-1步得到:

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

其中

矩阵三角分解法

$$\mathbf{L}_{n-1}=\begin{pmatrix}1&&&&\\&1&&&\\&&\ddots&&\\&&&1&\\&&&-l_{n,n-1}&1\end{pmatrix}$$

也就是:

$$\mathbf{A}^{(n)}=\mathbf{L}_{n-1}\mathbf{A}^{(n-1)}=\mathbf{L}_{n-1}\mathbf{L}_{n-2}\mathbf{A}^{(n-2)}=\ldots=\mathbf{L}_{n-1}\mathbf{L}_{n-2}\ldots\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A}^{(1)}$$

其中

$$\begin{array}{cl}\mathbf{L}_k=\begin{pmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&1&&&\\&&-l_{k+1k}&1&&\\&&\vdots&&\ddots&\\&&-l_{nk}&&&1\end{pmatrix}&\begin{array}{l}\\\\\leftarrow\text{第}k\text{行}\\\\\\,k=1,2,\cdots,n-1\end{array}\end{array}$$

矩阵三角分解法

所以有:

$$\mathbf{A}=\mathbf{A}^{(1)}=\mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\ldots\mathbf{L}_{n-1}^{-1}\mathbf{A}^{(n)}=\mathbf{LU} \quad \text{A的LU三角分解}$$

其中$\mathbf{L}=\mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\ldots\mathbf{L}_{n-1}^{-1}$，$\mathbf{U}=\mathbf{A}^{(n)}$.

而且有

$$\mathbf{L}_k^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{k+1k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{L}=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

L为单位下三角矩阵;
U是上三角矩阵.

定理1 设n阶方阵**A**的各阶顺序主子式不为零, 则存在唯一单位下三角矩阵**L**和上三角矩阵**U**使**A=LU** .

证明 只证唯一性, 设有两种分解

$$A = LU = \overline{L}\overline{U}$$

则有

$$\underbrace{\overline{L}^{-1} L}_{\text{单位下三角阵}} = \underbrace{\overline{U} U^{-1}}_{\text{上三角形矩阵}} = E$$

所以得 $L = \overline{L}, U = \overline{U}.$

于是 **Ax=b** $\Rightarrow$ **LUx=b** 令 **Ux=y** 得

$$\begin{cases} \mathbf{Ly} = \mathbf{b} \\ \mathbf{Ux} = \mathbf{y} \end{cases}$$

直接三角分解法

下面介绍矩阵三角分解的Doolittle分解方法，设

$$
\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}
$$

则得

$$
\begin{cases} u_{1j} = a_{1j} \quad j = 1,2,\cdots n \\ l_{i1} = a_{i1} \div u_{11} \quad i = 2,3,\cdots,n \\ \text{对}k=2,3,\ldots,n,\text{计算} \\ u_{kj} = a_{kj} - \sum\limits_{m=1}^{k-1} l_{km} u_{mj} \quad j = k, k+1, \cdots, n \\ l_{ik} = (a_{ik} - \sum\limits_{m=1}^{k-1} l_{im} u_{mk}) \div u_{kk} \quad , i = k+1, k+2, \cdots, n \end{cases}
$$

直接三角分解法

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1k-1} & u_{1k} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2k-1} & u_{2k} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{k-11} & l_{k-12} & \cdots & u_{k-1k-1} & u_{k-1k} & \cdots & u_{k-1n} \\ l_{k1} & l_{k2} & \cdots & l_{kk-1} & u_{kk} & \cdots & u_{kn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nk-1} & l_{nk} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} u_{1j} = a_{1j} \quad j = 1,2,\cdots n \\ l_{i1} = a_{i1} \div u_{11} \quad i = 2,3,\cdots,n \\ \text{对}k=2,\ 3,\ \ldots,\ n,\ \text{计算} \\ u_{kj} = a_{kj} - \sum\limits_{m=1}^{k-1} l_{km} u_{mj} \quad j = k, k+1, \cdots, n \\ l_{ik} = (a_{ik} - \sum\limits_{m=1}^{k-1} l_{im} u_{mk}) \div u_{kk} \quad ,i = k+1, k+2, \cdots, n \end{cases}$$

直接三角分解法

由

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

可得

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_k = b_k - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} y_i \quad ,k = 2,3,\cdots,n \\ x_n = y_n \div u_{nn} \\ x_i = (y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j) \div u_{ii} \quad ,i = n-1, n-2,\cdots,1 \end{cases}$$

这就是求解方程组Ax=b的Doolittle三角分解方法。

直接三角分解法

例：利用三角分解方法解线性方程组

$$\begin{cases} x_1+2x_2-3x_3=1 \\ 2x_1-x_2+3x_3=5 \\ 3x_1-2x_2+2x_3=1 \end{cases}$$

解 因为

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & -1 & 3 \\ 3 & -2 & 2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & -5 & 9 \\ 3 & \frac{8}{5} & -\frac{17}{5} \end{pmatrix}$$

所以

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & -1 & 3 \\ 3 & -2 & 2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 3 & \frac{8}{5} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ & -5 & 9 \\ & & -\frac{17}{5} \end{pmatrix}$$

直接三角分解法

先解 $\begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 3 & \frac{8}{5} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix}$，得 $\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ -\frac{34}{5} \end{pmatrix}$

再解 $\begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ & -5 & 9 \\ & & -\frac{17}{5} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ -\frac{34}{5} \end{pmatrix}$，得 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}$

解线性方程组Ax=b的Doolittle三角分解法的计算量约为(1/3)n^3，与Gauss消去法基本相同．其优点在于求一系列同系数的线性方程组$Ax=b_k$，(k=1, 2, ..., m)时，可大大节省运算量．

例如，求上例中矩阵A的逆矩阵．可分别取常向量

$b_1=(1, 0, 0)^T$，$b_2=(0, 1, 0)^T$，$b_3=(0, 0, 1)^T$

直接三角分解法

由

$$\begin{pmatrix}1&&\\2&1&\\3&\frac{8}{5}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}1&2&-3\\&-5&9\\&&-\frac{17}{5}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix},得\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{4}{17}\\\frac{5}{17}\\-\frac{1}{17}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}1&&\\2&1&\\3&\frac{8}{5}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}1&2&-3\\&-5&9\\&&-\frac{17}{5}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix},得\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{2}{17}\\\frac{11}{17}\\\frac{8}{17}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}1&&\\2&1&\\3&\frac{8}{5}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix},\begin{pmatrix}1&2&-3\\&-5&9\\&&-\frac{17}{5}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix},得\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{3}{17}\\-\frac{9}{17}\\-\frac{5}{17}\end{pmatrix}$$

所以

$$\mathbf{A}^{-1}=\begin{pmatrix} \frac{4}{17} & \frac{2}{17} & \frac{3}{17} \\ \frac{5}{17} & \frac{11}{17} & -\frac{9}{17} \\ -\frac{1}{17} & \frac{8}{17} & -\frac{5}{17} \end{pmatrix}=\frac{1}{17}\begin{pmatrix} 4 & 2 & 3 \\ 5 & 11 & -9 \\ -1 & 8 & -5 \end{pmatrix}$$

平方根法

设**A**为对称正定矩阵，则有唯一分解**A=LU**, 且$u_{kk}>0$.

$$\text{而}\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix} = \underset{\uparrow \atop \mathbf{D}}{\begin{pmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}} \underset{\uparrow \atop \mathbf{M}}{\begin{pmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & 1 & \cdots & \frac{u_{2n}}{u_{22}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}}$$

则有 **A=LDM** $=\mathbf{LDL}^T$

又因为 $(\mathbf{LDM})^T=\mathbf{M}^T\mathbf{D}\mathbf{L}^T=\mathbf{LDM}$ 所以 $\mathbf{M}=\mathbf{L}^T$

$$\text{令}\mathbf{D}=\begin{pmatrix} \sqrt{u_{11}} & & & \\ & \sqrt{u_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{u_{nn}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{u_{11}} & & & \\ & \sqrt{u_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{u_{nn}} \end{pmatrix}=\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}$$

则有 $$\mathbf{A}=\mathbf{L}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{L}^T=(\mathbf{L}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}})(\mathbf{L}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}})^T=\mathbf{G}\mathbf{G}^T \quad \text{其中}, \mathbf{G}=\mathbf{L}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}$$

平方根法

分解$A=GG^T$称为对称正定矩阵的**Cholesky分解.**

Ax=b 转换为 **Gy=b** , $G^Tx=y$ ______平方根法.

若记$G=(g_{ij})$，则有：对k=1, 2, …, n

$$\begin{cases} g_{kk}=(a_{kk}-\sum_{m=1}^{k-1} g_{km}^2)^{\frac{1}{2}} \\ g_{ik}=(a_{ik}-\sum_{m=1}^{k-1} g_{im}g_{km})\div g_{kk} \qquad ,i=k+1,\cdots,n \end{cases}$$

实际计算时, 可采用紧凑格式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & & & & & \\ a_{21} & a_{22} & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} g_{11} & & & & & \\ g_{21} & g_{22} & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ g_{k1} & g_{k2} & \cdots & g_{kk} & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nk} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix}$$

解三角方程 **Gy=b** , **G^{T}x=y** 可得

$$\begin{cases} y_k = (b_k - \sum\limits_{m=1}^{k-1} g_{km} y_m) \div g_{kk} & ,k = 1,2,\cdots,n \\ x_k = (y_k - \sum\limits_{m=k+1}^{n} g_{mk} x_m) \div g_{kk} & ,k = n, n-1,\cdots,1 \end{cases}$$

例 解线性方程组

$$\begin{cases} 4x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 4 \\ 2x_1 + 10x_2 - x_3 = 17 \\ 4x_1 - x_2 + 6x_3 = 0 \end{cases}$$

解

$$\begin{pmatrix} 4 & & \\ 2 & 10 & \\ 4 & -1 & 6 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & & \\ 1 & 3 & \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

平方根法

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

解方程 $$\begin{pmatrix}2 & & \\ 1 & 3 & \\ 2 & -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4\\ 17\\ 0\end{pmatrix}$$,得 $$\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2\\ 5\\ 1\end{pmatrix}$$

再解方程 $$\begin{pmatrix}2 & 1 & 2\\ & 3 & -1\\ & & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2\\ 5\\ 1\end{pmatrix}$$,得 $$\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1\\ 2\\ 1\end{pmatrix}$$

平方根法是求对称正定系数线性方程组的三角分解法,对称正定矩阵的Cholesky分解的计算量和存贮量均约为一般矩阵的**LU**分解的一半. 且Cholesky分解具有数值稳定性.

