工程数学

第一章 矩阵分析基础

第二章 科学计算方法

第三章 最优化理论与方法

第四章 组合数学

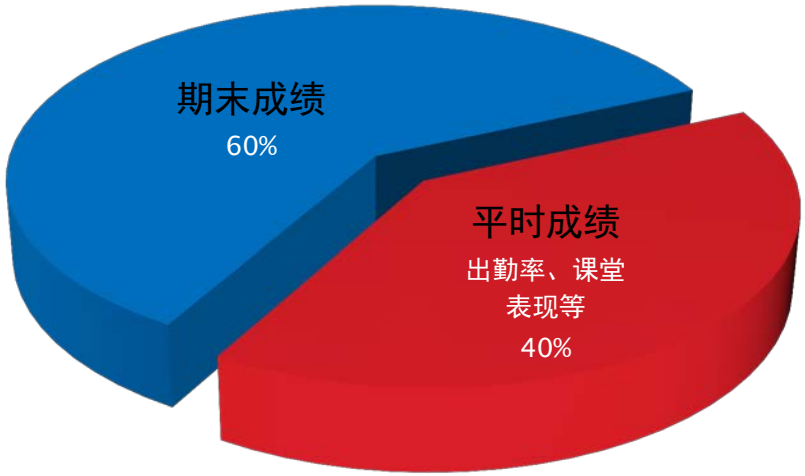
第五章 图论

注意

- **教材：**

  黄廷祝，傅英定．高等工程数学，电子科技大学出版社，2008.

- **成绩构成：**



- **学时：60**

第一章　矩阵分析基础

§1.1 向量与矩阵的范数

定义1 由mn个数排成的行列数表

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

称为一个m行n列矩阵, 简称为$m\times n$矩阵, 其中a_{ij}表示第i行第j列处的元, i称为a_{ij}的行指标, j称为a_{ij}的列指标; 当$n=1$时, 称为$m\times 1$列向量, 当$m=1$时, 称为$1\times n$行向量.

说明:

(1) $m\times 1$列向量即: $\begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix}$; $1\times n$行向量即: $(a_{11},\cdots,a_{1n})$

(2) 通常用大写黑体字母 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\cdots$ 或者$(a_{ij}),(b_{ij}),\cdots$ 表示矩阵. 如需指明矩阵的行数和列数, 通常用 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 或 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{m\times n}$

(3) 通常用小写黑体字母 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$ 或者$\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 等表示向量;

(4) 用符号 $\boldsymbol{R}^{m\times n}$ $(\boldsymbol{C}^{m\times n})$表示实(复)数域上所有$m\times n$矩阵的集合.

例 利用矩阵和向量的定义，线性方程组(1.1.1)

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \qquad (1.1.1)$$

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

称为方程组的系数矩阵

$$\overline{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} & b_m \end{pmatrix}$$

称为方程组的增广矩阵

在求解线性方程组过程中, 经常要估计误差的大小, 判定算法的稳定性, 这就需要利用向量和矩阵的范数.

向量范数是用来刻画向量大小的一种度量. 实数的绝对值, 复数的模, 向量的长度, 都是抽象向量范数的原型.

定义2 若对于任意向量 $x \in C^n$ 都有一个实数 $\|x\|$ 与之对应, 且满足

(1) 正定性 $\|x\| \geq 0$, 当且仅当 $x=0$ 时 $\|x\| = 0$;

(2) 齐次性 $\|kx\| = |k| \cdot \|x\|$, $k \in C$;

(3) 三角不等式 $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$, $x, y \in C^n$;

则称映射 $\|x\|$ 为向量 x 的向量范数. 条件(1)、(2)、(3)称为向量范数三公理.

范数的性质：

（1）零向量的范数为0;

(2) $\| -x \| = \| x \|$

(3) $x \neq 0$ 时, $\| \dfrac{1}{\| x \|} x \| = 1$

(4) $| \|x\| - \|y\| | \leq \|x - y\|$

证明 性质(1)、(2)、(3)直接由定义可得.

对性质(4), 由

$$\| x \| = \| x - y + y \| \leqslant \| x - y \| + \| y \|$$

得 $\| x - y \| \geqslant \| x \| - \| y \|$

又 $\| x-y \| = \| y-x \| \geqslant \| y \| - \| x \|$

从而 $-\| x-y \| \leqslant \| x \| - \| y \|$

故 $| \|x\| - \|y\| | \leq \|x - y\|$

例1 设 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \in C^n$, 则

$$\| x \|_1 = \sum_{i=1}^{n} | x_i |, \qquad \| x \|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} | x_i |^2 \right)^{1/2}$$

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

都是C^n上的向量范数, 分别称为向量 x 的1-范数, 2-范数, ∞-范数.

证明　根据范数定义，易证 $\|x\|_1$, $\|x\|_\infty$ 满足范数的三个条件，所以是向量范数. 下面证明$\|x\|_2$也是向量范数.

正定性和齐次性显然，下面证明满足三角不等式.

设　$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$，$y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}\in C^n$

由Cauchy不等式有

$$|x^{\mathrm{H}}y|=\left|\sum_{i=1}^{n}\overline{x}_i y_i\right|\leqslant\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^2\right)^{1/2}\left(\sum_{i=1}^{n}|y_i|^2\right)^{1/2}=\|x\|_2\|y\|_2$$

其中　$x^{\mathrm{H}}=(\overline{x}_1,\overline{x}_2,\cdots,\overline{x}_n)$，所以有

$$\| x+y \|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} | x_i + y_i |^2 = (x+y)^{\mathrm{H}}(x+y)$$

$$= x^{\mathrm{H}}x + x^{\mathrm{H}}y + y^{\mathrm{H}}x + y^{\mathrm{H}}y$$

$$\leqslant | x^{\mathrm{H}}x | + | x^{\mathrm{H}}y | + | y^{\mathrm{H}}x | + | y^{\mathrm{H}}y |$$

$$\leqslant \| x \|_2^2 + 2 \| x \|_2 \| y \|_2 + \| y \|_2^2$$

$$= (\| x \|_2 + \| y \|_2)^2,$$

$$\| x+y \|_2 \leqslant \| x \|_2 + \| y \|_2$$

在矩阵分析与计算过程中，仅仅有向量范数还不够，还需要矩阵的范数.

定义3 若对于任意矩阵 $A \in C^{m\times n}$ 都有一个实数 $\|A\|$ 与之对应, 且满足

(1) 正定性 $\| A \| \geq 0$, 当且仅当 $A = 0$ 时 $\| A \| = 0$;

(2) 齐次性 $\|k A \| = |k| \cdot \| A \|$, k是常数 ;

(3) 三角不等式 $\|A + B \| \leq \|A\| + \|B\|$, $A, B \in C^{m\times n}$;

则称映射 $\|A\|$ 为矩阵A的矩阵范数. 条件(1)、(2)、(3)称为矩阵范数三公理.

矩阵范数的性质：

（1）零矩阵的范数为0;

(2) $\| -A \| = \| A \|$

(3) $A \neq 0$ 时, $\left\| \dfrac{1}{\| A \|} A \right\| = 1$

(4) $| \|A\| - \|B\| | \leq \|A - B\|$

例2 设 $A = (a_{ij}) \in C^{m \times n}$, 则

$$\| A \|_{m_1} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} | a_{ij} | \quad , \qquad \| A \|_{m_2} = \left(\sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} | a_{ij} |^2 \right)^{1/2}$$

$$\| A \|_{m_\infty} = \max_{i,j} | a_{ij} |$$

都是$C^{m \times n}$上的矩阵范数.

注: 如果把$A=(a_{ij})\in C^{m\times n}$看作$C^{mn}$中的一个向量, 则上面的三种矩阵范数, 可以认为是C^{mn}上的向量范数, 因此上面关于向量范数的性质对矩阵范数也都成立, 证明方法类似.

定理1 $C^{m\times n}$上的矩阵范数都是等价的.

定义4 设任意矩阵$A\in C^{m\times n}$, $B\in C^{n\times l}$如果矩阵范数恒有不等式

$$\| AB \| \leq \| A \| \cdot \| B \|$$

则称该矩阵范数是相容的.

例3 证明矩阵范数 $\|\cdot\|_{m_1}$ 是相容的.

证明 设 $A=(a_{ij})\in C^{m\times n}$, $B=(b_{ij})\in C^{n\times l}$, 则

$$\|AB\|_{m_1}=\sum_{j=1}^{l}\sum_{i=1}^{m}\left|\sum_{k=1}^{n}a_{ik}b_{kj}\right|\le\sum_{j=1}^{l}\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|\,|b_{kj}|$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{m}|a_{ik}|\sum_{j=1}^{l}|b_{kj}|\right)$$

$$\le\left(\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{m}|a_{ik}|\right)\left(\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{l}|b_{kj}|\right)$$

$$=\|A\|_{m_1}\|B\|_{m_1}$$

矩阵范数与向量范数的关联性

定义5 设 $\|\cdot\|_m$ 是 $C^{n\times n}$ 上的矩阵范数, $\|\cdot\|_v$ 是 C^n 上的向量范数,若对于任意的 $A\in C^{n\times n}$ 和 $x\in C^n$ 都有

$$\|Ax\|_v \le \|A\|_m \|x\|_v$$

则称矩阵范数 $\|\cdot\|_m$ 与向量范数 $\|\cdot\|_v$ 是相容的.

例4 求证 $C^{n\times n}$ 上的矩阵范数 $\|\cdot\|_{m_1}$ 与 C^n 上的向量1-范数相容.

证明 设 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, $x=(x_1,\cdots,x_2)^T\in C^n$, 则

$$\|Ax\|_1=\sum_{i=1}^{n}\left|\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\right|\le\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}x_j|$$

$$\leq \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\sum_{j=1}^{n}|x_j|\right)$$

$$=\left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\right)\left(\sum_{j=1}^{n}|x_j|\right)$$

$$=\|A\|_{m_1}\|x\|_1$$

这说明矩阵范数$\|\cdot\|_{m_1}$与C^n上的向量1-范数相容.

对于任一向量范数, 是否存在与该向量范数相容的矩阵范数呢? 下面定理给出了肯定的答案.

定理2 设 $\|x\|_v$ 是 C^n 上的向量范数, $A \in C^{n\times n}$, 则

$$\| A \|_v = \max_{x\neq 0} \frac{\| Ax \|_v}{\| x \|_v} \left(= \max_{\|x\|_v=1} \| Ax \|_v\right)$$

是与向量范数 $\|x\|_v$ 相容的矩阵范数, 称此范数为从属于向量范数 $\|x\|_v$ 的算子范数.

证明 首先证明 $\|x\|_v$ 确实是矩阵范数.

(1) 正定性.

设 $A\neq 0$, 则存在非零向量 $x_0 \in C^n$, 使 $Ax_0 \neq 0$, 由向量范数的定义知 $\|Ax_0\|_v > 0$, $\|x_0\|_v > 0$, 于是

$$\| A \|_v \geq \frac{\| Ax_0 \|_v}{\| x_0 \|_v} > 0$$

(2) 齐次性.

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

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

(3) 三角不等式.

$$\| A + B \|_v = \max_{x \neq 0} \frac{\| (A + B) x \|_v}{\| x \|_v}$$

$$\leq \max_{x \neq 0} \frac{\| A x \|_v + \| B x \|_v}{\| x \|_v}$$

$$\leq \max_{x \neq 0} \frac{\| A x \|_v}{\| x \|_v} + \leq \max_{x \neq 0} \frac{\| B x \|_v}{\| x \|_v} = \| A \|_v + \| B \|_v$$

即 $\|x\|_v$ 确实是矩阵范数.

下面证明相容性.

由 $\| A \|_v = \max\limits_{x \neq 0} \dfrac{\| Ax \|_v}{\| x \|_v}$ ，知 $\| A \|_v \geq \dfrac{\| Ax \|_v}{\| x \|_v}$ ，

故不等式 $\| Ax \|_v \leq \| A \|_v \| x \|_v$ 成立.

这就完成了定理的证明.

推论1 设 $\|x\|_v$ 是 C^n 上的向量范数, $A,B \in C^{n \times n}$, $\|A\|_v$ 为从属于 $\|x\|_v$ 的算子范数, 则它是相容的矩阵范数, 即

$$\| AB \|_v \leq \| A \|_v \| B \|_v$$

证明 根据定义

$$\| AB \|_v = \max_{x \neq 0} \frac{\| ABx \|_v}{\| x \|_v}$$

$$\leq \max_{x \neq 0} \frac{\| A \|_v \| Bx \|_v}{\| x \|_v}$$

$$\leq \| A \|_v \max_{x \neq 0} \frac{\| Bx \|_v}{\| x \|_v}$$

$$= \| A \|_v \| B \|_v$$

其中不等式是因 $\|A\|_v$为从属于 $\|x\|_v$ 的算子范数，具有相容性，故有：

$$\|ABx\|_v \leq \|A\|_v \cdot \|Bx\|_v$$

几个特殊算子范数的计算公式

定理3 设$A=(a_{ij})\in C^{m\times n}$, $\|A\|_1$是从属于向量1-范数的算子范数, 则

$$\| A \|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \sum_{i=1}^{m} | a_{ij} |$$

称为矩阵的1-范数或列和范数.

证明 根据定义

$$\| Ax \|_1 = \sum_{i=1}^{m} | \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j | \leqslant \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} | a_{ij} x_j |$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \left(| x_j | \cdot \sum_{i=1}^{m} | a_{ij} | \right) \leqslant \max_j \sum_{i=1}^{m} | a_{ij} | \cdot \sum_{j=1}^{n} | x_j |$$

$$= \| A \|_1 \| x \|_1$$

故 $\|A\|_1$ 与 $\|x\|_1$ 是相容的. 记 $A=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n)$ ，令

$$l=\sum_{i=1}^{m}|a_{is}|=\max_{j}\sum_{i=1}^{m}|a_{ij}|,1\leqslant s\leqslant n$$

则 $l=\|\alpha_s\|_1$ ，取 $e_s=(0,\cdots,0,1,0,\cdots 0)^T$ ，于是

$$\|Ae_s\|_1=\|\alpha_s\|_1=l\|e_s\|_1$$

故

$$l=\max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_1}{\|x\|_1}=\max_{1\leq j\leq n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|=\|A\|_1$$

因此, $\|A\|_1$ 是从属于向量1-范数的算子范数.

定理4 设$A=(a_{ij})\in C^{m\times n}$, $\|A\|_\infty$ 是从属于向量∞ -范数的算子范数, 则

$$\| A \|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant m} \sum_{j=1}^{n} | a_{ij} |$$

称为矩阵的∞ –范数或行和范数.

证明 根据定义, 则

$$\| Ax \|_\infty = \max_{1\le i\le m} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| \le \max_{1\le i\le m} \sum_{j=1}^{n} | a_{ij} | \cdot | x_j |$$

$$\le (\max_{1\le i\le m} \sum_{j=1}^{n} | a_{ij} |)(\max_{1\le j\le n} | x_j |)$$

$$= \| A \|_\infty | x |_\infty$$

即 $\|A\|_\infty$ 与 $|x|_\infty$ 相容. 若令

$$\lambda = \sum_{j=1}^{n} |a_{sj}| = \max_{1\le i\le m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

记 $a_{sj} = |a_{sj}| e^{i\theta_j}$ ，其中， $\theta_j \in R, j = 1, 2, \cdots, n$ ，则令

$z = (e^{-i\theta_1}, \cdots, e^{-i\theta_n})^T$ ，有 $\|z\|_\infty$ =1, 同时有

$$\| Az \|_\infty \geqslant \left| \sum_{j=1}^{n} a_{sj} e^{-i\theta_j} \right| = \lambda = \lambda \| z \|_\infty$$

任何复数 w 均可表为: $w = re^{i\theta} = r(\cos\theta + i\sin\theta)$

因此, $\|A\|_\infty$ 是从属于向量∞ -范数的算子范数.

定义6 设$A \in C^{n\times n}$的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ ，则称

$$\rho(A) = \max\{|\lambda_1|, \cdots, |\lambda_n|\}$$

为矩阵A的谱半径; 称 $\sigma(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\}$ 为A的谱.

定理5 设$A \in C^{m\times n}$, $\|A\|_2$是从属于向量2–范数的算子范数, 则

$$\| A \|_2 = \sqrt{\rho(A^H A)}$$

称为矩阵A的2-范数或谱范数.

A^H为以A的元素的共额复数作为元素表示的转置矩阵.

证明 因为$A^H A$为n阶Hermite矩阵, 同时因二次型

$$f(x) = x^H (A^H A)x = (Ax)^H (Ax) \geq 0$$

是正定或半正定的. 因此$A^H A$的所有特征值都大于或等于0, 不妨设这n个特征值为

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

Hermite矩阵：满足$A^H = A$的矩阵A.
对应于欧氏空间的对称矩阵

且x_i是属于特征值 λ_i $(i=1,2,\cdots,n)$ 的单位正交特征向量，则对于任意单位向量 $u \in C^n$ 可以表示为

$$u = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_n x_n$$

所以

$$\| u \|_2^2 = u^H u = | a_1 |^2 + | a_2 |^2 + \cdots + | a_n |^2 = 1$$

$$A^H A u = a_1 \lambda_1 x_1 + a_2 \lambda_2 x_2 + \cdots + a_n \lambda_n x_n$$

有

$$\| Au \|_2^2 = (Au)^H Au = \lambda_1 | a_1 |^2 + \lambda_2 | a_2 |^2 + \cdots + \lambda_n | a_n |^2$$

$$\leq \lambda_1 (| a_1 |^2 + | a_2 |^2 + \cdots + | a_n |^2) = \lambda_1$$

故

$$\max_{\|u\|_2 = 1} \| Au \|_2 \leqslant \sqrt{\lambda_1}$$

同时当 $u=x_1$ 时, 因为 $\| x_1 \|_2 = 1$, 且有 $\| Ax_1 \|_2 = \sqrt{\lambda_1}$, 从而

$$\| A \|_2 = \max_{\|u\|_2 = 1} \| Au \|_2 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{\rho(A^H A)}$$

即$\|A\|_2$ 是从属于向量2-范数的算子范数.

矩阵的谱范数的基本性质.

定理6 设$A \in C^{n \times n}$, U 和 V是 n 阶酉矩阵, 则

(1) $\| A^H \|_2 = \| A \|_2$

(2) $\| UA \|_2 = \| AV \|_2 = \| UAV \|_2 = \| A \|_2$

酉矩阵: 对n 阶复矩阵 A, 若 A 满足$A^H A = A\ A^H = E$, 则称 A 为酉矩阵. 酉矩阵的行列式的绝对值为1. 正交矩阵是酉矩阵的特例.

证明（1）设 λ 是$A^H A$的非零特征值，其对应的特征向量为x，即

$$A^H Ax = \lambda x$$

因此, $\lambda x \neq 0$, 从而 $Ax \neq 0$, 对以上等式两边同乘以矩阵A, 得

$$AA^H (Ax) = \lambda (Ax)$$

即 λ 也是$A^H A$的非零特征值. 设 λ_1是 $A^H A$与 AA^H的最大特征值, 则

$$\| A^H \|_2 = \| A \|_2 = \sqrt{\lambda_1}$$

(2) $\|UA\|_2 = \sqrt{\rho((UA)^H (UA))} = \sqrt{\rho(A^H A)} = \|A\|_2$

由(1)及上式有

$$\|AV\|_2 = \|(AV)^H\|_2 = \|V^H A^H\|_2 = \|A^H\|_2 = \|A\|_2$$

$$\|UAV\|_2 = \|AV\|_2 = \|A\|_2$$

§1.2 矩阵的分解

一、三角分解

定义1 设 n 阶矩阵 $R=(r_{ij})\in C^{n\times n}$ 是上三角矩阵, 如果$r_{ii}>0$ $(i=1,2,\ldots,n)$, 则称矩阵 R 为正线上三角矩阵. 特别当$r_{ii}=1$ $(i=1,2,\ldots,n)$ 时, 则称 R 为单位上三角矩阵.

定义2 设 n 阶矩阵 $L=(l_{ij})\in C^{n\times n}$ 是下三角矩阵, 如果 $l_{ii}>0$ $(i=1,2,\ldots,n)$, 则称矩阵 L 为正线下三角矩阵. 特别当$l_{ii}=1$ $(i=1,2,\ldots,n)$ 时, 则称 L 为单位下三角矩阵.

定理1 设$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$是可逆矩阵, 则 A 可唯一地分解为

$$A=U_1R \tag{1.2.1}$$

其中 U_1 是酉矩阵, R 是正线上三角矩阵; 或可唯一地分解为

$$A=LU_2 \tag{1.2.2}$$

其中 U_2 是酉矩阵, L 是正线下三角矩阵

证明 略

因正交矩阵是实数域上的酉矩阵,故有:

推论1 设$A=(a_{ij})\in R^{n\times n}$是可逆矩阵, 则 A 可唯一地分解为

$$A=Q_1R$$

其中 Q_1 是正交矩阵, R 是正线上三角实矩阵; 或可唯一地分解为

$$A=LQ_2$$

其中 Q_2 是正交矩阵, L 是正线下三角实矩阵

推论2 设A是实对称正定矩阵, 则存在唯一正线上三角实矩阵R, 使得

$$A=R^{\mathrm{T}}R \qquad (1.2.9)$$

证明 因为A是实对称正定矩阵, 所以存在可逆矩阵P, 使得

$$A = P^{\mathrm{T}} P \qquad (1.2.10)$$

由推论1可知, 存在正交矩阵Q和正线上三角实矩阵R, 使得

$$P = QR \qquad (1.2.11)$$

将式(1.2.11)带入式(1.2.10), 可得

$$A = (QR)^{\mathrm{T}} (QR) = R^{\mathrm{T}} R$$

再证惟一性. 设 A 有两种分解式, 即

$$A = R_1^{\mathrm{T}} R_1 = R_2^{\mathrm{T}} R_2$$

$$R_2^{\mathrm{T}} = (R_1^{\mathrm{T}} R_1) R_2^{-1} = R_1^{\mathrm{T}} (R_1 R_2^{-1})$$

于是有

$$(\boldsymbol{R}_2\,\boldsymbol{R}_1^{-1})^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{R}_1^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{R}_2^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{R}_1^{\mathrm{T}})^{-1}\,\boldsymbol{R}_1^{\mathrm{T}}\,(\boldsymbol{R}_1\,\boldsymbol{R}_2^{-1})=\boldsymbol{R}_1\,\boldsymbol{R}_2^{-1}$$

由于上(下)三角矩阵的逆矩阵是上(下)三角矩阵, 两个(下)上三角矩阵的乘积同样是上(下)三角矩阵, 因而上式左端是下三角矩阵, 右端是上三角矩阵.

因此, $(R_2R_1^{-1})^{\mathrm{T}}=R_1R_2^{-1}$ 是对角矩阵.

又主对角线上元素是两个三角矩阵相应主对角线元素之积, 注意到三角矩阵的逆矩阵的主对角线元素是原矩阵主对角线元素的倒数,

由 R_1, R_2 均为正线上三角矩阵可知 $R_1R_2^{-1}=I$, 即

$$R_1=R_2$$

推论3 设A是正定Hermite矩阵, 则存在唯一正线上三角复矩阵R, 使得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}$$

应用: n 阶矩阵的三角分解用于对求解非齐次线性方程组非常方便.

例如, 设方程组 $Ax=b$, 有三角分解 $A=LR$, 则有$LRx=b$, 于是令 $y=Rx$, 有

$$\begin{cases} Ly = b \\ Rx = y \end{cases}$$

先求第一个方程组的未知向量 y, 然后将 y 代入第二个方程组再求解. 由于它们都是以三角矩阵为系数矩阵的方程组, 所以很容易求出方程组的解, 并且易于利用计算机求解.

§1.3 矩阵特征值的估计

意义：(1) n 阶复矩阵A的n个特征值的几何意义是复平面上的n个点. 对于阶数较高的矩阵, 要计算出其特征值的精确值是相当困难的. 因此, 能由A的元素的简单关系便可估计出A的特征值所在位置的范围(即所谓特征值估计), 就显得尤其重要.

(2) 实际应用中的大量问题, 往往不需要精确地计算出矩阵的特征值, 仅需估计出它们所在的范围.

例如, 在线性代数方程组迭代求解收敛性的分析中, 要估计一个矩阵的特征值是否在复平面的单位圆内; 与差分法的稳定性有关的问题, 要判定矩阵的特征值是否都落在单位圆上等等.

定理1 设矩阵 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ ，则

$$\sum_{i=1}^{n}|\lambda_i|^2\le\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2=\|A\|_{m_2}^2$$

且等号成立当且仅当A是正规矩阵.

正规矩阵:设$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, 如果

$$AA^{\mathrm{H}}=A^{\mathrm{H}}A$$

则称为正规矩阵.

显然, 对角矩阵、实对称矩阵、反对称矩阵、Hermite矩阵($A^H=A$)、反Hermite矩阵($A^H=-A$)、正交矩阵和酉矩阵等都是正规矩阵, 但是正规矩阵并不仅限于上述七种矩阵.

证明 由**Schur**定理, 存在酉矩阵U 使得

$$A = URU^H$$

其中$R=(r_{ij})$, 为上三角矩阵. R的对角元 r_{ii} $(1\le i \le n)$为A的特征值 λ_i .

于是有

$$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2 = \sum_{i=1}^{n} |r_{ii}|^2 \le \sum_{i=1}^{n} |r_{ii}|^2 + \sum_{i\neq j} |r_{ij}|^2 = \|R\|_{m_2}^2 \qquad \textbf{(1.3.1)}$$

$$= \mathbf{tr}(\boldsymbol{R^H R})$$

例如 $R^T R = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^2+b^2 & * \\ * & c^2+d^2 \end{bmatrix}$, $\mathrm{tr}R^T R = \sum r_{ij}^2$

又由 $A = URU^H$ 得

$$A^H A = (URU^H)^H URU^H = U(R^H R)U^H$$

即 $A^H A$ 与 $R^H R$ 酉相似, 因而具有相同的迹, 所以

$$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2 \le \mathrm{tr}(R^H R) = \mathrm{tr}(A^H A) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2 = \|A\|_{m_2}^2$$

易知, 结论中等号成立当且仅当不等式(1.3.1)中

$$\sum_{i \ne j} |r_{ij}|^2 = 0$$

即R为对角矩阵. 因此, 结论中等号成立当且仅当A酉相似于对角矩阵, 即为A正规矩阵.

例1 已知矩阵A如下 (i为虚数单位). A 的一个特征值为2, 试估计另外两个特征值的上界.

$$A=\begin{pmatrix} 3+i & -2-3i & 2i \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

解 记 $\lambda_1=2$, 而 λ_2,λ_3 为的另两个特征值, 由定理1, 得

$$|\lambda_2|^2\le|\lambda_2|^2+|\lambda_3|^2=\sum_{i=1}^{3}|\lambda_i|^2-|\lambda_1|^2\le\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}|a_{ij}|^2-|\lambda_1|^2=25$$

故 $|\lambda_2|\le 5$, 同理可得 $|\lambda_3|\le 5$

事实上, A的另两个特征值分别为 1和 i, 可见估计是正确的.

一些直接估计特征值上下界的方法

对 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, 记

$$B=(b_{ij})=\frac{A+A^H}{2}=(\frac{a_{ij}+\overline{a_{ji}}}{2}) \qquad (1.3.2)$$

$$C=(c_{ij})=\frac{A-A^H}{2}=(\frac{a_{ij}-\overline{a_{ji}}}{2}) \qquad (1.3.3)$$

显然矩阵B和C分别为Hermite矩阵 ($B^H=B$) 和反Hermite矩阵 ($C^H=-C$) .

定理2(Hirsch) 设$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$, 矩阵B, C 如式(1.3.2) 和 (1.3.3), 则

$$|\lambda_i| \le n \max_{i,j} |a_{ij}|$$

$$|\mathrm{Re}(\lambda_i)| \le n \max_{i,j} |b_{ij}|$$

$$|\mathrm{Im}(\lambda_i)| \le n \max_{i,j} |c_{ij}|$$

定理3 设 *A* 为 *n* 阶实矩阵, 则 *A* 的任一特征值 λ_i满足

$$|\mathrm{Im}\,\lambda_i| \le \sqrt{\frac{n(n-1)}{2}} \max_{i,j} |c_{ij}|$$

推论1 Hermite矩阵的特征值都是实数, 反Hermite矩阵的特征值都是纯虚数.

证明 当$A=(a_{ij})$ 为Hermite矩阵时,

$$a_{ij}=\overline{a_{ji}}\ (i,j\in\{1,2,\cdots,n\})$$

所以，$\max\limits_{i,j}|c_{ij}|=0$ 于是由定理2知 $\mathrm{Im}(\lambda_i)=0$ ，即 λ_i 为实数 $(i=1,2,\cdots,n)$

当$A=(a_{ij})$ 为反 Hermite矩阵时,

$$a_{ij}=-\overline{a_{ji}}\ (i,j\in\{1,2,\cdots,n\})$$

所以，$\max\limits_{i,j}|b_{ij}|=0$ 于是由定理2知 $\mathrm{Re}(\lambda_i)=0$ ，即 λ_i 为纯虚数 $(i=1,2,\cdots,n)$

例1 已知矩阵A如下 (i为虚数单位), 估计矩阵A的特征值的实部和虚部的范围.

$$A=\begin{pmatrix} 0 & 0.2 & 0.1 \\ -0.2 & 0 & 0.2 \\ -0.1 & -0.2 & 0 \end{pmatrix}$$

解 由于$A^H = -A$, 由推论1知

$$\mathrm{Re}(\lambda_i)=0$$

又

$$C=\frac{A-A^H}{2}=\begin{pmatrix} 0 & 0.2 & 0.1 \\ -0.2 & 0 & 0.2 \\ -0.1 & -0.2 & 0 \end{pmatrix}=A$$

$$\max_{i,j}|c_{ij}|=0.2$$

所以由定理3得

$$|\operatorname{Im}\lambda_i| \le \sqrt{\frac{n(n-1)}{2}} \max_{i,j} |c_{ij}| = 0.2 \times \sqrt{3} \approx 0.3464$$

说明: (1) 若由定理2, 则得 $|\operatorname{Im}\lambda_i| \le n \max_{i,j} |c_{ij}| = 0.6$

(2) 实际计算的特征值分别为

$$\mu_1 = 0 \qquad \mu_2 = -0.3i \qquad \mu_3 = 0.3i$$

显然 $|\operatorname{Im}\lambda_i| \le 0.3464, \ i = 1,2,3.$

例3 估计矩阵的特征值的上界.

$$A=\begin{pmatrix} 1 & -0.8 \\ 0.5 & 0 \end{pmatrix}$$

解 由定理2 (n=2) 得

$$\max_{i,j}|a_{ij}|=1\ ,\quad \max_{i,j}|b_{ij}|=1\ ,\quad \max_{i,j}|c_{ij}|=0.65$$

于是有

$$|\lambda|\le 2\times 1=2\ ,\quad |\mathrm{Re}\,\lambda|\le 2\times 1=2$$

$$|\mathrm{Im}\,\lambda|\le 2\times 0.65=1.3$$

若据定理3, 则得

$$|\mathrm{Im}\,\lambda|\le\sqrt{\frac{2\times(2-1)}{2}}\times 0.65=0.65$$

实际计算可得

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(1 \pm i\sqrt{0.6})$$

因而

$$|\lambda_{1,2}| = 0.632456 < 2 \ , \ |\mathrm{Re}\,\lambda_{1,2}| = 0.5 < 2$$

$$|\mathrm{Im}\,\lambda_{1,2}| = 0.387298 < 0.65$$

实际上, 在估计实矩阵特征值的虚部的上界时, 定理3的结果明显优于定理2的结果.

设矩阵A,B,C 的特征值分别为:

$\{\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_n\}$ ， $\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$

$\{i\gamma_1,i\gamma_2,\cdots,i\gamma_n\}$

且满足

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

$$\mu_1\geq\mu_2\geq\cdots\geq\mu_n$$

$$\gamma_1\geq\gamma_2\geq\cdots\geq\gamma_n$$

其中B 和 C 如式(1.3.2)和(1.3.3), 从而由推论1其特征值为实数和纯虚数.

定理4 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$， $B,C,\lambda_i,\mu_i,\gamma_i$ 定义同上, 则有

$$\mu_n\leq \mathrm{Re}(\lambda_i)\leq\mu_1\ ,\ \gamma_n\leq \mathrm{Im}(\lambda_i)\leq\gamma_1$$

定理5 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$，奇异值为 $\sigma_1\geq\sigma_2\geq\cdots\geq\sigma_n$，则有

$$\sigma_n\leq|\lambda_i|\leq\sigma_1 \qquad (i=1,2,\ldots,n)$$

其中奇异值 $\sigma_i=\sqrt{\lambda_i(A^HA)}$ $(i=1,2,\ldots,n)$

推论2 酉矩阵的任一特征值的模均等于1.

理由 对于酉矩阵U, 有 $\sigma_1=\sigma_2=\cdots=\sigma_n=1$，因而 $|\lambda|=1$.

特征值的分布区域

定义1 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, 称

$$S_i=\{z\in C:|\,z-a_{ii}\,|\le R_i\}$$

为矩阵在复平面上的第i个Gerschgorin圆盘(盖尔圆盘), 其中

$$R_i=R_i(A)=\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|\,a_{ij}\,| \qquad (i=1,2,\ldots,n)$$

称为S_i的半径.

定理6(Gerschgorin圆盘定理1) 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, 则$A$的任一特征值

$$\lambda\in S=\bigcup_{i=1}^{n}S_i$$

证明 设 λ 为矩阵A的任一特征值, 其对应的特征向量为 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T\neq 0$, 则有$Ax=\lambda x$, 即

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j=\lambda x_i \quad (i=1,2,\ldots,n) \qquad (1.3.10)$$

因 $x\neq 0$, 所以至少有一个分量具有正的模, 不妨设

$$|x_k|=\max_{1\le i\le n}|x_i|>0$$

于是由式(1.3.10)有

$$\sum_{j=1}^{n} a_{kj}x_j=\lambda x_k$$

即

$$(\lambda-a_{kk})x_k=\sum_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n} a_{kj}x_j$$

由此可得

$$|\lambda - a_{kk}|\ |x_k| = \left|\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} a_{kj}x_j\right| \le \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} |a_{kj}|\ |x_j| \le \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} |a_{kj}|\ |x_k| = R_k |x_k|$$

从而

$$|\lambda - a_{kk}| \le R_k$$

即

$$\lambda \in S_k \subseteq S$$

例4 估计矩阵的特征值的分布范围.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} & i & 0 \\ 0 & -\frac{i}{2} & 5 & \frac{i}{2} \\ -1 & 0 & 0 & 5i \end{pmatrix}$$

解 矩阵的四个盖尔圆盘分别为

$$S_1=\{z\in C:|z-1|\le 1\}$$

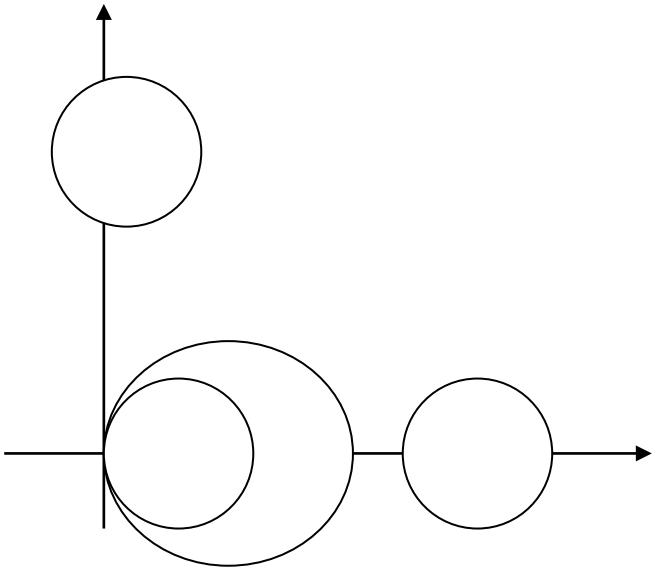
$$S_2=\{z\in C:|z-\frac{3}{2}|\le \frac{3}{2}\}$$

$$S_3=\{z\in C:|z-5|\le 1\}$$

$$S_4=\{z\in C:|z-5i|\le 1\}$$

$$A=\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} & i & 0 \\ 0 & -\frac{i}{2} & 5 & \frac{i}{2} \\ -1 & 0 & 0 & 5i \end{pmatrix}$$

于是, 由定理6知矩阵的特征值均落在 $\bigcup_{i=1}^{4} S_i$ 之中, 即落在图1.1所示区域之中.



在例4中,圆盘S_1和S_2重迭在一起(一般情况下两个盖尔圆盘可能相交), 它们的并集是一连通区域; 交结在一起的盖尔圆盘所构成的连通区域为并集S的一个连通部分. 孤立的一个盖尔圆盘就是一个连通部分. 在上图中, S_1和S_2的并集(即S_2), S_3和S_4的并集 , 各是一个连通部分.

下面的定理能明确说明在一个连通区域中有几个特征值.

定理7(Gerschgorin圆盘定理2) 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$的$n$个盖尔圆盘中有$k$个的并形成一个连通区域, 且它与余下的$n-k$个盖尔圆盘都不相交, 则在这个区域中恰好有$A$的$k$个特征值.

说明 (1) 定理6中的区域常称为A的行Gerschgorin区域.

(2) 因为A和A^T有相同的特征值, 所以将定理6和定理7应用于A^T, 则可得到关于A的列的Gerschgorin圆盘定理.

