数值分析

Numerical Analysis

第二章 线性方程组的解法

/* Method for Solving Linear Systems */

- 引 言/* Introdction */

线性代数方程组出现在工程与科学的许多领域中，而且很多数值求解问题最后也是导致于求解某些线性代数方程组，例如电学中的网络问题，船体数学放样中建立三次样条函数问题，用最小二乘法求实验数据的曲线拟合问题，解非线性方程组问题，用差分法或者有限元方法解常微分方程、偏微分方程边值问题等。

众多的事实表明，解线性代数方程组的有效方法在计算数学和科学计算中具有特殊的重要性。

➢线性方程组的两种数值解法

- 直接解法/* Direct Methods */

经过有限步算术运算，可求得方程组精确解的方法（若计算过程中没有舍入误差）。

- 特点

直接法是解低阶稠密方程组的有效方法。

- 迭代法/* Iterative Methods */

用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解的方法。

- 特点

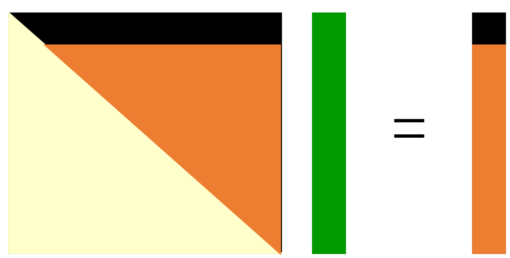
迭代法是解大型稀疏方程组（尤其是由微分方程离散后得到的大型方程组）的重要方法。

§ 2 高斯消元法 /* Gaussian Elimination */

求解 $A\vec{x}=\vec{b}$

➢ 高斯消元法：

思路 首先将A化为上三角阵 /* upper-triangular matrix */，再回代求解 /* backward substitution */。



例: 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 & (1) \\ 4x_2 - x_3 = 5 & (2) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (3) \end{cases}$$

解 第一步，将方程（1）乘上-2 加到方程（3）上去，消去（3）中的未知数 x_1，得到

$$-4x_2 - x_3 = -11 \qquad (4)$$

第二步，将方程（2）加到方程（4）上去，消去方程（4）中的未知数 x_2 得到与原方程组等价的三角形方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ 4x_2 - x_3 = 5 \\ -2x_3 = -6 \end{cases} \Longrightarrow x^* = (1,2,3)^T$$

上述过程相当于

$$(A\,|\,b)=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & \vdots & 6\\ 0 & 4 & -1 & \vdots & 5\\ 2 & -2 & 1 & \vdots & 1\end{bmatrix}\xrightarrow{(-2)\times r_1+r_3\to r_3}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & \vdots & 6\\ 0 & 4 & -1 & \vdots & 5\\ 0 & -4 & -1 & \vdots & -11\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2+r_3\to r_3}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & \vdots & 6\\ 0 & 4 & -1 & \vdots & 5\\ 0 & 0 & -2 & \vdots & -6\end{bmatrix}$$

其中 r_i 为矩阵的第 i 行。

一般解n阶方程组的Guass消去法

设有线性方程组

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

或改写为矩阵形式 $AX = b$，其中

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

消元 记 $A^{(1)}=A=(a_{ij}^{(1)})_{n\times n}$， $\vec{b}^{(1)}=\vec{b}=\begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix}$

Step 1：设 $a_{11}^{(1)}\neq 0$ 计算因子 $l_{i1}=a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}\quad (i=2,\ldots,n)$

将增广矩阵/* augmented matrix */ 第 i 行 − l_{i1} × 第1行，得到

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

其中

$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-l_{i1}a_{1j}^{(1)} \\ b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-l_{i1}b_1^{(1)} \end{cases}$$

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

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

且计算

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-l_{ik}a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-l_{ik}b_k^{(k)} \end{cases}$$

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

共进行 $n-1$

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

回代

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

$$x_i = \frac{b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}} \qquad (i = n-1, \dots, 1)$$

例：用 Gauss 消去法解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\ 3x_1 + x_2 + 2x_3 = 6 \\ x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 5 \end{cases}$$

解： 对增广矩阵

$$\left[A^{(1)} \mid b^{(1)}\right]=\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 6 \\ 1 & 2 & 2 & 5 \end{array}\right]$$

用 r_i 表示第 i 个方程，及增广矩阵的第 i 行，用 $r_i + ar_j \to r_i$ 表示第 i 个方程（行）乘数 a 加至第 j 个方程（行）.

