

数值分析

第四章 线性方程组的直接方法

参考 李庆扬 王能超 易大义

《数值分析》 第5版 第5章

第五章 方程组的数值解法

§ 5.1 引言

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，如电学中网络问题、用最小二乘法求实验数据的曲线拟合问题，工程中的三次样条函数的插值问题，经济运行中的投入产出问题以及大地测量、机械与建筑结构的设计计算问题等等，都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。

解线性方程组的直接法

常见的线性方程组是方程个数和未知量个数相同的 n 阶线性方程组, 一般形式为

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots\dots\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (6.1)$$

简记为 $Ax = B$, 其中

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

线性方程组的数值解法一般有两类：

1. 直接法：就是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），如克莱姆法则就是一种直接法，直接法中具有代表性的算法是高斯(Gauss)消去法。
2. 迭代法：就是用某种极限过程去逐步逼近线性方程组的精确解的方法。也就是从解的某个近似值出发，通过构造一个无穷序列去逼近精确解的方法。（一般有限步内得不到精确解）

§ 5.2 高斯消去法

5.2.1 高斯消去法的基本思想

先用一个简单实例来说明Gauss法的基本思想

例5.1 解线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 & \text{①} \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 4 & \text{②} \\ x_1 + 2x_2 = 7 & \text{③} \end{cases}$$

解：该方程组的求解过程实际上是将中学学过的消元法标准化, 将一个方程乘或除以某个常数, 然后将两个方程相加减, 逐步减少方程中的未知数, 最终使每个方程只含有一个未知数, 从而得出所求的解。整个过程分为消元和回代两个部分。

(1) 消元过程

第1步:将方程①乘上 (-2) 加到方程 ②上去,将方程①乘上 $(-\frac{1}{2})$ 加到方程 ③上去,这样就消去了第2、3个方程的 x_1 项,于是就得到等价方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 \\ 4x_2 - x_3 = 2 \\ \frac{5}{2}x_2 - \frac{3}{2}x_3 = \frac{13}{2} \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{④} \\ \text{⑤} \end{matrix}$$

(2) 回代过程

回代过程是将上述三角形方程组自下而上求解，从而求得原方程组的解：

$$\begin{aligned} x_1 &= 9, & x_2 &= -1, & x_3 &= -6 \\ \left\{ \begin{array}{l} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 \\ 4x_2 - x_3 = 2 \\ -\frac{7}{8}x_3 = \frac{21}{4} \end{array} \right. & & & & & \text{⑥} \end{aligned}$$

这样，消元过程就是把原方程组化为上三角形方程组，其系数矩阵是上三角矩阵。

前述的消元过程相当于对原方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ 4 & 2 & 5 \\ 1 & 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 7 \end{bmatrix}$$

的增广矩阵进行下列变换 (r_i 表示增广矩阵的第 i 行)

$$\tilde{A} = [A|b] = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 & 1 \\ 4 & 2 & 5 & 4 \\ 1 & 2 & 0 & 7 \end{bmatrix} \xrightarrow[r_3 + (-\frac{1}{2})r_1]{r_2 + (-2)r_1} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 & 1 \\ 0 & 4 & -1 & 2 \\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{3}{2} & \frac{13}{2} \end{bmatrix}$$

同样可得到与原方程组等价的方程组 ⑥

$$\xrightarrow{r_3 + (-\frac{5}{8})r_2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 & 1 \\ 0 & 4 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & -\frac{7}{8} & \frac{21}{4} \end{bmatrix}$$

由此看出, 高斯消去法解方程组基本思想是设法消去方程组的系数矩阵A的主对角线下的元素, 而将 $Ax=b$ 化为等价的上三角形方程组, 然后再通过回代过程便可获得方程组的解。

换一种说法就是用矩阵行的初等变换将原方程组系数矩阵化为上三角形矩阵, 而以上三角形矩阵为系数的方程组的求解比较简单, 可以从最后一个方程开始, 依次向前代入求出未知变量 x_n, x_{n-1}, \dots, x_1

这种求解上三角方程组的方法称为回代, 通过一个方程乘或除以某个常数, 以及将两个方程相加减, 逐步减少方程中的变元数, 最终将方程组化成上三角方程组, 一般将这一过程称为消元, 然后再回代求解。

通常把按照先消元, 后回代两个步骤求解线性方程组的方法称为高斯 (Gauss) 消去法。

5.2.2 高斯消去法算法构造

我们知道,线性方程组(6.1)用矩阵形式表示为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad (6.3)$$

解线性方程组(6.1)的高斯(Gauss)消去法的消元过程就是对(6.3)的增广矩阵进行行初等变换。将例6.1中解三阶线性方程组的消去法推广到一般的 $n \times n$ 阶线性方程组并记

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}, b_i^{(1)} = b_i \quad (i, j = 1, 2, \cdots, n)$$

则高斯消去法的算法构造归纳为:

(1) 消元过程, 斯消去法的消元过程由 $n-1$ 步组成:

第1步 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 把 (6.3) 中的第一列中元素 $a_{21}^{(1)}, a_{31}^{(1)}, \dots, a_{n1}^{(1)}$ 消为零, 令 $m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $(i = 2, 3, \dots, n)$

用 $-m_{i1}$ 乘以第1个方程后加到第 i 个方程上去, 消去第2~ n 个方程的未知数 x_1 , 得到 $A^{(2)}x = b^{(2)}$ 即

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & \vdots & & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

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

$$i, j = 2, 3, \dots, n$$

记为 $A^{(k)}x = b^{(k)}$ 其中

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

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad (i = k+1, \dots, n) \quad i, j = k+1, \dots, n$$

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

只要 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 消元过程就可以进行下去, 直到经过 $n-1$ 次消元之后, 消元过程结束, 得到与原方程组等价的上三角形方程组, 记为 $A^{(n)}x = b^{(n)}$

或者写成

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

即

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)} \\ \quad a_{22}^{(2)} x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)} \\ \quad \quad \quad \cdots \cdots \cdots \\ \quad \quad \quad \quad a_{nn}^{(n)} x_n = b_n^{(n)} \end{array} \right. \quad (6.7)$$

(2) 回代过程

就是对上三角方程组 (6.7) 自下而上逐步回代解方程组计算，即

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}$$
$$x_i = \frac{b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}}, \quad (i = n-1, \cdots, 2, 1)$$

(3) 高斯消去法的计算步骤:

① 消元过程; 设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 对 $k = 1, 2, \dots, n-1$ 计算

$$\begin{cases} m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \\ a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \end{cases}$$
$$i, j = k+1, k+2, \dots, n$$

② 回代过程

$$\begin{cases} x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} \\ x_i = \frac{b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}} \end{cases}$$
$$i = n-1, n-2, \dots, 1$$

