四、解线性方程组的数值方法

在自然科学和工程技术中很多问题的解决常常归结为解线性代数方程组。例如电学中的网络问题，船体数学放样中建立三次样条函数问题，用最小二乘法求实验数据的曲线拟合问题，解非线性方程组问题，用差分法或者有限元法解常微分方程，偏微分方程边值问题等都导致求解线性方程组。

线性方程组的数值解法一般有两类：

- 直接法：经过有限步算术运算，可求得方程组的精确解。
- 迭代法：用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解。

（一）解线性方程组的直接法

设线性方程组
$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots\ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots\ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \ldots\ldots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots\ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

矩阵式 $AX = B$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = (a_{ij})_{n\times n}$$

$$X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix}^T$$

$$B = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix}^T$$

*Gramer*法：　$x_i = \dfrac{D_i}{D}$　$i = 1, 2, \ldots, n$，其中

$\mathrm{D} = \det(\mathrm{A}) \neq 0$，$D_i = \det(A_i)$，$A_i$是$A$的第$i$列用$B$代替所得。

克莱姆法则在理论上有着重大意义，但在实际应用中存在一定的困难，在线性代数中，为解决这一困难提出了高斯消元法。

（1）若方程为下三角形方程：

$$\begin{cases} l_{11}x_1 & = b_1 \\ l_{21}x_1 + l_{22}x_2 & = b_2 \\ \qquad \cdots\cdots \\ l_{n1}x_1 + l_{n2}x_2 + \ldots + l_{nn}x_n & = b_n \end{cases} \qquad LX = B$$

其中，$l_{ij} \neq 0,\ i = 1, 2, \cdots, n$ ；$j = 1, 2, \cdots, \leq i$

易求解：

$$\begin{cases} x_1 = b_1 / l_{11} \\ x_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}x_j) / l_{ii} \end{cases}$$

$i = 2, 3, \ldots, n$

（2）若方程为上三角形方程：

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \ldots\ldots + u_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad\quad u_{22}x_2 + \ldots\ldots + u_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad \ldots\ldots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad u_{nn}x_n = b_n \end{cases} \qquad UX = B$$

其中，$u_{ji} \neq 0, i = 1,2,\ldots,n$；$j = i,\ldots,n$

易求解：

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

高斯消元法

将方程化为上（下）三角形方程

对线性方程组 $Ax = b$

如果 $\det(A) \neq 0$ 对其增广矩阵施行行初等变换：

$$\overline{A} = (A, b) \overset{\text{记}}{=} (A^{(1)}, b^{(1)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

假定 $a_{11}^{(1)} \neq 0$　**定义行乘数**　$m_{i1} = \dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \quad i = 2,3,\cdots,n$

第i行$-$第1行$\times m_{i1}$,则

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)} \qquad i,j = 2,3,\cdots,n$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)} \qquad i = 2,3,\cdots,n$$

$$(A^{(1)},b^{(1)}) \longrightarrow (A^{(2)},b^{(2)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

如果 $a_{11}^{(1)}=0$ 由于 $\det(A)\neq 0$

则 A 的第一列中至少有一个元素不为零

如 $a_{i_1 1}^{(1)}\neq 0$, 则将 $(A^{(1)},b^{(1)})$ 的第一行与第 i_1 行交换后消元

且
$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix} \longrightarrow \det(\bullet)\neq 0$$

因此, 第 $k-1$ 步后, $(A^{(1)},b^{(1)})$ 将化为

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

$$\det(\bullet) \neq 0$$

定义行乘数

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

第i行$-$第k行$\times m_{ik}$，则

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

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

当经过$k=n-1$步后,$(A^{(1)},b^{(1)})$将化为

$$(A^{(1)},b^{(1)}) \longrightarrow (A^{(n)},b^{(n)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

因此,上三角形方程组 $A^{(n)}x=b^{(n)}$ 有唯一解

即方程 $Ax=b$ 的解:

