高等数学第二部分

計算方法

高等数学教研組編

西安交通大學

1961·11

目 录

第一章 綫性代数計算方法

第二章 函数的多項式插值与逼近

第三章 常微分方程数值介法

第四章 偏微分方程的数値解法

第一章　綫性代数計算方法

§1. 引　言

綫性方程組

$$AX=B, \tag{1.1.1}$$

$$A=\begin{pmatrix} a_{11}\cdots \\ \vdots \\ \cdots a_{nn}\end{pmatrix},\qquad X=\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n\end{pmatrix},\qquad B=\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n\end{pmatrix}$$

当行列式 $|A|\neq 0$ 的条件下有唯一的解

$$X^*=\begin{pmatrix} x_1^* \\ \vdots \\ x_n^*\end{pmatrix}$$

這个解可由克来謀(Cramer)公式給出:

$$x_i^*=\frac{\triangle_i}{|A|},\quad \triangle_i=\begin{vmatrix} a_{11}\cdots a_{1i-1} & b_1 & a_{1i+1}\cdots a_{1n} \\ \cdots\cdots & \cdots & \cdots\cdots \\ a_{n1}\cdots a_{ni-1} & b_n & a_{ni+1}\cdots a_{nn}\end{vmatrix} \tag{1.1.2}$$

如果將(1.1.1)化为

$$X=(A+E)X-B=\tilde{A}X-B \tag{1.1.3}$$

它的解就是(1.1.1)的解，可以用迭代法求得。

按照克棻謀公式計算时，計算量很大，所以不宜采用，高斯 (Geuss) 方法要簡便得多了．甚至一般迭代法 (1.1.3) 有时收斂速度慢，或者初始値$X^{(0)}$不易得，所以还要創造其它形式的迭代法来弥补这些缺点．

很多微分方程的計算問題可以归結于綫性代数的計算，因此綫性代数的計算方法中佔重要地位．

§2. 高　斯　方　法

高斯方法就是消去法，现在通过具有四个未知数的方程組来說明这方法的步驟，設有方程組

$$\left.\begin{aligned} a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3+a_{14}x_4&=a_{15}\\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3+a_{24}x_4&=a_{25}\\ a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3+a_{34}x_4&=a_{35}\\ a_{41}x_1+a_{42}x_2+a_{43}x_3+a_{44}x_4&=a_{45} \end{aligned}\right\}\ \text{且}\ \begin{vmatrix} a_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & a_{44} \end{vmatrix}\neq 0 \qquad (1.2.1)$$

将(1.2.1)化为下列形式

$$\left.\begin{aligned} x_1+b_{12}x_2+b_{13}x_3+b_{14}x_4&=b_{15}\\ x_2+b_{23}x_3+b_{24}x_4&=b_{25}\\ x_3+b_{34}x_4&=b_{35}\\ x_4&=b_{45} \end{aligned}\right\} \qquad (1.2.2)$$

这就是高斯方法的目的.

从下面列表中Ⅰ,Ⅱ,Ⅲ,Ⅳ四个步驟説明将(1.2.1) 化为 (1.2.2)的計算过程.