(4) 高斯消去法流程图，

(5) Gauss消去法计算量 $\approx \frac{1}{3}n^3$

① 消元计算: $a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}$
($i, j = k+1, k+2, \dots, n$)

第一步计算乘数 m_{ik} , $m_{ik} = a_{i1}/a_{11}$ ($i=2, 3, \dots, n$)

需要 $n-1$ 次除法运算,

计算 $a_{ij}^{(2)}$ ($i, j=2, 3, \dots, n$)

需要 $(n-1)^2$ 次乘法运算及 $(n-1)^2$ 次加减法运算,

第k 步	加减法次数	乘法次数	除法次数
1	$(n-1)^2$	$(n-1)^2$	$(n-1)$
2	$(n-2)^2$	$(n-2)^2$	$(n-2)$
3	$(n-3)^2$	$(n-3)^2$	$(n-3)$
...
n-1	1	1	1
合计	$n(n-1)$ $(2n-1)/6$	$n(n-1)$ $(2n-1)/6$	$n(n-1)/2$

乘除法次数：

$$\text{MD} = n(n-1)(2n-1)/6 + n(n-1)/2 = 1/3 n(n^2-1)$$

加减法次数： $\text{AS} = n(n-1)(2n-1)/6$

算法. 若 $a_{kk}^{(k)} \neq 0, k = 1, 2, \dots, n$, $A^{(k)}$ 覆盖 $A, .$

1.消去: 对于 $k = 1, 2, \dots, n$,

(1) 若 $a_{kk} = 0$, 则停止计算.

(2) 对于 $i = k + 1, \dots, n$

$$(i) \quad m_{ik} \leftarrow a_{ik} / a_{kk}$$

$$b_i \leftarrow b_i - m_{ik} \cdot b_k.$$

(ii) 对于 $j = k + 1, \dots, n$

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{ik} \cdot a_{kj}.$$

2.回代: 对于 $i = n, \dots, 1$,

$$(1) \quad x_i \leftarrow b_i,$$

(2) 对于 $j = i + 1, \dots, n$

$$x_i \leftarrow x_i - a_{ij} \cdot x_j,$$

$$(3) \quad x_i \leftarrow x_i / a_{ii}.$$

乘除法运算工作量

第 k 步消元: $m_{ik} : n - k$ 次除法, $a_{ij}^{(k+1)} : (n - k)^2$ 次乘法,
 $b_i^{(k+1)} : n - k$ 次乘法, $(i, j = k + 1, \dots, n)$.

消元过程乘除法次数: $\sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n$

回代过程乘除法次数: $1 + \sum_{k=1}^{n-1} (n-k+1) = \frac{1}{2}n(n+1)$

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

总的乘除法运算次数: $\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$

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

非零判断次数最多为: $\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{1}{2}n(n-1)$

行交换的元素个数为: $\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{1}{2}n(n-1)$

5.2.3 高斯消去法的适用条件

定理1 方程组系数矩阵的顺序主子式全不为零则高斯消去法能实现方程组的求解。

证明 上三角形方程组是从原方程组出发，通过逐次进行“一行乘一数加到另一行”而得出的，该变换不改变系数矩阵顺序主子式的值。

设方程组系数矩阵 $A = (a_{ij})_n$ ，其顺序主子式

$$A_m = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mm} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (m = 1, 2, \dots, n)$$

经变换得到的上三角形方程组的顺序主子式

$$A_m = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1m}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2m}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{mm}^{(m)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{mm}^{(m)} \neq 0$$

$(m = 1, 2, \dots, n)$ 所以能实现高斯消去法求解

定义5.1 设矩阵 $A = (a_{ij})_n$ 每一行对角元素的绝对值都大于同行其他元素绝对值之和

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

则称 A 为严格对角占优矩阵。

定理 1.1 若方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵 A 为严格对角占优，则用高斯消去法求解时， $a_{kk}^{(k)}$ 全不为零。

得
$$|a_{ii}^{(2)}| = \left| a_{ii} - \frac{a_{i1}a_{1i}}{a_{11}} \right| \geq |a_{ii}| - \frac{|a_{i1}| |a_{1i}|}{|a_{11}|}$$

故有
$$\sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}^{(2)}| < |a_{ii}^{(2)}|, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

当 A 为严格对角占优时, $a_{11}^{(1)} = a_{11} \neq 0$, 余下的子阵仍是对角占优的, 从而又有 $a_{22}^{(2)} \neq 0$ 。依次类推全不为零。定理证毕。

再利用方程组的 \checkmark 对角占优性, 由上式可进一步得

$$\sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}^{(2)}| < |a_{ii}| - |a_{i1}| + \frac{|a_{i1}|}{|a_{11}|} (|a_{11}| - |a_{1i}|) = |a_{ii}| - \frac{|a_{i1}| |a_{1i}|}{|a_{11}|}$$

又由
$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij} - \frac{a_{i1}a_{1j}}{a_{11}}, \quad i, j = 2, 3, \dots, n$$

一般线性方程组使用高斯消去法求解时，在消元过程中可能会出现 $a_{kk}^{(k)} = 0$ 的情况，这时消去法将无法进行；即使 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ，但它的绝对值很小时，用其作除数，会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，将严重影响计算结果的精度。实际计算时必须避免这类情况的发生。主元素消去法就可弥补这一缺陷。

§ 5.3 高斯主元素消去法

- 交换原则：通过方程或变量次序的交换，使在对角线位置上获得绝对值尽可能大的系数作为 $a_{kk}^{(k)}$ ，称这样的 $a_{kk}^{(k)}$ 为主元素，并称使用主元素的消元法为主元素法
- 根据主元素选取范围分为：列主元素法、行主元素法、全主元素法

$$\begin{cases} 10^{-5} x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} 10^{-5} x_1 + x_2 = 1 \\ (1 - 10^5) x_2 = 2 - 10^5 \end{cases}$$

由此回代解出 $x_1 = 0, x_2 = 1$, 但这个解不满足原方程组, 解是错误的。这是因为所用的除数太小使得上式在消元过程中“吃掉”了下式, 解决这个问题方法之一就是采用列选主元高斯消元法。即按列选绝对值大的系数作为主元素, 则将方程组中的两个方程相交换, 原方程组变为

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ 10^{-5}x_1 + x_2 = 1 \end{cases}$$

将比较大的值换到主元的位置。

得到消元后的方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ (1-10^{-5})x_2 = 1-2 \times 10^{-5} \end{cases}$$

注意这里的计算顺序为将第一行的乘某个数加到第二行, 从而消去第二行的第一列的非零元素, 因此若此时第一行需要乘的数很大, 即 x_1 的系数很小, (拿这个例子举例) 由于在算出 x_2 之后。肯定要有舍入误差, 此时再将 x_2 代入第一个式子计算则由于一个大数加一个很小的数约等于大数, 因此便不能够准确算出 x_1 的值。

