

第三章 解方程组的数值方法

§ 1 引言

§ 2 高斯消去法

§ 3 选主元素的高斯消去法

§ 4 矩阵的三角分解

§ 5 解三对角线方程组的追赶法

§ 6 解对称正定矩阵方程组的平方根法

§ 7 向量和矩阵的范数

§ 8 解线性方程组的迭代法

§ 9 解非线性方程组的迭代法

§ 10 病态方程组和迭代改善法



§ 1 引 言

在自然科学和工程中有很多问题的解决归结为求解线性方程组或者非线性方程组的数学问题。例如，电学中网络问题，用最小二乘法求实验数据的的曲线拟合问题，三次样条的插值问题，用有限元素法计算结构力学中一些问题或用差分法解椭圆型微分方程边值问题等等。

在工程实际问题中产生的线性方程组，其系数矩阵大致有两种，一种是低阶稠密矩阵（这种矩阵的全部元素都存储在计算机的存贮器中）；另一类是大型稀疏矩阵（此类矩阵阶数高，但零元素较多，这类矩阵一般采用压缩存贮或仅存贮系数矩阵的非零元素）。

本章讨论方程组的数值解法。

§ 2 高斯消去法

高斯消去法是一个古老的求解线性方程组的方法，但由它改进得到的选主元的高斯消去法则是目前计算机上常用的解低阶稠密矩阵方程组的有效方法。

例1 用高斯消去法解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 1 & (2.1) \\ 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 1/2 & (2.2) \\ x_1 + 3x_2 + 9x_3 = 5/2 & (2.3) \end{cases}$$

解 第1步：将方程 (2.1) 乘上 $(-3/2)$ 加到方程 (2.2)
将方程 (2.1) 乘上 $(-1/2)$ 加到方程 (2.3)
则得到与原方程等价的方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 1 \\ -x_2 + x_3 = -1 \end{cases} \quad (2.4)$$

$$\begin{cases} 2x_2 + 8x_3 = 2 \end{cases} \quad (2.5)$$

其中方程 (2.4) , (2.5) 已消去了未知数 x_1 。

第2步：方程 (2.4) 乘上2加到方程 (2.5) , 消去 (2.5) 式中未知数 x_2 , 得到等价的三角形方程组

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

由上述方程组, 用回代的方法, 即可求得原方程组的解。

$$x_3 = 0, x_2 = 1, x_1 = -1/2$$

若用矩阵来描述消去法的约化过程，即为

$$[A, b] = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & \vdots & 1 \\ 3 & 2 & 4 & \vdots & 1/2 \\ 1 & 3 & 9 & \vdots & 5/2 \end{bmatrix} \xrightarrow{1} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & \vdots & 1 \\ 0 & -1 & 1 & \vdots & -1 \\ 0 & 2 & 8 & \vdots & 2 \end{bmatrix}$$
$$\xrightarrow{2} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & \vdots & 1 \\ 0 & -1 & 1 & \vdots & -1 \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & 0 \end{bmatrix}$$

这种求解过程，称为**具有回代的高斯消去法**。

从上例看出，用高斯法解方程组的基本思想是用矩阵的初等变换将系数矩阵约化为具有简单形式的矩阵（上三角矩阵，单位矩阵等），从而容易求解。

下面讨论求解一般线性方程组的高斯消去法，设有 n 个未知数的线性方程组：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \quad \quad \cdots \quad \quad \quad \cdots \quad \quad \quad \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (2.7)$$

引进记号

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

(2.7) 可用矩阵形式表示

$$Ax = b \quad (2.8)$$

为了讨论方便，记

$$A = A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)})_{n \times n}, \quad b = b^{(1)} = (b_1^{(1)}, \dots, b_n^{(1)})^T.$$

假设 A 为非奇异矩阵（即设 $\det(A) \neq 0$ ）。

第1步（k=1）： 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$ 计算乘数

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} (i = 2, \dots, n)$$

用 $(-m_{i1})$ 乘上 (2.7) 第一个方程，加到第 i 个中程上去，
即施行行初等变换：

$$R_i \leftarrow R_i - m_{i1} \cdot R_1, (i = 2, \dots, n)$$

消去第2到第n个方程的未知数 x_1 ，得到(2.7)的等价方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

记为

$$A^{(2)} x = b^{(2)}$$

其中 (2.9) 式中方框内元素为这一步需要计算的元素，
计算公式为：

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

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

第k步：继续上述消去过程，设第1步至第k-1步计算已经完成，得到与原方程组等价的方程组。

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

记为

$$A^{(k)} x = b^{(k)}$$

现进行第k步消元计算，设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ，计算乘数

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

用 $(-m_{ik})$ 乘 (2.10) 的第 k 个方程加到第 i 个方程消去 (2.10) 中第 i 个方程 $(i = k + 1, \dots, n)$ 的未知数 x_k ，得到原方程组的等价方程组：

$$\begin{bmatrix}
 a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\
 & & \ddots & & \\
 & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\
 & & & & \boxed{a_{k+1,k+1}^{(k+1)} \quad \cdots \quad a_{k+1,n}^{(k+1)}} \\
 & & & & \vdots \\
 & & & & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \vdots & a_{nn}^{(k+1)}
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 x_1 \\
 x_2 \\
 \vdots \\
 \\
 x_n
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 b_1^{(1)} \\
 b_2^{(2)} \\
 \vdots \\
 b_k^{(k)} \\
 \boxed{b_{k+1}^{(k+1)} \quad \vdots \quad b_n^{(k+1)}}
 \end{bmatrix}
 \quad (2.11)$$

简记为

$$A^{(k+1)} x = b^{(k+1)}$$

其中 $A^{(k+1)}, b^{(k+1)}$ 元素计算公式为:

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, (i, j = k+1, \dots, n) \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, (i = k+1, \dots, n) \\ A^{(k+1)} \text{ 与 } A^{(k)} \text{ 前 } k \text{ 行元素相同,} \\ b^{(k+1)} \text{ 与 } b^{(k)} \text{ 前 } k \text{ 个元素相同.} \end{cases} \quad (2.12)$$

重复上述约化过程，即 $k = 1, 2, \dots, n-1$ ，且设

$$a_{kk}^{(k)} \neq 0 (k = 1, 2, \dots, n-1)$$

，共完成 $n-1$ 步消元计算，得到与原方程组 (2.7) 等价的三角形方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

用回代法，即可求得 (2.13) 的解，计算公式为：

$$\begin{cases} x_n = \frac{b^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} \\ x_i = \frac{b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}}, (i = n-1, \dots, 1) \end{cases} \quad (2.14)$$

元素 $a_{kk}^{(k)}$ 称为约化的主元素。将 (2.7) 约化为 (2.13) 的过程称为消元过程；(2.13) 求解过程 (2.14) 称为回代过程，由消元过程和回代过程求解线性方程组的方法称为高斯消去法。

定理1（高斯消去法） 设 $Ax=b$, 其中 $A \in R^{n \times n}$ 如果约化的主元素 $a_{kk}^{(k)} \neq 0 (k=1,2,\cdots,n)$, 则可通过高斯消去法（不进行交换两行的初等变换）将方程组 $Ax=b$ 约化为三角形矩阵方程组 (2.13), 且消元和求解公式为:

1. 消元计算

$$k=1,2,\cdots,n-1$$

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

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, (i,j=k+1,\cdots,n)$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, (i=k+1,\cdots,n)$$

2. 回代计算

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

当A为非奇异矩阵时，也可能有某 $a_{kk}^{(k)} = 0$ ，但在第k列存在元素

$$a_{i_k k}^{(k)} \neq 0 (k+1 \leq i_k \leq n)$$

于是可能通过交换 (A, b) 的第 k 行和第 i_k 行将 $a_{i_k k}^{(k)}$ 调到 (k, k) 位置，然后再进行消元计算。于是，在 A 为非奇异矩阵时，只要引进行交换，则高斯消去法可将原线性方程组 $Ax = b$ 约化为三角形方程组 (2.13)，且通过回代法即可求得方程组的解。

高斯消去法计算量:

(1) 消元计算：第 k 步 $(k = 1, 2, \dots, n-1)$ 。

1. 计算乘数：需要作 $(n-k)$ 次除法运算；
 2. 消元：需作 $(n-k)^2$ 次乘法运算；
 3. 计算 $b^{(k)}$ ：需作 $(n-k)$ 次乘法运算；
- 于是，完成全部消元计算共需作乘除运算的次数为 s ：

$$\begin{aligned}
 s &\equiv \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) + \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 + \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \\
 &= \frac{n(n-1)}{2} + \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} + \frac{n(n-1)}{2}
 \end{aligned}$$

(2) 回代计算：共需要作 $n(n+1)/2$ 次乘除运算。

于是，用高斯消去法解 $Ax = b$ (其中 $A \in R^{n \times n}$)的计算量为共需作

$$MD = \frac{n(n+1)}{2} + s = \frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3} \quad (2.15)$$

次乘除运算。

下面比较用高斯消去法和用克莱姆（Cramer）法则解20阶方程组的计算量。

表6-1

方法	高斯消去法	Cramer 法则
计算量	3060次乘除法	大约 5×10^{19} 次乘法

如果计算在每秒作 10^5 次乘除法运算的计算机上进行，那么用高斯消去法解20阶方程组约需要0.03秒时间即可完成，而用克莱姆法则大约需 1.3×10^{11} 小时完成（大约相当于 10^7 年）。由此可知克莱姆法则完全不适用在计算机上求解高维方程组。

在计算机上用高斯消去法解低阶稠密矩阵线性方程组时要注意几点:

- (1) 要用一个二维数组 $\mathbf{A}(n,n)$ 存放系数矩阵 \mathbf{A} 的元素，用一维数组 $\mathbf{b}(n)$ 存放常数项 \mathbf{b} 向量；
- (2) 需要输入的数据： \mathbf{A} ， \mathbf{b} ， n
- (3) 约化的中间结果 $A^{(k)}$ 元素冲掉 \mathbf{A} 元素， $b^{(k)}$ 冲掉 \mathbf{b} ，乘数 m_{ik} 冲掉 $a_{(ik)}^{(k)}$ 。例如,计算

$$1. A(i,k) \leftarrow A(i,k)/A(k,k) (i = k+1, \dots, n)$$

$$2. A(i,j) \leftarrow A(i,j) - A(i,k) * A(k,j)$$

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

$$3. b(i) \leftarrow b(i) - A(i,k) * b(k) (i = k+1, \dots, n)$$

(4) 在高斯消去法中一般要引进行交换;

(5) 如果不存在 i_k 使 $a_{i_k k}^{(k)} \neq 0$, 要输出方程没有唯一解的信息。

§ 3 选主元素的高斯消去法

用高斯消去法解 $Ax = b$ 时, 其中设 A 为非奇异矩阵, 可能出现 $a_{kk}^{(k)} = 0$ 情况, 这时必须进行带行交换的高斯消去法。但在实际计算中即使 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 但其绝对值很小时, 用 $a_{kk}^{(k)}$ 作除数, 会导致中间结果矩阵 $A^{(k)}$ 元素数量级严重增长和舍入误差的扩散, 使得最后的计算结果不可靠。

例2 设有方程组

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

解 精确解为 $x^* = (0.99989999, 1.00010001)^T$

[方法1]: 用高斯消去法求解(用具有舍入的3位浮点数进行运算)

$$[A, b] = \begin{bmatrix} 0.000100 & 1 & \vdots & 1 \\ 1 & 1 & \vdots & 2 \end{bmatrix} \xrightarrow{m_{21} = 10000}$$

$$\begin{bmatrix} 0.0001000 & 1 & \vdots & 1 \\ 0 & -10000 & \vdots & -10000 \end{bmatrix}$$

回代得到计算解 $x_2 = 1.00, x_1 = 0.00$ 。与精确解比较,这是一个很坏的结果。

[方法2] 用具有行交换的高斯消去法(避免小主元)。

$$[A, b] \xrightarrow{r_1 \Leftrightarrow r_2, m_{21}=0.000100} \begin{bmatrix} 1 & 1 & \vdots & 2 \\ 0.000100 & 1 & \vdots & 1 \end{bmatrix}$$

$$\longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & \vdots & 2 \\ 0 & 1.00 & \vdots & 1.00 \end{bmatrix}$$

回代求解 $x_2 = 1.00, x_1 = 1.00$ 。对于用具有舍入的3位浮点数进行运算，这是一个很好的计算结果。

方法1计算失败的原因，是用了一个绝对值很小的数作除数，乘数很大，引起约化中间结果数量很严重增长，再舍入就使得结果不可靠了。

由这个例知，在采用高斯消去法解方程组时，小主元可能导致计算失败，故在消去法中应避免采用绝对值很小的主元素。对一般方程组，需要引进选主元的技巧，即在高斯消去法的每一步应该选取系数矩阵或消元后的低阶矩阵中选取绝对值最大的元素作为主元素，保持乘数 $|m_{ik}| \leq 1$ ，以便减少计算过程中舍入误差对计算解的影响；同时，对同一个数值问题，用不同的计算方法，得到的结果的精度大不一样，一个计算方法，如果用此方法的计算过程中舍入误差得到控制，对计算结果影响较小，称此方法为数值稳定的；否则，如果用此计算方法的计算过程中舍入误差增长迅速，计算结果受舍入误差影响较大称此方法为数值不稳定。因此，我们解数值问题时，应选择和使用数值稳定的计算方法，否则，如果使用数值不稳定的计算方法去解数值计算问题，就可能导致计算失败。

