



第六章 线性方程组的数值解法

肖 明

微电子科学与技术学院

邮箱: xiaom37@mail.sysu.edu.cn

- 1 高斯消元法
- 2 主元素法
- 3 矩阵三角分解法
- 4 **平方根法**
- 5 **追赶法**
- 6 迭代法

课堂练习



练习

试用LU分解求解方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 5 & -6 \\ 4 & 13 & -19 \\ -6 & -3 & -6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 19 \\ -30 \end{bmatrix}$$

第1步

求LU分解

分解 $LU = A$, 令

$$\begin{bmatrix} 2 & 5 & -6 \\ 4 & 13 & -19 \\ -6 & -3 & -6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{22} & u_{23} \\ u_{33} \end{bmatrix}$$

$$k=1\text{时}: u_{11}=2, u_{12}=5, u_{13}=-6;$$

$$l_{21} = \frac{4}{u_{11}} = 2, l_{31} = \frac{-6}{2} = -3。$$

$$k=2\text{时}: u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 13 - 2 \times 5 = 3,$$

$$u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = -19 - 2 \times (-6) = -7$$

$$l_{32} = (a_{32} - l_{31}u_{12}) / u_{22} = 4$$

$$k=3\text{时}: u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} = 4$$

$$\text{所以 } A = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ -3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 5 & -6 \\ & 3 & -7 \\ & & 4 \end{bmatrix} = LU$$

课堂练习



练习

试用LU分解求解方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 5 & -6 \\ 4 & 13 & -19 \\ -6 & -3 & -6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 19 \\ -30 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ -3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 5 & -6 \\ 3 & -7 \\ 4 \end{bmatrix} = LU$$

第2步

解方程组求y

$$\begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ -3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 19 \\ -30 \end{bmatrix}$$

得 $y_1 = 10, y_2 = 19 - 20 = -1, y_3 = 34 - 30 = 4$

即 $y = (10, -1, 4)^T$

第3步

解方程组求x

$$\begin{bmatrix} 2 & 5 & -6 \\ 3 & -7 \\ 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ -1 \\ 4 \end{bmatrix}$$

解得： $x_3 = 1, x_2 = 2, x_1 = 3$

所以方程组的解为 $x = (3, 2, 1)^T$ 。



平方根法

对称正定矩阵分解定理

假设线性方程组:

$$Ax = b$$

其系数矩阵 A **对称正定**, 则 A 的各阶顺序主子式和全部特征值均大于零。

(对称正定矩阵的LU分解形式更加简单, 平方根法就是针对正定矩阵的LU分解法)

定理 设 A 是对称正定矩阵, 则存在惟一的

非奇异下三角阵 L , 使得

$$A = LL^T$$

且 L 的对角元素皆为正数。

推论: 设 A 为对称矩阵, A 的所有顺序主子式不为零, 则 A 可惟一分解为:

$$A = LDL^T$$

其中 L 为单位下三角阵, D 为对角阵。

比较

平方根法 (Cholesky): $A = LL^T$

改进平方根法: $A = L_1DL_1^T$

优点: 1) 不必选主元

2) 算法稳定





平方根法

直接Cholesky分解

定理——若 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是对称 **正定矩阵** $\mathcal{Q}$ ，则存在一个对角元全为正数的下三角矩阵 $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ，使得 $A = LL^T$ 成立。

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \quad L^T = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

推导 $A = LL^T$ ：我们先令

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & A_{21}^T \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix}, \quad L^T = \begin{bmatrix} l_{11} & L_{21}^T \\ 0 & L_{22}^T \end{bmatrix}$$

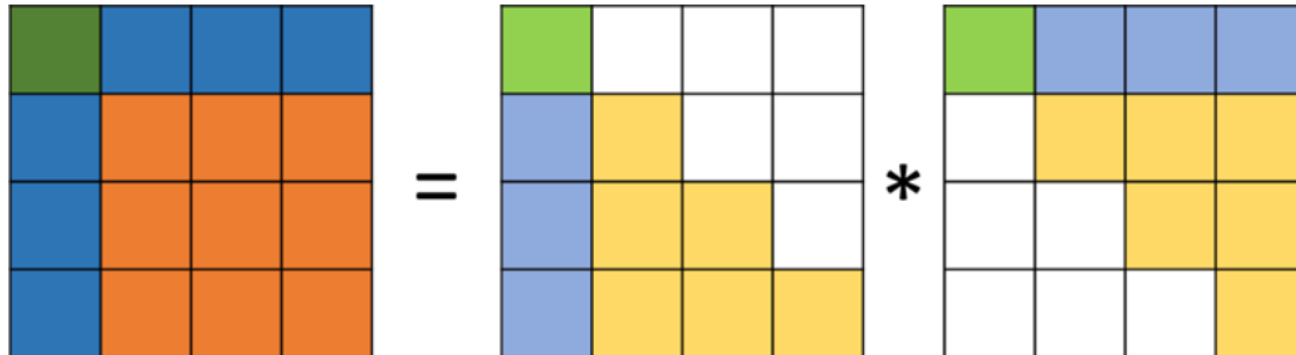
$$\longrightarrow l_{11} = \sqrt{a_{11}} \quad L_{21} = \frac{1}{l_{11}} A_{21} \quad \boxed{L_{22} L_{22}^T} = A_{22} - L_{21} L_{21}^T$$