对 $\left[A^{(1)} \mid b^{(1)}\right]$ 执行行初等变换 $r_2 - \frac{3}{2}r_1 \to r_2,\ r_3 - \frac{1}{2}r_1 \to r_3$

得到

$$\left[A^{(1)} \mid b^{(1)}\right]=\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 3/2 & 3/2 & 3 \end{array}\right]$$

再进行行初等变换 $r_3+3r_2\to r_3$，得

$$\left[A^{(3)}\,|\,b^{(3)}\right]=\left[\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 3 \end{array}\right]$$

这样就产生了三角形方程组

$$\begin{cases} 2x_1+x_2+x_3=4 \\ -\dfrac{1}{2}x_2+\dfrac{1}{2}x_3=0 \\ 3x_3=3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1=1 \\ x_2=1 \\ x_3=1 \end{cases}$$

消去过程完结，然后实现回代过程，得出方程组的解。

定理 如果A为n阶非奇异矩阵，则可通过高斯消去法（及交换两行的初等变换）将方程组化为三角形方程组。

矩阵 A 什么条件下才能保证 $a_{kk}^{(k)} \neq 0 \quad (k=1,2,\cdots,n)$

引理 约化的主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i=1,2,\cdots,k)$ 的充要条件是矩阵A的顺序主子式 $D_i \neq 0$ $(i=1,2,\cdots,k)$ 即 $D_1 = a_{11} \neq 0$

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0 \qquad (i=2,3,\cdots,k)$$

证明：首先利用归纳法证明引理的充分性，显然，当 $k=1$ 时引理的充分性是成立的，现假设引理对 $k-1$是成立的，求证引理对 k亦成立，由归纳法设有$a_{ii}^{(i)} \neq 0$ $(i=1,2,\cdots,k-1)$ 于是可用高斯消去法将 $A^{(1)}=A$ 约化到 $A^{(k)}$ 中，即

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

且有 $D_2 = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)}$ ； $D_3 = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} a_{33}^{(3)}$

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{kk}^{(k)}$$

由设 $D_i \neq 0 (i = 1,2,\cdots,k)$ 及上式，则有 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，即引理的充分性对 k 成立。

必要性成立是显然的,由假设$a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i=1,2,\cdots,k)$利用上式亦可推出 $D_i \neq 0 (i=1,2,\cdots,k)$.

推论 如果A的顺序主子式$D_k \neq 0 \ (k=1,2,\cdots,n-1)$

则
$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} = D_1 \\ a_{kk}^{(k)} = D_k / D_{k-1} \end{cases}$$

定理 若A的所有顺序主子式 /* determinant of leading principal submatrices */ 均不为0，则高斯消元无需换行即可进行到底，得到唯一解。

Guass法的问题：在消元过程中可能出现 $a_{kk}^{(k)} = 0$ 的情况，这时消去法将无法进行；即使主元素$a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 但很小时，用其做除数，会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，最后也使得计算解不可靠。

➢ §3 选主元消去法 /* Pivoting Strategies */

例：单精度解方程组 $\begin{cases} 10^{-9}x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$

/* 精确解为 $x_1^* = \dfrac{1}{1-10^{-9}} = 1.\overbrace{00\ldots0}^{8个}100\ldots$ 和 $x_2^* = 2 - x_1 = 0.\overbrace{99\ldots9}^{8个}899\ldots$ */

算法1：用Gaussian Elimination计算：

$$l_{21} = a_{21} / a_{11} = 10^9$$

$$a_{22} = 1 - l_{21} \times 1 = 0.\overbrace{0\ldots0}^{8个}1 \times 10^9 - 10^9 \doteq -10^9$$

$$b_2 = 2 - l_{21} \times 1 \doteq -10^9$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 10^{-9} & 1 & \\ 0 & -10^9 & -10^9 \end{bmatrix}$$

小主元 /* Small pivot element */ 可能导致计算失败。

$$\Rightarrow \quad x_2 = 1, \quad x_1 = 0$$

算法2:

$$\begin{bmatrix} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 10^{-9} & 1 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