追赶法

追赶法是求三对角线性方程组的三角分解法.即方程

$$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & \\ d_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & d_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & d_n & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix}$$

三对角矩阵**A**的各阶顺序主子式都不为零的一个充分条件是:

$$|a_1|>|c_1|>0\ ;\ |a_n|>|d_n|>0\ ;\ |a_i|\geq|c_i|+|d_i|\ ,\ c_i d_i\neq 0\ ,i=2,3,\ldots,n-1.$$

在此条件下, **A=LDM=TM** , 称之为矩阵**A**的**Crout分解.**

对三对角矩阵**A**进行Crout分解,有

追赶法

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}\alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & 1\end{pmatrix}$$

其中

$$\begin{cases}\alpha_1=a_1,\beta_1=c_1\div\alpha_1,\gamma_i=d_i,i=2,3,\cdots,n \\ \alpha_i=a_i-d_i\beta_{i-1},i=2,3,\cdots,n \\ \beta_i=c_i\div\alpha_i,i=2,3,\cdots,n-1\end{cases}$$

解三角方程 **Ty=b** , **Mx=y** 可得

$$\begin{cases}y_1=b_1\div\alpha_1,y_i=(b_i-\gamma_i y_{i-1})\div\alpha_i,i=2,3,\cdots,n \\ x_n=y_n,x_i=y_i-\beta_i x_{i+1},i=n-1,n-2,\cdots,1\end{cases}$$

追赶法

称之为解三对角方程组的追赶法.

例 解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & & \\ -1 & 3 & 2 & \\ & -1 & 3 & 2 \\ & & -1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 11 \\ 15 \\ 9 \end{pmatrix}$$

解

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & & \\ -1 & 3 & 2 & \\ & -1 & 3 & 2 \\ & & -1 & 3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & \frac{2}{3} & & \\ -1 & \frac{11}{3} & \frac{6}{11} & \\ & -1 & \frac{39}{11} & \frac{22}{39} \\ & & -1 & \frac{139}{39} \end{pmatrix}$$

所以 $$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}3&&&\\-1&\frac{11}{3}&&\\&-1&\frac{39}{11}&\\&&-1&\frac{139}{39}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\frac{2}{3}&&\\&1&\frac{6}{11}&\\&&1&\frac{22}{39}\\&&&1\end{pmatrix}$$

解方程 $$\begin{pmatrix}3&&&\\-1&\frac{11}{3}&&\\&-1&\frac{39}{11}&\\&&-1&\frac{139}{39}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\\y_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}7\\11\\15\\9\end{pmatrix}$$，得 $$\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\\y_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{7}{3}\\\frac{40}{11}\\\frac{205}{39}\\4\end{pmatrix}$$

追赶法

再解方程
$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{2}{3} & & \\ & 1 & \frac{6}{11} & \\ & & 1 & \frac{22}{39} \\ & & & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{7}{3} \\ \frac{40}{11} \\ \frac{205}{39} \\ 4 \end{pmatrix}$$
，得
$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

当满足条件

$|a_1|>|c_1|>0$; $|a_n|>|d_n|>0$; $|a_i|\geq|c_i|+|d_i|$, $c_i d_i\neq 0$,$i=2,3,\ldots,n-1$.

时, 追赶法是数值稳定的, 追赶法具有计算程序简单, 存贮量少,计算量小的优点.

知识点1 向量的范数及常用的向量范数

为了研究线性方程组近似解的误差估计和迭代法的收敛性。我们需要对 R^n (n维向量空间)中向量($R^{n\times n}$中矩阵)的“大小”引进某种度量。

向量（矩阵）范数

向量范数概念是三维欧式空间中向量长度概念的推广，在数值分析中起着重要作用。

知识点1 向量的范数及常用的向量范数

定义1 设$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，$y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^T\in R^n$(或$C^n$).

将实数$(x,y)=y^Tx=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i$(或复数$(x,y)=y^Hx=\sum_{i=1}^{n}x_i\overline{y}_i$)称为向量$x,y$的数量积. 将非负实数$\|x\|_2=(x,x)^{\frac{1}{2}}=(\sum_{i=1}^{n}x_i^2)^{\frac{1}{2}}$或$\|x\|_2=(x,x)^{\frac{1}{2}}=(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^2)^{\frac{1}{2}}$称为向量$x$的欧式范数.

知识点1 向量的范数及常用的向量范数

引理 设x，$y \in R^n$(或C^n)，则

1. $(x,x)=0$，当且仅当$x=0$时成立；
2. $(\alpha x, y)=\alpha(x,y)$，$\alpha$为实数(或$(x,\alpha y)=\overline{\alpha}(x,y)$，$\alpha$为复数)；
3. $(x,y)=(y,x)$(或$(x,y)=\overline{(y,x)}$)；
4. $(x_1+x_2,y)=(x_1,y)+(x_2,y)$；
5. $(Cauchy-Schwarz$不等式$)$

$$|(x,y)| \leq \|x\|_2 \bullet \|y\|_2$$

等式当且仅当x与y线性相关时成立；

6. 三角不等式

$$\|x+y\|_2 \leq \|x\|_2 + \|y\|_2$$

知识点1 向量的范数及常用的向量范数

定义2 (向量的范数)

如果向量$x \in R^n$(或C^n)的某个实值函数$N(x)=\|x\|$，满足条件：

(1) $\|x\| \geq 0$ ($\|x\|=0$当且仅当$x=0$) (正定条件)，

(2) $\|\alpha x\|=|\alpha|\ \|x\|$，$\forall \alpha \in R$(或$\alpha \in C$)， (齐次性)

(3) $\|x+y\| \leq \|x\|+\|y\|$ (三角不等式)，

则称$N(x)$是R^n(或C^n)上的一个向量范数(或模). 由(3)可推出不等式

(4) $\big|\, \|x\|-\|y\| \,\big| \leq \|x-y\|$.

知识点1 向量的范数及常用的向量范数

几种常用的向量范数：

1. 向量的∞–范数(最大范数)：

$$\|x\|_\infty = \max_{1\le i\le n} |x_i|.$$

2. 向量的1–范数：

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|.$$

欧式范数

3. 向量的2–范数：

$$\|x\|_2 = (x,x)^{\frac{1}{2}} = (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}}.$$

4. 向量的p–范数：

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p}.$$

例 9:

计算向量 $x=(1,-2,3)^T$ 的各种范数.

知识点2 范数的等价性

定义 设$\{x^{(k)}\}$为R^n中一向量序列，$x^* \in R^n$，记$x^{(k)}=(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)})^T, x^*=(x_1^*,x_2^*\cdots,x_n^*)^T$. 如果$\lim\limits_{k\to\infty} x_i^{(k)}=x_i^* \quad (i=1,2,\cdots,n)$，则称$x^{(k)}$收敛于$x^*$，记为

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)}=x^*.$$

定理 (范数的连续性)

设非负函数$N(x)=\|x\|$为R^n上任一向量范数，则$N(x)$是x的分量$x_1,x_2,\cdots,x_n$的连续函数.

x有很小变化，

同时$N(x)$亦变化不大.

知识点2 范数的等价性

证明 设$x=\sum_{i=1}^{n}x_ie_i$，$y=\sum_{i=1}^{n}y_ie_i$，其中$e_i=(0,\cdots,1,0,\cdots,0)^T$.

只须证明当$x\to y$时$N(x)\to N(y)$即成. 事实上

$$
\begin{aligned}
|N(x)-N(y)| &= \big|\,\|x\|-\|y\|\,\big| \le \|x-y\| \\
&= \left\|\sum_{i=1}^{n}(x_i-y_i)e_i\right\| \\
&\le \sum_{i=1}^{n}|x_i-y_i|\;\|e_i\| \\
&\le \|x_i-y_i\|_\infty \sum_{i=1}^{n}\|e_i\|,
\end{aligned}
$$

即 $|N(x)-N(y)|\le c\|x_i-y_i\|_\infty \to 0$ （当$x\to y$时）

其中 $c=\sum_{i=1}^{n}\|e_i\|.$

知识点2 范数的等价性

定理 (向量范数的等价性)

设$\|x\|_s$，$\|x\|_t$为R^n上向量的任意两种范数，则存在常数c_1，$c_2>0$，使得对一切$x\in R^n$有

$$c_1\|x\|_s\le\|x\|_t\le c_2\|x\|_s.$$

证明 只要就$\|x\|_s=\|x\|_\infty$证明上式成立即可，即证明存在常数c_1，$c_2>0$，使

$$c_1\le\frac{\|x\|_t}{\|x\|_\infty}\le c_2，对一切x\in R^n且x\ne 0.$$

考虑泛函

$$f(x)=\|x\|_t\ge 0，\quad x\in R^n.$$

记$S=\left\{x\mid\ \|x\|_\infty=1,\ x\in R^n\right\}$，则$S$是一个有界闭集. 由于$f(x)$为$S$上的连续函数，所以$f(x)$于$S$上达到最大最小值，即存在$x'$，$x''\in S$使得

$$f(x')=\min_{x\in S}f(x)=c_1,\quad f(x'')=\max_{x\in S}f(x)=c_2.$$

知识点2 范数的等价性

设$x \in R^n$且$x \neq 0$，则$\dfrac{x}{\|x\|_\infty} \in S$，从而有

$$c_1 \leq f\left(\frac{x}{\|x\|_\infty}\right) \leq c_2,$$

$$\left\|\frac{x}{\|x\|_\infty}\right\|_\infty = 1$$

显然c_1，$c_2 > 0$，上式为

$$c_1 \leq \left\|\frac{x}{\|x\|_\infty}\right\|_t \leq c_2,$$

即

$$c_1\|x\|_\infty \leq \|x\|_t \leq c_2\|x\|_\infty，\text{对一切} x \in R^n.$$

Tips：

注意，定理不能推广到无穷维空间. 由定理可得到结论：如果在一种范数定义下向量序列收敛时，则在任何一种范数意义下该向量序列均收敛.