Cholesky 分解，可以进一步递归求解

平方根法

$$\left[\begin{array}{c|c} a_{11} & A_{21}^T \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array} \right] = \begin{bmatrix} l_{11} & \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & L_{21}^T \\ & L_{22}^T \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} l_{11}^2 & l_{11} L_{21}^T \\ l_{11} L_{21} & L_{21} L_{21}^T + L_{22} L_{22}^T \end{bmatrix}$$



STEP 1: 求 l_{11} 和 L_{21} $l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad L_{21} = \frac{1}{l_{11}} A_{21}$

1次开方, $n-1$ 次乘除法

STEP 2: 求 L_{22}

$$L_{22} L_{22}^T = A_{22} - L_{21} L_{21}^T$$

乘除法次数 $\frac{(n-1)^2}{2}$

STEP 3: A_{new}

直至矩阵规模变为 1×1



平方根法分解

练习

以如下 A 矩阵为例进行Cholesky分解:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{bmatrix}$$

第一次循环:

首先进行分块:

$$\left[\begin{array}{c|cc} 4 & 12 & -16 \\ \hline 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{array} \right] = \begin{bmatrix} l_{11} & \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & L_{21}^T \\ & L_{22}^T \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} l_{11}^2 & l_{11} L_{21}^T \\ l_{11} L_{21} & L_{21} L_{21}^T + L_{22} L_{22}^T \end{bmatrix}$$

STEP 2:

$$L_{22} L_{22}^T = A_{22} - L_{21} L_{21}^T =$$
$$\begin{bmatrix} 37 & -43 \\ -43 & 98 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 6 \\ -8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6 & -8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 5 \\ 5 & 34 \end{bmatrix}$$

STEP 3:

$$A_{new} = L_{22} L_{22}^T = \begin{bmatrix} 1 & 5 \\ 5 & 34 \end{bmatrix}$$

STEP 1:

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{4} = 2,$$
$$L_{21} = \frac{1}{l_{11}} A_{21} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 12 \\ -16 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ -8 \end{bmatrix}$$



平方根法分解

练习

以如下 A 矩阵为例进行Cholesky分解:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{bmatrix}$$

第二次循环:

第三次循环: $[9]=[3] \times [3]$

分块:

$$\left[\begin{array}{c|c} 1 & 5 \\ \hline 5 & 34 \end{array} \right] = \begin{bmatrix} l_{11} & \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & L_{21}^T \\ & L_{22}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11}^2 & l_{11} L_{21}^T \\ l_{11} L_{21} & L_{21} L_{21}^T + L_{22} L_{22}^T \end{bmatrix} \quad \text{故:}$$

STEP 1: $l_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{1} = 1,$
 $L_{21} = \frac{1}{l_{11}} A_{21} = \frac{1}{1} [5] = [5]$

STEP 3: $A_{new} = L_{22} L_{22}^T = [9]$

$$\begin{bmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 6 & 1 & 0 \\ -8 & 5 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 6 & -8 \\ 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

STEP 2: $L_{22} L_{22}^T = A_{22} - L_{21} L_{21}^T =$
 $[34] - [5] * [5] = [9]$

平方根法使用开方运算, 有可能损失精度和增加运算量, 常使用改进的平方根法



平方根法求解线性方程组

$$A = LL^T$$

$$Ax = b$$



$$Ly = b$$

$$L^T x = y$$

$$\begin{cases} l_{11}y_1 & = b_1 \\ l_{21}y_1 + l_{22}y_2 & = b_2 \\ \dots\dots\dots & \\ l_{n1}y_1 + l_{n2}y_2 + \dots + l_{nn}y_n & = b_n \end{cases} \quad \begin{cases} l_{11}x_1 + l_{21}x_2 + \dots + l_{n1}x_n = y_1 \\ l_{22}x_2 + \dots + l_{n2}x_n = y_2 \\ \dots\dots\dots \\ l_{nn}x_n = y_n \end{cases}$$

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

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

$$\begin{cases} l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk})/l_{jj}, & j = 1, 2, \dots, i-1 \\ l_{ii} = (a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2)^{\frac{1}{2}}, & i = 1, 2, \dots, n \end{cases}$$



平方根法分解

例题 用cholesky方法求解线性方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, 其中

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{pmatrix}$$

解析

显然 $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$, 且 $D_1 = 4 > 0, D_2 = 16 > 0, D_3 = 16 > 0$. 系数矩阵为对称正定矩阵

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}} = 2, l_{21} = \frac{a_{21}}{l_{11}} = -0.5, l_{31} = \frac{a_{31}}{l_{11}} = 0.5,$$

$$l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} = 2,$$

$$l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}l_{21}}{l_{22}} = 1.5,$$

$$l_{33} = \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2} = 1,$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 2 & & \\ -0.5 & 2 & \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix}$$