	x_1	x_2	x_3	x_4	右項	$\sum$	
原式系数	a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	a_{15}	a_{16}	$a_{11}\neq 0,\ \begin{vmatrix} a_{11} & \\ & a_{22}\end{vmatrix}\neq 0,\ \begin{vmatrix} a_{11}\cdots & \\ \cdots\cdots & \\ \cdots a_{33}\end{vmatrix}\neq 0$
	a_{21}	a_{22}	a_{23}	a_{24}	a_{25}	a_{26}	
	a_{31}	a_{32}	a_{33}	a_{34}	a_{35}	a_{36}	
	a_{41}	a_{42}	a_{43}	a_{44}	a_{45}	a_{46}	
Ⅰ	1	b_{12}	b_{13}	b_{14}	b_{15}	b_{16}	$b_{1k}=\dfrac{a_{1k}}{a_{11}},\quad k>1$
		$a_{22.1}$	$a_{23.1}$	$a_{24.1}$	$a_{25.1}$	$a_{26.1}$	
		$a_{32.1}$	$a_{33.1}$	$a_{34.1}$	$a_{35.1}$	$a_{36.1}$	$a_{ik.1}=a_{ik}-a_{i1}b_{1k},\quad i,k\geqslant 2$
		$a_{42.1}$	$a_{43.1}$	$a_{44.1}$	$a_{45.1}$	$a_{46.1}$	
Ⅱ		1	b_{23}	b_{24}	b_{25}	b_{26}	$b_{2k}=\dfrac{a_{2k.1}}{a_{22.1}},\quad k>2$
			$a_{33.2}$	$a_{34.2}$	$a_{35.2}$	$a_{36.2}$	$a_{ik.2}=a_{ik.1}-a_{i2.1}b_{2k},\quad i,k\geqslant 3$
			$a_{43.2}$	$a_{44.2}$	$a_{45.2}$	$a_{46.2}$	
Ⅲ			1	b_{34}	b_{35}	b_{36}	$b_{3k}=\dfrac{a_{3k.2}}{a_{33.2}},\quad k>3$
				$a_{44.3}$	$a_{45.3}$	$a_{46.3}$	$a_{ik.3}=a_{ik.2}-a_{i3.2}b_{3k},\quad i,k\geqslant 4$

續上表

IV				1	b_{45}	b_{46}	$b_{45}=a_{45.3}/a_{44.3}$

高斯方法的計算方案有下列驗算方法：

将(1.2.1)及(1.2.2)作 $x_i=y_i-1$ 代换后，得

$$a_{i1}y_1+a_{i2}y_2+a_{i3}y_3+a_{i4}y_4=a_{i1}+a_{i2}+a_{i3}+a_{i4}+a_{i5}=a_{i6}$$
$$i=1,2,3,4 \tag{1.2.3}$$

及

$$\left.\begin{aligned} y_1+b_{12}y_2+b_{13}y_3+b_{14}y_4&=1+b_{12}+b_{13}+b_{14}+b_{15}=b_{16}\\ y_2+b_{23}y_3+b_{24}y_4&=1+b_{23}+b_{24}+b_{25}=b_{26}\\ y_3+b_{34}y_4&=1+b_{34}+b_{35}=b_{36}\\ y_4&=1+b_{45}=b_{46}\end{aligned}\right\} \tag{1.2.4}$$

(1.2.2) 与 (1.2.1)；(1.2.4) 与 (1.2.2) 相比較仅是右項改为系数的和 a_{i6}，b_{i6}，同样作出計算表格中各行系数的和$\sum$，我們就利用$\sum$来核算，例如

$$b_{16}=1+b_{12}+\cdots+b_{15},\quad b_{16}=\frac{a_{16}}{a_{11}}$$

如果数值$\frac{a_{16}}{a_{11}}$与数值 $1+b_{12}+\cdots+b_{15}$ 相同，則核算无誤，又如

$$\sum=a_{26.1}=a_{22.1}+a_{23.1}+a_{24.1}+a_{25.1},$$

当我們把 $\sum=a_{26.1}$ 作为方程的右項来看，应有

$$\sum=a_{26.1}=a_{26}-a_{21}b_{16}$$

其余核算依此类推.

利用高斯方法还可計算方程組行列式的值：

$$\begin{vmatrix} a_{11}\cdots\cdots a_{14}\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\\ a_{41}\cdots\cdots a_{44}\end{vmatrix}=a_{11}\cdot a_{22.1}\cdot a_{33.2}\cdot a_{44.3}\cdot$$

$$\cdot\begin{vmatrix} 1 & b_{12} & b_{13} & b_{14}\\ 0 & 1 & b_{23} & b_{24}\\ 0 & 0 & 1 & b_{34}\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{vmatrix}=a_{11}\cdot a_{22.1}\cdot a_{33.2}\cdot a_{44.3}$$

