数值计算方法

第一章： 线性代数方程组的求解

线性代数方程组的数值求解具有重要意义，例如
求解下列方程组

$$
\begin{aligned}
0.6328x_1 + 0.2471x_2 + 0.2568x_3 + 1.2671x_4 &= 1.8471 \\
0.1968x_1 + 0.2071x_2 + 1.2168x_3 + 0.2271x_4 &= 1.7471 \\
0.1582x_1 + 1.1675x_2 + 0.1768x_3 + 0.1871x_4 &= 1.6471 \\
1.1161x_1 + 0.1254x_2 + 0.1397x_3 + 0.1490x_4 &= 1.5471
\end{aligned}
$$

写为矩阵形式为 $AX = B$，

A 是矩阵，X 和 B 是列向量，如果 A 是上三角或者下三角矩阵，则方程的解可容易得到，假设是上三角矩阵，即方程组为

$$\begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots a_{1n}x_n \\ a_{22}x_2 + \cdots a_{2n}x_n \\ \cdots\cdots \\ a_{nn}x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

得到 x 解的通式为

$$x_k = \frac{b_k - \sum_{i=k+1}^{n} a_{ki}x_i}{a_{kk}} \quad ,k = n-1,\cdots 2,1$$

基本思想：就是将矩阵化为与之等价的上三角矩阵或者下三角矩阵

步骤：

STEP1:

将第 2 行至第 n 行，每行分别与第一行做运算，消除每一行的第一个参数，公式如下

$$a_{11}^{(1)} \neq 0\text{，} l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} (i = 2:n)\text{，第}i\text{行}+(-l_{i1})\times\text{第1行}\ (i=2:\mathrm{n})$$

形成如下图所示的新矩阵

$$B^{(1)} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix} \triangleq B^{(2)}$$

STEP2:

从新矩阵的 a22 开始（a22 不能为零），以第二行为基准，将 3 至 n 行与第二行做运算，消掉第二个参数，公式如下

$$l_{i2}=\frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}(i=3:n)\text{，第}i\text{行}+(-l_{i2})\times\text{第}2\text{行}(i=3:\mathrm{n})$$

形成如下图所示的新矩阵

$$B^{(2)}\Rightarrow\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{pmatrix}\triangleq B^{(3)}$$

Step K　　　　　按照上述方法，当第 k 步运算，公式如下

$$\text{设}\ a_{\mathrm{kk}}^{(k)} \neq 0\text{，令}\ l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{\mathrm{kk}}^{(k)}} (i = \mathrm{k+1} \sim n)$$

$$\text{第}\,i\,\text{行} + (-l_{ik}) \times \text{第k行}\ (i=\mathrm{k+1}\sim\mathrm{n})$$

运算前后的矩阵为

$$B^{(\mathrm{k})} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(k)} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$
\begin{pmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & a_{1,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\
0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & a_{2,k+1}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\
0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k+1)} & b_{k+1}^{(k+1)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{nn}^{(k+1)} & b_n^{(k+1)}
\end{pmatrix} \triangleq B^{(k+1)}
$$

STEP (n-1):

经过 n-1 步，方程组就转换为我们希望的上三角矩阵

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

全选主元高斯消去法

一、功能

用全选主元高斯(Gauss)消去法求解线性代数方程组 $AX=B$。

二、方法说明

高斯消去法分两步进行。

第一步 消去过程

在这一过程中，为了保证数值计算的稳定性，本子程序采用了全选主元。

对于 $k=1,2,\cdots,n-1$，作以下三步：

(1) 全选主元。即从系数矩阵的第 k 行、第 k 列开始的右下子阵中选取绝对值最大的元素，并将它交换到主元素的位置上。

(2) 归一化。即

$$a_{kj}/a_{kk}\Rightarrow a_{kj},\quad j=k+1,\cdots,n$$

$$b_k/a_{kk}\Rightarrow b_k$$

(3) 消去。即

线性变换消去每一列的左下角的非对角元

$$a_{ij}-a_{ik}a_{kj}\Rightarrow a_{ij},\quad i,j=k+1,\cdots,n$$

$$b_i-a_{ik}b_k\Rightarrow b_i,\quad i=k+1,\cdots,n$$

第二步　回代过程

(1)　　$b_n/a_{nn} \Rightarrow x_n$

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

三、子程序语句

SUBROUTINE AGAUS(A,B,N,X,L,JS)

