

第7章 解线性方程组的直接方法

张利军

zlj@nju.edu.cn

<https://ai.nju.edu.cn/zlj>





目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析



引言

- 在自然科学和工程技术中，很多问题的解决常常归结为求解线性代数方程组
 - 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

- 方程组的系数矩阵大致分为两种
 - 低阶稠密矩阵（如阶数上界大约为150的矩阵）
 - 大型稀疏矩阵（即阶数高且零元素较多的矩阵）



线性方程组的数值解法

□ 直接法

- 经过有限步算术运算即可求得方程组精确解
- 但由于舍入误差的存在和影响，也只能求得近似解
- 这类方法是解低阶稠密矩阵方程组的有效方法，在求解较大型稀疏矩阵方程组方面也取得了进展

□ 迭代法

- 用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解
- 具有存储单元较少、程序设计简单、原始系数矩阵在计算过程中始终不变等优点
- 存在收敛性及收敛速度方面的问题
- 是解大型稀疏矩阵方程组的重要方法



目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析



Guass消去法

- 介绍**Guass**消去法（逐次消去法）、消去法和矩阵三角分解之间的关系
 - 最基本的一种解线性方程组的直接方法

- **Guass**消去法是一个古老的求解线性方程组的方法
 - 早在公元前250年我国就掌握了解三元一次联立方程组的方法
 - 但由它改进、变形得到的主元素消去法、三角分解法仍然是目前计算机上常用的有效方法



消元手续

□ 设有线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \quad (7.2.1)$$

或写成矩阵形式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, 其中

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

其中 $\mathbf{A}$ 为非奇异矩阵

■ 下面举一个简单例子说明消去法的基本思想



例7.1

□ 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

- 基本思想：用逐次消去未知数的方法把原来的方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 转化为与其等价的三角方程组，而求解三角方程组就容易了
- 换言之，用行的初等变换将原方程组系数矩阵化为简单形式，从而将求解原方程组(7.2.1)的问题转化为求解简单方程组的问题



例7.1

□ 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

- 第一步，将式(7.2.2)乘以 -2 加到式(7.2.4)上去，消去式(7.2.4)中的未知数 x_1 得到

$$-4x_2 - x_3 = -11 \quad (7.2.5)$$

- 第二步，将式(7.2.3)加到式(7.2.5)上，消去式(7.2.5)中的未知数 x_2 得到

$$-2x_3 = -6$$



例7.1

□ 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

■ 得到与原方程组等价的三角方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, \\ 4x_2 - x_3 = 5, \\ -2x_3 = -6 \end{cases} \quad (7.2.6)$$

■ 显然方程组(7.2.6)是容易求解的, 解为 $x^* = (1, 2, 3)^T$



例7.1

□ 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

■ 上述过程相当于

$$(A | \mathbf{b}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ 2 & -2 & 1 & | & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ \color{red}{0} & -4 & -1 & | & -11 \end{bmatrix} \xrightarrow{\color{red}(-2) \times r_1 + r_3 \rightarrow r_3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ \color{red}{0} & \color{red}{0} & -2 & | & -6 \end{bmatrix} \xrightarrow{\color{red}r_2 + r_3 \rightarrow r_3}$$



解 n 阶方程组的Gauss消去法

□ 将式(7.2.1)记作 $\mathbf{A}^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}$

■ 其中 $\mathbf{A}^{(1)} = (a_{ij}^{(1)}) = (a_{ij})$, $\mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \quad (7.2.1)$$

1. 第一次消元

- 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 首先对行计算乘数 $m_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$, 其中 $i = 2, 3, \cdots, n$
- 用 $-m_{i1}$ 乘(7.2.1)的第1个方程, 加到第 i 个方程上, 消去(7.2.1)的第2到 n 个方程中的未知数 x_1



解 n 阶方程组的Gauss消去法（续）

■ 得与式(7.2.1)等价的方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix} \quad (7.2.7)$$

■ 简记作 $\mathbf{A}^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)}$ ，其中

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)}, \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)} \quad (i, j = 2, 3, \dots, n)$$

2. 一般第 $k(1 \leq k \leq n-1)$ 次消元

■ 设第 $k-1$ 步计算已经完成，即已得到等价方程组

$$\mathbf{A}^{(k)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k)} \quad (7.2.8)$$



解 n 阶方程组的Gauss消去法（续）

- $A^{(k)}$ 已经消去未知数 $x_1, x_2, \dots, x_{k-1}$ ，如下所示

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

- 设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ，计算乘数 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$ ，其中 $i = k+1, \dots, n$
- 用 $-m_{ik}$ 乘式(7.2.8)的第 k 个方程，加到第 i 个方程上，消去第 $k+1$ 到 n 个方程中的未知数 x_k



解 n 阶方程组的Gauss消去法（续）

- 得与式(7.2.1)等价的方程组

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

- $\mathbf{A}^{(k+1)}$ 元素的计算公式为

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik}a_{kj}^{(k)} & (i, j = k + 1, \dots, n), \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik}b_k^{(k)} & (i = k + 1, \dots, n). \end{cases}$$

- 显然， $\mathbf{A}^{(k+1)}$ 的第1行直到第 k 行与 $\mathbf{A}^{(k)}$ 相同

3. 继续这一过程，直到完成第 $n - 1$ 次消元

- 最后得到与原方程组等价的三角方程组

$$\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)} \quad (7.2.10)$$



解 n 阶方程组的Gauss消去法（续）

■ 即

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix} \quad (7.2.10)$$

□ 由式(7.2.1)约化为式(7.2.10)的过程称为
消元过程

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \quad (7.2.1)$$



解 n 阶方程组的Gauss消去法（续）

□ 求解三角方程组(7.2.10)

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix} \quad (7.2.10)$$

■ 设 $a_{ii}^{(i)} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 易得求解公式

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k)} x_j \right) / a_{kk}^{(k)} \quad (k = n-1, n-2, \dots, 2, 1) \end{cases}$$

■ 式(7.2.10)的求解过程称为回代过程



消元过程的注意事项

□ 如果 $a_{11}^{(1)} = 0$

■ 由于 $\mathbf{A}$ 为非奇异矩阵，所以 $\mathbf{A}$ 的第1列一定有元素不等于零，例如 $a_{i_1, 1}^{(1)} \neq 0$ ，于是可以先交换两行元素 ($\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_{i_1}$)，然后再进行消元运算

■ 这时 $\mathbf{A}^{(2)}$ 右下角矩阵 ($n-1$ 阶) 亦为非奇异矩阵，继续上述过程，Gauss消去法可继续计算

□ **定理7.1** 如果 $\mathbf{A}$ 为 n 阶非奇异矩阵，则可以通过 Gauss 消去法（及交换两行的初等变换）将方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 化为三角方程组 $\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$



消元过程的注意事项（续）

- $\mathbf{A}$ 在什么条件下才能保证 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, n$)?
 - 这样在实现Gauss消去法时不需要交换行
- 引理 约化的主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$)的充要条件是矩阵 $\mathbf{A}$ 的顺序主子式 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$), 即

$$D_1 = a_{11} \neq 0,$$

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (i = 2, 3, \dots, k)$$



引理（证明）

□ 利用归纳法证明引理的充分性

- 显然，当 $k = 1$ 时引理的充分性是成立的
- 现假设引理对 $k - 1$ 成立，求证引理对 k 成立
- 设 $a_{ii}^{(i)} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k - 1$)，于是可用Gauss消去法将 $\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}$ 约化到 $\mathbf{A}^{(k)}$ 中，即

$$\mathbf{A}^{(1)} \rightarrow \mathbf{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$



引理（证明）

■ 注意到Gauss消去法不改变行列式，因此

$$D_2 = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)}, \quad D_3 = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} a_{33}^{(3)}$$
$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{kk}^{(k)} \quad (7.2.13)$$

■ 由设 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$)及式(7.2.13)，有
 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ，即引理充分性对 k 成立

□ 显然，由假设 $a_{ii}^{(i)} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$)，利用式(7.2.13)亦可推出 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$)



简化的Gauss消去法

□ 推论 如果 $\mathbf{A}$ 的顺序主子式 $D_k \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, n-1$), 则

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} = D_1, \\ a_{kk}^{(k)} = \frac{D_k}{D_{k-1}} \quad (k = 2, 3, \dots, n) \end{cases}$$

□ 定理**7.2** 如果 n 阶矩阵 $\mathbf{A}$ 的所有顺序主子式均不为零, 即 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 则可通过Gauss消去法 (不进行交换两行的初等变换), 将方程组(7.2.1)化为三角方程组(7.2.10)



简化的计算公式

1. 消元计算($k = 1, 2, \dots, n - 1$)

$$\begin{aligned} m_{ik} &= a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} & (i = k + 1, \dots, n), \\ a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} & (i, j = k + 1, \dots, n), \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} & (i = k + 1, \dots, n). \end{aligned}$$

2. 回代计算（与之前相同）

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k)} x_j \right) / a_{kk}^{(k)} \end{cases} \quad (k = n - 1, n - 2, \dots, 2, 1)$$



Gauss消去法的矩阵描述

- 建立Gauss消去法与矩阵因式分解的关系
- 设式 $Ax = b$ 中 A 的各顺序主子式均不为零
 - 对 A 施行行的初等变换相当于用初等矩阵左乘 A
 - 对式 $A^{(1)}x = b^{(1)}$ 施行第一次消元后化为式 $A^{(2)}x = b^{(2)}$, 这时 $A^{(1)}$ 化为 $A^{(2)}$, $b^{(1)}$ 化为 $b^{(2)}$, 即
$$L_1 A^{(1)} = A^{(2)}, \quad L_1 b^{(1)} = b^{(2)},$$

其中

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & \\ -m_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & & 1 \end{bmatrix}$$



Gauss消去法的矩阵描述（续）

□ 一般第 k 步消元， $\mathbf{A}^{(k)}$ 化为 $\mathbf{A}^{(k+1)}$ ， $\mathbf{b}^{(k)}$ 化为 $\mathbf{b}^{(k+1)}$ ，相当于

$$\mathbf{L}_k \mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{A}^{(k+1)}, \quad \mathbf{L}_k \mathbf{b}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k+1)}$$

□ 重复这一过程，最后得到

$$\begin{cases} \mathbf{L}_{n-1} \cdots \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_1 \mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}^{(n)} \\ \mathbf{L}_{n-1} \cdots \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_1 \mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}^{(n)} \end{cases} \quad (7.2.14)$$

其中

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



Gauss消去法的矩阵描述（续）

□ 将上三角矩阵 $\mathbf{A}^{(n)}$ 记作 $\mathbf{U}$ ，由式(7.2.14)可得

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}_1^{-1} \mathbf{L}_2^{-1} \cdots \mathbf{L}_{n-1}^{-1} \mathbf{U} = \mathbf{L} \mathbf{U},$$

其中

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1^{-1} \mathbf{L}_2^{-1} \cdots \mathbf{L}_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

为单位下三角矩阵

- 即对角元素为1的下三角矩阵
- $\mathbf{L}$ 中的元素是消元计算所得的系数



矩阵的三角分解

□ Gauss消去法实质上产生了一个将 $\mathbf{A}$ 分解为两个三角矩阵相乘的因式分解

■ 得到如下重要定理，在解方程组的直接法中起着重要作用

□ 定理**7.3**（矩阵的LU分解） 设 $\mathbf{A}$ 为 n 阶矩阵，如果 $\mathbf{A}$ 的顺序主子式 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$)，则 $\mathbf{A}$ 可分解为一个单位下三角矩阵 $\mathbf{L}$ 和一个上三角矩阵 $\mathbf{U}$ 的乘积，且这种分解是唯一的