(3) 由定理6和定理7并引入下列记号可得下列推论3.

$$C_j = C_j(A) = \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{n} |a_{ij}|$$

推论3 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, 则$A$的任一特征值

$$\lambda\in G=\bigcup_{i=1}^{n}G_i$$

其中G_i为A的列 $G_i=\{z:|z-a_{ii}|\le C_i(A)\}$ 盖尔圆盘; 此外, 若这些圆盘中的k个之并形成一个连通区域, 且与所有其余$n-k$个圆盘不相交, 则在这个区域内恰好有A的k个特征值.

因为矩阵 A和A^T 有相同的特征值, 故又有

推论4 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, 则$A$的任一特征值

$$\lambda\in\left(\bigcup_{i=1}^{n}S_i\right)\cap\left(\bigcup_{i=1}^{n}G_i\right)$$

注 由两个或两个以上的盖尔圆盘构成的连通部分, 可能在其中的一个盖尔圆盘中有两个或两个以上的特征值, 而在另外的一个或几个盖尔圆盘中没有特征值.

例5 讨论矩阵A的特征值分布状况,其中

$$A=\begin{pmatrix} 1 & -0.8 \\ 0.5 & 0 \end{pmatrix}$$

解 矩阵A的两个特征值为 $\lambda_{1,2}=\frac{1}{2}(1\pm i\sqrt{0.6})$.

A的两个盖尔圆盘为

$$|z-1|\le 0.8 \text{ 和 } |z|\le 0.5$$

构成一个连通区域.

由于

$$|\lambda_{1,2}|=\sqrt{0.4}>0.5$$

故A的两个特征值均不在A的第2个盖尔圆盘 $|z|\le 0.5$ 之中.

推论5　设 n 阶矩阵 A 的 n 个盖尔圆盘两两不相交, 则 A 相似于对角矩阵.

矩阵 A与矩阵 B相似: 存在可逆矩阵 T 使$A= T^{-1}B\ T$

推论6　设 n 阶实矩阵 A 的 n 个盖尔圆盘两两不相交, 则 A 的特征值全为实数 .

证明 由于A为实矩阵, 所以A的n个盖尔圆盘的圆心都在实轴上, 又由这些圆盘互不相交, A的个特征值互不相等, 且每个圆盘只含有一个特征值. 因为实矩阵若有复特征值, 必成对共轭出现, 且在实轴的上下方对称排列, 所以, 若A有一个复特征值位于A的某一盖尔圆盘上, 则与其成共轭的特征值也必位于该圆盘上, 与定理7的结论矛盾, 故A只能有实特征值

当矩阵 S 可逆时, 因 $S^{-1}AS$ 和 A 有相同的特征值, 所以, 可以把Gerschgorin定理应用于 $S^{-1}AS$ 而得到一些新的结果. 进一步, 若适当选择 S, 即有可能得到更精确的界. 一个特别方便的选择是取

$$S = D = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)\ ,\ d_i > 0\ (i = 1, 2, \cdots, n)$$

记

$$r_i = \frac{1}{d_i}\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|\, d_j\ ,\ Q_i = \{z \in C : |z - a_{ii}| \leq r_i\}$$

$$(i = 1, 2, \cdots, n)$$

$$t_j = d_j \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{n} \frac{|a_{ij}|}{d_i}\ ,\ P_j = \{z \in C : |z - a_{jj}| \leq t_j\}$$

$$(j = 1, 2, \cdots, n)$$

则有如下定理.

定理8 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$，　$d_1,d_2,\cdots,d_n$为一组正数，则A的任一特征值

$$\lambda(A)\in\left(\bigcup_{i=1}^{n}Q_i\right)\cap\left(\bigcup_{i=1}^{n}P_i\right)$$

证明　记 $D=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$，显然矩阵$D$可逆，且有

$$D^{-1}AD=\left(\frac{a_{ij}d_j}{d_i}\right)$$

于是，由推论3.4 得 $D^{-1}AD$ 的任一特征值

$$\lambda(D^{-1}AD)\in\left(\bigcup_{i=1}^{n}Q_i\right)\cap\left(\bigcup_{i=1}^{n}P_i\right)$$

由于$\lambda(D^{-1}AD)=\lambda(A)$,故有

$$\lambda(A)\in\left(\bigcup_{i=1}^{n}Q_i\right)\cap\left(\bigcup_{i=1}^{n}P_i\right)$$

例6 估计矩阵的特征值范围.

$$A=\begin{pmatrix}0.9 & 0.01 & 0.12\\ 0.01 & 0.8 & 0.13\\ 0.01 & 0.02 & 0.4\end{pmatrix}$$

解 矩阵*A* 的3个特征值在它的3个盖尔圆盘

$$|z-0.9|\le 0.13\ ,\ |z-0.8|\le 0.14$$

$$|z-0.4|\le 0.03$$ 的并集中

由于 $|z-0.4|\le 0.03$ 为一个孤立的连通部分, 所以其中恰好有的一个特征值.

取 $$d_1 = d_2 = 1, d_3 = 0.1$$

则由定理8得的特征值在如下3个盖尔圆盘

$$|z-0.9|\le 0.022 \quad , \quad |z-0.8|\le 0.023$$

$$|z-0.4|\le 0.3$$ 的并集中

由于这些圆盘是彼此孤立的, 所以每一个盖尔圆盘恰好有A 的一个特征值.

易知, 这里用定理8所得估计比定理6的估计更为精确.

在特征值的估计中, 某些附加信息的利用可提高估计的准确性. 例如, 若A为Hermite矩阵, 则A的特征值一定为实数,因而它们一定位于集合

$$R\cap\left(\bigcup_{i=1}^{n}Q_i\right)\cap\left(\bigcup_{i=1}^{n}P_i\right)$$

中, 这是实闭区间的有限并.

因为矩阵可逆的充要条件是0不是其特征值, 所以, 值得研究从包含特征值的已知区域中去掉原点的条件, 从而也就获得了判定矩阵可逆的实用准则.

定义2 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, 若

$$|a_{ii}|\geq R_i(A)=\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}| \quad (i=1,2,\cdots,n) \qquad (1.3.11)$$

则称 A为行对角占优矩阵; 若A^T为行对角占优矩阵, 则称A为列对角占优矩阵; 若A为行、列对角占优矩阵, 则称A为对角占优矩阵. 若式(1.3.11)中均为严格不等式, 则称A为相应的严格对角占优矩阵.

定理9 设矩阵$A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$为行(列)严格对角占优矩阵, 则

(1) A为可逆矩阵, 且 $\lambda_i\in\bigcup_{i=1}^{n}S_i$, 这里 ;

$$S_i=\{z\in C:|z-a_{ii}|<|a_{ii}|\}$$

(2) 若A的所有主对角元均为正数，则A的所有特征值都有正实部；

(3) 若A为Hermite矩阵，且A的所有主对角元为正数，则A的所有特征值均为正数.

证明 (1) 因A为行严格对角占优矩阵(若A为列严格对角占优矩阵, 则对A^T作类似讨论), 所以

$$R_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| < |a_{ii}| \qquad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

于是由定理6易知

$$\lambda_i(A) \in \bigcup_{i=1}^{n} S_i = \bigcup_{i=1}^{n} \{z \in C : |z - a_{ii}| < |a_{ii}|\}$$

又, 显然, $0 \notin S_i \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$ 因而 $0 \notin \bigcup_{i=1}^{n} S_i$, 即零不是的特征值, 故A可逆.

(2) 因 $a_{ii} > 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$, 即A的所有盖尔圆盘的圆心均在正实轴上. 又由(1)知的A任一特征值 λ 满足

$$|\lambda - a_{ii}| < a_{ii} \quad (\exists i \in \{1, 2, \cdots, n\})$$

故A的所有盖尔圆盘全在复平面的右半平面上, 即的所有特征值均有正实部.

(3) 若A为Hermite矩阵, 则A的特征值全为实数, 于是根据(2)知结论显然.

矩阵谱半径的实用估计

谱半径 : $\rho(A)=\max\{|\lambda_1|,|\lambda_2|,\cdots,|\lambda_n|\}$

其中 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 是矩阵A的特征值.

因矩阵A的所有特征值均位于

$$S=\bigcup_{i=1}^{n}\{z\in C:|z-a_{ii}|\le\sum_{j\neq i}|a_{ij}|\}\quad 和\quad G=\bigcup_{j=1}^{n}\{z\in C:|z-a_{jj}|\le\sum_{i\neq j}|a_{ij}|\}$$

这两个区域中, 所以A的模最大的特征值也在其中. 在S的第i个圆盘中, 离原点最远点有模

$$|a_{ii}|+R_i(A)=\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

因而这些值的最大者一定是A的最大特征值模的一个上界. 类似地也可对绝对列和讨论. 同理, 由定理8可得谱半径的上界(即如下定理中的(2)), 即有

定理10 设矩阵 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$, 则谱半径 $\rho(A)$ 满足

(1) $$\rho(A)\le \min\{\max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|,\ \max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|\}$$

(2) $$\rho(A)\le \min_{d_1,\cdots,d_n>0}\max_{1\le i\le n}\frac{1}{d_i}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|d_j$$

(3) $$\rho(A)\le \min_{d_1,\cdots,d_n>0}\max_{1\le j\le n}\frac{1}{d_j}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|d_i$$

注： 矩阵的谱半径一般不是矩阵范数 , 看下例

$$A=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}\neq 0$$

但 $\rho(A)=0$, 因此 $\rho(A)$ 未必满足矩阵范数的正定性条件.

又如

$$A=\begin{pmatrix}1 & 4\\ 0 & 1\end{pmatrix}\quad ,\ B=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 1 & 1\end{pmatrix}$$

易求得 $\rho(A)=\rho(B)=1$ 而

$$A+B=\begin{pmatrix}2 & 4\\ 1 & 2\end{pmatrix}$$

可见, 不满足矩阵范数的三角不等式.

§1.4 矩阵分析

- 1 矩阵序列与矩阵级数
- 2 矩阵函数

1 矩阵序列与矩阵级数

设$m \times n$型矩阵序列为$\{A^{(k)}\}$, 其中

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11}^k & a_{12}^k & \cdots & a_{1n}^k \\ a_{21}^k & a_{22}^k & \cdots & a_{2n}^k \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1}^k & a_{n2}^k & \cdots & a_{nn}^k \end{pmatrix}, k = 1, 2, \cdots$$

定义 1： $\lim\limits_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij} \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty} A^{(k)} = A$

定理 1： 设 $\lim\limits_{k\to+\infty} A^{(k)} = A, \lim\limits_{k\to+\infty} B^{(k)} = B. \alpha, \beta \in C,$则

(1) $\lim\limits_{k\to+\infty} (\alpha A^{(k)} + \beta B^{(k)}) = \alpha A + \beta B;$

(2) $\lim\limits_{k\to+\infty} A^{(k)} B^{(k)} = AB;$

(3) 当$A^{(k)}$与A都可逆时，$\lim\limits_{k\to+\infty} (A^{(k)})^{-1} = A^{-1}.$

定理 2：

设 $\|\cdot\|$ 是$C^{m\times n}$ 上任意矩阵范数， $C^{m\times n}$中矩阵序列$\{A^{(k)}\}$收敛于A的充要条件是

$$\lim_{k\to+\infty} || A^{(k)} - A ||= 0$$

定义2：

设$A \in C^{n\times n}$，若$\lim\limits_{k\to\infty} A^k = 0$ (k为正整数)，则称A为收敛矩阵.

定理3：

设$A \in C^{n\times n}$,则A为收敛矩阵的充要条件是$\rho(A) < 1$.

证

(1) 充分性：

$$A \in C^{n\times n} \Rightarrow P^{-1}AP = J = diag(J_{r_1}(\lambda_1), J_{r_2}(\lambda_2), \cdots, J_{r_s}(\lambda_s))$$

$$\Rightarrow A^k = PJ^kP^{-1}$$

$$A^k \to 0 \Leftrightarrow J^k \to 0 \Rightarrow J_{r_i}^k(\lambda_i) \to 0$$

$$J_{r_i}^k(\lambda_i) = \begin{bmatrix} f_k(\lambda_i) & f_k^{'}(\lambda_i) & \cdots & \dfrac{f_k^{(r_i-1)}(\lambda_i)}{(r_i-1)!} \\ & f_k(\lambda_i) & \cdots & \dfrac{f_k^{(r_i-2)}(\lambda_i)}{(r_i-2)!} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & f_k(\lambda_i) \end{bmatrix}, k > r_i$$

$$f_k(\lambda_i) = \lambda_i^k, |\lambda_i| < 1$$

$$f_k^{(l)}(\lambda_i) \to 0 \quad (l = 0,1,\cdots,r_i - 1) \Rightarrow J_{r_i}^k(\lambda_i) \to 0$$
$$\Rightarrow J^k \to 0$$
$$\Rightarrow A^k \to 0$$

(2) 必要性：

$$A^k \to 0 \Rightarrow J_{r_i}^k(\lambda_i) \to 0 \Rightarrow \lambda_i^k \to 0 \Rightarrow |\lambda_i| < 1$$

定义 3：　设$\{A^{(k)}\}$是$C^{m\times n}$的矩阵序列，称

$$\sum_{k=1}^{\infty} A^{(k)} = A^{(1)} + A^{(2)} + \cdots + A^{(k)} + \cdots$$

为矩阵级数　称$S^{(N)} = \sum_{k=1}^{N} A^{(k)}$为矩阵级数的部分和. 如果$\lim_{N\to\infty} S^{(N)} = S$,则称$\sum_{k=1}^{\infty} A^{(k)}$收敛

定义 4：如果mn个数项级数

$$\sum_{k=1}^{\infty} a_{ij}^{(k)},\ i=1,2,\cdots,m;\ j=1,2,\cdots,n$$

都绝对收敛,则称矩阵级数$\sum_{k=1}^{\infty} A^{(k)}$绝对收敛.

定理4： 在$C^{n\times n}$中,$\sum_{k=1}^{\infty} A^{(k)}$绝对收敛的充要条件是正项级数$\sum_{k=1}^{\infty} \| A^{(k)} \|$ 收敛。

证： (1) $\sum_{k=1}^{\infty} A^{(k)}$绝对收敛 $\Rightarrow \sum_{k=1}^{N} |\mathrm{a}_{ij}^{(k)}| \leq M$

$$\sum_{k=1}^{N}|| A^{(k)} ||_{m_1} = \sum_{k=1}^{N}\left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}| a_{ij}^{(k)} | \right) \leq mnM$$

$$\Rightarrow \sum_{k=1}^{\infty}|| A^{(k)} ||_{m_1} \text{收敛} \Rightarrow \sum_{k=1}^{\infty}|| A^{(k)} || \text{收敛}$$

$$(2) \sum_{k=1}^{\infty}|| A^{(k)} | \text{收敛} \Rightarrow \sum_{k=1}^{\infty}|| A^{(k)} ||_{m_1} \text{收敛}$$

$$\xrightarrow{|a_{ij}^{k}| \leq \| A^{(k)} \|_{m_1}} \sum_{k=1}^{\infty} a_{ij}^{(k)} \text{绝对收敛}$$

定理5 ($Neumann$定理)　方阵A的$Neumann$级数

$$\sum_{k=0}^{\infty} A^k = I + A + A^2 + \cdots + A^k + \cdots$$

收敛的充要条件是$\rho(A) < 1$，而且收敛时，和为$(I - A)^{-1}$

证：充分性

$\rho(A) < 1 \Rightarrow I - A$可逆

$$\Rightarrow (I + A + A^2 + \cdots + A^k)(I - A) = I - A^{k+1}$$

$$\Rightarrow I + A + \cdots + A^k = (I - A)^{-1} - A^{k+1}(I - A)^{-1}$$

$$\xrightarrow{\rho(A)<1} I + A + A^2 + \cdots + A^k = (I - A)^{-1}$$

必要性：

$$\sum_{k=0}^{\infty} A^k \text{ 收敛} \Rightarrow \delta_{ij} + (A)_{ij} + \cdots + (A^k)_{ij} + \cdots \text{收敛}$$

$$\Rightarrow (A^k)_{ij} \to 0$$

$$\Rightarrow A^k = \left((A^k)_{ij}\right) \to 0$$

$$\Rightarrow \rho(A) < 1$$

定理 6：设幂级数

$$f(A)=\sum_{k=0}^{\infty}c_kA^k$$

收敛半径为r，如果方阵A满足$\rho(A)<r$，则矩阵幂级数$\sum_{k=0}^{\infty}c_kA^k$绝对收敛；如果$\rho(A)<r$，则矩阵幂级数$\sum_{k=0}^{\infty}c_kA^k$发散。

一、矩阵函数的定义

定义：设幂级数$\sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$收敛半径为$r$，且当$|z| < r$时，幂级数收敛于$f(z)$,即

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k, |z| < r$$

如果$A \in C^{n\times n}$满足$\rho(A) < r$,则称收敛的矩阵幂级数$\sum_{k=0}^{\infty} a_k A^k$的和为矩阵函数，记为$f(A)$,即

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k.$$

常用的矩阵函数

$$(1)\ e^A = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k,\ A \in C^{n\times n}$$

$$(2)\quad \sin A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} A^{2k+1},\qquad A \in C^{n\times n}$$

$$(2)\quad \cos A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} A^{2k},\qquad A \in C^{n\times n}$$

$$(4)\quad (I-A)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} A^k,\ \rho(A) < 1$$

$$(5)\quad \ln(I+A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k+1} A^{k+1},\ \rho(A) < 1$$

二、矩阵函数值的计算

1、利用相似对角化:

$$P^{-1}AP = diag(\lambda_1, \cdots, \lambda_n) = D$$

$$\Rightarrow f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (PDP^{-1})^k = P\left(\sum_{k=0}^{\infty} c_k D^k\right) P^{-1}$$

$$= P \begin{pmatrix} \sum_{k=0}^{\infty} c_k \lambda_1^{\,k} & & \\ & \ddots & \\ & & \sum_{k=0}^{\infty} c_k \lambda_n^{\,k} \end{pmatrix} P^{-1} = P \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & & \\ & \ddots & \\ & & f(\lambda_n) \end{pmatrix} P^{-1}$$

同理

$$f(At) = Pdiag\Big(f(\lambda_1 t), \cdots, f(\lambda_n t)\Big)P^{-1}$$

例：

$$\text{设 } A = \begin{pmatrix} 4 & 6 & 0 \\ -3 & -5 & 0 \\ -3 & -6 & 1 \end{pmatrix}, \text{ 求} e^{At}.$$

解：

$$1)\ \det(\lambda I - A) = (\lambda + 2)(\lambda - 1)^2$$

$$\Rightarrow \lambda_1 = -2, \lambda_2 = \lambda_3 = 1$$

2)

当$\lambda_1 = -2$时, $\xi_1 = (-1,1,1)^T$;

当$\lambda_2 = \lambda_3 = 1$时, $\xi_2 = (-2,1,0)^T, \xi_3 = (0,0,1)^T$

因而$P = \begin{pmatrix} -1 & -2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$,

所以$e^{At} = Pdiag\left(e^{-2t}, e^t, e^t\right)P^{-1}$

$$= \begin{pmatrix} 2e^t - e^{-2t} & 2e^t - 2e^{-2t} & 0 \\ e^{2t} - e^{-t} & 2e^{-2t} - e^t & 0 \\ e^{-2t} - e^t & 2e^{-2t} - 2e^t & e^t \end{pmatrix}$$

2、Jordan 标准形法：

$$P^{-1}AP = J = diag(J_1, J_2, \cdots, J_s) \Rightarrow$$

$$f(J_i) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k J_i^k$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} a_k \begin{pmatrix} \lambda_i^k & C_k^1 \lambda_i^{k-1} & \cdots & C_k^{m_i-1} \lambda_i^{k-(m_i-1)} \\ & \lambda_i^k & & \vdots \\ & & \ddots & C_k^1 \lambda_i^{k-1} \\ & & & \lambda_i^k \end{pmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} f(\lambda_i) & \frac{1}{1!}f'(\lambda_i) & \cdots & \frac{1}{(m_i-1)!}f^{(m_i-1)}(\lambda_i) \\ & f(\lambda_i) & \cdots & \frac{1}{(m_i-2)!}f^{(m_i-2)}(\lambda_i) \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & f(\lambda_i) \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k P J^k P^{-1} = P\left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k J^k\right) P^{-1}$$

$$= P \begin{pmatrix} \sum_{k=0}^{\infty} a_k J_1^{\,k} & & \\ & \ddots & \\ & & \sum_{k=0}^{\infty} a_k J_s^{\,k} \end{pmatrix} P^{-1}$$

$$= P \begin{pmatrix} f(J_1) & & \\ & \ddots & \\ & & f(J_s) \end{pmatrix} P^{-1}$$

例

$$\text{设 } A=\begin{pmatrix}\pi & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\pi & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix},\ \text{求}\sin A.$$

解：(1) 化为$Jordan$标准形

$$J_1=\pi, J_2=-\pi, J_3=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

(2) 计算$\sin(J_i)$

$$\sin(J_1)=\sin(J_2)=0, \sin(J_3)=\begin{pmatrix}\sin 0 & \cos 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

所以

$$\sin A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

3、数项级数求和法：

哈密尔顿－凯莱定理：设A是数域P上的一个$n \times n$矩阵，$f(\lambda) = |\lambda I - A|$是$A$的特征多项式，则

$$f(A) = A^n - b_{n-1}A^{n-1} - \cdots - b_1 A - b_0 I = 0$$

$$\Rightarrow A^n = b_{n-1}A^{n-1} + \cdots + b_1 A + b_0 I$$

$$\Rightarrow f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$$

$$= (c_0 I + c_1 A + \cdots + c_n A^n) + c_{n+1}(b_{n-1}A^{n-1} + \cdots + b_0 I) + \cdots$$

$$= (c_0 + \sum_{l=1}^{\infty} c_{n+l} b_0^{(l)})I + (c_1 + \sum_{l=1}^{\infty} c_{n+l} b_1^{(l)})A + \cdots + (c_{n-1} + \sum_{l=1}^{\infty} c_{n+l} b_{n-1}^{(l)})A^{n-1}$$

$$= \sum_{i=0}^{n-1}(c_i + \sum_{l=1}^{\infty} c_{n+l} b_i^{(l)})A^i$$

矩阵函数的一些性质

性质1：

如果$AB = BA$，则$e^A e^B = e^B e^A = e^{A+B}$.

性质2：

如果$AB = BA$，则

(1) $\cos(A + B) = \cos A \cos B - \sin A \sin B$

(2) $\sin(A + B) = \sin A \cos B + \cos A \sin B$

函数矩阵的微分积分

定义1：矩阵$A=\left(a_{ij}(t)\right)_{m\times n}$称为函数矩阵，如果$a_{ij}(t)$是以变量$t$的函数.

定义2：如果$a_{ij}(t)$在$t\in[a,b]$上连续，可微，可积，则称矩阵$A=\left(a_{ij}(t)\right)_{m\times n}$在$[a,b]$上连续，可微，可积.

$$A'(t)=\left(a_{ij}{}'(t)\right)$$

$$\int_a^b A(t)dt=\left(\int_a^b a_{ij}(t)dt\right)$$

例：求函数矩阵

$$A(t)=\begin{pmatrix} t & \sin t & 4 & t^2 \\ \cos t & e^t & \ln t & a^t \end{pmatrix}$$的导数。

解：$$\frac{d}{dt}A(t)=\begin{pmatrix} 1 & \cos t & 0 & 2t \\ -\sin t & e^t & \dfrac{1}{t} & a^t \ln a \end{pmatrix}$$

性质：设$A(t), B(t) \in C^{m\times n}$是两个可微函数，则

$$(1)\quad \frac{d}{dt}(A(t)+B(t)) = \frac{d}{dt}A(t) + \frac{d}{dt}B(t)$$

$$(2)\quad \frac{d}{dt}(A(t)B(t)) = \frac{d}{dt}A(t)\cdot B(t) + A(t)\frac{d}{dt}B(t)$$

$$(3)\quad \frac{d}{dt}(a(t)A(t)) = \frac{d}{dt}a(t)\cdot A(t) + a(t)\frac{d}{dt}A(t)$$

性质：设$A \in C^{n\times n}$是常数矩阵，则

$$(1)\quad \frac{d}{dt}e^{tA} = Ae^{tA} = e^{tA}A;$$

$$(2)\quad \frac{d}{dt}\cos(tA) = -A\sin(tA) = -\sin(tA)A;$$

$$(3)\quad \frac{d}{dt}\sin(tA) = A\cos(tA) = \cos(tA)A;$$

性质：设$A(t), B(t) \in C^{m\times n}$在$[a,b]$上可积，则

$$(1)\quad \int_a^b (A(t) \pm B(t))dt = \int_a^b A(t)dt \pm \int_a^b B(t)dt$$

$$(2)\ \int_a^b \lambda A(t)dt = \lambda \int_a^b A(t)dt$$

$$(3)\quad \int_a^b (A(t)B)dt = \int_a^b A(t)dt \cdot B$$

$$\int_a^b (AB(t))dt = A \cdot \int_a^b B(t)dt$$

数量函数对矩阵变量的导数

例2：设$x=(x_1,\cdots,x_n)^T, f(x)=x^Tx$,求$f$的梯度.

解：$f(x)=x^Tx=\sum_{i=1}^{n}x_i^2,$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}=2x_i \Rightarrow \frac{df}{dx}=2x=2(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$$

定义2：设$X=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T, f(X)$是以$X$为自变量的函数,则$f$对$X$的导数为

$$\frac{df}{dx}=\left(\frac{\partial f}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^T$$

定义2：设$X=\left(x_{ij}\right)\in C^{m\times n}$，$f(X)$是以$X$为自变量的$mn$元函数，且$\dfrac{\partial f}{\partial x_{ij}}$都存在，规定$f$对$X$的导数为

$$\frac{df}{dx}=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial f}{\partial x_{1n}}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \cdots & \dfrac{\partial f}{\partial x_{mn}}\end{pmatrix}$$

矩阵值函数对矩阵变量的导数

定义3：设$G(X)=\left(g_1(X),\cdots,g_n(X)\right)^T$是以$X=(x_1,\cdots,x_n)$为自变量的函数，则$f$对$X$的导数为

$$\frac{dG}{dX}=(\frac{\partial G}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial G}{\partial x_n})=\begin{pmatrix}\frac{\partial g_1(X)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_1(X)}{\partial x_n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial g_n(X)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_n(X)}{\partial x_n}\end{pmatrix}$$

定义3：设$X=(x_{st})\in C^{m\times n}$，$f_{ij}(X)$是$mn$元函数

$i=1,\cdots,r;j=1,\cdots,s;F(X)=(f_{ij}(X))\in C^{r\times s}$

则$F(X)$对矩阵X的导数为

$$\frac{df}{dX}=\begin{pmatrix}\frac{\partial F}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial F}{\partial x_{1n}}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial F}{\partial x_{m1}} & \cdots & \frac{\partial F}{\partial x_{mn}}\end{pmatrix},$$

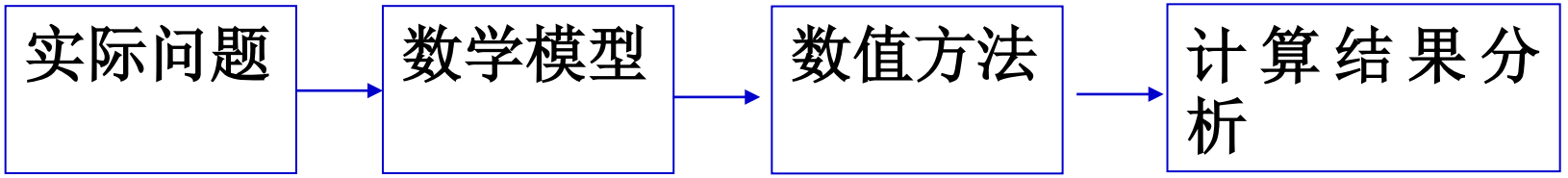
其中

$$\frac{\partial F}{\partial x_{ij}}=\begin{pmatrix}\frac{\partial f_{11}}{\partial x_{ij}} & \cdots & \frac{\partial f_{1s}}{\partial x_{ij}}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial f_{r1}}{\partial x_{ij}} & \cdots & \frac{\partial f_{rs}}{\partial x_{ij}}\end{pmatrix}$$

第二章　科学计算方法

科学研究、工程技术以及其它方面的大量的实际应用都要涉及到计算。科学计算与科学实验，理论研究共同成为科学方法论的基本环节. 它们互相补充，互相依赖，又相对独立.

科学计算过程描述为：



其中，数值方法的主要内容是研究求解数学模型的算法及有关理论。

§2.1 绪论

计算机程序设计的核心是算法. 评价算法的两个主要标准是速度和精度，速度涉及计算量，精度涉及误差.

误差有数据误差和方法误差。数据误差是由计算机中机器的数字长度有限所致；方法误差是由“近似”产生，近似是数值计算方法的一大特点。这是因数值计算时不必要有时也不可能取精确值。

一、误差的来源和分类

1. 来源

来源于科学计算过程的四个主要的环节：数学模型的建立、有关数据的获取、近似计算方法（数值方法）的确立、数值计算的进行。

2. 分类

分为: 模型误差、观测误差、截断误差和舍入误差

其中截断误差（又称方法误差）,它是由求其近似 所致；舍入误差通常是四舍五入所致—此两类误差即为数值分析所研究的计算误差.

二、绝对误差与相对误差

定义1 设实数 x^* 为某一数据的准确值，它的近似值为 x，称 $e(x)= x - x^*$ 为 x 的绝对误差，简称误差.

当 $x^*\neq 0$ 时，称

$$e_r(x) = \frac{e(x)}{|x^*|}$$ 为 x 的相对误差.

绝对误差仅考虑近似值与准确值的差异，而相对误差还考虑数据本身的大小，相对误差常用百分数表示.在实际测量或计算时，可根据具体情况估计 $e(x)$ 或 $e_r(x)$ 的大小范围.

定义2 设 x 为准确值 x^* 的近似值，如果

$$|e(x)| = |x^* - x| \le \varepsilon(x)$$

则称 $\varepsilon(x)$ 为 x 的绝对误差限. 当 $x^* \neq 0$ 时，称

$$\varepsilon_r(x) = \frac{\varepsilon(x)}{|x^*|}$$

为 x 相对误差限.

说明：当绝对误差限 $\varepsilon(x)$ 已知时，通常相对误差限 $\varepsilon_r(x)$ 仍然是未知的，所以在处理具体问题时，由于准确值未知，可以用近似值代替，即用 x 代替 x^*。

例 1 零件的质量取决于参数 x，设 x 的标定值为 1 个单位. 生产中允许参数有一定误差，由此将零件分成 A，B，C 三个等级，等级由相对误差限决定，A等为1%，B 等为5%，C 等为10%. 试确定三个等级的零件参数允许变化的范围.

解 由题设，标定值 $x^*=1$，根据相对误差限定义

$$\frac{|x-x^*|}{|x^*|}\le\varepsilon_r$$

有 $$x^*(1-\varepsilon_r)\le x\le x^*(1+\varepsilon_r)$$

将三个相对误差限分别代入，得

A 等：$x\in[0.99，1.01]$，B 等：$x\in[0.95，1.05]$

C 等：$x\in[0.9，1.1]$.

例2 测量一物体的长度是954cm，问测量数据的相对误差限是多大？

解 因为实际问题所截取的近似数，其绝对误差限一般不超过最小刻度的半个单位，所以当 $x = 954$ cm 时，有 $\varepsilon(x) = 0.5$cm，而x 的相对误差满足

$$e_r(x) \le \frac{0.5}{954} = 0.0005241\cdots$$

$$< 0.00053 = 0.053\%$$

所以，测量数据的相对误差限可确定为

$$\varepsilon_r(x) = 0.053\%$$

六、 数值计算中的一些基本原则

为使误差不增长，有一些基本原则.

1. 避免绝对值小的数作除数

这一原则主要指尽量避免除数绝对值远远小于被除数绝对值的除法.

2. 避免两个相近的数据相减

3. 要防止大数“吃掉”小数

一个绝对值很大的数和一个绝对值很小的数直接相加时，很可能发生所谓“大数吃小数”的现象，从而影响计算结果的可靠性. 这主要是计算机表示的数位数有限这一客观现实引起的.

4．尽量减少计算工作量

在考虑算法时应注意简化计算步骤，减少运算次数. 计算机执行一个算法所花费的时间代价除了与问题的规模大小有关外，主要依赖于计算过程中所用乘除法次数的多少，也就是计算工作量的大小. 计算工作量小的算法不仅节约运行时间，而且使误差积累小.

5．选用数值稳定性好的算法

对同一个数学问题，即使在数学公式已经确定的情况下，仍然可以设计出不同的算法. 而不同的算法在执行过程中对数据误差的影响不一样，舍入误差对计算结果影响不大的算法被称为数值稳定的算法.

§2.2 非线性方程数值方法

方程

$$f(x)= 0$$

如果 $f(x)$ 是非线性函数，则称为非线性方程, 其中 $f(x)$是关于x的一元函数.

非线性方程的求解问题是科学与工程计算中常见的问题之一. 但对高于4次的代数方程，不存在通用的求根公式，而对超越方程一般很难直接求出其准确解.

所以，数值方法就是非常实用和有效的方法. 其中，迭代技术是一种常用技术. 其思想是对根的逐次逼近.

一般地，若用计算机求解非解线性方程有下列两步:

第一步 对方程的根进行隔离.

找出隔根区间（区间内只包含方程的一个根）.

第二步 利用迭代法计算满足一定精度的根近似值.

在方程的隔根区间内从给定的一个（或多个）出发值 x_0，按某种方法产生一个序列

$$x_0，x_1，x_2，\ldots，x_n，\ldots.$$

此序列在某种条件下收敛于方程的根 x^*.

本节介绍非线性方程求根的逐次逼近法. 同时也讨论方法的收敛性和误差估计等问题.

一、 二分法

二分法本质上是一种区间迭代算法，在迭代过程中不断对隔根区间进行压缩，以区间中点逼近方程的根. 它所涉及的理论是连续函数介值定理:

定理1 设函数 $f(x)$ 在区间$[a，b]$上连续，且$f(a)f(b)< 0$，则 $f(x)= 0$ 在区间$(a，b)$内至少有一个根.

方法 (设函数 $f(x)$满足定理1条件):

1. 求区间$[a，b]$的中点

$$x_0 = a + (b – a)/2= (a + b)/2$$

2. 计算$f(x_0)$,

如果 $f(x_0)= 0$, 则 x_0 是方程的解; 否则继续3.

3．如果 $f(x_0)f(a)<0$，取 $a_1=a$，$b_1=x_0$;

如果 $f(x_0)f(b)<0$，取$a_1=x_0$，$b_1=b$.

此时区间 $[a_1，b_1]$的长度是$[a，b]$的一半,将其作为新的$[a，b]$区间，重复 1–3 直到找到根或找到满足精度要求的近似根(隔根区间充分小时).

说明　在二分法计算过程中，设第n个区间为$[a_n，b_n]$，则

(1) $b_n-a_n=(b-a)/2^n$

(2) n充分大时，可取$x_n=(a_n+b_n)/2$为方程的解x^*的近似值,且有如下收敛定理

定理2　设x^*为方程 $f(x)=0$在区间$[a，b]$内的唯一根，$f(x)$满足 $f(a)f(b)<0$，则二分法计算过程中第n个区间$[a_n，b_n]$的中点x_n满足不等式

$$\left|x_n - x^*\right| \le \frac{b-a}{2^{n+1}} \qquad (*)$$

即二分法是局部收敛的，其中局部收敛的定义为：

定义2 如果存在$\varphi(x_n)$的不动点x^*的一个闭邻域

$$N(x^*)=[x^*-\delta, x^*+\delta], \delta>0$$

使对任意的$x_0 \in N(x^*)$，$x_n=\varphi(x_{n-1})$ 产生的序列$\{x_n\}$均收敛于 x^*，则称迭代法局部收敛.

（3）若给出精度ε，即求近似值 x_n，使其满足 $|x_n - x^*| \le \varepsilon$，则由（*）式容易推出二分法的迭代次数估计式为

$$n = \log_2 \frac{b-a}{\varepsilon} - 1$$

算法1（二分法求解非线性方程算法）

第一步：输入误差限 ε_0，ε_1，计算 $y_1 \leftarrow f(a)$，$y_2 \leftarrow f(b)$；

第二步：计算 $x_0 \leftarrow 0.5(a+b)$，$y_0 \leftarrow f(x_0)$，若 $|y_0| < \varepsilon_0$，则输出 x_0，结束. 否则转第三步；

第三步：若 $y_0 y_1 < 0$，则置 $b \leftarrow x_0$，$y_2 \leftarrow y_0$；否则 $a \leftarrow x_0$，$y_1 \leftarrow y_0$，转第四步；

第四步：若 $|b-a| > \varepsilon_1$ 则转第二步；否则，输出 x_0 结束.

例1 用二分法求下列方程在区间[0，1]内的一个根，要求误差不超过 $1/2^5$

$$e^{-x} - \sin(\frac{\pi x}{2}) = 0$$

解　令

$$f(x) = e^{-x} - \sin(\frac{\pi x}{2})$$

计算得

$$f(0)=1>0,\quad f(1)=-0.6321<0,\quad f'(x)=-e^{-x}-\frac{\pi}{2}\cos(\frac{\pi x}{2})<0$$

所以 $f(x)$ 在区间 [0，1] 上恰有一个根. 计算结果如下表.

n	函数值符号	有根区间
1	$f(0.5) = -0.1006 < 0$	[0，0.5]
2	$f(0.25) = 0.3961 > 0$	[0.25，0.5]
3	$f(0.3755) = 0.1317 > 0$	[0.375，0.5]
4	$f(0.4375) = 0.0113 > 0$	[0.4375，0.5]

取 $x_4 = 0.5\ (0.4375 + 0.5) = 0.4688$ 作为 x^* 的近似值. 误差不超过$1/2^5$.