例：

$$
\begin{aligned}
x_1+0.42x_2+0.54x_3+0.66x_4&=0.3\\
0.42x_1+x_2+0.32x_3+0.44x_4&=0.5\\
0.54x_1+0.32x_2+x_3+0.22x_4&=0.7\\
0.66x_1+0.44x_2+0.22x_3+x_4&=0.9
\end{aligned}
$$

唯 一 除 法 方 案

x_1	x_2	x_3	x_4		$\sum$						
a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	a_{15}	a_{16}	1.00	0.42	0.54	0.66	0.3	2.92
a_{21}	a_{22}	a_{23}	a_{24}	a_{25}	a_{26}	0.42	1.00	0.32	0.44	0.5	2.68
a_{31}	a_{32}	a_{33}	a_{34}	a_{35}	a_{36}	0.54	0.32	1.00	0.22	0.7	2.78
a_{41}	a_{42}	a_{43}	a_{44}	a_{45}	a_{46}	0.66	0.44	0.22	1.00	0.9	3.22
1	b_{12}	b_{13}	b_{14}	b_{15}	b_{16}	1	0.42	0.54	0.66	0.3	2.92
	$a_{22.1}$	$a_{23.1}$	$a_{24.1}$	$a_{25.1}$	$a_{26.1}$		0.82360	0.09320	0.16280	0.37400	1.45360
	$a_{32.1}$	$a_{33.1}$	$a_{34.1}$	$a_{35.1}$	$a_{36.1}$		0.09320	0.70840	-0.13640	0.53800	1.20320
	$a_{42.1}$	$a_{43.1}$	$a_{44.1}$	$a_{45.1}$	$a_{46.1}$		0.16280	-0.13640	0.56440	0.70200	1.29280
	1	$b_{23.1}$	$b_{24.1}$	$b_{25.1}$	$b_{26.1}$		1	0.11316	0.19767	0.45410	1.76493
		$a_{33.2}$	$a_{34.2}$	$a_{35.2}$	$a_{36.2}$			0.69785	-0.15482	0.49968	1.03871
		$a_{43.2}$	$a_{44.2}$	$a_{45.2}$	$a_{46.2}$			-0.15482	0.53222	0.62807	1.00547
		1	$b_{34.2}$	$b_{35.2}$	$b_{36.2}$			1	-0.22185	0.71030	1.48844
			$a_{44.3}$	$a_{45.3}$	$a'_{46.3}$				0.49787	0.73804	1.23591
			1	x_4	$\bar{x}_4$				1	1.48240	2.48240
		1		x_3	$\bar{x}_3$			1		1.03917	2.03917
	1			x_2	$\bar{x}_2$		1			0.04348	1.04348
1				x_1	$\bar{x}_1$	1				-1.25780	-0.25779

高斯方法根据以上方案进步計算有时行不通，例如 $a_{11}=0$，或者 $a_{11}\neq0$，但 $a_{22.1}=0$，即

$$a_{22.1}=\frac{1}{a_{11}}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{vmatrix}=0,$$

等等，在这种情况下計算程序无法进行。这样，我們就有必要考虑另外的

計算程序，下面的計算程序叫做"主元素程序"。

設方程組

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{15} \\ a_{25} \\ a_{35} \\ a_{45} \end{pmatrix} \qquad (1.2.5)$$

所謂主元素即指其系数按絕对值最大者：

$$|a_{i_0k_0}| = \max |a_{ik}|$$

如果这样的元素不是唯一的，則任取其中之一，例如

$$a_{i_0k_0} = a_{23},$$

把(1.2.5)化为

$$\begin{bmatrix} a_{11.1} & a_{12.1} & 0 & a_{14.1} \\ b_{21} & b_{22} & 1 & b_{24} \\ a_{31.1} & a_{32.1} & 0 & a_{34.1} \\ a_{41.1} & a_{42.1} & 0 & a_{44.1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{15.1} \\ b_{25} \\ a_{35.1} \\ a_{45.1} \end{bmatrix}$$