定理7.3（证明）

- 根据Gauss消去法的矩阵分析， $A = LU$ 的存在性已经得到证明
- 下面在 A 为非奇异矩阵的假定下，证明唯一性
 - 设 $A = LU = L_1U_1$,
其中 L, L_1 为单位下三角矩阵， U, U_1 为上三角矩阵
 - 由于 L^{-1}, U_1^{-1} 存在，故
$$L^{-1}LUU_1^{-1} = L^{-1}L_1U_1U_1^{-1} \Rightarrow UU_1^{-1} = L^{-1}L_1$$
 - 根据三角矩阵的性质， UU_1^{-1} 为上三角矩阵， $L^{-1}L_1$ 为单位下三角矩阵
 - 从而上式两端都必须等于 I ，故 $U = U_1, L = L_1$



例7.2

□ 对于例7.1, 其系数矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 2 & -2 & 1 \end{bmatrix},$$

由Gauss消去法, 有

$$m_{21} = 0, \quad m_{31} = 2, \quad m_{32} = -1,$$

故

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \mathbf{0} & 1 & 0 \\ \mathbf{2} & \mathbf{-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} = LU$$



Gauss消去法的计算量（续）

1. 消元过程的计算量

$$\begin{aligned} m_{ik} &= a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} & (i = k + 1, \dots, n), \\ a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} & (i, j = k + 1, \dots, n) \end{aligned}$$

- 第一步计算乘数 m_{i1} ($i = 2, 3, \dots, n$)需要 $n - 1$ 次除法运算
- 计算 $a_{ij}^{(2)}$ ($i, j = 2, 3, \dots, n$)需要 $(n - 1)^2$ 次乘法运算及 $(n - 1)^2$ 次加、减法运算



Gauss消去法的计算量（续）

1. 消元过程的计算量

- 消元过程所需的乘、除法次数 MD 及加、减法次数 AS 分别为

$$MD = n(n^2 - 1)/3, \quad AS = n(n - 1)(2n - 1)/6$$

第 k 步	加、减法次数	乘法次数	除法次数
1	$(n - 1)^2$	$(n - 1)^2$	$n - 1$
2	$(n - 2)^2$	$(n - 2)^2$	$n - 2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$n - 1$	1	1	1
合 计	$\frac{n(n - 1)(2n - 1)}{6}$	$\frac{n(n - 1)(2n - 1)}{6}$	$\frac{n(n - 1)}{2}$



Gauss消去法的计算量（续）

2. 计算 $\mathbf{b}^{(n)}$ 的计算量

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

■ 乘、除法次数 MD 及加、减法次数 AS 分别为

$$MD = (n - 1) + (n - 2) + \dots + 2 + 1 = n(n - 1)/2$$

$$AS = n(n - 1)/2$$

3. 解 $\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$ 所需的计算量

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k)} x_j \right) / a_{kk}^{(k)} \end{cases} \quad (k = n - 1, n - 2, \dots, 2, 1)$$



Gauss消去法的计算量（续）

■ 乘、除法次数 MD 及加、减法次数 AS 分别为

$$MD = n(n+1)/2, \quad AS = n(n-1)/2$$

4. 解式 $Ax = b$ 所需的总的计算量为

乘除法次数 $MD = n^3/3 + n^2 - n/3 \approx n^3/3$ （当 n 比较大时）

加减法次数 $AS = n(n-1)(2n+5)/6 \approx n^3/3$ （当 n 比较大时）

□ 定理7.4 如果 A 为 n 阶非奇异矩阵，则用 Gauss消去法解式 $Ax = b$ 所需乘除法次数及加减法次数分别为

$$MD = n^3/3 + n^2 - n/3$$

$$AS = n(n-1)(2n+5)/6$$



目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析



Gauss消去法的局限

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

- 由Gauss消去法知道，在消元过程中可能出现 $a_{kk}^{(k)} = 0$ 的情况，这时消去法将无法进行
- 即使主元素 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 但很小时，用其作除数，也会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，最后会使得计算解不可靠



例7.3

□ 求解方程组

$$\begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.000 \\ 2.000 \\ 3.000 \end{bmatrix}$$

用四位浮点数进行计算。精确解为

$$\mathbf{x}^* = (-0.4904, -0.05104, 0.3675)^T$$

1. 用Gauss消去法求解

$(A, \mathbf{b})$

$$= \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \end{array} \right] \quad \begin{aligned} m_{21} &= -1.000/0.001 = -1000 \\ m_{31} &= -2.000/0.001 = -2000 \end{aligned}$$

$$\mathbf{x}^* = (-0.4904, -0.05104, 0.3675)^T$$



例7.3 (续)

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 4001 & 6006 & 2003 \end{array} \right] \quad m_{32} = 4001/2004 = 1.997$$

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 0 & 5.000 & 2.000 \end{array} \right]$$

■ 计算解为

$$\bar{\mathbf{x}} = (-0.4000, -0.09980, 0.4000)^T$$

■ 显然，计算解 $\bar{\mathbf{x}}$ 是一个很坏的结果，不能作为方程组的近似解

■ 原因是在消元计算时用了小主元0.001，使得约化后的方程组元素数量级大大增长



例7.3 (续)

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 0 & 5.000 & 2.000 \end{array} \right]$$

- 经再舍入使得在计算第3行第3列的元素时发生了严重的相消情况（第3行第3列的元素舍入到第四位数字的正确值是5.922）

2. 交换行，避免绝对值小的主元作除数

(A , b)

$$\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_3} \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \end{array} \right] \quad \begin{array}{l} m_{21} = 0.5000 \\ m_{31} = -0.0005 \end{array}$$

$$\mathbf{x}^* = (-0.4904, -0.05104, 0.3675)^T$$



例7.3 (续)

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 2.001 & 3.003 & 1.002 \end{array} \right] m_{32} = 0.6300$$

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 0 & 1.868 & 0.6870 \end{array} \right]$$

■ 得计算解为

$$\mathbf{x} = (-0.4900, -0.05113, 0.3678)^T \approx \mathbf{x}^*$$

□ 在采用Gauss消去法解方程组时，小主元可能产生麻烦，故应避免采用绝对值小的主元素 $a_{kk}^{(k)}$



完全主元素消去法

- 对一般矩阵来说，最好每一步都选取系数矩阵（或消元后的低阶矩阵）中绝对值最大的元素作为主元素，以使Gauss消去法具有较好的数值稳定性
- 设方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的增广矩阵为

$$\mathbf{B} = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1j_1} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2j_1} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{i_1 1} & a_{i_1 2} & \cdots & a_{i_1 j_1} & \cdots & a_{i_1 n} & b_{i_1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nj_1} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right]$$



完全主元素消去法（续）

1. 首先在 $\mathbf{A}$ 中选取绝对值最大的元素作为主元素，例如 $|a_{i_1 j_1}| = \max_{1 \leq i, j \leq n} |a_{ij}| \neq 0$ ，然后交换 $\mathbf{B}$ 的第1行与第 i_1 行，第1列与第 j_1 列，经第一次消元计算得 $(\mathbf{A}, \mathbf{b}) \rightarrow (\mathbf{A}^{(2)}, \mathbf{b}^{(2)})$
2. 重复上述过程，设已完成第 $k-1$ 步的选主元素、交换两行及交换两列、消元计算， $(\mathbf{A}, \mathbf{b})$ 约化为

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



完全主元素消去法（续）

3. 第 k 步选主元素（在 $\mathbf{A}^{(k)}$ 右下角方框内选），即确定 i_k, j_k 使

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

交换 $(\mathbf{A}^{(k)}, \mathbf{b}^{(k)})$ 第 k 行与 i_k 行元素，交换 $(\mathbf{A}^{(k)})$ 第 k 列与 j_k 列元素，将 $a_{i_k j_k}$ 调到 (k, k) 位置，再进行消元计算

4. 持续上述过程，最后将原方程组化为



完全主元素消去法（续）

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

其中 $y_1, y_2, \dots, y_n$ 的次序为未知数 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 调换后的次序

□ 回代求解得

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



算法1 完全主元素消去法

- 消元结果冲掉 $\mathbf{A}$ ，乘数 m_{ij} 冲掉 a_{ij} ，计算结果 $\mathbf{x}$ 冲掉常数项 $\mathbf{b}$ ，使用整型数组 $\text{Iz}(n)$ 记录未知数 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的次序（下标）， k 表示消元次数
1. 对于 $i = 1, 2, \dots, n$ ，有 $\text{Iz}(i) \leftarrow i$ ；
对于 $k = 1, \dots, n - 1$ ，做到步6
 2. 选主元素 $|a_{i_k j_k}| = \max_{k \leq i, j \leq n} |a_{ij}|$
 3. 如果 $a_{i_k j_k} = 0$ ，则计算停止（这时 $\det \mathbf{A} = 0$ ）
 4. （1）如果 $i_k = k$ ，则转（2）；否则换行： $a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j}$ ($j = k, k + 1, \dots, n$)， $b_k \leftrightarrow b_{i_k}$
（2）如果 $j_k = k$ ，则转步5；否则换列： $a_{ik} \leftrightarrow a_{ij_k}$ ($i = 1, 2, \dots, n$)， $\text{Iz}(k) \leftrightarrow \text{Iz}(j_k)$



算法1 完全主元素消去法（续）

5. 计算乘数

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

6. 消元计算

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

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

7. 回代求解

$$(1) \quad b_n \leftarrow b_n/a_{nn}$$

$$(2) \quad \text{对 } i = n - 1, \dots, 1, \quad b_i \leftarrow (b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}b_j)/a_{ii}$$

8. 调整未知数的次序

$$(1) \quad \text{对 } i = 1, \dots, n, \quad a_{1, \text{Iz}(i)} \leftarrow b_i$$

$$(2) \quad \text{对 } i = 1, \dots, n, \quad b_i \leftarrow a_{1i}$$



列主元素消去法

- 完全主元素消去法在选主元素时要花费较多机器时间，而列主元素消去法仅考虑依次按列选主元素，然后换行使之变到主元位置上，再进行消元
- 设用列主元素消去法解 $Ax = b$ 已完成 $k - 1$ 步计算

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



列主元素消去法（续）

- 第 k 步选主元素（在 $\mathbf{A}^{(k)}$ 第 k 列方框内选），即确定 i_k 使

$$|a_{i_k, k}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$$

交换 $(\mathbf{A}^{(k)}, \mathbf{b}^{(k)})$ 第 k 行与 i_k 行元素，再进行消元计算

- 其余步骤与完全主元素消去法相同

□ 例7.3的方法2用的就是列主元素消去法



算法2 列主元素消去法

□ 消元结果冲掉 $\mathbf{A}$ ，乘数 m_{ij} 冲掉 a_{ij} ，计算结果 $\mathbf{x}$ 冲掉常数项 $\mathbf{b}$ ，行列式存放在 $\det \mathbf{A}$ ， k 表示消元次数

1. $\det \mathbf{A} \leftarrow 1$ ，对于 $k = 1, \dots, n - 1$ ，做到步7

2. 按列选主元素 $|a_{i_k k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|$

3. 如果 $a_{i_k k} = 0$ ，则 $\det \mathbf{A} \leftarrow 0$ ，计算停止

4. 如果 $i_k = k$ ，则转步5；否则换行

$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j} \ (j = k, k + 1, \dots, n), \ b_k \leftrightarrow b_{i_k}, \ \det \mathbf{A} \leftarrow -\det \mathbf{A}$