知识点2 范数的等价性

定理 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^* \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty}\left\|x^{(k)} - x^*\right\| = 0$，其中$\|\bullet\|$为向量的任一种范数.

证明 显然，$\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^* \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty}\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_\infty = 0$，而对于$R^n$上任一种范数$\|\bullet\|$，由定理10，存在常数$c_1$，$c_2 > 0$使

$$c_1\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_\infty \le \left\|x^{(k)} - x^*\right\| \le c_2\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_\infty,$$

各分量均逼近

于是又有 夹逼法则

$$\lim_{k\to\infty}\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_\infty = 0 \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty}\left\|x^{(k)} - x^*\right\| = 0.$$

矩阵的范数

将向量范数概念推广到矩阵上去，视$R^{n\times n}$中的矩阵为R^{n^2}中的向量，则由R^{n^2}上的$2-$范数可以得到$R^{n\times n}$中矩阵的一种范数

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

称为A的$Frobenius$范数(或F范数、或斐波那契范数).

知识点3 矩阵的范数及常用的矩阵范数

定义 (矩阵的范数)

如果矩阵$A \in R^{n\times n}$的某个非负的实值函数$N(A)=\|A\|$，

满足条件

(1) $\|A\| \ge 0(\|A\|=0 \Leftrightarrow A=0)$ (正定条件);

(2) $\|cA\|=|c|\,\|A\|$，c为实数(齐次条件);

(3) $\|A+B\| \le \|A\|+\|B\|$ (三角不等式);

(4) $\|AB\| \le \|A\|\,\|B\|$.

则称$N(A)$是$R^{n\times n}$上的一个矩阵范数(或模).

显然，$F(A)=\|A\|_F$ 就是$R^{n\times n}$上的一个矩阵范数.

由于在大多数于估计有关的问题中，矩阵和向量会同时参与讨论，所以希望引进一种矩阵的范数，它是和向量范数相联系且和向量范数相容的，即对任何向量$x \in R^n$及$A \in R^{n\times n}$都成立

$$\|Ax\| \le \|A\|\,\|x\|.$$

知识点3 矩阵的范数及常用的矩阵范数

定义 (矩阵的算子范数)

设$x \in R^n$，$A \in R^{n\times n}$，给出一种向量范数$\|x\|_v$ (如$v=1,2,$或∞)，相应地定义一个矩阵的非负函数

$$\|A\|_v = \max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}$$

可验证$\|A\|_v$满足定义4(矩阵的范数)，所以$\|A\|_v$是$R^{n\times n}$上矩阵的一个范数，称为A的算子范数.

定理 设$\|x\|_v$是R^n上一个向量范数，则$\|A\|_v$是$R^{n\times n}$上矩阵的范数，且满足相容条件

$$\|Ax\|_v \le \|A\|_v \|x\|_v$$

显然这种矩阵的范数$\|A\|_v$依赖于向量范数$\|x\|_v$的具体含义.也就是说，当给出一种具体的向量范数$\|x\|_v$时，相应地就得到了一种矩阵范数$\|A\|_v$.

知识点3 矩阵的范数及常用的矩阵范数

定理

设$x \in R^n$，$A \in R^{n\times n}$，则

1. $\|A\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$ (称为A的行范数),

2. $\|A\|_1 = \max\limits_{1\le j\le n} \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ij}|$ (称为A的列范数),

3. $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$ (称为A的$2-$范数),

其中$\lambda_{\max}(A^T A)$表示$A^T A$的最大特征值.

知识点3 矩阵的范数及常用的矩阵范数

例 设$A=\begin{pmatrix}1 & -2\\ -3 & 4\end{pmatrix}$，计算$A$的各种范数。

解 $\|A\|_1=\max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{n}|a_{ij}|=\max\{(1+3),(2+4)\}=6,$ (列范数)

$\|A\|_\infty=\max\limits_{1\le i\le n}\sum\limits_{j=1}^{n}|a_{ij}|=\max\{(1+2),(3+4)\}=7,$ (行范数)

$\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}=\sqrt{15+\sqrt{221}}\approx 5.46,$ (2－范数)

$\|A\|_F=\left(\sum\limits_{i,j=1}^{n}a_{i,j}^2\right)^{\frac{1}{2}}\approx 5.477.$ (F－范数)

定义6 设$A \in R^{n\times n}$的特征值为$\lambda_i (i=1,2,\cdots,n)$,

称

$$\rho(A)=\max_{1\le i\le n}\left|\lambda_i\right|$$

为A的谱半径.

知识点4 谱半径定义及相关

定理12 (特征值上界)

设$A \in R^{n\times n}$，则$\rho(A) \le \|A\|$，即对A的谱半径不超过A的任何一种算子范数(对$\|A\|_F$亦对).

证明 设λ是A的任一特征值，x为相应的特征向量，则$Ax = \lambda x$，由相容性条件得

$$|\lambda| \ \|x\| = \|\lambda x\| = \|Ax\| \le \|A\| \ \|x\|,$$

注意到$\|x\| \ne 0$，即得

$$|\lambda| \le \|A\|.$$

知识点4 谱半径定义及相关

定理13 如果$A\in R^{n\times n}$为对称矩阵，则$\|A\|_2=\rho(A)$

定理14 如果$\|B\|<1$，则$I\pm B$为非奇异矩阵，且

$$\left\|(I\pm B)^{-1}\right\|\le\frac{1}{1-\|B\|},$$

其中$\|\bullet\|$是指矩阵的算子范数.

证明 用反证法. 若$\det(I-B)=0$，则$(I-B)x=0$有非零解，

即存在$x_0\neq 0$使$Bx_0=x_0$，$\dfrac{\|Bx_0\|}{\|x_0\|}=1$，故$\|B\|\geq 1$，与假设矛盾.

又由$(I-B)(I-B)^{-1}=I$，有

$$(I-B)^{-1}=I+B(I-B)^{-1},$$

从而

$$\left\|(I\pm B)^{-1}\right\|\leq\|I\|+\|B\|\ \left\|(I\pm B)^{-1}\right\|,$$

$$\left\|(I-B)^{-1}\right\|\leq\frac{1}{1-\|B\|}.$$

方程组的固有形态

考虑线性方程组

$$Ax = b$$

其中设A为非奇异矩阵，x为方程组的精确解.

由于A(或b)元素是测量得到的，或者是计算的结果，在第一种情况A(或b)常带有某些观测误差，在后一种情况A(或b)又包含有舍入误差. 因此，我们处理的实际矩阵是$A+\delta A$(或$b+\delta b$)，接下来研究数据A(或b)的微小误差对解的影响.

知识点5 线性方程组的固有形态

例1 设有方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

记为$Ax=b$. 它的精确解为$x=(2,0)^T$.

现在考虑常数项的微小变化对方程组解的影响，即考察方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix}$$

也可表示为$A(x+\delta x)=b+\delta b$，其中$\delta b=(0,0.0001)^T$, $y=x+\delta x$，x为(2.3)的解。显然方程组(2.4)的解为$x+\delta x=(1,1)^T$.从而看到(2.3)的常数项b的第2个分量只有$\dfrac{1}{10000}$的微小变化，方程组的解却变化很大，这样的方程组称为病态方程组.

知识点5 线性方程组的固有形态

定义 如果矩阵A或常数项b的微小变化，引起方程组$Ax=b$解的巨大变化，则称此方程组为“病态”方程组，矩阵A称为“病态”矩阵(相对于方程组而言)，否则称方程组为“良态”方程组，A称为“良态”矩阵.

应该注意，矩阵的“病态”性质是矩阵本身的特性，下面我们希望找到刻画矩阵“病态”性质的量. 设有方程组

$$Ax=b$$

其中A为非奇异矩阵，x为上式的准确解. 接下来研究方程组的系数矩阵A(或b)的微小误差(扰动)时对解的影响.

知识点5 线性方程组的固有形态

现设A是精确的，b有误差δb，解为$x+\delta x$，则

$$A(x+\delta x)=b+\delta b \Rightarrow \delta x = A^{-1}\delta b$$

$$\|\delta x\| \le \|A^{-1}\| \ \|\delta b\|. \qquad (2.6)$$

由$Ax=b$

$$\|b\| \le \|A\| \ \|x\|,$$

$$\frac{1}{\|x\|} \le \frac{\|A\|}{\|b\|} \qquad (设 b \ne 0) \qquad (2.7)$$

由(2.6),(2.7)相乘得下述定理.