连续求解 $\mathbf{Ly} = \mathbf{b} \quad \mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$

解得 $\mathbf{x} = (1, 1, 1)^T$



改进的平方根法

$$A = LDL^T$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & 0 & & & \\ & d_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & d_n & \\ 0 & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & l_{31} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & 1 & l_{32} & \cdots & l_{n2} \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & l_{n3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} d_k = a_{kk} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{km}^2 d_m \\ l_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{im} d_m l_{km} \right) / d_k \\ i = k+1, k+2, \dots, n \end{cases}$$

求解 $Ly = b$, $L^T x = D^{-1}y$ 计算公式为

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_k = b_k - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj} y_j \quad (k = 2, \dots, n) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_n = y_n / d_n \\ x_k = \frac{y_k}{d_k} - \sum_{j=k+1}^n l_{jk} x_j \quad (k = n-1, \dots, 1) \end{cases}$$

在平方根法中, 需进行 n 次开方运算,

为了避免这一点, 在更多情况下是将 A 作

$$A = LDL^T \text{ 分解。}$$

这一方法称为**改进的平方根法**。

典型例题

例5.4

用改进的平方根法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 4 \\ 2x_1 + 5x_2 = 7 \\ x_1 + 14x_3 = 15 \end{cases}$$

系数矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 0 \\ 1 & 0 & 14 \end{pmatrix}$ 为对称正定阵

$$\therefore d_1 = 1, u_{21} = 2, u_{31} = 1,$$

$$l_{21} = 2, l_{31} = 1, d_2 = 5 - 2 \times 2 = 1$$

$$u_{32} = 0 - 1 \times 2 = -2, l_{32} = -2$$

$$d_3 = 14 - 1 \times 1 - (-2) \times (-2) = 9$$

求解 $Ly = b, L^T x = D^{-1}y$ 计算公式为

$$\begin{cases} d_k = a_{kk} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{km}^2 d_m \\ l_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{im} d_m l_{km} \right) / d_k \\ i = k+1, k+2, \dots, n \end{cases}$$

由公式得：

$$y_1 = 4, y_2 = 7 - 2 \times 4 = -1$$

$$y_3 = 15 - 1 \times 4 - (-2) \times (-1) = 9,$$

$$x_3 = 1, x_2 = -1 - (-2) \times 1 = 1$$

$$x_1 = 4 - 2 \times 1 - 1 \times 1 = 1$$

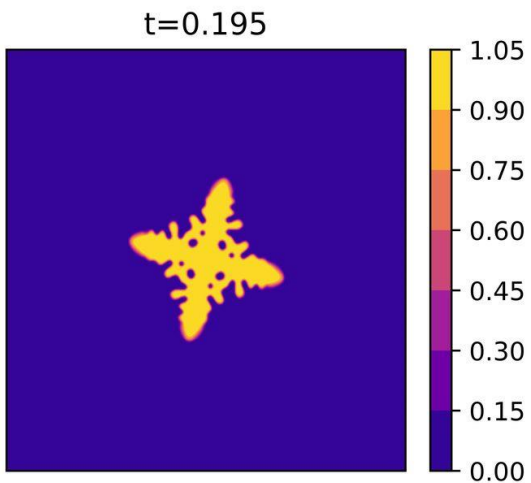
$\therefore$ 方程组的解为 $x_1 = 1, x_2 = 1, x_3 = 1$