3.1 完全主元素消去法

设有线性方程组 $Ax = b$ ，其中 A 为非奇异矩阵。
方程组的增广矩阵为

$$[A, b] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} & \vdots & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} & \vdots & b_2 \\ \vdots & & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & a_{i_1 j_1} & & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & a_{nn} & \vdots & b_n \end{bmatrix}$$

第1步 (k=1) : 首先在 A 中选主元素, 即选择 i_1, j_1 , 使

$$|a_{i_1, j_1}| = \max_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq n}} |a_{ij}| \neq 0$$

再交换 $[A, b]$ 的第1行与第 i_1 行元素，交换 A 的第1列与第 j_1 列元素(相当于交换未知数 x_1 与 x_{j_1})，将

$a_{i_1 j_1}$ 调到(1, 1)位置(交换后为简单起见增广阵仍记为 $[A, b]$ ，其元素仍记为 (a_{ij}, b_i) 然后，进行消元计算。

第k步：继续上述过程，设已完成第1步到第k-1步计算， $[A, b]$ 约化为下述形式（仍记 $A^{(k)}$ 元素为 a_{ij} , $b^{(k)}$ 为元素为 b_i ）：

$$[A, b] \rightarrow [A^{(k)}, b^{(k)}]$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & \vdots & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & \vdots & b_2 \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & \vdots & b_k \\ & & & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kn} & \cdots & a_{nn} & \vdots & b_n \end{bmatrix}$$

第k步选主元区域

对于 $k = 1, 2, \dots, n-1$ 做到 (3)

(1) 选主元素：选取 i_k, j_k 使

$$|a_{i_k, j_k}| = \max_{\substack{k \leq i \leq n \\ k \leq j \leq n}} |a_{ij}| \neq 0$$

(2) 如果 $i_k \neq k$; 则交换 $[\mathbf{A}, \mathbf{b}]$ 第 k 行与第 i_k 行元素, 若 $j_k \neq k$, 则交换 \mathbf{A} 的第 k 列与第 j_k 列元素。

(3) 消元计算

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

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{ik} a_{kj}, (i, j = k + 1, \dots, n)$$

$$b_i \leftarrow b_i - m_{ik} b_k, (i = k + 1, \dots, n)$$

(4) 回代求解。经过上面的过程, 即从第1步到 $n-1$ 步完成选主元, 交换两行, 交换两列, 消元计算, 原方程组约化为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

其中 y_1, y_2, \dots, y_n 为未知数 x_1, x_2, \dots, x_n 调换后的次序。
回代求解

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

3.2 列主元素消去法

完全主元消去法是解低阶稠密矩阵方程组的有效方法，但完全主元素方法在选主元时要花费一定的计算时间，为此，引入一种在实际计算中常用的**部分选主元**

（列主元）消去法。列主元消去法即是每次选主元时，仅依次按列选取绝对值最大的元素作为主元素，且仅交换两行，再进行消元计算。

设列主元素消去法已经完成第1步到第k-1步的按列选主元，交换两行，消元计算得到与原方程组等价的方程组

$$A^{(k)} x = b^{(k)}$$

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

第k步选主元区域

第k步计算如下：对于 $k = 1, 2, \dots, n-1$ 做到 (4)

(1) 按列选主元：即确定 i_k 使

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

(2) $a_{i_k, k} = 0$ ，则 \mathbf{A} 为奇异阵，停止计算。

(3) $i_k \neq k$ ，则交换 $[\mathbf{A}, \mathbf{b}]$ 第 i_k 与第 k 行元素。

(4) 消元计算：

$$a_{ik} \leftarrow m_{ik} = a_{ik} / a_{kk}, (i = k+1, \dots, n)$$

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{ik} \times a_{kj}, (i, j = k+1, \dots, n)$$

$$b_i \leftarrow b_i - m_{ik} \times b_k, (i = k+1, \dots, n)$$

(5) 回代计算:

$$\begin{cases} b_n \leftarrow b_n / a_{nn} \\ b_i \leftarrow (b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} b_j) / a_{ii}, (i = n-1, \dots, 2, 1) \end{cases}$$

计算解 (x_1, \dots, x_n) 在常数项 $b(n)$ 内得到。

例2的[方法2]就是列主元消去法。

例3 用列主元素消去法解方程组

$$\begin{cases} 0.729x_1 + 0.81x_2 + 0.9x_3 = 0.6867 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 0.8338 \\ 1.331x_1 + 1.21x_2 + 1.1x_3 = 1.000 \end{cases}$$

解 精确解为（舍入值）：

$$x^* = (0.2245, 0.2814, 0.3279)^T$$

$$[A, b] = \begin{bmatrix} 0.7290 & 0.8100 & 0.9000 & \vdots & 0.6867 \\ 1.000 & 1.000 & 1.000 & \vdots & 0.8338 \\ 1.331 & 1.210 & 1.100 & \vdots & 1.00 \end{bmatrix}$$

$(\gamma_1 \leftrightarrow \gamma_3, m_{21}=0.7513, m_{31}=0.5477)$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 1.331 & 1.210 & 1.100 & \vdots & 1.000 \\ 0 & 0.09090 & 0.1736 & \vdots & 0.08250 \\ 0 & 0.1473 & 0.2975 & \vdots & 0.1390 \end{bmatrix}$$

$\gamma_2 \leftrightarrow \gamma_3, m_{32}=0.6171$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 1.331 & 1.210 & 1.100 & \vdots & 1.000 \\ 0 & 0.1473 & 0.2975 & \vdots & 0.1390 \\ 0 & 0 & -0.01000 & \vdots & -0.003280 \end{bmatrix}$$

回代即得到计算解

$$x = (0.2246, 0.2812, 0.3280)^T$$

本例是用具有舍入的4位浮点数进行运算，所得到的计算解还是比较准确的。

完全主元素消去法框图（[图6—1](#)）

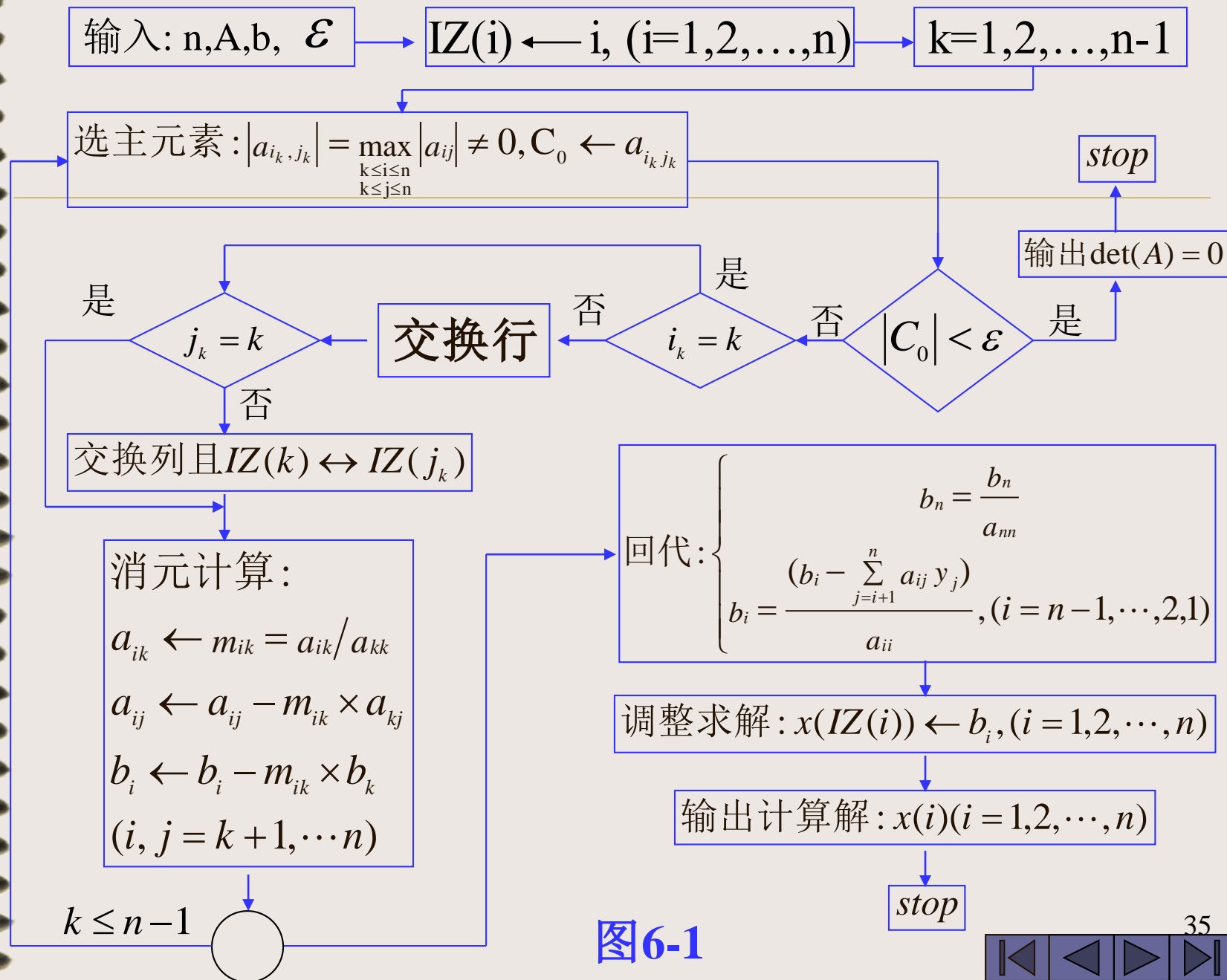


图6-1

用完全主元素法解 $Ax=b$ ，可用一整型数组 $IZ(n)$ 开始记录未知数 x_1, x_2, \dots, x_n 次序即 $IZ(n) = \{1, 2, \dots, n\}$ ，最后记录调整后未知数的足标。系数矩阵 A 存放在二维数组 $A(n, n)$ 内，常数项 b 存放在 $b(n)$ 内，解存放在数组 $X(n)$ 于内。

§ 4 矩阵的三角分解

现用矩阵理论来研究高斯消去法，设约化主元素

$$a_{kk}^{(k)} \neq 0 (k = 1, 2, \dots, n-1)$$

由于对 \mathbf{A} 施行行的初等变换相当于用初等矩阵左乘于 \mathbf{A} ，高斯消去法第1步： $A^{(1)}x = b^{(1)} \rightarrow A^{(2)}x = b^{(2)}$

对应有 $L_1 A^{(1)} = A^{(2)}, L_1 b^{(1)} = b^{(2)}$

其中

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & 1 \end{bmatrix}, (\text{为初等下三角阵})$$

第k步消元过程:

$$A^{(k)}x = b^{(k)} \rightarrow A^{(k+1)}x = b^{(k+1)}$$

对应

$$L_k A^{(k)} = A^{(k+1)}, L_k b^{(k)} = b^{(k+1)} \quad (4.1)$$

其中

k列

↓

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

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

k列
↓

利用递推公式 (4.1), 则有

$$\begin{aligned} L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A^{(1)} &= A^{(n)} \equiv U \\ L_{n-1} \cdots L_2 L_1 b^{(1)} &= b^{(n)} \end{aligned} \quad (4.2)$$

由 (4.2) 式得到

$$A = (L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1}) U \equiv LU \quad (4.3)$$

其中

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

L为由乘数构成的单位下三角阵，U为上三角阵，
(4.3)式表明,用矩阵理论来分析高斯消去法,得到一个重要结果,即在条件 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n-1)$ 下,高斯消去法实质上是将A分解为两个三角矩阵的乘积 $A=LU$ 。

显然，由本章高斯消去法及行列式性质知，如果

$$a_{kk}^{(k)} \neq 0 (k = 1, 2, \dots, n-1)$$

则有

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

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

其中

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

反之，可用归纳法证明：如果A的顺序主子式

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

则

$$\det(A_i) \neq 0 (i = 1, 2, \cdots, k)$$

总结上述讨论，得到下述重要定理。

定理2（矩阵的三角分解）设 $A \in R^{n \times n}$ ，如果A的顺序主子式

$$\det(A_i) \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$$

则A可分解为一个单位下三角阵与一个上三角阵的乘积，即

$$A = LU$$

且分解是唯一的。

证明 仅就 $\det(A_i) \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$ 来证明唯一性。
设有

$$A = L_1 U_1 = LU \quad (4.4)$$

其中 L_1, L 为下三角阵, U_1, U 为上三角阵。

由假设知 U_1^{-1} 存在，于是从 (4.4) 可得

$$L^{-1}L_1 = UU_1^{-1}$$

上式右边为上三角阵，左边为单位下三角阵，故应为单位阵。即

$$L_1 = L, U_1 = U。$$

称矩阵的三角分解 $A = LU$ 为杜利特尔 (Doolittle) 分解。其中

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

$$, U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

在定理2条件下, 同样可有三角分解

$$A = LU$$

其中L为下三角阵,U为单位上三角阵。称矩阵的这种分解为克劳特 (Crout)分解。

例4 由例1可得到A的三角分解

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 3/2 & 1 & \\ 1/2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ & -1 & 1 \\ & & 1 \end{bmatrix} = LU$$

