计算数学讲义(二)

线性代数计算方法

南京大学数学系计算数学专业 编

科学出版社

计算数学讲义(二)

线性代数计算方法

南京大学数学系计算数学专业 编

科学出版社

1979

内 容 简 介

本书共分七章：第一章为解线性代数方程组的直接方法，第二章对大型稀矩阵方程组的解法作了初步介绍，第三章介绍计算部分特征值的方法，第四、六两章分别介绍计算实对称矩阵特征值和特征向量的Jacobi 方法和 QR 方法，第五章介绍简化矩阵的方法，目的在于为第六章作准备，第七章的内容是广义特征值问题的计算方法；在最后的附录中对线性代数计算方法的误差分析作了简单介绍.

计算数学讲义(二)

线性代数计算方法

南京大学数学系计算数学专业 编

*

科学出版社 出版

北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂 印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1979年2月第 一 版　　开本：787×1092 1/32

1979年2月第一次印刷　　印张：4 3/4

印数：0001—125,400　　字数：106,000

统一书号：13031・857

本社书号：1223・13—1

定 价： 0.50 元

说　　明

1. 这一套《计算数学讲义》是在我专业过去所编教材的基础上修改补充而成的.

2. 这套讲义共分下列九册:

(一) 数值逼近方法,

(二) 线性代数计算方法,

(三) 常微分方程数值解法,

(四) 偏微分方程数值解法,

(五) 最优化方法,

(六) 概率统计基础和概率统计方法,

数学基础之一: 线性代数,

数学基础之二: 常微分方程,

数学基础之三: 偏微分方程.

由于篇幅的原因,我们把《概率统计基础》和《概率统计方法》合并为一册.

3 这套讲义可作为综合性大学理科计算数学专业教材,也可供利用电子计算机从事科学计算的科技人员参考.

4. 这套《计算数学讲义》的主编是何旭初同志.

讲义各册由我专业有关同志分工负责.

这册《线性代数计算方法》的编写者为张元继、林成森、何旭初等同志.

5. 由于理论水平和实践经验所限,讲义中的缺点和错误在所难免,我们衷心盼望读者提出宝贵意见,以便进一步修改.

南京大学数学系计算数学专业

1978年3月

目　　录

第一章　解线性代数方程组的消去法

§1　Gauss 消去法

1.1. Gauss 消去法的基本思想　设给定 n 阶线性方程组

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1, \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2, \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots&\cdots\cdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

用矩阵和向量的记号来表示，(1)可以写成

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

其中的 A 为方程组(1)的系数矩阵 $[a_{ij}]$，$\mathbf{x}$ 表示以 $x_1, \cdots, x_n$ 为分量的 n 维向量，$\mathbf{b}$ 为方程组(1)的右端向量，其分量为 $b_1, \cdots, b_n$. 若矩阵 A 非奇异，则方程组(1)有唯一解. 现在我们的目的是求方程组(1)的解. 这时，很自然地会想到 Cramer 法则，即

$$x_i = \frac{\Delta_i}{\Delta},\ i = 1, \cdots, n, \tag{2}$$

其中 Δ 表示系数行列式 $\det A$，而 Δ_i 表示把 Δ 中第 i 列换成 $\mathbf{b}$ 后所得的 n 阶行列式. 但是，用公式(2)来计算方程组(1)的解是很不现实的. 因为一个 n 阶行列式中有 $n!$ 个项，而每一项又为 n 个数的乘积，姑且不管舍入误差对计算结果精确度的影响，对于较大的 n，运算量之大是惊人的. 因此需要寻求其他方法求解. 一种有效的方法就是*消去法*，它实际上就是

中学代数课本中所讲的加减消去法．今举例说明如下．

例　解方程组

$$\begin{aligned} 2x_1+4x_2-2x_3&=6,\\ x_1-x_2+5x_3&=0,\\ 4x_1+x_2-2x_3&=2. \end{aligned} \tag{3}$$

用 1/2 乘第一个方程的两端并从第二方程减去所得方程，然后再用 2 乘第一方程并从第三方程减去所得方程，则方程组(3)就化为

$$\begin{aligned} 2x_1+4x_2-2x_3&=6,\\ -3x_2+6x_3&=-3,\\ -7x_2+2x_3&=-10. \end{aligned} \tag{3a}$$