二、 牛顿（Newton）迭代法

算法思想 将方程 $f(x)=0$ 中函数 $f(x)$ 在根的附近线性化，以线性方程的解逼近非线性方程的解 .

理论依据 设函数$f(x)$在有根区间$[a，b]$二次连续可微，x_0是根 x^*的一个近似值，则 $f(x)$ 在 x_0 处的泰勒展开式为

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)^2$$

其中ξ在 x 和 x_0之间.

即 $$f(x)\approx f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)$$

于是 $f(x)=0$ 可近似转换为

$$f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)=0$$

迭代公式的推导

设 $f'(x_0) \neq 0$，其解记为

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

这是较 x_0 更靠近x^* 的新的近似值. 一般，在 x_n 附近的线性化方程为

$$f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) = 0$$

设 $f'(x_n) \neq 0$, 其解记为

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \qquad n = 0，1，\ldots$$

这就是迭代公式, 被称为牛顿迭代法的计算格式. 选一个初始点 x_0，由迭代公式便可得到迭代序列

$$x_0，\ x_1，\ \cdots，\ x_n，\ \cdots.$$

例3 用牛顿迭代法计算 7 的平方根，记录并分析计算过程中数据变化规律.

解 设 $x=\sqrt{7}$ ，得方程 $x^2-7=0$. 利用牛顿迭代法，得计算格式

$$x_{n+1}=\frac{1}{2}\left(x_n+\frac{7}{x_n}\right) \quad n=0，\ 1，\ \cdots$$

取初始值为 $x_0 = 2.5$，迭代计算的数据结果见下表

k	x_k	$x_k - x_{k-1}$
1	2.65000000000000	1.5000e-001
2	2.64575471698113	-4.2453e-003
3	2.64575131106678	-3.4059e-006
4	2.64575131106459	-2.1902e-012
5	2.64575131106459	0

由此可见，计算过程中每迭代一次，新数据与前一次数据的相同位数几乎增加一倍。第五次迭代和第四次迭代数据的15位数完全相同，说明数据2.64575131106459 准确到小数点后14位. 而得到这样的精度的数据只有4次迭代.

对于牛顿迭代法, 迭代函数为

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

$$\varphi'(x) = f(x)f''(x)/[f'(x)]^2$$

假定x^* 是 $f(x)=0$ 的单根，即$f(x^*)=0$， $f'(x^*) \neq 0$

由 $\varphi'(x^*) = 0$ ，利用台劳展式知，牛顿迭代法在根x^*附近至少平方收敛.

定理3 假设在的某邻域内具有连续的二阶导数，且设 $f(x^*)=0$， $f'(x^*) \neq 0$ ，则对充分靠近的初始值x_0，牛顿迭代法产生的序列$\{x_n\}$至少平方收敛于x^*.

牛顿迭代法的缺陷:

1. 可能发生被零除错误

   当函数在它的零点附近，导函数的绝对值非常小时，运算会出现被零除错误;

2. 可能出现死循环

   当函数在它的零点有拐点时，可能会使迭代陷入死 循环.

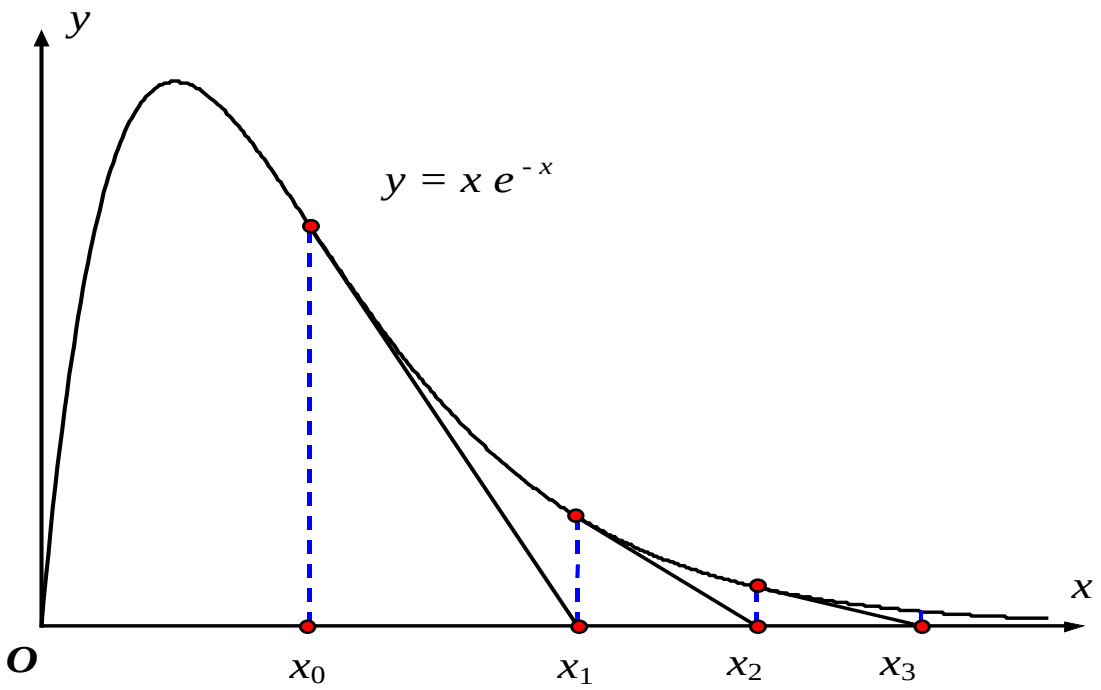
下面是两个牛顿迭代法不成功的反例

例4 用牛顿迭代法解方程 $xe^{-x}=0$.

解 令 $f(x)= xe^{-x}$，$f(x)$ 恒为正，在区间[1，∞]内单调递减. 取$x_0= 2$，用牛顿迭代法计算得

$$x_1= 4，x_2= 5.33333，…，x_{15}= 19.72354943，….$$

同时可计算出当自变量增大时函数 $f(x)$ 迅速趋近于零，例如 $f(x_{15})=0.0000000536$. 算法有可能错误地将 x_{15}做为根.

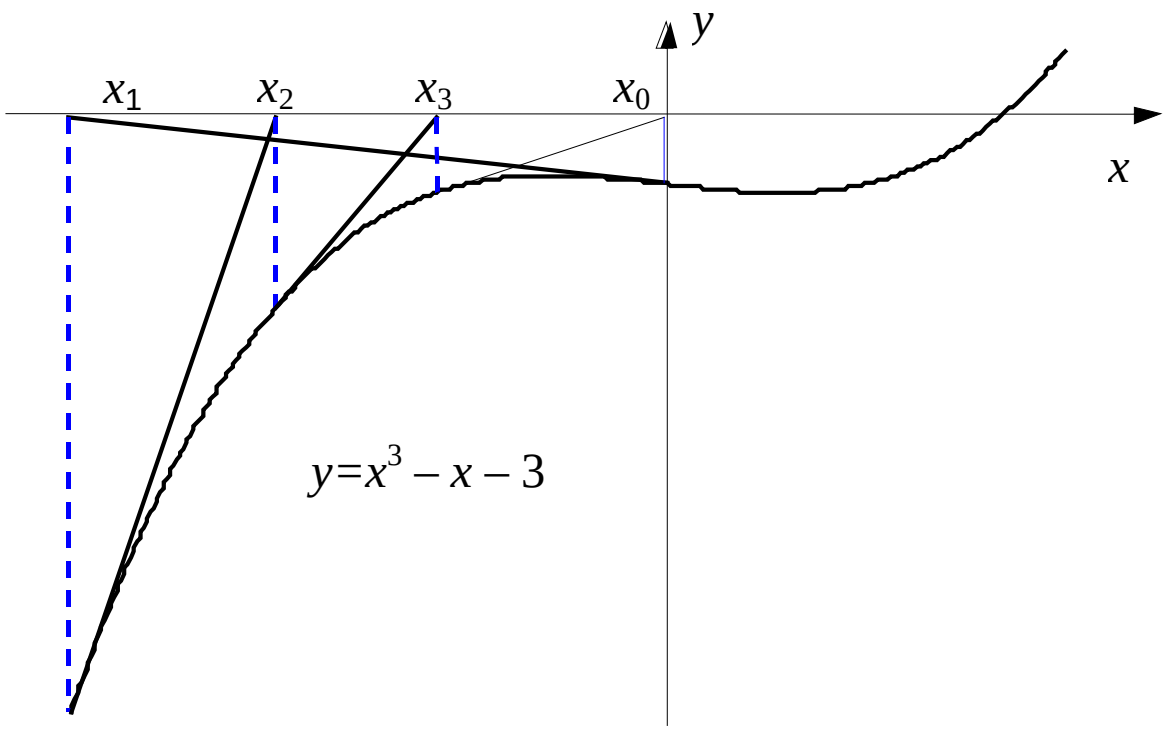


例5 用牛顿迭代法解方程 $x^3 - x - 3 = 0$.

解 对于 $f(x) = x^3 - x - 3$，取$x_0 = 0$，用牛顿迭代法计算，得

$x_1 = -3$，$x_2 = -1.9615$，$x_3 = -1.1472$，$x_4 = -0.0066$，….

数列中的项以四项为一个周期重复(见右图)，算法将陷入一种死循环中.



定理4 （非局部收敛性定理）给定方程$f(x)=0$，如果函数 $f(x)\in C^2[a，b]$，且在$[a，b]$满足条件：

（1）$f(a)\,f(b)<0$；

（2）$f'(x)$，$f''(x)$ 在$[a，b]$上连续且不变号（恒为正或恒为负）；

（3）取 $x_0\in[a，b]$ 使得 $f(x_0)\,f''(x_0)>0$.

则方程 $f(x)=0$ 在$[a，b]$ 上有唯一根 x^*，且由初值x_0按牛顿迭代公式

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \qquad （n=0，1，2，\cdots\cdots）$$

求得的序列$\{x_n\}$二阶收敛于x^*.

收敛性要求初始点要取得合适，否则会导致错误结果

定理4的解释：1. 定理4 中条件（1）保证了根的存在；

2. 条件（2）要求 $f(x)$ 是单调函数，且$f(x)$在$[a，b]$上是上凸或下凸；

3. 条件（3）取 $x_0 \in [a，b]$使 $f(x_0)f''(x_0) > 0$ 保证了当 $x_n \in [a，b]$时，有 $x_{n+1} \in [a，b]$.

注记如下：

如果 $f(x)$ 的二阶导数大于零，则函数图形是下凸曲线，根据条件（3），应取牛顿迭代的初始点使得 $f(x_0)>0$（见右图）

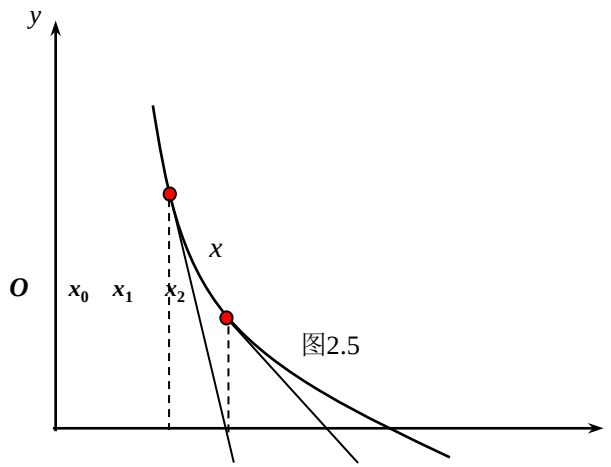
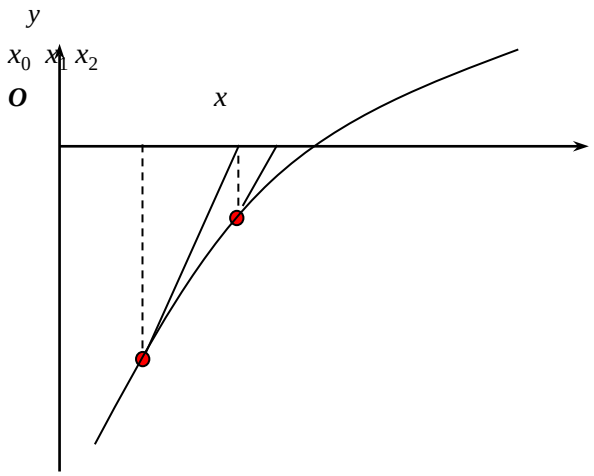


图2.5

如果 $f(x)$ 的二阶导数小于零，则函数图形是上凸曲线，根据条件（3），应取牛顿迭代的初始点使得 $f(x_0)<0$（见下图）



§2.3 线性方程组的直接解法

用 $E_1, E_2, \ldots, E_n$ 表示方程的行号, 则 n 阶线性方程组可写成如下形式:

$$\begin{aligned} E_1 \quad & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots\cdots a_{1n}x_n = b_1, \\ E_2 \quad & a_{21}x_2 + a_{22}x_2 + \cdots\cdots a_{2n}x_n = b_2, \\ & \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ E_n \quad & a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots\cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{aligned} \tag{2.3.1}$$

写为矩阵形式 $\boldsymbol{Ax = b}$ (2.3.2)

$$A = (a_{ij})_{n\times n} \in R^{n\times n}\ ,\ b = (b_1, b_2, \cdots, b_n)^T \in R^n, x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T \in R^n$$

分别称为方程组的系数矩阵、右端向量和解向量.

线性方程组的数值解法分为直接法和迭代法两类.

直接法在没有舍入误差的情况下, 通过有限步计算求得方程组的准确解. 对于中、小型方程组 ($n \leq 1000$) 及某些大型的稀疏方程组非常实用. 实际计算中，由于误差的影响，直接法只能求得方程组的近似解.

而迭代法则是建立迭代格式，从初始向量出发，产生向量序列, 逐次逼近方程组的准确解.对大型方程组, 常选用迭代法.

求解方程组 (2.3.1) 的 Gram 法则是公式求解方法. 对一个 n 阶方程组, Gram 法则需要计算出包括A的行列式在内的 $(n+1)$ 个n 阶行列式, 而每一个行列式的计算需用$n!(n-1)$次乘法. 对于$n=20$的中等规模问题的求解, 也要耗费巨大机时; 而作为一类最基本的直接法——高斯消元法, 其计算工作量只有大约$2n^3/3$次浮点数运算.

一、高斯消元法

基本思想 将一般的线性方程组 (2.3.1) 经初等变换化为等价的上三角形方程组, 然后对上三角形方程组直接求解.

1. 上三角方程组求解的回代过程

如下形式的线性方程组称为上三角形方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ \qquad a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad\qquad a_{nn}x_n = b_n. \end{cases} \tag{2.3.3}$$

当 $a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}\neq 0$ 时,求解过程为 从最后一个方程开始, 逐个计算出未知元 (称为回代过程) , 即

$$\begin{cases} x_n = b_n / a_{nn}, \\ x_k = [b_k - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}x_j] / a_{kk}, (k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1). \end{cases}$$

算法1

第一步：输入方程组系数矩阵和右端向量;

第二步： $x_n = b_n / a_{nn}; k \leftarrow n-1;$

第三步： $x_k = [b_k - (a_{k,k+1} + \cdots + a_{kn} \quad x_n)] / a_{kk}$;

第四步：判断, 若$k > 1$, 则$k \leftarrow k-1$, 转第三步, 否则, 转第五步;

第五步：输出 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ ，结束.

回代过程所用的乘除法次数总共为 $n(n+1)/2$

二、高斯消元过程

基本思想 对方程组的增广矩阵做行初等变换使其为上三角形方程组, 再回代求出方程组的解.

例1 用高斯消元法解方程组:

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 6, \\ 3x_1 + 5x_2 + 2x_3 = 5, \\ 4x_1 + 3x_2 + 30x_3 = 32. \end{cases}$$

解 E_i 表示增广矩阵的第 i 行, 用 $\lambda E_i + E_j \to E_j$, 表示第 i 行乘数 λ 加至第 j 行.

该方程组的增广矩阵为:

$$[\boldsymbol{A}\ \ \boldsymbol{b}]=\begin{bmatrix}2&3&4&6\\3&5&2&5\\4&3&30&32\end{bmatrix}$$

$$-\frac{3}{2}E_1+E_2\to E_2,-\frac{4}{2}E_1+E_3\to E_3$$

$$[\boldsymbol{A}^{(1)}\ \ \boldsymbol{b}^{(1)}]=\begin{bmatrix}2&3&4&6\\0&0.5&-4&-4\\0&-3&22&20\end{bmatrix}$$

$$\frac{3}{0.5}E_2+E_3\to E_3$$

$$[\boldsymbol{A}^{(2)}\ \ \boldsymbol{b}^{(2)}]=\begin{bmatrix}2&3&4&6\\0&0.5&-4&-4\\0&0&-2&-4\end{bmatrix}$$

已得到三角形方程组

$$\begin{cases}2x_1+3x_2+4x_3=6,\\0.5x_2-4x_3=-4,\\-2x_3=-4.\end{cases}$$

由回代求出方程组的解:

$x_1=-13$　　$x_2=8$

$x_3=2$

说明: 对于方程组 (2.3.1), 将其转化为等价的上三角形方程组的过程称为消元过程.

设方程组 (2.3.1) 的增广矩阵为

$$[\boldsymbol{A} \quad \boldsymbol{b}] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ & & \cdots\cdots & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{4n} & b_n \end{bmatrix}$$

算法2 (消元过程的算法)

第一步：输入 $A=(a_{ij})_{n\times n}$ 和 $b=[b_1, \ldots, b_n]^T$, $k\leftarrow 0$;

第二步：$k\leftarrow k+1$, $i \leftarrow k$;

第三步：$i\leftarrow i+1$, 计算 $m_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$, $b_i \leftarrow b_i - m_{ik}b_k$,

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

如果 $i < n$, 则转第三步, 否则转第四步;

第四步：如果$k < n-1$, 则转第二步, 否则结束.

说明： (1) 消元过程所用乘、除法次数为

$$S_2 = n(n-1)/2 + (n^3 - n)/3$$

(2) 加上回代过程的乘除法次数S_1, 得高斯消元法解n阶方程组所用的乘、除法总次数为 (与n^3 同阶)

$$S = S_1 + S_2 = n^2 + (n^3 - n)/3$$

(3) 在消元过程中, 增广矩阵经有限次初等变换化为上三角形矩阵的过程称为约化. 其中每一步所涉及到的一个关键数据 $a_{k+1,k+1}^{(k)}$ 称为约化主元. 当所有约化主元不等于零时, 消元过程才能顺利进行. 下面的定理给出了约化主元不为零的判定.

定理1 约化主元 $a_{k+1,k+1}^{(k)} \neq 0 (k = 0, 1, \cdots, n-1)$ 的充分必要条件是矩阵A的各阶顺序主子式不等于零. 即

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (k = 1, \cdots, n)$$

说明: 在消元过程中, 如果出现约化主元 $a_{kk}^{(k-1)} = 0$ 时, 消元过程将无法进行. 有时即使约化主元不为零, 但其绝对值很小时也会导致舍入误差扩大. 这可结合使用选主元方法, 避免用绝对值小的主元作除数, 使消元法具有较好的数值稳定性.

列主元法是一种部分选主元方法, 针对方程组 (2.3.1) , 首先从增广矩阵 $[A\ \ b]$ 的第一列中选取绝对值最大的元素作为主元素, 即确定 j 使得

$$|a_{j1}|=\max\{|a_{11}|,|a_{21}|,\cdots,|a_{n1}|\}$$

如果 $j\neq 1$, 且 $a_{j1}\neq 0$, 则交换第一行与第 j 行, 并进行第一步消元, 得$[A^{(1)}\ \ b^{(1)}]$. 重复这一过程, 直至方程组化为上三角形方程组 .

例2 用Gauss列主元法解方程组

$$\begin{cases} -3x_1+2x_2+6x_3=4, \\ 10x_1-7x_2=7, \\ 5x_1-x_2+5x_3=6. \end{cases}$$

解 首先写出方程组的增广矩阵

$$[\boldsymbol{A}\ \ \boldsymbol{b}]=\begin{bmatrix}-3 & 2 & 6 & 4\\ 10 & -7 & 0 & 7\\ 5 & -1 & 5 & 6\end{bmatrix}$$

第一步列主元选取10, 将第一行与第二行交换, 再进行第一步消元, 得

$$[\boldsymbol{A}^{(1)}\ \ \boldsymbol{b}^{(1)}]=\begin{bmatrix}10 & -7 & 0 & 7\\ 0 & -1/10 & 6 & 61/10\\ 0 & 5/2 & 5 & 5/2\end{bmatrix}$$

第二步列主元选取 5/2, 将第二行与第三行交换, 再进行第二步消元, 得

$$[\boldsymbol{A}^{(2)}\ \ \boldsymbol{b}^{(2)}]=\begin{bmatrix}10 & -7 & 0 & 7\\ 0 & 5/2 & 5 & 5/2\\ 0 & 0 & 31/5 & 31/5\end{bmatrix}$$

对应的方程组为

$$\begin{cases} 10x_1 - 7x_2 = 7, \\ \frac{5}{2}x_2 + 5x_3 = \frac{5}{2}, \\ \frac{31}{5}x_3 = \frac{31}{5}. \end{cases}$$

回代求解, 得

$$x_1 = 0, x_2 = -1, x_3 = 1$$

三、直接三角分解法

在一些实际问题中, 如常微分方程边值问题, 三次样条函数计算等, 都需要求解如下类型的三对角方程组:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix} \qquad (2.3.8)$$

其系数矩阵A称为三对角矩阵.

解法分析:

首先利用矩阵的直接分解法将矩阵A分解为两个三角形矩阵的乘积, $A=LU$, 其中, L 为下三角矩阵, U 为单位上三角矩阵, 设

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_1 & & & \\ \gamma_2 & \delta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

其中右边的参数待定, 比较上式两边得

$$\begin{cases} b_1 = \delta_1, c_1 = \delta_1\beta_1, \\ a_k = \gamma_k, b_k = \gamma_k\beta_{k-1} + \delta_k \quad (k = 2, \cdots, n), \\ c_k = \delta_k\beta_k \quad (k = 2, 3, \cdots, n-1). \end{cases} \tag{2.3.10}$$

或

$$\begin{cases} \gamma_k = a_k, k = 2,3,\cdots n \\ \delta_1 = b_1, \beta_1 = \dfrac{c_1}{b_1} \\ \delta_k = b_k - a_k\beta_{k-1}, k = 2,\cdots n \\ \beta_k = \dfrac{c_k}{\delta_k}, k = 2,\cdots,n-1 \end{cases}$$

可看出：$Q=L+U-I_n=$

$$\begin{bmatrix} \delta_1 & \beta_1 & & & \\ \gamma_2 & \delta_2 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_{n-1} & \delta_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix}$$

式 (2.3.10) 中, 若δ= 0, 则计算将无法进行. 下面定理给出了使δ≠0 的条件.

定理2 如果三角矩阵的元素满足条件:

(1) $|b_1|>|c_1|>0$;

(2) $|b_k|\geq|a_k|+|c_k|$ $a_k c_k \neq 0$ $(k=2,3,\cdots,n)$;

(3) $|b_n|>|a_n|>0$.

则由公式 (2.3.10) 可计算出δ和 β , 且

$$|\delta_k|>|c_k|\neq 0\ (k=1,2,\cdots,n-1)$$

由定理 2知, 当三对角方程组 (2.3.8) 的系数矩阵A满足假设条件时, 用公式 (2.3.10) 可以实现A的LU分解. 此时, 求解三对角方程组$Ax=f$ 等价于 $LUx=f$,这又等价于解两个三角形方程组:

(1) 求解$Ly=f$, 得向量y;

(2) 求解 $Ux = y$, 得方程组 (2.3.8) 的解 x.

具体计算公式如下:

$$\begin{cases} y_1 = f_1 / \delta_1, \\ y_i = (f_i - a_i y_{i-1}) / \delta_i, \ (i = 2, \cdots, n), \\ x_n = y_n, x_i = y_i - \beta_i x_{i+1} \quad (i = n-1, \cdots, 2, 1). \end{cases}$$

这种方法称为解三对角方程组的追赶法.

例3 用追赶法解三对角方程组

$$\begin{bmatrix} \delta_1 & \beta_1 & & & \\ \gamma_2 & \delta_2 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_{n-1} & \delta_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

解 计算过程用$Q=L+U-I_4$形式存放数据

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1/2 & & \\ -1 & 5/2 & -4/5 & \\ & -2 & 12/5 & -5/6 \\ & & -3 & 5/2 \end{bmatrix},$$

$$\begin{cases} \gamma_k = a_k, k = 2,3,\cdots n \\ \delta_1 = b_1, \beta_1 = \dfrac{c_1}{b_1} \\ \delta_k = b_k - a_k\beta_{k-1}, k = 2,\cdots n \\ \beta_k = \dfrac{c_k}{\delta_k}, k = 2,\cdots,n-1 \end{cases}$$

故

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

求解方程 $Ly=f$ 得

$$y=\left[3,\quad 8/5,\quad 4/3,\quad 2\right]^T$$

求解方程 $Ux=y$ 得原方程组的解

$$x=\left[5,\quad 4,\quad 3,\quad 2\right]^T$$

由例3的计算过程知, 三对角矩阵的LU分解过程中, 只是将原矩阵元素按行的次序进行刷新, 且每一行第一个元素不变. 结合式 (2.3.9) 和式 (2.3.10) 可设计算法如下:

算法 3

第一步：输入数据 $a_j, b_j, c_j, f_j (j = 1, 2, \cdots, n)$ ；

第二步：置 $f_1 \leftarrow f_1 / b_1$，$k \leftarrow 1$;

第三步：置 $k \leftarrow k+1$, 计算

$c_{k-1} \leftarrow c_{k-1} / b_{k-1}$，$b_k \leftarrow b_k - a_k \times c_{k-1}$，$f_k \leftarrow (f_k - a_k \times f_{k-1}) / b_k$;

第四步：判断, 如果 $k<n$, 转第三步; 否则, $j \leftarrow n$, 转第五步;

第五步：$j \leftarrow j-1$, $f \leftarrow f - c \times f_{+1}$;

第六步：判断, 如果 $j>1$, 转第五步;
否则输出 $f_1, f_2, \ldots, f_n$ ， 结束.

§2.4 线性方程组的迭代解法

随着计算技术的发展, 计算机的存储量日益增大, 计算速度也迅速提高, 在计算机上可以求解的线性方程的规模也越来越大, 在实际应用中, 常常遇到大型稀疏线性方程组的求解问题, 因此寻求能保持稀疏性的有效算法就成为数值代数中的一个非常重要的课题.而迭代法就是其中之一.

迭代法思想: 构造收敛的向量序列, 使该序列收敛于所求解方程组的准确解.

具体地

设方程组 $Ax = b$有唯一解 x^*, 将 $Ax = b$ 变形为等价的方程组

$$x = Bx + f$$

由此建立迭代公式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f \quad (k = 0, 1, 2, \dots).$$

给定初始向量 $x^{(0)}$, 按此公式计算的近似解向量序列 $\{x^{(k)}\}$, 称此方法为迭代法. 若对任意初值 $x^{(0)}$, 当迭代次数无限增加时, 序列 $\{x^{(k)}\}$ 都有相同的极限 x^*, 即

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

$$\Rightarrow \qquad x^* = Bx^* + f,$$

则称迭代法是收敛的, 否则称为发散的. 迭代格式中的矩阵B称为迭代矩阵.

一、雅可比迭代和高斯-赛德尔迭代

迭代法适用于大型稀疏矩阵的线性方程组, 为了介绍该迭代法的思想, 考查下面三阶方程的迭代计算过程.

例1 已知

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

试用迭代法产生向量序列逐步逼近准确解 (注:方程组的准确解为 $x^* = [1, 1, 1]^T$) .

解 将原方程做等价变形, 由第一个方程解出 x_1, 由第二个方程解出 x_2, 由第三个方程解出 x_3, 得如下方程组:

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{9}x_2 + \frac{1}{9}x_3 + \frac{7}{9} \\ x_2 = \frac{1}{10}x_1 + \frac{1}{10}x_3 + \frac{8}{10} \\ x_3 = \frac{1}{15}x_1 + \frac{1}{15}x_2 + \frac{13}{15} \end{cases}$$

由此建立迭代格式

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

取初始向量 $x(0) = [0, 0, 0]^T$, 迭代情况如表2-6所示.

表 2-6

k	1	2	3	4
$x_1^{(k)}$	0.7778	0.9630	0.9929	0.9987
$x_2^{(k)}$	0.8000	0.9644	0.9935	0.9988
$x_3^{(k)}$	0.8667	0.9719	0.9952	0.9991

说明: 1. 表2-6中第一列数据为第一次迭代的结果, 记 为 $x^{(1)}$; 以 $x^{(1)}$ 为输入数据进行第二次迭代, 其结果为表中第二列数据, 记为 $x^{(2)}$; …. 当 $k = 4$时, 得近似解

$$x^{(4)} = [0.9987, 0.9988, 0.9991]^T.$$

2. 由上可知, 对给定的方程组, 迭代法是利用迭代格式迭代计算出向量序列

$$x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(n)}, \ldots$$

逐步逼近方程组的准确解. 例1所用迭代法称为雅可比 (Jacobi) 迭代法.

一般地, n 阶线性代数方程 $Ax = b$ ($A \in R^{n \times n}$, $b \in R^n$, $x \in R^n$) 可以写成如下形式:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \qquad (i = 1, 2, \ldots, n).$$

设 $a_{ii} \neq 0$ ($i = 1, 2, \ldots, n$), 由第i个方程解出x_i ($i = 1, 2, \ldots, n$), 得到与原方程组等价的方程组

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}}[-\sum_{j \neq i} a_{ij} x_j + b_i] \qquad (i = 1, 2, \ldots, n).$$

将迭代格式 (2.4.1) 推广, 有

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}[-\sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} + b_i] \qquad (i = 1, 2, \ldots, n). \qquad (2.4.2)$$

这就是雅可比迭代法的分量形式, 即

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{11}}(-a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)} + b_1), \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{22}}(-a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)} + b_2), \\ \cdots\cdots \\ x_n^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{nn}}(-a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)} + b_n). \end{cases}$$

从而得到雅可比迭代法的矩阵形式

$$\boldsymbol{x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + f_J}\ ,\ \ \boldsymbol{k = 1, 2, \ldots, n}$$

其中

$$\boldsymbol{B}_J = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad f_J = \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}$$

将原方程组系数矩阵A中主对角元分裂, 设

$$A = D - L - U$$

其中, $D = \mathrm{diag}(a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn})$, $a_{ii} \neq 0$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$,

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ -a_{21} & 0 & & & \\ -a_{31} & -a_{32} & 0 & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & -a_{n3} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & -a_{13} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ \cdots & \cdots & 0 & \cdots & -a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \cdots \\ & & & & 0 \end{pmatrix}$$

由于D^{-1}存在, 于是

$$B_J = D^{-1}(L+U) = D^{-1}(D-A) = I - D^{-1}A,$$

$$f_J = D^{-1}b.$$

称 $B_J = I - D^{-1}A$ 为雅可比迭代矩阵.

例2 将例1中的方程组及迭代格式 (2.4.1) 做如下修改：尽量利用最新计算数据, 如计算 $x_2^{(k+1)}$ 时, 由于已算出 $x_1^{(k+1)}$, 所以用 $x_1^{(k+1)}$, 而不用 $x_1^{(k)}$, 则迭代格式 (2.4.1) 变为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{9}x_2^{(k)} + \dfrac{1}{9}x_3^{(k)} + \dfrac{7}{9} \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{10}x_1^{(k+1)} + \dfrac{1}{10}x_3^{(k)} + \dfrac{8}{10} \\ x_3^{(k+1)} = \dfrac{1}{15}x_1^{(k+1)} + \dfrac{1}{15}x_2^{(k+1)} + \dfrac{13}{15} \end{cases} \qquad (2.4.3)$$

取初始值$x^{(0)} = [0, 0, 0]^T$, 迭代情况如下表所示

k	1	2	3	4
$x_1^{(k)}$	0.7778	0.9839	0.9994	1.0000
$x_2^{(k)}$	0.8778	0.9961	0.9998	1.0000
$x_3^{(k)}$	0.9770	0.9987	0.9999	1.0000

$k = 4$时, 满足 $\| x^{(4)} - x^{(3)} \| = 5.5578 \times 10^{-4}$.

说明: 1. 我们称迭代格式 (2.4.3) 为解$Ax = b$的高斯-赛德尔 (Gauss-Seidel) 迭代法.

2. 对一般n阶方程组$Ax = b$, $a_{ii} \neq 0$ ($i = 1, 2, \ldots, n$), 迭代格式 (2.4.3) 就成为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{11}}(-a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)} + b_1), \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{22}}(-a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)} + b_2), \\ \cdots\cdots \\ x_n^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{nn}}(-a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)} + b_n). \end{cases}$$

即

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k+1)} + b_i \right) \quad (i = 1, 2, \ldots, n). \qquad (2.4.4)$$

这就是Gauss-Seidel迭代法的分量形式, 其矩阵形式为

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= D^{-1}(L x^{(k+1)} + U x^{(k)} + b) \\ &= D^{-1} L x^{(k+1)} + D^{-1} U x^{(k)} + D^{-1} b. \end{aligned}$$

可改写为

$$x^{(k+1)} = (D-L)^{-1}U\,x^{(k)} + (D-L)^{-1}b$$

$$= B_{G\text{-}S}\,x^{(k)} + f_{G\text{-}S} \quad (k = 1, 2, \ldots, n)$$

其中 $B_{G\text{-}S} = (D-L)^{-1}U$

称为Guss-Seidel迭代矩阵.

计算实践表明, 对许多问题 Gauss-Seidel 迭代法确实比 Jacobi 迭代法收敛快, 但 也有Gauss-Seidel迭代比Jacobi迭代收敛慢的情况, 甚至还有Jacobi迭代收敛, 而Gauss-Seidel迭代发散的情形.

上述两种最基本的迭代法的算法形式

算法1 (Jacobi 迭代算法)

(1) 输入A, b, $x^{(0)}$, 维数n, 精度ε, 最大容许迭代次数N;

(2) 置k=1;

(3) 计算 $$x_i = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j\neq 1} a_{ij}x_j^{(0)}\right)\ (i = 1, 2, \ldots, n);$$

(4) 若$\| x - x^{(0)} \| < \varepsilon$, 输出$x$, 停机; 否则转 (5) ;

(5) 若 $k<N$, 则 $k \leftarrow k+1$, $x_i \leftarrow x_i^{(0)}$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$, 转 (3) ; 否则, 输出失败信息, 停机.

算法2 (Gauss-Seidel迭代算法)

(1) 输入A, b, $x^{(0)}$, 维数n, 精度ε, , 最大容许迭代次数N;

(2) 置k=1;

(3) 计算

$$x_1 = \frac{1}{a_n}\left(b_1 - \sum_{j=2} a_{1j} x_j^{(0)}\right)$$

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(0)}\right) \quad (i = 2, \ldots, n-1)$$

$$x_n = \frac{1}{a_{nn}}\left(b_n - \sum_{j=1}^{n-1} a_{ij} x\right);$$

(4) 若$\| x - x^{(0)} \| < \varepsilon$, 输出$x$, 停机; 否则转 (5) ;

(5) 若$k<N$, 则置$k \leftarrow k+1$, $x_i \leftarrow x_i^{(0)}$ ($i = 1, 2, \ldots, n$), 转 (3) ; 否则, 输出失败信息, 停机.

收敛基本定理

定理1 迭代法 (2.4.4) 收敛的充分必要条件是迭代矩阵的谱半径$\rho(B) < 1$.

定理2 若 $\|B\| < 1$, 则对于迭代格式 $x^{(k+1)} = B x^{(k)} + f$, $k = 0, 1, 2, \ldots$, 有

$$\| x^* - x^{(k)} \| \leqslant \frac{\| B \|}{1 - \| B \|} \| x^{(k)} - x^{(k-1)} \| \qquad (2.4.5)$$

$$\| x^* - x^{(k)} \| \leqslant \frac{\| B \|}{1 - \| B \|} \| x^{(1)} - x^{(0)} \| \qquad (2.4.6)$$

其中x^*为方程组 $Ax = b$ 的精确解.设 $\| \cdot \|$ 为矩阵的算子范数,有

$$\| B \|_1 = \max_j \sum_{i=1}^{n} | b_{ij} |,$$

$$\| B \|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^{n} | b_{ij} |,$$

$$\| B \|_F = \sqrt{\sum_{i,j} | b_{ij} |^2}$$

定义2 设 $A=(a_{ij})\in C^{n\times n}$ ，若

$$|a_{ii}|\geqslant\sum_{j\neq i}|a_{ij}|,\quad i=1,2,\cdots,n$$

则称A为对角占优矩阵. 若上式中均为严格不等式, 则称A为严格对角占优矩阵.

定理3 若$A\,x=b$的系数矩阵A为严格对角占优矩阵, 则Jacobi迭代和Gauss-Seidel迭代均收敛.

定理4 若A为对称正定矩阵, 则Gauss-Seidel迭代收敛.