为了避免这样的计算误差, 通常将较大的值作为主元。

这时

$$1 - 10^5 = 0.00001 \times 10^5 - 10^5 = -10^5, \quad 2 - 10^5 = 0.00002 \times 10^5 - 10^5 = -10^5$$

因而方程组的实际形式是

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

由此回代解出 $x_1 = 1, x_2 = 1$, 这个结果是正确的

可见用高斯消去法解方程组时, 小主元可能导致计算失败, 因为用绝对值很小的数作除数, 乘数很大, 引起约化中间结果数量级严重增长, 再舍入就使得计算结果不可靠了, 故避免采用绝对值很小的主元素。以便减少计算过程中舍入误差对计算解的影响。

全主元素消去法

是通过方程或变量次序的交换，使在对角线位置上获得绝对值尽可能大的系数作为 $a_{kk}^{(k)}$ ，称这样的 $a_{kk}^{(k)}$ 为主元素。尽管它的算法更稳定，但计算量较大，实际应用中大多数使用列主元素消去法即可满足需要。

- 全主元素法不是按列选主元素，而是在全体待选系数中选取，则得全主元素法。

• 例5.3 用全主元素法解下列线组

注意通常解线性方程组时不能将系数矩阵的列元素呼唤，因为这样互换之后解出来的第一个未知量的值就不是 x_1 了，但是此处可以将行列均可以互换，因此需要时刻记着变换之后的各个未知量的位置在哪里，已经不能按照原来的未知量的顺序去写解出来的值。

$$\begin{cases} 10x_1 - 19x_2 - 2x_3 = 3 & (1) \\ -20x_1 + 40x_2 + x_3 = 4 & (2) \\ x_1 + 4x_2 + 5x_3 = 5 & (3) \end{cases}$$

- 解：选择所有系数中绝对值最大的40作为主元素，交换第一、二行和交换第一、二列使该主元素位于对角线的第一个位置上，得

$$\begin{cases} 40x_2 - 20x_1 + x_3 = 4 & (4) \\ -19x_2 + 10x_1 - 2x_3 = 3 & (5) \\ 4x_2 + x_1 + 5x_3 = 5 & (6) \end{cases}$$

计算 $m_{21} = -19/40 = 0.475$, $m_{31} = 4/40 = 0.1$

(5) - m_{21} (4), (6) - m_{31} (4) 消去 x_2 得

$$\begin{cases} 0.5x_1 - 1.525x_3 = 4.9 & (7) \end{cases}$$

$$\begin{cases} 3x_1 + 4.9x_3 = 4.6 & (8) \end{cases}$$

选 4.9 为主元素

$$\begin{cases} 4.9x_3 + 3x_1 = 4.6 & (9) \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1.525x_3 + 0.5x_1 = 4.9 & (10) \end{cases}$$

计算 $m_{32} = -1.525/4.9 = -0.31122$,

(10) - m_{32} (9) 消去 x_2 得

$$1.43366x_1 = 6.33161 \quad (11)$$

保留有主元素的方程

$$\left\{ \begin{array}{l} 40x_2 - 20x_1 + x_3 = 4 \quad (4) \\ 4.9x_3 + 3x_1 = 4.6 \quad (9) \\ 1.43366x_1 = 6.33161 \quad (11) \end{array} \right.$$

进行回代

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = 4.41634 \\ x_3 = -1.76511 \\ x_2 = 2.35230 \end{array} \right.$$

5.3.2 列主元素法

- 列主元素法就是在待消元的所在列中选取主元，经方程的行交换，置主元素于对角线位置后进行消元的方法。

- 例5.4** 用列主元素法解下列线性方程组

$$\begin{cases} 10x_1 - 19x_2 - 2x_3 = 3 & (1) \\ -20x_1 + 40x_2 + x_3 = 4 & (2) \\ x_1 + 4x_2 + 5x_3 = 5 & (3) \end{cases}$$

其实通常若被消去的值和主元的值没有相差很大的数量级时不需要这样的元素互换，解出来的值也是精确的。

- 解：** 选择-20作为该列的主元素，

$$\begin{cases} -20x_1 + 40x_2 + x_3 = 3 & (4) \\ 10x_1 - 19x_2 - 2x_3 = 4 & (5) \\ x_1 + 4x_2 + 5x_3 = 5 & (6) \end{cases}$$

$$\text{计算 } m_{21} = 10 / -20 = -0.5$$

$$m_{31} = 1 / -20 = -0.05$$

(5) - $m_{21}(4)$, (6) - $m_{31}(4)$ 得

$$\begin{cases} x_2 - 1.5x_3 = 5 & (7) \\ 6x_2 + 5.05x_3 = 5.2 & (8) \end{cases}$$

选6为主元素

$$\begin{cases} 6x_2 + 5.05x_3 = 5.2 & (9) \\ x_2 - 1.5x_3 = 5 & (10) \end{cases}$$

计算 $m_{32} = 1/6 = 0.16667$,

(10) - $m_{32}(9)$ 得

$$-2.34168x_3 = 4.13332 \quad (11)$$

保留有主元素的方程

$$\left\{ \begin{array}{lcl} -20x_1 + 40x_2 + x_3 & = & 4 \quad (4) \\ 6x_2 + 5.05x_3 & = & 5.2 \quad (9) \\ -2.34168x_3 & = & 4.13332 \quad (11) \end{array} \right.$$

进行回代

$$\left\{ \begin{array}{l} x_3 = -1.76511 \\ x_2 = 2.35230 \\ x_1 = 4.41634 \end{array} \right.$$

列选主元素的计算方法与高斯消去法完全一样，不同的是在每步消元之前要按列选出主元

例5.5 用矩阵的初等行变换求解解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3 \\ 4x_1 + 7x_2 + 7x_3 = 1 \\ -2x_1 + 4x_2 + 5x_3 = -7 \end{cases}$$

解：用矩阵的初等行变换求解，对增广矩阵
(下面带下划线元素为主元素)

$$\tilde{A}^{(1)} = [A|b] = \left[\begin{array}{cccc} 2 & 2 & 3 & 3 \\ 4 & 7 & 7 & 1 \\ -2 & 4 & 5 & -7 \end{array} \right] \xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_1} \left[\begin{array}{cccc} 4 & 7 & 7 & 1 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \\ -2 & 4 & 5 & -7 \end{array} \right]$$

$$\xrightarrow[r_3 + \frac{1}{2}r_1]{r_2 + \left(-\frac{1}{2}\right)r_1} \left[\begin{array}{cccc} 4 & 7 & 7 & 1 \\ 0 & -1.5 & -0.5 & 2.5 \\ 0 & 7.5 & 8.5 & -6.5 \end{array} \right] \xrightarrow{r_3 \leftrightarrow r_2} \left[\begin{array}{cccc} 4 & 7 & 7 & 1 \\ 0 & 7.5 & 8.5 & -6.5 \\ 0 & -1.5 & -0.5 & -2.5 \end{array} \right]$$

$$\xrightarrow{r_3 + \left(\frac{1}{5}\right)r_2} \left[\begin{array}{cccc} 4 & 7 & 7 & 1 \\ 0 & 7.5 & 8.5 & -6.5 \\ 0 & 0 & 1.2 & 1.2 \end{array} \right]$$