下一步在

$$\begin{bmatrix} a_{11.1} & a_{12.1} & a_{14.1} \\ a_{31.1} & a_{32.1} & a_{34.1} \\ a_{41.1} & a_{42.1} & a_{44.1} \end{bmatrix}$$

中取定主元素，仿前面作法繼續下去，这样做的目的在于減少誤差。

虽然主元素法在理論上是对的，但是当方程組的行列式的数值接近于零时，例如

$$|A| = 0.0001$$

而我們的計算是按位小数計算，从近似計算的观点来看主元素法实际上也不好应用了。

应用高斯方法解方程組要比克来謀方法簡便得多，尤其是 n 值較大的时候，現在列表說明这兩个方法对于乘除法运算的次数。

	$n=2$	$n=3$	$n=4$
高　斯　方　法	6	26	106
克　栾　謀　方　法	8	364	25206

§3. 高斯方法与矩陣因式分解的关系

高斯方法将方程

$$AX=a, \quad A=\begin{pmatrix} a_{11}\cdots \\ \vdots \\ \cdots a_{nn} \end{pmatrix}, \quad X=\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad a=\begin{pmatrix} a_{1\,n+1} \\ \vdots \\ a_{n\,n+1} \end{pmatrix}$$

化为

$$BX=b, \qquad B=\begin{pmatrix} 1 \ b_{12} \cdots\cdots b_{1} \\ 0 \ 1 \cdots\cdots\cdots b_{2n} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ 0,\ 0,\ \cdots\cdots\cdots 1 \end{pmatrix}, \quad b=\begin{pmatrix} b_{1\,k+1} \\ \vdots \\ b_{n\,n+1} \end{pmatrix}$$

式中 a_{ik} 与 $b_{ik}(i=1,\ 2,\ \cdots,\ n,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ n+1)$ 有着下列关系

$$b_{1k}=\frac{a_{1k}}{a_{11}},\ k\geqslant 1,\ a_{ik.1}=a_{ik}-a_{i1}b_{1k},\ i,\ k\geqslant 2$$

$$b_{2k}=\frac{a_{2k.1}}{a_{22.1}},\ k\geqslant 2,\ a_{ik.2}=a_{ik.1}-a_{i2.1}b_{2k},\ i,\ k\geqslant 3$$

$$b_{3k}=\frac{a_{3k.2}}{a_{33.2}},\ k\geqslant 3,\ a_{ik.3}=a_{ik.2}-a_{i3.2}b_{3k},\ i,\ k\geqslant 4$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$b_{jk}=\frac{a_{jk.j-1}}{a_{jj.j-1}},\ k\geqslant j,\ a_{ik.j}=a_{ik.j-1}-a_{ij.j-1}b_{jk},\ i,\ k\geqslant j+1$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

如果将

$a_{ik.k-1}(i\geqslant k)$ 記作 $c_{ik}(i\geqslant k)$ 則

$$\begin{aligned} a_{ik.j}&=a_{ik.j-1}-a_{ij.j-1}b_{jk}=a_{ik.j-1}-c_{ij}b_{jk}= \\ &=a_{ik.j-2}-c_{ij-1}b_{j-1k}-c_{ij}b_{jk}= \\ &=\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots= \\ &=a_{ik}-c_{i1}b_{1k}-c_{i2}b_{2k}\cdots\cdots c_{ij}b_{jk}= \\ &=a_{ik}-\sum_{m=1}^{j}c_{im}b_{mk}. \end{aligned}$$

$$\therefore \quad \left.\begin{aligned} c_{ik}&=a_{ik.k-1}=a_{ik}-\sum_{m=1}^{k-1}c_{im}b_{mk} \qquad (i\geqslant k) \\ b_{ik}&=\frac{a_{ik.i-1}}{a_{ii.i-1}}=\frac{a_{ik}-\sum\limits_{m=1}^{i-1}c_{im}b_{mk}}{c_{ii}} \qquad (i\geqslant k) \end{aligned}\right\} \tag{1.3.1}$$