算法2 列主元素消去法（续）

5. 计算乘数 m_{ik}

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

6. 消元计算

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

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

7. $\det A \leftarrow a_{kk} \det A$

8. 回代求解

$$b_n \leftarrow b_n/a_{nn}$$

$$b_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}b_j \right) / a_{ii} \quad (i = n - 1, n - 2, \dots, 1)$$

9. $\det A \leftarrow a_{nn} \det A$



矩阵描述

□ 下面用矩阵运算来描述列主元素消去法

$$\begin{cases} L_1 I_{1i_1} A^{(1)} = A^{(2)}, & L_1 I_{1i_1} b^{(1)} = b^{(2)} \\ L_k I_{ki_k} A^{(k)} = A^{(k+1)}, & L_k I_{ki_k} b^{(k)} = b^{(k+1)} \end{cases} \quad (7.3.1)$$

- L_k 的元素满足 $|m_{ik}| \leq 1$ ($k = 1, 2, \dots, n-1$)
- I_{ki_k} 是初等排列矩阵 (由交换单位矩阵 I 的第 k 行和第 i_k 行得到)

□ 利用式(7.3.1)得到

$$L_{n-1} I_{n-1, i_{n-1}} \cdots L_2 I_{2i_2} L_1 I_{1i_1} A = A^{(n)} = U$$

- U 为列主元素消去法得到的上三角矩阵



矩阵描述（续）

■ 上式简记为

$$\tilde{P}A = U, \quad \tilde{P}b = b^{(n)}$$

其中 $\tilde{P} = L_{n-1}I_{n-1,i_{n-1}} \cdots L_2I_{2i_2}L_1I_{1i_1}$

□ $n = 4$ 时

$$\begin{aligned} U &= A^{(4)} = L_3I_{3i_3}L_2I_{2i_2}L_1I_{1i_1}A \\ &= L_3(I_{3i_3}L_2I_{3i_3})(I_{3i_3}I_{2i_2}L_1I_{2i_2}I_{3i_3})(I_{3i_3}I_{2i_2}I_{1i_1})A \\ &\equiv \tilde{L}_3\tilde{L}_2\tilde{L}_1PA \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} \tilde{L}_1 &= I_{3i_3}I_{2i_2}L_1I_{2i_2}I_{3i_3}, & \tilde{L}_2 &= I_{3i_3}L_2I_{3i_3}, \\ \tilde{L}_3 &= L_3, & P &= I_{3i_3}I_{2i_2}I_{1i_1} \end{aligned}$$



矩阵描述（续）

$$U = \tilde{L}_3 \tilde{L}_2 \tilde{L}_1 P A$$

- 可以证明， $\tilde{L}_k$ ($k = 1, 2, 3$) 亦为单位下三角阵，其元素的绝对值不大于1

- 记
$$L^{-1} = \tilde{L}_3 \tilde{L}_2 \tilde{L}_1$$

由上式可得
$$P A = L U$$

其中 P 为排列矩阵， L 为单位下三角阵， U 为上三角阵

- 说明对 $Ax = b$ 应用列主元素消去法相当于对 $(A|b)$ 先进行一系列行交换后再对 $PAx = Pb$ 应用 Gauss 消去法



矩阵描述（续）

- 定理**7.5**（列主元素的三角分解定理）如果 $\mathbf{A}$ 为非奇异矩阵，则存在排列矩阵 $\mathbf{P}$ ，使

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LU},$$

其中 $\mathbf{L}$ 为单位下三角阵， $\mathbf{U}$ 为上三角阵

- 不再假设 $\mathbf{A}$ 的顺序主子式 $D_i \neq 0$
- 在算法2“列主元素消去法”中
 - $\mathbf{L}$ 元素存放在数组 $\mathbf{A}$ 的下三角部分
 - $\mathbf{U}$ 元素存放在 $\mathbf{A}$ 的上三角部分
 - 额外引入整型数组 $\text{Ip}(n)$ ，可以记录 $\mathbf{P}$ 的情况



Gauss-Jordan消去法

□ Gauss消去法始终是消去对角线下方的元素，现考虑一种消去对角线下方和上方元素的方法，称为Gauss-Jordan消去法

■ 设用Gauss-Jordan消去法已完成 $k-1$ 步，于是 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 化为等价方程组 $A^{(k)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k)}$ ，其中

$$(A^{(k)}, \mathbf{b}^{(k)}) = \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & & & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & | & b_1 \\ & 1 & & \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ & & & 1 & a_{k-1,k} & \cdots & a_{k-1,n} & | & \vdots \\ & & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & | & b_k \\ & & & & \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ & & & & a_{nk} & \cdots & a_{nn} & | & b_n \end{array} \right]$$



Gauss-Jordan消去法（续）

□ 第 k 步计算时，考虑对上述矩阵的第 k 行上、下都进行消元计算

1. 按列选主元素，即确定 i_k 使 $|a_{i_k k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|$
2. 换行（当 $i_k \neq k$ ）交换 (A, b) 第 k 行与第 i_k 行元素
3. 计算乘数 $m_{ik} = -a_{ik}/a_{kk}$ ($i = 1, 2, \dots, n; i \neq k$)

$$m_{kk} = 1/a_{kk}$$

（ m_{ik} 可保存在存放 a_{ik} 的单元中）



Gauss-Jordan消去法 (续)

4. 消元计算

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} + m_{ik}a_{kj} \quad \left(\begin{array}{l} i = 1, 2, \dots, n; i \neq k; \\ j = k + 1, \dots, n \end{array} \right),$$

$$b_i \leftarrow b_i + m_{ik}b_k \quad (i = 1, 2, \dots, n; i \neq k)$$

5. 计算主行

$$a_{kj} \leftarrow a_{kj} \cdot m_{kk} \quad (j = k, k + 1, \dots, n),$$

$$b_k \leftarrow b_k \cdot m_{kk}$$

□ 上述过程结束后, 有

$$(A, \mathbf{b}) \rightarrow (A^{(k+1)}, \mathbf{b}^{(k+1)}) \rightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & & & & \hat{b}_1 \\ & 1 & & & \hat{b}_2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & 1 & \hat{b}_n \end{array} \right]$$



Gauss-Jordan消去法（续）

- 说明用Gauss-Jordan消去法将 A 约化为单位矩阵，计算解就在常数项位置得到，因此用不着回代求解
 - 该方法的计算量大约需要 $n^3/2$ 次乘除法运算，比Gauss消去法计算量大
 - 用Gauss-Jordan消去法求一个矩阵的逆矩阵还是比较合适的
- Gauss消去法计算量

$$MD = n^3/3 + n^2 - n/3$$

$$AS = n(n-1)(2n+5)/6$$



Gauss-Jordan消去法（续）

□ 定理7.6（Gauss-Jordan消去法求逆矩阵）

设 A 为非奇异矩阵，方程组 $AX = I_n$ 的增广矩阵为 $C = (A|I_n)$ 。如果对 C 应用Gauss-Jordan消去法为 $(I_n|T)$ ，则 $A^{-1} = T$

□ 事实上，求 A 的逆矩阵 A^{-1} ，即求 n 阶矩阵 X ，使 $AX = I_n$ ，其中 I_n 为单位矩阵

- 将 X 按列分块 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $I = (e_1, e_2, \dots, e_n)$
- 求解 $AX = I_n$ 等价于求解 n 个方程组 $Ax_j = e_j$ ($j = 1, 2, \dots, n$)
- 因此可用Gauss-Jordan消去法求解 $AX = I_n$



例7.4

□ 用Gauss-Jordan消去法求

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 6 \end{bmatrix}$$

的逆矩阵 A^{-1}

■ 应用Gauss-Jordan消去法，按列选主元素

$$C = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 5 & 0 & 1 & 0 \\ \boxed{3} & 5 & 6 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_3} \left[\begin{array}{ccc|ccc} \boxed{3} & 5 & 6 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 4 & 5 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right]$$



例7.4 (续)

$$\xrightarrow{\text{第一次消元}} \left[\begin{array}{ccc|cc} 1 & 5/3 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2/3 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1/3 & 1 & 1 & 0 \end{array} \right]$$

$\mathbf{c}_3$

$$\xrightarrow{\text{第二次消元}} \left[\begin{array}{ccc|cc} 1 & 0 & -1/2 & 0 & -5/2 \\ 0 & 1 & 3/2 & 0 & 3/2 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1 & -1/2 \end{array} \right]$$

$\mathbf{c}_2$

$$\xrightarrow{\text{第三次消元}} \left[\begin{array}{ccc|cc} 1 & 0 & 0 & 1 & -3 \\ 0 & 1 & 0 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -1 \end{array} \right] = (\mathbf{I}_n | \mathbf{A}^{-1})$$

$\mathbf{c}_1$



例7.4（续）

- 小红框内为每次按列所选的主元素，且蓝框内

$$\mathbf{m}_1 = (m_{11}, m_{21}, m_{31})^T = \mathbf{c}_3$$

$$\mathbf{m}_2 = (m_{12}, m_{22}, m_{32})^T = \mathbf{c}_2$$

$$\mathbf{m}_3 = (m_{13}, m_{23}, m_{33})^T = \mathbf{c}_1$$

- 为了节省内存单元，不必将单位矩阵存放起来， $\mathbf{c}_3$ 存放在 $\mathbf{A}$ 的第1列位置， $\mathbf{c}_2$ 存放在 $\mathbf{A}$ 的第2列位置， $\mathbf{c}_1$ 存放在 $\mathbf{A}$ 的第3列位置
- 第 k 步消元时候，由 $\mathbf{A}$ 的第 k 列

$$\mathbf{a}_k = (a_{1k}, \dots, a_{kk}, \dots, a_{nk})^T$$

计算 $\mathbf{m}_k = (-a_{1k}/a_{kk}, \dots, 1/a_{kk}, \dots, -a_{nk}/a_{kk})^T$
且冲掉 $\mathbf{a}_k$



例7.4（续）

- 经消元计算，最后再调整一下列就可在 **A** 的位置得到 **A^{-1}**

□ 最后，在 **A** 位置如何调整列呢？

- 事实上，在 **A** 位置最后得到矩阵 **$PA \equiv A_1$** （其中 **P** 为排列矩阵）的逆矩阵 **A_1^{-1}**
- 于是 **$A^{-1} = (P^{-1}A_1)^{-1} = A_1^{-1}P$**
 - ✓ 意味着需要交换列

算法3

Gauss-Jordan列主元素方法求逆



□ 计算结果 $\mathbf{A}^{-1}$ 存放在原矩阵 $\mathbf{A}$ 的数组中，用整型数组 $\text{Ip}(n)$ 记录主行， $\mathbf{A}$ 的行列式存放在 $\det \mathbf{A}$ ， k 表示消元次数

1. $\det \mathbf{A} \leftarrow 1$ ，对于 $k = 1, \dots, n - 1$ ，做到步8

2. 按列选主元素 $|a_{i_k k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|$
 $c_0 \leftarrow a_{i_k k}$, $\text{Ip}(k) \leftarrow i_k$

与算法1中 $\text{Iz}(\cdot)$ 的记录方式不一样
(只是逐步记录)

