数值分析与计算软件

第 4 课

刘帆

南京大学工程管理学院

2020 年 3 月 9 日

0. 引言

- 本课讨论 n 元线性方程组的直接解法。

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

0. 引言

- 本课讨论 n 元线性方程组的直接解法。

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

- 方程组 (1) 的矩阵形式为 $Ax = b$。

- 本课讨论 n 元线性方程组的直接解法。

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

- 方程组 (1) 的矩阵形式为 $Ax = b$。
- 方程组有解的充要条件是系数矩阵与其增广矩阵有相等的秩。

0. 引言

- 所谓直接法又称精确法，是指在假设没有舍入误差的条件下，经过有限次算术运算就能求出线性方程组的精确解的方法。

0. 引言

- 所谓直接法又称精确法，是指在假设没有舍入误差的条件下，经过有限次算术运算就能求出线性方程组的精确解的方法。
- 但由于实际计算中舍入误差的存在，用直接解法一般也只能求出方程组的近似解。

0. 引言

- 所谓直接法又称精确法，是指在假设没有舍入误差的条件下，经过有限次算术运算就能求出线性方程组的精确解的方法。
- 但由于实际计算中舍入误差的存在，用直接解法一般也只能求出方程组的近似解。
- 消去法 $\rightarrow$ 主元消去法

1.1 Gauss 消去法

- 基本思想：

- 基本思想:
- 高斯消去法一般由“消元过程”和“回代过程”两部分组成。

1.1 Gauss 消去法

- 基本思想:
- 高斯消去法一般由“消元过程”和“回代过程”两部分组成。
- “消元过程”是按确定的计算过程对方程组的增广矩阵进行初等行变换，将原方程组化为与之等价的上三角方程组。

1.1 Gauss 消去法

- 基本思想：
- 高斯消去法一般由“消元过程”和“回代过程”两部分组成。
- “消元过程”是按确定的计算过程对方程组的增广矩阵进行初等行变换，将原方程组化为与之等价的上三角方程组。
- “回代过程”就是求解上三角方程组的过程。

Gauss 消去法的算法

Gauss 消去法的算法

Step 0： 输入方程组的阶数 n，系数矩阵 A 和右边向量 b

Step 1： 对 $k = 1, 2, ..., n-1$， $i, j = k+1, k+2, \cdots, n$，假设 $a_{kk} \neq 0$，计算

$$\begin{cases} m_{ik} = a_{ik}/a_{kk} \\ a_{ij} = a_{ij} - m_{ik}a_{kj} \\ b_i = b_i - m_{ik}b_k \end{cases}$$

Step 2： 对 $i = n-1, n-2, \ldots, 1$，计算

$$\begin{cases} x_n = b_n / a_{nn} \\ x_i = \dfrac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j}{a_{ii}} \end{cases}$$

- 将 Gauss 消去过程中第 k-1 步消元后的系数矩阵记为：

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}, k = 1, 2, ..., n-1$$

1.1 Gauss 消去法

- 将 Gauss 消去过程中第 k-1 步消元后的系数矩阵记为：

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}, k = 1, 2, ..., n-1$$

- Gauss 消去法能进行到底的条件：主元 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$。

定理

主元 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 的充要条件是是矩阵 A 的顺序主子式均不为零，即

$$D_1 = a_{11} \neq 0, D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0, i = 1, 2, ..., n$$

1.2 列主元 Gauss 消去法

- 一旦主元等于 0，消元过程将无法进行。

1.2 列主元 Gauss 消去法

- 一旦主元等于 0，消元过程将无法进行。
- 即便主元不等于 0，但其绝对值很小，用它做除数也会导致其他元素的数量级激增和舍入误差扩大，严重影响计算结果的精度。

1.2 列主元 Gauss 消去法

- 一旦主元等于 0，消元过程将无法进行。
- 即便主元不等于 0，但其绝对值很小，用它做除数也会导致其他元素的数量级激增和舍入误差扩大，严重影响计算结果的精度。
- 列主元高斯消去法的基本思想，是在第 k 步消元时，在 $\{a_{ik}^{(k)}, i = k, k+1, \ldots, n\}$ 选择绝对值最大的元素作为主元。

