面向“四新”人才培养普通高等教育系列教材

数值分析方法

主编　李冬果 李林 高磊

首都医科大学 生物医学工程学院智能医学工程学学系

第二章　数值代数基础

目录/Contents

2.1 线性方程组的直接解法

2.1.1 Gauss消去法

将线性方程组$Ax=b$用矩阵形式表示

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

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

➢ 消元过程 Gauss消去法的消元过程由n-1步完成

$$\text{第一步：}\quad \text{当} a_{11}^{(1)} \neq 0, \text{第1行} \times \frac{-a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} + \text{第}i\text{行}, i = 2, \cdots, n$$

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

$$\text{令} m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, i = 2,3,\ldots,n \quad \text{则} \quad a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)} \qquad (i = 2,\ldots,n; j = 2,\ldots,n)$$

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

- 消元过程 Gauss消去法的消元过程由n-1步完成

第二步：当$a_{22}^{(2)} \neq 0$，第2行$\times \dfrac{-a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$+第$i$行，$i = 3, \cdots, n$

$$
\begin{pmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\
0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)}
\end{pmatrix}
\rightarrow
\begin{pmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\
0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\
0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)}
\end{pmatrix}
$$

令$m_{i2} = \dfrac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, i = 2,3,\ldots,n$ 则

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - m_{i2} a_{2j}^{(2)} \qquad (i = 3,\ldots,n;\ j = 3,\ldots,n)$$

$$b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - m_{i2} b_2^{(2)} \qquad (i = 3,\ldots,n)$$

➢ 消元过程 Gauss消去法的消元过程由n-1步完成

重复上述步骤直至n−1步

$$
[A^{(n)} \vdots b^{(n)}] = \left[\begin{array}{cccccc|c}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\
 & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
 & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\
 & & & & \cdots & \cdots & \cdots \\
 & & & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)}
\end{array}\right]
$$

➢ 回代求解

$$
\begin{cases}
a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \ldots\ldots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\
\qquad a_{22}^{(2)}x_2 + \ldots\ldots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\
\qquad\qquad \ldots\ldots \\
\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)}
\end{cases}
\Rightarrow
\begin{cases}
x_n = b_n^{(n)}/a_{nn}^{(n)} \\
x_i = (b_i^{(i)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)}x_j)/a_{ii}^{(i)}
\end{cases}
\quad i = n-1,\ldots 2,1
$$

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

Gauss消去法总的计算量为$O(n^3)$

例　用Gauss消去法求解线性方程组 $\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 4 \\ x_1 + 2x_2 \qquad = 7 \end{cases}$

解　Gauss消去法的消元过程是将方程组的增广矩阵进行下列一系列的初等行变换

$$(A,b) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 3 & 1 \\ 4 & 2 & 5 & 4 \\ 1 & 2 & 0 & 7 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3+(-\frac{1}{2})r_1]{r_2+(-2)r_1} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 3 & 1 \\ 0 & 4 & -1 & 2 \\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{3}{2} & \frac{13}{2} \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3+(-\frac{5}{8})r_2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 3 & 1 \\ 0 & 4 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & -\frac{7}{8} & \frac{21}{4} \end{pmatrix}$$

由此得到与方程组同解的上三角形方程组 $\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 \\ \quad 4x_2 - x_3 = 2 \\ \quad\quad -\frac{7}{8}x_3 = \frac{21}{4} \end{cases}$

回代求解，得 $x_1 = 9,\quad x_2 = -1,\quad x_3 = -6$

$$\det(A_i)=\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix}$$

- 适用条件

定理：若A的各阶顺序主子式不等于0，则高斯消去法能顺序进行消元，得到唯一解。

- 存在问题

1. 在高斯消去法消去过程中可能出现 $a_{kk}^{(k)}=0$的情况，这时高斯消去法将无法进行

$$m_{ik}=\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}\text{：消元因子}$$

2. 如果某个$a_{kk}^{(k)}\neq 0$，但很小，会引入较大的误差。

2.1.2 Gauss列主元素消去法

- 基本思想

  在每轮消元之前，选列主元素（绝对值最大的元素）

- 具体步骤

  第一步：选$|a_{i_1,1}| = \max\limits_{1\le i\le n}|a_{i1}|$,交换第1行和第$i_1$行，然后进行消元

  第二步：选$|a^{(2)}_{i_2,2}| = \max\limits_{2\le i\le n}|a^{(2)}_{i2}|$,交换第2行和第$i_2$行，然后进行消元

  第k步：选$|a^{(k)}_{i_k,k}| = \max\limits_{k\le i\le n}|a^{(k)}_{kn}|$,交换换k行和第$i_k$行，然后进，然k次消元

如此至多经过n-1步，就得到与之同解的上三角形方程组的增广矩阵，再用回代过程即可得方程组的解.