3. 如果 $c_0 = 0$ ，则计算停止（此时 $\mathbf{A}$ 为奇异矩阵）

4. 如果 $i_k = k$ ，则转步5； 否则换行：

$$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j} \quad (j = k, k + 1, \dots, n), \quad \det \mathbf{A} \leftarrow -\det \mathbf{A}$$

算法3

Gauss-Jordan列主元素方法求逆



5. $\det A \leftarrow \det A \cdot c_0$
6. 计算 $h \leftarrow a_{kk} \leftarrow 1/c_0$,
 $a_{ik} \leftarrow m_{ik} = -a_{ik} \cdot h (i = 1, 2, \dots, n; i \neq k)$
7. 消元计算 $a_{ij} \leftarrow a_{ij} + m_{ik} a_{kj} \left(\begin{matrix} i = 1, 2, \dots, n; i \neq k \\ j = 1, 2, \dots, n; j \neq k \end{matrix} \right)$
8. 计算主行 $a_{kj} \leftarrow a_{kj} \cdot h (j = 1, 2, \dots, n; j \neq k)$
9. 交换列对于 $k = n - 1, n - 2, \dots, 2, 1$ 反向执行列交换
 - (1) $t = \text{Ip}(k)$
 - (2) 如果 $t \leq k$, 则转 (3); 否则换列 $a_{ik} \leftrightarrow a_{it} (i = 1, 2, \dots, n)$ 避免重复交换
 - (3) 继续循环



目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析



Guass消去法的变形

□ Gauss消去法有很多变形

- 有的是Gauss消去法的改进、改写
- 有的是用于某一类特殊性质矩阵的简化

□ 直接三角分解法

- 将Gauss消去法改写为紧凑形式，可以直接从矩阵 $\mathbf{A}$ 的元素得到计算 $\mathbf{L}$, $\mathbf{U}$ 元素的递推公式，而不需任何中间步骤，这就是所谓直接三角分解法
- 一旦实现了矩阵 $\mathbf{A}$ 的LU分解，那么求解式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的问题就等价于以下两个三角方程组
$$\underbrace{\mathbf{L}}_{\mathbf{y}} \mathbf{Ux} = \mathbf{b}$$
 - (1) $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$, 求 $\mathbf{y}$;
 - (2) $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$, 求 $\mathbf{x}$.



不选主元的三角分解法

□ 设 A 为非奇异矩阵，且有分解式 $A = LU$ ，其中 L 为单位下三角阵， U 为上三角阵，即

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}}_U \quad (7.4.1)$$

■ 下面说明 L, U 的元素可以由 n 步直接计算定出，其中第 r 步定出 U 的第 r 行和 L 的第 r 列元素



不选主元的三角分解法（续）

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \quad (7.4.1)$$

- 由式(7.4.1)，考虑 **A 的第1行**元素

$$a_{1i} = u_{1i} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

于是得 **U 的第1行**元素 $u_{1i} \ (i = 1, 2, \dots, n)$

- 此外，考虑 **A 的第1列**元素

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

于是得 **L 的第1列**元素 $l_{i1} \ (i = 2, \dots, n)$



不选主元的三角分解法（续）

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \quad (7.4.1)$$

- 设已定出 U 的第1行到第 $r-1$ 行元素与 L 的第1列到第 $r-1$ 列元素
- 由式(7.4.1)，考虑 A 的第 r 行元素

$$a_{ri} = \sum_{k=1}^n l_{rk} u_{ki} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki} + u_{ri} \quad (\text{当 } k > r, l_{rk} = 0)$$

- ✓ L 的第 r 行乘 U 的第 i 列, $i = r, r+1, \dots, n$



不选主元的三角分解法（续）

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{nl} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \quad (7.4.1)$$

- 设已定出 U 的第1行到第 $r-1$ 行元素与 L 的第1列到第 $r-1$ 列元素
- 由式(7.4.1)，考虑 A 的第 r 行元素

$$a_{ri} = \sum_{k=1}^n l_{rk} u_{ki} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki} + u_{ri} \quad (\text{当 } k > r, l_{rk} = 0)$$

于是得 U 的第 r 行元素

$$u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki} \quad (i = r, r+1, \cdots, n)$$



不选主元的三角分解法（续）

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \quad (7.4.1)$$

■ 设已定出 U 的第1行到第 $r-1$ 行元素与 L 的第1列到第 $r-1$ 列元素

■ 由式(7.4.1)，考虑 A 的第 r 列元素

$$a_{ir} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kr} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} + l_{ir} u_{rr} \quad (\text{当 } k > r, u_{kr} = 0)$$

✓ L 的第 i 行乘 U 的第 r 列, $i = r+1, r+2, \dots, n$



不选主元的三角分解法（续）

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \quad (7.4.1)$$

- 设已定出 U 的第1行到第 $r-1$ 行元素与 L 的第1列到第 $r-1$ 列元素
- 由式(7.4.1)，考虑 A 的第 r 列元素

$$a_{ir} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kr} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} + l_{ir} u_{rr} \quad (\text{当 } k > r, u_{kr} = 0)$$

于是得 L 的第 r 列元素

$$l_{ir} = \left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} \right) / u_{rr} \quad (i = r+1, \cdots, n)$$



用直接三角分解法解 $Ax = b$

1. 计算 U 的第1行和 L 的第1列元素

$$u_{1i} = a_{1i} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$l_{i1} = a_{i1} / u_{11} \quad (i = 2, 3, \dots, n)$$

■ 按照 $r = 2, 3, \dots, n$, 重复下面步骤

2. 计算 U 的第 r 行元素

$$u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki} \quad (i = r, r+1, \dots, n) \quad (7.4.2)$$

3. 计算 L 的第 r 列元素

$$l_{ir} = \left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} \right) / u_{rr} \quad (i = r+1, \dots, n) \quad (7.4.3)$$



用直接三角分解法解 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ (续)

4. 求解 $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \quad (i = 2, 3, \dots, n) \end{cases} \quad (7.4.4)$$

5. 求解 $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$

$$\begin{cases} x_n = y_n / u_{nn} \\ x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik} x_k \right) / u_{ii} \quad (i = n-1, n-2, \dots, 1) \end{cases} \quad (7.4.5)$$



例7.5

□ 用直接三角分解法解

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14 \\ 18 \\ 20 \end{bmatrix}$$

- 根据前面步骤2和步骤3, 得到

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & -24 \end{bmatrix} = LU$$

- 根据步骤4求解方程

$$Ly = (14, 18, 20)^T$$

得到

$$y = (14, -10, -72)^T$$



例7.5（续）

□ 用直接三角分解法解

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14 \\ 18 \\ 20 \end{bmatrix}$$

- 根据前面步骤2和步骤3，得到

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & -24 \end{bmatrix} = LU$$

- 根据步骤5求解方程

$$Ux = (14, -10, -72)^T$$

得到

$$x = (1, 2, 3)^T$$



讨论

- 在用计算机计算时，由于计算好 u_{ri} 后 a_{ri} 就不用了，因此计算好 L, U 的元素后就存放在 A 的相应位置

■ 例如

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & u_{34} \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & u_{44} \end{bmatrix}$$

最后在存放 A 的数组中得到 L, U 的元素

- 由直接三角分解计算公式，需要计算形如 $\sum a_i b_i$ 的式子，可采用“双精度累加”，以提高精度



讨论（续）

- 直接分解法大约需要 $n^3/3$ 次乘、除法运算，和Gauss消去法的计算量基本相同
- 如果已经实现了 $A = LU$ 的分解计算，且 L, U 保存在 A 的相应位置，则用直接三角分解法解具有相同系数的方程组 $Ax = (b_1, b_2, \dots, b_m)$ 是相当方便的
 - 每解一个方程组 $Ax = b_j$ 仅需要增加 n^2 次乘除法运算
- 矩阵 A 的分解公式(7.4.2)、(7.4.3)又称为Doolittle分解公式



选主元的三角分解法

- 从直接三角分解公式看出，当 $u_{rr} = 0$ 时计算将中断或者当 u_{rr} 绝对值很小时，按分解公式计算可能引起舍入误差的累积
- 如果 $\mathbf{A}$ 非奇异，就可以通过交换 $\mathbf{A}$ 的行实现矩阵 $\mathbf{PA}$ 的LU分解，因此可采用与列主元素消去法类似的方法，将直接三角分解法修改为（部分）选主元的三角分解法
 - 可证明下述方法与列主元素消去法等价



选主元的三角分解法

□ 设第 $r-1$ 步分解已完成, 这时有

$$A \rightarrow \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & & & & & \vdots \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & u_{r-1,r-1} & \cdots & \cdots & u_{r-1,n} \\ \vdots & & & l_{r,r-1} & a_{rr} & \cdots & a_{rn} \\ \vdots & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,r-1} & a_{nr} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

■ 第 r 步分解需用到式(7.4.2)及式(7.4.3)



选主元的三角分解法（续）

$$u_{ri} = \left(a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki} \right) \quad (i = r, r+1, \dots, n) \quad (7.4.2)$$

$$l_{ir} = \left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} \right) / u_{rr} \quad (i = r+1, \dots, n) \quad (7.4.3)$$

■ 引进量

$$s_i = a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} \quad (i = r, r+1, \dots, n)$$

■ 显然

$$u_{rr} = s_r$$

$$l_{ir} = s_i / s_r \quad (i = r+1, \dots, n)$$



选主元的三角分解法（续）

- 为了避免用小的数 u_{rr} 作除数，选主元

$$\max_{r \leq i \leq n} |s_i| = |s_{i_r}|$$

- 用 s_{i_r} 作为 u_{rr} ，交换 $\mathbf{A}$ 的 r 行与 i_r 行元素（将 (i, j) 位置的新元素仍记作 l_{ij} 及 a_{ij} ），由此再进行第 r 步分解计算

- 通过这样的变换，可保证

$$|l_{ir}| = \left| \frac{s_i}{s_r} \right| \leq 1 \quad (i = r + 1, \dots, n)$$



算法4 选主元的三角分解法

□ 用 $\mathbf{PA} = \mathbf{I}_{n-1, i_{n-1}} \cdots \mathbf{I}_{1, i_1} \mathbf{A}$ 的三角分解冲掉 $\mathbf{A}$,
用 $\text{Ip}(n)$ 记录主行, 解 $\mathbf{x}$ 存放在 $\mathbf{b}$ 内, r 表示消
元次数

■ 对于 $r = 1, 2, \dots, n$, 做到步4

1. 计算 s_i

$$a_{ir} \leftarrow s_i = a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} \quad (i = r, r+1, \dots, n)$$

2. 选主元

$$|s_{i_r}| = \max_{r \leq i \leq n} |s_i|, \quad \text{Ip}(r) \leftarrow i_r$$

与算法3一样

3. 交换 $\mathbf{A}$ 的 r 行与 i_r 行元素

$$a_{ri} \leftrightarrow a_{i_r i} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$



算法4 选主元的三角分解法（续）

4. 计算 $\mathbf{U}$ 的第 r 行元素， $\mathbf{L}$ 的第 r 列元素

$$a_{rr} = u_{rr} = s_r$$

$$a_{ir} \leftarrow l_{ir} = s_i / u_{rr} = a_{ir} / a_{rr} \quad (i = r + 1, \dots, n)$$

$$a_{ri} \leftarrow u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki} \quad (i = r + 1, \dots, n)$$