§5.4 矩阵三角分解法

矩阵三角分解法是高斯消去法解线性方程组的一种变形解法

5.4.1 矩阵三角分解原理

应用高斯消去法解 n 阶线性方程组 $Ax=b$ ，经过 $n-1$ 步消元之后，得出一个等价的上三角型方程组 $A^{(n)}x=b^{(n)}$ ，对上三角形方程组用逐步回代就可以求出解来。上述过程可通过矩阵分解来实现。

将非奇异阵 A 分解成一个下三角阵 L 和一个上三角阵 U 的乘积

$$A=LU$$

称为对矩阵 A 的三角分解，又称LU分解

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = LU \quad \text{其中}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \cdots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & & a_{2n}^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & & a_{3n}^{(3)} \\ & & & \ddots & \\ & & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵 A 经过顺序消元逐步化为上三角型 $A^{(n)}$, 相当于用一系列初等变换左乘 A 的结果。事实上, 第1列消元将 $A^{(1)}=A$ 化为 $A^{(2)}$, 若令:

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -m_{31} & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -m_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad (i = 2, 3, \cdots, n)$$

则根据矩阵左乘有 $L_1 A^{(1)} = A^{(2)}$

第2列消元将 $A^{(2)}$ 化为 $A^{(3)}$ ，若令：

$$L_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -m_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -m_{n2} & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad m_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \quad (i = 3, 4, \cdots, n)$$

经计算可知 $L_2 A^{(2)} = A^{(3)}$ ，依此类推，一般有 $L_k A^{(k)} = A^{(k+1)}$

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

于是矩阵 $A = A^{(1)}$ 经过消元化为上三角阵 $A^{(n)}$

的过程可表示为 $L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1A = A^{(n)}$ 左乘相当于行变换。

上述矩阵 $L_k (k = 1, 2, \dots, n-1)$ 是一类初等矩阵，
它们都是单位下三角阵，且其逆矩阵也是单位
下三角阵，只需将 $-m_{ik}$ 改为 $m_{ik} (i = k+1, k+2, \dots, n)$ ，
就得到 L_k^{-1} 。即

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

于是有

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

其中

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \cdots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & & a_{2n}^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & & a_{3n}^{(3)} \\ & & & \ddots & \\ & & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

L为由乘数构成的单位下三角阵，U为上三角阵，由此可见，在 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ($k=1,2,\cdots,n-1$) 的条件下，高斯消去法实质上是将方程组的系数矩阵A分解为两个三角矩阵的乘积 $A=LU$ 。这种把非奇异矩阵 A 分解成一个下三角矩阵L和一个上三角矩阵U 的乘积称为矩阵的三角分解，又称 LU 分解。

显然，如果 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ($k=1,2,\cdots,n-1$)，由行列式的性质知，方程组系数矩阵A的前n-1个顺序主子矩阵 A_k ($k=1,2,\cdots,n-1$) 非奇异，即顺序主子式不等于零，即

$$\det(A_1) = a_{11}^{(1)} \neq 0$$

$$\det(A_i) = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 2, 3, \cdots, k)$$

其中

$$A_1 = (a_{11}), A_i = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{bmatrix} \quad (\text{A的主子阵})$$

反之, 可用归纳法证明, 如果 A 的顺序主子式

$$\det(A_i) = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 1, 2, \cdots, k)$$

则

$$a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 1, 2, \cdots, k)$$

于是得到下述定理:

现在证明分解的唯一性

设 A 有两种分解 $A = LU = \bar{L}\bar{U}$

其中 L, \bar{L} 为单位下三角阵, U, \bar{U} 为上三角阵

$\because A$ 的行列式 $|A| \neq 0, L, U, \bar{L}, \bar{U}$ 均为非奇异矩阵, 有

$$LU = \bar{L}\bar{U}$$

上式两边左边同乘 \bar{L}^{-1} , 右边同乘 U^{-1} 得

$$\bar{L}^{-1}L = \bar{U}U^{-1}$$

上式左边为单位下三角阵, 右边为上三角阵, 故应为单位阵, 即 $L = \bar{L}, U = \bar{U}$

现仅证明分解的惟一性。 惟一性得证。

把A分解成一个单位下三角阵L和一个上三角阵U的乘积称为**杜利特尔 (Doolittle)** 分解。其中

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

把 A 分解成一个下三角阵 L 和一个单位
上三角阵U的乘积称为克洛特分解(Crout)
其中

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

5.4.2 用三角分解法解方程组

求解线性方程组 $Ax=b$ 时,先对非奇异矩阵 A 进行LU分解使 $A=LU$,那么方程组就化为

$$LU \ x=b$$

从而使问题转化为求解两个简单的三角方程组

$$L \ y=b$$

求解 y

$$U \ x=y$$

求解 x

这就是求解线性方程组的三角分解法的基本思想。下面只介绍杜利特尔 (Doolittle) 分解法。设 $A=LU$ 为

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

由矩阵乘法规则

$$\boxed{a_{1i} = u_{1i} \quad i = 1, 2, \dots, n}$$

$$\boxed{a_{i1} = l_{i1} u_{11} \quad i = 2, 3, \dots, n}$$

由此可得U的第1行元素和L的第1列元素

$$\boxed{u_{1i} = a_{1i} \quad i = 1, 2, \dots, n}$$

$$\boxed{l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}} \quad i = 2, 3, \dots, n}$$

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

再确定U的第k行元素与L的第k列元素, 对于
 $k=2, 3, \dots, n$ 计算: ① 计算U的第k行元素

$$u_{kj} = a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}$$

($j=k, k+1, \dots, n$)

② 计算L的第k列元素

$$l_{ik} = \frac{a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}}{u_{kk}}$$

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

利用上述计算公式便可逐步求出U与L的各元素

求解 $Ly=b$, 即计算:

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \end{cases} \quad (i = 2, 3, \dots, n)$$

求解 $Ux=y$, 即计算:

$$\begin{cases} x_n = \frac{y_n}{u_{nn}} \\ x_i = \frac{y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik} x_k}{u_{ii}} \end{cases} \quad (i = n-1, \dots, 2, 1)$$

显然，当 $u_{kk} \neq 0 (k = 1, 2, \dots, n)$ 时，
解 $Ax=b$ 直接三角分解法计算才能完成。
设 A 为奇异矩阵，当 $u_{kk} = 0$ 时计算将中
断。或者当 u_{kk} 绝对值很小时，按分解
公式计算可能引起舍入误差的积累，因此
可采用与列主元消去法类似的方法，对矩
阵进行行交换，则再实现矩阵的三角分解。