第三章　最优化理论与方法

最优化计算方法主要是研究在一定限制条件下，选取某种方案以达到最优化目标的一门学科。达到最优目标的方案，称为最优方案，搜索最优方案的方法，称为最优化方法。这种方法的数学理论，称为最优化理论。

实际上最优化方法已广泛应用于空间技术、军事科学、电子工程、通讯工程、自动控制、系统识别、资源分配、计算数学、经济管理等等领域。

最优化方法包括的内容很广泛，如线性规划、非线性规划、整数规划、动态规划、多目标规划、组合优化等等。

简史

- 萌芽期：Lanchester战斗方程（1914）、排队论先驱者Erlang公式（1917）、康托罗洛维奇LP模型（1939，1960 Nobel Prize）、Dantzig 单纯形法（1947）、Von Neumann &.Morgenstern 对策论（1944）.....
- 成长期：20世纪30年代末（二战），运筹学（Operational Research or Operations Reseach）作为一个名词出现（诞生），主要应用于军事作战、防御等方面。
- 发展期：20世纪50年代至今，相继应用到工业、农业、经济、社会问题等领域，并形成许多分支。IFORS（1959）、EUOR（1975）、APORS（1985） .....

中国

- 《史记·高祖本纪》“运筹策帷幄之中，决胜于千里之外”[谋士张良]
- 战 田忌赛马、宋 丁渭修皇宫 [宰相 汴水]
- 20世纪50年代中后期，钱学森、华罗庚、许国志等引入。1965+年华罗庚“优选法”“统筹法”

§3.1 线性规划问题的数学模型

一. 最优化问题举例

例1（运输问题） 设有位于不同城市的 m 个电视机厂A_1，A_2，…，A_m，其产量分别为a_1，a_2，…，a_m（台），其产品供应 n 个城市B_1，B_2，…，B_n。每个城市的需要量分别为b_1，b_2，…，b_n（台）。假定产需平衡，即

$$\sum_{i=1}^{m} a_i = \sum_{i=1}^{n} b_i$$

已知从A_i到B_j的运费单价为 c_{ij}（元/台）（i =1,2,…, m；j = 1,2,…, n）。问由每个厂到每个城市的运输量各为多少时，即既能保证需要量，又能使总运费最少？

解 设由A_i到B_j的运输量为x_{ij}（台）（$i=1,2,\ldots,m$；$j=1,2,\ldots,n$），则要求总运费

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij}x_{ij}$$

达到最小，其中要满足的约束条件为：

$$\sum_{j=1}^{n} x_{ij}=a_i,\quad i=1,2,\ldots,m;\quad \sum_{i=1}^{m} x_{ij}=b_j,\quad j=1,2,\ldots,n$$

$$\begin{cases} \min\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij}x_{ij}, \\ s.t.\sum_{j=1}^{n} x_{ij}=a_i,\quad i=1,2,\cdots,m, \\ \sum_{i=1}^{m} x_{ij}=b_j,\quad j=1,2,\cdots,n, \\ x_{ij}\geq 0,\quad i=1,2,\cdots,n;\ j=1,2,\cdots,m, \end{cases}$$

例2 (系统可靠性问题) 在设计某些大型的系统工程时,常常要考虑它们的可靠性。

设一个系统是由 n 个部件串联而成。为提高系统的可靠性,每个部件都装有备用件,一但原部件出现故障,备用件就自动进入系统。显然, 备用件越多系统可靠性越大, 但费用也越高， 重量也越大, 这在实际上是不行的。假定当部件k 配置 u_k 个备用件时, 这个部件正常工作的概率为 $p_k(u_k)$, 而每个备用件k 的费用为 c_k, 重量为 a_k。 试在总费用不超过C, 总重量不超过A 的条件下决定各部件的备用件的数量,使得系统正常工作的概率最大。

解　因为系统正常工作的概率是各部件正常工作的概率的乘积,所以问题归纳为

$$\max \prod_{k=1}^{n} p_k(u_k)$$

$$s.t \quad \sum_{k=1}^{n} c_k u_k \le C$$

$$\sum_{k=1}^{n} a_k u_k \le A$$

u_k 是正整数。

例3（非线性方程组的求解） 解非线性方程组是相当困难的一类问题，由于最优化方法的发展，对解非线性方程组提供了一种有力的手段。

解非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ f_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \end{cases}$$

在方程组有解的情况下等价于下列函数的最小值点：

$$\min F(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \sum_{i=1}^{n} f_i^{\,2}(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

例4 合理下料问题

某车间有长度为180cm的钢管(数量充分多), 今要将其截为三种不同长度, 长度为70cm的管料100根, 而52cm、35 cm的管料分别不得少于150根和120根, 问应采取怎样的截法, 才能完成任务, 同时使剩下的余料最少?

解 所有可能的截法共有8种, 如下表所示.

截 法		一	二	三	四	五	六	七	八	需要量
长度	70	2	1	1	1	0	0	0	0	100
	52	0	2	1	0	3	2	1	0	150
	35	1	0	1	3	0	2	3	5	120
余 料		5	6	23	5	24	6	23	5	

选其中一种余料最少的截法, 但不能完成任务. 所以我们必须同时采取若干种截法, 配合起来, 在完成任务的条件下, 使总的余料最少.

设采用第 i 种截法的钢管数目为 x_i (i =1, …,8), 那么截出 70cm 的管料数目应为 $(2x_1 + x_2 + x_3 + x_4)$ 根, 其总数应为100, 即

$$2x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 100$$

同理可得

$$2x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 \geq 150$$

$$x_1 + x_3 + 3x_4 + 2x_6 + 3x_7 + 5x_8 \geq 120$$

由题意可知

$$x_i \geq 0 \quad (i = 1, \ldots, 8)$$

余料的总长度为

$$f = 5x_1 + 6x_2 + 23x_3 + 5x_4 + 24x_5 + 6x_6 + 23x_7 + 5x_8.$$

于是上述下料问题的数学模型为

$$\begin{cases} \min f = 5x_1 + 6x_2 + 23x_3 + 5x_4 + 24x_5 + 6x_6 + 23x_7 + 5x_8; \\ s.t.\ \ 2x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 100, \\ \qquad 2x_2 + x_3 + 3x_5 + 2x_6 + x_7 \geqslant 150, \\ \qquad x_1 + x_3 + 3x_4 + 2x_6 + 3x_7 + 5x_8 \geqslant 120, \\ \qquad x_i \geqslant 0, (ji = 1, 2, \cdots, 8). \end{cases}$$

说明：由于求变量 x_1，x_2，…，x_n使某函数 $f(x_1，x_2，…，x_n)$（也记为 $f(\mathbf{x})$) 达到极大，等价于使 $-f(\mathbf{x})$ 达到极小。所以上述例子均可归结为函数的带约束或不带约束的极小化问题，简称最优化问题，其中称 $f(\mathbf{x})$ 为目标函数。

二． 最优化问题的数学模型与分类

1. 根据问题不同特点分类

(1) 无约束极小化问题

求 $x=(x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$ 使函数 $f(x)$ 达到最小, 记为

$$\min_{x \in R^n} f(x) \quad \text{或} \quad \min f(x)$$

（2）约束极小化问题

记为

$$\begin{cases} \min\ f(x) \\ s.t.\ \ g_i(x) \geq 0,\ \ i = 1,2,\cdots,m \\ \qquad h_j(x) = 0,\ \ j = 1, 2, \ldots, n \end{cases}$$

说明：若某些问题的约束条件出现 $h(x) \leq 0$ ， 则可令 $g(x) = -h(x)$ 而将此约束转化为 $g(x) \geq 0$, 所以模型中的不等号均假定为≥.

注: $\because \ h(x) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} h(x) \geq 0 \\ -h(x) \geq 0 \end{cases}$

所以上述 (2)约束极小化问题也可表为：

$$\begin{cases} \min \ f(x) \\ s.t. \ g_i(x) \geq 0, \ i = 1,2,\ldots,m \end{cases}$$

或 $\min\limits_{x \in S} f(x)$

其中 $S = \{x \mid g_i(x) \geq 0, i = 1, \ldots, m\}$

称为可行集或可行域，S 中的点称为可行点。

3. 线性规划问题数学模型的标准形式

$$\begin{cases} \min f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j; \\ s.t. \ \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \quad (i = 1, 2, \cdots, m), \\ x_j \geqslant 0 \quad (j = 1, 2, \cdots, n). \end{cases}$$

4. 将一般的线性规划问题转化成标准形式的方法

(1) 极大值问题极小化

对 **max** $f(x)$，只要令 $g(x) = -f(x)$，则极大值问题就转化为求 $g(x)$ 的极小值问题.

(2) 转变“≤”约束为等式约束

$$\sum_{j=1}^{n} a_{pj} x_j \leqslant b_p$$ 引入 $x_{n+p} \geq 0$，使 $$\sum_{j=1}^{n} a_{pj} x_j + x_{n+p} = b_p$$

称变量 x_{n+p}为松弛变量.

(3) 转变“≥”约束为等式约束

$$\sum_{j=1}^{n} a_{qj} x_j \geqslant b_q$$ 引入 $x_{n+q} \geq 0$，使 $$\sum_{j=1}^{n} a_{qj} x_j - x_{n+q} = b_q$$

称变量 x_{n+q}为剩余变量.

(4) 消除自由变量

标准形式要求 $x_i \geq 0$, 模型中如果出现 x_i 可任取值, 则称 x_i 为自由变量, 此时可作如下处理:

引入新变量 $x_j^+ \geqslant 0, x_i^- \geqslant 0$, 令 $x_i = x_i^+ - x_i^-$ 即可

例6 将下面线性规划化为标准形.

$$\begin{cases} \max(x_1 - 2x_2 + 3x_3); \\ s.t. \quad 2x_1 - 7x_3 \leqslant 0, \\ \qquad 3x_1 + 2x_2 \geqslant 0, \\ \qquad x_1 + x_2 + x_3 = 5 \\ \qquad x_1, x_2 \geqslant 0, x_3 \text{任意}. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \max(x_1 - 2x_2 + 3x_3); \\ s.t.\ \ 2x_1 - 7x_3 \leqslant 0, \\ \quad 3x_1 + 2x_2 \geqslant 0, \\ \quad x_1 + x_2 + x_3 = 5 \\ \quad x_1, x_2 \geqslant 0, x_3 \text{任意}. \end{cases}$$

解 极大问题极小化:

$$\max(x_1 - 2x_2 + 3x_3) = \min(-x_1 + 2x_2 - 3x_3).$$

引入松驰变量 $x_4 \geq 0$, 使

$$2x_1 - 7x_3 + x_4 = 0$$

引入剩余变量 $x_5 \geq 0$, 使

$$3x_1 - 2x_2 - x_5 = 0.$$

消除自由变量x_3, 令

$$x_3 = x_6 - x_7, x_6 \geqslant 0, x_7 \geqslant 0,$$

则原规划的标准形式为

$$\begin{cases} \max(x_1 - 2x_2 + 3x_3); \\ s.t.\ \ 2x_1 - 7x_3 \leqslant 0, \\ \quad 3x_1 + 2x_2 \geqslant 0, \\ \quad x_1 + x_2 + x_3 = 5 \\ \quad x_1, x_2 \geqslant 0, x_3 \text{任意}. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \min(-x_1 + 2x_2 - 3x_6 + 3x_7) \\ s.t.\ 2x_1 + 4x_4 - 7x_6 + 7x_7 = 0 \\ \quad 3x_1 + 2x_2 - x_5 = 0 \\ \quad x_1 + x_2 + x_6 - x_7 = 5 \\ \quad x_i \geq 0,\ i = 1,2,\cdots,7 \end{cases}$$

注: 标准形中还可要求 $b_i \geq 0$ $(i = 1, \ldots, m)$, 若某个$b_i \leq 0$, 则可在所在等式两端同乘以(–1)即可.

5. 线性规划的标准形还可以写成矩阵形式

令 $c^T=(c_1,c_2,\cdots c_n)$ $b=(b_1,b_2,\cdots b_m)^T$ $x=(x_1,x_2,\cdots x_n)^T$

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

则线性规划的标准形式又可写成矩阵形式：

$$\begin{cases} \min c^T x; \\ s.t.\ \ Ax=b, \\ \qquad x \geqslant 0. \end{cases}$$

如例6 ,即规化:

$$\begin{cases} \min(-x_1 + 2x_2 - 3x_6 + 3x_7) \\ s.t.\ 2x_1 + 4x_4 - 7x_6 + 7x_7 = 0 \\ \quad 3x_1 + 2x_2 - x_5 = 0 \\ \quad x_1 + x_2 + x_6 - x_7 = 5 \\ \quad x_i \geq 0,\ i = 1,2,\cdots,7 \end{cases}$$

的矩阵形式为:

$$\begin{cases} \min c^T x; \\ s.t.\ \ Ax = b, \\ \quad x \geqslant 0. \end{cases}$$

其中

$$c^T = (-1,2,0,0,0,-3,3) \qquad b = (0,0,5)^T,\ x = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)^T$$

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 4 & 0 & -7 & 7 \\ 3 & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

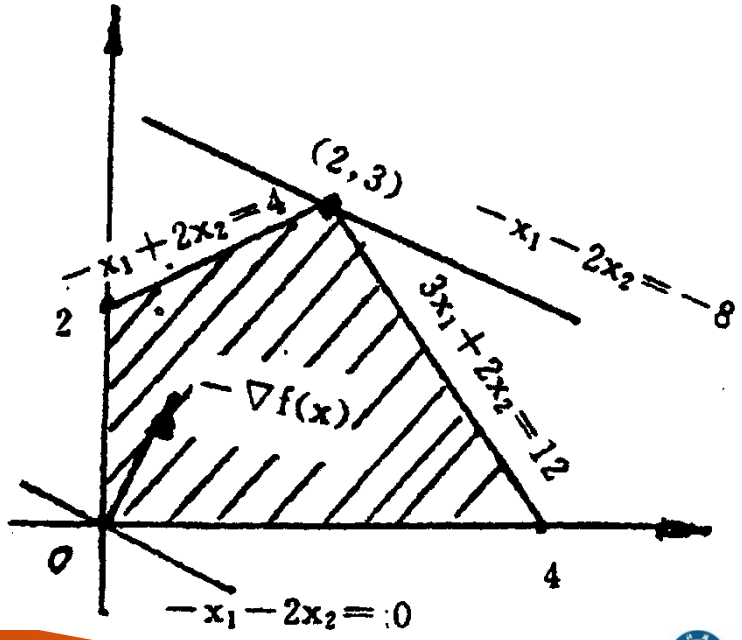
§3.2 二维线性规划的图解法

对线性规划
$$\begin{cases} \min\ f(x) = c^T x; \\ s.t.\ \ Ax = b, \\ \qquad x \geqslant 0. \end{cases}$$
设其可行集为 ***R***.

当 $x=(x_1,x_2)$ (即二维线性规划) 时，可行集 ***R*** 可用图形表示出来, 因而可用图解法来求该线性规划的解.

例1 用图解法求解
$$\begin{cases} \min\ f(x) = -x_1 - 2x_2; \\ s.t.\ \ -x_1 + 2x_2 \leqslant 4, \\ \qquad 3x_1 + 2x_2 \leqslant 12, \\ \qquad x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0. \end{cases}$$

解 先绘出可行集, 由 $x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$, 可知可行集在第一象限内; 因 $-x_1 + 2x_2 \leq 4$, 可知可行集在以直线$-x_1 + 2x_2 = 4$为分界线, 且含原点的半平面内; 而 $3x_1 + 2x_2 \leq 12$ 是包含坐标原点的、以直线 $3x_1 + 2x_2 = 12$为分界线的半平面. 这两个半平面在第一象限的交集就是可行集, 如下图所示的限影部分.



再绘出目标函数的等值线.当目标函数值为z_0时, 其等值线为

$$-x_1 - 2x_2 = z_0$$

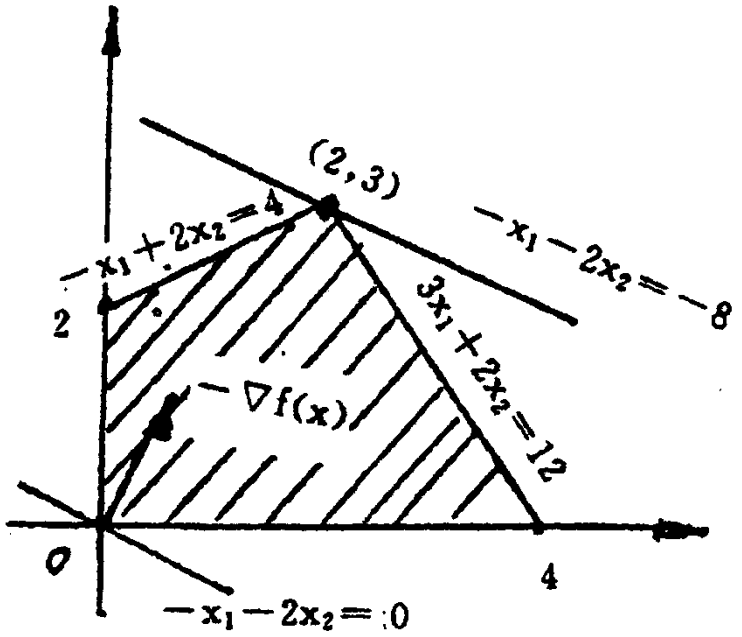
这是一条直线, 当 z_0 取不同值时, 可得到其他等值线. 因具有相同的斜率, 所以等值线是彼此平行的直线. 例如,当z_0=0时, 得一通过坐标原点的等值线

$$-x_1 - 2x_2 = 0$$

然后确定目标函数的负梯度方向 (这是函数值下降最快的方向):

$$-\nabla f(x) = (1, 2,)^T,$$

如上图中箭头所指的方向.



最后沿 $(1,2)^T$ 方向, 作目标函数值的一系列等值线(一族平行线). 由图可知, 沿目标函数值下降方向的等值线在点 $x^*=(2,3)$ 与可行集 R 唯一相交; 若目标函数值继续下降, 相应的等值线与可行集将不再相交.

故点$x^*=(2,3)$为此线性规划的唯一最小值点, 相应的最小值为 -8 .

例中最优解是 R 的一个“顶点”. 一般地, 可证:

(1) 若可行集$R=\phi$, 则线性规划无最优解;

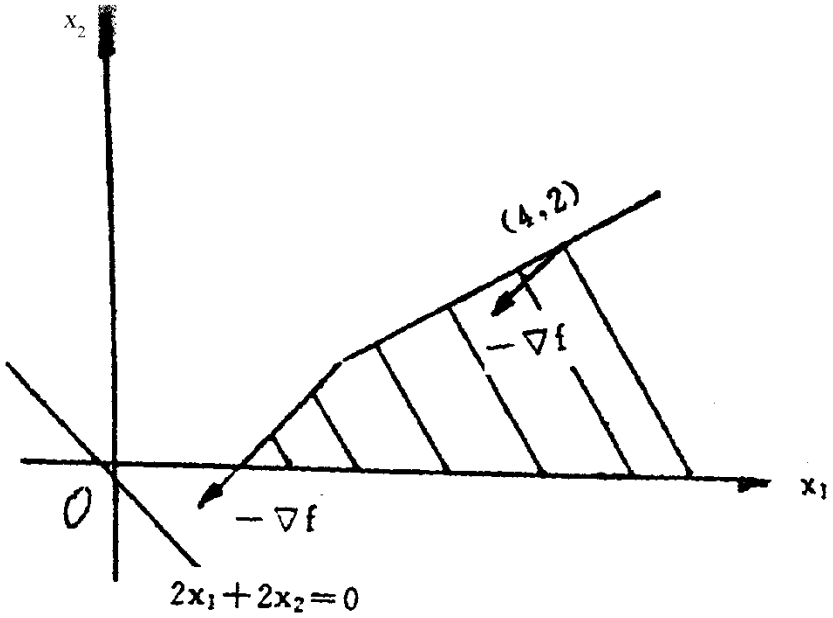
(2) 若线性规划的最优解存在, 则必可在R的某个“顶点”处取得.

(3) 若R的某两个顶点是最优解, 则这两个顶点所连接的线段上任一点都是最优解.

例2 解线性规划

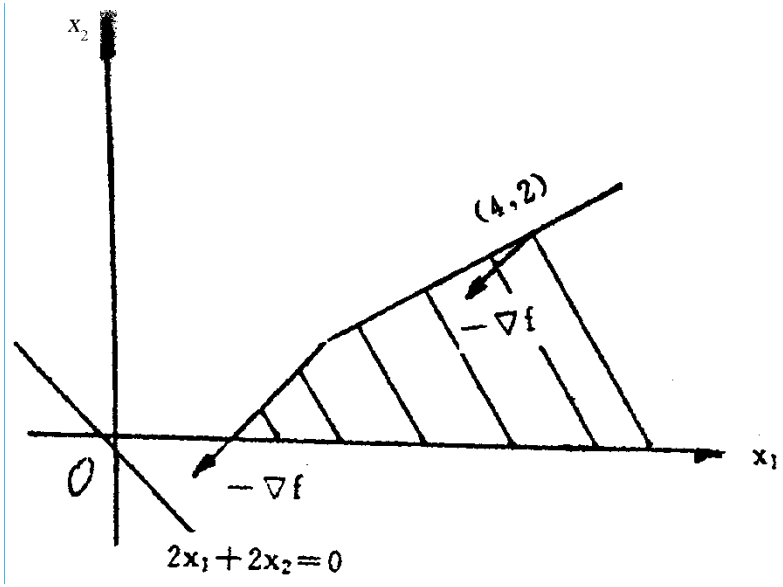
$$\begin{cases} \min(2x_1+2x_2). \\ x.t.\ \ x_1-x_2 \geqslant 1, \\ \qquad -x_1+2x_2 \leqslant 0, \\ \qquad x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0. \end{cases}$$

解 可行集如下图所示的阴影部分.



绘出过原点的等值线; 求出目标函数的负梯度方向:

$$-\nabla f(x)=(-2,-2)^T$$



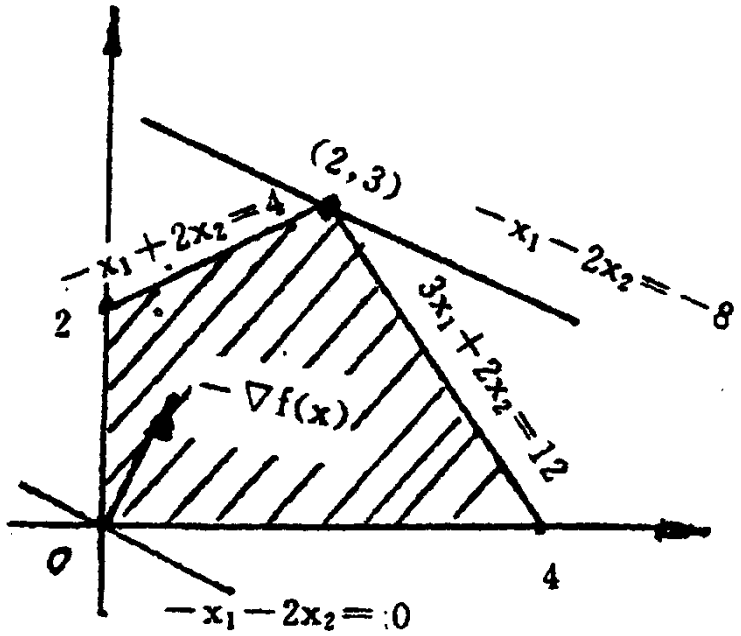
沿 $(-2,-2)^T$ 的方向作目标函数的等值线, 也即 $2x_1+2x_2=0$ 的平行线, 易见 $x^*=(1,0)$ 是此规划的唯一最小值点, 且最小值为 2.

说明: 将例2的 min 改为 max, 即 $\min(-2x_1-2x_2)$. 此目标函数的下降方向与例2的相反, 由图可知此线性规划没有最优解.

例3 将例1的目标函数改为 $f(x)= -3x_1 -2x_2$,而约束条件不变, 即求

$$\begin{cases} \min\ f(x) = -3x_1 - 2x_2; \\ s.t.\quad -x_1 + 2x_2 \leqslant 4, \\ \qquad 3x_1 + 2x_2 \leqslant 12, \\ \qquad x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0. \end{cases}$$

解 可行集如图:



可行集的4个顶点为:

(0,2), (0,0), (4,0), (2,3)

相应的函数值依次为:

-4, 0, -12, -12

所以, 目标函数的最小值为 -12, 且点(2,3)与(4,0)之间的所有点都是该规划的最优解, 该规划有无穷多个解.

§3.3 二维线性规划的基本概念及解的性质

考虑线性规划:

$$\begin{cases} \min c^T x; \\ s.t.\ \ Ax = b, \\ \quad x \geqslant 0. \end{cases} \qquad (3.3.1)$$

其中 A 为 $m \times n$ 矩阵, 设秩 $R(A)=m$, 则 $m \leq n$, 用 P_j 表示 A 的第 j 列, 则 Ax 可记为

$$\sum_{j=1}^{n} x_j P_j = b$$

基: 若 $B=(P_{j1}, P_{j2}, \cdots, P_{jm})$ 可逆, 则称 B 为该线性规划的基. 称 $P_{ji}(i=1,2,\cdots,m)$ 为基向量. 称 x_{ji} 为基变量. 其余变量称为非基变量.

基本解: 设 $B=(P_{j1},P_{j2},\cdots,P_{jm})$ 是式(3.3.1)的一个基, 相应的基变量为 $x_B=(x_{j1},x_{j2},\cdots,x_{jm})^{\mathrm{T}}$ 则方程组 $Bx_B=b$ 有唯一解:

$$x_B=B^{-1}b=(x_{j1}^0,x_{j2}^0,\cdots,x_{jm}^0)^T.$$

令非基变量全部为 0, 得 $Ax=b$ 的一组解:

$$x_{j1}^0,x_{j2}^0,\cdots,x_{jm}^0,0,0,\cdots,0 \quad (\text{假定 } j_1,\ldots,j_m=1,\ldots,m)$$

称此解为式(3.3.1)的基本解.

可行解: 满足 $Ax=b$, $x\geq 0$ 的向量 x 称为式(3.3.1)的可行解.

基本可行解: 若 x 既是可行解又是基本解, 则称 x 为式(3.3.1)的基本可行解. 此时的 B 称为可行基. 因A为$m\times n$矩阵，所以式(3.3.1)的不同基最多有C_n^m个. 即基本可行解的个数有限.

最优解：C^Tx 取得的最小值的可行解 x^*, 称为式(3.3.1)的最优解.

例1 求下列约束的所有基本可行解.

$$x_1 + x_2 + x_3 = 2,$$
$$x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 6,$$
$$x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0, x_3 \geqslant 0$$

解 $$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 2 \\ 6 \end{bmatrix}$$

即 $$P_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, P_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, P_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

$\Rightarrow$ $B_1 = (P_1, P_2), B_2 = (P_2, P_3), B_3 = (P_1, P_3)$ 均为基

(1) 取B_1为基, 则

$$x_{B_1} = B_1^{-1}b = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}^{-2} \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

由于x_1=-2 < 0, 故 x 不是可行解, 从而不是基本可行解.

(2) 取B_2为基, 则 x_2, x_3 为基变量.

$$x_{B_2} = B_2^{-1}b = (1,1)^T, x^2 = (0,1,1)^T.$$

(3) 取B_3为基, 则 x_1, x_3 为基变量.

$$x_{B_3} = B_3^{-1}b = \left(\frac{2}{3}, \frac{4}{3}\right)^T. \quad x^3 = \left(\frac{2}{3}, 0, \frac{4}{3}\right)^T,$$

所以所有基本可行解为: x^2, x^3

定义1 设 $D \subset R^n$，若对 $\forall x^1, x^2 \in D$，及 $a \in [0,1]$，都有 $ax^1 + (1-a)x^2 \in D$，则称 ***D*** 为凸集. 规定空集 ϕ 与单元集也是凸集.

说明: **(1)** 凸集又等价为: 若 $\alpha_1 \geqslant 0, \alpha_2 \geqslant 0$，且 $a_1 + a_2 = 1$，都有 $a_1 x^1 + a_2 x^2 \in D$，则***D***为凸集.

(2) 从几何来讲, 若集合***D***中任意两点的连线仍属于***D***, 则***D***为凸集.

定义2 设 $x^1, x^2, \cdots, x^m \in R^n, a_1, a_2, \cdots, a_m$ 为一组非负实数, 且 $a_1 + a_2 + \cdots + a_m = 1$，则

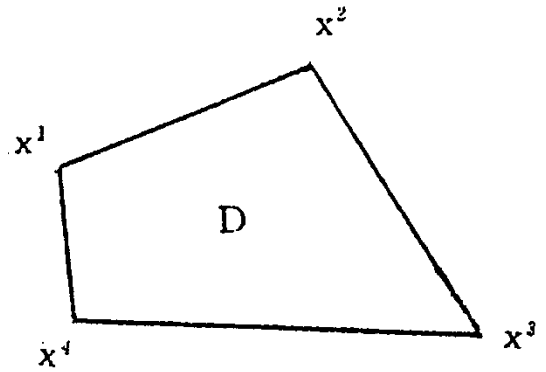
$$a_1 x^2 + a_2 x^2 + \cdots a_m x^m = \sum_{i=1}^{m} a_i x^i$$

称为 $x^1, x^2, \ldots, x^m$ 的一个凸组合.

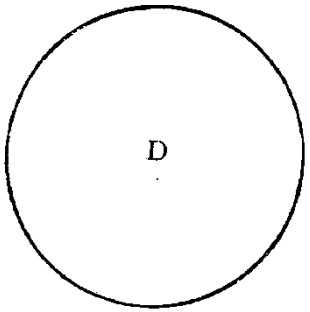
定理1　$D \subset R^n$ 为凸集的充要条件是D中任意有限个点的凸组合仍在D中.

定义3 设 $x \in D \subset R$, D是凸集, 若 x° 不能表示为D中其他任意两个不同点的凸组合, 则称 x° 是D的极点.

例 (1) 右图中, x^1, x^2, x^3, x^4 为凸集D的极点.



(2) 下图, 圆周上每一点都是极点.



(3) 开区间为凸集, 其上任一点都可表示为两个不同点的凸组合, 故上没有极点.

定理2 的推论 线性规划可行集R的点x是R的极点的充要条件是 x 为此线性规划的基本可行解.

定理3 若线性规划有最优解, 则必可在其可行集的顶点处取得.

从以上理论可知: 求解线性规划问题, 其本质上是找 出可行集的极点. 而极点与基本可行解一一对应, 基本 可行解最多C_n^m个. 从理论上说都可全部计算出来, 通过 比较各极点处目标函数值的大小就可以得到最优解.

例4 求线性规划的最优解

$$\begin{cases} \min f(\boldsymbol{x}) = x_1 - 2x_2 - 3x_3; \\ s.t.\ \ x_1 + x_2 + x_3 = 2, \\ \quad x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 6, \\ \quad x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0, x_3 \geqslant 0. \end{cases}$$

解 由例1知此线性规划有两个基本可行解:

$$x^1 = (0,1,1)^T, x^2 = \left(\frac{2}{3}, 0, \frac{4}{3}\right)^T.$$

代入目标函数得

$$f(x^1) = -5,\ f(x^2) = -\frac{10}{3}.$$

所以 $x^1 = (0,1,1)^T$ 和 -5 是最优解.

§3.4 单纯形法

思想 从可行集的一个顶点出发, 沿目标函数值下降的方向寻找下一个顶点, 而顶点的个数有限, 所以若有解, 则必可在有限步求得最优解.

一、对应于B的单纯形表

设线性规划问题为:

$$\begin{cases} \min f(\boldsymbol{x}) = c^T \boldsymbol{x}; \\ s.t.\ A\boldsymbol{x} = b, \\ \quad x \geqslant 0. \end{cases}$$

设系数矩阵A的秩为m, B为$m \times n$的线性规划问题的一个基. 不妨设

$$A=(B,N),B=(P_1,P_2,\cdots,P_m),N=(P_{m+1},\cdots P_n)$$

相应地 $x=\begin{pmatrix}x_B\\x_N\end{pmatrix}$ 其中，$x_B=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_m\end{pmatrix}$ 为对应于***B***的基变量部分；

$x_N=\begin{bmatrix}x_{m+1}\\x_{m+2}\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}$ 为对应于***B***的非基变量部分.

此时

$$Ax=(B,N)\begin{pmatrix}x_B\\x_N\end{pmatrix}=Bx_B+Nx_N=Bx_B \quad (\text{当 } x_N=0 \text{ 时})$$

所以当 x 为基本解时 (有x_N =0) 有

$$Ax = b \quad \Rightarrow \quad Bx_N = b \quad \Rightarrow \quad x_N = B^{-1}b$$

此时目标函数值为

$$c^T x = c^T x_N = c^T B^{-1} b$$

判别定理 对于基B, 若 $B^{-1}b \geqslant 0$, 且 $C_B^T B^{-1} A - C \leqslant 0$, 则对应于基B的基本解便是最优解, 称为基本最优解; 这时基B称为最优基.

注: $c_B^T B^{-1} A - c^T \leqslant 0$ 与 $c_B^T B^{-1} N - c_N^T \leqslant 0$ 是等价的.

记: $c_B^T B^{-1} b = b_{00}, c_B^T B^{-1} A - c^T = (b_{01}, b_{02}, \cdots, b_{0n}),$

其中 $b_{0j}, j = 1, 2, \cdots, n$ 称为检验数.

对应于基B的单纯形表, 记为$T(B)$, 定义为

$$T(B) = \begin{pmatrix} c_B^T B^{-1} b & c_B^T B^{-1} A - c^T \\ B^{-1} b & B^{-1} A \end{pmatrix} = (b_{ij}) = \left[\begin{array}{c|ccc} b_{00} & b_{01} & b_{02} & \cdots & b_{0n} \\ \hline b_{10} & b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{m0} & b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mn} \end{array}\right]$$

说明 (1) 如果所有 $b_{io} \geqslant 0 (i = 1, 2, \cdots, m)$, 这时对应于基B的基本解为基本可行解, 基B为可行基.

(2) 若所有 $b_{io} \geqslant 0 (i = 1, 2, \cdots, m)$ 而且所有 $b_{oj} \leqslant 0 (j = 1, 2, \cdots, n)$, 这时对应于基B的基本解为基本最优解, 基B为最优基. 相应的目标函数值为最优值.

例1 线性规划

$$\begin{cases} \min f(\boldsymbol{x}) = x_1 + 2x_2 + 3x_3; \\ s.t.\ \ 2x_1 - x_2 = 1, \\ x_1 + x_3 = 1, \\ x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0, x_3 \geqslant 0. \end{cases}$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

有三个基: $(P_1, P_2), (P_1, P_3), (P_2, P_3).$

$$\Rightarrow \quad B_1 = (P_1, P_2), N_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, x_{B_1} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad x_{N_1} = x_3, c_{B_1}^T = (1,2), C_{N_1} = 3;$$

$$\Rightarrow \quad B_1^{-1}b = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad c_{B_1}^T B_1^{-1} b = (1,2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = (3)$$

$$\Rightarrow \quad B_1^{-1}A=\begin{pmatrix}0&1\\-1&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&-1&0\\1&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&2\end{pmatrix},$$

$$\Rightarrow \quad c_{B_1}^T B_1^{-1}A-c^T=(1,2)\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&2\end{pmatrix}-(1,2,3)=(0,0,2).$$

$$T(B)=\begin{pmatrix}c_B^T B^{-1}b & c_B^T B^{-1}A-c^T\\ B^{-1}b & B^{-1}A\end{pmatrix}$$

$$=(b_{ij})=\left[\begin{array}{c|cccc} b_{00} & b_{01} & b_{02} & \cdots & b_{0n}\\ \hline b_{10} & b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n}\\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ b_{m0} & b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mn}\end{array}\right]$$

因此对于基B_1的单纯形表$T(B_1)$如下:

S表目标函数		x_1	x_2	x_3
S	3	0	0	2
x_1	1	1	0	1
x_2	1	0	1	2

对应于B_1的基本解及相应的目标函数值为:

x_1=1, x_2=1, x_3=0; S =3.

说明: (1) 因基变量值非负, 所以上述解是基本可行解.

(2) 由表可写出用非基变量x_3表示 S 和 用 x_3 表示基变量.

$$S=3-2x_3,\ x_1=1-x_3,\ x_1=1-2x_3$$

类似, 得表$T(B_2)$:

		x_1	x_2	x_3
S	2	0	–1	0
x_1	1/2	1	-1/2	0
x_3	1/2	0	1/2	1

说明: 因基变量值非负,检验数非正, 所以上述解是最优解

$(x_1, x_2, x_3) = (1/2, 0, 1/2)$, $S = 2$.

$T(B_3)$:

		x_1	x_2	x_3
S	1	–2	0	0
x_2	–1	–2	1	0
x_3	1	1	0	1

说明: 因基变量有负值-1, 所以上述基本解不是可行解.

二、换基迭代

由运算可知, 如果已知线性规划问题的一个可行基B, 我们可求得对应于基B的单纯形表, 表中

第一列就是目标函数值和基本解中基变量的值;

第一行中的第二个数起是检验数, 可用以判定基B对应的基本可行解得否为最优解. 若

(1) 所有检验数皆非正, 则判定基B是最优基, 取最优解, 求解终止.

(2) 有某些检验数是正的, 此时就要进行换基迭代.

所谓换基迭代就是从一个基本可行解迭代到一个新的基本可行解的方法.