这时有 $|l_{ir}| \leq 1$

□ 上述计算过程完成后就实现了 PA 的LU分解，且 $\mathbf{U}$ 保存在 $\mathbf{A}$ 上三角部分， $\mathbf{L}$ 保存在 $\mathbf{A}$ 的下三角部分，排列阵 $\mathbf{P}$ 由 $\text{Ip}(n)$ 最后记录可知



算法4 选主元的三角分解法（续）

5. $i = 1, 2, \dots, n - 1$

(1) $t \leftarrow \text{Ip}(i)$

(2) 如果 $i = t$ ，则转 (3)；否则 $b_i \leftrightarrow b_t$

(3) 继续循环

计算 Pb ，对 b 顺序执行前面的换行操作

6. 求解 $Ly = Pb$

$$b_i \leftarrow b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} b_k \quad (i = 2, 3, \dots, n)$$

7. 求解 $Ux = y$

$$b_n \leftarrow b_n / u_{nn}$$

$$b_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik} b_k \right) / u_{ii} \quad (i = n - 1, \dots, 1)$$



矩阵求逆

□ 利用算法4的结果，可计算***A***的逆矩阵

$$PA = LU$$

$$\Rightarrow A^{-1} = (P^{-1}LU)^{-1} = U^{-1}L^{-1}P$$

□ 利用***PA***的三角分解计算***A*⁻¹**步骤

1. 计算上三角阵的逆矩阵***U*⁻¹**
 2. 计算***U*⁻¹*L*⁻¹**
 3. 交换***U*⁻¹*L*⁻¹**列（利用 *Ip*(*n*) 最后记录）
- 上述方法求***A*⁻¹**大约需要*n*³次乘法运算



平方根法

- 考虑系数矩阵是**对称正定的**
- 平方根法：利用对称正定矩阵的三角分解而得到的求解对称正定方程组的一种有效方法
 - 在计算机上广泛应用平方根法解此类方程组
- 设 **A** 为对称矩阵，且 **A** 的所有顺序主子式均不为零，由定理**7.3**知， **A** 可唯一分解为

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \quad (7.4.1)$$



对称矩阵的三角分解

□ 为了利用**A**的对称性，将**U**再分解

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \frac{u_{n-1,n}}{u_{n-1,n-1}} \\ & & & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{D}\mathbf{U}_0$$

■ **D**为对角阵，**U**₀为单位上三角阵

■ 因此 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{U}_0$

■ 此外 $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T = \mathbf{U}_0^T(\mathbf{D}\mathbf{L}^T)$

■ 根据定理7.3中分解的唯一性，可知

$$\mathbf{U}_0^T = \mathbf{L} \Rightarrow \mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T$$



对称矩阵的三角分解（续）

- **定理7.7**（对称阵的三角分解定理）设 $\mathbf{A}$ 为 n 阶对称阵，且 $\mathbf{A}$ 的所有顺序主子式均不为零，则 $\mathbf{A}$ 可唯一分解为

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T$$

其中 $\mathbf{L}$ 为单位下三角阵， $\mathbf{D}$ 为对角阵

- 接下来考虑 $\mathbf{A}$ 为对称**正定**矩阵的情况，重温7.2节的引理（需要用到证明的中间结论）
- 引理 约化的主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$) 的充要条件是矩阵 $\mathbf{A}$ 的顺序主子式 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$)



对称矩阵的三角分解（续）

□ 现设 $\mathbf{A}$ 为对称正定矩阵，首先说明 $\mathbf{A}$ 的分解式 $\mathbf{A} = \mathbf{LDL}^T$ 中 $\mathbf{D}$ 的对角元素 d_i 均为正数

- $\mathbf{A}$ 为对称正定矩阵，那么 $\mathbf{A}$ 的顺序主子式 $D_k > 0$ ($k = 1, 2, \dots, n-1$)
- 由7.2节的引理证明过程可知，

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} \cdots a_{kk}^{(k)} = d_1 \cdots d_k$$

■ 因此

$$d_1 = D_1 > 0 \quad d_i = \frac{D_i}{D_{i-1}} > 0 \quad (i = 2, 3, \dots, n)$$



对称矩阵的三角分解（续）

■ 根据 **D** 的非负性

$$D = \begin{bmatrix} d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{d_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{d_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{d_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{d_n} \end{bmatrix} = D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}}$$

■ 结合定理7.7得到

$$A = LDL^T = LD^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} L^T = (LD^{\frac{1}{2}})(LD^{\frac{1}{2}})^T = L_1 L_1^T$$

其中 $L_1 = LD^{\frac{1}{2}}$ 为下三角阵

□ **定理7.8**（对称正定矩阵的三角分解） 如果 **A** 为 **n** 阶对称正定矩阵，则存在一个实的非奇异下三角阵 **L** 使 **$A = LL^T$** ，当限定 **L** 的对角元素为正时，这种分解是唯一的



计算对称正定矩阵的三角分解

□ 下面用直接分解方法来确定计算***L***元素的递推公式

■ 由于

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

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



计算对称正定矩阵的三角分解（续）

- 考虑下三角元素，即 a_{ij} ($i \geq j$)，根据矩阵乘法

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} + l_{jj} l_{ij}$$

其中第二个等号由于 $l_{jk} = 0$ ($j < k$)

- 依据上式，可以逐列计算矩阵 L 的元素

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} l_{jj} &= (a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2)^{\frac{1}{2}} \quad (7.4.7) \\ l_{ij} &= (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}) / l_{jj} \end{aligned}$$



平方根法计算公式

□ 解对称正定方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的平方根法计算公式

■ 对于 $j = 1, 2, \dots, n$

1. 计算 l_{jj}

$$l_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

2. 按列计算 l_{ij}

$$l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right) / l_{jj}, \quad i = j + 1, \dots, n$$



平方根法计算公式（续）

□ 对于方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ，如果对系数矩阵进行了分解 $\mathbf{A} = \mathbf{LL}^T$ ，则变为求解两个三角方程组

3. 求解 $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$

$$y_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \right) / l_{ii} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

4. 求解 $\mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$

$$x_i = \left(b_i - \sum_{k=i+1}^n l_{ki} x_k \right) / l_{ii} \quad i = n, n-1, \dots, 1$$



数值稳定性

□ 根据前的推导

$$l_{jj} = (a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow a_{jj} = \sum_{k=1}^j l_{jk}^2, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

□ 因此

$$l_{jk}^2 \leq a_{jj} \leq \max_{1 \leq j \leq n} a_{jj} \Rightarrow \max_{j,k} l_{jk}^2 \leq \max_{1 \leq j \leq n} a_{jj}$$

□ 上面分析说明，分解过程中元素 l_{jk} 的数量级不会增长且对角元素 l_{jj} 恒为正数，于是不选主元素的平方根法是一个数值稳定的方法



时空复杂度

- 当求出 $\mathbf{L}$ 的第 j 列元素时， $\mathbf{L}^T$ 的第 j 行元素亦就算出，所以平方根法约需 $\frac{n^3}{6}$ 次乘除法运算，大约为一般直接LU分解法计算量的一半
- 由于 $\mathbf{A}$ 为对称阵，因此在用计算机计算时只需存储 $\mathbf{A}$ 的下三角部分，共需要存储 $\frac{n(n+1)}{2}$ 个元素，可用一维数组存放
- $\mathbf{L}$ 的元素存放在 $\mathbf{A}$ 的相应位置



避免开方的分解

- 根据 $l_{jj} = (a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2)^{\frac{1}{2}}$ 可知平方根法需要用到开方运算
- 为了避免开方运算，下面用定理7.7的分解式

$$A = LDL^T$$
$$= \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$



避免开方的分解（续）

- 考虑下三角元素，即 a_{ij} ($i \geq j$)，根据矩阵乘法

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n (\mathbf{LD})_{ik} (\mathbf{L}^T)_{kj} = \sum_{k=1}^n l_{ik} d_k l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} + l_{ij} d_j$$

其中第二个等号由于 $l_{jk} = 0$ ($j < k$)、 $l_{jj} = 1$

- 依据上式，可以逐行计算矩阵 $\mathbf{L}$ 的元素

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} \right) / d_j$$

$(j = 1, 2, \dots, i-1)$



避免开方的分解（续）

- 考虑下三角元素，即 a_{ij} ($i \geq j$)，根据矩阵乘法

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n (\mathbf{LD})_{ik} (\mathbf{L}^T)_{kj} = \sum_{k=1}^n l_{ik} d_k l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} + l_{ij} d_j$$

其中第二个等号由于 $l_{jk} = 0$ ($j < k$)、 $l_{jj} = 1$

- 依据上式，可以得到 $\mathbf{D}$ 的对角元素公式

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} \quad d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_k$$



改进的平方根法计算公式

□ 为避免重复计算，令 $t_{ij} = l_{ij}d_j$ ，根据上页得到以下按行计算 $\mathbf{L}$, $\mathbf{T}$ 元素的公式

■ 对于 $i = 1, 2, \dots, n$

1. 按行计算 t_{ij}

$$t_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} t_{ik} l_{jk} \quad j = 1, 2, \dots, i-1$$

2. 按行计算 l_{ij}

$$l_{ij} = t_{ij} / d_j \quad j = 1, 2, \dots, i-1$$

3. 计算 d_i

$$d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ik} l_{ik}$$



改进的平方根法计算公式（续）

□ 为了节省空间

- 在计算出 $\mathbf{T} = \mathbf{LD}$ 的第 i 行元素 t_{ij} ($j = 1, 2, \dots, i - 1$) 后，存放在 $\mathbf{A}$ 的第 i 行相应位置
- 然后再计算 $\mathbf{L}$ 的第 i 行元素，存放在 $\mathbf{A}$ 的第 i 行
- $\mathbf{D}$ 的对角元素存放在 $\mathbf{A}$ 的相应位置

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & a_{41} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & a_{42} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{43} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ l_{21} & d_2 & & \\ l_{31} & l_{32} & d_3 & \\ \color{red}{t_{41}} & \color{red}{t_{42}} & \color{red}{t_{43}} & \color{red}{t_{44}} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ l_{21} & d_2 & & \\ l_{31} & l_{32} & d_3 & \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & d_4 \end{bmatrix}$$

- ### □ 对称正定矩阵 $\mathbf{A}$ 按 $\mathbf{LDL}^T$ 分解和按 $\mathbf{LL}^T$ 分解计算量差不多，但 $\mathbf{LDL}^T$ 分解不需要开方计算



改进的平方根法计算公式（续）

□ 对于方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ，如果对系数矩阵进行了分解 $\mathbf{A} = \mathbf{LDL}^T$ ，则变为求解两个三角方程组

4. 求解 $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \quad i = 2, \dots, n \end{cases}$$

5. 求解 $\mathbf{DL}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$

$$\begin{cases} x_n = y_n / d_n \\ x_i = y_i / d_i - \sum_{k=i+1}^n l_{ki} x_k \quad i = n-1, \dots, 2, 1 \end{cases}$$



对角占优的三对角方程组

- 在一些实际问题中，例如船体数学放样中建立三次样条函数，都会要求解系数矩阵为对角占优的三对角方程组

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix}$$

简记作

$$Ax = f \quad (7.4.12)$$



对角占优的三对角方程组（续）

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}$$

□ **A**满足对角占优条件

1. $|b_1| > |c_1| > 0$
2. $|b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \quad a_i, c_i \neq 0 \quad (i = 2, \dots, n-1)$
3. $|b_n| > |a_n| > 0$