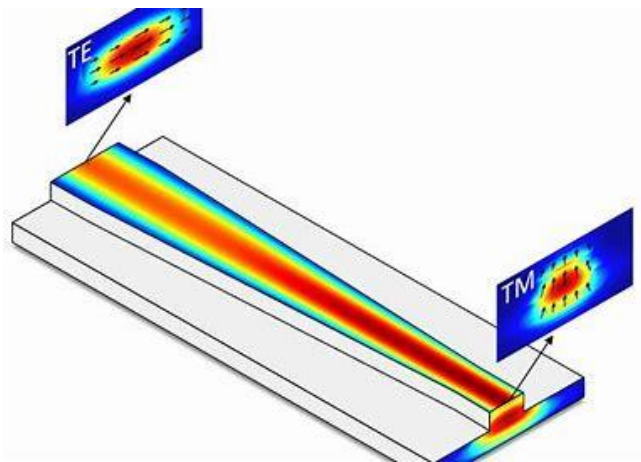


追赶法

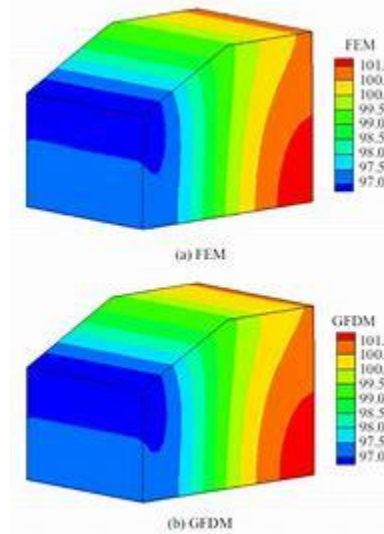
引例---有限差分法



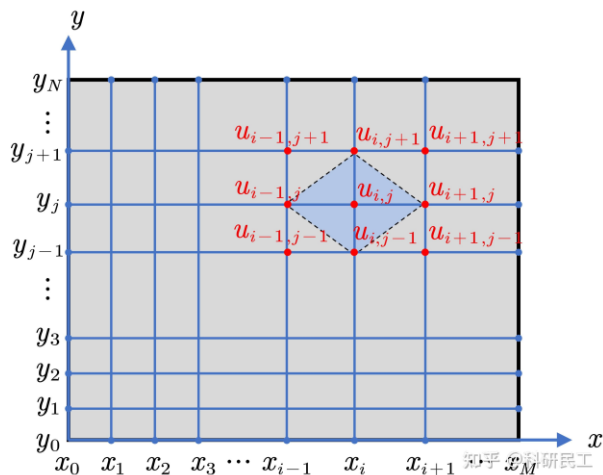
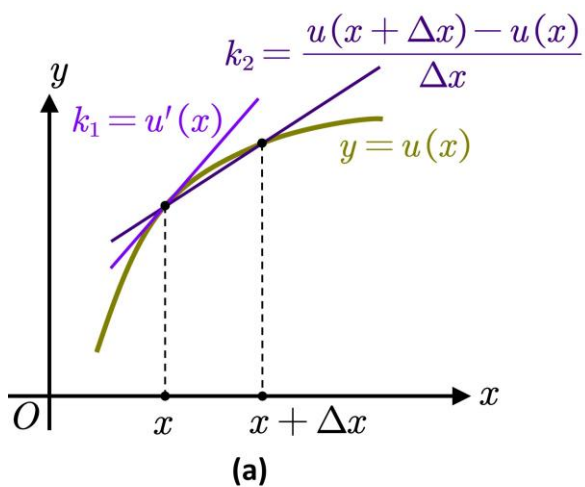
材料学模拟



光学模拟



力学模拟



$$\begin{bmatrix} \mathbf{U} & \mathbf{V} & & \\ & \mathbf{V} & \mathbf{U} & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \mathbf{V} & \mathbf{U} & \mathbf{V} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{u}_{i,1} \\ \vec{u}_{i,2} \\ \vdots \\ \vec{u}_{i,N-2} \\ \vec{u}_{i,N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{f}_{i,1} \\ \vec{f}_{i,2} \\ \vdots \\ \vec{f}_{i,N-2} \\ \vec{f}_{i,N-1} \end{bmatrix} - q \begin{bmatrix} \vec{u}_{i,0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} - q \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \vec{u}_{M,0} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} r & p & & & \\ p & r & p & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & p & r & p \\ & & & p & r \end{bmatrix}_{(M-1) \times (M-1)}, \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} q & & & \\ & q & & \\ & & \ddots & \\ & & & q \end{bmatrix}_{(M-1) \times (M)}$$

非线性方程转换成含有三对角矩阵的线性方程组求解

三对角矩阵



三对角线性方程组：

$$\begin{cases} b_1 x_1 + c_1 x_2 & & & = d_1 \\ a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 & & & = d_2 \\ & \dots & & \\ & a_{n-1} x_{n-1} + b_{n-1} x_{n-1} + c_{n-1} x_n & = d_{n-1} \\ & a_n x_{n-1} + b_n x_n & = d_n \end{cases}$$

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

分解定理

设矩阵A满足下列条件：

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| > 0 \\ |b_i| \geq |a_i| + |c_i| & a_i c_i \neq 0 (i = 2, 3, \dots, n-1) \\ |b_n| > |a_n| > 0 \end{cases} \quad (*)$$

则它可分解为

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_2 & 1 & & 0 \\ & l_3 & \ddots & \\ 0 & \ddots & 1 & \\ & & l_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & \\ & u_2 & c_2 & 0 \\ & & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \ddots & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{bmatrix}$$

其中 $c_i (i = 1, 2, \dots, n-1)$ 为A中给出，且分解是唯一的。

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

分解法的实质是高斯消元法、LU分解法的应用。事实上，将系数矩阵A做LU分解：

$$\begin{cases} u_1 = b_1 \\ l_i = a_i / u_{i-1} & (i = 2, 3, \dots, n) \\ u_i = b_i - c_{i-1} l_i \end{cases}$$



“追赶”过程

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_2 & 1 & & 0 \\ & l_3 & \ddots & \\ 0 & & \ddots & 1 \\ & & & l_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & \\ & u_2 & c_2 & 0 \\ & & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \ddots & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{bmatrix} \quad \text{令 } Ux=y, \text{ 则 } Ax=b \Leftrightarrow \begin{cases} Ux = y \\ Ly = b \end{cases}$$