用直接三角分解法解 $Ax=b$ 大约需要
 $n^3 / 3$ 次乘除法。

例6.8 用三角分解法解方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 5 \\ 1 & 3 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 1 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ & 1 & 2 \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

求解 $Ly=b$ 得 $y = [2, 2, 1]^T$

求解 $Ux=y$ 得 $x = [-1, 0, 1]^T$

所以方程组的解为

$$x_1 = -1 \quad x_2 = 0 \quad x_3 = 1$$

§5.5 解三对角线方程组的追赶法

在数值计算中,有一种系数矩阵是三对角方程组

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix}$$

简记为 $Ax=f$, **A 满足条件**(对角占优)

$$(1) \quad |b_1| > |c_1| > 0$$

$$(2) \quad |b_i| \geq |a_i| + |c_i| \quad (a_i c_i \neq 0, i = 2, 3, \dots, n-1)$$

$$(3) \quad |b_n| > |a_n| > 0$$

按乘法展开

$$\begin{cases} b_1 = l_1 \\ c_i = l_i u_i \\ b_{i+1} = a_{i+1} u_i + l_{i+1} \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

矩阵的LU分解

则可计算

$$\begin{cases} l_1 = b_1 \\ u_i = c_i / l_i \\ l_{i+1} = b_{i+1} - a_{i+1} u_i \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

当, $l_i \neq 0$ 由上式可惟一确定L和U。

可依次计算

$$l_1 \rightarrow u_1 \rightarrow l_2 \rightarrow u_2 \rightarrow \dots \rightarrow u_{n-1} \rightarrow l_n$$

LU分解的大概流程已知道, 因此下一步就是看一下LU具体是怎么分解的。

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_1 & & & & \\ a_2 & l_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & a_n & l_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & u_{n-1} & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -2 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & & & \\ -1 & \frac{5}{2} & & \\ & -2 & \frac{12}{5} & \\ & & -2 & \frac{5}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & & \\ & 1 & -\frac{4}{5} & \\ & & 1 & -\frac{5}{6} \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

由 $Ly=f$ $y_1 = \frac{f_1}{l_1} = \frac{3}{2} = 1.5,$ $y_2 = \frac{f_2 - a_2 y_1}{l_2} = 1$

解出 y $y_3 = \frac{f_3 - a_3 y_2}{l_3} = \frac{5}{6},$ $y_4 = \frac{f_4 - a_4 y_3}{l_4} = -1$

又由 $Ux=y$ $x_4 = y_4 = -1,$ $x_3 = y_3 - u_3 x_4 = 0$

解出 x $x_2 = y_2 - u_2 x_3 = 1,$ $x_1 = y_1 - u_1 x_2 = 2$

5.6解正定矩阵方程的平方根法

工程实际计算中,线性方程组的系数矩阵常常具有对称正定性,其各阶顺序主子式及全部特征值均大于0。矩阵的这一特性使它的三角分解也有更简单的形式,从而导出一些特殊的解法,如平方根法与改进的平方根法。

定理6 设A是正定矩阵,则存在唯一的对角元素均为正数的下三角阵L,使 $A=LL^T$

即U变成了L的转置。

证: 因A是正定矩阵, A的顺序主子式

$$\Delta_i > 0, \quad i=1, 2, \dots, n$$

因此存在唯一的分解 $A=LU$

L是单位下三角阵，U是上三角阵，将U再分解

$$\begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{u_{n-1,n}}{u_{n-1,n-1}} \\ & & & & 1 \end{bmatrix} = D U_0$$

其中D为对角阵， U_0 为单位上三角阵，于是

$$A = L U = L D U_0$$

又

$$A = A^T = U_0^T D L^T$$

由分解惟一性，即得

$$U_0^T = L$$

$$A = L D L^T$$

记

$$D = \begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

又因为 $\det(A_k) > 0, (k=1, 2, \dots, n)$, $u_{ii} > 0, (i=1, 2, \dots, n)$
 于是对角阵D还可分解

$$D = \begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{u_{11}} & & & \\ & \sqrt{u_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{u_{nn}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{u_{11}} & & & \\ & \sqrt{u_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{u_{nn}} \end{bmatrix} = D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore A = LDL^T = LD^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} L^T = (LD^{\frac{1}{2}})(LD^{\frac{1}{2}})^T = L_1 L_1^T$$

其中 $L_1 = LD^{\frac{1}{2}}$ 为下三角阵, 令 $L=L_1$, 定理得证。

将 $A=LL^T$ 展开，写成

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

按矩阵乘法展开，可逐行求出分解矩阵L的元素，计算公式是对于 $i=1,2,\cdots,n$

$$l_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad l_{ji} = \frac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} l_{ik}}{l_{ii}} \quad j=i+1, i+2, \dots, n$$

这一方法称为平方根法，又称乔累斯基(Cholesky)分解，它所需要的乘除次数约 $\frac{1}{6}n^3$ 为数量级，比LU分解节省近一般的工作量。

例6.9 平方根法求解方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 11 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 8 \\ 7 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 1 & 1 & \\ 2 & -2 & \sqrt{3} \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{由 } Ly=b \text{ 解得 } y_1=5, y_2=3, y_3=\sqrt{3} \\ \text{由 } L^T x = y \text{ 解得} \\ x_1 = -2, x_2 = 5, x_3 = 1 \end{array}$$

由此例可以看出，平方根法解正定方程组的缺点是需要进行开方运算。为避免开方运算，我们改用单位三角阵作为分解阵，即把对称正定矩阵A分解成

$$A = LDL^T$$

的形式，其中

$$D = \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix}$$

为对角阵，而

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

是单位下三角阵，这里分解公式为

$$\begin{cases} l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} d_k l_{ik} l_{jk}) / d_j \\ d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{ik}^2 \end{cases}$$

$$j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

据此可逐行计算 $d_1 \rightarrow l_{21} \rightarrow d_2 \rightarrow l_{31} \rightarrow l_{32} \rightarrow d_3 \rightarrow \dots$

运用这种矩阵分解方法, 方程组 $Ax=b$ 即 $L(DL^T x) = b$

可归结为求解 两个上三角方程组 应该是两个三角方程组吧。

$$Ly = b \quad \text{和} \quad L^T x = D^{-1}b$$

其计算公式分别为 $y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \quad i = 1, 2, \dots, n$

$$\text{和} \quad x_i = y_i / d_i - \sum_{k=i+1}^n l_{ki} x_k \quad i = n, n-1, \dots, 1$$

求解方程组的上述算法称为改进的平方根法。这种方法总的计算量约为 $n^3 / 6$, 即仅为高斯消去法计算量的一半。

§5.7 向量和矩阵的范数

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，有必要对向量及矩阵的“大小”引进某种度量——范数的概念。