Gauss全主元素消去法

在消元进消元进k步选主元时，选择使得 $|a^{(k)}_{i_k,j_k}| = \max\limits_{\substack{k\le i\le n\\ k\le j\le n}} |a^{(k)}_{ij}| \neq 0$ 的元素，

交换增广矩阵 $(A^{(k)}\ b^{(k)})$ 的行及 $A^{(k)}$ 的列，使得主元位置的元素的绝对值是给出的最大值 $a^{(k)}_{i_k,j_k}$，然后再进行消元过程

因为有列变换，因此未知量的次序有所改变，待消元过程结束后必须还原。

例 用Gauss列主元消元法和全主元消去法解线性方程组

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

解 （1）列主元素消去法

第一步，选择−20作为该列的主元素，
$$\begin{cases} -20x_1 + 40x_2 + x_3 = 4 & (4) \\ 10x_1 - 19x_2 - 2x_3 = 3 & (5) \\ x_1 + 4x_2 + 5x_3 = 5 & (6) \end{cases}$$

计算$m_{21} = -\frac{10}{20} = -0.5, m_{31} = -\frac{1}{20} = -0.05, (5) - m_{21}(4), (6) - m_{31}(4)$ 消去x_1得，$\begin{cases} x_2 - 1.5x_3 = 5 & (7) \\ 6x_2 + 5.05x_3 = 5.2 & (8) \end{cases}$

第二步，选6作为主元素，

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

计算$m_{32} = \frac{1}{6} = 0.16667$，$(10) - m_{32}(9)$，得$-2.34168x_3 = 4.13332 \qquad (11)$

保留有主元素的方程

$$\begin{cases} -20x_1 + 40x_2 + x_3 = 4 & (4) \\ \qquad 6x_2 + 5.05x_3 = 5.2 & (9) \\ \qquad\quad -2.34168x_3 = 4.13332 & (11) \end{cases}$$

再进行回代得方程组解为

$$\begin{cases} x_1 = 4.41634 \\ x_2 = 2.35230 \\ x_3 = -1.76511 \end{cases}$$

（2）全主元素消去法

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

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

计算 $m_{21} = -\dfrac{19}{40} = -0.475, m_{31} = \dfrac{4}{40} = 0.1, (5) - m_{21}(4), (6) - m_{31}(4)$ 消去 x_2 得，

$$
\begin{cases}
0.5x_1 - 1.525x_3 = 4.9 & (7') \\
3x_1 + 4.9x_3 = 4.6 & (8')
\end{cases}
$$

第二步，在所有元素中选绝对值最大的4.9作为主元素，交换第一、二行和第一、二列

$$
\begin{cases}
4.9x_3 + 3x_1 = 4.6 & (7') \\
-1.525x_3 + 0.5x_1 = 4.9 & (8')
\end{cases}
$$

计算$m_{32}=\dfrac{1.525}{4.9}=0.31122$，$(8')+m_{32}(7')$，消去$x_3$得$1.43366x_1=6.33161$ （12）

保留有主元素的方程

$$\begin{cases} 40x_2 - 20x_1 + x_3 = 4 & (4) \\ 4.9x_3 + 3x_1 = 4.6 & (7') \\ 1.43366x_1 = 6.33161 & (12) \end{cases}$$

在进行回代得方程组解为

$$\begin{cases} x_1 = 4.41634 \\ x_2 = 2.35230 \\ x_3 = -1.76511 \end{cases}$$

2.1.3 矩阵的三角分解法

- 若矩阵A有分解：A=LU，其中L为下三角阵，U为上三角阵，则称该分解为A的LU分解，又称为Doolittle分解
- 若矩阵A有分解A=LU，则解线性方程组Ax=b就等价于求解 $L(UX)=b\Rightarrow\begin{cases}Ly=b\\Ux=y\end{cases}$
- 定理

如果n阶方阵A的各阶顺序主子式不为零，即 $a_{11}\neq 0,\begin{vmatrix}a_{11} & a_{12}\\a_{21} & a_{22}\end{vmatrix}\neq 0,\cdots,|A|\neq 0,$

则方阵A必可作LU分解，且分解是唯一的

利用矩阵的乘法运算介绍Doolittle分解法求解线性方程组的具体计算过程。 设A=LU

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

由矩阵乘法规则得

$$a_{1i} = u_{1i} \qquad i = 1,2,\cdots,n$$

$$a_{i1} = l_{i1}u_{11} \qquad i = 2,3,\cdots,n$$

由此可得U的第1行元素和L的第1列元素: $u_{1i} = a_{1i} \qquad i = 1,2,\cdots,n$

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}} \qquad i = 2,3,\cdots,n$$