设有方程组 $Ax = b, A \in R^{n \times n}$ 。如果实现了 $A = LU$, 则求解问题化为:

$$Ax = b \Leftrightarrow \text{求解 } LUx = b$$

即

$$(1) Ly = b, \text{求 } y$$

$$(2) Ux = y, \text{求解 } x$$

求解两个三角形方程组是容易的。

如果A为非奇异矩阵，则由列主元消去法知A通过行交换后可实现三角分解，即存有置换阵P使

$$PA = LU$$

其中L为单位下三角阵，U为上三角阵。

§ 5 解三对角线组的追赶法

在一些实际问题中，如用三次样条函数的插值问题，用差分解二阶线形常微分方程边值问题等，最后都导致解三对角线方程组 $Ax = f$ 即

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_1 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_i & b_i & c_i \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

其中A满足条件

$$\left. \begin{array}{l} (1) \quad |b_1| > |c_1| > 0; \\ (2) \quad |b_i| \geq |a_i| + |c_i|, (a_i c_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n-1); \\ (3) \quad |b_n| > |a_n| > 0 \end{array} \right\} \quad (5.2)$$

对于具有条件 (5.2) 的方程组 (5.1), 可用下述的追赶法求解。追赶法具有计算量少, 方法简单, 算法稳定等特点。

定理3 设三对角线方程组 $Ax = f$, 且A满足条件(5.2), 则A为非奇异矩阵。

证明 用归纳法证明, 显然, 对 $n=2$ 时有

$$\det(A) = \begin{vmatrix} b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} = b_1 b_2 - c_1 a_2 \neq 0$$

现设定理对 $n-1$ 阶满足条件 (5.2) 的三对角阵成立，
求证对满足条件 (5.2) 的 n 阶三对角阵定理亦成立。

因 $b_1 \neq 0$ ，消去法执行一步后得

$$A \rightarrow \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2 & & & \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \equiv A^{(2)}$$

显然

$$\det(A) = b_1 \det(B)$$

其中

$$B = \begin{bmatrix} a_2 & c_2 & & \\ a_3 & b_3 & c_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & a_n & b_n \end{bmatrix}, \quad a_2 = b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2$$

$$|a_2| = \left| b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2 \right| \geq |b_2| - \left| \frac{c_1}{b_1} \right| |a_2| > |b_2| - |a_2| \geq |c_2| \neq 0$$

于是由归纳法假设，则有

$$\det(B) \neq 0$$

故

$$\det(A) \neq 0$$

定理4 设 $Ax = f$, 其中A为满足条件 (5.2) 的三对角阵, 则A的所有顺序主子式都不为零, 即

$$\det(A_k) \neq 0, \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

证明 由于A是满足 (5.2) 的n阵三对角阵, 因此, A的任一个顺序主子阵亦是满足 (5.2) 的三对角阵, 由 定理3, 则有:

$$\det(A_k) \neq 0, (k = 1, 2, \dots, n)$$

于是，由矩阵的三角分解定理，则有

$$A = LU$$

即

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_i & b_i & c_i \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & \gamma_i & \alpha_i & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & & \\ & 1 & \beta_2 & & & \\ & & 1 & \ddots & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & \beta_{i-1} \\ & & & & 1 & \beta_i & \cdots \\ & & & & & \ddots & \ddots \\ & & & & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

由矩阵乘法，可得计算待定系数 $\{\alpha_i\}, \{\beta_i\}, \{\gamma_i\}$ 的计算公式，即

- (1) $b_1 = \alpha_1, \quad c_1 = \alpha_1 \beta_1, \quad \beta_1 = c_1 / b_1;$
- (2) $\alpha_i = \gamma_i, \quad b_i = \alpha_i + \gamma_i \beta_{i-1} = \alpha_i \beta_{i-1} + \alpha_i, \quad (i = 2, \cdots, n);$
- (3) $c_i = \alpha_i \beta_i, \quad (i = 2, \cdots, n-1)$

于是，得到解 (5.1) 的追赶法公式：

(1) 分解计算公式 $A=LU$

$$\begin{cases} \beta_1 = c_1 / b_1 \\ \beta_i = c_i / (b_i - \alpha_i \beta_{i-1}), \quad (i = 2, \dots, n-1) \end{cases}$$

求解 $Ax = f \Leftrightarrow$ 求解 (1) $Ly = f$, 求 y

(2) $Ux = y$, 求 x

(2) 求解 $Ly = f$ 的递推公式

$$\begin{cases} y_1 = f_1 / b_1 \\ y_i = (f_i - \alpha_i y_{i-1}) / (b_i - \alpha_i \beta_{i-1}) \\ (i = 2, 3, \dots, n) \end{cases}$$

(3) 求解 $Ux = y$ 的递推公式

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - \beta_i x_{i+1}, \quad (i = n-1, \dots, 2, 1) \end{cases}$$

将计算 $\beta_1 \rightarrow \beta_2 \rightarrow \dots \rightarrow \beta_{n-1}$ 及 $y_1 \rightarrow y_2 \rightarrow \dots \rightarrow y_n$ 的过程称为**追的过程**, 计算方程组解

$$x_n \rightarrow x_{n-1} \rightarrow \dots \rightarrow x_2 \rightarrow x_1$$

的过程称为**赶的过程**. 追赶法解 $Ax = f$ 仅需要 $5n-4$ 次乘除运算。只需要用3个一维数组分别存贮 A 的系数 $\{a_i\}, \{b_i\}, \{c_i\}$ 且还需要用两个一维数组保存计算的中间结果 $\{\beta_i\}$, 和 $\{y_i\}$ (或 $\{x_i\}$)

例5 用追赶法解方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

解 (1) 计算 $\{\beta_i\}$:

$$\beta_1 = -1/2, \quad \beta_2 = -2/3, \quad \beta_3 = -3/4$$

(2) 计算 $\{y_i\}$:

$$y_1 = 1/2, \quad y_2 = 1/3, \quad y_3 = 1/4, \quad y_4 = 1$$

(3) 求解计算 $\{x_i\}$:

$$x_4 = 1, \quad x_3 = 1, \quad x_2 = 1, \quad x_1 = 1$$

§ 6 解对称正定矩阵方程组的平方根法

在工程技术问题中,例如用有限元方法解结构力学中问题时,常常需要求解具有对称正定矩阵方程组,对于这种具有特殊性质系数矩阵,利用矩阵的三角分解法求解就得到解对称正定矩阵方程组的平方根法,这是一种解对称正定矩阵方程组的有效方法。

设有方程组

$$Ax = b \quad (6.1)$$

其中 $A \in R^{n \times n}$, 若 A 满足下述条件:

(1) A对称: 即 $A^T = A$

(2) 对任意非零向量 $x \in R^n$, 有

$$(Ax, x) = x^T Ax > 0$$

则称A为**对称正定矩阵**。

对称正定矩阵A具有性质:

a. 设A为对称正定阵, 则A的顺序主子式都大于零, 即

$$\det(A_k) > 0 (k = 1, 2, \dots, n)$$

b. A的特征值满足:

$$\lambda_i > 0 (i = 1, 2, \dots, n)$$

由设A为对称正定矩阵，则A有三角分解

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \\ &= LU \\ &\equiv LDU_0 \end{aligned} \quad (6.2)$$

其中

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

$$U_0 = \begin{bmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \dots & \dots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & 1 & \frac{u_{23}}{u_{22}} & \dots & \frac{u_{2n}}{u_{22}} \\ & & 1 & & \vdots \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

由设 $A = A^T$, 于是 $A = U_0^T(DL^T)$, U_0^T 为单位下三角阵, (DL^T) 为上角阵, 由矩阵三角分解的唯一性, 则 $L = U_0^T$, 从而对称正定矩阵 A 有唯一分解式

$$A = LDL^T \quad (6.3)$$

由(6.2)式可知

$$\det(A_k) = u_{11}u_{22} \cdots u_{kk}, (k = 1, 2, \cdots, n)$$

又因为 $\det(A_k) > 0, (k = 1, 2, \cdots, n)$, 故

$$u_{ii} > 0 \quad (k = 1, 2, \cdots, n)$$

于是，对角阵D还可分解

$$\begin{aligned} D &= \text{diag}[\sqrt{u_{11}}, \sqrt{u_{22}}, \cdots, \sqrt{u_{nn}}] * \\ &\quad \text{diag}[\sqrt{u_{11}}, \sqrt{u_{22}}, \cdots, \sqrt{u_{nn}}] \\ &\equiv D^{1/2} D^{1/2} \end{aligned}$$

代入(6.3)，则有

$$A = LD^{1/2} D^{1/2} L^T = (LD^{1/2})(LD^{1/2})^T \equiv \hat{L} \hat{L}^T$$

其中 $\hat{L} = LD^{1/2}$ 为下三角阵。

定理5（对称正定阵的三角分解）

设 A 为 n 阶对称正定矩阵，则有三角分解（且唯一）：

（1） $A = LDL^T$ ，其中 L 为单位下三角阵， D 为对角阵，或

（2） $A = LL^T$ ，其中 L 为下三角阵且当限定 L 的对角元素为正时这种分解是唯一的。

这种矩阵分解称为乔来斯金（Cholesky）分解。

分解计算 $A = LL^T$ 的递推公式及求解公式：

设有 $Ax = b$, 其中 $A \in R^{n \times n}$ 为对称正定阵, 于是有三角分解

$$A = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n1} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{nn} \end{bmatrix} \\ = LL^T$$

其中

$$l_{ii} > 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

由矩阵乘法，则有L的第一列元素为

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}}, l_{i1} = a_{i1} / l_{11}, (i = 2, \dots, n)$$

同理，可确定L的第j列元素 $l_{ij} (i = j, \dots, n)$.

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \sum_{k=1}^n l_{ik} (L^T)_{kj} = \sum_{k=1}^n l_{ik} l_{jk} \\ &= \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} + l_{ij} l_{jj} \\ &\quad (\text{当 } j < k \text{ 时, 则 } l_{jk} = 0) \end{aligned}$$

由此得解对称正定矩阵方程组的平方根法计算公式：

(一) $A = LL^T$ 分解计算

$$(1) \quad l_{11} = \sqrt{a_{11}}, l_{i1} = a_{i1} / l_{11}, (i = 2, \dots, n)$$

(2) 对于 $j = 2, 3, \dots, n$

$$\begin{cases} l_{jj} = (a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2)^{1/2} \\ l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}) / l_{ij}, (i = j+1, \dots, n), (j \neq n) \end{cases}$$

(二) 求解计算

(3) 求解 $Ly = b$

$$\begin{cases} y_{11} = b_{11} / l_{11} \\ y_i = (b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k) / l_{ii}, (i = 2, 3, \dots, n) \end{cases}$$

(4) 求解 $L^T x = y$

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

平方根法仅需计算L与D，因此平方根法的计算量约为 $\frac{1}{6}n^3$ 次乘除法运算，大约为一般高斯消去法计算量的一半。

由分解公式有

$$a_{jj} = \sum_{k=1}^j l_{jk}^2 \quad (j=1,2,\dots,n)$$
$$|l_{jk}| \leq \sqrt{a_{jj}} \leq \max_{1 \leq j \leq n} \sqrt{a_{jj}} \quad (6.4)$$

(6.4) 说明解 $Lx = b$ 的平方根法所得的中间数据是有界的，即 l_{jk} 数量级不会增长。因此，虽然解对称正定矩阵方程组的平方根法没有进行选主元素，但平方根法是数值稳定的。

因为A为对称矩阵，因此，电算时只需用一维数组存贮A的对角线以下元素，即

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ a_{21} & a_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad \text{对称}$$

↑
存区

用一维数组按行存贮:

$$A(n * (n + 1) / 2) \\ = \{a_{11}, a_{21}, a_{22}, \cdots, a_{n1}, a_{n2}, \cdots, a_{nn}\}$$

且矩阵A的元素 $a_{ij} (i \geq j)$ 在一维数组中表示为:

$$A(i * (i - 1) / 2 + j)$$

计算得到的L的元素存放在A的对应位置。

例6 用平方根法解方程组

$$\begin{bmatrix} 6 & 7 & 5 \\ 7 & 13 & 8 \\ 5 & 8 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 10 \\ 9 \end{bmatrix}$$

解 精确解 $x^* = (1, -1, 2)^T$

(1) 分解计算 $A = LL^T$

$$l_{11} = \sqrt{6} = 2.4495, l_{22} = 2.1985$$

$$l_{21} = 7/\sqrt{6} = 2.8577, l_{32} = 0.9856$$

$$l_{31} = 5/\sqrt{6} = 2.0412, l_{33} = 0.9285$$

$$L = \begin{bmatrix} 2.4495 & & \\ 2.8577 & 2.1985 & \\ 2.0412 & 0.9856 & 0.9285 \end{bmatrix}$$

(2) 求解两个三角形方程组，求解

$$Ly = b$$

得到 $y = (3.6742, -0.2273, 1.8570)^T$

求解 $Ux = y$ ，即得 $Ax = b$ 的解

$$x = (1.0, -1.0, 2.0)^T$$

§ 7 向量和矩阵的范数

为了对方程组的计算解进行误差分析，讨论迭代法的收敛性，需要对 R^n (n维列向量空间) 及 $R^{n \times n}$ 中矩阵引进某种量度，即引进向量或矩阵的范数概念。中向量范数是 R^3 中向量长度概念的推广。

定义1 (向量范数) 如果向量 $x \in R^n$ 的某个实值函数 $N(x) \equiv \|x\|$ 满足条件

(1) 正定条件:

$$\|x\| \geq 0 \text{ 且 } \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$$