□ 下面利用矩阵的直接三角分解法来推导解三对角方程组(7.4.12)的计算公式



对角占优的矩阵三角分解

□ 由系数阵**A**的特点，可以将**A**分解为两个三角阵的乘积，即

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & 1 & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

■ **L**为下三角阵，**U**为单位上三角阵

■ $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ 为待定系数，比较公式两端可得

$$\begin{cases} b_1 = \alpha_1, & c_1 = \alpha_1 \beta_1 \\ a_i = \gamma_i, & b_i = \gamma_i \beta_{i-1} + \alpha_i & i = 2, 3, \dots, n \\ c_i = \alpha_i \beta_i, & i = 2, 3, \dots, n-1 \end{cases} \quad (7.4.14)$$



对角占优的矩阵三角分解（续）

$$\begin{cases} b_1 = \alpha_1, & c_1 = \alpha_1 \beta_1 \\ a_i = \gamma_i, & b_i = \gamma_i \beta_{i-1} + \alpha_i \quad i = 2, 3, \dots, n \\ c_i = \alpha_i \beta_i, & i = 2, 3, \dots, n-1 \end{cases} \quad (7.4.14)$$

□ 上式可完全确定 $\{\alpha_i\}, \{\beta_i\}, \{\gamma_i\}$ ，实现了 $\mathbf{A}$ 的LU分解

$$\alpha_1 = b_1, \quad \beta_1 = \frac{c_1}{\alpha_1} = \frac{c_1}{b_1}$$

$$\gamma_i = a_i, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

$$\alpha_i = b_i - \gamma_i \beta_{i-1} = b_i - a_i \beta_{i-1}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

$$\beta_i = \frac{c_i}{\alpha_i} = \frac{c_i}{b_i - a_i \beta_{i-1}}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$



分解后系数的性质

$$c_1 = \alpha_1 \beta_1$$

$$c_i = \alpha_i \beta_i, i = 2, 3, \dots, n-1$$

□ 为了分析算法的稳定性，需要刻画分解后系数的大小

1. γ_i 由 a_i 的性质决定

$$\gamma_i = a_i, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

2. 从上页可知 $\beta_i = c_i / \alpha_i$ ，下面用归纳法证明

$$|\alpha_i| > |c_i| \neq 0 \Leftrightarrow 0 < |\beta_i| = \left| \frac{c_i}{\alpha_i} \right| < 1, \quad (i = 1, 2, \dots, n-1)$$

■ 当 $i = 1$ 时

$$|\beta_1| = \left| \frac{c_1}{\alpha_1} \right| = \left| \frac{c_1}{b_1} \right| \xrightarrow{|b_1| > |c_1| > 0} 0 < |\beta_1| < 1$$



$$b_i = \gamma_i \beta_{i-1} + \alpha_i$$

分解后系数的性质（续） $a_i = \gamma_i$

■ 假设 $i-1$ 时, $0 < |\beta_{i-1}| = |c_{i-1}/\alpha_{i-1}| < 1$,

$$\left. \begin{array}{l} |\alpha_i| = |b_i - \gamma_i \beta_{i-1}| \\ a_i = \gamma_i \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} |\alpha_i| = |b_i - a_i \beta_{i-1}| \geq |b_i| - |a_i \beta_{i-1}| \\ |\beta_{i-1}| = |c_{i-1}/\alpha_{i-1}| < 1 \end{array} \right\}$$

$$\left. \begin{array}{l} \Rightarrow |\alpha_i| > |b_i| - |a_i| \\ |b_i| \geq |a_i| + |c_i| \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} |\alpha_i| > |c_i| \\ c_i \neq 0 \end{array} \right\} \Rightarrow 0 < |\beta_i| = \left| \frac{c_i}{\alpha_i} \right| < 1$$

3. 从上面的证明可知, 对于 $i = 2, 3, \dots, n-1$

$$|\alpha_i| > |b_i| - |a_i| \geq |c_i| > 0, \quad |\alpha_n| > |b_n| - |a_n| > 0$$

同时, 对于 $i = 2, 3, \dots, n$

$$|\alpha_i| = |b_i - \gamma_i \beta_{i-1}| = |b_i - a_i \beta_{i-1}| \leq |b_i| + |a_i \beta_{i-1}| < |b_i| + |a_i|$$



分解后系数的性质（续）

- 总结上述讨论，有以下定理
- **定理7.9** 设有三对角方程组 $Ax = f$ ，其中 A 满足对角占优条件，则 A 为非奇异矩阵且分解后的系数 $\{\gamma_i\}$ 、 $\{\beta_i\}$ 和 $\{\alpha_i\}$ 满足
 1. $\gamma_i = a_i \quad (i = 2, 3, \dots, n)$
 2. $0 < |\beta_i| < 1 \quad (i = 1, 2, \dots, n-1)$
 3. $0 < |c_i| \leq |b_i| - |a_i| < |\alpha_i| < |b_i| + |a_i| \quad (i = 2, 3, \dots, n-1)$
 $0 < |b_n| - |a_n| < |\alpha_n| < |b_n| + |a_n|$
 $\alpha_1 = b_1$



追赶法

□ 得到 $A = LU$ 的分解之后, 求解 $Ax = f$ 等价于解两个三角方程组

1. 计算 $\{\beta_i\}$ 的递推公式

$$\beta_1 = \frac{c_1}{b_1}, \quad \beta_i = \frac{c_i}{b_i - a_i \beta_{i-1}}, \quad i = 2, 3, \dots, n-1$$

2. 解 $Ly = f$

$$L = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} y_1 &= \frac{f_1}{\alpha_1} = \frac{f_1}{b_1} \\ y_i &= \frac{f_i - \gamma_i y_{i-1}}{\alpha_i} = \frac{f_i - a_i y_{i-1}}{b_i - a_i \beta_{i-1}}, \\ i &= 2, 3, \dots, n \end{aligned}$$



追赶法（续）

3. 解 $Ux = y$

$$U = \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & 1 & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} x_n &= y_n \\ x_i &= y_i - \beta_i x_{i+1}, \\ i &= n-1, n-2, \dots, 1 \end{aligned}$$

- 将计算系数 $\beta_1 \rightarrow \beta_2 \rightarrow \dots \rightarrow \beta_{n-1}$ 及 $y_1 \rightarrow y_2 \rightarrow \dots \rightarrow y_n$ 的过程称为追的过程
- 将计算方程组的解 $x_n \rightarrow x_{n-1} \rightarrow \dots \rightarrow x_1$ 的过程称为赶的过程



追赶法（续）

3. 解 $Ux = y$

$$U = \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & 1 & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} x_n &= y_n \\ x_i &= y_i - \beta_i x_{i+1}, \\ i &= n-1, n-2, \dots, 1 \end{aligned}$$

- 定理7.9表明，追赶法计算公式中不会出现中间结果数量级的巨大增长和舍入误差的严重累积
- 因此，追赶法是一个数值稳定的方法



时空复杂度

- 追赶法公式实际上就是把Gauss消去法用到求解三对角方程组上的结果
- 由于 $\mathbf{A}$ 特别简单，因此使得求解的计算公式也非常简单，计算量仅为 $5n - 4$ 次乘除法运算
- 另外增加解一个方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{f}_2$ 仅需增加 $3n - 2$ 次乘除运算，易见追赶法的计算量比较小
- 在用计算机计算时，只需用三个一维数组分别存储 $\mathbf{A}$ 的三条对角线元素 $\{a_i\}$ ， $\{b_i\}$ 和 $\{c_i\}$ ，此外还需要用两组存储单元保存 $\{\beta_i\}$ ， $\{y_i\}$ 或 $\{x_i\}$



目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析



向量和矩阵的范数

- 为了研究线性方程组近似解的误差估计和迭代法的收敛性，需要对 $\mathbf{R}^n$ 中向量（或 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 中矩阵）的“大小”引进某种度量——向量（或矩阵）范数的概念
 - 向量范数概念是三维Euclid空间中向量长度概念的推广，在数值分析中起着重要作用
- 首先将向量长度概念推广到 $\mathbf{R}^n$
 - 注意到本节的内容同样可以拓展到 n 维复向量空间 $\mathbf{C}^n$



数量积与Euclid范数

□ 定义**7.1** 设

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, \mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T \in \mathbf{R}^n$$

向量 $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ 的数量积（内积）定义为：

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{y}^T \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

向量 $\mathbf{x}$ 的Euclid范数定义为：

$$\|\mathbf{x}\|_2 = (\mathbf{x}, \mathbf{x})^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} \geq 0$$



数量积与Euclid范数（续）

□ 下述定理可在线性代数书中找到

□ 定理**7.10** 设 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{R}^n$ ，则

1. $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0$ ，当且仅当 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 时成立
2. $(\alpha\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ ， α 为实数
3. $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{y}, \mathbf{x})$
4. $(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}_1, \mathbf{y}) + (\mathbf{x}_2, \mathbf{y})$
5. （Cauchy–Schwarz不等式） $|(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \leq \|\mathbf{x}\|_2 \cdot \|\mathbf{y}\|_2$ ，等式当且仅当 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 线性相关时成立
6. （三角不等式） $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|_2 \leq \|\mathbf{x}\|_2 + \|\mathbf{y}\|_2$



向量范数

- 除了Euclid范数之外，还可以用其他办法来度量 $\mathbf{R}^n$ 中向量的“大小”
 - 例如对于 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T \in \mathbf{R}^n$ ，用一个 $\mathbf{x}$ 的函数 $N(\mathbf{x}) = \max_{i=1,2} |x_i|$ 来度量 $\mathbf{x}$ 的“大小”，而且这种度量方法计算起来比Euclid范数更方便
 - 在许多应用中，对度量 $\mathbf{x}$ 的“大小”的函数 $N(\mathbf{x})$ 都要求是正定的、齐次的且满足三角不等式
- 下面给出向量范数的一般定义



向量范数（续）

□ 定义**7.2**（向量的范数）如果向量 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ 的某个实值函数 $N(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$ ，满足条件：

1. $\|\mathbf{x}\| \geq 0$, $\|\mathbf{x}\| = 0$ 当且仅当 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ （正定性）
2. $\|\alpha\mathbf{x}\| = |\alpha|\|\mathbf{x}\|$, $\forall \alpha \in \mathbf{R}$ （齐次性）
3. $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ （三角不等式）

则称 $N(\mathbf{x})$ 是 $\mathbf{R}^n$ 上的一个向量范数（或模）

□ 由条件3可以推出不等式

$$|\|\mathbf{x}\| - \|\mathbf{y}\|| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$



常用的向量范数

□ 向量的 ∞ -范数（最大范数）

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

□ 向量的1-范数

$$\|\mathbf{x}\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$$

□ 向量的2-范数

$$\|\mathbf{x}\|_2 = (\mathbf{x}, \mathbf{x})^{\frac{1}{2}} = (|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_n|^2)^{\frac{1}{2}}$$

□ 向量的 p -范数，其中 $p \in [1, \infty)$

$$\|\mathbf{x}\|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}$$

■ 上述三种范数是 p -范数的特殊情况



范数的连续性

□ 定义**7.3** 设 $\{x^{(k)}\}$ 为 $\mathbf{R}^n$ 中一向量序列, $\mathbf{x}^* \in \mathbf{R}^n$, 记 $\mathbf{x}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$, $\mathbf{x}^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)^T$ 。如果 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^*$, $i = 1, 2, \dots, n$, 则称 $\mathbf{x}^{(k)}$ 收敛于向量 $\mathbf{x}^*$, 记作