从(1.3.1)的第一式:

$$a_{ik}=\sum_{m=1}^{k-1}a_{im}b_{mk}+c_{ik}+\sum_{m=1}^{k-1}c_{im}b_{mk}+c_{nk}b_{kk}=\sum_{m=1}^{k}c_{im}b_{mk}\quad(i\geqslant k)$$

从(1.3.1)的第二式:

$$a_{ik}=\sum_{m=1}^{i-1}c_{im}b_{mk}+c_{ii}b_{ik}=\sum_{m=1}^{i}c_{im}b_{mk}\qquad(i<k)$$

因此說明了

$$A=CB\quad 其中\quad C=\begin{bmatrix} c_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_{21} & c_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{n1} & c_{n2} & c_{n3} & \cdots & c_{nn} \end{bmatrix}.$$

我們可以利用(1.3.1)通过 c_{ik} 直接計算 b_{ik}

$1°.\ c_{i1}=a_{i1}$ $\qquad 2°.\ b_{1k}=\dfrac{a_{1k}}{c_{11}}$

$3°.\ c_{i2}=a_{i2}-c_{i1}b_{12}$ $\qquad 4°.\ b_{2k}=\dfrac{a_{2k}-c_{21}c_{1k}}{c_{22}}$

………………………………………

这样使高斯方法的計算方案可以简化。

§4. 矩 陣 求 逆

1°. 設矩陣 A 的逆 A^{-1} 为已知，則方程組

$$AX=a$$

的解为

$$X=A^{-1}a$$

在結构力学中，利用感应数来解方程組的方法就是利用逆矩陣，感应数就是逆矩陣的元素。

令

$$A^{-1}=\begin{pmatrix} \alpha_{11}\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\alpha_{nn} \end{pmatrix},$$

从

$$AA^{-1}=E$$

得

$$\left.\begin{array}{ll}\sum_{k=1}^{n} a_{ik}\alpha_{kj}=\delta_{ij} & (i_{ij}=1,\ 2,\ \cdots,\ n)\\ \delta_{ij}=1, & i=j\\ \delta_{ij}=0, & i\neq j\end{array}\right\} \quad (1.4.1)$$

从(1.4.1)中每一个 j_0，得方程組

$$\sum_{k=1}^{n} a_{ik}\alpha_{kj_0}=\delta_{ij_0}. \qquad (i=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$$

解得 α_{1j_0}，α_{2j_0}，$\cdots$，α_{nj_0}，所以我們可以根据下列高斯方法的扩充方案去求 α_{kj}。

a_{11}	a_{21}	$\cdots$	a_{1n}	1	0	$\cdots$	0
a_{21}	a_{22}	$\cdots$	a_{2n}	0	1	$\cdots$	0
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
a_{n1}	a_{n2}	$\cdots$	a_{nn}	0	0	$\cdots$	1

2°. A 矩陣求逆 $A^{-1}=D$ 問題也可以通过将 A 分解为兩个三角形矩陣之积的过程来处理。設

$$A=CB,\quad A^{-1}=D=B^{-1}C^{-1},\quad D=\begin{pmatrix} d_{n}\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots d_{nn}\end{pmatrix}$$

故有

$$DC=B^{-1} \qquad (1.4.2)$$

$$BD=C^{-1} \qquad (1.4.3)$$

若

$$B=\begin{bmatrix} 1 & b_{12} & \cdots & a_{1n}\\ 0 & 1 & \cdots & b_{2n}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{bmatrix}$$

得

$$B^{-1}=\begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1n}\\ \beta_{21} & \beta_{22} & \cdots & \beta_{2n}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \cdots & \beta_{nn}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & * & * & \cdots & *\\ 0 & 1 & * & \cdots & *\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1\end{bmatrix}$$

符号 * 是确定的数，不必要具体写出，从左上至右下的对角綫上都是1，对角綫以下全是零。

又由

$$C=\begin{bmatrix} c_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{bmatrix}$$