(2) 齐次性:

$$\|cx\| = |c| \|x\|$$

c 为实数。

(3) 三角不等式:

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \forall x, y \in R^n$$

称 $N(x) \equiv \|x\|$ 是 R^n 上的一个向量范数（或向量的模）。

(4) 利用三角不等式可推得（图6-2）

$$\left| \|x\| - \|y\| \right| \leq \|x - y\|$$

R^2 中三角不等式，即为两边之和大于第三边。

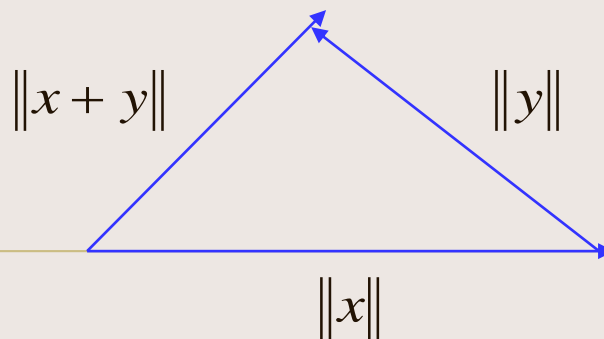


图6-2

定义 2 设 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in R^n$, 定义 R^n 上三种常用的**向量范数**

(1) 向量的“1”范数:

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

(2) 向量的“ ∞ ”范数:

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

(3) 向量的“2”范数:

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

上述定义的向量的函数 $N(x) \equiv \|x\|_v$, ($v = 1$ 或 ∞ 或 2) 满足定义1的3个条件, 因此, $N(x)$ 是 R^n 上的向量的范数。

例7 设 $x = (-1, 2, 3)^T$, 计算 $\|x\|_1, \|x\|_\infty, \|x\|_2$

解

$$\|x\|_1 = 1 + 2 + 3 = 6$$

$$\|x\|_\infty = \max\{1, 2, 3\} = 3$$

$$\|x\|_2 = (1^2 + 2^2 + 3^2)^{1/2} = \sqrt{14}$$

定义3 (向量序列的极限)

设 $\{x^{(k)}\}$ 为向量序列记为 $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T \in R^n$
及 $x^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)^T \in R^n$. 如果 n 个数列极限存在且

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^*, (i = 1, 2, \dots, n)$$

则称 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 且记为

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

定理6 设 $\{x^{(k)}\}$ 是 R^n 中一向量序列, $x^* \in R^n$
则

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

(当 $k \rightarrow \infty$)

证明 只就 $v = \infty$ 证明。显然有:

$$\begin{cases} x_i^{(k)} \rightarrow x_i^* \\ (i = 1, 2, \dots, n) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \|x^{(k)} - x^*\|_\infty \\ = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{(k)} - x_i^*| \rightarrow 0 \\ (k \rightarrow \infty) \end{cases}$$

定义4 (矩阵的范数) 如果矩阵 $A \in R^{n \times n}$ 的某个非负实值函数 $N(A) = \|A\|$ 满足下述条件

。

(1) 正定性:

$$\|A\| \geq 0, \text{ 且 } \|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0;$$

(2) 齐次性:

$$\|cA\| = |c| \|A\|, c \text{ 为实数};$$

(3) 三角不等式:

$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|, \forall A, B \in R^{n \times n}$$

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

称 $N(A) = \|A\|$ 是 $R^{n \times n}$ 上一个矩阵范数（或称为模）。

也可借助向量范数来定义矩阵范数。

定义5（矩阵的算子范数） 设 $x \in R^n, A \in R^{n \times n}$ ，且给出一种向量范数 $\|x\|_v$ ，相应地定义一个矩阵的非负函数 $N(A) = \|A\|_v$ 。即

$$\|A\|_v = \max_{\substack{x \neq 0 \\ x \in R^n}} \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \quad (\text{最大比值}) \quad (7.1)$$

显然，由 (7.1) 式对任意 $x \in R^n, A \in R^{n \times n}$ 有

$$\|Ax\|_v \leq \|A\|_v \|x\|_v \quad (7.2)$$

易验证 $N(A) = \|A\|_v$ 满足矩阵范数条件 (1) — (4)，
所以 $\|A\|_v$ 是 $R^{n \times n}$ 上的矩阵范数，下面只验证条件 (3)
成立，事实上，利用向量范数的三角不等式及 (7.2)
则有

$$\begin{aligned} \|(A+B)x\|_v &\leq \|Ax\|_v + \|Bx\|_v \\ &\leq \|A\|_v \|x\|_v + \|B\|_v \|x\|_v \end{aligned}$$

设 $x \neq 0$ ，故有

$$\frac{\|(A+B)x\|_v}{\|x\|_v} \leq \|A\|_v + \|B\|_v, \forall x \in R^n$$

$$\text{于是 } \|A+B\|_v \leq \|A\|_v + \|B\|_v$$

$v=1, v=\infty$ 时矩阵的算子范数 $\|A\|_v$ 计算公式有如下定理:

定理7 (矩阵范数求算公式) 设 $x \in R^n, A \in R^{n \times n}$,
则

$$(1) \quad \|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| \text{ 对应 } \|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$$

(称为A的列范数);

$$(2) \quad \|x\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \text{ 对应 } \|A\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

(称为A的行范数)。

证明 只证 (2)，同理可证 (1)。

设 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \neq 0$ ，且设 $A \neq 0$ ，引进记号，

$$t = \|x\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$$

$$\mu = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| = \sum_{j=1}^n |a_{i_0 j}|$$

于是

$$\begin{aligned}\|Ax\|_{\infty} &= \max_{1 \leq i \leq n} \left| \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right| \leq \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| |x_j| \\ &\leq t \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|\end{aligned}$$

即对任何非零向量 $x \in R^n$ ，则有

$$\frac{\|Ax\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \leq \mu$$

下面说明存在 $x_0 \in R^n$ ，使比值 $\frac{\|Ax_0\|_\infty}{\|x_0\|_\infty} = \mu..$

事实上，选取向量 $x_0 = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 为

$$x_j = \begin{cases} 1, & \text{当 } a_{i_0 j} \geq 0 \text{ 时} \\ -1, & \text{当 } a_{i_0 j} < 0 \text{ 时} \end{cases}$$

且有 $\|x_0\|_\infty = 1$ ， Ax_0 第 i_0 个分量为

$$\sum_{j=1}^n a_{i_0 j} x_j = \sum_{j=1}^n |a_{i_0 j}| = \mu$$

故

$$\frac{\|Ax_0\|_\infty}{\|x_0\|_\infty} = \|Ax_0\|_\infty = \mu$$

即

$$\max_{\substack{x \neq 0 \\ x \in R^n}} \frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \frac{\|Ax_0\|_\infty}{\|x_0\|_\infty} = \|Ax_0\|_\infty = \mu$$

例 8 设 $A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ -4 & 5 \end{bmatrix}$, 计算 $\|A\|_1, \|A\|_\infty$.

解 $\|A\|_1 = \max\{5, 8\} = 8$
 $\|A\|_\infty = \max\{4, 9\} = 9$

§ 8 解线性方程组的迭代法

前面已介绍解线性方程组的直接法（例如选主元的高斯消去法等），但是，对于工程技术中产生的大型稀疏矩阵方程组，则利用迭代法求解是合适的，并可利用 A 中有大量零元素的特点节省计算机内存。

$$Ax = b \quad A$$

设有方程组 $Ax = b$ 其中 A 为非奇异阵，解方程组的迭代法，首先需要将 $Ax = b$ 转化为一个等价方程组

$$x = Bx + f \quad (8.1)$$

任取初始向量 $x^{(0)}$ 按下述逐次代入方法构造向量序列 $x^{(k)}$:

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f \quad (8.2)$$

其中B与k无关, 称此迭代法为一阶定常迭代法, 如果

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

则称此迭代法收敛且 x^* 为 (8.1) 的解。事实上, 在 (8.2) 式两边取极限即知:

$$\begin{aligned}x^* &= \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k+1)} \\&= \lim_{k \rightarrow \infty} (Bx^{(k)} + f) \\&= Bx^* + f\end{aligned}$$

例9 设有方程组

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 + 2x_3 = 6 \\ -x_1 + 11x_2 - x_3 + 3x_4 = 25 \\ 2x_1 - x_2 + 10x_3 - x_4 = -11 \\ 3x_2 - x_3 + 8x_4 = 15 \end{cases}$$

解

精确解 $x^* = (1, 2, -1, 1)^T$

首先将 $Ax = b$ 转化为等价方程组

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{10}(6 + x_2 - 2x_3) \\ x_2 = \frac{1}{11}(25 + x_1 + x_3 - 3x_4) \\ x_3 = \frac{1}{10}(-11 - 2x_1 + x_2 + x_4) \\ x_4 = \frac{1}{8}(15 - 3x_2 + x_3) \end{cases}$$

取初始向量 $x^{(0)} = (0, 0, 0, 0)^T$ 时的迭代公式:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{10} (6 + x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{11} (25 + x_1^{(k)} + x_3^{(k)} - 3x_4^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{10} (-11 - 2x_1^{(k)} + x_2^{(k)} + x_4^{(k)}) \\ x_4^{(k+1)} = \frac{1}{8} (15 - 3x_1^{(k)} + x_3^{(k)}), (k = 0, 1, 2, \dots) \end{array} \right.$$

且有误差 $\|x^* - x^{(10)}\|_{\infty} \approx 0.0002$

计算结果如下**表6-2**

表6-2

$x^{(k)}$	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$x_4^{(k)}$
$x^{(0)}$	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
$x^{(1)}$	0.6000	2.2727	-1.100	1.8750
$x^{(2)}$	1.0473	1.7159	-0.8052	0.8852
$x^{(3)}$	0.9326	2.0533	-1.0493	1.1309
$x^{(4)}$	1.0152	1.9637	-0.9681	0.9739
$x^{(5)}$	0.9890	2.0114	-1.0103	1.0214
$x^{(6)}$	1.0032	1.9922	-0.9945	0.9944
$x^{(7)}$	0.9981	2.0023	-1.0020	1.0036
$x^{(8)}$	1.0006	1.9987	-0.9990	0.9989
$x^{(9)}$	0.9997	2.0004	-1.0004	1.0006
$x^{(10)}$	1.0001	1.9998	-0.9998	0.9998

从此例看出，由迭代法产生的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 逐次逼近方程组的精确解。但是，并不是对任何一个方程组(8.1)，由迭代法产生的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 都收敛。

设有方程组

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$\text{或} \quad Ax = b \quad (8.3)$$

其中A为非奇异矩阵，且

$$a_{ii} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$$

将A写为：

$$\begin{aligned}
 A &= \begin{bmatrix} a_{11} & & & & \\ & a_{22} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & a_{nn} & \\ & & & & \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ -a_{21} & 0 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & 0 & \end{bmatrix} \\
 &- \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & -a_{13} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & & & 0 \end{bmatrix} \\
 &\equiv D - L - U
 \end{aligned} \tag{8.4}$$

现将A分裂为

$$A = M - N$$

于是方程组 (8.3) 等价于方程组

$$Mx = Nx + b \quad (8.5)$$

其中M为可选择的一个非奇异矩阵，应选择M使 $Mx = f$ 容易求解。

对应于方程(8.5)可构造一个迭代过程：

$$\begin{cases} x^{(0)} \text{ (初始向量)} \\ x^{(k+1)} = M^{-1}Nx^{(k)} + M^{-1}b \\ (k = 0, 1, \dots) \end{cases} \quad (8.6)$$

8.1 雅可比迭代法

选取 $M=D$ ，于是 $N = M - A = (L+U)$ ，方程
(8.3) 转化为等价方程组

$$Dx = (L+U)x + b$$

于是得到雅可比迭代公式：

$$\begin{cases} x^{(0)} \text{ (初始向量)} \\ x^{(k+1)} = Jx^{(k)} + f \\ \text{其中 } J = D^{-1}(L+U) \text{ , } f = D^{-1}b \end{cases} \quad (8.7)$$

J 称为 **Jacobi** 迭代法的迭代矩阵。

Jacobi迭代公式的分量形式:

记 $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$ 为第 k 次近似, 则
(8.7) 式可写出为

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij}x_j^{(k)}$$

或

$$\begin{cases} x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T \\ x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij}x_j^{(k)}) \\ (i = 1, 2, \dots, n; \quad k = 0, 1, \dots) \end{cases} \quad (8.8)$$

Jacobi 迭代法公式简单,由公式(8.7)或 (8.8)可知,每次迭代只需计算一次矩阵与向量的乘法,例9的迭代法就是解 $Ax=b$ 的 Jacobi 迭代法。电算时Jacobi方法需要两组工作单元来保存 $x^{(k)}$ 及 $x^{(k+1)}$ 且可用 $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_{\infty} < \varepsilon$ 来控制迭代终止。由迭代法计算公式可知, 迭代法一个重要特点是计算过程中原来矩阵A数据始终不变。

8.2 高斯-塞德尔迭代法

在(8.5)式选取 $M = D - L$ (下三角矩阵)。
于是,

$$N = M - A = U$$

方程(8.3) 转化为等价方程组

$$(D - L)x = Ux + b$$

于是得到高斯-塞德尔（G - S）迭代公式：

$$\begin{cases} x^{(0)} \text{ (初始向量)} \\ x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + f \\ \text{其中 } G = (D - L)^{-1}U, \quad f = (D - L)^{-1}b \end{cases} \quad (8.9)$$