一般地, 如果对应于可行基的单纯形表(如下表)的检验数出现正数, 这时就不能判定B是否为最优基, 因而要进行换基迭代.

		x_1	x_2	$\cdots$	x_j	$\cdots$	x_s	$\cdots$	x_n
S	b_{00}	b_{01}	b_{02}	$\cdots$	b_{0j}	$\cdots$	b_{0s}	$\cdots$	b_{0n}
x_{j1}	b_{10}	b_{11}	b_{12}	$\cdots$	b_{1j}	$\cdots$	b_{1s}	$\cdots$	b_{1n}
x_{j2}	b_{20}	b_{21}	b_{22}	$\cdots$	b_{2j}	$\cdots$	b_{2s}	$\cdots$	b_{2n}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$
x_{ji}	b_{i0}	b_{i1}	b_{i2}	$\cdots$	b_{ij}	$\cdots$	b_{is}	$\cdots$	b_{in}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$
x_{jr}	b_{r0}	b_{r1}	b_{r2}	$\cdots$	b_{rj}	$\cdots$	$\boxed{b_{rs}}$	$\cdots$	b_{rn}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$
x_{jm}	b_{jm}	b_{m1}	b_{m2}	$\cdots$	b_{mj}	$\cdots$	b_{ms}	$\cdots$	b_{mn}

换基迭代的步骤:

(1) 求轴心项: 在所有的检验数 $b_{0j}>0$ 中, 选最左边的一个, 设为 b_{0s} , 其对应的非基变量设为 x_s , 对应于向量

$$P_s=(b_{1s},b_{2s},\cdots b_{is}\cdots b_{is}\cdots b_{rs}\cdots b_{ms})^T$$

用P_S中正的各分量 b_{is} 分别去除对应的b_{i0}, 取b_{i0}/b_{is}中最小者(若同时有几个相同的最小者, 则取其中对应的基变量下标最小者), 设为b_{r0}/b_{rs}, 则称 b_{rs}为轴心项, 并将b_{rs}用□框住.

(2) 在基B中, 调进P_S (称为进基列), 换出P_r (称为出基列), x_s 称为进基变量, x_r 称为出基变量, 得新基

$$\overline{B}=(P_{j2}P_{j2}\cdots P_{jr-1}P_sP_{jr+1}\cdots P_{jm}).$$

(3) 对基B的单纯形表, 进行适当的变换, 使P_S各量变为单位向量(分量b_{rs}取1, 其他分量取0), 便得新基 $\overline{B}$ 的单纯形表.

为使新表中 $b_{rs}=1$, 用原表中 b_{rs}去除第 r 行各数, 得新表第 r 行的数, 即

$$\overline{b}_{rj}=\frac{b_{rj}}{b_{rs}} \qquad (0 \leqslant j \leqslant n).$$

为使新表中$b_{is}=0$（ $0 \leq i \neq r \leq m$）, 将在原表中第 i 行各数减去第 r 行相应数的b_{rj}/b_{rs},倍, 得新表第 i 行的数, 即

$$\overline{b}_{ij}=b_{ij}-b_{is}\frac{b_{rj}}{b_{rs}}\begin{pmatrix}0 \leqslant i \neq r \leqslant m\\ 0 \leqslant j \leqslant n\end{pmatrix}.$$

三、由一可行基开始, 求解线性规划的步骤

已知一可行基 $B=(P_{j1}p_{j2}\cdots p_{jm})$

1) 作对应于基B 的单纯形表 $T(B)$

$$T(B)=\begin{pmatrix} c_B^T B^{-1}b & c_B^T B^{-1}A-c \\ B^{-1}b & B^{-1}A \end{pmatrix}$$

$$=\left(\begin{array}{c|cccc} b_{00} & b_{01} & b_{02} & \cdots & b_{0n} \\ \hline b_{10} & b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{20} & b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{m0} & b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mn} \end{array}\right)$$

2） 判别

1. 如果所有检验数都非正, 则基B对应的基本可行解为最优解.

2. 如果检验数中，有些为正数，但其中某正数所对应的列向量的所有分量都是非正数，则问题无最优解.

3. 如果检验数中，有些为正数，且这些正数的对应的列向量中都有正分量，此时要进行换基迭代.

3）换基迭代

注: 1. 若基B为单位矩阵 I, 则

$$T(B)=\begin{bmatrix} c_B^T b & c_B^T A-c \\ b & A \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \min f(x)=c^T x; \\ s.t.\ \ Ax=b, \\ \quad x\geqslant 0. \end{cases}$$

2. 若$B=I$, 且 $c_B{}^T=0$ （如所有的基变量均为松驰变量），则

$$T(B)=\begin{bmatrix} 0 & -c \\ b & A \end{bmatrix}$$

例2 用单纯形法求解下列线性规划

$$\begin{cases} \max f(\boldsymbol{x}) = 2x_1 + 5x_2 \\ s.t.\ \ x_1 \leqslant 4, \\ \quad x_2 \leqslant 3, \\ \quad x_1 + 2x_2 \leqslant 8, \\ \quad x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0. \end{cases}$$

解 引进松驰变量, 变化为标准形.

$$\begin{cases} \min \boldsymbol{s}' = -f(\boldsymbol{x}) = -2x_1 - 5x_2 + 0x_3 + 0x_4 + 0x_5 \\ s.t.\ \ x_1 + x_3 = 4, \\ \quad x_2 + x_4 = 3, \\ \quad x_1 + 2x_2 + x_5 = 8, \\ \quad x_1, x_2, \cdots, x_5 \geqslant 0. \end{cases}$$

此时

$$-c^T = (2,5,0,0,0)\ , \qquad b^T = (4,3,8)$$

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0&1&0&0\\0&1&0&1&0\\1&2&0&0&1\end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_1=\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_2=\begin{pmatrix}0\\1\\2\end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_3=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_4=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_5=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

(1) 取基 $\boldsymbol{B}$为单位矩阵 $(\boldsymbol{P}_3, \boldsymbol{P}_4, \boldsymbol{P}_5)$
得单纯形表

$$T(B)=\begin{bmatrix}0 & -c\\ b & A\end{bmatrix}$$

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	0	2	5	0	0	0
x_3	4	1	0	1	0	0
x_4	3	0	1	0	1	0
x_5	8	1	2	0	0	1

(2) 判别数有正数, 正数中最左边的为 2.

(3) 因 Min{4/1,8/1}=4, 所以1为轴心项 .

(4) 在基B_1中调进P_1, 换出P_3, 得新基 (P_1 , P_4 , P_5)得单纯形表

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	–8	0	5	–2	0	0
x_1	4	1	0	1	0	0
x_4	3	0	1	0	1	0
x_5	4	0	2	–1	0	1

(5) 判别数有正数5.

(6) 因 Min{3/1,4/2}=2, 所以2为轴心项 .

重复上面换基迭代步骤可得对应于新基的单纯形表

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	–18	0	0	1/2	0	-5/2
x_1	4	1	0	1	0	0
x_4	1	0	0	1/2	1	-1/2
x_2	2	0	1	-1/2	0	1/2

检验数有正数1/2, 作换基迭代步骤, 得新的单纯形表

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	–19	0	0	0	–1	–2
x_1	2	1	0	0	–2	1
x_3	2	0	0	1	2	–1
x_2	3	0	1	0	1	0

检验数全部小于等于零, 得最优解为

$$x_1 = 2, x_2 = 3, x_3 = 2, x_4 = 0, x_5 = 0. \quad S' = -19$$

Zhangxiaowei@uestc.edu.cn

去掉松驰变量的值, 即得原问题的最优解为: $x_1=2, x_2=3$

相应的原问题的目标函数最大值为: $f(2,3)=19.$

例3 求解线性规划

$$\begin{cases} \min f(\boldsymbol{x}) = -x_1 - 2x_2; \\ s.t.\ \ x_1 + x_3 = 4, \\ \quad x_2 + x_4 = 3, \\ \quad x_1 + 2x_2 + x_5 = 8, \\ \quad x_1, x_2, \cdots, x_5 \geqslant 0. \end{cases}$$

解 此时

$$-c^T = (1,2,0,0,0)\ , \qquad b^T = (4,3,8)$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, P_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

(1) 同上例一样, 取基 B 为单位矩阵 (P_3, P_4, P_5) 得单纯形表:

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	0	1	2	0	0	0
x_3	4	1	0	1	0	0
x_4	3	0	1	0	1	0
x_5	8	1	2	0	0	1

换基迭代后, 得新基 (P_1, P_4, P_5)的单纯形表:

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	–4	0	2	–1	0	0
x_1	4	1	0	0	0	0
x_4	3	0	1	0	1	0
x_5	4	0	2	–1	0	1

换基迭代后, 得新基 (P_1, P_4, P_2)的单纯形表:

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	–8	0	0	0	0	–1
x_1	4	1	0	1	0	0
x_4	1	0	1	1/2	1	-1/2
x_2	2	0	1	-1/2	0	1/2

检验数全部小于等于零, 得最优解为:

$$(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = (4,2,0,1,0),\ S_{\min} = -8$$

值得指出的是: 在上表中除基变量 x_1, x_2, x_4 对应的检验数为零外, 非基变量 x_3 对应的检验数也为零, 可以把 x_3 对应列中 $b_{23} = ½$ 作轴心项. 在最优基 (P_1, P_4, P_2) 中调进 P_3, 调出 P_4 进行换基迭代, 得新的最优基 (P_1, P_3, P_2) 对应的单纯形表:

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	–8	0	0	0	0	–1
x_1	2	1	-2	0	–2	1
x_3	2	0	2	1	2	-1
x_2	3	0	1	0	1	–1

因表中的检验数全非负, 所以(P_1 , P_3 , P_2)也为最优基, 对应的基本最优解为:

$$x_1 = 2, x_2 = 3, x_3 = 2, x_4 = 0, x_5 = 0.$$

所以, 原问题的又一基本最优解为: x_1=2, x_2=3; 对应的目标函数最小值为: f(2,3)= -8.

综上, 得两个最优解: $x_1^* = (4,2)$, $x_2^* = (2,3)$. 它们是可行集凸集的两个顶点, 故这两个顶点的连线上的所有点都是该线性规划的最优解—最优解有无穷多个, 其表达式为

$$x = ax_1^* + (1-a)x_2^*.$$

结论: 线性规划问题的最优基对应的单纯形表中, 若非基 变量对应的检验数都是负数, 其基本最优解是唯一的; 若非基变量对应的检验数中有零, 这一问题的基本最优解可能不止一个, 一旦求得另一个最优解, 就可得到无穷多个最优解.

例4 求解

$$\begin{cases} \min f(\boldsymbol{x}) = -2x_1 - 5x_2; \\ s.t. \quad -x_1 + x_3 = 4, \\ \quad x_2 + x_4 = 3, \\ \quad -x_1 + 2x_2 + x_5 = 8, \\ \quad x_1, x_2, \cdots, x_5 \geqslant 0. \end{cases}$$

解

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

取基 $\boldsymbol{B}$ 为单位矩阵 $(\boldsymbol{P}_3, \boldsymbol{P}_4, \boldsymbol{P}_5)$ 得单纯形表:

		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
S'	0	2	5	0	0	0
x_3	4	–1	0	1	0	0
x_4	3	0	1	0	1	0
x_5	8	–1	0	0	0	1

因检验数 2>0, 其对应的列向量

$$P' = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \leqslant 0$$

所以原规划无最优解.

注：为避免迭代中的循环，轴心基的选取应遵循以下两条原则：

1) 对进基列P_s

在所有判别数为正的那些列中，以列标最小，也就是最左边的那一列作进基列.

2) 对轴心项

若在进基列P_s中有多个分量符合轴心项的条件，则取行标最小的那一个作为轴心项.

§3.7 一维搜索法

一、下降迭代算法及终止准则

问题为: $$\min_{x\in R^n} f(x). \qquad (*)$$

下降迭代算法的基本思想: 选择的一个初始点 x^0，逐次产生一系列点列 $x^0, x^1, x^2, \ldots$，使

$$f(x^0) > f(x^1) > \ldots > f(x^k) > \ldots$$

并希望点列 $\{x^k\}$ 的极限就是 $f(x)$ 的极小点 x^*。即

$$\lim_{k\to\infty} x^k = x^* \quad \Longleftrightarrow \quad \lim_{k\to\infty} \|x^k - x^*\| = 0$$

基本步骤

(1) 选初始点 $\mathbf{x}^0$ ， 令 $k = 0$。

(2) 按某种规则确定一个方向$\mathbf{p}^k$， 使 $f(\mathbf{x})$ 沿 $\mathbf{p}^k$ 方向函数值下降（称为搜索方向）。

（3）从$\mathbf{x}^k$ 出发以 $\mathbf{p}^k$ 为方向作射线 $\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{p}^k$ （$\alpha \geq 0$），（参数 α 称为步长因子）。在此射线上求 $f(\mathbf{x})$ 的最小值。即求

$$\min_{\alpha \geq 0} f(\mathbf{x}^k + a\mathbf{d}^k) = f(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k) = f(\mathbf{x}^{k+1})$$

其中 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k$

(4) 判别 $\mathbf{x}^{k+1}$ 是否为最优解；若

$$\left\| \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) \right\| < \varepsilon_1 \quad \text{或} \quad \left| f(\mathbf{x}^{k+1}) - f(\mathbf{x}^{k}) \right| < \varepsilon_1 \qquad (*)$$

则 $\mathbf{x}^{k+1}$ 为近似最优解，迭代停止；否则令 $k := k+1$，转（2）。其中 ε_1 为预先给定的一个很小的正数, $\nabla f(\mathbf{x}^{k+1})$ 为函数在点 $\mathbf{x}^{k+1}$ 的梯度 .

说明：（*）式称为终止准则，终止准则也可用下式

$$\frac{\left| f^{k+1} - f^{k} \right|}{\left| f^{k} \right|} < \varepsilon_1 \quad \text{或} \quad \frac{\left\| x^{k+1} - x^{k} \right\|}{\left\| x^{k} \right\|} < \varepsilon_1$$

二、黄金分割法(0.618法)

0.618 法是求单峰函数的一种试探法，也是广泛使用的方法之一。

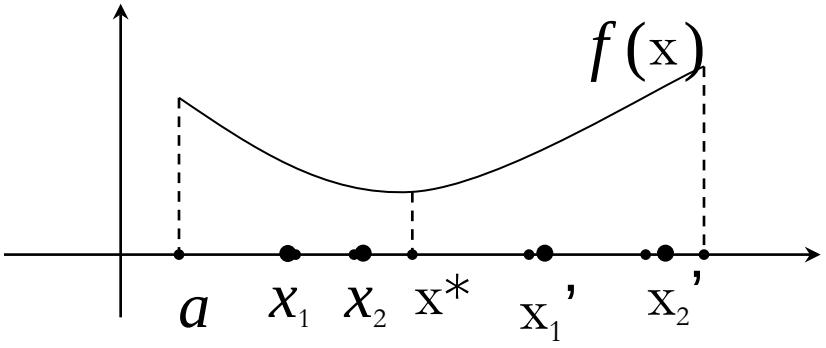
1. 单峰函数

定义 设 $f(x)$ 是定义在$[a,b]$上的函数，若

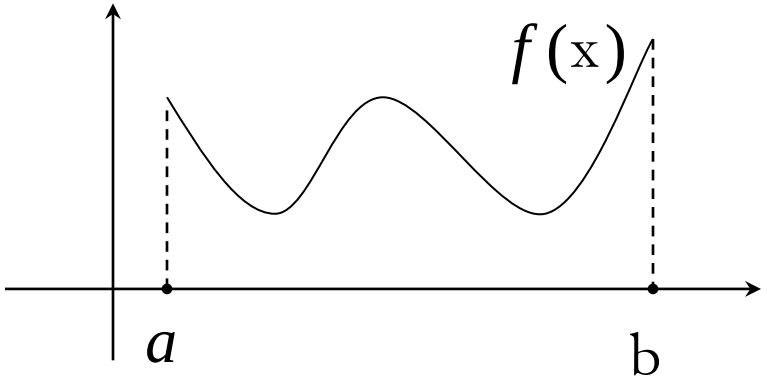
（i） 存在 $x^* \in [a, b]$ 使 $\min\limits_{x\in[a,b]} f(x) = f(x^*)$

（ii） 对任意的 $a \le x_1 < x_2 \le b$，当 $x_2 < x^*$ 时， $f(x_1) > f(x_2)$ 当 $x_1 > x^*$ 时 $f(x_1) < f(x_2)$，则称 $f(x)$ 为 $[a, b]$ 上的单峰函数。

例如：



单峰函数



不是单峰函数

2. 黄金分割法

基本思想：在搜索区间 $[a,b]$ 内适当插入两点t_1和t_2将其分成三段，通过比较这两点的函数值后，由单峰函数的性质，可删去最左或最右端的一段，这算一次迭代. 然后在留下来的区间上再插入一点，重复上述过程，如此下去，可将区间无限缩小.

说明：(1) 黄金分割法中参数0.618是由对称原则和等比收缩原则导出的，其中

对称原则是指选点 x_1 和 x_2，使

$[a,x_1]$的长 $=[x_2,b]$的长

即使：$x_1-a = b-x_2 \quad \Rightarrow \quad x_2 = a+b-x_1$ （或$x_1 = a+b-x_2$）

即“加两头减中间”。

等比收缩原则是指每次留下的区间长是上次留下的ω倍（ω即为0.618）且 x_1 或 x_2 是下次搜索的一个分点.

(2) 由等比收缩原则可得 $x_1 - a = l_0(1-\omega)$, l_0为[a,b]的长. 再由“加两头减中间”可得两分点与端点间的关系式:

$$\begin{cases} x_1 = a + (1-\omega)\, l_0 = a + (1-\omega)\,(b-a) \\ x_2 = a + b - x_1 = a + \omega(b-a) \\ \omega = 0.618 \end{cases}$$

算法 (0.618法) 已知目标函数 $f(x)$，精度ε。

(1) 确定 $f(x)$ 的搜索区间 $[a, b]$ — 利用前一算法。

(2) 计算 $x_2 = a + 0.618(b - a)$，$y_2 = f(x_2)$。

(3) 计算 $x_1 = a + b - x_2$，$y_1 = f(x_1)$。

(4) 若 $|x_1 - x_2| < \varepsilon$，则停。取 $x^* = \dfrac{x_1 + x_2}{2}$;否则转 5)。

(5) 若$y_1 \le y_2$，则置 $b := x_2$，$x_2 := x_1$，$y_2 := y_1$ 转3）；否则置 $a := x_1$，$x_1 := x_2$，计算 $x_2 = a + b - x_1$，$y_2 = f(x_2)$，转4）。

§3.8 无约束最优化方法

一、最速下降法

1. 最速下降方向

该方法在每次迭代中沿最速下降方向进行搜索。那么什么方向是函数，$f(x)$ 在点$x \in R^n$ 处的最速下降方向呢？

分析：设 $f(x)$ 在x 处可微，由台劳公式有

$$f(x+\delta)=f(x)+\delta^T g(x)+o(\|\delta\|)$$

其中 $g(x) = \nabla f(x) \neq 0$， $\delta = (\delta_1, \delta_2, \ldots, \delta_n)^T$,

$\|\delta\| = \sqrt{\delta_1^2 + \delta_2^2 + \ldots + \delta_n^2}$ ，$o(\|\delta\|)$ 表示当 $\delta \to 0$ 时， $o(\|\delta\|)$是比 $\|\delta\|$ 高阶的无穷小。若忽略高阶无穷小, 上式等价于

$$f(x+\delta) - f(x) = \delta^T g(x)$$

再对上式右边用Cauchy不等式可得

$$\delta^T g(x) \geq -\|\delta\| \|g(x)\|$$

当且仅当 $\delta = -\dfrac{g(x)}{\|g(x)\|}$ 时上式取等号。于是

$$f(x+\delta)-f(x)\geq -\|\delta\|\,\|g(x)\|$$

当且仅当 $\delta=-\dfrac{g(x)}{\|g(x)\|}$ 时上式取等号。

可见当δ取负梯度方向时，$f(x+\delta)$ 下降最快。这个方向称为最速下降方向。

2. 最速下降法

问题：$\min f(x)$，$x\in R^n$，本节的优化问题均作此假定。

计算步骤

1）取初始点 $x^0 \in R^n$，精度$\varepsilon>0$，令 $k := 0$。

2）计算 $\mathbf{d}^k = -\nabla f(\mathbf{x}^k)$，若满足终止准则 (比如 $\|\mathbf{d}^k\| \le \varepsilon$) 则停，　$x^* = x^k$；　否则转3）。

3）线性搜索：$\min\limits_{\lambda \ge 0} f(\mathbf{x}^k + \lambda \mathbf{d}^k) = f(\mathbf{x}^k + \lambda_k \mathbf{d}^k)$。令

$$x^{k+1} = \mathbf{x}^k + \lambda_k \mathbf{d}^k, k := k+1，转 2）。$$

第四章　组合数学

贾宪 北宋数学家（约11世纪） 著有《黄帝九章细草》、《算法斠古集》斠 音“笑（“古算法导引”）都已失传。杨辉著《详解九章算法》（1261年）中曾引贾宪的“开方作法本源”图（即指数为正整数的二项式展开系数表，现称“杨辉三角形”）和“增乘开方法”（求高次幂的正根法）。前者比帕斯卡三角形早600年，后者比霍纳（William Geoge Horner，1786—1837）的方法（1819年）早770年。

莱布尼兹 1666年莱布尼兹所著《组合学论文》一书问世，这是组合数学的第一部专著。书中首次使用了组合论（Combinatorics）一词。

说组合数学年青是因为它的蓬勃发展则是在计算机问世和普遍应用之后。

由于组合数学涉及面广，内容庞杂，并且仍在很快地发展着，因而还没有一个统一而有效的理论体系。这与数学分析形成了对照。

组合数学经常使用的方法并不高深复杂。最主要的方法是计数时的合理分类和组合模型的转换。

但是，要学好组合数学并非易事，既需要一定的数学修养，也要进行相当的训练。

§4.1 排列与组合

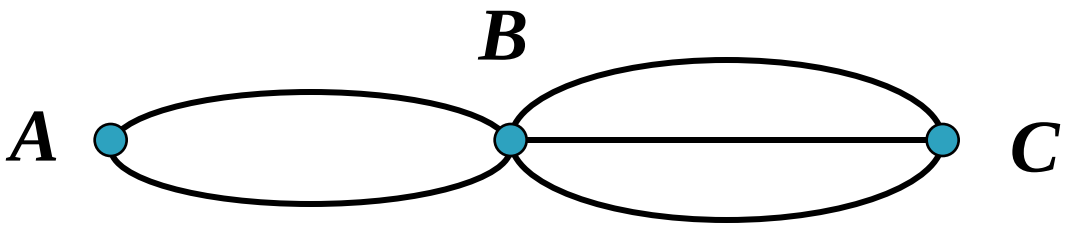
一．两个基本法则

加法法则：设 A, B 为两类不同的事件。若事件A 有 m 种不同的产生方式，事件B 有n 种不同的产生方式，则 “事件A 或事件B” 有 $m+n$ 种产生方式。

例如，小于10的正偶数有4个，小于10的正奇数有5个，则小于10的正整数有4+5 = 9个。

设 A, B 为两类不同的事件。若事件A有m 种不同的产生方式，事件 B 有n 种不同的产生方式，则 “事件A与事件B” 有 $m\,n$ 种产生方式。

例如，从 A 地到 B 地有两条不同的道路，从 B 地到 C 地有三条不同的道路，则从 A 经B 到C 的不同道路数有$2\times3=6$条。



例1　求能整除 360 的正整数的数目。

解　因 $360 = 2^3 \times 3^2 \times 5$，故能整除360的正整数应为

$$2^m \cdot 3^n \cdot 5^l$$

其中 $0 \le m \le 3$，$0 \le n \le 2$，$0 \le l \le 1$。由乘法法则可得，能整除360 的正整数个数为

$$N = 4 \times 3 \times 2 = 24$$

一般地，一个计数问题，若分类计算用加法；
若分阶段计算用乘法。

例1 求比10000小的正整数中含有数字1的数的个数。

解：所有由$\{0,2,3,4,5,6,7,8,9\}$9个数字组成的数的每一位都有9种出现方式，根据乘法法则，则9个数字组成的4位数个数等于$9\times9\times9\times9=81^4=6561$，其中0000不是正整数。故比10000小不含数字1的4位正整数个数等于6561-1=6560。

所以小于10000含有数字1的数的个数为9999-6560

=3439

二. 排列与组合

定义1　从 n 个不同元素中，取 r 个按次序排成一列，称为从 n 个不同元中取 r 个元的排列，其排列数记为 $P(n,r)$；若取出 r 个元而不考虑次序，则称从 n 个不同元中取 r 个元的组合，其组合数记为 $C(n, r)$ 或

$$\binom{n}{r}$$

规定：　$P(n, r) =$　$C(n, r) = \begin{cases} 1, n \geq r = 0 \\ 0, n < r \end{cases}$

从 n 个不同元中取 n 个的排列称为 n 的全排列，其排列数为 $n!$ 。

有下列排列与组合的计数公式：

1．$P(n,r) = n(n-1)\ldots(n-r+1) = \dfrac{n!}{(n-r)!}$

特别地，$P(n,n)=n!$

例2 由数字1, 2, 3, 4, 5可构成多少个各位数字互不相同且 1 不在首位的三位数?

解 由所给数字构成的各位数字互不相同的三位数相当于 5 个数字中取 3 个数字的一个排列，这样的三位数的个数为

$$P(5,3) = 5\times4\times3 = 60。$$

其中 1 在首位的三位数，相当于2, 3, 4, 5 的一个2 排列，再在首位添上1，其个数为 $P(4,2) = 4\times3 = 12$。

所以所求的三位数的个数为

$$P(5,3) - P(4,2) = 60-12 = 48$$

2. $C(n, r) = \dfrac{P(n,r)}{r!} = \dfrac{n!}{r!(n-r)!}$

3. n 个不同元允许重复地取 r 个元作排列，称为 n 元可重 r-排列，其排列数为 n^r。

例3 由数字1，2，3 可组成多少个两位数？并写出这些两位数。

解 这是一个三元可重2-排列问题，其排列数（即所求的两位数的个数）为 $3^2 = 9$。

这些两位数为

11，12，13，21，22，23，31，32，33

例2 将具有9个字母的单词FRAGMENTS进行排列，要求字母A总是紧跟在字母R的右边，问有多少种这样的排法？

解：A紧跟在字母R的右边，可以把这样的排列看作是8个元素的集合{F，RA，G，M，E，N，T，S}的全排列。所以个数为：P(8,8)=8!=40320。

考虑：1、当上例改为“A在R左边”；

2、当上例改为“A总是紧挨着R”时该怎样求解？

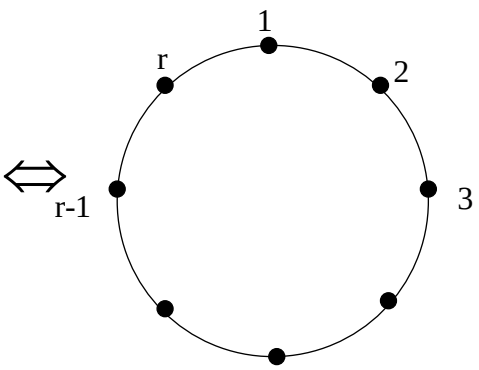
4. 从 n 个不同元中取 r 个元围成一圈, 称为从 n 个不同元中取 r 个元的圆排列, 其排列数记为 $K(n,r)$，有

$$K(n,r) = \frac{P(n,r)}{r}$$

理由：因 r 个不同的线排列（即一般的排列），如

$(1, 2,\ldots, r)$，$(2, 3,\ldots, r\text{-}1, r, 1)$,…, $(r, 1, 2,\ldots, r\text{-}1)$ 一一对应一个如下图的圆排列

$$\left.\begin{array}{l} 1,2,\cdots,r \\ 2,3,\cdots r,1 \\ \cdots\cdots \\ r,1,\cdots,r-1 \end{array}\right\} \Leftrightarrow$$



例4　4个女生4个男生围圆桌而坐，男女相间，试问有多少种不同的入座方式?

解 先让女生入座，这是4的圆排列问题, 有

$$K(4,4)=\frac{4!}{4}=3!$$

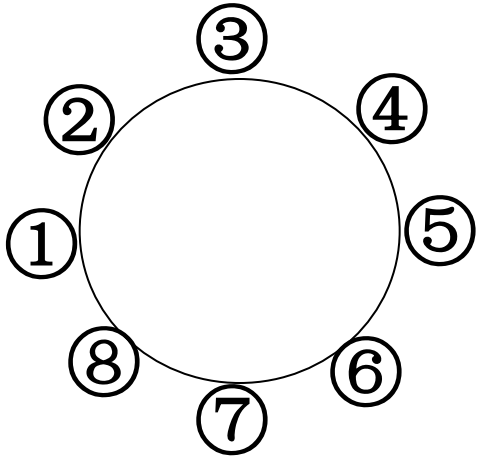
种入座方式。对每一种女生的入座方式，再让男生入座, 则第一个男生有四种选择方式；第一个男生选定后，第二个男生有3种选择方式。类推，……，第4个男生有一种入座方式。由乘法法则，得总入座方式数为

$$3!\times 4!=6\times 24=144$$

圆排列计数

从集合 $A=\{a_1,a_2,\cdots,a_n\}$ 的 n 个不同元素中取 r 个元素按一定次序排成一个圆圈，称为 n 元 r-圆排列。其排列数为$P(n, r)/r$, 即

$$\frac{P(n,r)}{r}=\frac{n!}{r(n-r)!}$$



例3. 八人就餐入座问题.

有8人围圆桌就餐，有多少种入座方式？

如果有两人不愿坐在一起，又有多少种入座方式？

解：由圆排列公式知，8人围圆桌就餐有8!/8=7!种就座方式。

若两人不愿坐在一起，考虑相反情况：

这两人坐在一起时，相当于7人围圆桌就餐，有7!/7=6! 种入座方式,

这两人在一起时又有两种方式,或者一人在左,或者另一人在左.所以两人在一起的就座方式有2×6!种.

因此，两人不在一起的入座方式有

$$8!/8 - 2\times 6! = 5\times(6!)$$

5．n_1个a_1，n_2个a_2，…，n_k个 a_k 的全排列的个数为

$$\frac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_k!} \qquad (1.1)$$

其中 $n = n_1 + n_2 + \ldots + n_k$。

例如，将两面红旗，三面蓝旗，四面黄旗插成一排有

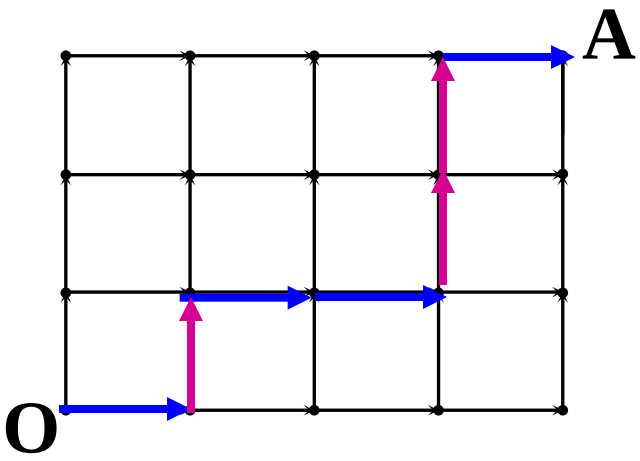
$$\frac{9!}{2!\times 3!\times 4!}$$ 种方式

问题5 若用集合描述为：重集

$$\{n_1\cdot a_1,\ n_2\cdot a_2,\ \ldots,\ n_k\cdot a_k\}$$

的全排列数为 (1.1)式。

例4 求图中从 0 点到 A 点的不同路径数。



解 一条从0到A的路径对应三个“↑”，四个“→”的一个全排列（如图中所示），且对应是一一的，所以从 0 到 A 的路径数为

$$\frac{(3+4)!}{3!\times 4!}=35$$

6. n 个不同元中允许重复地取 r 个元的组合，称为 n 元可重 r-组合，其组合数记为 $F(n, r)$。

或用集合描述为：重集

$$\{\infty \cdot a_1, \infty \cdot a_2, \ldots, \infty \cdot a_n\}$$

的 r-组合数为$F(n, r)$。

定理1 $F(n, r) = C(n+r-1, r)$，其中 n, r 均为正整数。

简证　设 $a_1, a_2, \ldots, a_r$ 是从1, 2,…, n 中任取的一个可重 r-组合，不妨设

$$1 \le a_1 \le a_2 \le \ldots \le a_r \le n \qquad (1.2)$$

$$\Rightarrow \quad 1 \le a_1 < a_2+1 < a_3+2 < \ldots < a_r+r-1 \le n+r-1 \qquad (1.3)$$

(1.2), (1.3) 式表明从 1,2,…, n 中取出的一个可重 r-组合对应于从 1,2,…, $n+r-1$ 中取出的一个不可重 r-组合。可证, 对应是一一的。所以 n 元可重r-组合数等于 $n+r-1$元的普通 r-组合数，即

$$F(n, r) = C(n+r-1, r)$$

例如， 从a, b, c三个字母中允许重复地取2个字母作组合，其组合数为

$$C(3+2-1, 2) = C(4, 2) = 6$$

这些组合为

$\{a,a\}$，$\{a,b\}$，$\{a,c\}$，$\{b,b\}$，$\{b,c\}$，$\{c,c\}$

例 5　食品店有三种月饼，第一种3个，第二、三种多于5个，如果一盒装6个（盒内无序）试问有多少种装法？

解　若第一种月饼也多于5个，则问题为3元6-组合问题。其组合数

$$N_1 = F(3, 6) = C(3+6-1, 6) = C(8, 6) = C(8, 2) = 28$$

设 N_2 代表第一种月饼至少装4个的三种月饼的装法数。这种装法可视为先在第一种月饼中取4个，再在三种月饼中可重复地取两个，故

$$N_2 = F(3, 2) = C(3+2-1，2) = C(4，2) = 6$$

$$\therefore \quad 所求数 = N_1 - N_2 = 28-6 = 22$$

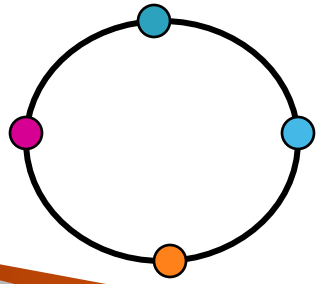
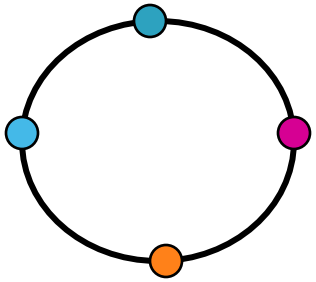
例6　由四种颜色的珠子各一个，可以做成多少种不同的 项链？

解 项链是由四种颜色的珠子排成一个圆圈而成，有

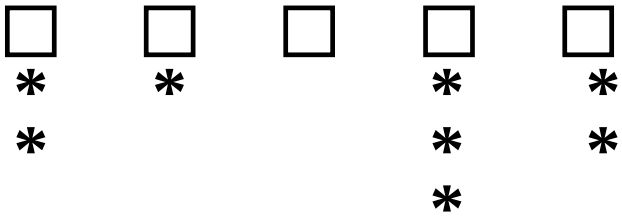
$$K(4,4)=\frac{4!}{4}=3!=6$$

种这样的排列。

而其中两个排列一一对应一种项链（能翻转重合的两个不同的圆排列，对应一种项链），故所求项链总数为3。

如  与  是同一种项链

例7　某售票处有5个售票窗口，现有8个人，他们排队购 票的方案有多少种？



解法1 第一个人有 5 种选择方案，即他可选 1 到 5 个窗口中的任一个。第二个人有 6 种选择方案，因当他选与第一个人相同的窗口时，还有在第一个人的前或后之分。类推第三个人有7种选择方案,……,第八个人有12种选择方案。由乘法法则，总方案数

$$N = 5 \times 6 \times \ldots \times 12$$

解法2　8个人排在5个售票窗口前的每一种排法，一一对应一个如下类型的线排列：

□*□□*□** □

其中4个“□”代表第一到第四号窗口，8个“*”代表8个不同的人。排列中在□左边的 * 表示排在该窗口前的人，最后一个□右边的 * 表示排在五号窗口前的人。

因4个相同的□，8个不同 * 的全排列数为

$$\frac{12!}{4!\times 1!\times\cdots\times 1!}=\frac{12!}{4!}=5\times 6\times\cdots\times 12$$

所以排队购票的方案有 5×6×…×12 种。

例8 （1）求下列方程组的整数解个数

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + \cdots + x_n = r \\ x_1, x_2, \cdots, x_n \geq 0 \end{cases}$$

（2） 1到10000中有多少个整数，其数字之和等于5？

解 （1） 方程组的任一解 $x_1 = k_1$，$x_2 = k_2$，…，$x_n = k_n$ 对应从 n 个不同字符 x_1，x_2，…，x_n 中允许重复的取 r个字符的组合 ($x_i = k_i$ 相当于 x_i 取 k_i 次)，且对应是一一的，所以方程组的整数解的个数为

$$F(n, r) = C(n+r-1, r)。$$

（2） 设所求整数为 $k_1k_2k_3k_4$，由题意此整数应满足

$$\begin{cases} k_1 + k_2 + k_3 + k_4 = 5 \\ 0 \le k_1, k_2, k_3, k_4 \le 9 \end{cases}$$