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

□ 定理**7.11** ($N(\mathbf{x})$ 的连续性) 设非负函数 $N(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上任一向量范数, 则 $N(\mathbf{x})$ 是 $\mathbf{x}$ 分量 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的连续函数



范数的等价性

□ **定理7.12**（向量范数的等价性）设 $\|\mathbf{x}\|_s, \|\mathbf{x}\|_t$ 为 $\mathbf{R}^n$ 上向量的任意两种范数，则存在常数 $c_1, c_2 > 0$ ，使得

$$c_1 \|\mathbf{x}\|_s \leq \|\mathbf{x}\|_t \leq c_2 \|\mathbf{x}\|_s, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$$

- 注意，定理7.12不能推广到无穷维空间
- 从上述定理可知：如果在一种范数意义下向量序列收敛，则在任何一种范数意义下该向量序列亦收敛

□ **定理7.13** $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*$ 当且仅当 $k \rightarrow \infty$ 时， $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| \rightarrow 0$ ，其中 $\|\cdot\|$ 为向量的任一种范数



矩阵范数

□ 将向量范数的概念推广到矩阵上

- 由向量的2-范数可以得到 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 中矩阵的一种范数

$$F(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

称为 $\mathbf{A}$ 的Frobenius范数

- $\|\mathbf{A}\|_F$ 显然满足正定性、齐次性及三角不等式



矩阵范数（续）

□ 定义7.4（矩阵范数）如果矩阵 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 的某个实值函数 $N(A) = \|A\|$ ，满足条件：

1. $\|A\| \geq 0$, $\|A\| = 0$ 当且仅当 $A = \mathbf{0}$ （正定性）
2. $\|cA\| = |c|\|A\|$, c 为实数（齐次性）
3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ （三角不等式）
4. $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$

则称 $N(A)$ 是 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 上的一个矩阵范数（或模）

- 最后的条件未必需要
- 上一页定义的 $F(A) = \|A\|_F$ 就是 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 上的一个矩阵范数



矩阵的算子范数

- 在大多数与估计有关的问题中，矩阵和向量会同时参与讨论，所以希望引进一种矩阵的范数，它是和向量范数相联系而且相容，即

$$\|A\mathbf{x}\| \leq \|A\| \|\mathbf{x}\|$$

对于任意向量 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ 及 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 都成立

- **定义7.5**（矩阵的算子范数）设 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ 及 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ，给出一种向量范数 $\|\mathbf{x}\|_v$ （如 $v = 1, 2$ 或 ∞ ），定义 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 上的矩阵范数

$$\|A\|_v = \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\|A\mathbf{x}\|_v}{\|\mathbf{x}\|_v}$$



矩阵的算子范数（续）

□ 可验证 $\|A\|_v$ 满足定义7.4，所以 $\|A\|_v$ 是 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 上的一个矩阵范数，具体而言有如下定理

□ 定理**7.14** 设 $\|x\|_v$ 是 $\mathbf{R}^n$ 上一个向量范数，则 $\|A\|_v$ 是 $\mathbf{R}^{n \times n}$ 上的矩阵范数，且满足相容条件

$$\|Ax\|_v \leq \|A\|_v \|x\|_v$$

□ 显然这种矩阵范数 $\|A\|_v$ 依赖于向量范数 $\|x\|_v$ 的具体含义



常用的矩阵范数

□ 定理**7.15** 设 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$, $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 则

$$1. \|\mathbf{A}\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (\text{行范数})$$

$$2. \|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (\text{列范数})$$

$$3. \|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})} \quad (2\text{-范数})$$

其中 $\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$ 表示 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ 的最大特征值

- 矩阵的2-范数 $\|\mathbf{A}\|_2$ 在计算上不方便, 但是矩阵的2-范数具有许多好的性质, 它在理论上是有用的



特征值与范数

- **定义7.6** 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 的特征值为 $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, n$, 称 $\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$ 为 A 的谱半径
- **定理7.16** (特征值上界) 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 则 $\rho(A) \leq \|A\|$, 即 A 的谱半径不超过 A 的任何一种算子范数 (对于 $\|A\|_F$ 亦成立)
- **定理7.17** 如果 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为对称矩阵, 则 $\|A\|_2 = \rho(A)$
- **定理7.18** 如果 $\|B\| < 1$, 则 $I \pm B$ 为非奇异矩阵, 且 $\|(I \pm B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|}$, $\|\cdot\|$ 为算子范数



定理7.18证明

- 用反证法，若 $I \pm B$ 是奇异矩阵，则列线性相关，则 $(I \pm B)x = 0$ 有非零解，即存在 $x_0 \neq 0$ 使

$$Bx_0 = \mp x_0$$

- 注意到

$$\|B\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Bx\|}{\|x\|} \geq \frac{\|Bx_0\|}{\|x_0\|} = 1$$

与假设矛盾，因此 $I \pm B$ 为非奇异矩阵

- 由 $(I \pm B)(I \pm B)^{-1} = I$ ，有

$$(I \pm B)^{-1} = I \mp B(I \pm B)^{-1}$$

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



目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析



微小误差对解的影响

□ 考虑线性方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ，其中 $\mathbf{A}$ 为非奇异矩阵， $\mathbf{x}$ 为方程组的精确解

■ 由于 $\mathbf{A}$ （或 $\mathbf{b}$ ）中的元素是测量得到的，或者是计算的结果，所以 $\mathbf{A}$ （或 $\mathbf{b}$ ）常带有某些观测误差或者包含有舍入误差

□ 在处理实际问题 $(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})\mathbf{x} = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b}$ 时，通常要考虑 $\mathbf{A}$ （或 $\mathbf{b}$ ）的微小误差对解的影响

■ 考虑估计 $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ ，其中

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

$$(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})\mathbf{y} = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b}$$



例7.8

□ 设有方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ，其精确解为 $\mathbf{x} = (2,0)^T$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

■ 现在考虑常数项的微小变化对方程组解的影响，即考察

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{bmatrix}$$

■ 可描述为 $A(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b}$ ， $\delta\mathbf{b} = (0, 0.0001)^T$ ，易得

$$\mathbf{x} + \delta\mathbf{x} = (1, 1)^T$$

■ 可以看到，常数项 $\mathbf{b}$ 的第二个分量只有 $1/10000$ 的微小变化，方程组的解却变化很大，这样的方程组称为病态方程组



病态方程组

- 定义**7.7** 设如果矩阵 **A** 或常数项 **b** 的微小变化，引起方程组 **$Ax = b$** 解的巨大变化，则称此方程组为**病态方程组**，矩阵 **A** 称为**病态矩阵**（相对于方程组而言），否则称方程组为**良态方程组**， **A** 称为**良态矩阵**
- 应该注意，矩阵的病态性质是**矩阵本身的特性**，我们希望可以定量地刻画矩阵的病态程度，且无需通过解具体的方程组



微小误差影响的定量分析

□ 设方程组 $Ax = b$ ，其中 A 为非奇异阵， x 为方程组的精确解

1. 设 A 是精确的， b 有微小误差 δb ，解为 $x + \delta x$

■ 首先

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

$$\Rightarrow \|\delta x\| = \|A^{-1}\delta b\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta b\|$$

■ 其次

$$Ax = b \Rightarrow \|b\| = \|Ax\| \leq \|A\| \|x\| \Rightarrow \frac{1}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|}$$

其中假设 $b \neq 0$



微小误差影响的定量分析（续）

□ 设方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ，其中 $\mathbf{A}$ 为非奇异阵， $\mathbf{x}$ 为方程组的精确解

1. 设 $\mathbf{A}$ 是精确的， $\mathbf{b}$ 有微小误差 $\delta\mathbf{b}$ ，解为 $\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}$

■ 结合

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

□ 定理 7.19 设 $\mathbf{A}$ 为非奇异阵， $\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \neq \mathbf{0}$ ，且 $\mathbf{A}(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b}$ ，则

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

■ 常数项 $\mathbf{b}$ 的相对误差在解中可能放大 $\|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\|$ 倍



微小误差影响的定量分析（续）

□ 设方程组 $Ax = b$ ，其中 A 为非奇异阵， x 为方程组的精确解

2. 设 b 是精确的， A 有微小误差 δA ，解为 $x + \delta x$

■ 首先

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

$$\Rightarrow Ax + (\delta A)x + (A + \delta A)\delta x = b \Rightarrow (A + \delta A)\delta x = -(\delta A)x$$

■ 如果 δA 不受限制， $A + \delta A$ 可能奇异，注意到

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

■ 由定理 7.18 知，当 $\|A^{-1}\delta A\| < 1$ 时， $(I + A^{-1}\delta A)^{-1}$ 存在



微小误差影响的定量分析（续）

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

$$\begin{aligned}\Rightarrow \|\delta x\| &\leq \|(I + A^{-1}\delta A)^{-1}\| \|A^{-1}\| \|\delta A\| \|x\| \\ &\leq \frac{\|A^{-1}\| \|\delta A\| \|x\|}{1 - \|A^{-1}\delta A\|} \leq \frac{\|A^{-1}\| \|\delta A\| \|x\|}{1 - \|A^{-1}\| \|\delta A\|}\end{aligned}$$

其中假设 $\|A^{-1}\| \|\delta A\| < 1$

□ **定理7.20** 设 A 为非奇异阵, $Ax = b \neq 0$, 且 $(A + \delta A)(x + \delta x) = b$, 如果 $\|A^{-1}\| \|\delta A\| < 1$

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



微小误差影响的定量分析（续）

■ 若 δA 充分小，且 $\|A^{-1}\|\|\delta A\| < 1$ ，则矩阵 A 的相对误差 $\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}$ 在解中可能放大 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 倍

□ 从上面的讨论可知，量 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 愈小，由 A （或 b ）的相对误差引起的解的相对误差就愈小；量 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 愈大，该解的相对误差就可能愈大

■ 量 $\|A^{-1}\|\|A\|$ 实际上刻画了解对原始数据变化的灵敏度，即刻画了方程组的病态程度



条件数

- 定义7.8 设 A 为非奇异矩阵，称 $\text{cond}(A)_v = \|A^{-1}\|_v \|A\|_v$ ($v = 1, 2$ 或 ∞) 为矩阵 A 的条件数
- 矩阵的条件数与范数有关
 - 当 A 的条件数相对地大时，即 $\text{cond}(A) \gg 1$ 时，式 $Ax = b$ 是病态的（即 A 是病态矩阵，或者说 A 是坏条件的）
 - 当 A 的条件数相对地小时，式 $Ax = b$ 是良态的（或者说 A 是好条件的）
 - A 的条件数愈大，方程组的病态程度愈严重，也就愈难得到方程组的比较准确的解



常用的条件数

1. $\text{cond}(\mathbf{A})_\infty = \|\mathbf{A}^{-1}\|_\infty \|\mathbf{A}\|_\infty$

2. $\mathbf{A}$ 的谱条件数

$$\text{cond}(\mathbf{A})_2 = \|\mathbf{A}^{-1}\|_2 \|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}}$$

- 当 $\mathbf{A}$ 为对称阵时, $\text{cond}(\mathbf{A})_2 = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$, 其中 λ_1 和 λ_n 为 $\mathbf{A}$ 的绝对值最大和绝对值最小的特征值
- 这是最常见的条件数