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

（二）解线性方程组的迭代法

在用直接法解线性方程组时要对系数矩阵不断变换，如果方程组的阶数很高, 则运算量将会很大，并且大量占用计算机资源。

迭代法是数值计算中常用的一种近似方法

线性方程组 $Ax=b$ 设$A\in R^{n\times n}, b\in R^{n}, x\in R^{n}$

可作分解：$A=(A_1-A_2)$ 且A_1的逆A_1^{-1}存在（$A_1A_1^{-1}=I$）

则 $Ax=b \Rightarrow A_1x=A_2x+b$

$$x=A_1^{-1}A_2x+A_1^{-1}b \qquad x=Bx+f$$

与原方程同解

如果能将线性方程组变换为 $x = Bx + f$

取初始向量 $x^{(0)}$,代入,可得 $x^{(1)} = Bx^{(0)} + f$

依此类推 $x^{(2)} = Bx^{(1)} + f$

$$\vdots$$

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f \qquad (k = 0,1,2,\cdots)$$

这种方式就称为迭代法, 以上过程称为迭代过程，迭代法产生一个序列 $\{x^{(k)}\}_0^{\infty}$

如果其极限存在, 即 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*$

则称迭代法收敛, 否则称为发散。

1、简单迭代法(Jacobi迭代法)

设线性方程组的一般形式为

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

设$a_{ii} \neq 0 \ (i = 1,2,\cdots,n)$ 方程组可改写为:

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}}[b_1 - (a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n)]$$

$$x_2 = \frac{1}{a_{22}}[b_2 - (a_{21}x_1 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n)]$$

依此类推, 线性方程组可化为

$$
\begin{cases}
x_1 = \dfrac{1}{a_{11}}(b_1 - \sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq 1}}^{n} a_{1j}x_j) = x_1 + \dfrac{1}{a_{11}}(b_1 - \sum\limits_{j=1}^{n} a_{1j}x_j) \\
x_2 = \dfrac{1}{a_{22}}(b_2 - \sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq 2}}^{n} a_{2j}x_j) = x_2 + \dfrac{1}{a_{22}}(b_2 - \sum\limits_{j=1}^{n} a_{2j}x_j) \\
\cdots\cdots\cdots\cdots \\
x_i = \dfrac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j) = x_i + \dfrac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}x_j) \\
\cdots\cdots\cdots\cdots \\
x_n = \dfrac{1}{a_{nn}}(b_n - \sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq n}}^{n} a_{nj}x_j) = x_n + \dfrac{1}{a_{nn}}(b_n - \sum\limits_{j=1}^{n} a_{nj}x_j)
\end{cases}
$$

对上式作迭代过程

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

$$(i = 1,2,\cdots,n; k = 0,1,2,\cdots)$$

若迭代收敛, 则得方程组的解。称Jacobi迭代法。

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \dots & \dots & \ddots & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \dots & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \dots & -a_{1n} \\ & 0 & \dots & \dots \\ & & \ddots & -a_{n-1n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

$$A = D - L - U \qquad Ax = b \qquad x = D^{-1}(L+U)x + D^{-1}b$$

得同解方程 $x = B_J x + f$

取初始向量 $x^{(0)}$,代入作迭代

$$x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + f \qquad (k = 0,1,2,\cdots)$$

而迭代序列的分量形式:

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

Jacbi迭代法。

2、Gauss-Seidel迭代法

分析Jacobi迭代法的迭代过程

$$x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} + \frac{1}{a_{11}}(b_1 - \sum_{j=1}^{n} a_{1j} x_j^{(k)})$$

$$x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} + \frac{1}{a_{22}}(b_2 - \sum_{j=1}^{n} a_{2j} x_j^{(k)})$$

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}) \qquad (i = 1,2,\cdots,n; k = 0,1,2,\cdots)$$

发现在$x_i^{(k+1)}$之前，$x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$已经求出

但当求$x_i^{(k+1)}$时，仍用$x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_{i-1}^{(k)}$进行迭代

能否求$x_i^{(k+1)}$时，利用$x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$进行迭代呢?

对Jacobi迭代法进行修正

设初值 $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}$

第1步 由迭代公式解得$x_1^{(1)}$;

第2步 由$\underline{x_1^{(1)}}, x_2^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}$代入迭代公式得$x_2^{(1)}$;

第3步 同理由$\underline{x_1^{(1)}, x_2^{(1)}}, x_3^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}$得$x_3^{(1)}$;

依此类推

第n步由$\underline{x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \quad x_3^{(1)}, \ldots, x_{n-1}^{(1)}}, x_n^{(0)}$得$x_n^{(1)}$。

迭代式改写为:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\right) \quad (i = 1, 2, \ldots, n) \quad (k = 0, 1, \ldots)$$

原Jacobi迭代的矩阵式

$$x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + f \qquad (k=0,1,2,\cdots)$$