得

$$C^{-1}=\begin{bmatrix} * & 0 & \cdots & 0 \\ * & * & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ * & * & \cdots & * \end{bmatrix}$$

从(1.4.2)得

$$\begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ d_{n1} & d_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & * & \cdots & * \\ 0 & 1 & \cdots & * \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

又从(1.4.2)得

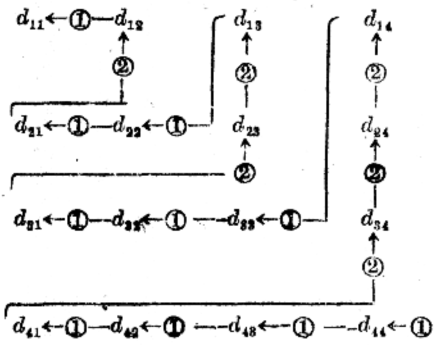
$$\begin{bmatrix} 1 & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & b_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ d_{n1} & d_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} * & 0 & \cdots & 0 \\ * & * & \cdots & * \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ * & * & \cdots & * \end{bmatrix}$$

取 $n=4$ 为例，得：

$$\left.\begin{array}{r|cccc} & i=1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline c_{11}d_{i1}+c_{21}d_{i2}+c_{31}d_{i3}+c_{41}d_{i4}= & 1 & 0 & 0 & 0 \\ c_{22}d_{i2}+c_{32}d_{i3}+c_{42}d_{i4}= & & 1 & 0 & 0 \\ c_{33}d_{i3}+c_{43}d_{i4}= & & & 1 & 0 \\ c_{44}d_{i4}= & & & & 1 \end{array}\right\}\text{①}$$

$$\left.\begin{array}{r|ccc} & j=2 & 3 & 4 \\ \hline d_{1j}+b_{12}d_{2j}+b_{13}d_{3j}+b_{14}d_{4j}= & 0 & 0 & 0 \\ d_{2j}+b_{23}d_{3j}+b_{24}d_{4j}= & & 0 & 0 \\ d_{3j}+b_{34}d_{4j}= & & & 0 \end{array}\right\}\text{②}$$

計算步驟及計算表格如下:



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}
c_{11} 1	b_{12}	b_{13}	b_{14}
c_{21}	c_{22} 1	b_{23}	b_{24}
c_{31}	c_{32}	c_{33} 1	b_{34}
c_{41}	c_{42}	c_{43}	c_{44} 1

以上方法求得的逆矩陣 D 只不过是近似的，因为在計算过程中对于各个元素有不可避免的舍入誤差，这样影响最后的結果是难以估計的。現在我們把以上求得的近似 D 記作 D_0，作为 D 的初始近似，設法建立一个迭代程序加以修正。