条件数的性质

1. 任何非奇异矩阵 $\mathbf{A}$ ，都有 $\text{cond}(\mathbf{A})_v \geq 1$

$$\text{cond}(\mathbf{A})_v = \|\mathbf{A}^{-1}\|_v \|\mathbf{A}\|_v \geq \|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\|_v = \|\mathbf{I}\|_v = 1$$

2. $\mathbf{A}$ 为非奇异矩阵， c 为不等于零的常数，则

$$\text{cond}(c\mathbf{A})_v = \text{cond}(\mathbf{A})_v$$

3. 如果 $\mathbf{A}$ 为正交矩阵，则 $\text{cond}(\mathbf{A})_2 = 1$ ；如果 $\mathbf{A}$ 为非奇异矩阵， $\mathbf{R}$ 为正交矩阵，则

$$\text{cond}(\mathbf{R}\mathbf{A})_2 = \text{cond}(\mathbf{A}\mathbf{R})_2 = \text{cond}(\mathbf{A})_2$$



例7.9

□ 已知Hilbert矩阵 H_n ，计算 H_3 的条件数

$$H_n = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{bmatrix}$$

■ 解

$$H_3 = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{bmatrix}, \quad H_3^{-1} = \begin{bmatrix} 9 & -36 & 30 \\ -36 & 192 & -180 \\ 30 & -180 & 180 \end{bmatrix}$$



例7.9 (续)

- 计算 $\mathbf{H}_3$ 条件数 $\text{cond}(\mathbf{H}_3)_\infty$

$$\|\mathbf{H}_3\|_\infty = \frac{11}{6}, \quad \|\mathbf{H}_3^{-1}\|_\infty = 408$$

所以 $\text{cond}(\mathbf{H}_3)_\infty = 748$

- 同样可计算 $\text{cond}(\mathbf{H}_6)_\infty = 2.9 \times 10^6$
- 一般当 n 愈大时, $\mathbf{H}_n$ 的病态愈严重

□ 考虑方程组

$$\mathbf{H}_3 \mathbf{x} = \left(\frac{11}{6}, \frac{13}{12}, \frac{47}{60} \right)^T = \mathbf{b}$$

- 精确解为 $\mathbf{x} = (1, 1, 1)^T$



例7.9 (续)

$$\mathbf{x} = (1, 1, 1)^T$$

- 设 $\mathbf{H}_3$ 及 $\mathbf{b}$ 有微小误差（取三位有效数字），

$$\begin{bmatrix} 1.00 & 0.500 & 0.333 \\ 0.500 & 0.333 & 0.250 \\ 0.333 & 0.250 & 0.200 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 + \delta x_1 \\ x_2 + \delta x_2 \\ x_3 + \delta x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.83 \\ 1.08 \\ 0.783 \end{bmatrix} \quad (7.6.8)$$

$$\text{简记作 } (\mathbf{H}_3 + \delta \mathbf{H}_3)(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}) = \mathbf{b} + \delta \mathbf{b}$$

- 式(7.6.8)的解为

$$\mathbf{x} + \delta \mathbf{x} = (1.089512538, 0.487967062, 1.491002798)^T$$

- 可得 $\delta \mathbf{x} = (0.0895, -0.5120, 0.4910)^T$



例7.9（续）

■ 于是

$$\frac{\|\delta \mathbf{H}_3\|_\infty}{\|\mathbf{H}_3\|_\infty} \approx 0.18 \times 10^{-3} < 0.02\%,$$

$$\frac{\|\delta \mathbf{b}\|_\infty}{\|\mathbf{b}\|_\infty} \approx 0.182\%, \quad \frac{\|\delta \mathbf{x}\|_\infty}{\|\mathbf{x}\|_\infty} \approx 51.2\%$$

■ $\mathbf{H}_3$ 与 $\mathbf{b}$ 相对误差不超过0.2%，而引起解的误差超过50%



判断矩阵是否病态

□ 由上面讨论可知，要判别一个矩阵是否病态，需要计算条件数 $\text{cond}(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\|$ ，而计算 $\|\mathbf{A}^{-1}\|$ 是比较困难的，那么在实际计算中如何发现病态情况呢？

1. 如果在 $\mathbf{A}$ 的三角约化时（尤其是用主元素消去法解方程组时）出现小主元，那么对大多数矩阵来说， $\mathbf{A}$ 是病态矩阵

■ 例如用选主元的直接三角分解法解(7.6.8)

$$\begin{bmatrix} 1.00 & 0.500 & 0.333 \\ 0.500 & 0.333 & 0.250 \\ 0.333 & 0.250 & 0.200 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 + \delta x_1 \\ x_2 + \delta x_2 \\ x_3 + \delta x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.83 \\ 1.08 \\ 0.783 \end{bmatrix} \quad (7.6.8)$$



判断矩阵是否病态（续）

■ 得到

$$I_{23}(\mathbf{H}_3 + \delta \mathbf{H}_3) = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 0.333 & 1 & \\ 0.500 & 0.994 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0.5000 & 0.3330 \\ & 0.0835 & 0.0891 \\ & & -0.00507 \end{bmatrix}$$

2. 如果 $\mathbf{A}$ 的最大特征值和最小特征值之比（按绝对值）是大的，则 $\mathbf{A}$ 是病态的，即 $\frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$ 是大的，其中 λ_1 和 λ_n 为 $\mathbf{A}$ 的绝对值最大和绝对值最小的特征值

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n| > 0$$

$$\text{定理7.16} \Rightarrow |\lambda_1| \leq \|\mathbf{A}\|, \frac{1}{|\lambda_n|} \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \Rightarrow \text{cond}(\mathbf{A}) \geq \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|} \gg 1$$



判断矩阵是否病态（续）

3. 如果系数矩阵的行列式值相对来说很小，或系数矩阵某些行近似线性相关，则 $\mathbf{A}$ 可能是病态的
 4. 如果系数矩阵 $\mathbf{A}$ 元素间数量级相差很大，并且无一定规则，则 $\mathbf{A}$ 可能是病态的
- 病态问题通常不能用选主元素的消去法来解决



病态问题的求解

1. 一般采用高精度的算术运算（采用双倍字长进行运算）

2. 预处理方法，即将求解 $Ax = b$ 的问题转化为求解一等价方程组

$$\begin{cases} PAQy = Pb \\ y = Q^{-1}x \end{cases}$$

- 通过选择非奇异矩阵 P 与 Q ，使 $\text{cond}(PAQ) < \text{cond}(A)$
- 一般选择 P 与 Q 为对角阵或者三角阵



病态问题的求解（续）

3. 当矩阵 $\mathbf{A}$ 的元素大小不均时，在 $\mathbf{A}$ 的行（或列）中引进适当的比例因子（使矩阵 $\mathbf{A}$ 的所有行或列按 ∞ -范数大体上有相同的长度，使 $\mathbf{A}$ 的系数均衡）

- 对 $\mathbf{A}$ 的条件数是有影响的
- 但这种方法不能保证 $\mathbf{A}$ 的条件数一定得到改善

□ 例7.10 设 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 10^4 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ ，方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 为

$$\begin{bmatrix} 1 & 10^4 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10^4 \\ 2 \end{bmatrix}, \text{ 计算 } \text{cond}(\mathbf{A})_\infty \text{ 和解}$$



例7.10 (续)

■ 由

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 10^4 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

可得

$$A^{-1} = \frac{1}{10^4 - 1} \begin{bmatrix} -1 & 10^4 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\text{cond}(A)_\infty = \frac{(1 + 10^4)^2}{10^4 - 1} \approx 10^4$$

■ 用列主元素消去法解 $Ax = b$ 时（计算到三位数字），得

$$(A, b) \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 10^4 & 10^4 \\ 0 & -10^4 & -10^4 \end{array} \right]$$

于是得到很坏的结果： $x_1 = 0, x_2 = 1$



例7.10（续）

- 在 $\mathbf{A}$ 的第一行引进比例因子，如用 $s_1 = \max_{1 \leq i \leq 2} |a_{1i}| = 10^4$ 除第一个方程式，得 $\mathbf{A}'\mathbf{x} = \mathbf{b}'$ ，即

$$\begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (\mathbf{A}')^{-1} = \frac{1}{1 - 10^{-4}} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -10^{-4} \end{bmatrix}$$

$$\text{cond}(\mathbf{A}')_{\infty} = \frac{1}{1 - 10^{-4}} \approx 1$$

大幅下降

- 用列主元素消去法解 $\mathbf{A}'\mathbf{x} = \mathbf{b}'$ 时，得

$$(\mathbf{A}', \mathbf{b}') \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 10^{-4} & 1 & 1 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{array} \right]$$

从而得到较好的结果： $x_1 = 1, x_2 = 1$



事后误差估计

□ 设 $\bar{\mathbf{x}}$ 为方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的近似解，于是可计算 $\bar{\mathbf{x}}$ 的剩余向量 $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}$ ，当 $\mathbf{r}$ 很小时， $\bar{\mathbf{x}}$ 是否为 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 一个较好的近似解呢？

□ 定理**7.21**（事后误差估计） 设 $\mathbf{A}$ 为非奇异阵， $\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \neq \mathbf{0}$ ， $\bar{\mathbf{x}}$ 是方程组的近似解， $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}$ ，则

$$\frac{\|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \text{cond}(\mathbf{A}) \frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$



定理7.21 (证明)

■ 由

$$A(x - \bar{x}) = b - A\bar{x} = r$$

得

$$x - \bar{x} = A^{-1}r \Rightarrow \|x - \bar{x}\| \leq \|A^{-1}\| \|r\|$$

■ 又有

$$\|b\| = \|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$$

得

$$\frac{1}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|}$$

■ 因此

$$\frac{\|x - \bar{x}\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A\| \|A^{-1}\| \|r\|}{\|b\|} = \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|b\|}$$



舍入误差

- 在复杂的计算中，由浮点运算而引进的舍入误差可能积累而影响答案，因此对任何算法都需要进行舍入误差分析，看其是否过度影响所得的结果
- 设 $\bar{x}$ 为选主元素Gauss消去法解 $Ax = b$ 的计算解， x 为精确解
 - 若要直接计算每一步舍入误差对解的影响来获得界的估计 $\|x - \bar{x}\|$ ，是非常困难的



舍入误差（续）

- Wilkinson等人提出了“向后误差分析方法”，基本思想是把舍入误差对解的影响归为原始数据变化对解的影响，即 $\bar{x}$ 是扰动方程组 $(A + \delta A)x = b$ 的精确解
 - 具体定理可以查看教材
- 计算解 $\bar{x}$ 的相对误差限依赖于 $\text{cond}(A)_\infty$ ，元素的增长因子、方程组阶数、计算机字长等



总结

□ Gauss消去法

- 消元过程、回代过程、能够成功的充分条件
- Gauss消去法的矩阵描述、矩阵的LU分解
- Gauss消去法的计算量

□ Gauss主元素消去法

- 完全主元素消去法、列主元素消去法
- 列主元素的三角分解定理
- Gauss-Jordan消去法、矩阵求逆



课程主页查看作业!

总结（续）

□ Gauss消去法的变形

- 不选主元的三角分解法、选主元的三角分解法
- 平方根法、对称（正定）矩阵的三角分解
- 数值稳定性、避免开方的分解
- 追赶法、对角占优的矩阵三角分解、分解的性质

□ 向量和矩阵的范数

- 数量积与Euclid范数、范数、连续性和等价性
- 矩阵范数、算子范数、特征值、谱半径

□ 误差分析

- 病态方程组、误差分析、条件数、舍入误差