四、形参说明

A——双精度实型二维数组,体积为 N×N,输入参数。存放方程组的系数矩阵,返回时将被破坏。

B——双精度实型一维数组,长度为 N,输入参数。存放方程组右端向量,返回时将被破坏。

N——整型变量,输入参数。存放方程组的阶数。

X——双精度实型一维数组,长度为 N,输出参数。返回方程组的解向量。

L——整型变量,输出参数。若返回 L=0,说明方程组的系数矩阵奇异,求解失败;若 L≠0,说明正常返回。

JS——整型一维数组,长度为 N。本子程序的工作数组。

```
SUBROUTINE AGAUS(A,B,N,X,L,JS)
    DIMENSION A(N,N),X(N),B(N),JS(N)
    DOUBLE PRECISION A,B,X,T
    L=1
    DO 50 K=1,N-1
!   全选主元
       D=0.0
       DO 210 I=K,N
       DO 210 J=K,N
          IF (ABS(A(I,J)).GT.D) THEN
              D=ABS(A(I,J))
              JS(K)=J
              IS=I
          END IF
210       CONTINUE
```

```
!   归一化
      IF (D+1.0.EQ.1.0) THEN
        L=0
      ELSE
        IF (JS(K).NE.K) THEN
          DO 220 I=1,N
            T=A(I,K)
            A(I,K)=A(I,JS(K))
           A(I,JS(K))=T
220        CONTINUE
        END IF
        IF (IS.NE.K) THEN
          DO 230 J=K,N
            T=A(K,J)
            A(K,J)=A(IS,J)
```

```
            A(IS,J)=T
230          CONTINUE
          T=B(K)
          B(K)=B(IS)
          B(IS)=T
        END IF
      END IF
      IF (L.EQ.0) THEN        ！判断是否矩阵是奇异的
        WRITE(*,100)
        RETURN
      END IF
      DO 10 J=K+1,N
        A(K,J)=A(K,J)/A(K,K)
10    CONTINUE
      B(K)=B(K)/A(K,K)
```

```
!   消去处理
        DO 30 I=K+1,N
          DO 20 J=K+1,N
            A(I,J)=A(I,J)-A(I,K)*A(K,J)
20        CONTINUE
          B(I)=B(I)-A(I,K)*B(K)
30      CONTINUE
50       CONTINUE
! 判断是否矩阵奇异
      IF (ABS(A(N,N))+1.0.EQ.1.0) THEN
        L=0
        WRITE(*,100)
        RETURN
      END IF
```

```
！ 回代过程
     X(N)=B(N)/A(N,N)
     DO 70 I=N-1,1,-1
        T=0.0
        DO 60 J=I+1,N
           T=T+A(I,J)*X(J)
60      CONTINUE
        X(I)=B(I)-T
70       CONTINUE
100      FORMAT(1X,' FAIL ')
     JS(N)=N
!输出解
     DO 150 K=N,1,-1
        IF (JS(K).NE.K) THEN
           T=X(K)
```

```
        X(K)=X(JS(K))
        X(JS(K))=T
      END IF
150   CONTINUE
    RETURN
    END SUBROUTINE
```

```
PRGRAM EXAMPLE01
DIMENSION A(4,4),B(4),X(4),JS(4)
DOUBLE PRECISION A,B,X
 DATA A/0.2368,0.1968,0.1582,1.1161,0.2471,0.2071,1.1675,0.1254,    &
                 0.2568,1.2168,0.1768,0.1397,1.2671,0.2271,0.1871,0.1490/
 DATA B/1.8471,1.7471,1.6471,1.5471/
 N=4
 CALL AGAUS(A,B,N,X,L,JS)
 IF (L.NE.0) THEN
    WRITE(*,10) (I,X(I),I=1,4)
 END IF
10 FORMAT(1X,'X(',I2,' )=',D15.6)
 END program
```

运行结果为

```
X( 1 )=     .104058D+01
X( 2 )=     .986956D+00
X( 3 )=     .935053D+00
X( 4 )=     .881297D+00
```

以上就是求得的 X 向量的值

1.2 求解对称方程组的分解法

如果求解如下线性代数方程组 AX=B

A 为 n 阶**对称矩阵**

方法说明：

对称矩阵可以分解为 $A=LDL^T$ 的形式，其中 L 是下三角矩阵，D 是对角矩阵，L^T 是上三角矩阵。

$$L=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{1,0} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & 1 & \\ l_{n-1,0} & l_{n-1,1} & \cdots l_{n-1,n-2} & 1 \end{bmatrix} \quad D=\begin{bmatrix} d_{00} & & & \\ & d_{11} & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_{n-1,n-1} \end{bmatrix}$$