显然 k_i 不会大于5，故所求整数个数应是上面方程组的非负整数解的个数。由(1)可知，所求的整数个数为

$$F(4, 5) = C(4+5-1，5) = C(8，5) = 56$$

三. 一些组合恒等式

1. $C(n, r) = C(n, n- r)$

组合意义： 从n个不同元中取走r个元，余下n-r个元，故n个不同元中取r个元的组合与n个不同元中取n-r个元的组合一一对应，所以两者的组合数相等。

2． $C(n, r) = C(n-1, r-1)+C(n-1, r)$

组合意义：从 n 个不同元 $a_1, a_2,\ldots, a_n$中取 r 个元的全体组合可分为含 a_1 的（其个数为$C(n-1, r-1)$ 和不含 a_1 的（其个数为$C(n-1, r)$）,故等式成立。

反复用恒等式2，可将公式2推广为

$$C(n,r) = C(n-1, r-1)+C(n-2, r-1) +\ldots+ C(r-1,r-1) \quad (1.4)$$

--

例9 计算$1\times2+2\times3+\ldots+(n-1)\times n$

解　在 (1.4) 中取$r=3$，　$n=n+1$则有

$$C(2,2)+C(3,2)+\ldots+C(n,2)=C(n+1,3)$$

即

$$\frac{2\times1}{2!}+\frac{3\times2}{2!}+\ldots\frac{n(n-1)}{2!}=\frac{(n+1)n(n-1)}{3!}$$

同乘以2得

$$1\times2+2\times3+\ldots+(n-1)n=\frac{n(n-1)(n+1)}{3}$$

对二项式定理

$$(1+x)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^k \qquad (1.5)$$

令 x=1, -1 可得下面 3 和 4，其中 n 为正整数。

3. $$\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} = 2^n$$

4. $$\sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{n}{k} = 0$$

例5 数510510能被多少个不同的奇数整除？

解：由于$510510 = 2 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11 \cdot 13 \cdot 17$，所以在6个不相同的奇数任意取$k(k = 1,2,\cdots,6)$个的乘积，必能整除510510，而且这些乘积互不相同，它们的个数为：$\sum_{k=1}^{6} C(6,k) = \sum_{k=0}^{6} C(6,k) - 1 = 2^6 - 1 = 63$。

对（1.5）式作一些数学运算（如微分，积分，相乘等）再令 x 为一些特定值，还可得一系列组合恒等式，其中常用的有下面几个：

5. $$\sum_{k=1}^{n} k\binom{n}{k} = n \times 2^{n-1}$$

6. $$\sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k}\binom{n}{k} = \binom{m+n}{m}$$

7. $$\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k}^2 = \binom{2n}{n}$$

例10　有 n 个不同的整数，从中取出两组来，要求第一组里的最小数大于第二组的最大数，有多少种方案？

解　从 n 个不同整数中先取走 i 个，有 $\binom{n}{i}$

种方式，$i=2,\ldots,n$。

再将选定的 i 个整数依大小排列，不妨设为 $a_1, a_2,\ldots, a_i$。并将其分为两组

$\{a_1, a_2,\ldots, a_j\}$，$\{a_{j+1}, a_{j+2},\ldots, a_i\}$，$j=1,2,\ldots,i-1$，

则第一组里的最小数大于第二组的最大数。所以所求方案数为

$$\sum_{i=2}^{n}\binom{n}{i}(i-1)=\sum_{i=2}^{n}i\binom{n}{i}-\sum_{i=2}^{n}\binom{n}{i}$$

$$=\left[\sum_{i=1}^{n}i\binom{n}{i}-n\right]-\left[\sum_{i=0}^{n}\binom{n}{i}-1-n\right]$$

$$=(n2^{n-1}-n)-(2^{n}-1-n)=(n-2)2^{n-1}+1$$

其中用到恒等式 5 和 3。

§ 4.2 鸽笼原理与容斥原理

一、鸽笼原理

鸽笼原理又称抽屉原理，是组合数学的基本原理之一。这个原理是指：“有 $n+1$ 只鸽子飞进 n 个鸽子巢，则必有一个鸽子巢内至少装有两只鸽子”。

这是一个显而易见的道理，然而用它可导出一些并不显见的结论。鸽笼原理可用定理描述为

定理 将 $n+1$ 个物体放进 n 个盒子中，则必有一个盒子至少装两个物体。

例 1　一年365天，今有366人，则其中至少有两人生日相同。

例 2　某校有30个班，今有31个该校的在校生，则其中至少有两个在校生同班。

例 3　证明：在边长为 2 的正方形内任意放置 五 个点，则其中必有两点，其距离不超过 $\sqrt{2}$ 。

证明　将此正方形分为四个相等的小正方形，于是将五个点放入大正方形内等价于将五个点放入四个小正方形内，由鸽笼原理，至少有两个点位于同一个小正方形内，于是这两点的距离不会超过小正方形的对角线长 $\sqrt{2}$。

例 4 证明：对任意给定的 m 个整数$a_1, a_2,\ldots, a_m$，必存在k 和 l ($0\le k < l \le m$) 使得 $a_{k+1}+a_{k+2}+\ldots+ a_l$ 能被 m 整除。

证明 考虑

$$a_1,\ a_1+a_2,\ a_1+a_2+a_3,\ \ldots,\ a_1+a_2+\ldots+a_m$$

若这些和式中有一个能被 m 整除，则结论成立；

否则这 m 个和式被m 除后都有一个非零余数，即余数为 1,2,…,m-1 中的一个，由鸽笼原理，必有两个和式除以 m 的余数相同。设这两个和式分别为

$$a_1+a_2+\ldots+a_k \text{ 和 } a_1+a_2+\ldots+a_l,\quad k<l$$

其相同的余数为r，即

$$a_1+a_2+\ldots+a_k=am+r,\ a_1+a_2+\ldots+a_l=bm+r$$

其中a,b均为整数。相减得：

$$a_{k+1}+a_{k+2}+\ldots+a_l=(b-a)m$$

即 $a_{k+1}+a_{k+2}+\ldots+a_l$ 能被 m 整除。

二、 容斥原理

设 S 为全集，集合A 的补集记为 $\overline{A}$ ，易知集合有下列性质：

（1） $\left|\overline{A}\right| = \left|S\right| - \left|A\right|$ （2.5）

（2） $\overline{A \cup B} = \overline{A} \cap \overline{B}$ ，$\overline{A \cap B} = \overline{A} \cup \overline{B}$

一般地，

$$\overline{A_1 \cup A_2 \cup \cdots \cup A_n} = \overline{A_1} \cap \overline{A_2} \cap \cdots \cap \overline{A_n} \quad (2.6)$$

（3） $\left|A \cup B\right| = \left|A\right| + \left|B\right| - \left|A \cap B\right|$ (2.7)

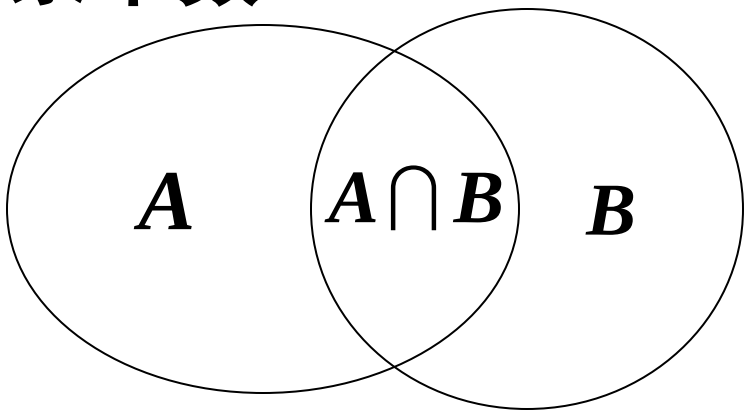
推广 (2.7）式，即可得到定理6（容斥原理）。

容斥原理——包容与排斥

最简单的计数问题是求有限集合A和B的并的元素数目。

$$|A \cup B| = |A| + |B| - |AB|$$

即具有性质A或B的元素的个数等于具有性质A和B的元素个数。



定理1 设$A_1, A_2, \ldots, A_m$均为有限集，$m \geq 2$，则

$$\left|A_1 \cup \cdots \cup A_m\right| = \sum_{i=1}^{m}\left|A_i\right| - \sum_{i=1}^{m}\sum_{j>i}\left|A_i \cap A_j\right|$$

$$+\sum_{i=1}^{m}\sum_{j>i}\sum_{k>j}\left|A_i \cap A_j \cap A_k\right| - \cdots + (-1)^{m-1}\left|A_1 \cap \cdots \cap A_m\right|$$

（2.8）

证明 对m 用归纳法。

m =2 即为(2.7)式。

设 $$\left|A_1 \cup A_2 \cup \cdots \cup A_{m-1}\right| = \sum_{i=1}^{m-1} |A_i| + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j>i} |A_i \cap A_j|$$

$$+ \cdots + (-1)^{m-2} \left|A_1 \cap \cdots \cap A_{m-1}\right| \qquad (2.9)$$

于是

$$\left|A_1 \cup \cdots \cup A_{m-1} \cup A_m\right| = \left|(A_1 \cup \cdots \cup A_{m-1}) \cup A_m\right|$$

$$= \left|A_1 \cup \cdots \cup A_{m-1}\right| + \left|A_m\right| - \left|(A_1 \cup \cdots \cup A_{m-1}) \cap A_m\right|$$

$$(2.10)$$

而

$$\left|(A_1 \cup A_2 \cup \cdots \cup A_{m-1}) \cap A_m\right| = \left|(A_1 \cap A_m) \cup \cdots \cup (A_{m-1} \cap A_m)\right|$$

$$= \sum_{i=1}^{m-1} \left|A_i \cap A_m\right| - \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j>i} \left|A_i \cap A_j \cap A_m\right| + \cdots$$

$$+ (-1)^{m-2} \left|A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_m\right| \qquad (2.11)$$

代（2.9）和 (2.11) 入（2.10），得

$$\left|A_1 \cup \cdots \cup A_m\right| = \sum_{i=1}^{m} \left|A_i\right| - \sum_{i=1}^{m} \sum_{j>i} \left|A_i \cap A_j\right| + \cdots$$

$$+ (-1)^{m-1} \left|A_1 \cap \cdots \cap A_m\right|$$

推论　设全集 S 为有限集，对集合 A_1，…，A_m 有

$$\left|\overline{A_1}\cap\overline{A_2}\cap\cdots\cap\overline{A_m}\right|=|S|-\sum_{i=1}^{m}|A_i|$$

$$+\sum_{i=1}^{m}\sum_{j>i}\left|A_i\cap A_j\right|-\cdots+(-1)^m\left|A_1\cap A_2\cap\cdots\cap A_m\right|$$

（2.12）

证明

$$\left|\overline{A_1}\cap\overline{A_2}\cap\cdots\cap\overline{A_m}\right|\overset{(2.6)}{=}\left|\overline{A_1\cup A_2\cup\cdots\cup A_m}\right|$$

$$\overset{(2.5)}{=}|S|-\left|A_1\cup\cdots\cup A_m\right|$$

再将 (2.8) 式代入上式便得(2.12) 式。

例4 求1到20的整数中, 2或3的倍数个数.

2的倍数有10个

2，4，6，8，10，12，14，16，18，20

3的倍数有6个

3，6，9，12，15， 18

答案：16 – 3 = 13

例5 求从1到500的整数中能被3或5除尽的数的个数。

解:令A为从1到500的整数中被3除尽的数的集合，B为被5除尽的数的集合

利用取整法求得整除数的个数

$$|A| = [\frac{500}{3}] = 166 \quad |B| = [\frac{500}{5}] = 100$$

$$|A \cap B| = [\frac{500}{15}] = 33$$

被3或5除尽的数的个数为

$$|A \cup B| = |A| + |B| - |A \cap B|$$

=166+100 – 33 =233

例 5　求1到1000的整数中，不能被5，6和8任一个整除的整数个数。

解　取全集$S=\{1,2,\ldots,1000\}$，令

$A_1=\{i \mid i\in S$且5 整除 $i\}$，$A_2=\{i \mid i\in S$ 且6 整除 $i\}$

$A_3=\{i \mid i\in S$ 且8 整除 $i\}$

于是有

$$|A_1|=\left\lfloor\frac{1000}{5}\right\rfloor=200,\quad |A_2|=\left\lfloor\frac{1000}{6}\right\rfloor=166,\quad |A_3|=\left\lfloor\frac{1000}{8}\right\rfloor=125$$

$$|A_1\cap A_2|=\left\lfloor\frac{1000}{5\times 6}\right\rfloor=33,\quad |A_1\cap A_3|=\left\lfloor\frac{1000}{5\times 8}\right\rfloor=25$$

$$|A_2 \cap A_3| = \left\lfloor \frac{1000}{\text{lcm}\{6,8\}} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{1000}{24} \right\rfloor = 41$$

其中符号 lcm{6，8} 表示 6 和 8 的最小公倍数。$\lfloor x \rfloor$ 表示非负实数 x 的整数部分。又

$$|A_1 \cap A_2 \cap A_3| = \left\lfloor \frac{1000}{\text{lcm}\{5,6,8\}} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{1000}{120} \right\rfloor = 8$$

于是

$$|\overline{A}_1 \cap \overline{A}_2 \cap \overline{A}_3| = |S| - |A_1 \cup A_2 \cup A_3|$$

$$= 1000-(200+166+125)+(33+25+41)-8 = 600$$

即 1 到 1000 的整数中，不能被5，6 和 8 任一个整除的整数有600个。

例：某软件公司的程序员都熟悉C++或VB，其中熟悉C++的共47人，熟悉VB的共35人，C++和VB都熟悉的共23人，问该公司共有多少程序员？

解：设A、B分别表示熟悉C++和VB的程序员集合，则该公司的程序员集合为A∪B，利用容斥原理得：

$$|A \cup B| = |A| + |B| - |A \cap B|$$

$$= 47 + 35 - 23 = 59$$

故该公司共有59名程序员。

例 6 设有2个红球, 3个白球, 4个蓝球和5个黑球, 同色球均相同, 求从这些球中取出10个球的组合数。

解 令 S 为从给定的四类球（假定都有足够多的数量）中取出10个球的组合所构成的集合，则

$$|S| = F(4,10) = C(4+10-1,10)$$

$$= C(13, 10) = C(13, 3) = 286$$

再令

$A = \{x \mid x \in S, x$中至少含有3个红球$\}$

$B = \{x \mid x \in S, x$中至少含有4个白球$\}$

$C = \{x \mid x \in S, x$中至少含有5个蓝球$\}$

$D = \{x \mid x \in S, x$中至少含有6个黑球$\}$

有

$$|A| = F(4, 7) = C(4+7-1, 7) = C(10, 7) = 120$$

$$|B| = F(4, 6) = C(4+6-1, 6) = C(9, 6) = 84$$

$$|C| = F(4, 5) = C(4+5-1, 5) = C(8, 5) = 56$$

$$|D| = F(4, 4) = C(4+4-1, 4) = C(7, 4) = 35$$

$$|A \cap B| = F(4, 3)) = C(6, 3) = 20$$

$$|A \cap C| = F(4, 2) = C(5, 2) = 10$$

$$|A \cap D| = |B \cap C| = F(4, 1) = C(4, 1) = 4$$

$$|B \cap D| = 1 \qquad |C \cap D| = 0$$

$$|A \cap B \cap C| = |A \cap B \cap D| = |A \cap C \cap D|$$
$$= |B \cap C \cap D| = |A \cap B \cap C \cap D| = 0$$

由容斥原理, 所求数为

$$\left|\overline{A}\cap\overline{B}\cap\overline{C}\cap\overline{D}\right| = |S| - |A\cup B\cup C\cup D|$$

$$= 286 - (120+84+56+35) + (20+10+4+4+1)$$

$$= 286-295+39 = 30$$

§4.3 有限制的排列

一、 错排问题

在一次宴会中，有n个人寄存他们的帽子，问有多少种返还帽子的方式，使没有一个人得到他自己的帽子。有n封信和n个写好地址的信封，问没有一封信装入它本身该装入的信封的装入方法有多少种。

以上问题都可归结为：求$1, 2, \ldots, n$的全排列，使所有的数均不在其自然位置上的排列个数，我们称这样的排列为n的错排，其错排数记为D_n。

定理2 对$n \geq 1$, 错排数

$$D_n = n!\left(1 - \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} - \frac{1}{3!} + \cdots + (-1)^n \frac{1}{n!}\right)$$

证明 取全集 S 为 $\{1, 2, \ldots, n\}$ 的全排列所成的集合。令A_i为 i 排在第 I 位的 $1, 2, \ldots, n$ 的全排列构成的集合，$i = 1, 2, \ldots, n$。有

$$|A_i| = (n-1)!, \quad |A_i \cap A_j| = (n-2)! \ (i \neq j), \ \ldots,$$

$$|A_1 \cap \cdots \cap A_{n-1}| = \ldots = |A_2 \cap \cdots \cap A_n| = 1!$$

$$|A_1 \cap \cdots \cap A_n| = 0! = 1$$

所以

$$D_n = \left|\overline{A_1} \cap \overline{A_2} \cap \cdots \cap \overline{A_n}\right| = |S| - |A_1 \cup \cdots \cup A_n|$$

$$= n! - \sum_{i=1}^{n} |A_i| + \sum_{i=1}^{n} \sum_{i>j} |A_i \cap A_j| \quad - \cdots + (-1)^n |A_1 \cap \cdots \cap A_n|$$

$$= n! - C(n,1)(n-1)! + C(n,2)(n-2)! - \cdots + (-1)^n C(n,n)0!$$

$$= n! - \frac{n!}{1!} + \frac{n(n-1)}{2!}(n-2)! + \cdots + (-1)^n \frac{n!}{n!}$$

$$= n!\left(1 - \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} - \frac{1}{3!} + \cdots + (-1)^n \frac{1}{n!}\right)$$

进一步

$$\frac{D_n}{n!} = 1 - \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} - \cdots + (-1)^n \frac{1}{n!} \quad \to \quad e^{-1} \quad (n \to \infty)$$

∴ ***n***充分大 (如 ***n*** >7) 时

$$\frac{D_n}{n!} \approx e^{-1}$$

例1 求 {1,2,…,8} 的全排列中奇数不排在原位的排列数目。

注：所求的排列数不是 D_4，因偶数的排法不定

解 分别令A_1，A_2，A_3，A_4，为1, 3, 5, 7排在原位的 {1,2,…,8} 的全排列的集合。则有

$$|A_i| = 7!\ , \qquad |A_1 \cap A_2| = \cdots = |A_3 \cap A_4| = 6!$$

$$|A_1 \cap A_2 \cap A_3| = |A_1 \cap A_2 \cap A_4| = |A_1 \cap A_3 \cap A_4| = |A_2 \cap A_3 \cap A_4| = 5!$$

$$|A_1 \cap A_2 \cap A_3 \cap A_4| = 4!$$

所求数 = $\left|\overline{A_1} \cap \overline{A_2} \cap \overline{A_3} \cap \overline{A_4}\right|$

$$= 8! - C(4,1)\,7! + C(4,2)\,6! - C(4,3)\,5! + C(4,4)\,4!$$

$$= 40320 - 20160 + 4320 - 480 + 24 = 24024$$

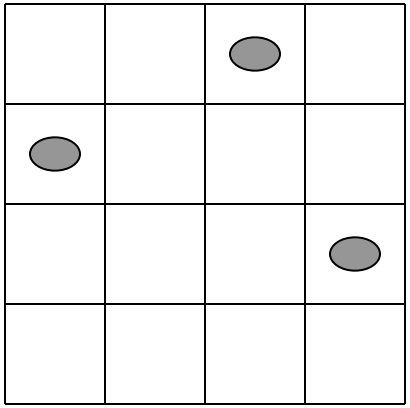
二、 有禁位的排列

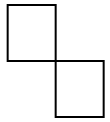
1．棋盘多项式

（1）棋子问题

对于给定的棋盘C（不一定标准）放入k个棋子，要求每个棋子只能放一格，且各子不同行不同列，记不同的放法数为$r_k(C)$，问$r_k(C)$ = ？此问题称为棋子问题。

例如， 3个棋子放入4×4棋盘的一种放法：



例3 设C_1 = □，C_2 = □□，C_3 = 

也记

有 $r_1(C_1)$ = r_1(□) = 1，r_1(□□) = 2，

$r_1(C_3)$ = 2； $r_2(C_1) = r_2(C_2) = 0$, $r_2(C_3)$ = 1 。

（2） 棋盘多项式

定义1 给定棋盘C，令 $r_0(C)$ =1，多项式

$$R(C) = \sum_{k=0}^{\infty} r_k(C)\, x^k$$

称为棋盘C的棋盘多项式。

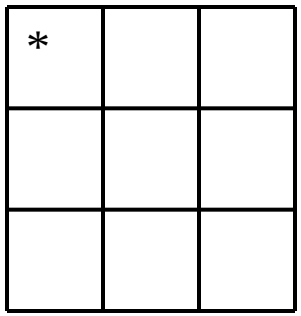
例如，对例3给出的棋盘C_1、C_2 和C_3

$R(\square)=1+x$，$R(C_2)=1+2x$，$R(C_3)=1+2x+x^2$。

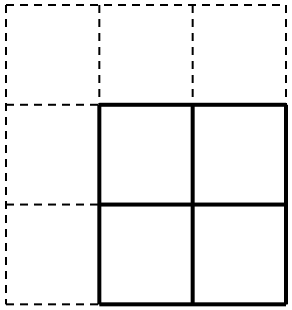
(3) 棋盘多项式的展开

给定棋盘C，指定C 中某格。令 C_i 为 C 中删去指定格所在行与列所剩的棋盘，C_e 为 C 中删去指定格所剩棋盘。

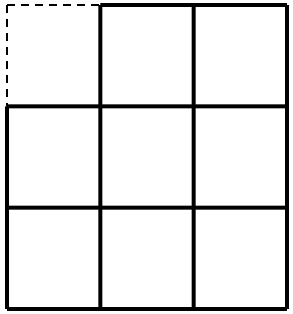
例:



C



C_i



C_e

给定棋盘C，将 k 个棋子放入C，其所有放法可按指定格有棋子与没有棋子分为两类。指定格有棋子的放法数为 $r_{k-1}(C_i)$，指定格没有棋子的放法数为 $r_k(C_e)$，因此有关系式

$$r_k(C)= r_{k-1}(C_i)+ r_k(C_e) \qquad (3.2)$$

定理3 给定棋盘C，在上述记号下，有

$$R(C)=xR(C_i)+R(C_e) \qquad (3.3)$$

证明 利用（3.2）式及棋盘多项式的定义

$$R(C)=\sum_{k=0}^{\infty} r_k(C)x^k$$

$$=1+\sum_{k=1}^{\infty}[r_{k-1}(C_i)+r_k(C_e)]x^k$$

$$=x\sum_{k=1}^{\infty} r_{k-1}(C_i)x^{k-1}+\sum_{k=0}^{\infty} r_k(C_e)x^k$$

$$=xR(C_i)+R(C_e)$$

例8 $R\left(\begin{array}{cc}\blacksquare & \\ \square & \square\end{array}\right) = x\,R\left(\begin{array}{c}\square\\ \square\end{array}\right) + R\left(\begin{array}{cc}* & \square\\ & \square\end{array}\right)$

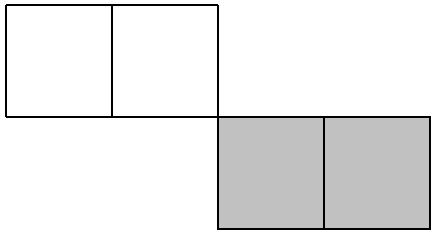
$$= x(1+2x) + xR(\square) + R\left(\begin{array}{c}\square\\ \square\end{array}\right)$$

$$= x(1+2x) + x(1+x) + (1+2x)$$

$$= 1+4x+3x^2$$

定义2 设 C_1 和 C_2 是两个棋盘，若 C_1 的所有格都不与 C_2 的所有格同行同列，则称这两个棋盘是独立的。

例 图中无阴影的棋盘与有阴影的棋盘是独立的。



定理 若棋盘C可分解为两个独立的棋盘C_1和C_2，则

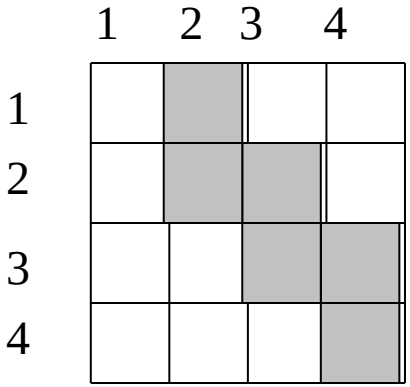
$$R(C)=R(C_1)R(C_2)$$

2．有禁位的排列

考虑1, 2,…, n 的全排列，使 i 不排在某些位（$i=1,2,\ldots,n$），称此类排列为n元有禁位的排列。

求此类排列的排列数的方法：先作一个$n\times n$ 棋盘C；再对每一个 i，若 i 不排在第 j 位，则将 C 中位于第 i 行第 j 列的小方格涂成阴影。对 i 的所有禁位都作如此处理。处理完毕后，称 C 中阴影部分为禁区棋盘。最后求出禁区棋盘的棋盘多项式，将相应数据代入下面定理中的公式即可求得排列数。定理中的公式可由容斥原理推得。

例如：“1不排在2；
2不排在2 和 3 ；
3不排在3和4；
4不排在4 ”的
禁区盘为：



定理4 n 元有禁位的排列数为

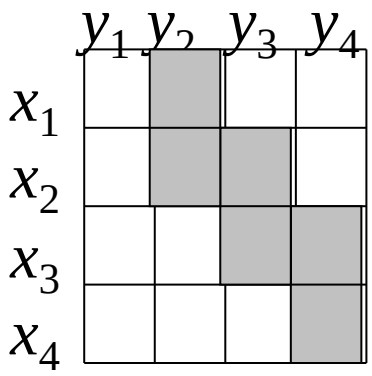
$$n!-r_1(n-1)!+r_2(n-2)!-\ldots+(-1)^n r_n$$

其中 r_i 为 i 个棋子放入禁区棋盘的方式数，$i=1,2,\ldots,n$。

例9 有 x_1, x_2, x_3, x_4 四位工人，y_1, y_2, y_3, y_4 四项工作，已知 x_1不 能从事工作 y_2； x_2 不能从事工作 y_2 和y_3 ； x_3 不能从事工作 y_3 和 y_4； x_4 不能从事工作 y_4, 若要求每人从事各自力所能及的一项工作，每项工作只能一人做，问有多少种安排方案？

解 该问题对应一个四元有禁位的排列问题（x_i不能从事 y_j 相当于 i 不排在第 j 位）。

由问题可得一个棋盘如下图所示。



设C为图中的禁区棋盘, 利用定理10中的公式可求得

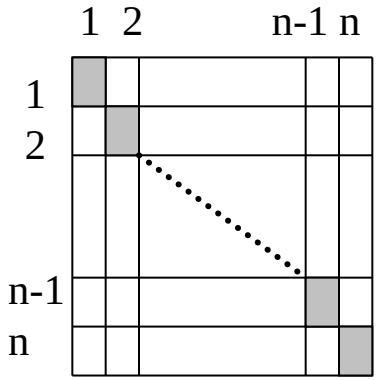
$$R(C)=1+6x+10x^2+4x^3$$

即 $r_1=6,\ r_2=10,\ r_3=4,\ r_4=0$ 。

由定理12可得安排方案数为

$$N=4!-6\cdot 3!+10\cdot 2!-4=4$$

例7 试解错排问题。



解 错排问题对应的棋盘如图所示。

对其中的禁区棋盘C，有

$$R(C)=(1+x)^n=1+C(n,1)x+\ldots+C(n,n)x^n$$

故 $r_1=C(n,1)$, $r_2=C(n,2)$,…, $r_n=C(n,n)$

所以方案数

$$D_n=n!-C(n,1)(n-1)!+C(n,2)(n-2)!-\ldots+(-1)^nC(n,n)0!$$

$$=n!-\frac{n!}{1!}+\frac{n!}{2!}-\cdots+(-1)^n\frac{n!}{n!}$$

$$=n!\left(1-\frac{1}{1!}+\frac{1}{2!}-\cdots+(-1)^n\frac{1}{n!}\right)$$

§4.4 母函数

一、 普通母函数

定义1 给定序列（$a_0, a_1, \ldots, a_n, \ldots$），记为$\{a_n\}$，函数

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots$$

称为该序列的普通母函数，简称母函数。

例1 (1) 常数列 (1, 1, …) 的母函数为

$$f(x)=1+x+x^2+\ldots=\frac{1}{1-x} \qquad (4.1)$$

(2) 序列 $\{C(n, i)\}$，$i = 0, 1, \ldots, n$ 的母合数为

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} C(n,i)x^i = (1+x)^n$$

例2 证明$\frac{1}{(1-x)^n}$是 n 元可重 i-组合数 $F(n,i)$ 的母函数，$i = 0,1, \ldots$。

证明 ∵ $\frac{1}{(1-x)^n} = (1-x)^{-n}$

$$= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-n)(-n-1)\cdots(-n-i+1)}{i!}(-x)^i$$

$$= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i n(n+1)\cdots(n+i-1)}{i!}(-1)^i x^i$$

$$= \sum_{i=0}^{\infty} \binom{n+i-1}{i} x^i = \sum_{i=0}^{\infty} F(n,i)x^i$$

∴ $\frac{1}{(1-x)^n}$ 是 $\{F(n,i)\}$ 的母函数。

下面我们从组合意义角度来构造一些组合问题的母函数。

由组合意义构造某组合问题的组合数 a_n 的母函数 $f(x)$ 的基本方法为：

用一个乘积因子 $(\ldots+x^n+\ldots)$ 来代表一个所选取的元素，若该元可重复选取 n 次，则因子中应出现 x^n。

例1 （1）n 个不同元的可重 r-组合数$F(n,r)$（$r = 0,1, \ldots$）的母函数为

$$f(x) = (1+x+x^2+\ldots)^n = \frac{1}{(1-x)^n}$$

（2）n 个不同元，每个元至少取一次的可重 r-组合数（$r = n, n+1, \ldots$）的母函数为

$$f(x) = (x+x^2+\ldots)^n = \frac{x^n}{(1-x)^n}$$

（3） 从 a, b 两个元中允许重复地取 r 个元，但要求含偶数个a ，奇数个b的组合数的母函数为

$$f(x) = (1 + x^2 + x^4 + \ldots)(x+ x^3+ x^5+ \ldots) = \frac{x}{(1-x^2)^2}$$

例 2　设有2个红球，3个白球，1个黑球和1个黄球。求从这些球中取出 5 个的不同方案数。

解　设从所给的球中取出 i 个的不同方案数为 a_i，则由题设可得数列 $\{a_i\}$ 的母函数为

$$f(x) = (1+x+x^2)(1+x+x^2+x^3)(1+x)^2$$

$$= 1+4x+8x^2+11x^3+11x^4+8x^5+4x^6+x^7$$

因展式中x^5 前的系数为 8，故从所给的球中取出5个的不同方案数为8。

例 3 求用1元和2元的钞票支付 n 元钱的不同方式数。

解 设所求方案数为a_n，则由题设可得数列 $\{a_n\}$的母函数

$$f(x) = (1+x+x^2+\ldots)[1+ x^2+(x^2)^2+(x^2)^3+ \ldots]$$

$$= \frac{1}{1-x} \bullet \frac{1}{1-x^2}$$

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

$$= \frac{1}{4}\left[\frac{2}{(1-x)^2}+\frac{1}{1-x}+\frac{1}{1+x}\right]$$

由例1得

$$\frac{1}{(1-x)^2}=\sum_{n=0}^{\infty}F(2,n)x^n=\sum_{n=0}^{\infty}C(2+n-1,n)x^n$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)x^n$$

于是

$$f(x)=\frac{1}{4}\left[2\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)x^n+\sum_{n=0}^{\infty}x^n+\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n x^n\right]$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+3+(-1)^n}{4}x^n$$

故

$$a_n=\frac{2n+3+(-1)^n}{4}$$

二、 指数型母函数

定义2 给定序列（$a_0, a_1, \ldots, a_n, \ldots$），记为$\{a_n\}$，函数

$$f_e(x) = a_0 + a_1 \frac{x}{1!} + a_2 \frac{x^2}{2!} + \ldots$$

称为该序列的指数型母函数，简称指数母函数。

例4 常数列（1,1,…）的指数母函数为

$$f_e(x) = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \ldots = e^x$$

例 5 从n 个不同元中取r 个的排列数 $P(n,r)$（$r=0,1,\ldots n$）的指数母函数为 $(1+x)^n$。

这是因为

$$(1+x)^n = \sum_{r=0}^{n} C(n,r)x^r = \sum_{r=0}^{n} p(n,r)\frac{x^r}{r!}$$

例 6 n 个不同元的可重 r-排列数 n^r（$r = 0,1,\ldots$）的指数母函数为

$$(1+\frac{x}{1!}+\frac{x^2}{2!}+\ldots)^n = e^{nx} = \sum_{r=0}^{\infty} n^r \frac{x^r}{r!}$$

例7　求由1,3,5,7,9五个数字组成的 n 位数的个数，但要求7, 9出现的次数为偶数。

解　设满足题设条件的 n 位数的个数为 a_n, 则由题设可得序列 $\{a_n\}$ 的指数母函数为

$$f_e(x)=\left(1+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^4}{4!}+\cdots\right)^2\left(1+\frac{x}{1!}+\frac{x^2}{2!}+\cdots\right)^3$$

$$\because\quad e^x=1+\frac{x}{1!}+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\cdots$$

$$e^{-x}=1-\frac{x}{1!}+\frac{x^2}{2!}-\frac{x^3}{3!}+\cdots$$

$$\therefore\quad \frac{e^x+e^{-x}}{2}=1+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^4}{4!}+\cdots$$

于是

$$f_e(x)=\left(\frac{e^x+e^{-x}}{2}\right)^2 e^{3x}=\frac{1}{4}(e^{5x}+2e^{3x}+e^x)$$

$$=\frac{1}{4}\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(5x)^n}{n!}+2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(3x)^n}{n!}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}\right]$$

$$=\frac{1}{4}\sum_{n=0}^{\infty}\left(5^n+2\bullet 3^n+1\right)\frac{x^n}{n!}$$

$$\therefore \quad a_n=\frac{1}{4}\left(5^n+2\bullet 3^n+1\right)$$

第五章　图论

图论简介

现实生活中许多问题都可归结为由点和线组成的图形的问题，例如，铁路交通图，公路交通图，市区交通图，自来水管网系统，甚至电路图在研究某些问题时也可简化为由点和线组成的图形。

图论就是研究这些由点和线组成的图形的问题

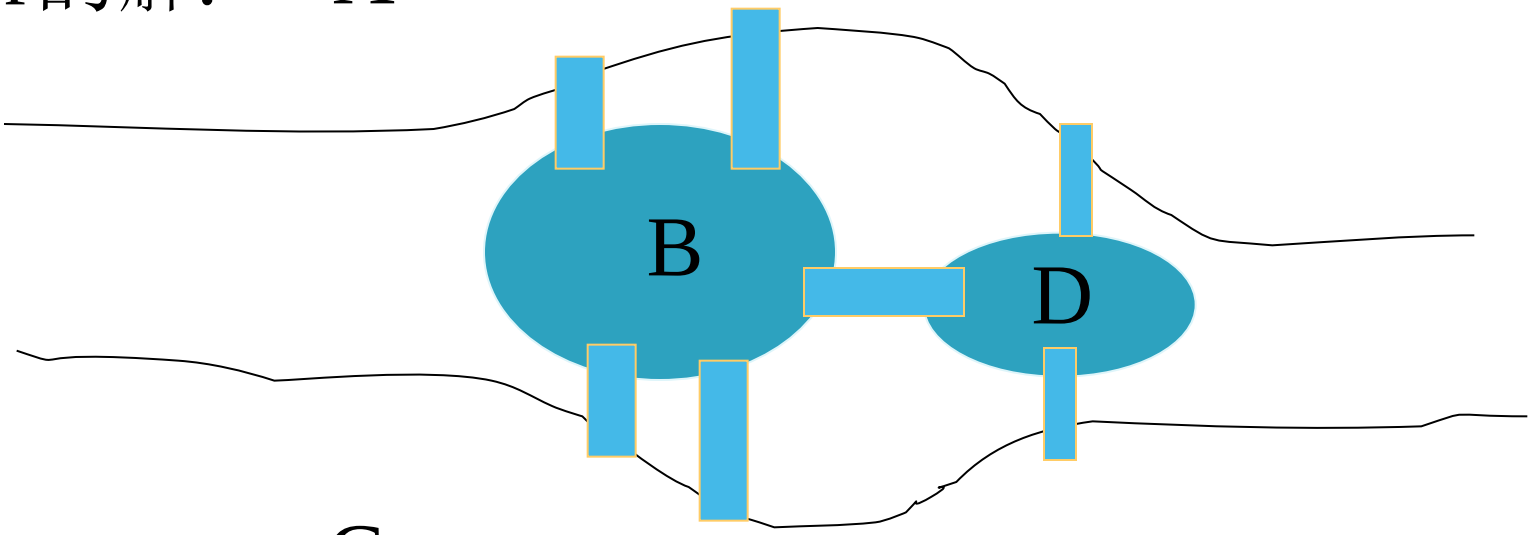
图论起源于18世纪，是一门较为年青的数学分支。但在历史上遗留了许多著名的图论问题，例如：