向量范数是用来度量向量长度的，它可以看成是二、三维解析几何中向量长度概念的推广。用 R^n 表示 n 维实向量空间。

§ 5.7 向量和矩阵的范数

定义5.2 对任一向量 $X \in R^n$ ，按照一定规则确定一个实数与它对应，该实数记为 $||X||$ ，若 $||X||$ 满足下面三个性质：

- (1) $||X|| \geq 0$ ； $||X|| = 0$ 当且仅当 $X=0$ ；
- (2) 对任意实数 λ ， $||\lambda X|| = |\lambda| ||X||$ ；
- (3) 对任意向量 $Y \in R^n$ ， $||X+Y|| \leq ||X|| + ||Y||$

则称该实数 $||X||$ 为向量 X 的范数

§5.7 向量和矩阵的范数

在 R^n 中，常用的几种范数有：

$$\|X\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n| = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

$$\|X\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2} = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\|X\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|\} = \max_{1 \leq i \leq n} \{|x_i|\}$$

其中 x_1, x_2, \dots, x_n 分别是 X 的 n 个分量。以上定义的范数分别称为1-范数，2-范数和 ∞ -范数。可以验证它们都是满足范数性质的，其中 $\|x\|_2$ 是由内积导出的向量范数。

§ 5.7 向量和矩阵的范数

上述范数都是 p 范数 $\|X\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$ 的特例

- 当不需要指明使用哪一种向量范数时，就用记号 $\|\cdot\|$ 泛指任何一种向量范数。
- 有了向量的范数就可以用它来衡量向量的大小和表示向量的误差。
- 设 x^* 为 $Ax=b$ 的精确解， x 为其近似解，则其绝对误差可表示成 $\|x - x^*\|$ ，其相对误差可表示成

$$\frac{\|x - x^*\|}{\|x^*\|} \quad \text{或} \quad \frac{\|x - x^*\|}{\|x\|}$$

向量范数 $\|x\|$ 具有以下性质：

$$(1) \quad \text{当}\|x\| \neq 0\text{时}, \left\| \frac{x}{\|x\|} \right\| = 1$$

$$(2) \quad \|x\| = \|-x\|$$

$$(3) \quad \|x\| - \|y\| \leq \|x - y\|$$

$$\text{证} \quad \|x\| = \|(x - y) + y\| \leq \|x - y\| + \|y\|$$

$$\therefore \|x\| - \|y\| \leq \|x - y\|$$

例5.10 证明对任意同维向量 x , y 有

$$| \|x\| - \|y\| | \leq \|x - y\|$$

证: $\|x\| - \|y\| \leq \|x - y\|$

$$\|y\| = \|(y - x) + x\| \leq \|x - y\| + \|x\|$$

$$\|y\| - \|x\| \leq \|x - y\|$$

即 $\|x\| - \|y\| \geq -\|x - y\|$

$$| \|x\| - \|y\| | \leq \|x - y\|$$

例5.11 设 $x=(1, 0, -1, 2)^T$, 计算

$$\|x\|_1, \|x\|_\infty, \|x\|_2$$

解: $\|x\|_1 = 1+0+|-1|+2=4$

$$\|x\|_2 = \sqrt{1^2 + 0^2 + (-1)^2 + 2^2} = \sqrt{6}$$

$$\|x\|_\infty = \max(1, 0, |-1|, 2) = 2$$

定理7.1 对于任意向量 x ，有 $\lim_{p \rightarrow \infty} \|x\|_p = \|x\|_\infty$

证： $\because \|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$

$$\therefore \|x\|_\infty = \left(\max_{1 \leq i \leq n} |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(n \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

$$\text{即 } \|x\|_\infty \leq \|x\|_p \leq n^{\frac{1}{p}} \|x\|_\infty$$

$$\text{当 } p \rightarrow \infty, \quad n^{\frac{1}{p}} \rightarrow 1$$

$$\therefore \lim_{p \rightarrow \infty} \|x\|_p = \|x\|_\infty$$

定义5.4（向量序列的极限）设 $\{x^{(k)}\}$ 为 R^n 中的一向量序列， $x^* \in R^n$ ，记 $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$
 $x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)^T$ 。如果 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^*$ ($i=1, 2, \dots, n$)，
则称 $x^{(k)}$ 收敛于向量 x^* ，记为

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

定理5.2（向量范数的等价性）设 $\|x\|_p, \|x\|_q$ 为 R^n 上任意两种向量范数，则存在常数 $C_1, C_2 > 0$ ，使得对任意 $x \in R^n$ 恒有

$$C_1 \|x\|_p \leq \|x\|_q \leq C_2 \|x\|_p$$

(证:略)

定理5.3 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^* \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\| = 0$

其中 $\|\cdot\|$ 为向量中的任一种范数。

证 由于 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^* \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\| = 0$

而对于 R^n 上的任一种 $\|\cdot\|$ 范数，由定理 3.7 知存在常数 C_1, C_2 ，使

$$C_1 \|x^{(k)} - x^*\|_{\infty} \leq \|x^{(k)} - x^*\| \leq C_2 \|x^{(k)} - x^*\|_{\infty}$$

于是可得

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\|_{\infty} = 0 \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\| = 0$$

从而定理得证。

定义5.5（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

(1) $\|A\| \geq 0$ 且仅当 $A = 0$ 时， $\|A\| = 0$ （正定性）

(2) 对任意实数 λ $\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|$ （齐次性）

(3) 三角不等式 $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ 对任意矩阵 $A, B \in R^{n \times n}$

(4) $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$

则称 $N(A)$ 是 $R^{n \times n}$ 上的一个矩阵范数(或模)

矩阵范数的性质可由向量范数定义直接验证。

(1) 设 $A \neq 0$, $\exists x \neq 0$, 使 $Ax \neq 0$, 根据向量范数的性质 $\|Ax\| > 0$, 所以

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

当 $A=0$ 时, $\exists x \neq 0$, 使 $\|Ax\| = 0$, 则

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

矩阵范数的性质可由向量范数定义直接验证

$$(2) \quad \|\lambda A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|\lambda Ax\|}{\|x\|}$$

根据向量范数的性质

$$\|\lambda Ax\| = |\lambda| \|Ax\|$$

\therefore

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

矩阵范数的性质可由向量范数定义直接验证

$$\begin{aligned} (3) \quad \|A + B\| &= \max_{x \neq 0} \frac{\|(A + B)x\|}{\|x\|} = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax + Bx\|}{\|x\|} \\ &\leq \max_{x \neq 0} \left(\frac{\|Ax\|}{\|x\|} + \frac{\|Bx\|}{\|x\|} \right) \\ &= \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} + \max_{x \neq 0} \frac{\|Bx\|}{\|x\|} = \|A\| + \|B\| \\ \therefore \quad \|A + B\| &\leq \|A\| + \|B\| \end{aligned}$$