G称为**G - S 迭代法**的**迭代矩阵**。

G - S 迭代法的分量形式：

记 $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$ ，公式 (8.9) 可
写为：

$$(D - L)x^{(k+1)} = Ux^{(k)} + b$$

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

或

$$\begin{cases} x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T \\ x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}) \\ (i = 1, 2, \dots, n; k = 0, 1, 2, \dots) \end{cases} \quad (8.10)$$

G-S 迭代法每次迭代只需计算一次矩阵与向量的乘法。但 G-S 迭代法比 Jacobi 迭代法有一个明显的优点就是电算时仅需一组工作单位用来保存

$x^{(k)}$ 分量(或 $x^{(k+1)}$ 分量)。当计算出 $x_i^{(k+1)}$ 就冲掉旧分量 $x_i^{(k)}$ 。从 G-S 迭代公式 (8.10) 可以看出在

$x^{(k)} \rightarrow x^{(k+1)}$ 的一步迭代中, 计算分量 $x_i^{(k+1)}$ 时利用了已经计算出的最新分量。因此, G-S 迭代法可看作是 Jacobi 迭代法的一种修正。

例10 用 G-S 迭代法解 例9 方程组

解： G-S 迭代公式 (结果如下 表6-3)

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{10}(6 + x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{11}(25 + x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)} - 3x_4^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{10}(-11 - 2x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)} + x_4^{(k)}) \\ x_4^{(k+1)} = \frac{1}{8}(15 - 3x_2^{(k+1)} + x_3^{(k+1)}), (k = 0, 1, \dots) \end{cases}$$

从此例看出，G-S 迭代比 Jacobi 迭代法收敛快(初始向量相同，达到同样精度，所需要迭代次数少)。但这个结论对 $Ax=b$ 的矩阵A满足某些条件时才是对的，甚至有这样的方程组，用 Jacobi 方法是收敛的，而用 G-S 迭代法却是发散的。

表6-3

$x^{(k)}$	$x^{(0)}$	$x^{(1)}$	$x^{(2)}$	$x^{(3)}$	$x^{(4)}$	$x^{(5)}$
$x_1^{(k)}$	0.0	0.6000	1.030	1.0065	1.0009	1.0001
$x_2^{(k)}$	0.0	2.3272	2.037	2.0036	2.003	2.0000
$x_3^{(k)}$	0.0	-0.9873	-1.014	-1.0025	-1.0003	-1.0000
$x_4^{(k)}$	0.0	0.8789	0.9844	0.9983	0.9999	1.0000

且 $\|x^* - x^{(5)}\|_{\infty} \approx 0.0001$

8.3 解线性方程组的超松弛迭代法

逐次超松弛迭代 (Successive Over- Relaxation) ,
简称SOR方法是G – S 迭代法的一种加速方法, 是解大型稀疏矩阵方程组的有效方法之一, 它有着广泛的应用。

设有方程组

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

且 $a_{ii} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$, A为非奇异矩阵。分裂A为
:

$$A = D - L - U$$

设已知第k次近似 $x^{(k)}$ 及第k+1次近似的分量:

$$x_j^{(k+1)} (j = 1, 2, \dots, i-1)$$

首先，用G-S迭代法计算一个辅助量 $\tilde{x}_i^{(k+1)}$ ：

$$\tilde{x}_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)}) \quad (8.11)$$

再由 $x^{(k)}$ 的第i个分量 $x_i^{(k)}$ 与 $\tilde{x}_i^{(k+1)}$ 加权平均，定义 $x_i^{(k+1)}$ ：

$$\begin{aligned} x_i^{(k+1)} &= (1 - \omega) x_i^{(k)} + \omega \tilde{x}_i^{(k+1)} \\ &= x_i^{(k)} + \omega (\tilde{x}_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}) \end{aligned} \quad (8.12a)$$

将 (8.11) 代入 (8.12a) 得到解 $Ax = b$ 的
SOR方法:

$$\begin{cases} x^0 = (x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T \\ x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij} x_j^{(k)}) \\ (i = 1, 2, \dots, n) \end{cases} \quad (8.13a)$$

其中 $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$, ω 称为松弛因子

或写为

$$\begin{cases} x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \Delta x_i \\ \Delta x_i = \frac{\omega}{a_{ii}} (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij} x_j^{(k)}) \\ (i = 1, 2, \dots, n), (k = 0, 1, \dots) \end{cases}$$

在SOR方法 (8.11) 中取 $\omega = 1$ ，则SOR方法就是 G-S 迭代法，当松弛因子 ω 满足 $0 < \omega < 1$ 时，迭代法 (8.13a) 称为低松弛方法，当 $1 < \omega < 2$ 时迭代方法 (8.13a) 称为超松弛方法。

SOR方法每次迭代主要计算量是计算一次矩阵乘向量。电算时可用

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| < \varepsilon$$

来控制迭代，且这时SOR方法只需一组工作单元 $X(n)$ 存放 $x^{(k+1)}$ 或 $x^{(k)}$ 。也可用剩余向量：

$$\|r^{(k)}\|_{\infty} = \|b - Ax^{(k)}\|_{\infty} < \varepsilon$$

来控制迭代终止。

例11 用SOR方法解方程组

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -4 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -4 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

解 精确解 $x^* = (-1, -1, -1, -1)^T$

取初始向量 $x^{(0)} = (0.0, 0.0, 0.0, 0.0)^T$

SOR迭代公式:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{\omega}{4} (1 + 4x_1^{(k)} - x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - x_4^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{\omega}{4} (1 - x_1^{(k+1)} + 4x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - x_4^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - \frac{\omega}{4} (1 - x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)} + 4x_3^{(k)} - x_4^{(k)}) \\ x_4^{(k+1)} = x_4^{(k)} - \frac{\omega}{4} (1 - x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)} - x_3^{(k+1)} + 4x_4^{(k)}) \\ (k = 0, 1, \dots) \end{array} \right.$$

(1) 取松弛因子 $\omega = 1.3$ 计算结果为:

$$x^{(11)} = (-0.999999646, -1.000000310, \\ -0.9999999953, -0.999999912)^T$$

$$\text{且 } \|\varepsilon^{(11)}\|_2 = \|x^* - x^{(11)}\|_2 \leq 0.46 \times 10^{-5}$$

迭代次数 $k=11$.

(2) 当取 $\omega = 1.0$ 时，初始向量相同，达到同样精度所需要迭代次数 $k=22$.

(3) 当取 $\omega = 1.7$ 时，初始向量相同，达到同样精度，则需要迭代 $k=33$ 次。

对于此例，最佳松弛因子是 $\omega_{op} = 1.3$ ，即达到同样精度所需迭代次数最少。由此可知，用SOR 方法解线性方程时，松弛因子选择得较好，常常会使SOR 迭代收敛大大加速。

解 $Ax = b$ 的SOR 方法收敛的必要条件是:

$$0 < \omega < 2$$

因此, 用SOR 方法解 $Ax = b$ 时松弛因子应在

$$0 < \omega < 2$$

内选择(这时SOR方法可能收敛)。

解 $Ax = b$ 的SOR 方法的矩阵形式:

由SOR迭代公式 (8.11), 即

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} = (1-\omega)a_{ii}x_i^{(k)} + \omega(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

即

$$Dx^{(k+1)} = (1-\omega)Dx^{(k)} + \omega(b + Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)})$$

$$(D - \omega L)x^{(k+1)} = ((1-\omega)D + \omega U)x^k + \omega b$$

由设 $a_{ii} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$, 于是 $(D - \omega L)$ 为非奇异矩阵, 于是, 矩阵形式为:

$$\begin{cases} \lambda = \omega(D - \omega\Gamma)^{-1} \rho \\ \Gamma^\omega = (D - \omega\Gamma)^{-1} [(I - \omega)D + \omega\Lambda] \\ x_{(k+1)} = \Gamma^\omega x_{(k)} + \lambda \\ x_{(0)} \end{cases}$$

(8.14a)

其中 L_ω 称为SOR方法的迭代矩阵。

解 $Ax = b$ 的SOR方法的框图(图6-3):

设方程组 $Ax = b$, 其中A满足条件:

- (1) A为对称正定阵, 或
- (2) A为严格对角占优阵, 即

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| (i = 1, 2, \dots, n)$$

数组 $X(n)$ 存放近似解, N_0 表示迭代的最大次数, 当

$$\|r^{(k)}\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \left| b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right| < \varepsilon$$

时迭代终止。

8.4 迭代法的收敛性

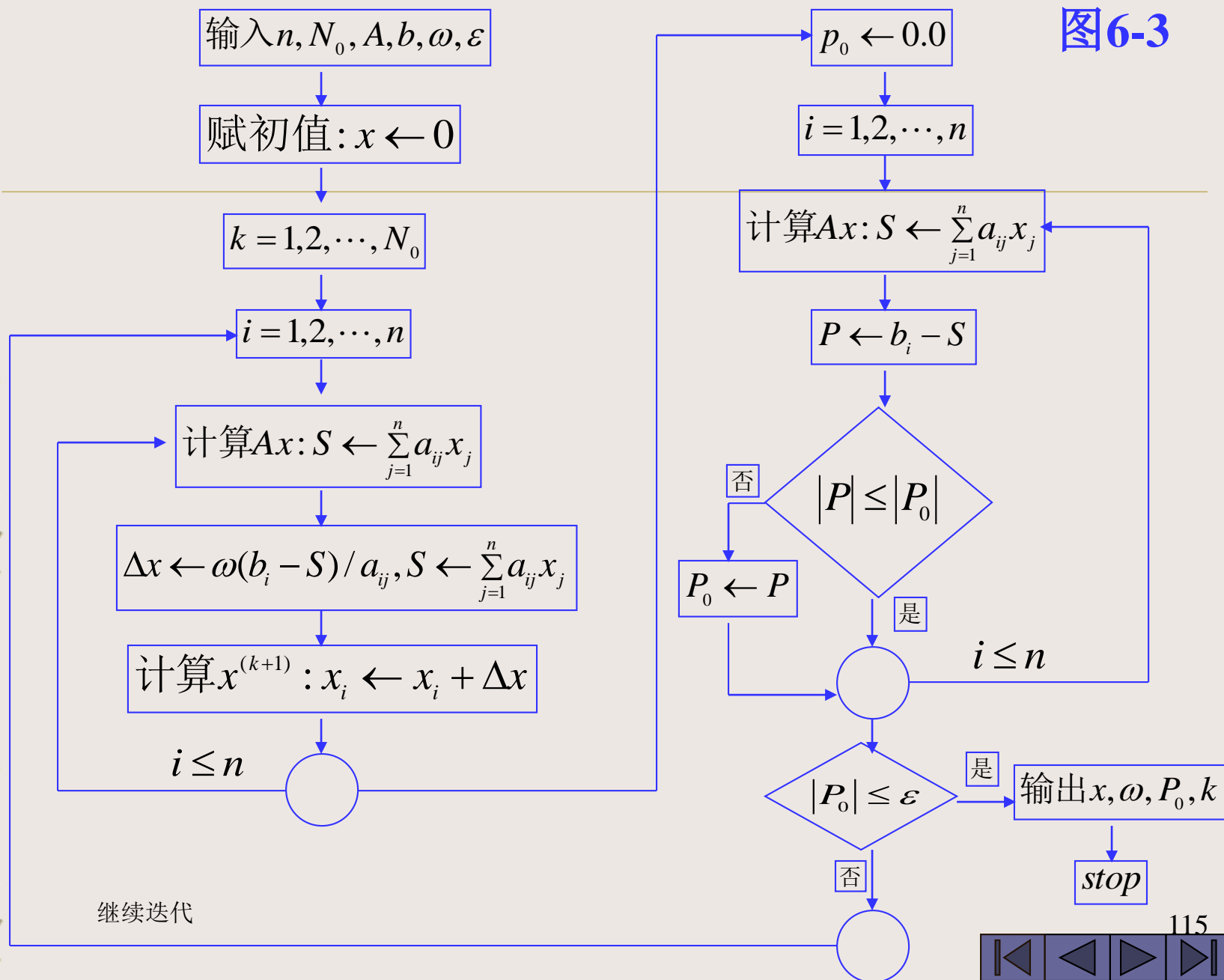
解 $Ax=b$ 的Jacobi迭代法, G-S迭代法, 都是一阶定常迭代法。下面讨论一阶定常迭代法的收敛条件。

定理8 如果 $\|B\| < 1$, 则 $I \pm B$ 为非奇异阵, 且有估计:

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

($\|\bullet\|$ 是矩阵的算子范数)

图6-3



证明 反证法，如果 $\det(I - B) = 0$ ，则齐次方程组

$$(I - B)x = 0$$

有非零解 x_0 ，即 $Bx_0 = x_0$ 且 $x_0 \neq 0$ ，于是

$$\frac{\|Bx_0\|}{\|x_0\|} = 1$$

故有 $\|B\| \geq 1$ ，与假设矛盾。

由 $(I - B) \bullet (I - B)^{-1} = I$ ，于是

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

$$\|(I - B)^{-1}\| \leq \|I\| + \|B\| \|(I - B)^{-1}\|$$

所以

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

证毕。

定理9（迭代法收敛的充分条件）

设方程组 $x = Bx + f$ ，且 $\{x^{(k)}\}$ 为迭代

$$x^{(k+1)} = B x^{(k)} + f$$

（ $x^{(0)}$ 为任意选取的初始向量）产生的向量序列。如果迭代矩阵 B 有某一种范数

$$\|B\| = q < 1,$$

则

(1) $\{x^{(k)}\}$ 收敛于方程组 $(I - B)x = f$ 唯一解 x^*

$$(2) \|x^* - x^{(k)}\| \leq \frac{1}{1-q} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$$