定理1 设A是非奇异矩阵，$Ax=b\ne 0$，且

$$A(x+\delta x)=b+\delta b,$$

则

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \|A^{-1}\| \ \|A\| \ \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}.$$

本定理给出了解的相对误差的上界，常数项b的相对误差在解中可能放大$\|A^{-1}\|\|A\|$倍.

知识点5 线性方程组的固有形态

现设b是精确的，A有微小误差(扰动)δA，解为$x+\delta x$，则

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b \Rightarrow (A+\delta A)\delta x=-(\delta A)x. \tag{2.8}$$

如果δA不受限制的话，$A+\delta A$可能奇异，而

$$(A+\delta A)=A(I+A^{-1}\delta A),$$

由定理14知，当$\|A^{-1}\delta A\|<1$时，$(I+A^{-1}\delta A)^{-1}$存在. 由(2.8)式

$$\delta x=-(A+\delta A)^{-1}(\delta A)x=-(I+A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}(\delta A)x,$$

因此
$$\|\delta x\|\le\frac{\|A^{-1}\|\ \|\delta A\|\ \|x\|}{1-\|A^{-1}(\delta A)\|}.$$

设$\|A^{-1}\|\ \|\delta A\|<1$，将上式不等式两边同除以$\|x\|$即得

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\frac{\boxed{\|A^{-1}\|\ \|A\|}\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A^{-1}\|\ \|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}. \tag{2.9}$$

知识点5 线性方程组的固有形态

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\|A^{-1}\|\ \|A\|\ \dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A^{-1}\|\ \|A\|\ \dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$$

定理16 设A为非奇异矩阵，$Ax=b\neq 0$，且

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b$$

如果$\|A^{-1}\|\ \|\delta A\|<1$，则式(2.9)成立.

如果δA充分小，且在条件$\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1$下，那么(2.9)式说明矩阵A的相对误差$\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}$在解中可能放大$\|A^{-1}\|\|A\|$倍.

总之，量$\|A^{-1}\|\ \|A\|$愈小，由A(或b)的相对误差引起的解的相对误差愈小；量$\|A^{-1}\|\ \|A\|$愈大，解的相对误差就可能愈大. 所以量$\|A^{-1}\|\ \|A\|$实际上刻画了解队原始数据变化的灵敏程度，即刻画了方程组的“病态”程度.

知识点5 线性方程组的固有形态

定义8 设A为非奇异矩阵，称数$cond(A)_v=\|A^{-1}\|_v\ \|A\|_v$ $(v=1,2或\infty)$为矩阵A的条件数.

由此看出矩阵的条件数与范数有关.

矩阵的条件数是一个十分重要的概念，由上面讨论知，当A的条件数相对的大，即$cond(A)>>1$时，则$Ax=b$是“病态”的(即A是“病态”矩阵，或者说A是坏条件的，相对于解方程组)，当A的条件数相对的小，则$Ax=b$是“良态”的(或者说A是好条件的).

注意，方程组病态性质是方程组本身的特性.A的条件数愈大，方程组的病态程度愈严重，就是愈难用一般的计算方法求得比较准确的解.

知识点6 条件数

通常使用的条件数有：

(1) $cond(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \ \|A\|_\infty$；

(2) A的谱条件数

$$cond(A)_2 = \|A\|_2 \ \|A^{-1}\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}}.$$

当A为对称矩阵时

$$cond(A)_2 = \frac{\lambda_1}{\lambda_n},$$

其中λ_1，λ_n为A的绝对值最大和绝对值最小的特征值.

知识点6 条件数

条件数的性质：

1. 对任何非奇异矩阵A，都有$cond(A)_v \geq 1$. 事实上，

$$cond(A)_v = \|A^{-1}\|_v \|A\|_v \geq \|A^{-1}A\|_v = 1;$$

2. 设A为非奇异矩阵，且$c \neq 0$(常数)，则

$$cond(cA)_v = cond(A)_v;$$

3. 如果A为正交矩阵($A^{-1} = A^T$)，则$cond(A)_2 = 1$；如果A为非奇异矩阵，R为正交矩阵，则

$$cond(RA)_2 = cond(AR)_2 = cond(A)_2.$$

$$cond(cA)_v = \|cA\|_v \|(cA)^{-1}\|_v = |c|\|A\|_v \left|\frac{1}{c}\right| \|A^{-1}\|_v = \|A\|_v \|A^{-1}\|_v = cond(A)_v$$

知识点6 条件数

$$A^{-1}=A^T,\quad cond(A)_2=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^TA)}{\lambda_{\min}(A^TA)}}=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^{-1}A)}{\lambda_{\min}(A^{-1}A)}}=1$$

$$R^{-1}=R^T,\quad cond(RA)_2=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}((RA)^T(RA))}{\lambda_{\min}((RA)^T(RA))}}=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^TR^TRA)}{\lambda_{\min}(A^TR^TRA)}}$$

$$=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^TA)}{\lambda_{\min}(A^TA)}}=cond(A)_2$$

$$cond(AR)_2=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}((AR)^T(AR))}{\lambda_{\min}((AR)^T(AR))}}=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(R^TA^TAR)}{\lambda_{\min}(R^TA^TAR)}}=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(R^{-1}A^TAR)}{\lambda_{\min}(R^{-1}A^TAR)}}$$

$$=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^TA)}{\lambda_{\min}(A^TA)}}=cond(A)_2$$

$$\Rightarrow cond(RA)_2=cond(AR)_2=cond(A)_2$$

例12　　已知希尔伯特(*Hilbert*)矩阵

$$H_n=\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{1+n} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix}$$

计算H_3的条件数.

解

$$H_3=\begin{pmatrix}1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4}\\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5}\end{pmatrix},\qquad H_3^{-1}=\begin{pmatrix}9 & -36 & 30\\ -36 & 192 & -180\\ 30 & -180 & 180\end{pmatrix}$$

(1) 计算H_3条件数$cond(H_3)_\infty$

$$\|H_3\|_\infty=\frac{11}{6},\qquad \|H_3^{-1}\|_\infty=408,\ 所以cond(H_3)_\infty=748.$$

同理可计算$cond(H_6)_\infty=2.9\times10^7$，$cond(H_7)_\infty=9.85\times10^8$. 当$n$愈大时，$H_n$矩阵病态愈严重.

(2) 考虑方程组 $H_3x=(\frac{11}{6},\ \frac{13}{12},\ \frac{47}{60})^T=b$，设$H_3$及$b$有微小误差(取3位有效数字)有

$$\begin{pmatrix} 1.00 & 0.500 & 0.333 \\ 0.500 & 0.333 & 0.250 \\ 0.333 & 0.250 & 0.200 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1+\delta x_1 \\ x_2+\delta x_2 \\ x_3+\delta x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1.83 \\ 1.08 \\ 0.783 \end{pmatrix},$$

简记为$(H_3+\delta H_3)(x+\delta x)=b+\delta b$. 方程组$H_3x=b$与(6.8)的精确解分别为：

$x=(1,\ 1,\ 1)^T$，$x+\delta x=(1.089512538,\ 0.487967062,\ 1.1491002798)$.于是

$$\delta x=(0.0895,\ -0.5120,\ 0.4910)^T,$$

行范数

$$\frac{\|\delta H_3\|_\infty}{\|H_3\|_\infty}\approx 0.18\times 10^{-3}<0.02\%\ ,$$

$$\frac{\|\delta b\|_\infty}{\|b\|_\infty}\approx 0.182\%\ ,\frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty}\approx 51.2\%.$$

这就是说H_3与相对误差不超过0.3%，而引起解的相对误差超过50%.

由于计算条件数运算量较大，实际计算中遇到下述情况之一，方程组就有可能是病态的：

(1) 矩阵元素间数量级差很大，且无一定规律；

(2) 矩阵的行列式值相对来说很小；

(3) 列主元消去法求解过程中出现量级很小的主元素；

(4) 数值求解过程中，计算解x的剩余向量$r=b-Ax$已经很小，但x仍不符合要求. 迭代改善法

知识点7 事后误差估计和迭代改善

（事后误差估计）设A为非奇异矩阵，x是$Ax=b\neq 0$的精确解. 再设$\bar{x}$是此方程组的近似解，$r=b-A\bar{x}$，则

$$\frac{\|x-\bar{x}\|}{\|x\|}\leq cond(A)\cdot\frac{\|r\|}{\|b\|}$$

证明　由$x-\bar{x}=A^{-1}r$，得

$$\|x-\bar{x}\|\leq\|A^{-1}\|\cdot\|r\|，\text{又有}$$

$$\|b\|=\|Ax\|\leq\|A\|\cdot\|x\|,\quad \frac{1}{\|x\|}\leq\frac{\|A\|}{\|b\|},$$

从而得证.

近似解$\bar{x}$的精度不仅依赖于剩余r的大小，而且依赖于A的条件数. 当A是病态时，即使有很小的剩余r，也不能保证$\bar{x}$是高精度的近似解.

迭代改善法

设$Ax=b$，其中$A\in R^{n\times n}$为非奇异矩阵，且为病态方程组(但不过分病态)，当求得方程组的近似解x_1，下面研究改善方程组近似解x_1精度的方法.

首先用选主元三角分解法实现分解计算

$$PA=LU,$$

其中P为置换阵，L为单位下三角阵，U为上三角阵，且求得计算解x_1.

现利用x_1的剩余向量来提高x_1的精度.

计算剩余向量

$$r_1=b-Ax_1, \qquad (2.10)$$

求解$Ad=r_1$，得到的解记为d_1. 然后改善

$$x_2=x_1+d_1, \qquad (2.11)$$

显然，如果(2.10),(2.11)及解$Ad=r_1$的计算没有误差，则x_2就是$Ax=b$的精确解.