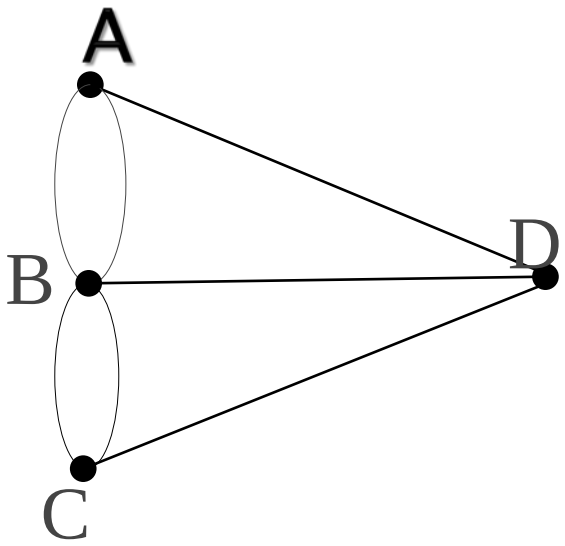
1.七桥问题

18世纪东普鲁士有一个城市称为个普尼斯堡，它位于普雷格尔河畔，河中有两个小岛，通过七座桥彼此相联（如图）。当时有人提出：

能否从某个地点出发经过每个桥一次且仅一次然后返回出发点？

Euler的解：





2. Hamilton 周游世界问题

1859年 Hamilton 提出这样一个问题：一个正十二面体有20个顶点，它们代表世界上20个重要城市。正十二面体的每个面均为五边形，若两个顶点之间有边相连，则表示相应的城市之间有航线相通。 Hamilton 提出“能否从某城市出发经过每个城市一次且仅一次然后返回出发点？”

3. 四色问题

1840年数学家茂比乌斯（Möbius）提出一个猜想：任何平面地图，总可以把它的一个国家用四种颜色的一种着染，使相邻国家着不同色。这就是著名的四色猜想。如：

1890年希五德（Heawood）指出“4换为5”猜想成立。

1976年两位数学家在三台百万次的电子计算机上花了1200小时证明了猜想成立。猜想成为定理。

4. 中国邮路问题

1962年中国数学家管梅谷提出：一个邮递员从邮局出发递送邮件，要求对他所负责的辖区的每条街至少走一次，问如何选取路程最短 的路线？这个问题称为中国邮路问题。

该问题可用专门的算法来求解。

图论的应用范围很广，它不但能应用于自然科学，也能应用于社会科学。它非但广泛应用于电信网络、电力网络、运输能力开关理论、编码理论、控制论、反馈理论、随机过程、可靠性理论、化学化合物的辨认、计算机的程序设计、故障诊断、人工智能、印刷电路板的设计、图案识别、地图着色、情报检索，也应用于语言学、社会结构、经济学、运筹学、遗传学等。

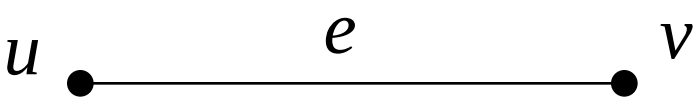
§5.1　图的概念

一．图的定义

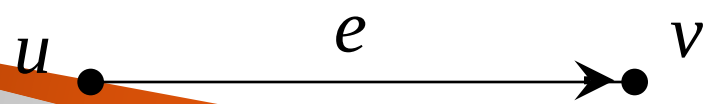
定义1 一个无向图 (有向图) G 是由一个称为点集的非空集合$V(G)$ 和一个称为边集的集合$E(G)$ 组成的有序对 $(V(G)\cap E(G)=\Phi)$，记为$G=(V(G),E(G))$，简记为$G=(V,E)$。其中V 中的元素称为点或顶点，E 中的元素称为无向边(有向边或弧)，并且 E 中的每个元素均与V中一对无序点对相对应（点对中的点允许相同）。

无向图简称为图; 不混淆时, 有向图也简称为图; 有向或无向边均可简称为边. 本章只讨论点集与边集均为有限集合的图。

若边 e 对应的无序点对为（u,v），则记 $e = uv$，其中点 u 与 v 均称为边 e 的端点。可用图形表示为：



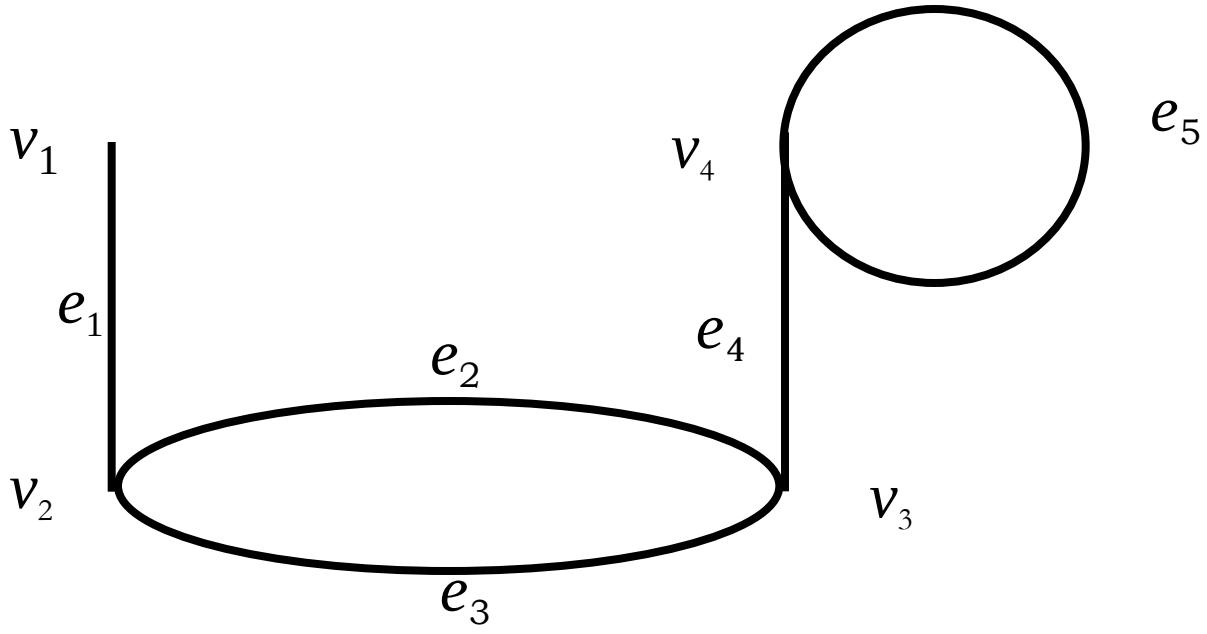
若有向边e 和有序点对 (u, v) (或 (u, v)) 相对应, 则记 $e = (u, v)$, 此时 u 称为 e 的始点或起点, v 称为 e 的终点. 若不分起始, u 与 v 均称为边 e 的端点. 有时为讨论方便, 也可直接称 (u, v) 为有向边.可用图形表示为：



例1 设$V=\{v_1,v_2,v_3,v_4\}$，$E=\{e_1,e_2,e_3,e_4,e_5\}$，满足

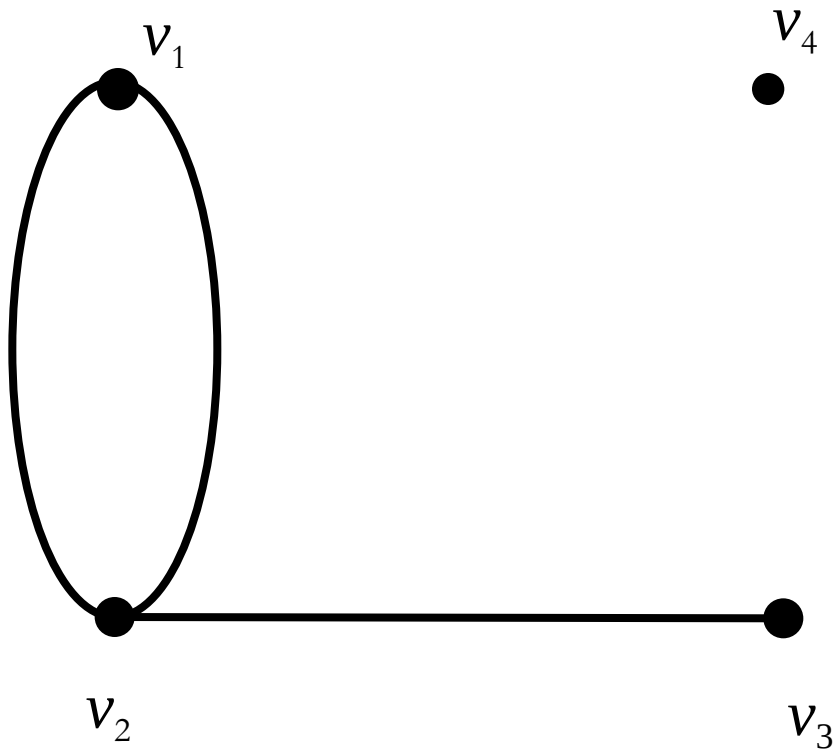
$e_1=v_1v_2$，$e_2=v_2v_3$，$e_3=v_2v_3$，$e_4=v_3v_4$，$e_5=v_4v_4$

则 $G=(V,E)$ 是一个图。



图中边集 E 的边也可直接由点对表示，而将 E 作为多重集（即允许 E 中有相同元素的集合）。

例2　设 $V=\{v_1, v_2, v_3, v_4\}$，$E=\{v_1v_2, v_1v_2, v_2v_3\}$，则 $H=(V,E)$ 是一个图。



图中，同一条边的两个端点称为相邻；若两条边有一个共同的端点，则这两条边也称为相邻； 若点u是边 e的端点，则称 u 与 e 相关联。

称两个端点相同的边为环，不与任何边相关联的点称为孤立点。若图中n条不同的边 $e_1, e_2,\ldots,$ e_n,（ $n\geq2$）中的每一条边的两个端点均为u和v，则这些边称为n重边，简称为 重边。不是重边的边称为单边。图中顶点的个数称为该图的阶。

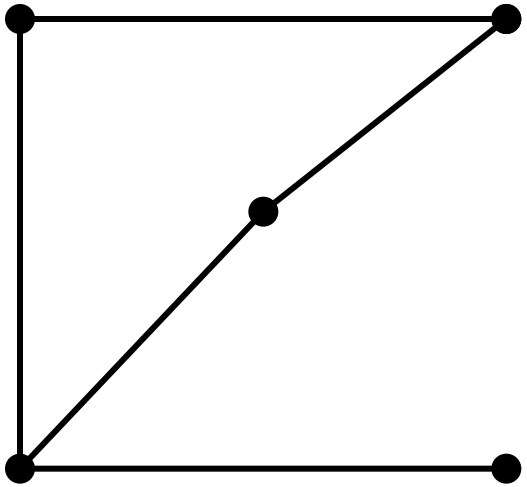
无边且仅有一个点的图称为平凡图。

有重边的图称为多重图。

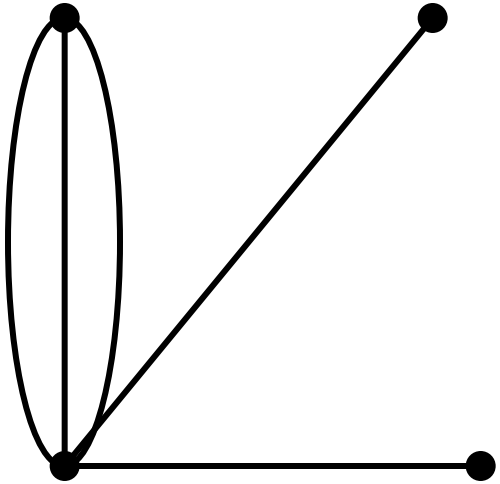
既无重边又无环的图称为简单图。

例如：

平凡图

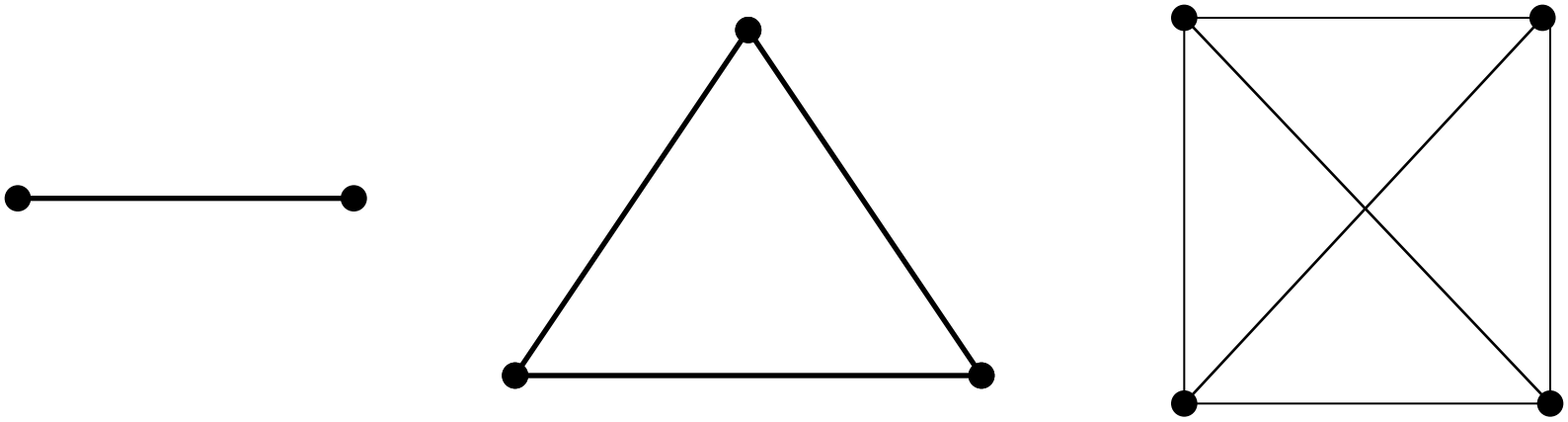


简单图



多重图

任意两点均相邻的简单图称为完全图，n 阶完全图记为K_n。例如K_2, K_3, K_4分别为如下图所示。

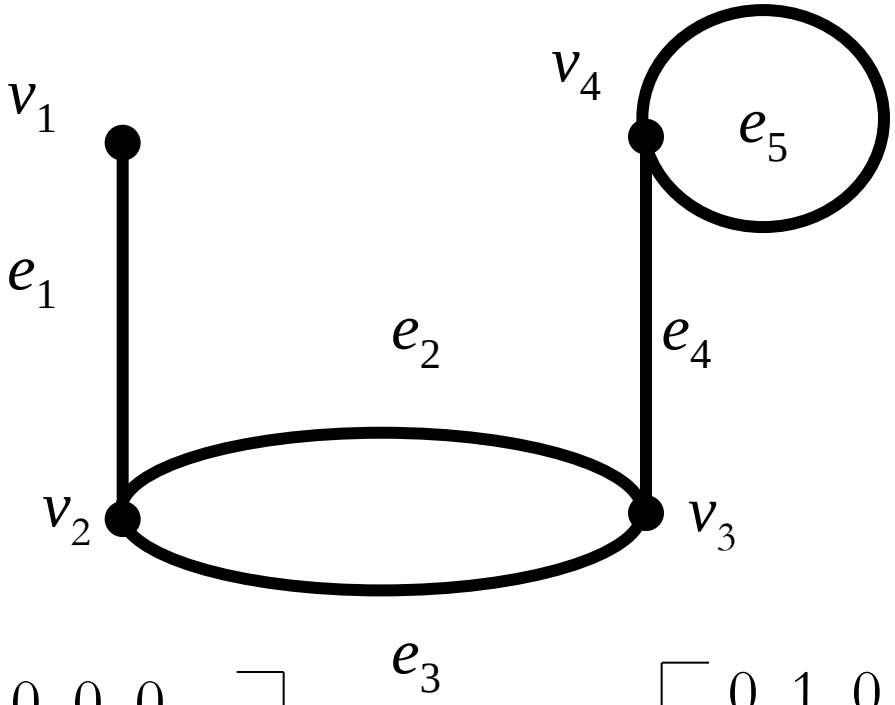


K_2　　K_3　　K_4

三．图的矩阵表示

定义：设图$G=(V,E)$，$V=\{v_1,v_2,\ldots,v_n\}$，$E=\{e_1,e_2,\ldots,e_m\}$。G 的关联矩阵 $M(G)=[m_{ij}]$ 是一个 $n\times m$ 矩阵，其中 m_{ij} 为点 v_i 与边 e_j 关联的次数；G 的邻接矩阵 $A(G)=[a_{ij}]$ 是一个n 阶方阵，其中a_{ij} 是连接 v_i 与 v_j 的边的数目。

例4



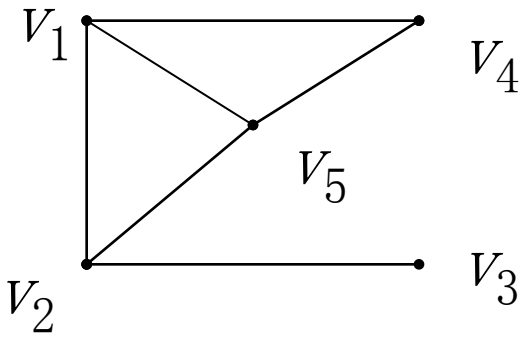
$$M(G)=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \qquad A(G)=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

由两类矩阵的定义容易推知$M(G)$中每列元素之和为2，$A(G)$为对称矩阵。

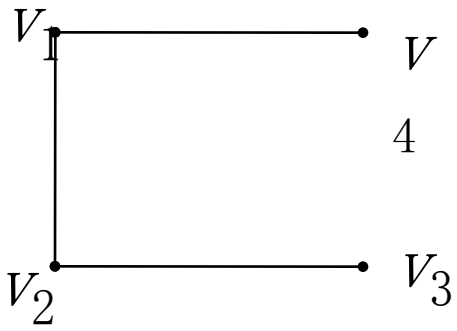
四. 子图

定义2 设G和H为两个图，若$V(H) \subseteq V(G)$, $E(H) \subseteq E(G)$,则称H是G的子图.若H是G的子图，且$V(H) = V(G)$，则称H是G的生成子图。

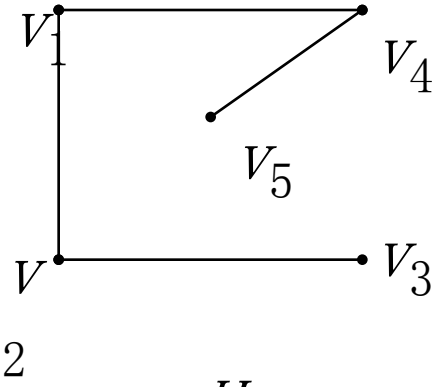
例5



G



H_1



H_2

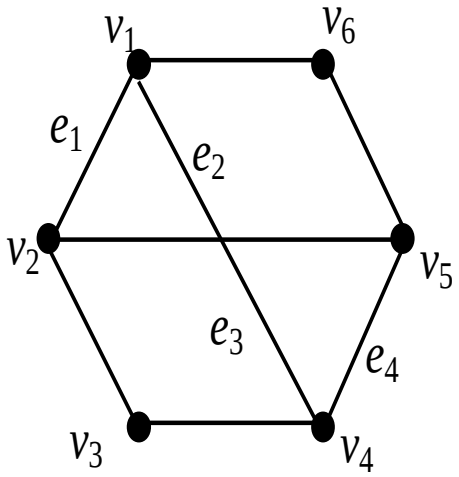
上图中，H_1与H_2均为G的子图，其中H_2是G的生成子图，而H_1则不是。

定义4 给定图$G = (V, E)$，任取V的一个非空子集V'，E的一个非空子集E'.

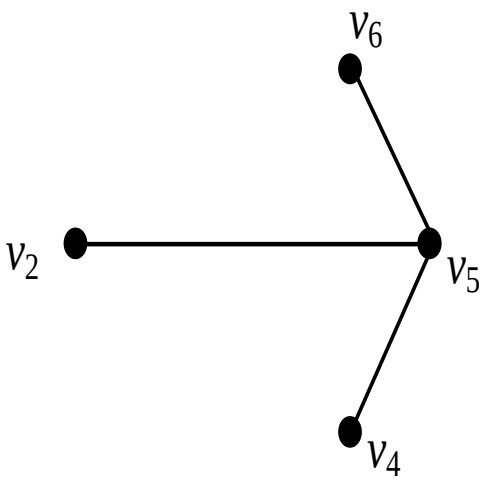
(1) 称以V'为顶点集，以两端点均在V'中的边的全体为边集所组成的G的子图为G的由V'导出的子图，记为$G[V']$，简称为G的导出子图.

(2) 称以E'为边集，以E'中全体边的端点为顶点集所组成的G的子图为G的由E'导出的子图，记为$G[E']$，简称为G的边导出子图.

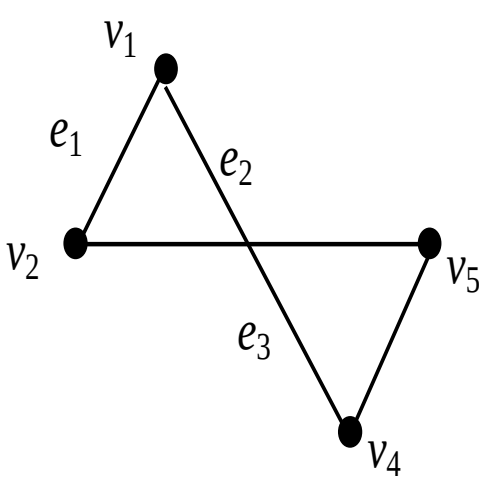
例 下图中, H_1和H_2分别是图G 的子图, 其中H_1是由顶点子集 $\{v_2, v_4, v_5, v_6\}$导出的子图, H_2 是由边集$\{e_1, e_2, e_3, e_4\}$导出的子图.



G



H_1



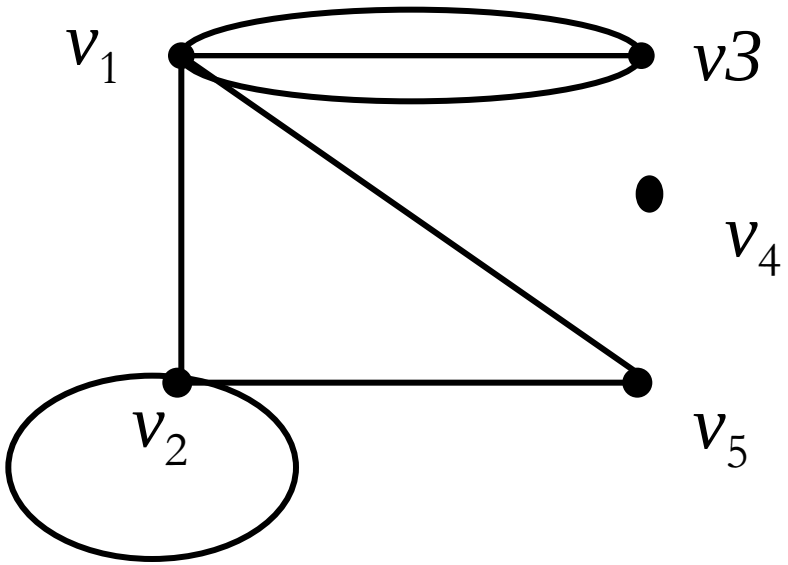
H_2

五．顶点的度

定义3 (1) 设 v为无向图 G 的顶点，G 中与 v 为端点的边的条数（环计算两次）称为点 v 的度数，简称为点v 的度，记为 $d_G(v)$，简记为 $d(v)$。

(2) 设 v 是有向图 D 的一个顶点, 称D中以v为始 (终) 点的边的数目为 v 的出 (入) 度, 记为 $d^+(v)$ $(d^-(v))$, 称v 的出度与入度之和为 v 的度, 记为 $d(v)$.

例



图中

$d(v_1) = 5$　$d(v_2) = 4$

$d(v_3) = 3$　$d(v_4) = 0$

$d(v_5) = 2$

注：该图中各点的度数之和等于14，恰好是边数7的两倍

涉及度还有两个常用记号$\triangle(G)$和$\delta((G)$，它们分别表示图G的顶点的最大度数和最小度数，$\triangle(G)$和$\delta((G)$可简记为$\triangle$和δ. 例如对上例中的图，$\triangle = 5$, $\delta = 0$.

定理1（握手定理）：对任意的有m条边的无向或有向图 $G=(V,E)$。有

$$\sum_{v\in V} d(v) = 2m \qquad (5.1.1)$$

证明 因图 G 的任一条边均有两个端点 (可以相同)，在计算度时恰被计算两次 (每个端点各被计算了一次)，所以各点的度数之和恰好为边数的两倍，即 (1.1) 式成立。

推论2 任意无向或有向图中，度数为奇数的点的个数为偶数。

证明 任给图$G=(V,E)$，设G有m条边，令

$$V_1=\{v \mid v\in V, d(v)\text{为奇数}\}\ ,\ V_2=\{v \mid v\in V, d(v)\text{为偶 数}\}$$

显然，$V_1 \cup V_2= V, V_1 \cap V_2=\Phi$ 。由握手定理

$$2m=\sum_{v\in V} d(v)=\sum_{v\in V_1} d(v)+\sum_{v\in V_2} d(v) \quad (*)$$

（*）式中$2m$为偶，$\sum_{v\in V_2} d(v)$也为偶（因其中每个$d(v)$为偶），从而推知$\sum_{v\in V_1} d(v)$也为偶。而和式中每个$d(v)$均为奇，故和式中的被加项的项数应为偶，这表明G中度为奇数的点有偶数个。

例7　证明在任意一次集会中和奇数个人握手的人的个数为偶数个。

证明：将集会中的人作为点，若两个人握过手则对应的点联线，则得简单图G。这样G中点v的度对应于集会中与v握手的人的个数。于是，问题转化为证明“图G中度数为奇的点的个数为偶数”，这正是推论2的结论。

§5.2 路、连通性与最短路

一、通路、回路与距离

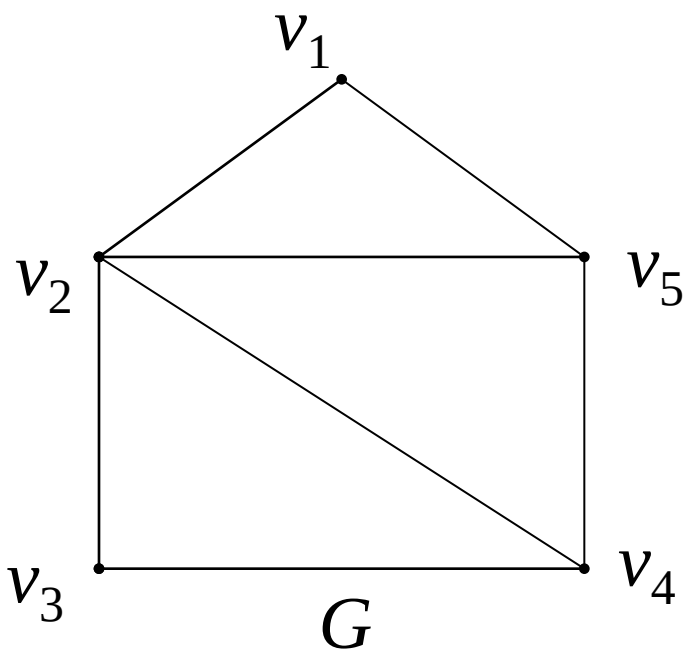
定义1 给定图$G=(V,E)$，$\Gamma=v_1e_1v_2e_2\ldots e_kv_{k+1}$是$G$中点边交替组成的序列，其中$v_i\in V$，$e_i\in E$，若$\Gamma$满足$e_i$的端点为$v_i$与$v_{i+1}$，$i=1,2,\ldots,k$，则称$\Gamma$为一条从起点$v_1$到终点$v_{k+1}$的长为$k$的通路。

边不重复的通路称为简单通路；除起点与终点可相同外，任意两点都不同的通路称为基本通路。基本通路简称路。显然基本通路必为简单通路。

我们称起点与终点相同的通路为回路。边不重复的回路称为简单回路；起点与终点相同的长为正的基本通路称为基本回路，也称为圈。

例1 在下图G中，取

$\Gamma_1 = v_1v_2v_3$ ，$\Gamma_2 = v_1v_2v_3v_4v_2$ ，$\Gamma_3 = v_1v_2v_3v_2v_3v_4$（注：简单图可只用点序列表通路）



则$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$依次为长为2, 4, 5的通路，其中

Γ_1与Γ_2为简单通路，

Γ_1为基本通路。

由定义1可看出,G中 $v_1\ v_2v_5v_1$为长为 3 的圈，

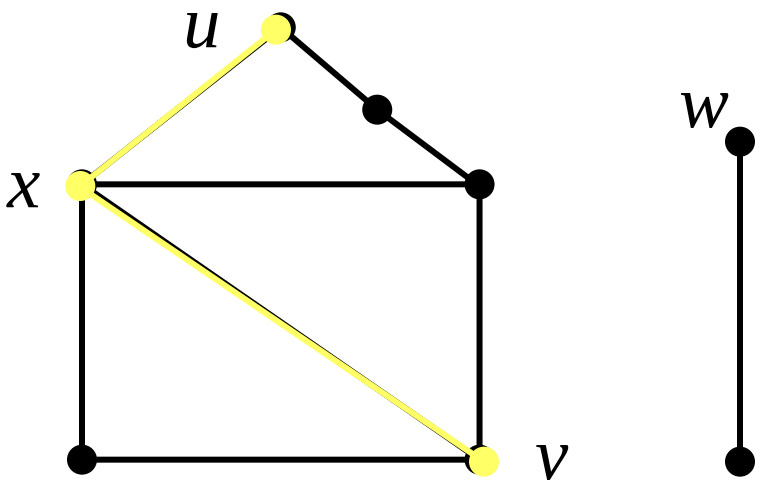
$v_1v_2\ v_3\ v_4v_2\ v_5v_1$为长为 6 的简单回路。

注： 在回路已被定义为通路的特殊情况中，为了讨论问题的方便，我们约定：凡指基本通路或路均认为此路不是圈。

易知，图中若点 u 与 v 间存在通路，则 u 与 v 间必存在基本通路；若过点u 存在简单回路，则过点u 必存在基本回路。

定义2 给定图$G=(V,E)$，对 $u,v\in V$，若u 与 v 间存在通路，则称u 与 v 间的最短通路的长为从 u 到 v 的距离，记为 $d(u,v)$；若u 与 v 间不存在通路，则称从u 到 v 的距离为无穷。

例如对图：



$d(u,v)=2$，其最短路为: $u\ x\ v$.　　$d(u,w)=\infty$

容易证明下面性质：

（1）$d(u, v) \geq 0$；

（2）$d(u, v) = d(v, u)$；

（3）$d(u, v) + d(v, w) \geq d(u, w)$

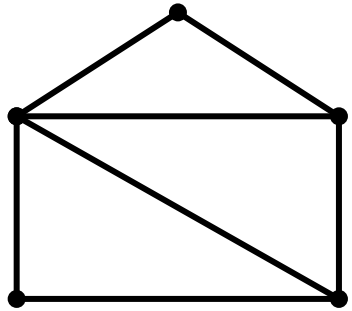
定理1 设 A 为图 G 的邻接矩阵, G 的顶点集合 $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$, 则 A^k 中第 i 行第 j 列的元素 等于 G 中从 v_i 到 v_j 的长为 k 的通路数目.

证明 留作习题.

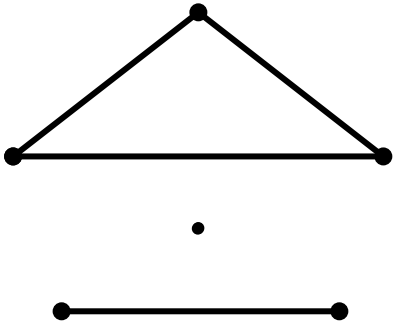
二、无向图的连通性

任意两点间均存在通路的图称为连通图，否则称为非连通图。

连通图



G



D

非连通图

若H是图G 的连通子图且H不能再扩充为G的任一连通子图，则称H为G的连通分支。用$\omega(G)$ 记图 G 的连通分支数。

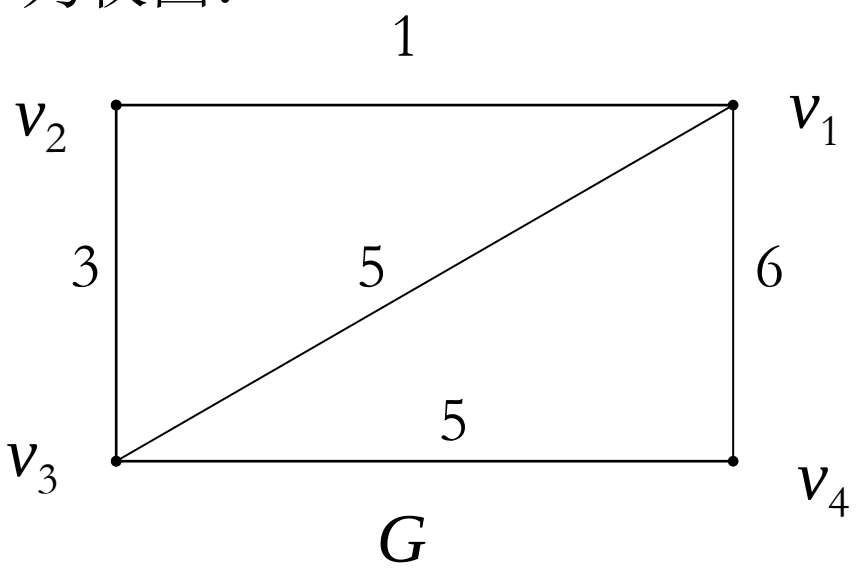
例如：$\omega(D)=3$，　$\omega(G)=1$

易知：G 连通　$\Longleftrightarrow$　$\omega(G)=1$

四、最短路问题

定义3　若图G的每一条边e都附有一个实数$w(e)$，则称G为权图。实数$w(e)$称为e的权。子图H的各边权之和称为子图H的权，记为$W(H)$。

例如下图G为权图：

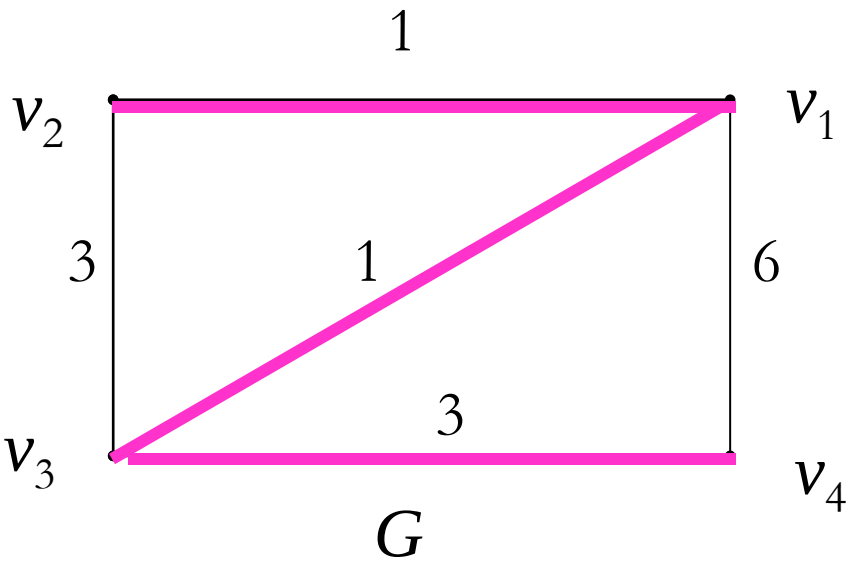


其中 $w(v_1v_2)=1$，$w(v_1v_3)=5$，$W(G)=20$。

设Γ是权图G 中的一条路，称Γ的各边权之和为路Γ的长。易知，各边的权均为1的权图中的路长与非权图中的路长是一致的。

权图中点 u 到v 的距离仍定义为点 u 到v 的最短路的长，仍记为 $d(u,v)$。

例2 下图中，$d(v_2, v_4) = 5$，相应的最短路为Γ：$v_2v_1\ v_3v_4$。



问题：给定简单权图$G=(V,E)$，并设G有n个顶点，求G中点u_0到其他各点的距离。

Dijkstra算法

(1) 置$l(u_0)=0$；对所有$v\in V\backslash\{u_0\}$，令$l(v)=\infty$；

$S_0=\{u_0\}$，$i=0$。

(2) 若$i=n$-1，则停；否则令$\overline{S_i}=V\backslash S_i$，

对每个$v\in\overline{S_i}$，令

$$l(v)=\min\{l(v),\ l(u_i)+w(u_iv)\}$$

(3) 计算 $\min\limits_{v\in\overline{S_i}}\{l(v)\}$

并用 u_{i+1}记达到最小值的某点。置$S_{i+1}=S_i\cup\{u_{i+1}\}$，$i=i+1$（表示赋值语句，以后的算法中相同），转（2）。

终止后，u_0 到 v 的距离由 $l(v)$ 的终值给出。

说明：

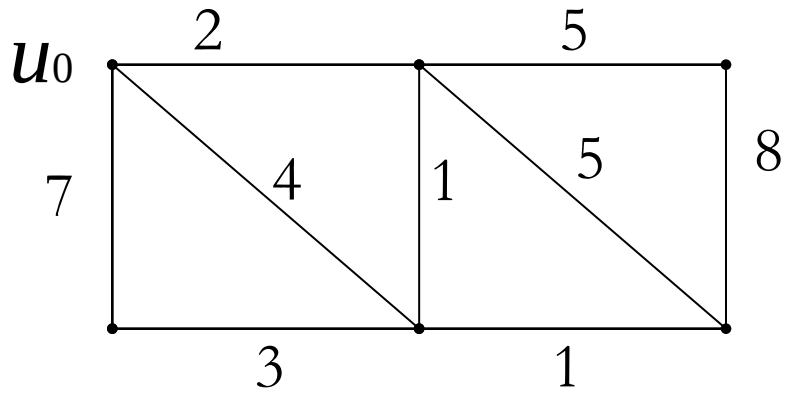
（1） 算法中$w(u_i v)$ 表示边 $u_i v$ 的权；

（2） 若只想确定u_0到某顶点v_0 的距 离， 则当某 u_j 等于 v_0 时即停；

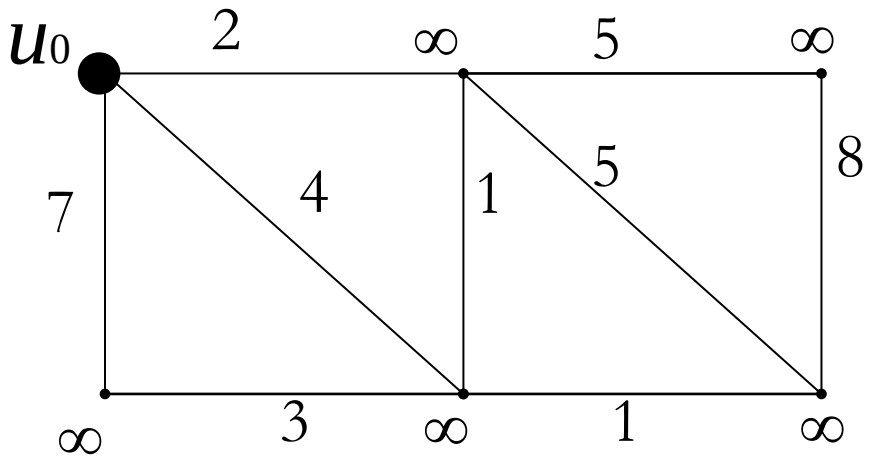
（3） 算法稍加改进可同时得出u_0到其它点的最短路。

例3 求图 G 中 u_0 到其它点的距离。

G：

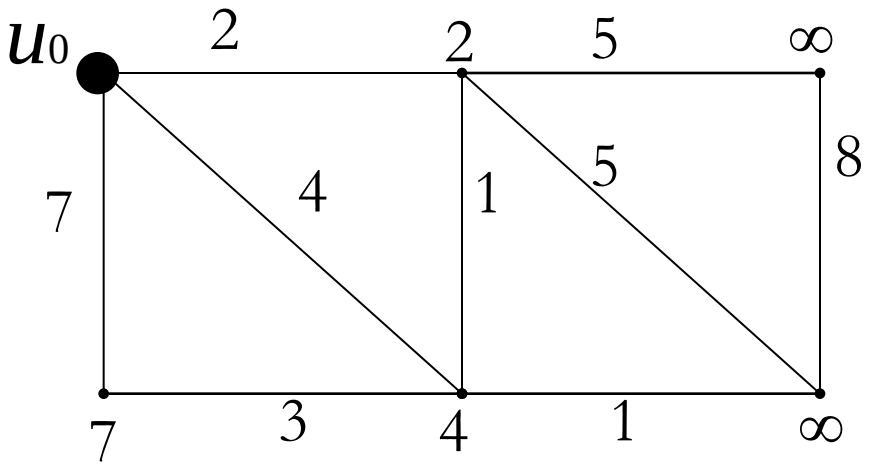


解

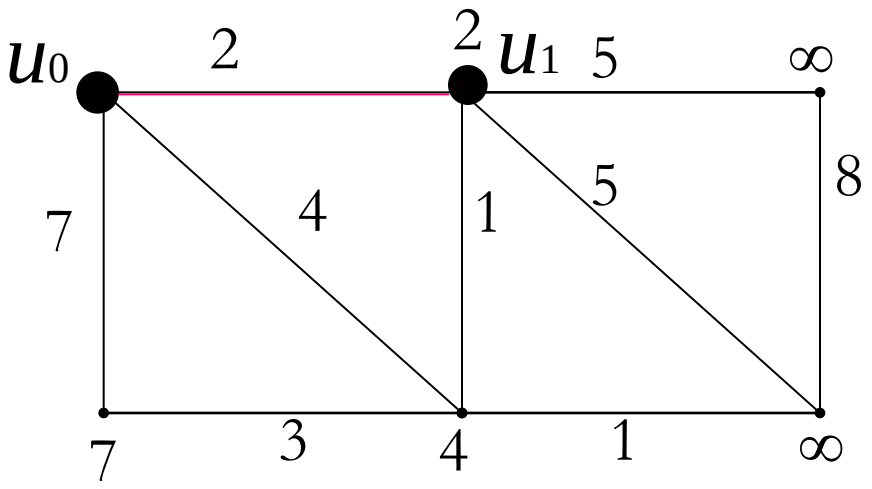


（a）初始标记；

（b）用与u_0关联的边的权2,4,7分别更新与u_0相邻的三个点的标号;