矩阵范数定义的另一种方法是

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

这是由于

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{x \neq 0} \left\| A \frac{x}{\|x\|} \right\|, \text{ 而 } \left\| \frac{x}{\|x\|} \right\| = 1$$

$$\text{所以有 } \|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

同样，矩阵范数和向量范数密切相关，向量范数有相应的矩阵范数，即

$$\|A\|_p = \max_{\|x\|_p=1} \|Ax\|_p \text{ (如 } p = 1, 2, \infty \text{)}$$

矩阵范数的计算公式

定理8 对 n 阶方阵 $A = (a_{ij})_n$

$$\|A\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (\text{称为} A \text{的行范数})$$

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (\text{称为} A \text{的列范数})$$

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

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

$$\text{即 } f(\lambda) = |\lambda E - A^T A| = 0$$

定义5.7 (矩阵的谱半径) 设 $A \in R^{n \times n}$ 的特征值为 $\lambda_i (i = 1, 2, \dots, n)$, 称 $\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$ 为 A 的谱半径。

例 5.12 计算方阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & -2 & 4 \end{bmatrix}$$

的三种常用范数

$$\|A\|_p \quad (p = 1, 2, \infty)$$

例5.12 计算方阵 $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & -2 & 4 \end{bmatrix}$ 的三种范数

解 $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq 3} \sum_{i=1}^3 |a_{ij}| = \max\{1, 4, 8\} = 8$

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq 3} \sum_{j=1}^3 |a_{ij}| = \max\{1, 6, 6\} = 6$$

所以 $\lambda_{\max}(A^T A) = 32$, 从而 $\|A\|_2 = \sqrt{32} = 4\sqrt{2}$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & 4 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & -2 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 32 \end{bmatrix}$$

定理 5.8.1 设 A 为 n 阶方阵, 则对任意矩阵范数 $\|\cdot\|$ 都有 $\rho(A) \leq \|A\|$

证: 设 λ 为 A 的特征值, x 是 A 的对应于 λ 的特征向量, 则 $\lambda x = Ax$ 。两端取范数并依据其性质, 得

$$|\lambda| \|x\| = \|\lambda x\| = \|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$$

由于 $x \neq 0$, 故 $|\lambda| \leq \|A\|$, 所以

$$\rho(A) \leq \|A\|$$

定理19 (特征值上界) 设 $A \in R^{n \times n}$, 则 $\rho(A) \leq \|A\|$ (任一范数).

定理20 若 $A \in R^{n \times n}$ 为对称矩阵, 则 $\rho(A) = \|A\|_2$.

定理21 若方阵 B 满足 $\|B\| < 1$, 则 $I \pm B$ 为非奇异阵, 且

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

5.8 误差分析

5.8.1 方程组的性态

在建立方程组时，其系数往往含有误差（如观测误差或计算误差），就是说，所要求解的运算是有扰动的方程组，因此需要研究扰动对解的影响。

例5.13 考察方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 1.0001x_2 = 2.0001 \end{cases}$$

和

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 1.0001x_2 = 2 \end{cases}$$

上述两个方程组尽管只是右端项有微小扰动，但解大不相同，第1个方程组的解是 $x_1 = x_2 = 1$ 第 2个方程组的解是 $x_1 = 2, x_2 = 0$ 。这类方程组称为病态的。

定义5.8 由 A 或 b 的微小变化(又称扰动或摄动)引起方程组 $Ax = b$ 解的巨大变化, 则称方程组为病态方程组, 矩阵 A 称为病态矩阵。否则方程组是良态方程组, 矩阵 A 也是良态矩阵

为了定量地刻画方程组“病态”的程度, 要对方程组 $Ax = b$ 进行讨论, 考察 A (或 b) 微小误差对解的影响。为此先引入矩阵条件数的概念。

定义5.9 (矩阵条件数) 设 A 为非奇异矩阵, 称 $cond(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ 为矩阵 A 的条件数。

常用的条件数有

$$\text{cond}(A)_1 = \|A\|_1 \cdot \|A^{-1}\|_1$$

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

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

当A为对称矩阵时

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

其中 λ_1, λ_n 为A的绝对值最大和最小的特征值.

条件数的性质：

1. 对任何非奇异矩阵 A ，都有 $\text{cond}(A)_v \geq 1$;
2. 设矩阵 A 非奇异且常数 $c \neq 0$ ，则 $\text{cond}(cA)_v = \text{cond}(A)_v$;
3. 如果 A 为正交矩阵，则 $\text{cond}(A)_2 = 1$;

如果 A 为非奇异矩阵， R 为正交矩阵，则

$$\text{cond}(RA)_2 = \text{cond}(AR)_2 = \text{cond}(A)_2;$$

我们先来考察常数项 b 的微小误差对解的影响。设 A 是精确的, b 有误差(或扰动) δb , 显然, 方程组 $A\tilde{x} = b + \delta b$ 的解与 x 有差别, 记为 $\tilde{x} - x = \delta x$ 即有 $A(x + \delta x) = b + \delta b$

即 $A(\delta x) = \delta b$ (由设 $Ax = b \neq 0$)

于是 $\|\delta x\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta b\|$ (6.18)

又 $\because Ax = b \neq 0$ 则有 $\|b\| \leq \|A\| \|x\|$

或 $\frac{1}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|}$ (6.19)

由 (6.18) 式及 (6.19) 式即得如下定理

定理 5.12 (b 的扰动对解的影响) 设 A 非奇异,

$Ax = b \neq 0$ 且 $A(x + \delta x) = b + \delta b$ 则有

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

证: 设 A 精确且非奇异, b 有扰动 δb , 使解 x 有扰动 δx , 则

$A(x + \delta x) = b + \delta b$ 消去 $Ax = b$, 有

$$\|\delta x\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta b\|$$

又
$$\|b\| \leq \|A\| \|x\|$$

相比较可得:
$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

定理 5.13 (A 的扰动对解的影响) 设 A 非奇异, $Ax = b \neq 0$, 且 $(A + \delta A)(x + \delta x) = b$
若 $\|A^{-1}\| \|\delta A\| \leq 1$ 则

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

证： 略

我们还可证明更为一般的结论：

当方程组的系数矩阵 A 非奇异和常数项 b 为非零向量时，且同时有扰动 δA ， δb ，满足 $\|A^{-1}\| \|\delta A\| \leq 1$ ，若 x 和 $x + \delta x$ 分别是方程组 $Ax = b$ 及 $(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b$ 的解则

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A\| \|A^{-1}\|}{1 - \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}} \left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \right)$$

例6.13 线性方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

的系数矩阵带误差，成为如下方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1.0005 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

求方程组系数矩阵的条件数，并说明方程组的性态

解 因为 $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ $\delta A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0.0005 \end{pmatrix}$ $A^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$

$$\text{所以 } \text{cond}(A)_{\infty} = \|A\|_{\infty} \|A^{-1}\|_{\infty} = 2 \times 1 = 2$$

因此方程组是良态的.