事实上

$$Ax_2=A(x_1+d_1)=Ax_1+Ad_1=Ax_1+r_1=b.$$

但是，在实际计算中，由于有舍入误差，x_2只是方程组的近似解，重复(2.10),(2.11)过程，就产生一近似解序列$\{x_k\}$，有时可能得到比较好的近似.

(迭代改善法)

设$Ax=b$，其中$A\in R^{n\times n}$为非奇异矩阵,且为病态方程组(但不过分病态)，用选主元分解法实现$PA=LU$及计算解x_1. 本算法用迭代改善法提高近似解x_1精度. 设计算机字长为t，用数组$A(n,n)$保存A元素，数组$C(n,n)$保存三角矩阵L及U，用$Ip(n)$记录行交换信息，$x(n)$存贮x_1及x_k，$r(n)$保存r_k或d_k.

1. 用选主元三角分解实行分解计算
   $PA=LU$且求计算解x_1(用单精度)

2. 对于$k=1,2,\cdots,N_0$

(1) 计算$r_k=b-Ax_k$(用原始A及双精度计算)

(2) 求解$LUd_k = Pr_k = PAd_k$，即$\begin{cases} Ly = Pr_k, \\ Ud_k = y. \end{cases}$ (用单精度计算)

(3) 如果$\dfrac{\|d_k\|_\infty}{\|x_k\|_\infty} \le 10^{-t}$则输出$k$，$x_k$，$r_k$，停机

(4) 改善$x_{k+1} = x_k + d_k$ (用单精度计算)

3. 输出迭代改善方法迭代N_0次失败信息

当$Ax = b$不是过分病态时，迭代改善法是比较好的改进近似解精度的一种方法，当$Ax = b$非常病态时，$\{x_k\}$可能不收敛.

知识点7 事后误差估计和迭代改善

例13 用迭代改善法解

$$\begin{pmatrix} 1.0303 & 0.99030 \\ 0.99030 & 0.95285 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.4944 \\ 2.3988 \end{pmatrix} \quad (\text{记为} Ax = b)$$

(这里$t = 5$，即用5位浮点数运算).

解 精确解$x^* = (1.2240, 1.2454)^T$(舍入到小数点后第4位).容易计算

$$cond(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \ \|A\|_\infty = 2\times 2000 = 4000.$$

首先实现分解计算$A = LU$，且求x_1.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.9118 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1.0303 & 0.99030 \\ 0 & 0.00099 \end{pmatrix} = LU,$$

且计算解$x_1 = (1.2560, 1.2121)^T$.

应用迭代改善法需要用原始矩阵A且用双倍字长精度计算剩余向量$r = b - Ax$，其他计算用单精度.

知识点7 事后误差估计和迭代改善

计算如下表　　**精确解** $x^* = (1.2240,\ 1.2454)^T$

x_1	r_1	d_1	x_2	r_2	d_2
1.2560	5.7×10^{-7}	-0.03220	1.2238	1.18×10^{-6}	2.285×10^{-4}
1.2121	3.3715×10^{-5}	0.033502	1.2456	9×10^{-7}	-2.365×10^{-4}

$$x_3 = (1.2240,\ 1.2454)^T,$$

$$r_3 = (-0.682\times10^{-5},\ -0.659\times10^{-5})^T,$$

$$d_3 = (-0.2717\times10^{-4},\ -0.3515\times10^{-4})^T.$$

如果x_k需要更多的位数，迭代可以继续.

第8章 常微分方程数值解法

§1 引言

§1.1 为什么要研究数值解法

一阶常微分方程初值问题的一般形式为

$$\left.\begin{array}{l} y'=f(x,y)\ ,a\le x\le b \\ y(a)=\alpha \end{array}\right\} \quad (8.1)$$

其中$f(x,y)$是已知函数,α为给定的初值.

如果函数$f(x,y)$在区域$\{a\le x\le b,-\infty<y<\infty\}$上连续且关于y满足**Lipschitz条件**

$$|f(x,y)-f(x,\bar{y})|\le L|y-\bar{y}| \qquad ,\forall x,y$$

其中L>0为**Lipschitz常数**,则初值问题(8.1)有唯一解.

所谓数值解法,就是设法将常微分方程离散化,建立差分方程,给出解在一些离散点上的近似值.

§1.2 构造数值解法的基本思想

假设初值问题(8.1)的解$y=y(x)$唯一存在且足够光滑.对求解区域$[a,b]$做剖分

$$a=x_0<x_1<x_2<\ldots<x_n<\ldots<x_N=b$$

其中剖分节点$x_n=a+nh,n=0,1,\ldots,N$, h称为剖分步长.数值解法就是求精确解$y(x)$在剖分节点x_n上的近似值$y_n\approx y(x_n)$, $n=1,2,\ldots,N$.

我们采用数值积分方法来建立差分公式.

在区间$[x_n,x_{n+1}]$上对方程(8.1)做积分,则有

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \qquad (8.2)$$

对右边的积分应用左矩形公式，则有

梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

左矩形公式

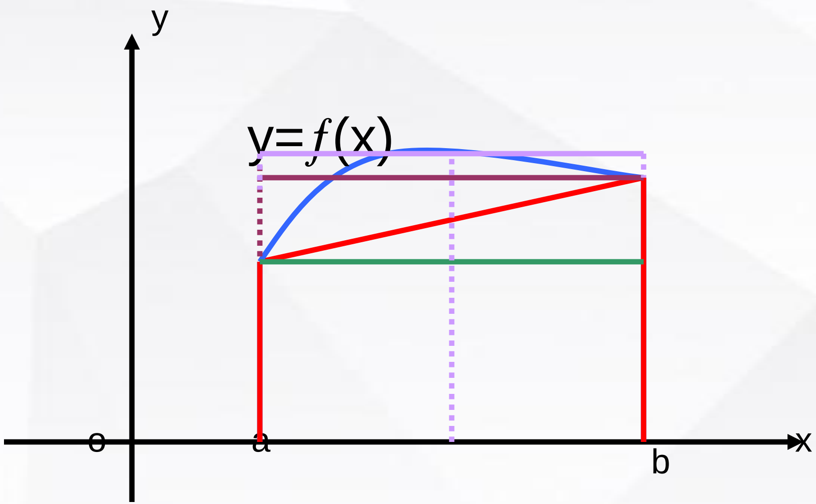
$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(a)$$

右矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(b)$$

中矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2})$$



$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx \qquad (8.2)$$

对右边的积分应用左矩形公式，则有

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$$

因此，建立节点处近似值y_n满足的差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_0 = \alpha \quad , n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

称之为**Euler**公式. 若对(8.2)式右边的积分应用梯形求积公式，则可导出差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \\ y_0 = \alpha \quad , n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

称为梯形公式.

若在区间[x_{n-1},x_{n+1}]上对方程(8.1)做积分,则有

$$y(x_{n+1})-y(x_{n-1})=\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} f(x,y(x))dx$$

对右边的积分应用中矩形求积公式，则得差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_{n-1}+2hf(x_n,y_n) \\ y_0=\alpha \quad ,n=0,1,2\cdots,N-1 \end{cases}$$

称为**Euler中点公式**或称**双步Euler公式**.

例1

利用Euler方法求初值问题

$$\begin{cases} y'=\dfrac{1}{1+x^2}-2y^2 \quad ,0\le x\le 2 \\ y(0)=0 \end{cases}$$

的数值解.此问题的精确解是$y(x)=x/(1+x^2)$.

解 此时的Euler公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\left(\dfrac{1}{1+x_n^2} - 2y_n^2\right) \\ y_0 = 0 \quad , n = 0,1,2\cdots \end{cases}$$

分别取步长h=0.2 ,0.1 ,0.05,计算结果如下

h	x_n	y_n	$y(x_n)$	$y(x_n)-y_n$
h=0.2	0.00	0.00000	0.00000	0.00000
	0.40	0.37631	0.34483	-0.03148
	0.80	0.54228	0.48780	-0.05448
	1.20	0.52709	0.49180	-0.03529
	1.60	0.46632	0.44944	-0.01689
	2.00	0.40682	0.40000	-0.00682
h=0.1	0.00	0.00000	0.00000	0.00000
	0.40	0.36085	0.34483	-0.01603
	0.80	0.51371	0.48780	-0.02590
	1.20	0.50961	0.49180	-0.01781
	1.60	0.45872	0.44944	-0.00928
	2.00	0.40419	0.40000	-0.00419
h=0.05	0.00	0.00000	0.00000	0.00000
	0.40	0.35287	0.34483	-0.00804
	0.80	0.50049	0.48780	-0.01268
	1.20	0.50073	0.49180	-0.00892
	1.60	0.45425	0.44944	-0.00481
	2.00	0.40227	0.40000	-0.00227

在Euler公式和梯形公式中,为求得y_{n+1},只需用到前一步的值y_n,这种差分方法称为**单步法**,这是一种自开始方法.

Euler中点公式则不然, 计算y_{n+1}时需用到前两步的值y_n , y_{n-1} ,称其为**两步方法**,两步以上的方法统称为**多步法**.

在Euler公式和Euler中点公式中,需要计算的y_{n+1}已被显式表示出来,称这类差分公式为**显式公式**,而梯形公式中,需要计算的y_{n+1}隐含在等式两侧,称其为**隐式公式**.

隐式公式中,每次计算y_{n+1}都需解方程,要比显式公式需要更多的计算量,但其计算稳定性较好.

方法

§ 2.1 改进的Euler方法

从数值积分的角度来看,梯形公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \\ y_0 = \alpha \quad , n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

计算数值解的精度要比Euler公式好,但它属于隐式公式,不便于计算.