三对角矩阵计算公式为

$$y_1 = d_1$$

$$y_k = d_k - l_k y_{k-1}$$

$$x_n = y_n / u_n$$

$$x_k = (y_k - c_k x_{k+1}) / u_k$$

“追”的过程
 $k = 2, 3, \dots, n$

$k = n-1, n-2, \dots, 1$

“赶”的过程

这种把三对角方程组的解用递推公式表示出来的方法，被形象化地叫做追赶法。

例5.5

$$\begin{cases} -2x_1 + x_2 & = 1 \\ x_1 - 2x_2 & = 1 \\ x_2 - 2x_3 + x_4 & = 0 \\ x_3 - 2x_4 & = -1 \end{cases} \quad \bar{A} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & & \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & 1 & -2 \end{bmatrix} \quad \begin{cases} u_1 = b_1, l_k = a_k / u_{k-1}, u_k = b_k - l_k c_{k-1} \\ y_1 = d_1, \quad y_k = d_k - l_k y_{k-1} \\ x_n = y_n / u_n, \quad x_k = (y_k - c_k x_{k+1}) / u_k \end{cases}$$

解析

$$\begin{aligned} u_1 &= -2 & y_1 &= 1 \\ l_2 &= -\frac{1}{2} & u_2 &= -\frac{3}{2} & y_2 &= \frac{3}{2} \\ l_3 &= -\frac{2}{3} & u_3 &= -2 & y_3 &= 1 \\ l_4 &= -\frac{1}{2} & u_4 &= -\frac{3}{2} & y_4 &= -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_4 &= \frac{1}{3} = 0.3333 & x_3 &= \frac{1 - 1 * 0.3333}{-2} = -0.3333 \\ x_2 &= \frac{\frac{3}{2} - 0 * (-0.3333)}{-\frac{3}{2}} = -1 & x_1 &= \frac{1 - 1 * (-1)}{-2} = -1 \end{aligned}$$

例5.5

$$\begin{cases} -2x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 - 2x_2 &= 1 \\ x_2 - 2x_3 + x_4 &= 0 \\ x_3 - 2x_4 &= -1 \end{cases} \quad \bar{A} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & & \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} u_1 = b_1, l_k = a_k / u_{k-1}, u_k = b_k - l_k c_{k-1} \\ y_1 = d_1, y_k = d_k - l_k y_{k-1} \\ x_n = y_n / u_n, x_k = (y_k - c_k x_{k+1}) / u_k \end{cases}$$

同解三角方程组为 $UX=Y$, 即

解析

$$\text{或 } \bar{A} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & & & \\ & 1 & -2 & 1 & 0 \\ & & 1 & -2 & -1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} & -2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & 0 & 0 & \frac{3}{2} \\ 0 & -\frac{2}{3} & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & -1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & 0 & 0 & \frac{3}{2} \\ 0 & -\frac{2}{3} & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{2} \\ 1 \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$x_4 = \frac{1}{3} = 0.3333 \quad x_3 = \frac{1 - 1 * 0.3333}{-2} = -0.3333$$

$$x_2 = \frac{\frac{3}{2} - 0 * (-0.3333)}{-\frac{3}{2}} = -1 \quad x_1 = \frac{1 - 1 * (-1)}{-2} = -1$$

追赶法的典型例题



练习

分解下列矩阵

解析

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1/2 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1/2 & & \\ -1 & 5/2 & -4/5 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{bmatrix}$$
$$\rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1/2 & & \\ -1 & 5/2 & -4/5 & \\ & -2 & 12/5 & -5/6 \\ & & -3 & 5/2 \end{bmatrix}$$
$$L = \begin{bmatrix} 2 & & & \\ -1 & 5/2 & & \\ & -2 & 12/5 & \\ & & -3 & 5/2 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 1 & -1/2 & & \\ & 1 & -4/5 & \\ & & 1 & -5/6 \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

- 解对称正定方程组的Cholesky方法稳定，使用较广泛，但存在平方根开方的计算精度问题。故推荐采用改进的平方根法求解。
- 线性方程组系数矩阵是三对角阵，可用追赶法求解。