設矩陣 A 为已知，其逆 D 为未知，按定义有

$$D^{-1}-A=0$$

将 $D^{-1}-A$ 作为未知量 D 的函数 $F(D)$ 看待，按牛頓方法得

$$D_1=D_0-\frac{F(D_0)}{F'(D_0)}=D_0-\frac{D_0^{-1}-A}{-D_0^{-2}}$$

$$=D_0+D_0-AD_0^2=D_0(2E-AD_0),\quad (AD_0\approx D_0A\approx E)$$

这迭代程序收斂很快，如果 D_0 各个元素已准确到小数点后第四位，則 D_1 各元素可以准确到 7－8 位。

3°. 分块法求逆矩陣

有时在求 n 阶方陣的逆矩陣时，往往用分块法即将 n 阶方陣 s 用下面的方式分块

$$s=\left(\frac{A\,|\,B}{C\,|\,D}\right),$$

其中 A、D 分别是 p 和 q 阶分陣，且 $p+q=n$，要找的逆矩陣 s^{-1} 如下形式

$$S^{-1}=\left(\begin{array}{c|c} K & L \\ \hline M & N \end{array}\right),$$

其中K，N是p，q阶的分陣。

根据分块矩陣的乘法规则，可得下列等式：

$$AK+BM=E,\qquad AL+BN=0$$
$$CK+DM=0\qquad CL+DN=E$$

由第一式減去第三式乘以BD^{-1}，則得

$$(A-BD^{-1}C)K=E,$$

由此得到

$$K=(A-BD^{-1}C)^{-1},$$

再由第三式可得

$$M=-D^{-1}CK.$$

同样，由第二第四兩个方程可得到：

$$N=(D-CA^{-1}B)^{-1},$$
$$L=-A^{-1}BN.$$

这样n阶分陣求逆便归結为四个比n低阶的分陣求逆（其中兩个是p阶，兩个是q阶的）及一些矩陣的乘法。

4°. 加边法求逆矩陣

所含n阶矩陣A，可以看作由$n-1$阶矩陣加边而得的結果，假設$n-1$阶的逆矩陣是已知的，設

$$A_n=\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1\,n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2\,n-1} & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n-1\,1} & a_{n-1\,2} & \cdots & a_{n-1\,n-1} & a_{n-1\,n} \\ \hline a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n\,n-1} & a_{nn} \end{array}\right)=\begin{pmatrix} A_{n-1} & u_n \\ V_n & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

此处A_{n-1}为$n-1$阶方陣，及 (1.4

$$V_n(a_{n1},\ a_{n2},\ \cdots,\ a_{n,n-1}),\qquad u_n=\begin{pmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \cdots \\ a_{n-1\,n} \end{pmatrix}$$

我們要找A^{-1}，使它也是

$$D_n = A_n^{-1} = \begin{pmatrix} P_{n-1} & r_n \\ q_n & \frac{1}{\alpha_n} \end{pmatrix}, \tag{1.4.5}$$

其中 P_{n-1} 是 $n-1$ 阶方陣，q_n 是单行矩陣，r_n 是单列矩陣，$\frac{1}{\alpha_n}$ 是数，它們都是需要决定的。

根据矩陣的乘法（分块矩陣乘法）可得：

$$A_n A_n^{-1} = \begin{pmatrix} A_n & u_n \\ V_n & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_n & r_n \\ q_n & \frac{1}{\alpha_n} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} A_{n-1}P_{n-1} + u_n q_n & A_{n-1}r_n + \frac{u_n}{\alpha_n} \\ V_n P_{n-1} + a_{nn} q_n & V_n r + \frac{a_{nn}}{\alpha_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

由此可推出

$$A_{n-1}P_{n-1} + u_n q_n = E \tag{1.4.6}$$

$$v_n P_{n-1} + a_{nn} q_n = 0 \tag{1.4.7}$$

$$A_{n-1} r_n + \frac{u_n}{\alpha_n} = 0 \tag{1.4.8}$$

$$v_n r_n + \frac{a_{nn}}{\alpha_n} = 1 \tag{1.4.9}$$

由等式(1.4.8)可得

$$r_n = -\frac{A_{n-1}^{-1} u_n}{\alpha_n},$$

將此 r_n 代入(1.4.9)，則得

$$\alpha_n = a_{nn} - v_n A_{n-1}^{-1} u_n.$$

其次，由(1.4.6)可得

$$P_{n-1} = A_{n-1}^{-1} - A_{n-1}^{-1} u_n q_n, \tag{1.4.10}$$

这樣，由(1.4.7)及(1.4.10)知：

$$v_n A_{n-1}^{-1} - v_n A_{n-1}^{-1} u_n q_n + a_{nn} q_n = v_n A_{n-1}^{-1} - (a_{nn} - \alpha_n) q_n + a_{nn} q_n$$

$$= v_n A_{n-1}^{-1} + \alpha_n q_n = 0$$

于是

$$q_n = -\frac{v_n A_{n-1}^{-1}}{\alpha_n},$$

最后将 q_n 代入(1.4.10)得

$$P_{n-1}=A_{n-1}^{-1}+\frac{A_{n-1}^{-1}u_n v_n A_{n-1}^{-1}}{\alpha_n},$$

这样就得到了最后的結果为

$$A_n^{-1}=\begin{pmatrix} A_{n-1}^{-1}+\dfrac{A_{n-1}^{-1}u_n v_n A_{n-1}^{-1}}{\alpha_n}, & -\dfrac{A_{n-1}^{-1}u_n}{\alpha_n} \\ -\dfrac{v_n A_{n-1}^{-1}}{\alpha_n}, & \dfrac{1}{\alpha_n} \end{pmatrix}$$