1.2 列主元 Gauss 消去法

- 在第 k 步消元时，令 $|a_{i_k k}| = \max\limits_{k\le i\le n}\{|a_{ik}^{(k)}|\}$

1.2 列主元 Gauss 消去法

- 在第 k 步消元时，令 $|a_{i_k k}| = \max\limits_{k\le i\le n}\{|a_{ik}^{(k)}|\}$
- 如果 $i_k \neq k$，则交换 A 和 b 的第 i_k 行与第 k 行，然后正常进行该步的消元过程

列主元 Gauss 消去法的算法

列主元 Gauss 消去法的算法

Step 0： 输入方程组的阶数 n，系数矩阵 A 和右边向量 b

Step 1： 对 $k = 1, 2, ..., n-1$，

计算 $|a_{i_k k}| = \max\limits_{k \le i \le n} \{|a_{ik}|\}$；

如果 $|a_{i_k k}| = 0$，则停止；否则，

若 $i_k \neq k$，则交换 A 和 b 的第 i_k 行与第 k 行；

列主元 Gauss 消去法的算法

Step 1： 对 $i, j = k+1, k+2, \cdots, n$，计算

$$\begin{cases} m_{ik} = a_{ik}/a_{kk} \\ a_{ij} = a_{ij} - m_{ik}a_{kj} \\ b_i = b_i - m_{ik}b_k \end{cases}$$

Step 2： 对 $i = n-1, n-2, \ldots, 1$，计算

$$\begin{cases} x_n = b_n / a_{nn} \\ x_i = \dfrac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j}{a_{ii}} \end{cases}$$

- 换个角度看 Guass 消去法，其实就是矩阵的三角分解过程

2.1 LU 分解法

- 换个角度看 Guass 消去法，其实就是矩阵的三角分解过程
- 矩阵分解，即将一个较复杂的矩阵分解成若干结构简单的矩阵的乘积，是矩阵计算中的一个很重要的技术

2.1 LU 分解法

- Gauss 消去过程中，第 $k-1$ 步消元后的矩阵 $A^{(k)}$ 和第 k 步消元后的矩阵 $A^{(k+1)}$ 之间的关系可以表示为：$A^{(k+1)} = L_k A^{(k)}$，其中，

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix}, m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, i = k+1, \ldots, n \tag{2}$$

2.1 LU 分解法

- 于是有，$A = A^{(1)} = (L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1)^{-1}A^{(n)}$，其中

$$
L_k^{-1} = \begin{pmatrix}
1 & & & & & \\
& \ddots & & & & \\
& & 1 & & & \\
& & m_{k+1,k} & 1 & & \\
& & \vdots & & \ddots & \\
& & m_{n,k} & & & 1
\end{pmatrix} \tag{3}
$$

- 记 $L = (L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1)^{-1}$，$U = A^{(n)}$，则

- 记 $L = (L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1)^{-1}$，$U = A^{(n)}$，则
- 记 $A = LU$，其中 L 是单位下三角矩阵，U 是非奇异上三角矩阵。

定理

A 存在唯一的 LU 分解的充要条件是 A 的所有顺序主子式都不为零。

- 列主元 Gauss 消去法对应的矩阵分解为 PLU 分解。

- 列主元 Gauss 消去法对应的矩阵分解为 PLU 分解。

定理

若 A 非奇异，则存在排列矩阵 P，使得 $PA = LU$，其中 L 为单位下三角矩阵，U 为上三角矩阵。

2.2 LU 分解法

- 列主元 Gauss 消去法对应的矩阵分解为 PLU 分解。

定理

若 A 非奇异，则存在排列矩阵 P，使得 $PA = LU$，其中 L 为单位下三角矩阵，U 为上三角矩阵。

- 列主元 Gauss 消去法比普通 Gauss 消去法要多一些比较运算，但比普通高斯消去法稳定。
- 列主元 Gauss 消去法是目前直接法的首选算法。

3.1 病态矩阵

定义

考虑线性方程组 $Ax = b$，如果 A 和 b 的微小变化会导致解的巨大变化，则称此线性方程组是病态的，并称矩阵 A 是病态的，反之则是良态的。

定义

考虑线性方程组 $Ax = b$，如果 A 和 b 的微小变化会导致解的巨大变化，则称此线性方程组是病态的，并称矩阵 A 是病态的，反之则是良态的。

- 例如，

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} \tag{4}$$

  的解是 $(2, 0)$。

- 当右边向量变成 $(2, 2.0001)$ 时，解是 $(1, 1)$。变换很大！

定义

设函数 $f: R^n \rightarrow R$，若 f 满足

(1) $f(x) \geq 0, \forall x \in R^n$，等号当且仅当 $x = 0$ 时成立（正定性）；

(2) $f(\alpha x) = |\alpha| \cdot f(x), \forall x \in R^n, \forall \alpha \in R$ （齐次性）；