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

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

将上式改为

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

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

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

设$B_G = (D-L)^{-1}U,\ f_G = (D-L)^{-1}b$,得

$$x^{(k+1)} = B_G x^{(k)} + f_G \qquad (k=0,1,2,\cdots)$$ Gauss-Seidel迭代

3、迭代法的收敛性

设解线性方程组的迭代格式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f \qquad \text{---------(10)}$$

而方程组的精确解为x^*,则

$$x^* = Bx^* + f \qquad \text{---------(11)}$$

将(10)与(11)相减,得

$$x^{(k+1)} - x^* = Bx^{(k)} - Bx^* = B(x^{(k)} - x^*)$$

令$\varepsilon^{(k)} = x^{(k)} - x^*$ $\qquad k = 0,1,2,\cdots$

则 $\varepsilon^{(k+1)} = B\varepsilon^{(k)} = B^2\varepsilon^{(k-1)} = \cdots = B^{k+1}\varepsilon^{(0)}$

注意$\varepsilon^{(0)} = x^{(0)} - x^*$为非零常数向量

因此迭代法收敛的充要条件

$$\lim_{k\to\infty} \varepsilon^{(k+1)} = \lim_{k\to\infty} (x^{(k+1)} - x^*) = 0$$

可转变为 $$\lim_{k\to\infty} B^{k+1} = 0$$

定理1.迭代格式(10)收敛的充要条件为

$$\lim_{k\to\infty} B^k = 0 \qquad \text{--------(12)}$$

根据矩阵与其Jordan标准形及特征值的关系,可知

$$\lim_{k\to\infty} B^k = 0 \Longleftrightarrow B\text{的所有特征值的绝对值小于}1$$

即 $\rho(B) < 1$ 因此

定理2. 迭代格式(10)收敛的充要条件为

$$\rho(B) < 1 \qquad \text{--------}(13)$$

又因为矩阵的谱半径不超过其任一种算子范数,即

$\rho(B) \le \|B\|_{\upsilon}$ 于是又可得到

定理3. 若$\|B\| < 1$,则以B为迭代矩阵的迭代法(10)收敛

且 $$\|\varepsilon^{(k)}\| \le \frac{\|B\|}{1-\|B\|}\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \qquad \text{--------(14)}$$

证明: 只证(14)式

$$x^{(k+1)} - x^* = x^{(k+1)} - x^{(k)} + x^{(k)} - x^*$$

$$x^{(k)} - x^* = x^{(k+1)} - x^* - (x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

$$\|x^{(k)} - x^*\| \le \|x^{(k+1)} - x^*\| + \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$$

$$= \|B(x^{(k)} - x^*)\| + \|B(x^{(k)} - x^{(k-1)})\|$$

$$\left\|x^{(k)}-x^*\right\| \le \|B\|\cdot\left\|x^{(k)}-x^*\right\|+\|B\|\cdot\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\|$$

所以 $$\left\|x^{(k)}-x^*\right\| \le \frac{\|B\|}{1-\|B\|}\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\|$$

即 $$\left\|\varepsilon^{(k)}\right\| \le \frac{\|B\|}{1-\|B\|}\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\| \qquad \text{--------(14)}$$

(14)可以用来估计迭代法的精度,理论上只要

$$\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\| \le \frac{1-\|B\|}{\|B\|}eps \quad \Rightarrow \quad \left\|\varepsilon^{(k)}\right\| \le eps$$

在计算时,迭代终止的时间可以用上式判别

4、线性方程组迭代法的加速

考虑解线性方程组的Gauss-Seidel迭代法

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

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

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

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

令 $r_i^{(k)} = x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}$

$$= \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}) \quad \text{------(2)}$$

$r_i^{(k)}$为第$k+1$次迭代时x的改变量

因此 $x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + r_i^{(k)}$

在改变量$r_i^{(k)}$前加一个因子$\omega,(0<\omega<2)$,得

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega r_i^{(k)}$$

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

在上式中合并$x_i^{(k)}$,得

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

$$i=1,2,\cdots n\quad,\quad k=0,1,2,\cdots \qquad \text{------(3)}$$

上式称为逐次超松弛法(SOR迭代法), ω称为松弛因子

练习、求解线性方程组的高斯消元法（选做）

建立求解线性方程组的高斯消元法的计算程序。

或利用专用软件的求解线性方程组的高斯消元法的计算程序。

选取一可解析求解的线性方程组

比较程序的计算结果与解析求解的计算结果。