实际上,常将Euler公式与梯形公式结合使用:

$$\begin{cases} y_{n+1}^{[0]} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1}^{[k+1]} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[k]})] \\ y_0 = \alpha \quad , n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

由迭代法收敛的角度看，当 $|y_{n+1}^{[k+1]} - y_{n+1}^{[k]}| < \varepsilon$ (ε是给定的精度要求)时, 取 $y_{n+1} = y_{n+1}^{[k+1]}$.

而且, 只要 $\frac{h}{2}\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right| \le L < 1$, 就可以保证迭代公式收敛，而当h很小时, 收敛是很快的.

通常采用只迭代一次的算法:

$$\begin{cases} \bar{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})] \\ y_0 = \alpha \quad , n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

称之为**改进的Euler方法**. 这是一种单步显式方法.

改进的Euler方法也可以写成

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \\ y_0 = \alpha \quad, n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

例2 求初值问题

$$\begin{cases} y' = y - 2x/y \quad, 0 \le x \le 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

的数值解, 取步长h=0.1 . [精确解为$y(x)=(1+2x)^{1/2}$.]

解 (1) 利用Euler方法

$$\begin{cases} y_{n+1} = 1.1y_n - 0.2x_n / y_n \\ y_0 = 1 \quad, n = 0,1,2\cdots,9 \end{cases}$$

(2) 利用改进Euler方法

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + 0.05(K_1 + K_2) \\
K_1 = y_n - 2x_n / y_n \\
K_2 = y_n + 0.1K_1 - \dfrac{2(x_n + 0.1)}{y_n + 0.1K_1} \\
y_0 = 1 \quad , n = 0,1,2\cdots,9
\end{cases}
$$

计算结果如下:

n	x_n	Euler方法y_n	改进Euler法y_n	精确解$y(x_n)$
0	0	1	1	1
1	0.1	1.1	1.095909	1.095445
2	0.2	1.191818	1.184096	1.183216
3	0.3	1.277438	1.266201	1.264991
4	0.4	1.358213	1.343360	1.341641
5	0.5	1.435133	1.416402	1.414214
6	0.6	1.508966	1.485956	1.483240
7	0.7	1.580338	1.552515	1.549193
8	0.8	1.649783	1.616476	1.612452
9	0.9	1.717779	1.678168	1.673320
10	1	1.784770	1.737869	1.732051

§2.2 差分公式的误差分析

在节点x_{n+1}的误差$y(x_{n+1})-y_{n+1}$,不仅与y_{n+1}这一步计算有关,而且与前n步计算值$y_n,y_{n-1},\dots,y_1$都有关.

为了简化误差的分析,着重研究进行一步计算时产生的误差.即假设$y_n=y(x_n)$,求误差$y(x_{n+1})-y_{n+1}$,这时的误差称为**局部截断误差**,它可以反映出差分公式的精度.

如果单步差分公式的局部截断误差为$O(h^{p+1})$,则称该公式为**p阶方法**.这里p为非负整数.显然,阶数越高,方法的精度越高.

研究差分公式阶的重要手段是Taylor展开式,一元函数和二元函数的Taylor展开式为:

$$y(x_{n+1})=y(x_n+h)=y(x_n)+y'(x_n)h+\frac{y''(x_n)}{2!}h^2+\frac{y'''(x_n)}{3!}h^3+\cdots$$

$$f(x_n+h,y_n+k)=f(x_n,y_n)+\frac{\partial f(x_n,y_n)}{\partial x}h+\frac{\partial f(x_n,y_n)}{\partial y}k$$
$$+\frac{1}{2!}\left[\frac{\partial^2 f(x_n,y_n)}{\partial x^2}h^2+2\frac{\partial^2 f(x_n,y_n)}{\partial x\partial y}hk+\frac{\partial^2 f(x_n,y_n)}{\partial y^2}k^2\right]+\cdots$$

另外,在$y_n=y(x_n)$的条件下,考虑到$y'(x)=f(x,y(x))$,则有

$y'(x_n)=f(x_n,y(x_n))=f(x_n,y_n)=f_n$

$y''(x_n)=$

$$\frac{d}{dx}[f(x_n,y(x_n))]=\frac{\partial f_n}{\partial x}+\frac{\partial f_n}{\partial y}f_n$$

$$y'''(x_n)=\frac{d}{dx}\left[\frac{\partial f_n}{\partial x}+\frac{\partial f_n}{\partial y}f_n\right]$$

$$=\frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x\partial y}f_n+\frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2}f_n^2+\frac{\partial f_n}{\partial x}\frac{\partial f_n}{\partial y}+\left(\frac{\partial f_n}{\partial y}\right)^2 f_n$$

对Euler方法，有

$y_{n+1}=y_n+hf(x_n,y_n)$

$$y(x_{n+1})=y(x_n+h)=y(x_n)+y'(x_n)h+\frac{y''(x_n)}{2!}h^2+\cdots$$

$=y_n+f(x_n,y_n)h+O(h^2)$

从而有:　$y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^2)$

所以Euler方法是一阶方法.

再看改进Euler方法, 因为

$$K_2=f(x_n+h,y_n+hK_1)=f_n+\frac{\partial f_n}{\partial x}h+\frac{\partial f_n}{\partial y}hK_1$$
$$+\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2}h^2+2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x\partial y}h^2K_1+\frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2}h^2K_1^2\right]+O(h^3)$$

可得

$$y_{n+1}=y_n+f_n h+\frac{h^2}{2}\left[\frac{\partial f_n}{\partial x}+\frac{\partial_n}{\partial y}f_n\right]+\frac{h^3}{4}\left[\frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x\partial y}f_n+\frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2}f_n\right]+O(h^4)$$

而

$$\begin{aligned}y(x_{n+1})&=y(x_n)+y'(x_n)h+\frac{y''(x_n)}{2}h^2+\frac{y'''(x_n)}{3!}h^3+O(h^4)\\&=y_n+f_n h+\frac{h^2}{2}\left[\frac{\partial f_n}{\partial x}+\frac{\partial f_n}{\partial y}f_n\right]\\&\quad+\frac{h^3}{6}\left[\frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2 f_n}{\partial x\partial y}f_n+\frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2}f_n^2+\frac{\partial f_n}{\partial x}\frac{\partial f_n}{\partial y}+\left(\frac{\partial f_n}{\partial y}\right)^2 f_n\right]+O(h^4)\end{aligned}$$

从而有: $y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^3)$

所以, 改进的Euler方法是二阶方法.

§2.3 TAYLOR展开方法

设y(x)是初值问题(8.1)的精确解, 利用Taylor展开式可得

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + y'(x_n)h + \frac{y''(x_n)}{2!}h^2 + \cdots + \frac{y^{(p)}(x_n)}{P!}h^p + \frac{y^{(p+1)}(\xi)}{(p+1)!}h^{p+1}$$

$$= y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2!} f^{(1)}(x_n, y(x_n)) + \cdots + \frac{h^p}{P!} f^{(p-1)}(x_n, y(x_n)) + O(h^{p+1})$$

因此，可建立节点处近似值y_n满足的差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \dfrac{h^2}{2!} f^{(1)}(x_n, y_n) + \cdots + \dfrac{h^p}{P!} f^{(p-1)}(x_n, y_n) \\ y_0 = \alpha \quad , n = 0,1,2\cdots, N-1 \end{cases}$$

称之为p阶Taylor展开方法.

其中

$$f^{(1)}(x, y) = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} f(x, y)$$

$$f^{(2)}(x, y) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} f^2 + \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial y} + (\frac{\partial f}{\partial y})^2 f$$

…… …… ……

可见,公式的局部截断误差为: $y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^{p+1})$.

所以,此差分公式是p阶方法.

由于Taylor展开方法涉及很多复合函数$f(x,y(x))$的导数的计算,比较繁琐,因而很少直接使用,经常用它为多步方法提供初始值.然而, Taylor展开方法给出了一种构造单步显式高阶方法的途径.

§3 RUNGE-KUTTA方法

§ 3.1 Runge-Kutta方法的构造

Euler方法可写为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK \\ K = f(x_n, y_n) \end{cases}$$

改进的Euler方法可写为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + hK_1) \end{cases}$$

构造差分公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2 + \cdots + \lambda_p K_p) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \alpha_2 h, y_n + h\beta_{21} K_1) \\ \cdots\cdots \qquad \cdots\cdots \\ K_P = f(x_n + \alpha_P h, y_n + h\sum_{i=1}^{p-1} \beta_{pi} K_i) \end{cases}$$

其中$\{\lambda_i,\alpha_i,\beta_{ij}\}$为待定参数.

若此公式的局部截断误差为

$O(h^{p+1})$,称公式为**p阶Runge-kutta方法**,简称**p阶R-K方法**.

对于p=2的情形, 应有

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(\lambda_1 K_1 + \lambda_2 K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \alpha h, y_n + \beta h K_1) \end{cases} \tag{8.3}$$

由于

$y_{n+1}=y_n+h\lambda_1 f_n+h\lambda_2(f_n+\alpha h f_{xn}+\beta h f_n f_{yn})+O(h^3)$

$=y_n+h(\lambda_1+\lambda_2)f_n+h^2\lambda_2(\alpha f_{xn}+\beta f_n f_{yn})+O(h^3)$

$$y(x_{n+1}) = y_n + hf_n + \frac{h^2}{2}\left(f_{xn} + f_n f_{yn}\right) + O(h^3)$$

所以,只要令

$\lambda_1+\lambda_2=1,\ \alpha\lambda_2=1/2,\ \beta\lambda_2=1/2$ (8.4)

若取$\alpha=1$,则得$\lambda_1=\lambda_2=1/2,\beta=1$,此时公式(8.3)就是改进的Euler公式;

若取$\lambda_1=0$,则得$\lambda_2=1,\alpha=\beta=1/2$,公式(8.3)为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_2 \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \end{cases}$$

称之为**中点公式**,或可写为

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}hf(x_n, y_n))$$

一般地, 参数由(8.4)确定的一族差分公式(8.3)统称为二阶R-K方法.