5.7.2 精度分析

求得方程组 $Ax = b$ 的一个近似解以后, 希望判断其精度, 检验精度的一个简单办法是将近似解再回代到原方程组去求出余量 r .

$$r = b - A\tilde{x}$$

如果 r 很小, 就认为解是相当精确的。

定理6.14 设 \tilde{x} 是方程组 $Ax = b$ 的一个近似解, 其精确解记为 x^* , r 为 \tilde{x} 的余量。则有

$$\frac{\|x^* - \tilde{x}\|}{\|x^*\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|b\|} \quad \text{证明见P}_{172}$$

例5.14 设 A 为正交矩阵，证明： $\text{cond}_2(A)=1$

分析：由正交矩阵和条件数的定义便可推得

解：因为 A 是正交矩阵，

故 $A^T A = AA^T = I$ ， $A^{-1} = A^T$ ，从而

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)} = \sqrt{\rho(A^T A)} = \sqrt{\rho(I)} = 1$$

$$\|A^{-1}\|_2 = \|A^T\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)} = \sqrt{\rho(I)} = 1$$

$$\text{故 } \text{cond}_2 = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = 1$$

例5.15 设 A, B 为 n 阶矩阵, 证明:

$$\text{cond}(AB) \leq \text{cond}(A) \cdot \text{cond}(B)$$

分析: 由矩阵范数性质和条件数定义
便可证明

证:

$$\begin{aligned} \text{cond}(AB) &= \|AB\| \cdot \|(AB)^{-1}\| \\ &\leq \|A\| \cdot \|B\| \|A^{-1}\| \cdot \|B^{-1}\| \\ &= \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \|B\| \cdot \|B^{-1}\| \\ &= \text{cond}(A) \cdot \text{cond}(B) \end{aligned}$$

例5.16 设 A, B 为 n 阶非奇异矩阵, $\|\cdot\|$ 表示矩阵的任一种范数, 证明:

$$\|A^{-1}-B^{-1}\| \leq \|A^{-1}\| \|B^{-1}\| \|A-B\|$$

$$\text{cond}(AB) \leq \text{cond}(A) \cdot \text{cond}(B)$$

分析: 由矩阵范数的基本性质即可推证

证: $A^{-1}-B^{-1} = A^{-1}(B-A)B^{-1}$, 从而

$$\begin{aligned} \|A^{-1}-B^{-1}\| &\leq \|A^{-1}(B-A)B^{-1}\| \\ &\leq \|A^{-1}\| \cdot \|B-A\| \cdot \|B^{-1}\| \end{aligned}$$

$$\therefore \|A^{-1}-B^{-1}\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|B-A\| \cdot \|B^{-1}\|$$

例9 求Hilbert矩阵 H_3 的条件数.

$$\mathbf{H}_3 = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_3^{-1} = \begin{bmatrix} 9 & -36 & 30 \\ -36 & 192 & -180 \\ 30 & -180 & 180 \end{bmatrix},$$

$$\text{cond}(\mathbf{H}_3)_\infty = \|\mathbf{H}_3\|_\infty \cdot \|\mathbf{H}_3^{-1}\|_\infty = \frac{11}{6} \cdot 408 = 748.$$

以三位十进制求解 $H_3x = \begin{bmatrix} \frac{11}{6} & \frac{13}{12} & \frac{47}{60} \end{bmatrix}^T$, 准确解 $x = [1, 1, 1]^T$.

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

$$\begin{bmatrix} x_1 + \delta x_1 \\ x_2 + \delta x_2 \\ x_3 + \delta x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0895 \\ 0.4880 \\ 1.4910 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \\ \delta x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.0895 \\ -0.5120 \\ 0.4910 \end{bmatrix}.$$

如何发现判断矩阵是病态的？

如何解决和处理？

预处理方法.

$$Ax = b \Leftrightarrow \begin{cases} PAQy = Pb, \\ x = Qy. \end{cases}$$

$$\text{cond}(PAQ) = \text{cond}(A).$$

例10 设 $\begin{pmatrix} 1 & 10^4 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10^4 \\ 2 \end{pmatrix}$. 则 $A = \begin{pmatrix} 1 & 10^4 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$,

$$A^{-1} = \frac{1}{1-10^4} \begin{pmatrix} 1 & -10^4 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{cond}(A)_{\infty} = \frac{(1+10^4)^2}{10^4-1} \approx 10^4.$$

在三位十进制下得到很坏的近似解 $x = [0, 1]^T$.

化为 $\begin{pmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$. 则

$$\begin{pmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{10^{-4}-1} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 10^{-4} \end{pmatrix}, \quad \text{cond}_{\infty} = \frac{2 \times 2}{1-10^{-4}} \approx 4.$$

在三位十进制下得到较好的近似解 $x = [1, 1]^T$.

定理24(事后误差估计) 设 A 为非奇异矩阵, x 是 $Ax = b \neq 0$ 的准确解. 再设 \bar{x} 是此方程组的近似解, $r = b - A\bar{x}$,则

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

二、迭代改善法(略去)



本章小结

本章介绍了线性方程组的直接法。直接法是一种计算量小而精度高的方法。直接法中具有代表性的算法是高斯（Gauss）消去法（在第一章提到的克莱姆算法也是一种直接法，但该算法用于高阶方程组时计算量太大而不实用），其它算法大都是它的变型，这类方法是解具有稠密矩阵或非结构矩阵（零元分布无规律）方程组的有效方法。

选主元的算法有很好的数值稳定性。从计算简单出发实际中多选用列主元法。

解三对角矩阵方程组（ A 的对角元占优）的追赶法，解对称正定矩阵方程组的平方根法都是三角分解法，且都是数值稳定的方法，这些方法不选主元素，也具有较高的精度。

向量、矩阵的范数、矩阵的条件数和病态方程组的概念，是数值计算中一些基本概念。线性方程组的病态程度是其本身的固有特性，因此即使用数值稳定的方法求解，也难以克服严重病态导致的解的失真。在病态不十分严重时，用双精度求解可减轻病态的影响

在实际应用中如何选择算法是一个重要问题，往往从三个方面考虑：

- ① 解的精度高；
- ② 计算量小；
- ③ 所需计算机内存小。

但这些条件相互间是矛盾而不能兼顾的，因此实际计算时应根据问题的特点和要求及所用计算机的性能来选择算法。一般说，系数矩阵为中、小型满矩阵，用直接法较好；当系数矩阵为大型、稀疏矩阵时，有效的解法是迭代法。

Thank you very much!