下一步再从(3a)的第三个方程减去用 7/3 乘第二个方程所得结果，最后，(3a)就化为三角形方程组

$$\begin{aligned} 2x_1+4x_2-2x_3&=6,\\ -3x_2+6x_3&=-3,\\ -12x_3&=-3. \end{aligned} \tag{3b}$$

这时，我们就可以从(3b)的第三个方程解出 x_3，以所得结果代入第二方程解出 x_2，再把所得到的 x_3 和 x_2 代入第一个方程中就可以解出 x_1，方程组的未知量 x_1，x_2 和 x_3 就完全解出来了．

上述解方程组的方法就是 Gauss 消去法．

1.2. Gauss 消去法的计算过程　现在我们来考虑一般的 n 阶方程组(1)的情形．消元过程由下列 $n-1$ 步所组成：

第一步：从最后 $n-1$ 个方程中消去未知量 x_1，算法如下：

设 $a_{11}\neq 0$，令 $l_{i1}=a_{i1}/a_{11}$，$i=2, 3, \cdots, n$．然后对 $i=2, 3, \cdots, n$，$j=2, \cdots, n$，计算

$a_{i1}:=0,$

$a_{ij}:=a_{ij}-l_{i1}a_{1j},$

$b_i := b_i - l_{i1}b_1$.

如果 $a_{11}=0$，因为矩阵A非奇异，总存在 $a_{r1}\neq 0$，这时可将第一方程和第 r 方程交换，并保留系数的原来记号，再进行前述运算.

第 k 步：设从第 2 到第 n 方程中 x_1 的系数、从第 3 到第 n 方程中 x_2 的系数、…、从第 k 到第 n 方程中 x_{k-1} 的系数均消为零. 这时我们仍用记号 a_{ij} 和 b_i 表示相应方程组的系数和右端. 为了从第 $k+1$ 到第 n 方程中消去 x_k 的系数，在 $a_{kk}\neq 0$ 时，令 $l_{ik}=a_{ik}/a_{kk}$，$i=k+1,\cdots,n$，对 $i=k+1,\cdots,n$；$j=k+1,\cdots,n$，计算：

$$a_{ik} := 0,$$

$$a_{ij} := a_{ij} - l_{ik}a_{kj},$$

$$b_i := b_i - l_{ik}b_k.$$

在完成上述 $n-1$ 步运算后，方程组(1)就化为三角形：

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + \cdots\cdots + a_{1n}x_n &= b_1, \\ a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}b_n &= b_2, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & \\ a_{nn}x_n &= b_n. \end{aligned}$$

其中的系数 a_{ij} 与 b_i，记号同前，其值已经改变了. 这时，便可以从下到上逐次把 $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$ 的值计算出来，这个过程称为“回代”. 我们称第 k 步中的系数 a_{kk} 为第 k 个主元素. 如果 $a_{kk}=0$，总可以选出系数 $a_{rk}\neq 0$，$r>k$，然后交换第 r, k 两方程. 求系数 $a_{rk}\neq 0$ 的过程称为“选主元”. 更具体地说，这种选主元的方法是按列选主元的方法.

Gauss 消去法的运算次数：

消去第一列 $n-1$ 个系数所需要的乘法运算次数为 $(n-1)n$，消去第二列中 $n-2$ 个系数需要 $(n-2)(n-1)$ 次乘法，最后，消去第 $n-1$ 列中一个系数需 1×2 次乘法，

所以，把方程组(1)化为三角形，共需乘法运算总次数为

$$\sum_{k=2}^{n}(k^2-k)=\sum_{k=1}^{n}k^2-\sum_{k=1}^{n}k$$
$$=\frac{1}{6}(n+1)\ n(2n+1)\ -\frac{n(n+1)}{2}$$
$$=\frac{1}{3}n^3-\frac{1}{3}n.$$

其次，在生成 l_{ij} 时还需要除法运算，其总次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1}k=\frac{1}{2}(n-1)n=\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n.$$