(3) 误差估计

$$\|x^* - x^{(k)}\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|$$

证明

由定理8可知方程组 $(I-B)x=f$ 有唯一解 x^* ,
即

$$x^* = B x^* + f \quad (8.12)$$

引进误差向量: $e^{(k)} = x^{(k)} - x^*$, 于是由
迭代公式减去 (8.12) , 即得误差 $e^{(k)}$ 的递
推公式:

$$e^{(k+1)} = B e^{(k)}, (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (8.13)$$

反复利用递推公式 (8.13)，即得

$$e^{(k)} = B e^{(k-1)} = \dots = B^k e^{(0)} \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (8.14)$$

于是

$$\|e^{(k)}\| = \|B^k e^{(0)}\| \leq \|B\|^k \|e^{(0)}\| = q^k \|e^{(0)}\| \rightarrow 0$$

(当 $k \rightarrow \infty$ 时)， $(e^{(0)} = x^{(0)} - x^*)$

证 (2) 显然，由迭代公式及 (8.13) 有

$$a. \quad \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \|B\| \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

$$b. \quad \|e^{(k+1)}\| \leq \|B\| \|e^{(k)}\|$$

则

$$\begin{aligned} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| &= \|x^* - x^{(k)} - (x^* - x^{(k+1)})\| \\ &\geq \|x^* - x^{(k)}\| - \|x^* - x^{(k+1)}\| \\ &\geq (1-q) \|x^* - x^{(k)}\| \\ \|x^* - x^{(k)}\| &\leq \frac{1}{(1-q)} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \\ &\leq \frac{q}{(1-q)} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \end{aligned}$$

反复利用a.情况，即得 (3)

例12 考察用Jacobi方法解例9中方程组的收敛性。

解

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 10 & -1 & 2 & 0 \\ -1 & 11 & -1 & 3 \\ 2 & -1 & 10 & -1 \\ 0 & 3 & -1 & 8 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 10 & & & \\ & 11 & & \\ & & 10 & \\ & & & 8 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & & & \\ 1 & 0 & & \\ -2 & 1 & 0 & \\ 0 & -3 & 1 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 & -2 & 0 \\ & 0 & 1 & -3 \\ & & 0 & 1 \\ & & & 0 \end{bmatrix} \\ &= D - L - U \end{aligned}$$

Jacobi迭代阵为:

$$J = D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{10} & -\frac{2}{10} & 0 \\ \frac{1}{11} & 0 & \frac{1}{11} & -\frac{3}{11} \\ -\frac{2}{10} & \frac{1}{10} & 0 & \frac{1}{10} \\ 0 & -\frac{3}{8} & \frac{1}{8} & 0 \end{bmatrix}$$

计算 $\|J\|_{\infty} = \max\left\{\frac{3}{10}, \frac{5}{11}, \frac{4}{10}, \frac{4}{8}\right\} = \frac{1}{2} < 1$, 故解

此方程组的Jacobi 方法收敛。

定义 （严格对角占优阵） 设 $A = (a_{ij})_{n \times n}$, 如果满足条件

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

即A的每一行对角元素的绝对值都严格大于同行其他元素绝对值之和，则称A为**严格对角占优阵**。

定理10 如果 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 为严格对角占优阵，则A为非奇异矩阵。

证明

用反证法。若 $\det(A) = 0$ 则 $Au = 0$ 有非零解，

记为 $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T$

且记 $|u_t| = \max_{1 \leq i \leq n} |u_i| \neq 0$

于是由 $Au = 0$ 的第 t 个方程

$$\sum_{j=1}^n a_{tj} u_j = 0$$

得到

$$|a_{tt}| |u_t| = \left| \sum_{j \neq t} a_{tj} u_j \right| \leq \sum_{j \neq t} |a_{tj}| |u_j| \leq |u_t| \sum_{j \neq t} |a_{tj}|$$

即

$$|a_{tt}| \leq \sum_{j \neq t}^n |a_{tj}|$$

与假设矛盾。

定理11 设 $Ax = b$, $A \in R^{n \times n}$, 如果 A 为严格对角占优阵, 则解 $Ax = b$ 的 Jacobi 方法, G-S 迭代法都收敛, 且 G-S 迭代法收敛比 Jacobi 方法为快。

证明 (1) 首先证明解 $Ax = b$ 的 Jacobi 方法收敛。由假设有

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1 (i = 1, 2, \dots, n) \quad (8.15)$$

解 $Ax = b$ 的 Jacobi 方法迭代矩阵为:

$$J = D^{-1}(L + U)$$

且由 (8.15) 有

$$\|J\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1$$

故由 定理9 知解 $Ax = b$ 的Jacobi方法收敛。

(2) 由设 $Ax = b$ 有唯一解记为 x^* ，即

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^* = b_i, (i = 1, 2, \dots, n)$$

其中 $x^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)$. 或

$$x_i^* = \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^*), (j = 1, 2, \dots, n) \quad (8.16)$$

G—S迭代公式：

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)}) \quad (8.17)$$

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

引进误差向量:

$$\mathcal{E}^{(k)} = x^{(k)} - x^*$$

且记

$$x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})^T$$

$$\mathcal{E}^{(k)} = (\mathcal{E}_1^{(k)}, \mathcal{E}_2^{(k)}, \cdots, \mathcal{E}_n^{(k)})^T$$

由 (8.17) 减去 (8.16) 即得G—S迭代近似解的误差递推公式:

$$\begin{cases} \varepsilon_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \varepsilon_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \varepsilon_j^{(k)} \\ (i = 1, 2, \dots, n) \end{cases} \quad (8.18)$$

记

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right|, \quad \beta_i = \sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right|$$

$$(i = 1, 2, \dots, n; \alpha_1 = \beta_n = 0)$$

由设有

$$\mu \equiv \|J\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1$$

即
$$\mu = \max_{1 \leq i \leq n} (\alpha_i + \beta_i) < 1$$

由 (8.18) 得

$$\begin{aligned} \left| \varepsilon_i^{(k+1)} \right| &\leq \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \left| \varepsilon_j^{(k+1)} \right| + \sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \left| \varepsilon_j^{(k)} \right| \\ &\leq \alpha_i \left\| \varepsilon^{(k+1)} \right\|_{\infty} + \beta_i \left\| \varepsilon^{(k)} \right\|_{\infty}, (i = 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (8.19)$$

记

$$\left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{(k)} \right\|_{\infty} = \max_i \left| \varepsilon_i^{(k)} \right| \equiv \left| \varepsilon_t \right|$$

在 (8.18) 中取 $i = t$, 则有

$$\left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)} \right\|_{\infty} \leq \alpha_t \left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)} \right\|_{\infty} + \beta_t \left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{(k)} \right\|_{\infty}$$

即

$$\left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)} \right\|_{\infty} \leq \frac{\beta_t}{1 - \alpha_t} \left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{(k)} \right\|_{\infty} \leq r \left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{(k)} \right\|_{\infty} \quad (8.20)$$

其中

$$r = \max_{1 \leq i \leq n} \frac{\beta_i}{1 - \alpha_i}$$

且由于 $\alpha_i + \beta_i \leq \mu < 1$ ，所以 $0 < r < 1$ 。

利用递推关系 (8.20)，则有

$$\|\varepsilon^{(k)}\|_{\infty} \leq r^k \|\varepsilon^{(0)}\|_{\infty} \rightarrow 0, \text{ 当 } k \rightarrow \infty \text{ 时}$$

故解 $Ax = b$ 的G—S迭代法收敛。

(3) 说明 $r \leq \mu < 1$

事实上, 对每一个 i 有

$$\begin{aligned} (\alpha_i + \beta_i) - \frac{\beta_i}{1 - \alpha_i} &= \frac{\alpha_i(1 - (\alpha_i + \beta_i))}{1 - \alpha_i} \\ &\geq \frac{\alpha_i(1 - \mu)}{1 - \alpha_i} \geq 0 \end{aligned} \quad (8.21)$$

所以, $r \leq \mu < 1$ 成立。(8.21) 说明解方程组 $Ax = b$ (其中设 A 为严格对角占优阵) G—S 方法收敛比 Jacobi 方法为快。

定理12 (1) 设 $Ax = b$ 其中 A 为对称正定阵;

(2) $0 < \omega < 2$;

则解 $Ax = b$ 的SOR方法收敛。

例13 设有方程组

$$\begin{cases} 6x_1 + x_2 - 3x_3 = 17.5 \\ x_1 + 8x_2 + 3x_3 = 10 \\ -x_1 + 4x_2 + 12x_3 = -12 \end{cases}$$

试考察用Jacobi及G—S迭代法解此方程组的收敛性。

解 由于

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 1 & -3 \\ 1 & 8 & 3 \\ -1 & 4 & 12 \end{bmatrix}$$

为严格对角占优阵，于是由定理11可知解 $Ax = b$ 的Jacobi迭代、G—S迭代均收敛。

§ 9 解非线性方程组的迭代法

在科学技术领域里常常提出求解非线性方程组问题，例如，用非线性函数拟合实验数据问题，非线性网络问题，用差分法求解非线性微分方程问题等。

设有非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (9.1)$$

其中, $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) (i=1, 2, \dots, n)$ 为实变量的非线性函数, 它是给定的多元函数。一般表示为:

$$f_i : R^n \rightarrow R$$

(9.1) 可用向量形式表示, 引进记号

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in R^n$$

于是 (9.1) 可写为:

$$F(x) = 0$$

其中 $F: R^n \rightarrow R$

问题是寻求 x^* 使 $F(x^*) = 0$, 本节介绍求解非线性方程组 $F(x) = 0$ 的数值方法。

例14 设有非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 4 = 0 \\ f_2(x_1, x_2) = e^{x_1} + x_2 - 1.5 = 0 \end{cases}$$

从几何上看其解就是圆 $x_1^2 + x_2^2 = 4$ 与曲线

$x_2 = 1.5 - e^{x_1}$ 的交点（[图6-4](#)）。

从[图6-4](#)可见方程组有两个解： $\begin{pmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{pmatrix}$ 及 $\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix}$ 。

然而，对于一般线性方程组 [\(9.1\)](#)，可能没有解，或可能有有限个解，或可能有无限个解。

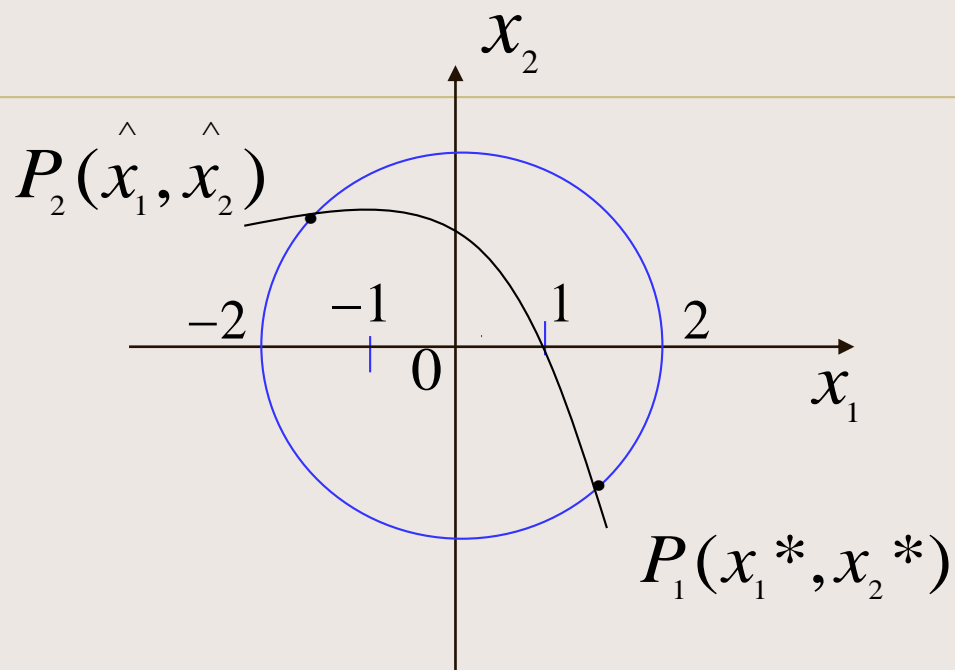


图6-4

9.1 解非线性方程组的迭代法

解非线性方程组的迭代法和解非线性方程式一样，首先需要将 $F(x) = 0$ 转化为等价的方程组

$$x_i = g_i(x_1, x_2, \dots, x_n). (i = 1, 2, \dots, n) \quad (9.2)$$

或者简记为

$$x = g(x)$$

其中

$$g_i : R^n \rightarrow R, \quad g : R^n \rightarrow R^n$$

$$g(x) = \begin{bmatrix} g_1(x) \\ g_2(x) \\ \vdots \\ g_n(x) \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in R^n$$