线性方程组的迭代法



迭代法的基本思想

引例

求解方程 $3x - e^x = 0$

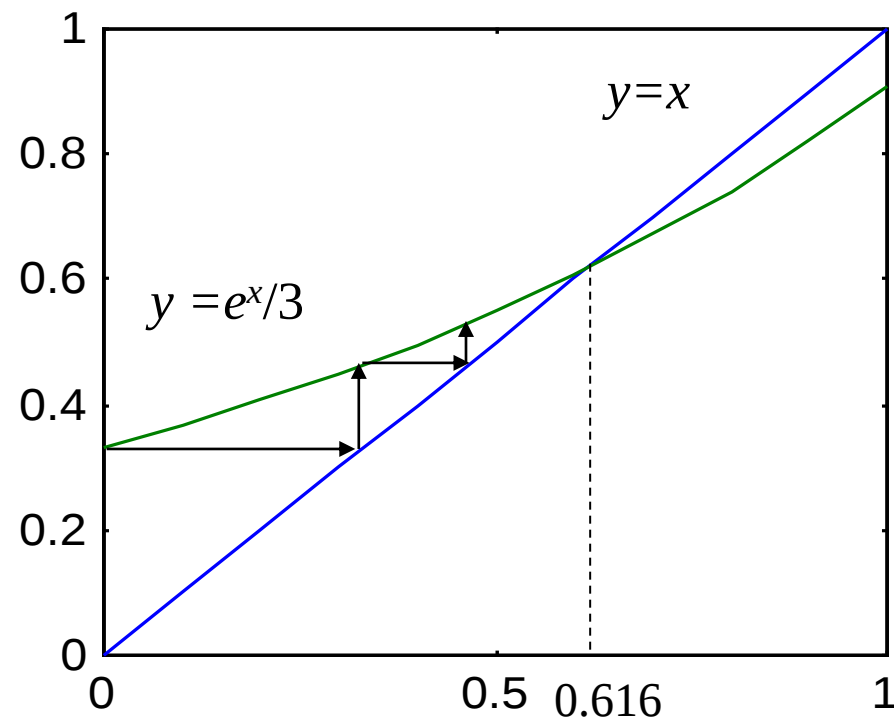
解析

方程变形: $x = e^x/3$

方程 $3x - e^x = 0$ 的迭代求解表: $x = e^x/3$

序号	0	1	2	3	4	5	6
左边	0	0.333	0.465	0.531	0.567	0.588	0.599
右边	0.333	0.465	0.531	0.567	0.588	0.599	0.607
序号	7	8	9	10	...		
左边	0.607	0.612	0.615	0.616	...		
右边	0.612	0.615	0.616	0.617	...		

迭代过程如图所示:





迭代法的基本思想

引例2

用迭代方法解 $x^3 - x^2 - x - 1 = 0$ 。

解析

第一步 构造迭代函数：

$$x = x^3 - x^2 - 1 \quad \varphi_1(x)$$

$$x = \sqrt[3]{x^2 + x + 1} \quad \varphi_2(x)$$

$$x = 1 + \frac{1}{x} + \frac{1}{x^2} \quad \varphi_3(x)$$

对于给定的方程 $f(x) = 0$ ，有多种方式将它改写成等价的形式 $x = j(x)$ 。但重要的是如何改写使得序列收敛？

计算结果：

序号	$j_2(x)$	$j_3(x)$	序号	$j_2(x)$	$j_3(x)$
1	1.4422	3.0000	8	1.8175	1.8136
2	1.6537	1.4444	9	1.8385	1.8554
3	1.7532	2.1716	10	1.8389	1.8294
4	1.7995	1.6725	11	1.8391	1.8454
5	1.8209	1.9554	12	1.8392	1.8355
6	1.8308	1.7730	13	1.8392	1.8416
7	1.8354	1.8822			

精确解： $x=1.8393$

$\varphi_1(x)$ 的迭代是失败的(迭代不收敛)。



迭代法的基本思想

引例3

求解方程组

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 6x_1 + 3x_2 + 12x_3 = 36 \end{cases} \quad (1)$$

解析

记为 $AX = b$, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 8 & -3 & 2 \\ 4 & 11 & -1 \\ 6 & 3 & 12 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 20 \\ 33 \\ 36 \end{pmatrix}$$

方程组的精确解是 $x^* = (3, 2, 1)^T$.



迭代法的基本思想

现将原方程改写为

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 6x_1 + 3x_2 + 12x_3 = 36 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = \frac{1}{8}(3x_2 - 2x_3 + 20), \\ x_2 = \frac{1}{11}(-4x_1 + x_3 + 33), \\ x_3 = \frac{1}{12}(-6x_1 - 3x_2 + 36). \end{cases} \quad (2)$$

或写为 $x = Bx + f$, 其中

$$B = \begin{bmatrix} 0 & \frac{3}{8} & -\frac{2}{8} \\ -\frac{4}{11} & 0 & \frac{1}{11} \\ -\frac{6}{12} & -\frac{3}{12} & 0 \end{bmatrix} \quad f = \begin{bmatrix} \frac{20}{8} \\ \frac{33}{11} \\ \frac{36}{12} \end{bmatrix} .$$



迭代法的基本思想

取一组数 $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})^T$ 代入方程右侧，若

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{8}(3x_2 - 2x_3 + 20), \\ x_2 = \frac{1}{11}(-4x_1 + x_3 + 33), \\ x_3 = \frac{1}{12}(-6x_1 - 3x_2 + 36). \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{1}{8}(3x_2^{(0)} - 2x_3^{(0)} + 20) = x_1^{(0)} \\ \frac{1}{11}(-4x_1^{(0)} + x_3^{(0)} + 33) = x_2^{(0)} \\ \frac{1}{12}(-6x_1^{(0)} - 3x_2^{(0)} + 36) = x_3^{(0)} \end{cases}$$

则 $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})^T$ 是原方程的根。

$$\begin{cases} \frac{1}{8}(3x_2^{(0)} - 2x_3^{(0)} + 20) \approx x_1^{(0)} \\ \frac{1}{11}(-4x_1^{(0)} + x_3^{(0)} + 33) \approx x_2^{(0)} \\ \frac{1}{12}(-6x_1^{(0)} - 3x_2^{(0)} + 36) \approx x_3^{(0)} \end{cases}$$