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

- **原因分析**：用 x_1, x_2 表示某个算法得到的计算解，并令

$$\varepsilon_1 = x_1 - x_1^*,\ \varepsilon_2 = x_2 - x_2^*$$

在这里对于两种算法 ε_2 相同，ε_1 却不相同。

当用算法1时，有

$$\left.\begin{aligned} 10^{-9} x_1^* + x_2^* &= 1 \\ 10^{-9} x_1 + x_2 &\approx 1 \end{aligned}\right\} \xrightarrow{\text{相减得}} 10^{-9} \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \approx 0$$

所以 $|\varepsilon_1| \approx 10^9 |\varepsilon_2|$

当用算法2时，同理可知有 $|\varepsilon_1| \approx |\varepsilon_2|$

- 列主元消去法 /* Partial Pivoting, or *maximal column pivoting* */

设方程组的增广矩阵为

$$B=\left[\begin{array}{cccc:c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array}\right]$$

首先在A的第一列中选取绝对值最大的元素作为主元素，例如

$$|a_{i_1,1}|=\max_{1\le i\le n}|a_{i1}|\neq 0$$

然后交换 B 的第 1 行与第 i_1行，经第 1 次消元计算得

$$(A\,|\,b)\to(A^{(2)}\,|\,b^{(2)})$$

重复上述过程，设已完成第 $k-1$ 步的选主元素，交换两行及消元计算，$(A|b)$ 约化为

$$(A^{(k)}|b^{(k)})=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & \vdots & b_1 \\ & a_{22} & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2n} & \vdots & b_2 \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & \vdots & b_k \\ & & & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk} & \cdots & a_{nn} & \vdots & b_n \end{bmatrix}$$

其中 $A^{(k)}$ 的元素仍记为 a_{ij}，$b^{(k)}$ 的元素仍记为 b_i。

第 k 步选主元素（在 $A^{(k)}$ 右下角方阵的第 1 列内选），即确定 i_k，使

$$|a_{i_k,k}|=\max_{k\le i\le n}|a_{ik}|\neq 0$$

交换 $(A^{(k)}\,|\,b^{(k)})$ 第k行与 i_k 行的元素，再进行消元计算，最后将原方程组化为

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

回代求解，得

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

• 例 用列主元消去法解方程组

第一次的主元为 $a_{21}=5$

$$\begin{cases} x_1+2x_2+3x_3=1 & r_1 \\ 5x_1+4x_2+10x_3=0 & r_2 \\ 3x_1-0.1x_2+x_3=0 & r_3 \end{cases}$$

解： 进行行交换 $r_1 \leftrightarrow r_2$ ，再消元得

第二次的主元为 $a_{32}=-2.5$

$$\begin{cases} 5x_1+4x_2+10x_3=0 \\ 1.2x_2+x_3=1 \\ -2.5x_2-5x_3=2 \end{cases}$$

进行行交换 $r_2 \leftrightarrow r_3$ ，再消元后得

$$\begin{cases} 5x_1+4x_2+10x_3=0 \\ -2.5x_2-5x_3=2 \\ -1.4x_3=1.96 \end{cases} \xrightarrow{\text{回代求解}} \begin{aligned} x_3&=-1.4, \\ x_2&=2, \\ x_1&=1.2 \end{aligned}$$

➢ 运算量 /* Amount of Computation */

由于计算机中乘除 /* multiplications / divisions */ 运算的时间远远超过加减 /* additions / subtractions */ 运算的时间，故估计某种算法的运算量时，往往只估计**乘除的次数**，而且通常以乘除次数的**最高次幂**为运算量的**数量级**。

Gaussian Elimination:

$(n-k)$ 次

Step k：设

且

$(n-k)\,(n-k+2)$ 次

Gaussian Elimination 的总乘除次数为 $\dfrac{n^3}{3}+n^2-\dfrac{1}{3}n$，运算量为 $\dfrac{n^3}{3}$ 级。

消元乘除次数：

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+2)=\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5}{6}n$$

共进行 $n-1$

$b_n^{(n)}$

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

$(n-i+1)$ 次

回代乘除次数：

$$x_i=\frac{b_i^{(i)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}^{(i)}x_j}{a_{ii}^{(i)}}\quad(i=n-1,\ldots,1)$$

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