迭代法：首先从某个初始向量 $x^{(0)}$ 开始，按下述逐次代入方法构造一向量序列 $\{x^{(k)}\}$ ：

$$\begin{cases} x_i^{(k+1)} = g_i(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \\ (i = 1, 2, \dots, n) \end{cases} \quad (9.3)$$

其中： $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$

或写为向量形式：

$$x^{(k+1)} = g(x^{(k)}), (k = 0, 1, 2, \dots)$$

如果 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} \equiv x^*$ (存在), 称 $\{x^{(k)}\}$ 为**收敛**。
且当 $g_i(x)$ 为连续函数时, 由(9.3)两边取极限, 即得

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

说明 x^* 为方程组(9.2)的解。 x^* 又称为 $x = g(x)$ 的**不动点**。

例15 用迭代法求解

$$\begin{cases} x_1 = -\sqrt{4 - x_2^2} \\ x_2 = 1 - e^{x_1} \end{cases}$$

解 迭代公式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -\sqrt{4 - (x_2^{(k)})^2} \\ x_2^{(k+1)} = 1 - e^{x_1^{(k)}} \end{cases}$$

取初始向量 $x^{(0)} = (-1.8, 0.8)^T$

计算结果如表6-4

表6-4

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$
0	-1.8	0.8
1	-1.833030	0.834701
2	-1.817419	0.840072
3	-1.815015	0.837567
4	-1.816172	0.837165
5	-1.816358	0.837353
6	-1.816271	0.837383
7	-1.816257	0.837369
8	-1.8162635	0.8373669

且
$$\begin{cases} f_1(x_1^{(8)}, x_2^{(8)}) \approx -3.909 \times 10^{-6} \\ f_2(x_1^{(8)}, x_2^{(8)}) \approx -1.01 \times 10^{-6} \end{cases}$$

$$\|x^{(8)} - x^{(7)}\|_{\infty} \approx 1.05 \times 10^{-5}$$

计算表明，由迭代法构造 $\{x^{(k)}\}$ 收敛到方程组

$F(x) = 0$ 的一个解

$$x^* = \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix}$$

定理13 设有非线性方程组 $x = g(x)$

- (1) 设 x^* 是方程 $x = g(x)$ 解;
- (2) 设 $g_i(x)$ 于 x^* 充分小的邻域连续可微;
- (3) 且满足条件 $\|G(x^*)\|_\infty = r < 1$, 其中

$$G(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots \\ \frac{\partial g_n(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial g_n(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

则当初始向量 $x^{(0)}$ 选择充分接近 x^* 时, 迭代过程 $x^{(k+1)} = g(x^{(k)})$ 产生的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 。

解线性方程组的迭代过程，初始向量选取不好，迭代过程可能不收敛。由**定理13**可知，在 $g(x)$ 满足一定条件下，迭代过程具有局部收敛性。

类似于解线性方程组的G-S迭代，可引进解线性方程组的G-S型迭代：

$$\begin{cases} x_i^{(k+1)} = g_i(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}, x_i^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \\ (i = 1, 2, \dots, n), (k = 0, 1, 2, \dots) \\ \text{其中 } x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T \end{cases}$$

9.2 解方程组的牛顿法

设有非线性方程组

$$F(x) = 0$$

其中

$$F(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x))^T$$

由 $f_i(x)$ 偏导数作成的矩阵记为 $J(x)$ 或 $F'(x)$, 称为 $F(x)$ 的Jacobi矩阵:

$$J(\mathbf{x}) \equiv F'(\mathbf{x}) \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (9.5)$$

设 \mathbf{x}^* 为 $F(\mathbf{x}) = 0$ 的解, 且 $\mathbf{x}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$

为 \mathbf{x}^* 近似解, 现利用多元函数 $f_i(\mathbf{x})$ 在点 $\mathbf{x}^{(k)}$ 点的泰勒公式有:

$$\begin{aligned}
 f_i(x) &= f_i(x^{(k)}) + (x_1 - x_1^{(k)}) \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_1} \\
 &\quad + \dots + (x_n - x_n^{(k)}) \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_n} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^n (x_j - x_j^{(k)})(x_l - x_l^{(k)}) \frac{\partial^2 f_i(C_i)}{\partial x_j \partial x_l} \\
 &\equiv P_i(x) + R \\
 &\quad (i = 1, 2, \dots, n)
 \end{aligned}
 \tag{9.6}$$

其中 C_i 在 $x^{(k)}$ 与 x 的所连的线段内。

如果用 (9.6) 中线性函数 $P_i(x)$ 近似代替 $f_i(x)$ ，并将线性方程组

$$\begin{aligned} P_i(x) &\equiv f_i(x^{(k)}) + (x_1 - x_1^{(k)}) \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_1} + \dots + (x_n - x_n^{(k)}) \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_n} \\ &= 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (9.7)$$

的解作为 x^* 的第 $k+1$ 次近似解记为 $x^{(k+1)}$ 。

将 (9.7) 写成矩阵形式，即

$$F(x^{(k)}) + J(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0$$

如果 $J(x^{(k)})$ 为非奇矩阵, 则得到牛顿迭代公式

$$\begin{cases} x^{(0)} (\text{初始向量}) \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} - [J(x^{(k)})]^{-1} F(x^{(k)}) \\ (k = 0, 1, 2, \dots) \end{cases} \quad (9.8)$$

求解非线性方程组 $F(x) = 0$ 的牛顿方法或为

$$\begin{cases} x^{(0)} \\ J(x^{(k)}) \Delta x^{(k)} = -F(x^{(k)}) \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)} \end{cases} \quad (9.9)$$

由牛顿方法计算公式 (9.9) 可知，每计算一步 $x^{(k)} \rightarrow x^{(k+1)}$ ，需要

(1) 计算矩阵 $J(x^{(k)})$ 及 $F(x^{(k)})$;

(2) 求解一个线性方程组:

$$J(x^{(k)})\Delta x^{(k)} = -F(x^{(k)})$$

例17 用牛顿法求解非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = x_2 - x_1^2 = 0 \\ f_2(x_1, x_2) = x_1 - x_1x_2 + 1 = 0 \end{cases}$$

解

取初始向量 $x^{(0)} = (1.5, 1.5)^T$

计算Jacobi矩阵

$$J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2x_1 & 1 \\ 1-x_2 & -x_1 \end{bmatrix}$$

(1) 计算 $J(x^{(0)})$, $F(x^{(0)})$

$$J(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} -3 & 1 \\ -0.5 & -1.5 \end{bmatrix}, F(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} -0.75 \\ 0.25 \end{bmatrix}$$

求解线性方程组：

$$J(x^{(0)})\Delta x^{(0)} = -F(x^{(0)})$$

得到 $x^{(1)} = x^{(0)} + \Delta x^{(0)} = (1.325, 1.725)^T$

(2) 计算 $J(x^{(1)})$, $F(x^{(1)})$

$$J(x^{(1)}) = \begin{bmatrix} -2.65 & 1 \\ 0.725 & -1.325 \end{bmatrix}$$

$$F(x^{(1)}) = \begin{bmatrix} -0.030625 \\ 0.039375 \end{bmatrix}$$

求解线性方程组： $J(x^{(1)})\Delta x^{(1)} = -F(x^{(1)})$

得到

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \Delta x^{(1)} = (1.324716, 1.754873)^T$$

计算

$$F(x^{(2)}) = \begin{bmatrix} f_1(x^{(2)}) \\ f_2(x^{(2)}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -8. \times 10^{-8} \\ 8.45 \times 10^{-8} \end{bmatrix}$$

当 $f_i(x)(i = 1, 2, \dots, n)$ 具有连续二阶导数时, $J(x^*)$ 为非奇异矩阵, x^* 为 $F(x) = 0$ 的解, 则当初始向量

$x^{(0)}$ 选取充分接近 x^* 时, 牛顿法产生的向量序列

$\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* , 且为二阶收敛。

牛顿法框图（图6-5）：

用牛顿法求解非线性方程组 $F(x)=0$ ，设 $x^{(0)}$ 为选定的 x^* 的初始近似解。存放在数组 $X(n)$ 内， $\Delta x^{(k)}$ 存放在 $y(n)$ 内， $J(x^{(k)})$ 存放在数组 $A(n,n)$ 内， $F(x^{(k)})$ 存放在 $F(n)$ 内。 N_0 表示最大迭代次数，且用

$$S = \sum_{i=1}^n f_i^2(x) < \varepsilon$$

控制迭代。

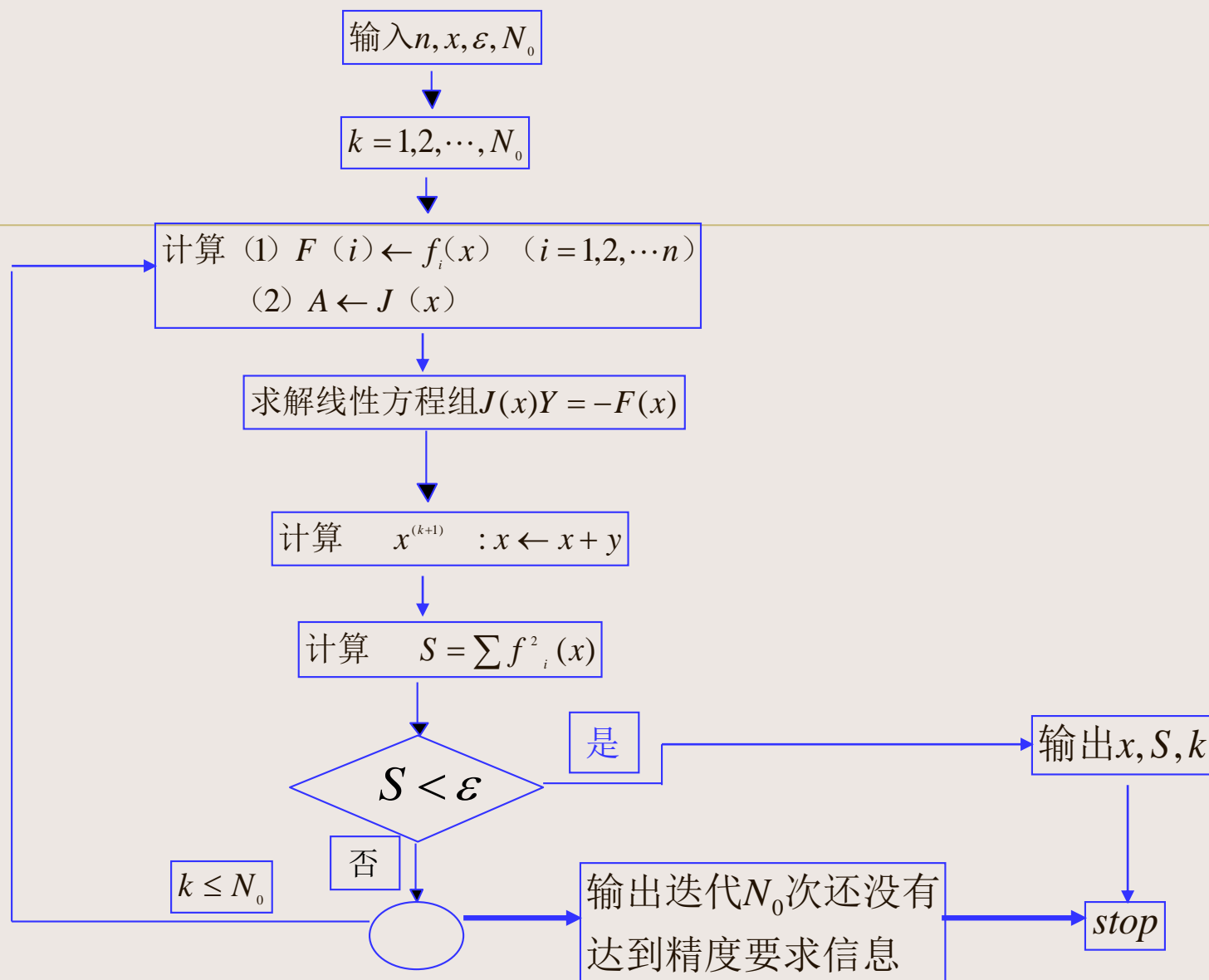


图6-5

§ 10 病态方程和迭代改善法

10.1 病态方程组

考虑线性方程组

$$Ax = b$$

(10.1)

假设 $A \in R^{n \times n}$ 为非奇矩阵, x 为方程组的解。在应用问题归结为求解程组 $Ax = b$ 时, 其系数矩阵 A 和 b 可能有某些观测误差, 或者 A , b 是计算的结果, 从而包含有舍入误差。下面研究数据 A 或 b 的误差对方程组解的影响。

例18 设有方程组

$$\begin{cases} 5x_1 + 7x_2 = 0.7 \\ 7x_1 + 10x_2 = 1 \end{cases}$$

其解 $x = (0., 0.1)^T$ ，现考虑常数项有微小的误差，即

$$b \rightarrow b + \delta b = (0.69, 1.01)^T$$

其中 $\delta b = (-0.01, 0.01)^T$ ，得到一个扰动方程组

$$\begin{cases} 5\hat{x}_1 + 7\hat{x}_2 = 0.69 \\ 7\hat{x}_1 + 10\hat{x}_2 = -1.01 \end{cases}$$

其解为

$$\hat{x} = (0.17, 0.22)^T$$

此例说明，方程组常数项分量只有微小变化（1/100），而方程组的解有较大的变化。也就是说这个方程组的解对于问题的数据**b**很灵敏。这样的方程组就是**病态方程组**。