则 $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})^T$ 是原方程的近似根。



迭代法的基本思想

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{8}(3x_2 - 2x_3 + 20), \\ x_2 = \frac{1}{11}(-4x_1 + x_3 + 33), \\ x_3 = \frac{1}{12}(-6x_1 - 3x_2 + 36). \end{cases} \quad (2)$$

任取初始值, 例如 $x^{(0)} = (0,0,0)^T$
将这些值代入(2)式右边, 得到新的
值

$$x^{(1)} = (x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)})^T = (2.5, 3, 3)^T$$

再将 $x^{(1)}$ 分量代入 (2) 式右边得到 $x^{(2)}$,
反复利用这个程序,

得到向量序列和一般的迭代公式

$$x^{(0)} = \begin{bmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ x_3^{(0)} \end{bmatrix}, \quad x^{(1)} = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} \\ x_2^{(1)} \\ x_3^{(1)} \end{bmatrix}, \quad \dots, \quad x^{(k)} = \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{bmatrix}, \quad \dots$$



迭代法的基本思想

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{8}(3x_2 - 2x_3 + 20), \\ x_2 = \frac{1}{11}(-4x_1 + x_3 + 33), \\ x_3 = \frac{1}{12}(-6x_1 - 3x_2 + 36). \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = (3x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)} + 20)/8 \\ x_2^{(k+1)} = (-4x_1^{(k)} + x_3^{(k)} + 33)/11 \\ x_3^{(k+1)} = (-6x_1^{(k)} - 3x_2^{(k)} + 36)/12 \end{cases}$$

简写为 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$

其中 k 表示迭代次数 ($k=0,1,2, \dots$) .

迭代到第10次有

$$x^{(10)} = (3.000032, 1.999838, 0.9998813)^T;$$

$$\|\varepsilon^{(10)}\|_{\infty} = 0.000187 (\varepsilon^{(10)} = x^{(10)} - x^*).$$

迭代法用向量序列 $x^{(k)}$ 逼近精确解 x^* .

迭代法的基本思想

思考

对于任何一个方程组 $x = Bx + f$ (由 $Ax = b$ 变形得到的等价方程组), 由迭代法产生的向量序列 $x^{(k)}$ 是否一定逐步逼近方程组的解呢?

请考虑用迭代法解下述方程组:

$$\begin{cases} x_1 = 2x_2 + 5, \\ x_2 = 3x_1 + 5. \end{cases}$$

并不是所有的 $x^{(k)}$
都收敛到解 x^* !



迭代法的相关概念

定义3.1

如果 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)}$ 存在(记为 x), 称为迭代法收敛(显然 x 就是方程组的解)

否则称为迭代法发散

为此引进误差向量 $\varepsilon^{(k)} = x^{(k)} - x$

$$\left. \begin{aligned} x &= Bx + f \\ x^{(k)} &= Bx^{(k-1)} + f \end{aligned} \right\} \varepsilon^{(k)} = B\varepsilon^{(k-1)} = \dots = B^k \varepsilon^{(0)}.$$

由此可见：考察 $\{x^{(k)}\}$ 的收敛性。

就要研究 B 在什么条件下有： $\lim_{k \rightarrow \infty} \varepsilon^{(k)} = 0$

亦即要研究 B 满足什么条件时有：

$$B^k \rightarrow 0 \text{ (零矩阵)} (k \rightarrow \infty).$$

B 称为迭代矩阵

定理

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} x_j^{(k)} = x_j, j = 1, 2, \dots, n,$$

$x_j^{(k)}$ 及 x_j 分别是向量 $x^{(k)}$ 及 x 的第 j 个分量.

分析：设 $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i$$

$$\begin{array}{c} x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \\ \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \\ k \rightarrow \infty \quad x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \end{array}$$



相关概念

定义3.2 设 $\lambda_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 为 n 阶方阵的特征值, A 的谱半径定义为:

$$\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} \{|\lambda_i|\}$$

A 的谱定义为: $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$

矩阵的谱半径

常用结论: $\rho(A^k) = [\rho(A)]^k \quad \because Ax = \lambda x \Rightarrow A^k x = \lambda^k x$

$$\rho(A) \leq \|A\|$$

事实上: 对 A 的 $\forall \lambda_i$ 及特征向量 u_i , $|\lambda_i| \|u_i\| = \|\lambda_i u_i\| = \|Au_i\| \leq \|A\| \|u_i\|$

$\therefore |\lambda_i| \leq \|A\|$ 由 λ_i 的任意性: $\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i| \leq \|A\|$

当 A 对称时, $\rho(A) = \|A\|_2$

定理

设 $A = (a_{ij})_{n \times n}$, 则 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^k = 0$ (零矩阵) 的充要条件是:

$$\rho(A) < 1$$

证明: (必要性)

$$\because \lim_{k \rightarrow \infty} A^k = 0 \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \|A^k\| = 0$$

$$0 \leq \rho(A^k) = [\rho(A)]^k \leq \|A^k\|$$

$$\therefore \lim_{k \rightarrow \infty} [\rho(A)]^k = 0 \Rightarrow \rho(A) < 1$$

(充分性)

引用：设 A 为 n 阶方阵，则对任意的，
存在一种矩阵的范数 $\|\cdot\|$ 使得： $\|A\| \leq \rho(A) + \varepsilon$

若 $\rho(A) < 1$, 则对 $\varepsilon = \frac{1 - \rho(A)}{2} < 1$, 必存在一种范数 $\|\cdot\|$, 使得

$$\|A\| \leq \rho(A) + \varepsilon = \frac{1 + \rho(A)}{2} < 1 \quad \therefore \lim_{k \rightarrow \infty} \|A\|^k = 0$$

而： $\|A^k\| \leq \|A\|^k$ (范数定义)

于是： $\lim_{k \rightarrow \infty} \|A^k\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \|A\|^k = 0$ 即 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^k = 0$

定理 (迭代法基本定理)

设有方程组 $x = Bx + f$, 及一阶定常迭代法 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$.