高阶R-K公式可类似推导.

下面列出常用的三阶、四阶R-K公式.

三阶R-K公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = f(x_n + h, y_n - hK_1 + 2hK_2) \end{cases}$$

四阶标准R-K公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3) \end{cases}$$

例3 用四阶标准R-K方法求初值问题

$$\begin{cases} y' = y - 2x/y, & 0 \le x \le 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

的数值解, 取步长h=0.2 .

解 四阶标准R-K公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}h(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = y_n - 2x_n / y_n \\ K_2 = y_n + \frac{1}{2}hK_1 - (2x_n + h)/(y_n + \frac{1}{2}hK_1) \\ K_3 = y_n + \frac{1}{2}hK_2 - (2x_n + h)/(y_n + \frac{1}{2}hK_2) \\ K_4 = y_n + hK_3 - 2(x_n + h)/(y_n + hK_3) \end{cases}$$

计算结果如下:

n	x_n	y_n	$y(x_n)$	n	x_n	y_n	$y(x_n)$
0	0.0	1.00	1.00	3	0.6	1.4833	1.4832
1	0.2	1.1832	1.1832	4	0.8	1.6125	1.6125
2	0.4	1.3417	1.3416	5	1.0	1.7321	1.7321

也可以构造隐式R-K方法,其一般形式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h\sum_{r=1}^{p} \lambda_r K_r \\ K_r = f(x_n + \alpha_r h, y_n + h\sum_{i=1}^{p} \lambda_{ri} K_i) \end{cases} \qquad , r = 1,2,\cdots,p$$

称之为**p级隐式R-K方法**,同显式R-K方法一样确定参数.如

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(K_1 + K_2) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + h, y_n + \frac{1}{2}hK_1 + \frac{1}{2}hK_2) \end{cases}$$

是二级二阶隐式R-K方法,也就是梯形公式.但是p级隐式R-K方法的阶可以大于p,例如,一级隐式中点公式为

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hK_1 \\ K_1 = f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hK_1) \end{cases}$$

或写为

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, \tfrac{1}{2}(y_n + y_{n+1}))$$

它是二阶方法.

§3.2 变步长RUNGE-KUTTA方法

以p阶R-K方法为例讨论.设从x_n以步长h计算$y(x_{n+1})$的近似值为 $y_{n+1}^{(h)}$,局部截断误差为

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(h)} = Ch^{p+1}$$

其中,C是与h无关的常数.

如果将步长减半,取h/2为步长, 从x_n经两步计算得到$y(x_{n+1})$的近似值记为 $y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}$,其局部截断误差为

于是有

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(\frac{h}{2})} \approx 2C(\frac{h}{2})^{p+1} = \frac{1}{2^p} Ch^{p+1}$$

$$\frac{y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}}{y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(h)}} \approx \frac{1}{2^p}$$

从而,得到事后误差估计

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(\frac{h}{2})} \approx \frac{1}{2^p - 1}(y_{n+1}^{(\frac{h}{2})} - y_{n+1}^{(h)})$$

可见,当 $|y_{n+1}^{(\frac{h}{2})} - y_{n+1}^{(h)}| \le \varepsilon$ 成立时,可取 $y(x_{n+1}) \approx y_{n+1}^{(\frac{h}{2})}$.否则,应将步长再次减半进行计算.

§4 单步方法的收敛性和稳定性

§ 4.1 单步方法的收敛性

求解初值问题

$$\begin{cases} y'=f(x,y),\ a\le x\le b \\ y(a)=\alpha \end{cases}$$

的单步显式方法可一统一写为如下形式

$$y_{n+1}=y_n+h\Phi(x_n,y_n,h) \qquad (8.5)$$

其中$\Phi(x,y,h)$称为**增量函数**.

对于Euler方法,有

$$\Phi(x,y,h)=f(x,y)$$

对于改进的Euler方法,有

$$\Phi(x,y,h)=1/2[f(x,y)+f(x+h,y+hf(x,y))]$$

设y(x)是初值问题(8.1)的解，y_n是单步法 (8.5)产生的近似解.如果对任意固定的点x_n,均有 $\lim\limits_{h\to 0} y_n =$ $y(x_n)$,则称单步法(8.5)是收敛的.

可见,若方法(8.5)是收敛的,则当$h\to 0$时,整体截断误差$e_n=y(x_n)-y_n$将趋于零.

定理8.1 设单步方法(8.5)是$p\geq 1$阶方法, 增量函数$\Phi(x,y,h)$在区域$\{a\leq x\leq b,-\infty<y<+\infty,0\leq h\leq h_0\}$上连续,且关于y满足Lipschitz条件,初始近似$y_0=y(a)=\alpha$,则方法(8.5)是收敛的,且存在与h无关的常数C,使

$$|y(x_n)-y_n|\leq Ch^p$$

证明 因为单步方法(8.5)是p阶方法,则y(x)满足

$y(x_{n+1})=y(x_n)+h\Phi(x_n,y(x_n),h)+R_n(h)$

其中,局部截断误差$|R_n(h)|\le C_1h^{p+1}$, 记$e_n=y(x_n)-y_n$,则有

$e_{n+1}=e_n+h[\Phi(x_n,y(x_n),h)-\Phi(x_n,y_n,h)]+R_n(h)$

利用Lipschitz条件得

$|e_{n+1}|\le(1+hL)|e_n|+C_1h^{P+1}$

递推得到

$$\begin{aligned}|e_n| &\le (1+hL)^n|e_0|+C_1h^{p+1}\sum_{i=0}^{n-1}(1+hL)^i \\ &\le (1+hL)^n|e_0|+\frac{C_1h^{p+1}}{hL}[(1+hL)^n-1]\end{aligned}$$

注意到

$$1+hL\le e^{hL}\ ,\ (1+hL)^n\le e^{nhL}\le e^{L(b-a)}$$

则有

$$|e_n| \le |e_0| e^{L(b-a)} + C_1 h^p / L (e^{L(b-a)} - 1)$$

由于$e_0=y(a)-y_0=0$, 所以有

$$|e_n| \le C_1 h^p / L (e^{L(b-a)} - 1) = Ch^p$$

设$f(x,y)$连续且关于y满足Lipschitz条件,对于Euler方法,由于$\Phi(x,y,h)=f(x,y)$,故Euler方法是收敛的.

对于改进的Euler方法,由$f(x,y)$的Lipschitz条件有

$$|\Phi(x,y,h)-\Phi(x,y^*,h)| \le 1/2|f(x,y)-f(x,y^*)| + 1/2|f(x+h,y+hf(x,y))-f(x+h,y^*+hf(x,y^*))|$$

$$\le 1/2L(2+hL)|y-y^*|$$

则当$h \le h_0$时,Φ关于y满足常数为$1/2L(1+h_0L)$的Lipschitz

条件,因此改进的Euler方法是收敛的.

可类似验证各阶R-K方法是收敛的.

§4.2　单步方法的稳定性

定义8.2　对于初值问题(8.1),取定步长h,用某个差分方法进行计算时,假设只在一个节点值y_n上产生计算误差δ,即计算值$\bar{y}_n=y_n+\delta$,

如果这个误差引起以后各节点值$y_m(m>n)$的变化均不超过δ ,则称此差分方法是**绝对稳定的**.

讨论数值方法的稳定性,通常仅限于典型的试验方程

$$y'=\lambda y$$

其中λ是复数且$\mathrm{Re}(\lambda)<0$.

在复平面上,当方法稳定时要求变量λh的取值范围称为方法的**绝对稳定域**,它与实轴的交集称为**绝对稳定区间**.

将Euler方法应用于方程$y'=\lambda y$, 得到

$$y_{n+1}=(1+\lambda h)y_n$$

设在计算y_n时产生误差δ_n,计算值 $\bar{y}_n=y_n+\delta_n$,则δ_n将对以后各节点值计算产生影响.记 $\bar{y}_m=y_m+\delta_m$,$m\geq n$,由上式可知误差δ_m满足方程

$$\delta_m=(1+\lambda h)\delta_{m-1}=\ldots=(1+\lambda h)^{m-n}\delta_n\ ,\ m\geq n$$

可见,若要$|\delta_m|<|\delta_n|$,必须且只须$|1+\lambda h|<1$,因此Euler法的绝对稳定域为$|1+\lambda h|<1$,绝对稳定区间是$-2<\mathrm{Re}(\lambda)h<0$.

对隐式单步方法也可类似讨论.如将梯形公式用于方程$y'=\lambda y$,则有

$$y_{n+1}=y_n+h/2\ \lambda(y_n+y_{n+1})$$

解出y_{n+1}得

$$y_{n+1}=\frac{1+\frac{1}{2}\lambda h}{1-\frac{1}{2}\lambda h}y_n$$

类似前面分析,可知绝对稳定区域为

$$\left|\frac{1+\frac{1}{2}\lambda h}{1-\frac{1}{2}\lambda h}\right|<1$$

由于Re(λ)<0,所以此不等式对任意步长h恒成立,这是隐式公式的优点.