其中 $\alpha_n=a_{nn}-v_n A_{n-1}^{-1}u_n$。

上面的公式，显然是用分块法求逆矩陣时所得之公式的特殊情形，此时

$$p=n-1,\ q=1。$$

§5. 迭 代 法

迭代法是将綫性方程組的解作为某列矢量的极限給出的。

假設給定了一組如下形式的綫性方程

$$\left.\begin{aligned} x_1&=a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n+b_1\\ x_2&=a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n+b_2\\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\ x_n&=a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n+b_n \end{aligned}\right\} \qquad (1.5.1)$$

事实上要将一个綫性方程組化成 (1.5.1) 的形式是有很多方法的，每个方法都将給出迭代法的某种变形。

将方程組(1.5.1)变成

$$X=AX+B \qquad (1.5.1')$$

的形式，其中 A 为系数矩陣，B 是自由項所成的矢量。作出一系列矢量：先取某矢量 $X^{(0)}$（通常是任意的）作为(1.5.1′)解的初始近似值，再由它作出矢量

$$\begin{aligned} X^{(1)}&=AX^{(0)}+B\\ X^{(2)}&=AX^{(1)}+B\\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\\ X^{(k)}&=AX^{(k-1)}+B\\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \end{aligned}$$

若矢量$X^{(0)}$, $X^{(1)}$, …, $X^{(k)}$, …, 列具有极限X，那么这个极限$\bar{X}$就是(1.5.1′)的解。

以下給出迭代法收斂的条件:

定理 設有綫性方程組

$$X = AX + B,\quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix},\quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & & \\ & & \\ & & a_{nn} \end{pmatrix},\quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \qquad (1.5.1')$$

它的迭代程序

$$X^{(m+1)} = AX^{(0)} + B,\ m = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots \qquad (1.5.2)$$

对于任何初始矢量$X^{(0)}$及任何固定矢量B都收斂其必要与充分条件是矩陣A的一切特征値λ的模数$|\lambda|$都小于1。

关于矩陣A的特征値問題以后再談，下列三个条件的任何一个都是保証A的一切$|\lambda| < 1$:

$$1°\quad \max_i \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \mu < 1;$$

$$2°\quad \max_j \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| = \nu < 1; \qquad (1.5.3)$$

$$3°\quad \sqrt{\sum_{i,j=1}^{n} a^2_{ij}} = \rho < 1.$$

在$\mu < 1$的情况下，迭代程序(1.5.2)的收斂速度为

$$\left|x_i^{(m)} - x_i^*\right| \leq \frac{\mu^m}{1-\mu} \max_i \left|x_i^{(1)} - x_i^{(0)}\right| \qquad (1.5.4)$$

这里$X^* = (x_1^*,\ x_2^*,\ \cdots,\ x_n^*)$是方程組的解。

在$\nu < 1$的情况下，有类似的結果，即将(1.5.3)式中μ改为ν。

在$\rho < 1$的情况下有

$$\left\{ \sum_{i=1}^{n} (x_i^{(m)} - x_i^*)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \leq \frac{\rho^m}{1-\rho} \left\{ \sum_{i=1}^{n} (x_i^{(1)} - x_i^{(0)})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

关于$X^{(0)}$，一般取法:

$$X^{(0)} = B = (b_1,\ b_2,\ \cdots,\ b_n),$$

迭代法的計算方案有兩种:

i) 直接按公式(1.5.2)进行計算

$$X^{(1)} = AX^{(0)} + B,\ X^{(2)} = AX^{(1)} + B,$$

开始几步可用較少的小数位进行計算。