矩阵 L 和 D 的矩阵元如下

$$d_{00} = a_{00}$$

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=0}^{i-1} l_{ik}^2 d_{kk}$$

$$l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=0}^{j-1} l_{ik} l_{jk} d_{kk} \right) \Big/ d_{jj} \quad , \ j < i$$

$$l_{ij} = 0 \quad , j > i$$

这样方程组 AX=B 可以化为 $LDL^TX=B \Rightarrow LY=B$，其中 $DL^TX=Y$，则由回代过程求解方程组 LY=B 而得到 Y，然后求的 X 的解。$DL^TX=Y$ 求解方程如下：

$$y_0 = c_0$$

$$y_i = \mathrm{b}_i - \sum_{k=0}^{i-1} l_{ik} y_k \quad , \ i > 0$$

$$x_{n-1} = y_{n-1} / d_{n-1,n-1}$$

$$x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n-1} d_{ii} l_{ki} x_k \right) \Big/ d_{ii}$$

如果方程组是**正定对称的**，则 $A=LU=U^TU$，$L=U^T$ 是下三角，U 是上三角矩阵。

例子：

$$A=\begin{bmatrix}5 & 7 & 6 & 5 & 1\\ 7 & 10 & 8 & 7 & 2\\ 6 & 8 & 10 & 9 & 3\\ 5 & 7 & 9 & 10 & 4\\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5\end{bmatrix} \qquad \mathrm{B}=\begin{bmatrix}24 & 96\\ 34 & 136\\ 36 & 144\\ 35 & 140\\ 15 & 60\end{bmatrix} \qquad \text{求AX=B}$$

主程序：ALDLE0。子程序：ALDLE

```
      PROGRAM ALDLE0
        DIMENSION A(5,5),B(5,2)
        DOUBLE PRECISION A,B
        DATA A/5.0,7.0,6.0,5.0,1.0,7.0,10.0,8.0,7.0,2.0,6.0,8.0, &
              10.0,9.0,3.0,5.0,7.0,9.0,10.0,4.0,1.0,2.0,3.0,4.0,5.0/
        DATA B/24.0,34.0,36.0,35.0,15.0,96.0,136.0,144.0,140.0,60.0/
       CALL ALDLE(A,5,2,B,L)
       IF (L.NE.0) THEN
         WRITE(*,10) ((B(I,J),J=1,2),I=1,5)
       END IF
10     FORMAT(1X,2D15.6)
      END PROGRAM
```

运行结果：

X(1) = 1.000000e+00　　4.000000e+00

X(2) = 1.000000e+00　　4.000000e+00

X(3) = 1.000000e+00　　4.000000e+00

X(4) = 1.000000e+00　　4.000000e+00

X(5) = 1.000000e+00　　4.000000e+00

以上是方程的两组解

```
SUBROUTINE ALDLE(A,N,M,C,L)
! A是输入的对称矩阵，  N是矩阵的维度，M是多维向量的维度，C是解，L非零表示正常结束
    DIMENSION A(N,N),C(N,M)
    DOUBLE PRECISION A,C
    L=1
    IF (ABS(A(1,1))+1.0.EQ.1.0) THEN
      L=0
      WRITE(*,10)
      RETURN
    END IF
10  FORMAT(1X,'FAIL')
    DO 20 I=2,N
20  A(I,1)=A(I,1)/A(1,1)
    DO 60 I=2,N-1
      DO 30 J=2,I
```

```
30     A(I,I)=A(I,I)-A(I,J-1)*A(I,J-1)*A(J-1,J-1)
       DO 50 K=I+1,N
         DO 40 J=2,I
40       A(K,I)=A(K,I)-A(K,J-1)*A(I,J-1)*A(J-1,J-1)
         IF (ABS(A(I,I))+1.0.EQ.1.0) THEN
           L=0
           WRITE(*,10)
           RETURN
         END IF
         A(K,I)=A(K,I)/A(I,I)
50     CONTINUE
60 CONTINUE
    DO 70 J=2,N
70  A(N,N)=A(N,N)-A(N,J-1)*A(N,J-1)*A(J-1,J-1)
    DO 80 J=1,M
```

```
      DO 80 I=2,N
      DO 80 K=2,I
80    C(I,J)=C(I,J)-A(I,K-1)*C(K-1,J)
      DO 90 I=2,N
      DO 90 J=I,N
90    A(I-1,J)=A(I-1,I-1)*A(J,I-1)
      IF (ABS(A(N,N))+1.0.EQ.1.0) THEN
         L=0
         WRITE(*,10)
         RETURN
      END IF
      DO 150 J=1,M
         C(N,J)=C(N,J)/A(N,N)
         DO 140 K=2,N
            K1=N-K+2
```

```
      DO 130 K2=K1,N
        K3=N-K+1
        C(K3,J)=C(K3,J)-A(K3,K2)*C(K2,J)
130         CONTINUE
      C(K3,J)=C(K3,J)/A(K3,K3)
140       CONTINUE
150     CONTINUE
    RETURN
    END SUBROUTINE
```