一些常用方法的绝对稳定区间为

方　法	方法的阶数	稳 定 区 间
Euler方法	1	(-2 ， 0)
梯形方法	2	(-∞ ， 0)
改进Euler方法	2	(-2 ， 0)
二阶R-K方法	2	(-2 ， 0)
三阶R-K方法	3	(-2.51 ， 0)
四阶R-K方法	4	(-2.78 ， 0)

例4 考虑初值问题

$$\begin{cases} y'=-30y, & 0\le x\le 1 \\ y(0)=1 \end{cases}$$

取步长h=0.1 ,利用Euler方法计算$y_{10}\approx y(1)$. $[y(x)=e^{-30x}]$

解 因$y_0=1$,计算得$y_{10}=1024$,而$y(1)=9.357623\times10^{-14}$.

这是因为$\lambda h=-3$不属于Euler方法的绝对稳定区间.

若取h=0.01,计算得$y_{100}=3.234477\times10^{-16}$.

若取h=0.001,计算得$y_{1000}=5.911998\times10^{-14}$.

若取h=0.0001,计算得$y_{10000}=8.945057\times10^{-14}$.

若取h=0.00001,计算得$y_{100000}=9.3156\times10^{-14}$.

单步显式方法的稳定性与步长密切相关, 在一种步长下是稳定的差分公式,取大一点步长就可能是不稳定的.

收敛性是反映差分公式本身的截断误差对数值解的影响;稳定性是反映计算过程中舍入误差对数值解的影响.只有即收敛又稳定的差分公式才有实用价值.

§5 线性多步方法

由于在计算y_{n+1}时 ,已经知道y_n ,y_{n-1} ,…,及$f(x_n,y_n)$, $f(x_{n-1},y_{n-1})$,…,利用这些值构造出精度高、计算量小的差分公式就是线性多步法.

§ 5.1 利用待定参数法构造线性多步方法

r+1步线性多步方法的一般形式为

$$y_{n+1}=\sum_{i=0}^{r}\alpha_i y_{n-i}+h\sum_{i=-1}^{r}\beta_i f_{n-i}$$

当$\beta_{-1}\neq 0$时,公式为隐式公式,反之为显式公式.参数$\{\alpha_i,\beta_i\}$的选择原则是使方法的局部截断误差为

$$y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h)^{r+2}$$

这里,局部截断误差是指 ,在$y_{n-i}=y(x_{n-i}),i=0,1,\ldots,r$的前提下,误差$y(x_{n+1})-y_{n+1}$.

例5

选取参数$\alpha,\beta_0,\beta_1,\beta_2$,使三步方法

$$y_{n+1}=\alpha y_n+h(\beta_0 f_n+\beta_1 f_{n-1}+\beta_2 f_{n-2})$$

为三阶方法.

解 设$y_n=y(x_n),y_{n-1}=y(x_{n-1}),y_{n-2}=y(x_{n-2})$,则有

$f_n=f(x_n,y(x_n))=y'(x_n)$

$f_{n-1}=f(x_{n-1},y(x_{n-1}))=y'(x_{n-1})=y'(x_n-h)$

$=y'(x_n)-hy''(x_n)+1/2h^2y'''(x_n)-1/6h^3y^{(4)}(x_n)+O(h^4)$

$f_{n-2}=y'(x_n)-2hy''(x_n)+2h^2y'''(x_n)-4/3h^3y^{(4)}(x_n)+O(h^4)$

于是有

$y_{n+1}=\alpha y(x_n)+h(\beta_0+\beta_1+\beta_2)y'(x_n)-h^2(\beta_1+2\beta_2)y''(x_n)$

$+h^3(1/2\beta_1+2\beta_2)y'''(x_n)-h^4/6(\beta_1+8\beta_2)y^{(4)}(x_n)+O(h^5)$

$y(x_{n+1})=y(x_n)+hy'(x_n)+1/2h^2y''(x_n)+1/6h^3y'''(x_n)$

$+1/24h^4y^{(4)}(x_n)+O(h^5)$

若使: $y(x_{n+1})-y_{n+1}=O(h^4)$,只要$\alpha,\beta_0,\beta_1,\beta_2$满足:

$\alpha=1$, $\beta_0+\beta_1+\beta_2=1$, $\beta_1+2\beta_2=-1/2$, $\beta_1+4\beta_2=1/3$

解之得:

$$\alpha=1,\quad \beta_0=\frac{23}{12},\quad \beta_1=-\frac{4}{3},\quad \beta_2=\frac{5}{12}$$

于是有三步三阶显式差分公式

$y_{n+1}=y_n+h/12(23f_n-16f_{n-1}+5f_{n-2})$

§5.2　利用数值积分构造线性多步方法

因为

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y(x))dx$$

设$p_r(x)$是函数$f(x,y(x))$的某个r次插值多项式,则有

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_r(x)dx+R_n$$

其中

$$R_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} (f(x, y(x)) - p_r(x))dx$$

由此,可建立差分公式

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_r(x)dx$$

选取不同的插值多项式$p_r(x)$,就可导出不同的差分公式.下面介绍常用的**Adams公式.**

1.Adams显式公式

设已求得精确解y(x)在步长为h的等距节点$x_{n-r},\ldots,x_n$上的近似值$y_{n-r},\ldots,y_n$, 记$f_k=f(x_k,y_k)$,利用r+1个数据$(x_{n-r},f_{n-r}),\ldots,(x_n,f_n)$构造r次Lagrange插值多项式

$$p_r(x) = \sum_{j=0}^{r} l_{n-j}(x) f_{n-j}$$

其中

$$l_{n-j}(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{r}\frac{(x-x_{n-k})}{(x_{n-j}-x_{n-k})}\qquad j=0,1,\cdots r$$

由此,可建立差分公式

$$y_{n+1}=y_n+\sum_{j=0}^{r}\int_{x_n}^{x_{n+1}}l_{n-j}(x)dx\,f_{n-j}$$

由于

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}}l_{n-j}(x)dx=\int_{x_n}^{x_{n+1}}\prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{r}\frac{(x-x_{n-k})}{(x_{n-j}-x_{n-k})}dx\qquad (令x=x_n+th)$$

$h\beta_{rj}$

$$=\frac{(-1)^j h}{j!(r-j)!}\int_0^1\prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{r}(t+k)dt\qquad ,j=0,1,\cdots r$$

则有

$$y_{n+1}=y_n+h\sum_{j=0}^{r}\beta_{rj}f_{n-j}$$

称之为**r+1步Adams显式公式.**

下面列出几个带有局部截断误差主项的Adams显式公式

r=0 $y_{n+1}=y_n+hf_n+(1/2)h^2y''(x_n)$

r=1 $y_{n+1}=y_n+(h/2)(3f_n-f_{n-1})+(5/12)h^3y'''(x_n)$

r=2 $y_{n+1}=y_n+(h/12)(23f_n-16f_{n-1}+5f_{n-2})+(3/8)h^4y^{(4)}(x_n)$

r=3 $y_{n+1}=y_n+(h/24)(55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3})+(251/720)h^5y^{(5)}(x_n)$

2.Adams隐式公式

如果利用r+1个数据$(x_{n-r+1},f_{n-r+1}),\ldots,(x_{n+1},f_{n+1})$构造r次Lagrange插值多项式$p_r(x)$,则可导出数值稳定性好的隐式公式,称为**Adams隐式公式**,其一般形式为

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{j=0}^{r} \beta_{rj}^{*} f_{n-j+1}$$

其中系数为

$$\beta_{rj}^{*} = \frac{(-1)^j}{j!(r-j)!}\int_{-1}^{0}\prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{r}(t+k)dt \qquad , j = 0,1,\cdots r$$

下面列出几个带有局部截断误差主项的Adams隐式公式

r=0 $y_{n+1}=y_n+hf_{n+1}-(1/2)h^2y''(x_n)$

r=1 $y_{n+1}=y_n+(h/2)(f_n+f_{n+1})-(1/12)h^3y'''(x_n)$

r=2 $y_{n+1}=y_n+(h/12)(5f_{n+1}+8f_n-f_{n-1})$
$-(1/24)h^4y^{(4)}(x_n)$

r=3 $y_{n+1}=y_n+(h/24)(9f_{n+1}+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2})$
$-(19/720)h^5y^{(5)}(x_n)$

3.Adams预估-校正公式

由显式公式提供一个预估值，再用隐式公式校正一次，求得数值解，称为**预估校正方法**。

一般预估公式和校正公式都采用同阶公式。例如：

预估 $\bar{y}_{n+1}=y_n+(h/24)(55f_n-59f_{n-1}+37f_{n-2}-9f_{n-3})$

校正 $y_{n+1}=y_n+(h/24)(9\bar{f}_{n+1}+19f_n-5f_{n-1}+f_{n-2})$

$\bar{f}_{n+1}=f(x_{n+1},\ \bar{y}_{n+1})$, n=3,4,…

称为四阶Adams预估校正公式.实际计算时通常用四阶单步方法(如四阶R-K公式)为它提供起始值y_1,y_2,y_3 .

例6

用四阶Adams预估校正公式求解初值问题

$$\begin{cases} y' = y - 2x/y, & 0 \le x \le 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

取步长h=0.1.

解 用四阶R-K公式提供起始值,计算结果如下

x_n	R-k法y_n	预估值y_n	校正值y_n	精确值$y(x_n)$
0	1			1
0.1	1.095446			1.095445
0.2	1.183217			1.183216
0.3	1.264912			1.264991
0.4		1.341551	1.341641	1.341641
0.5		1.414045	1.414213	1.414214
0.6		1.483017	1.483239	1.483240
0.7		1.548917	1.549192	1.549193
0.8		1.612114	1.612450	1.612452
0.9		1.672914	1.673318	1.673320
1		1.731566	1.732048	1.732051

练习题

第250页　　习题8

8-5，8-7，8-8，8-11，

8-12，8-13，8-15

课间休息