因此，用 Gauss 消去法化方程组(1)为三角形共需乘、除运算总次数为

$$\frac{1}{3}n^3+\frac{1}{2}n^2-\frac{5}{6}n.$$

在回代求解时，需要作乘法运算的总次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1}k=\frac{1}{2}(n-1)n=\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n.$$

此外，还需要 n 次除法运算，所以求解过程共需乘、除法运算的总次数为:

$$\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n+n=\frac{1}{2}n^2+\frac{1}{2}n.$$

于是，用 Gauss 消去法解 n 阶方程组时，总共需要乘、除法运算的次数为

$$\frac{1}{3}n^3+\ n^2-\frac{1}{3}n.$$

对于比较大的 n，所需运算工作量可以用 $\frac{1}{3}n^3$ 来估计，因为，相对而言，低阶项微不足道，而加减运算也可以略而不计.

1.3. 主元的选取对求解的影响 在用消去法解方程组的

过程中，主元的选取对结果会产生很大影响． 今举一例作为说明．

例　解方程组

$$\begin{aligned} 0.50x_1 + 1.1x_2 + 3.1x_3 &= 6.0, \\ 2.0x_1 + 4.5x_2 + 0.36x_3 &= 0.020, \\ 5.0x_1 + 0.96x_2 + 6.5x_3 &= 0.96, \end{aligned} \tag{4}$$

其中的系数都取两位有效数字．为了减小舍入误差的影响，在计算过程中我们多保留一位数字． 若按自然顺序（即按主对角元的顺序）选取主元，则消元结果如下：记原始的系数矩阵与右端为

$$\left[\begin{array}{ccc:c} 0.500 & 1.10 & 3.10 & 6.00 \\ 2.00 & 4.50 & 0.360 & 0.0200 \\ 5.00 & 0.960 & 6.50 & 0.960 \end{array}\right].$$

第一步取 0.500 为主元，消元结果为（带星号的系数为主元）：

$$\left[\begin{array}{ccc:c} 0.500^* & 1.10 & 3.10 & 6.00 \\ 0 & 0.100 & -12.0 & -24.0 \\ 0 & -10.0 & -24.5 & -590 \end{array}\right];$$

第二步取 0.100 作为主元，消元结果为

$$\left[\begin{array}{ccc:c} 0.500 & 1.10 & 3.10 & 6.00 \\ 0 & 0.100^* & -12.0 & -24.0 \\ 0 & 0 & -1220 & -2460 \end{array}\right].$$

在计算时，每次都对计算结果保留三位有效数字． 然后利用回代求解便得

$$x_3 \approx 2.02, \quad x_2 \approx 2.40, \quad x_1 \approx -5.80.$$

但是准确满足方程组(4)的解为:

$$x_3 = 2.00, \quad x_2 = 1.00, \quad x_1 = -2.60,$$

二者相比，误差很大.

为了改善计算结果，在消元时可选取绝对值较大的系数作为主元，例如，在消元的第一步可取第三个方程中 x_1 的系数 5.00 作为主元，这时消元结果为(一、三两方程交换)：

$$\begin{bmatrix} 5.00^* & 0.960 & 65.0 & : & 0.960 \\ 0 & 4.12 & -2.24 & : & -0.364 \\ 0 & 1.00 & 2.45 & : & 5.90 \end{bmatrix}.$$

在第二步消元时，取新的第二个方程中 x_2 的系数 4.12 作为主元，消元结果为

$$\begin{bmatrix} 5.00 & 0.960 & 6.50 & : & 0.960 \\ 0 & 4.12^* & -2.24 & : & -0.364 \\ 0 & 0 & 2.99 & : & 5.99 \end{bmatrix}.$$

最后，利用回代求解得

$$x_3 \approx 2.00, \quad x_2 \approx 1.00, \quad x_1 \approx -2.60.$$

上述选主元的方法称为*按列选主元*.

自然，我们也可以每次选取系数矩阵中绝对值最大的元素作为主元，这就是*总体选主元的方法*.

1.4. Gauss 主元素消去法 上一小节之末所讲的按列选主元以及总体选主元的方法具有比较好的数值稳定性，就是说计算结果受运算过程中舍入误差的影响比较小，是实际上经常使用的方法. 为了突出消元过程中“优选”主元这一点，我们称之为 Gauss *主元素消去法*，并总结于下.