(3) $f(x + y) \leq f(x) + f(y)$ （三角不等式）。

则称 f 为 R^n 上的（向量）范数，通常记为 $|| \cdot ||$ 。

3.2 向量范数

R^n 空间上常见的向量范数

R^n 空间上常见的向量范数

- 1-范数：$||x||_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$
- 2-范数：$||x||_2 = (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}}$

R^n 空间上常见的向量范数

- 1-范数： $||x||_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$
- 2-范数： $||x||_2 = (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}}$
- p-范数： $||x||_p = (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$

3.2 向量范数

R^n 空间上常见的向量范数

- 1-范数：$||x||_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$
- 2-范数：$||x||_2 = (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}}$
- p-范数：$||x||_p = (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$

3.2 向量范数

R^n 空间上常见的向量范数

- 1-范数：$||x||_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$
- 2-范数：$||x||_2 = (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}}$
- p-范数：$||x||_p = (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$
- ∞-范数：$||x||_\infty = \max_{1\leq i\leq n} |x_i|$

3.2 矩阵范数

定义

设函数 $f: R^{n\times n} \to R$，若 f 满足

(1) $f(A) \geq 0, \forall A \in R^{n\times n}$，等号当且仅当 $A = 0$ 时成立（正定性）;

(2) $f(\alpha A) = |\alpha| \cdot f(A), \forall A \in R^{n\times n}, \forall \alpha \in R$ （齐次性）;

(3) $f(A + B) \leq f(A) + f(B)$ （三角不等式）;

(4) $f(AB) \leq f(A)f(B)$（相容性）。

则称 f 为 $R^{n\times n}$ 上的（矩阵）范数，通常记为 $||\cdot||$ 。

常见的矩阵范数

常见的矩阵范数

- F-范数:

$$||A||_F = (\sum_i^n \sum_j^n a_{ij}^2)^{\frac{1}{2}} \tag{5}$$

- 算子范数

$$||A|| = \sup_{x \in R^n, x \neq 0} \frac{||Ax||}{||x||} \tag{6}$$

常见的算子范数

常见的算子范数

- 1-范数：$||A||_1 = \max\limits_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$
- 2-范数（谱范数）：$||A||_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$

常见的算子范数

- 1-范数：$||A||_1 = \max\limits_{1\leq j\leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$
- 2-范数（谱范数）：$||A||_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$
- ∞-范数（谱范数）：$||A||_\infty = \max\limits_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$

例 1

- 设

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -3 & 4 \end{pmatrix}$$

计算 $||A||_1, ||A||_2, ||A||_\infty$。

例 1

- 设

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -3 & 4 \end{pmatrix}$$

计算 $||A||_1, ||A||_2, ||A||_\infty$。

解：直接代入公式即可。

3.3 矩阵条件数

定义

设 A 非奇异，则称

$$Cond(A)_v = ||A^{-1}||_v||A||_v \tag{7}$$

为 A 的条件数，其中 $||\cdot||_v$ 是 1-范数，2-范数或者 ∞-范数。

定理

考虑线性方程组 $Ax = b$，设 A 是精确的，b 有微小的变化 $\triangle b$，此时的解为 $x + \triangle x$，则

$$\frac{||\triangle x||}{||x||} \leq ||A^{-1}||||A||\frac{||\triangle b||}{||b||} \tag{8}$$

3.3 矩阵条件数

定理

考虑线性方程组 $Ax = b$，设 b 是精确的，A 有微小的变化 $\triangle A$，此时的解为 $x + \triangle x$，若 $||A^{-1}\triangle A|| < 1$，则

$$\frac{||\triangle x||}{||x||} \leq \frac{||A^{-1}||||A||\frac{||\triangle A||}{||A||}}{1 - ||A^{-1}||||A||\frac{||\triangle A||}{||A||}} \tag{9}$$

3.3 矩阵条件数

- 一般来说，当 A 的条件数较大时，A 就是病态的。

3.3 矩阵条件数

- 一般来说，当 A 的条件数较大时，A 就是病态的。
- 条件数越大，病态越严重，此时就越难用一般方法求得线性方程组比较精确的解。

总结

1. Guass 消去法
2. 矩阵条件数

谢谢！

Q&A