下面找出用来刻画方程组病态性质的量，为此，考查**A**（或**b**）微小误差对解的影响。

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

$$A \hat{x} = b + \delta b$$

的解与 x 有差别记为 $\hat{x} - x = \delta x$, 即有

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

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

于是

$$\|\delta x\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta b\| \quad (10.2)$$

另一方面, 由 $Ax = b \neq 0$, 则有 $\|b\| \leq \|A\| \|x\|$
或

$$\frac{1}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|} \quad (10.3)$$

由(10.2)式及(10.3)即得

定理14 (b优动对解的影响)

(1) 设 $Ax = b \neq 0$, x 为精确解, A 为非奇异矩阵;

(2) 且设 $A(x + \delta x) = b + \delta b$, 则有

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \|A^{-1}\| \|A\| \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \quad (10.4)$$

(10.4) 说明, 当 b 有一相对误差时, 引起 $Ax = b$ 解的变化。引起解的相对误差可能是常数项相对误差的 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 倍。

A扰动对解的影响:

设 A 有微小误差 (扰动) δA , 即 $A \rightarrow A + \delta A$, b 是精确的, 记 $(A + \delta A)\hat{x} = b$ 的解为 $x + \delta x$, 即

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

由于 $Ax = b$, 上式即

$$(A + \delta A)\delta x = -(\delta A)x \quad (10.5)$$

设 $\|A^{-1}\| \|\delta A\| < 1$ ，则由定理8， $A + \delta A = A(I + A^{-1}\delta A)$ 为非奇异矩阵且有

$$\|(A + \delta A)^{-1}\| \leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\| \|\delta A\|} \quad (10.6)$$

由(10.5)有

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

利用 (10.6)，则：

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

(10.7)

定理15 (A扰动对解的影响)

- (1) 设 $Ax = b$, 其中 A 为非奇异矩阵, x 为精确解
- (2) 设 $(A + \delta A)(x + \delta x) = b$, 且设

$$\|\delta A\| < \frac{1}{\|A^{-1}\|}$$

则 A 的微小误差引起解的相对误差有估计式
(10.7) 。

(10.7) 说明, 如果 $\|A^{-1}\| \|A\|$ 数愈大, A 的微小相对误差可能引起解的相对误差就愈大, 因而 $\|A^{-1}\| \|A\|$ 数的大小刻划了方程组的解对问题数据 A (或 b) 的灵敏程度。

定义1 (矩阵的条件数) 设 A 为非奇异矩阵, 称

$$Cond(A)_v = \|A^{-1}\|_v \|A\|_v$$

为矩阵 A 的条件数 (其中 v 取 ∞ 或 1 或 2)。

定义2 (病态方程组) 设 $Ax = b$, 其中 A 为非奇异矩阵。如果 $Cond(A) \gg 1$ (相对大的条件数) 称 $Ax = b$ 为病态方程组, 如果 $Cond(A)$ 相对的小, 称 $Ax = b$ 为良态方程组。 A 的条件数愈大, 方程组病态愈严重。

注：方程组的病态性质，是方程组本身的特性。对于病态的方程组用一般的计算方法不容易求得较精确的解。且方程组病态愈严重，求解愈困难。

显然，对任何非奇异矩阵 \mathbf{A} ，都有

$$\begin{aligned} \text{Cond}(\mathbf{A})_v &= \|\mathbf{A}^{-1}\|_v \|\mathbf{A}\|_v \\ &\geq \|\mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}\|_v = \|\mathbf{I}\|_v = 1 \end{aligned}$$

例19

设 $\begin{bmatrix} 3 & 1.001 \\ 6 & 1.997 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.999 \\ 4.003 \end{bmatrix}$, 试计算 $Cond(A)_\infty$

解

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1.001 \\ 6 & 1.997 \end{bmatrix}$$

$$A^{-1} = \frac{-1}{0.015} \begin{bmatrix} 1.997 & -1.001 \\ -6 & 3 \end{bmatrix}$$

$$\|A\|_\infty = 7.997, \|A^{-1}\|_\infty = 600$$

$$Cond(A)_\infty = 4798.2$$

所以方程组为病态方程组。

10.2 迭代改善法

设有方程组 $Ax = b$, 其中 $A \in R^{n \times n}$ 为非奇异阵, 且设方程组不过分病态, 又设用高斯消去法 (或部分选主元消去法) 求得计算解 x_1 (精度不高), 如果希望获得方程组高精度的解, 一般可采用下述的迭代改善法, 用来改善 x_1 精度。

设 x_1 为用高斯法求得的计算解, 计算剩余向量

$$r_1 = b - Ax_1 \quad (10.8)$$

求解

$$Ad_1 = r_1 \quad (10.9)$$

且计算

$$x_2 = x_1 + d_1 \quad (10.10)$$

显然，如果计算 r_1 及 d_1 没有误差，则 x_2 是方程组 $Ax = b$ 的精确解。事实上

$$\begin{aligned} Ax_2 &= A(x_1 + d_1) = Ax_1 + Ad_1 \\ &= Ax_1 + r_1 = b \end{aligned}$$

但实际计算时，由于有舍入误差，因此得到的 x_2 是一个近似解（要求用双精度计算 r ）。

对 x_2 重复上述过程 (10.8) - (10.10)，就求得 r_2, d_2, x_2 ，即可求得方程组的一个近似解序列 $\{x_k\}$ 。
当 $Ax = b$ 不是过分病态时，通常 $\{x_k\}$ 很快收敛到方程组的解 x^* 。

例20 用迭代改善法解

$$\begin{bmatrix} 7.000 & 6.990 \\ 4.000 & 4.000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 34.97 \\ 20.00 \end{bmatrix}$$

解 方程组精确解 $x^* = (2, 3)^T$ ，且有

$$A = \begin{bmatrix} 7.000 & 6.990 \\ 4.000 & 4.000 \end{bmatrix}, A^{-1} = \begin{bmatrix} 100.05 & -174.84 \\ -100.05 & -175.09 \end{bmatrix}$$

于是

$$\text{Cond}(A)_{\infty} = \|A\|_{\infty} \|A^{-1}\|_{\infty} \approx 13.99 \times 275.14 \approx 3849$$

因此，方程组为病态方程组。

(1) 用高斯消去法解 $Ax = b$ (用具有舍入的4位浮点数进行计算) 且实现 $A \approx LU$ 分解, 即

$$x_1 = (1.667, 3.333)^T$$

$$A \approx \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0.5714 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 7.000 & 6.9960 \\ 0 & 0.006 \end{bmatrix} \\ = LU$$

(2) 计算 $r_1 = b - Ax_1 = (0.00333, 0)^T$

求解 $Ad_1 = r_1$ 或 $LUd_1 = r_1$

$$\begin{cases} d_1 = (0.3214, -0.3172)^T \\ x_2 = x_1 + d_1 = (-0.02784, -0.01600)^T \end{cases}$$

(3) 计算 $r_2 = b - Ax_2 = (-0.02784, -0.01600)^T$.

$$\begin{cases} LUd_2 = r_2 \\ d_2 = (0.1600, -0.02000)^T \\ x_3 = x_2 + d_2 = (2.004, 2.996)^T \end{cases}$$

(4) 计算 $r_3 = b - Ax_3 = (-0.00004, 0)^T$.

求解

$$\begin{cases} LUd_3 = r_3 \\ d_3 = (-0.00381, 0.00381)^T \\ x_4 = x_3 + d_3 = (2.000, 3.000)^T \quad (\text{较精确}) \end{cases}$$

迭代改善法： 设 $Ax = b$, A 为非奇异阵且方程组不是过分病态。用高斯消去法或列主元消去法计算解 x 且实现分解 $A \approx LU$ (或 $PA \approx LU$)。对于 $k = 1, 2, \dots, N$ 作如下计算：

(1) 计算 $r_k = b - Ax_k$ (双精度);

(2) 求解 $LUd_k = r_k$ (解两个三角形方程组);

(3) 计算 $x_{k+1} = x_k + d_k$, 且可以用

$$\frac{\|d_k\|_{\infty}}{\|x_k\|_{\infty}} < 10^{-l}$$

控制迭代式。

小 结

本章介绍了计算机上解方程组（线性方程组和非线性方程组）数值方法。

在解线性方程组的高斯消去法中，引进了选主元的技巧，从而导出了解线性方程组的完全主元消去法和列主元消去法。选主元素消去法是数值稳定的方法，且一般具有较高精度，因此，选主元素消去法是目前解中、小型稠密矩阵方程组（计算机内存能够存放 A 的全部元素）或带状方程组可靠而有效的方法。

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。平方根法在计算机上被广泛用来解对称正定矩阵方程组。

对于求解大型稀疏矩阵方程组，由于直接法受到计算机内存容量的限制，这时采用迭代法是合适的。比较有效的迭代法是G-S迭代，SOR迭代法，且SOR迭代法应用广泛。在使用SOR迭代法解线性方程组时，应选取较佳的松弛因子，使得收敛得到加速。

本章还介绍了向量，矩阵的范数，矩阵的条件数和病态方程组的概念。这些都是数值计算中一些基本概念。对于不是过分病态的方程组可用迭代改善法求解，一般可获得较高精度的解。

牛顿法是解非线性方程组的一个重要方法，它具有二阶收敛速度一般要求初始向量要选取在解的邻近，如果初值向量选取不好，牛顿法可能不收敛。

习题六

1. 分别用高斯消去法，列主元素消去法解下述方程组。

$$(1) \begin{bmatrix} -0.002 & 4.000 & 4.000 \\ -2.000 & 2.906 & -5.387 \\ 3.000 & -4.0312 & -3.112 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.998 \\ -4.481 \\ -4.143 \end{bmatrix}$$

(用具有舍入的4位浮点数进行运算) 并比较计算结果;

$$(2) \begin{bmatrix} 3.3830 & 1592.0 & -10.333 \\ 2.2220 & 16.710 & 9.6120 \\ 1.5611 & 5.1791 & 1.6852 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15913 \\ 28.544 \\ 8.4254 \end{bmatrix}$$

(用具有舍入的5位浮点数进行运算)

2. 设A为对称矩阵，且 $a_{11} \neq 0$ ，经高斯消去法一步A约化为

$$A \rightarrow A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11} & A_{11} \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}$$

试证明 (1) A_2 亦是对称矩阵

(2) 若A为对称正定，则 A_2 亦对称正定。

3. 设 $Ux = d$ 其中 U 为上三角阵或下三角阵，试计算解 $Ux = d$ 乘除法次数

4. 用平方根法解方程组

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 2 & 2 & -3 \\ -2 & -3 & 14 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 5 \\ 4 \end{bmatrix}$$

5. 设 A 为对称正定阵，求证 A 对角元素 $a_{ii} > 0, (i = 1, 2, \dots, n)$

6. 划出用平方根法解对称正定矩阵方程组的框图。

7. 用追赶法解方程组。

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & 4 & -1 & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 100 \\ 200 \\ 200 \\ 200 \\ 100 \end{bmatrix}$$

8.划出用追赶法解三对角阵方程组的框图.

9.设

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ -2 & 4 \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

试计算 $\|x\|_1, \|x\|_\infty, \|x\|_2, \|Ax\|_2, \|A\|_\infty, \|A\|_1$

10.求证

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_1 \leq n \|x\|_\infty$$

11.证明不等式

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

对任意向量 $x, y \in \mathbf{R}^n$

12.证明单位矩阵的算子范数 $\|I\| = 1$.

13.设有方程组

$$\begin{bmatrix} -8 & 1 & 1 \\ 1 & -5 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 16 \\ 7 \end{bmatrix}$$

(a)用*Jacobi*方法迭代3次;

(b)用*G-S*迭代法迭代3次, 并检查两个方法的收敛性

(真解为 $x^* = (-1, -4, -3)^T$, 取 $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$).

14.划出用*G-S*迭代法解 $Ax = b$ 的框图。

15.用*SOR*方法 (分别取 $\omega = 1.0$, $\omega = 0.9$, $\omega = 1.1$)
解方程组

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 5 \\ 0 \\ 6 \\ -2 \\ 6 \end{bmatrix}$$

(要求当 $\|r^{(k)}\|_{\infty} < 10^{-5}$ 时迭代终止)。

16. 求解非线性方程组 (要求 $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_{\infty} < 10^{-2}$)

$$\begin{cases} x_1^2 - x_2^2 - x_1 = 0 \\ x_1^2 - x_2^2 - x_2 = 0 \end{cases}$$

17.用牛顿法解非线性方程组

$$(a) \begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3 = 0 \\ 4x_1 + x_2 - 5 = 0 \end{cases}$$

$$(\text{取 } x^{(0)} = (0,0)^T, \text{要求 } \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_{\infty} < 10^{-3})$$

$$(b) \begin{cases} x_1 - \frac{1}{2} \cos x_2 = 0 \\ x_2 - \frac{1}{2} \sin x_1 = 0 \end{cases}$$

18.计算矩阵的条件数 $Cond(A)_{\infty}$

$$(a) A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1.001 & 2.001 \end{bmatrix}, (b) A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

19. 设 A 为正交矩阵, 试证明 $Cond(A)_2 = 1$

20. 用迭代改善法解

$$\begin{bmatrix} 1.0303 & 0.99030 \\ 0.99030 & 0.95285 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.4944 \\ 2.3988 \end{bmatrix}$$