科学与工程计算方法 **Winter 2017**

Lecture 3: 线性代数方程组的数值解法

Lecturer: Zhitao Liu *Scribes: Yusu Pan*

3.1 引言

- 大型线性代数方程组 (P61)
$$Ax = b \tag{3.1}$$
- 系数矩阵 A, 右端向量 b 和解向量 x (P61)
- Gram 法则: 需要 $n! \times (n-1)$ 次乘法
- 直接法: 将原式化为上三角方程组
$$Ux = L^{-1}b \tag{3.2}$$
  - 高斯消去法和它的变种, 直接三角分解法
  - 对于中小型方程组, 常选用直接法, 因为直接法能在预定的计算步骤内求得精确解 (不计舍入误差), 可靠且效率高.
  - 对于高阶的, 特别是大型稀疏方程组, 由于直接法存储量和计算量太大, 通常迭代法更具竞争力.
- 基本迭代法, 如 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法

3.2 高斯消去法

3.2.1 顺序消去过程和矩阵的 LU 分解

- 高斯消去法的消元过程: P62-64
  - 消元因子: l_{ik}
  - 主元素: $a_{kk}^{(k)}$
  - 高斯消元回代过程均要求主元素 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$
- 高斯消去法的回代过程: P64
- 矩阵的 LU 分解: P64-65
$$A = LU \tag{3.3}$$
$$\det A = \prod_{i=1}^{n} a_{ii}^{(i)} \tag{3.4}$$

例 3.2.1. *(求系数矩阵 A 的三角分解并计算 $\det A$) P66*

3.2.2 可行性和计算量

定理 3.2.1. 如果矩阵 A 的各阶顺序主子是式均不为零, 即 $D_k = \det A \neq 0$, 则 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$

- A 对称正定 $\Rightarrow a_{kk}^{(k)} > 0$
- A 严格对焦占优 $\Rightarrow a_{kk}^{(k\neq} > 0$
- 计算量: 当 n 很大时, 略去 n 的低次项, 则加减乘除运算总次数以 $2n^33$ 的渐近速度增长

3.2.3 数值的稳定性: 选主元

- 零主元或小主元会导致消元不可行或数值不稳定
- 选主元思想: 在第 k 列元素 $a_{kk}^{(k)}$ 之下的所有元素中选一个绝对值最大的元素作为主元素, 使消元因子 $|l_{ik}| < 1$, 达到抑制舍入误差的作用, 使算法基本稳定. (P69)
- 列主元消去法: 通过换行来选主元. 一个矩阵的两行交换, 其行列式反号.
- 完全选主元法: 在 $A^{(k)}$ 中右下角的子矩阵中选取绝对值最大的元素作为主元素.
- 高斯选主元法实现矩阵的三角分解: 排列阵 p (P72)

$$A = pLU \tag{3.5}$$

例 3.2.2. *(使用高斯列主元消去法求解线性方程组)*

例 3.2.3. *(使用高斯列主元消去法求矩阵的三角分解)*

3.3 矩阵的直接三角分解法

- 三对角形方程组

$$Ax = f \tag{3.6}$$

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \tag{3.7}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & l_n & 1 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} u_1 & d_1 & & & \\ & u_2 & d_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & d_{n-1} \\ & & & & u_n \end{bmatrix} \tag{3.8}$$

3.3.1 三对角形方程组的追赶法

$$\begin{cases} d_i = c_i \\ u_1 = b_1 \\ l_i = \frac{a_i}{u_{i-1}} \\ u_i = b_i - l_i c_{i-1} \end{cases} \tag{3.9}$$

$$\begin{cases} y_1 = f_1 \\ y_i = f_i - l_i y_{i-1} \end{cases} \tag{3.10}$$

$$\begin{cases} x_n = \frac{y_n}{u_n} \\ x_i = \frac{y_i - c_i x_{i+1}}{u_i} \end{cases} \tag{3.11}$$

- 整个求解过程仅需 $5n-4$ 次乘除和 $3(n-1)$ 次加减运算, 共 $8n-7$ 次运算
- 仅需 4 个一维数组

定理 3.3.1. *(追赶法可行的充要条件)*

例 3.3.1. *(用追赶法求解三对角方程组 $Ax = f$)*

3.3.2 对称正定的 Cholesky 分解法

定理 3.3.2.

$$\begin{aligned} A &= LL^T \\ l_{jj} &= \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2} \\ l_{ij} &= \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}} \end{aligned} \tag{3.12}$$

Cholesky 法 (或平方根法)

$$\begin{cases} Ly = b \\ L^T x = y \end{cases} \tag{3.13}$$

计算公式为:

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{b_1}{L_{11}} \\ y_i &= \frac{(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k)}{l_{ii}} \end{aligned} \tag{3.14}$$

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{y_n}{l_{nn}} \\ x_i &= \frac{(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k)}{l_{ii}} \end{aligned} \tag{3.15}$$

- 计算量比高斯消去法减少了一半
- 通常是数值稳定的, 不必选主元

例 3.3.2. *(用 Cholesky 方法解方程组 $Ax = b$)*

- 对称正定: $A^T = A$, $D_k(A) > 0$
- $A = LL^T$
- $Ly = b$
- $L^T x = y$

3.4 方程组的性态, 条件数

定义 3.4.1. *(病态矩阵, 病态方程组与良态方程组)*

定义 3.4.2. *(条件数)*

$$cond(A) = \|A^{-1}\|\|A\| \tag{3.16}$$

常用的条件数

$$\begin{aligned} cond_\infty(A) &= \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty \\ cond_1(A) &= \|A^{-1}\|_1 \|A\|_1 \\ cond_2(A) &= \|A^{-1}\|_2 \|A\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}} \end{aligned} \tag{3.17}$$

- *1* 范数: 列和范数
- ∞ 范数: 行和范数

例 3.4.1. *(计算 ∞-条件数, 并说明 δb 对解向量的影响)*

定理 3.4.1. *(事前误差估计式)*

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \cdots \tag{3.18}$$

推论 3.4.1.

推论 3.4.2.

定理 3.4.2. *(事后误差估计式)*

$$\cdots \le \frac{\|\tilde{x} - x\|}{\|x\|} \le \cdots \tag{3.19}$$

- 说明只有当 $cond(A) \approx 1$ 时, 方程组余量的相对误差是 δx 相对误差的很好度量.

3.5 大型方程组的迭代方法

(不考)

3.5.1 Jacobi 迭代和 Gauss-Seidel 迭代法

3.5.2 迭代法的收敛性和收敛速度

3.5.3 Jacobi 迭代和 Gauss-Seidel 迭代法的收敛性判定

3.5.4 分块迭代法