对任意选取初始向量 $x^{(0)}$, 迭代法收敛的充要条件是:

$$\rho(B) < 1.$$

证明:

$$\varepsilon^{(k)} = x^{(k)} - x = B\varepsilon^{(k-1)} = \dots = B^k \varepsilon^{(0)} \rightarrow 0$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \varepsilon^k = 0 \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} B^k = 0 \Leftrightarrow \rho(B) < 1$$

$$(\varepsilon^{(0)} = x^{(0)} - x)$$



基本迭代法

设有

$$Ax = b ,$$

其中, $A = (a_{ij}) \in R^{n \times n}$ 为非奇异矩阵

如何建立解 $Ax = b$ 的各种迭代法呢?

将 A 分裂为

$$A = M - N ,$$

其中, M 为可选择非奇异矩阵, 且使 $Mx = d$ 容易求解, 一般选择为 A 的某种近似, 称 M 为分裂矩阵



基本迭代法

于是，求解 $Ax = b$ 转化为求解 $Mx = Nx + b$ ，即求解

$$Ax = b \Leftrightarrow \text{求解 } x = M^{-1}Nx + M^{-1}b.$$

可构造一阶常迭代法

$$\begin{cases} x^{(0)} \text{ (初始向量),} \\ x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f \quad (k = 0, 1, 2, \dots), \end{cases}$$

其中 $B = M^{-1}N = M^{-1}(M - A) = I - M^{-1}A$, $f = M^{-1}b$.

称 $B = I - M^{-1}A$ 为迭代法的迭代矩阵，选取 M 阵，

就得到解 $Ax = b$ 的各种迭代法



例题

例6.1

求解方程组

$Ax = b$, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 9 & -1 & -1 \\ -1 & 10 & -1 \\ -1 & -1 & 15 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 7 \\ 8 \\ 13 \end{pmatrix}$$

即

$$\begin{cases} 9x_1 - x_2 - x_3 = 7 \\ -x_1 + 10x_2 - x_3 = 8 \\ -x_1 - x_2 + 15x_3 = 13 \end{cases}$$

方程组的精确解为 $x^* = (1, 1, 1)^T$

解析

依次从三个方程中分别分离出 x_1, x_2, x_3

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{9}(x_2 + x_3 + 7), \\ x_2 = \frac{1}{10}(x_1 + x_3 + 8), \\ x_3 = \frac{1}{15}(x_1 + x_2 + 13). \end{cases} \quad \text{建立迭代公式}$$

, 把方程组等价变形为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (x_2^{(k)} + x_3^{(k)} + 7)/9 \\ x_2^{(k+1)} = (x_1^{(k)} + x_3^{(k)} + 8)/10 \\ x_3^{(k+1)} = (x_1^{(k)} + x_2^{(k)} + 13)/15 \end{cases}$$



例题

例6.1

求解方程组

$$\begin{cases} 9x_1 - x_2 - x_3 = 7 \\ -x_1 + 10x_2 - x_3 = 8 \\ -x_1 - x_2 + 15x_3 = 13 \end{cases}$$

方程组的精确解为

$$x^* = (1, 1, 1)^T$$

解析

迭代公式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (x_2^{(k)} + x_3^{(k)} + 7)/9 \\ x_2^{(k+1)} = (x_1^{(k)} + x_3^{(k)} + 8)/10 \\ x_3^{(k+1)} = (x_1^{(k)} + x_2^{(k)} + 13)/15 \end{cases}$$

取初始向量 $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$, 用迭代公式反复

迭代得向量序列 $\{x^{(k)}\}$, 其中

$$x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)})^T$$

计算结果见下表

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
1	0.777778	0.8	0.866667
2	0.962963	0.964444	0.971852
3	0.992922	0.993481	0.995160
4	0.998738	0.998808	0.999094
5	0.999767	0.999783	0.999836
6	0.999958	0.99996	0.99997
7	0.999992	0.999993	0.999995
8	0.999999	0.999999	0.999999

□ 迭代法的使用特点:

储存空间小, 程序简单, 求解大型方程组更有优越性。

□ 使用迭代法必须考虑其收敛性。



肖明

中山大学



谢谢大家！

肖 明

微电子科学与技术学院

邮箱: xiaom37@mail.sysu.edu.cn

电话: 1781722706

办公室: 中山大学珠海校区公共实验楼2楼A214室