1) *按列选主元的消去法*

对于 $k=1,2,\cdots,n-1$ 进行下列运算：

1° 选主元：求 r 使

$$|a_{r,k}| = \max_{i\geqslant k}|a_{ik}|;$$

2° 若 $a_{rk}=0$，则系数矩阵为奇异，停止计算；否则，进行下一步；

3° 交换 r, k 两行和右端的 b_r, b_k 两个分量；

4° 对 $i=k+1, k+2, \cdots, n$，计算

$$a_{ik}:=l_{ik}=a_{ik}/a_{kk};$$

5° 对 $i=k+1, \cdots, n,\ j=k+1, \cdots, n$，计算

$$a_{ij}:=a_{ij}-l_{ik}a_{kj};$$

$$b_i:=b_i-l_{ik}b_k.$$

在完成上述全部运算后，方程组(1)就化为三角形：

$$\begin{aligned} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n&=b_1,\\ a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n&=b_2,\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots&,\\ a_{nn}x_n&=b_n. \end{aligned}$$

然后可以利用回代求解：即对 $k=n, n-1, \cdots, 1$，令

$$x_k:=\left(b_k-\sum_{j=k+1}^{n}a_{kj}x_j\right)\Big/a_{kk}.$$

按列选主元消去法框图见第 8 页.

2）总体选主元消去法

对于 $k=1, 2, \cdots, n-1$，进行下列运算：

1° 选主元：求 i_k, j_k，使

$$|a_{i_kj_k}|=\max_{i,j\geqslant k}|a_{ij}|;$$

2° 若 $a_{i_kj_k}=0$，则系数矩阵为奇异，停止计算；否则进行下一步；

3° 交换 i_k, k 两行，j_k, k 两列；b_{i_k}, b_k 两个分量；

4° 对 $i=k+1, \cdots, n$，计算

$$a_{ik}:=l_{ik}=a_{ik}/a_{kk};$$

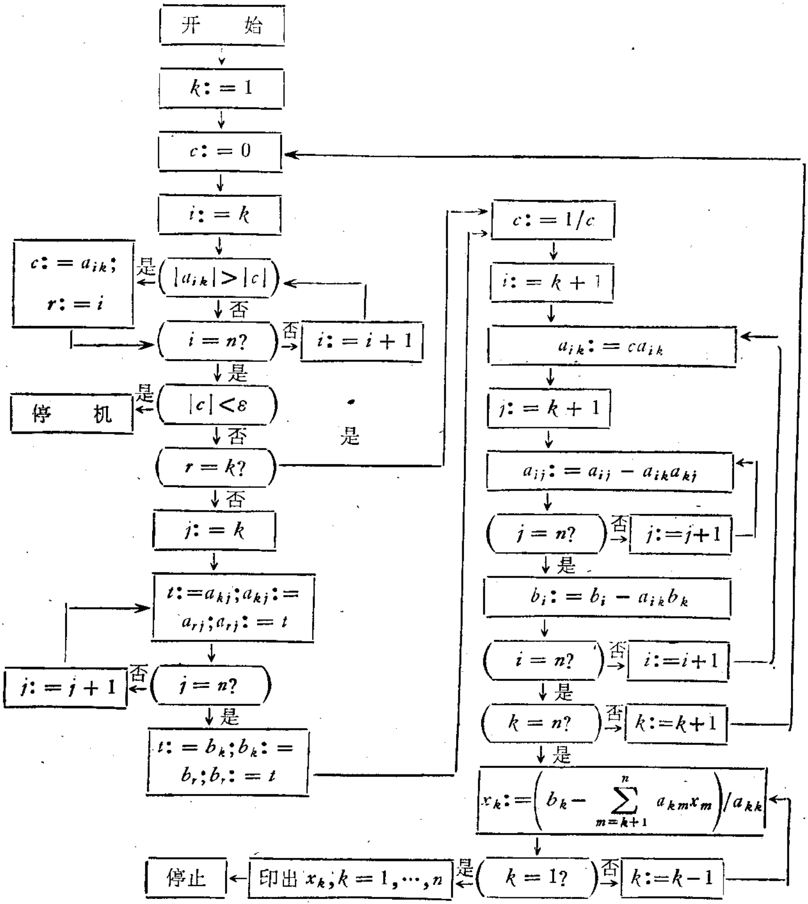
5° 对 $i,j=k+1, \cdots, n$，计算

$$a_{ij}:=a_{ij}-l_{ik}a_{kj};$$

6° 对 $i=k+1,\cdots,n$,计算

$$b_i:=b_i-l_{ik}b_k.$$

按列选主元消去法框图



注: ε 为控制常数

在上述运算完成后,方程组就化为三角形:

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_{j_1} + a_{12}x_{j_2} + \cdots + a_{1n}x_{j_n} &= b_1; \\
a_{22}x_{j_2} + \cdots + a_{2n}x_{j_n} &= b_2; \\
\cdots\cdots\cdots\cdots &, \\
a_{nn}x_{j_n} &= b_n.
\end{aligned}
$$

然后，利用回代即可求解：对 $k = n, n-1, \cdots, 1$，计算

$$
x_{j_k} := \left(b_k - \sum_{r=k+1}^{n} a_{kr}x_{j_r} \right) \Big/ a_{kk},
$$

其中规定 $\sum_{n+1}^{n} (\cdots) = 0$.

1.5. Gauss-Jordan 消去法 前面所讲的消去法最后把方程组化为三角形，求解要利用回代．但是，对消元过程稍加改变不难把方程组化为对角形，这样求解就不需要回代了．今对这个方法简单介绍如下．

我们假定消元是按自然顺序按列进行的．第一次消元后，方程组的系数矩阵化为

$$
\begin{bmatrix}
\times & \times \cdots \times \\
0 & \times \cdots \times \\
\vdots & \vdots \\
0 & \times \cdots \times
\end{bmatrix}.
$$

在第二次消元时，除把第二列主对角元下面的元素消为零外，同时也把同一列上面的元素消为零，即第二次消元后所得系数矩阵的形式为

$$
\begin{bmatrix}
\times & 0 & \times \cdots \times \\
0 & \times & \times \cdots \times \\
\vdots & 0 & \times \cdots \times \\
\vdots & \vdots & \vdots \quad\;\; \vdots \\
0 & 0 & \times \cdots \times
\end{bmatrix};
$$

余类推． 最后，方程组的系数矩阵就化为对角形：

$$\begin{bmatrix} \times & & & \\ & \times & & 0 \\ & 0 & \ddots & \\ & & & \times \end{bmatrix};$$

这样就可以直接把未知量计算出来而不必利用回代了．

当然，此法也可以采取按列或总体选主元的方式进行．

这种消元的方法称为 Gauss-Jordan 消去法．

§2 直接三角分解法

2.1. 消元过程和矩阵的初等变换 在 Gauss 消去法中，每一步的消元过程，实际上相当于对系数矩阵 A 作一次初等变换． 例如，第一步在从第 2—第 n 方程中消去 x_1 的系数就相当于用初等变换矩阵

$$T_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -l_{n1} & & & 1 \end{bmatrix} \tag{5}$$

左乘矩阵 A． 第二步及第 k 步相当于分别用矩阵

$$T_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & \mathbf{0} & \\ 0 & -l_{32} & 1 & & \\ & \vdots & \mathbf{0} & \ddots & \\ 0 & -l_{n2} & & & 1 \end{bmatrix},$$

$$T_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & 1 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & 1 & & & \\ & & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & -l_{nk} & & & 1 \end{bmatrix} \tag{6}$$

左乘前一次的结果，即

$$T_k T_{k-1} \cdots T_1 A,$$

在 $k = n-1$ 时，乘积就化为一个上三角矩阵 U，

$$T_{n-1} T_{n-2} \cdots T_1 A = U.$$

在需要进行行交换时，中间还得左乘以某些排列矩阵.

矩阵(6)是一种特殊的单位下三角矩阵，这种矩阵常称之为 Frobenius 矩阵，它具有下列简单的性质：

1）

$$T_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{k+1,k} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix}. \tag{7}$$

2）

$$T_1^{-1} T_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & & & 1 \end{bmatrix}$$