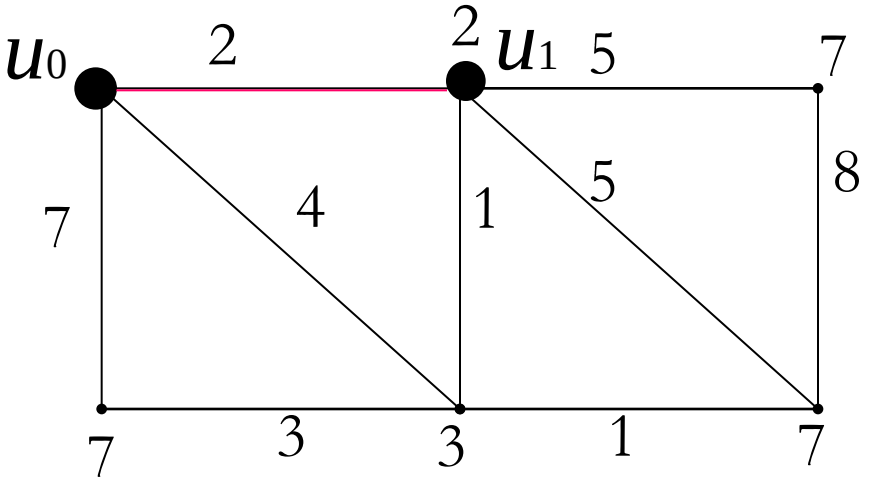


（c）取小圆点中标号最小者得 u_1;

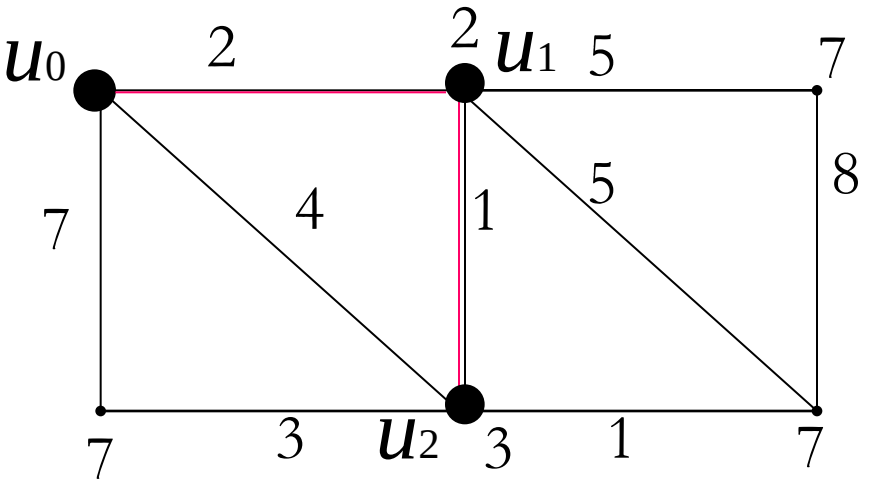


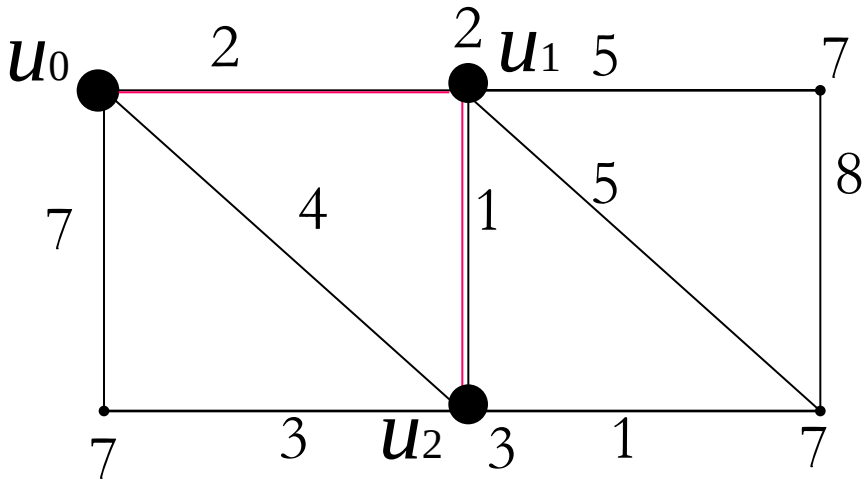
（d）对与u_1相邻的小圆点，用 $l(u_1)+w(u_1v)=2+1=3$ 更新标号4；

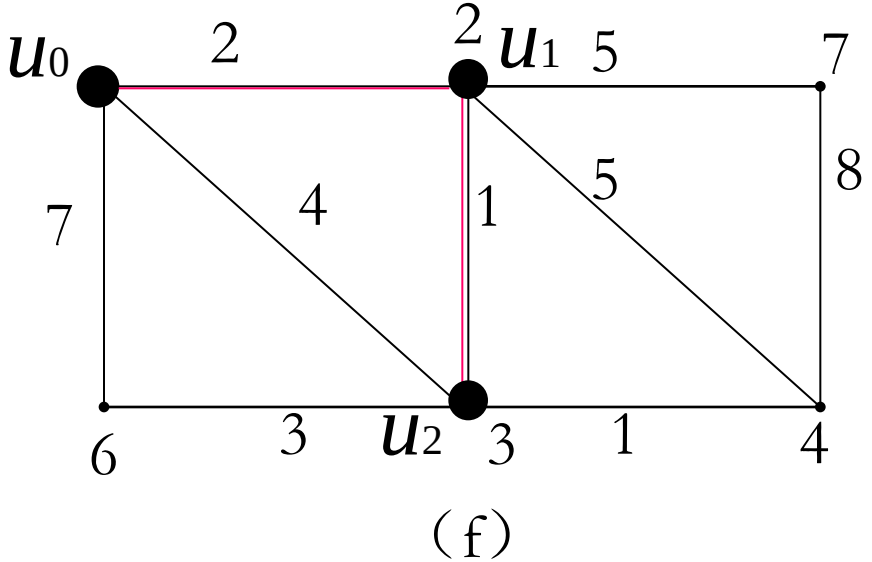
2+5=7更新两个∞；



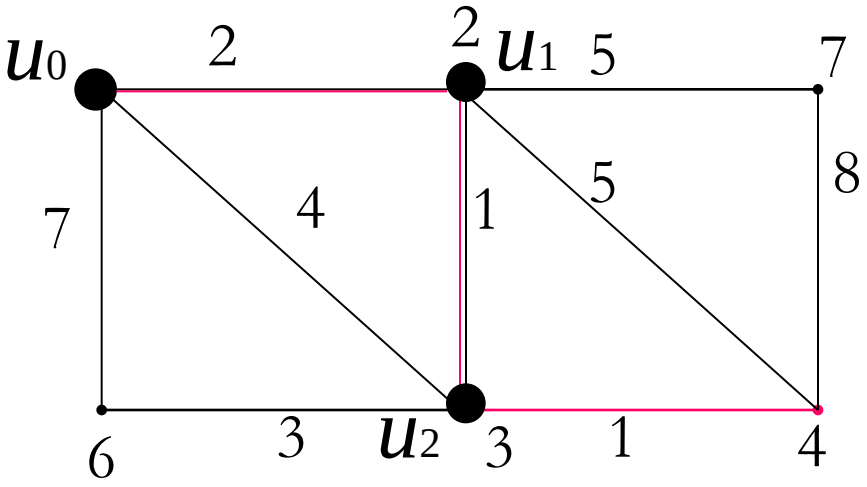
（e）取小圆点中标号最小者得 u_2。



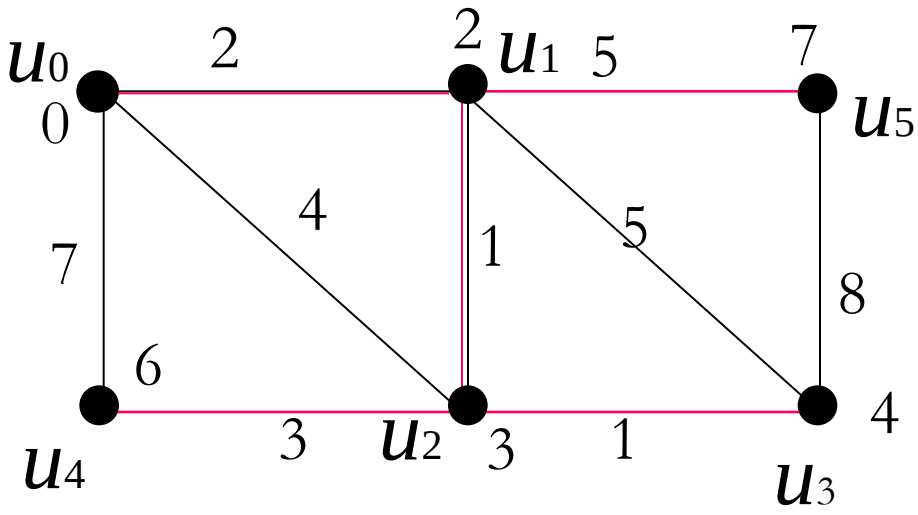

u_0
2
2
u_1
5
7
7
4
1
5
8
7
3
u_2
3
1
7


u_0
2
2
u_1
5
7
7
4
1
5
8
6
3
u_2
3
1
4

(f)


u_0
2
2
u_1
5
7
7
4
1
5
8
6
3
u_2
3
1
4
u_3

(g)

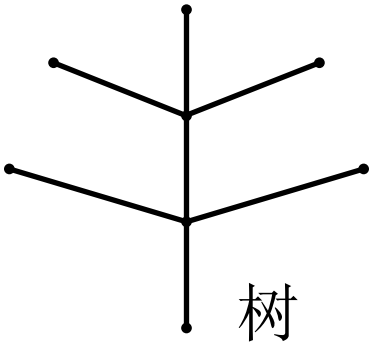

u_0
0
2
2
u_1
5
7
u_5
7
4
1
5
8
6
u_4
3
u_2
3
1
4
u_3

(h)

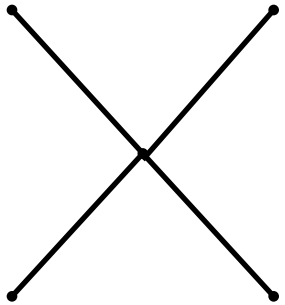
§ 5.3 树及其应用

定义1　无圈的无向连通图称为无向树，简称树.。
树中度为1的点称为树叶，其余点称为分枝点。

例

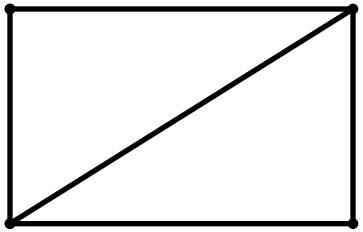


树

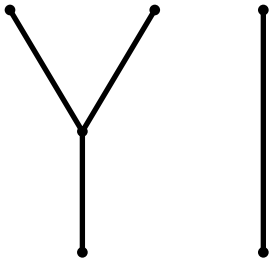


树

平凡树



不是树



不是树

定理1　设G是具有n个点m条边的图，则以下关于树的命题等价。

（1）G是树。

（2）G 中任意两个不同点之间存在唯一的路。

（3）G 连通，删去任一边便不连通。

（4）G 连通，且$n = m+1$。

（5）G 无圈，且$n= m+1$。

（6）G 无圈，添加任一条边可得唯一的圈。

证：（1）→（2）

因 G 是树，树是连通的，故G 中任意两个不同点之间存在路。下证唯一性。

若不然，设点 u 与 v 之间存在两条不同的路Γ_1与Γ_2。从 u 出发沿Γ_1搜索，设x是具有第一个如下性质的点：它在Γ_2 上，但它的下一个点 w 不在Γ_2上；继续搜索，设 y 是 w 之后的第一个既在Γ_1上又在Γ_2上的点。这样Γ_1上从 x 到 y 段与Γ_2上从 y 到 x 段便构成一个圈，这与G是树无圈矛盾，所以任意两点间的路唯一。

证：（3）→（4）

只需证 $n=m+1$即可。对n用归纳法。

当$n=1$时，G 无边，满足$n=m+1$。

设对少于 n 个点的图（4）的结论成立。

对于有n个点的图G，由（3）的假设知删去G中某边可得两个具有同样性质的子图G_1与G_2。设G_i的点数与边数分别为n_i与m_i（$i=1,2$）。显然$n_1<n$，$n_2<n$。由归纳假设有 $n_1=m_1+1$，$n_2=m_2+1$

相加得　　$n_1+n_2=m_1+m_2+2$　　（*）

同时有　　$n_1+n_2=n$，　$m_1+m_2=m-1$

代入（*）式得：$n=m+1$。

推论 非平凡树至少存在两片树叶.

证明 对任意的非平凡树G, 设其点数为 n , 其中有 x 个1度点. 因非平凡树没有孤立点, 故 G 中除 x 个1度点外, 其余 $(n–x)$ 个点的度数至少为 2, 于是由握手定理, 有

$x + 2(n–x) \leq$ 2倍边数 $= 2(n –1)$

$\Rightarrow$ $x + 2n–2x \leq 2n –2$

解得 $x \geq 2$

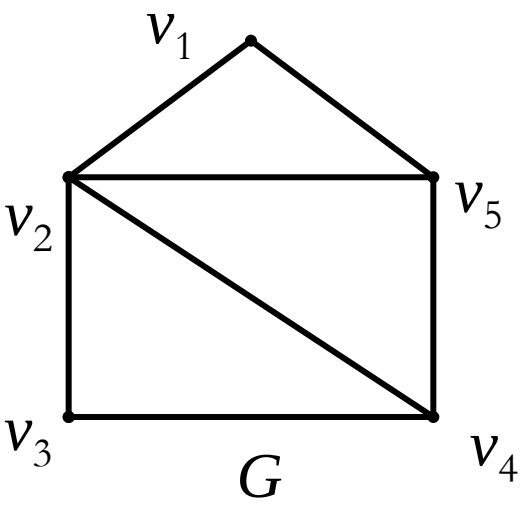
定义2　若图 G 的生成子图T是树，则称T为G的生成树。

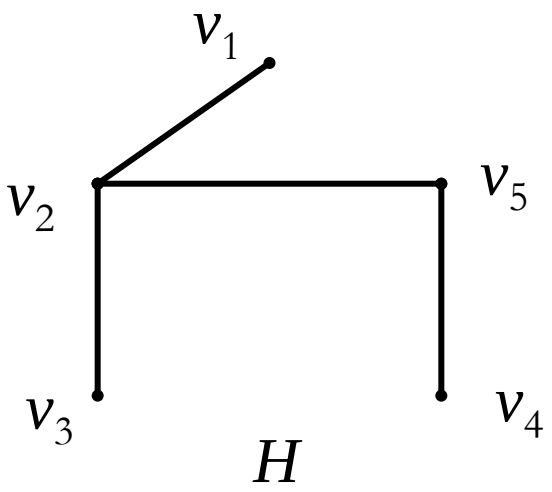
定理4 连通图的生成树必存在。

证明 给定连通图G，若G无圈，则G就是自己的生成树。若G有圈，则任取G中一个圈C，记删去C中一条边后所得之图为H_1。显然在H_1中，圈C 已不存在，但仍连通。若H_1中还有圈，重复以上过程，直至得到一个无圈的连通图H。H 便是G 的生成树。

定理4的证明方法也是求生成树的一种方法，称为“破圈法”。

例1 设有五个城市 v_1, v_2, v_3, v_4, v_5。它们之间有通信光纤连通，其布置如图中的G。问至少有几条光纤不出故障，城市间的通信才不会中断，且这些不出故障的光纤应如何分布？

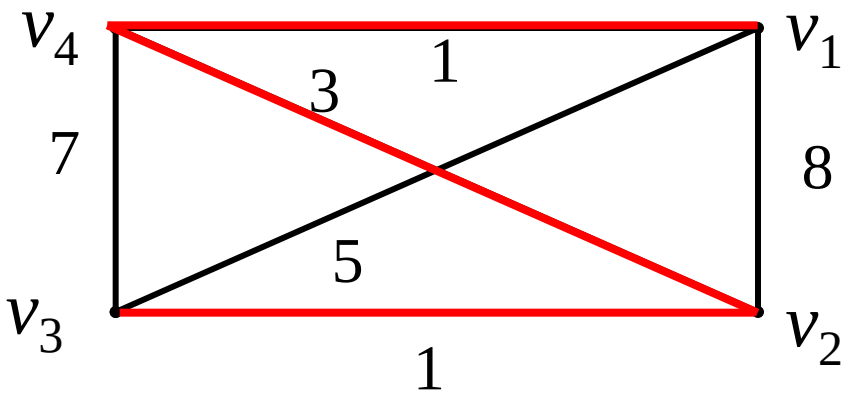




解 这是一个求图G的生成树的问题。

因G有5个点，由定理1的（4）知G的生成树有4条边，即至少需4条光纤不出故障，通信才不会中断，且这些不出故障的光纤应按上图中的H进行分布，其中H是由破圈法求得的G的一个生成树。（注：H不唯一）

例　假定有四个城市，准备修筑铁路将这四个城市连接起来，已知各城市间修铁路的造价预算如下图所示，图中边上的数值表示预算的造价（以亿元为单位），问如何选择线路以使总造价最小。



分析：设求出的线路为H，因要保证将四个城市连接起来，故H应是图中的连通生成子图。同时，因要保证造价最小，故H中应无圈（因若有圈，则删去圈中某边还能保证连通性，但造价被减少）。所以H应是图中的生成树，并且还应是该图中所有生成树中边权之和最小的一个。

定义3 在权图G 中，边权之和最小的生成树称为G 的最优树。

给定无圈连通权图G，设G 有 n 个点，m 条边，下面给出求 G 的最优树的一个算法。

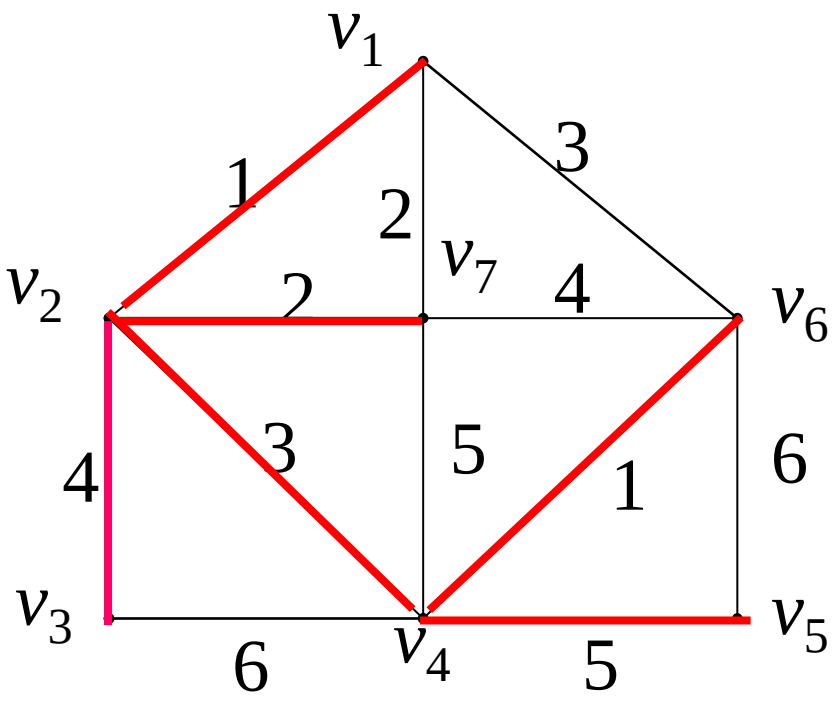
算法

（1） 将G 的边按权从小到大排列，不妨设为

$$e_1, e_2, \ldots, e_m$$

（2） 取$T = \{e_1\}$，再从e_2开始依次将排好序的边加入到T 中，使加入后由T 导出的子图（即由T 作为边集，T 中的边相关联的点作为点集所确定的子图）不含圈，直至T 中含有n-1条边。

例2 图 G 如所示，求G的最优树。



解 边权排序为1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5, 6, 6。 对应的边为v_1v_2， v_4v_6， v_2v_7， v_1v_7， v_2v_4， v_1v_6， v_2v_3， v_6v_7， v_4v_5， v_4v_7， v_5v_6， v_3v_4

依据算法，其中画有下横线的边为依次被选为生成树T的边,且 $W(T) = 1+1+2+3+4+5 = 16$

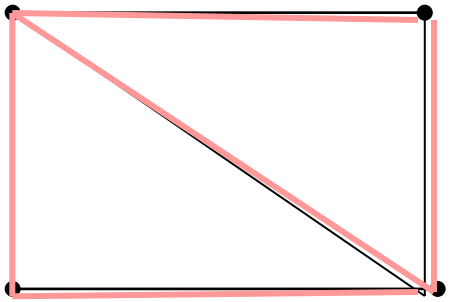
§5.5 Euler图与Hamilton图

一、 Euler图

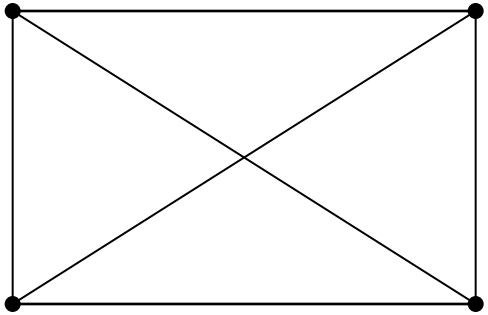
定义1　设G是无孤立点的(有向或无向)图。经过G中每条边一次且仅一次的通路（回路）称为欧拉通路（回路），存在欧拉回路的图称为欧拉图。

例1 考察图1：

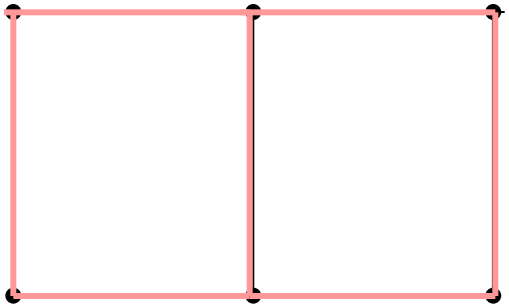
（a）



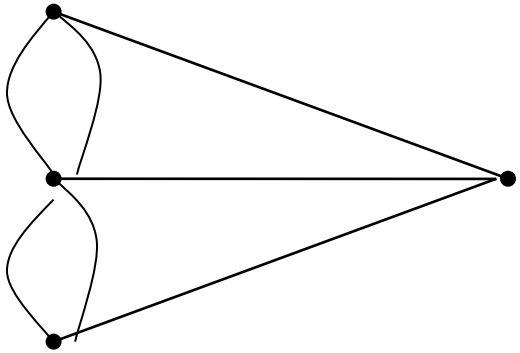
（b）



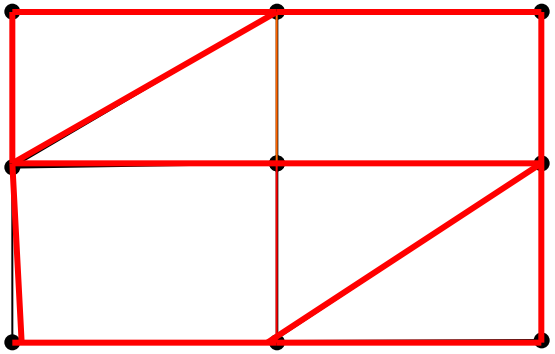
（c）



（d）



（e）



（f）

（a），（f）是欧拉图；（b），(d) 有欧拉通路但不是欧拉图；（c）和（e）无欧拉通路和回路。

定理1 无向连通图G是欧拉图当且仅当G不含度为奇数的点；无向连通图G 有欧拉这通路但无欧拉回路，当且仅当G中恰有两个度为奇的点, 并且两个度为奇的点必为欧拉通路的起点和终点.

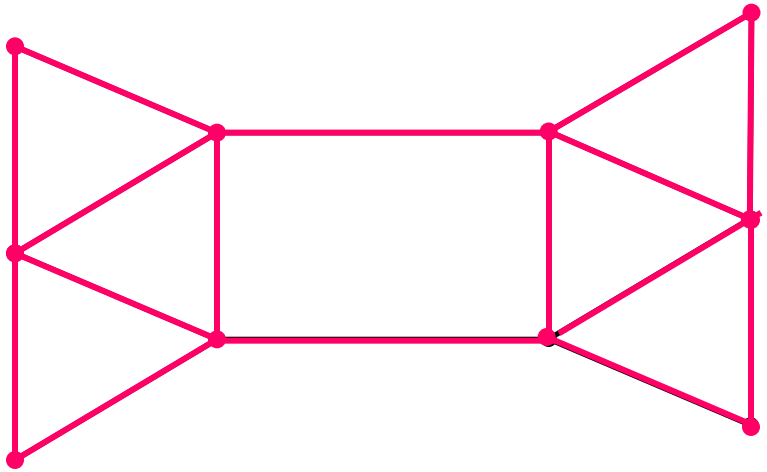
例如，对完全图 K_n，因 $d(K_n) = n\text{-}1$，故当n为奇数时是欧拉图，当n为偶时不是欧拉图。

图 G 有欧拉通路 $\Leftrightarrow$ G 能“一笔画” $\Leftrightarrow$

G 连通且 G 中度数为奇数的点的个数不超过2

求一个欧拉图的欧拉回路的方法：从任一点出发按下法来描画一条边不重复的通路，使在每一步中未描画的子图的割边仅当没有别的边可选择时才被描画。

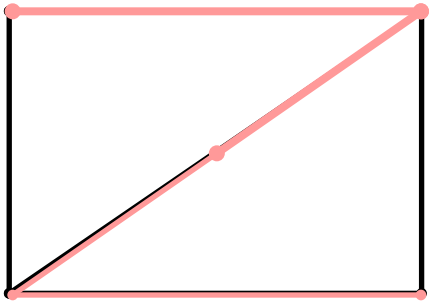
例

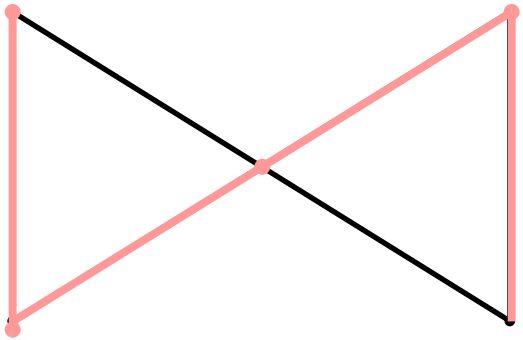


二、Hamilton图

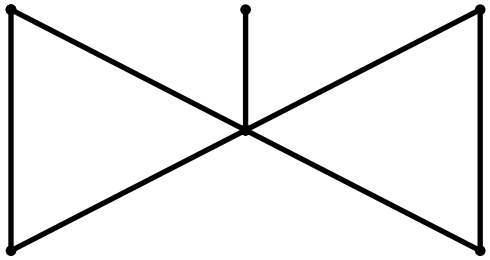
定义2　经过图中每个点一次且仅一次的路（回路）称为哈密尔顿路（回路或圈），存在哈密尔顿圈的图称为哈密尔顿图。

例2

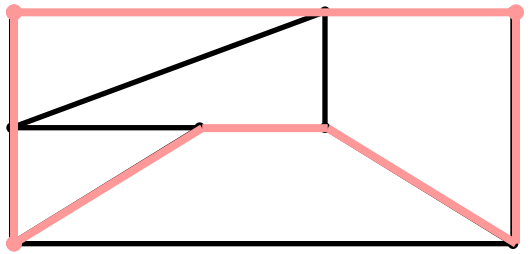




只有哈密尔顿路，但不是哈密尔顿图



无哈密尔顿路



哈密尔顿图

定理3 设$G=(V,E)$是哈密尔顿图，则对任意的 $V'\subseteq V$，$V'\neq\Phi$，有

$$\omega(G-V')\leq|V'|$$

其中$\omega(G-V')$表示G中删去V'（即删去V'中各点及其关联的边）后所得图的连通分支数。

证明 设C是G中一条哈密尔顿回路。任取V中非空子集V'，因C是G的哈密尔顿回路含G的所有点，故V'也是子图C的非空子集。由点不重复的回路的特性知任意删去C中$|V'|$个点，最多将C分为$|V'|$“段”，即

$$\omega(C-V')\leq|V'| \qquad (*)$$

而C是G的生成子图，又有

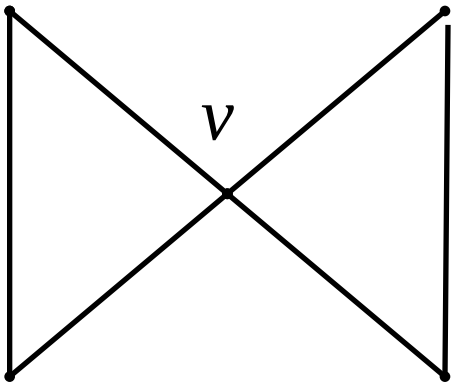
$$\omega(G-V')\leq\omega(C-V')$$

所以

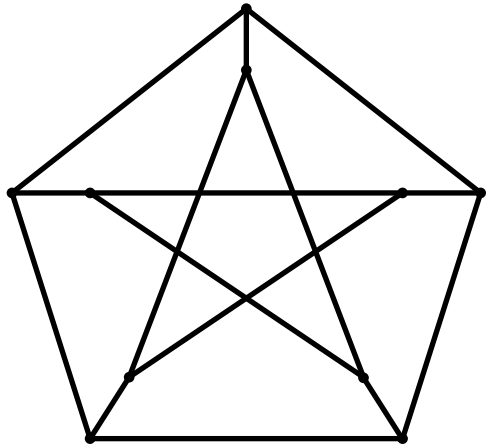
$$\omega(G-V')\leq|V'|$$

依据定理9可判断下图（a）不是哈密尔顿图，这是因若取$V'=\{v\}$，有 $\omega(G-V')=2>1=|V'|$

可验证彼得森图（下图（b）所示）不是哈密尔顿图，但满足式（*）式。这表明定理9给出的条件只是图 G 是哈密尔顿图的必要条件而不是充分条件。



（a）



（b）

定理4 设G是具有n ($n\geq 3$) 个点的简单图，则对G的任意两个不相邻顶点 u 和 v ，

（1）若$d(u) + d(v)\geq n-1$, 则 G 有哈密尔顿路；

（2）若$d(u) + d(v)\geq n$, 则 G 是哈密尔顿图。

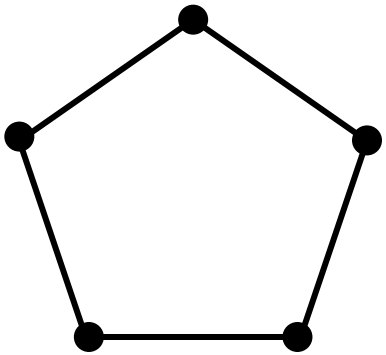
因任意两个顶点包含了任意两个不相邻顶点, 故有下面的推论.

推论 设 G 是具有 n 个点的简单无向图, $n\geq 3$, 则对G的任意两个顶点 u 和 v ,

(1) 若$d(u) + d(v) \geq n-1$, 则G有哈密尔顿路;

(2) 若$d(u) + d(v) \geq n$, 则G是哈密尔顿图.

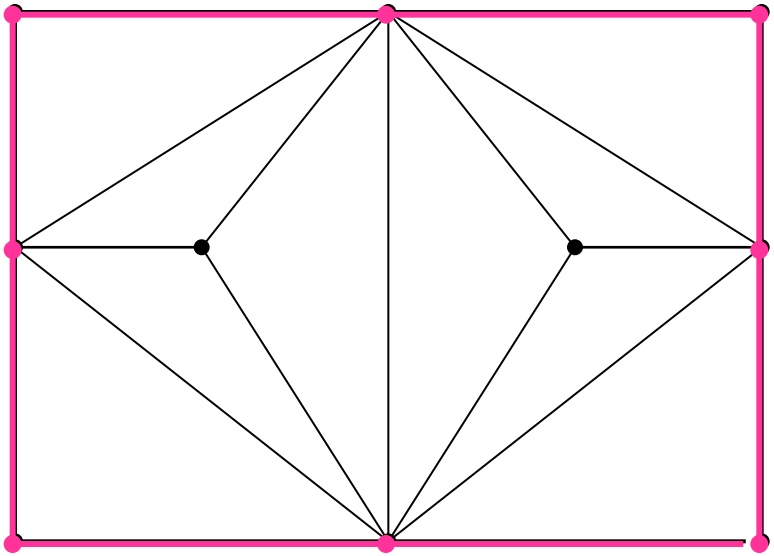
由推论可知当$n \geq 3$时 K_n是哈密尔顿图。



是哈密尔顿图，但不满足定理10的条件

故该定理的条件是一个图是哈密尔顿图的充分条件,但不是必要条件。

说明：判断一个图是否哈密尔顿图，往往要结合定义进行。由定义知：一个图若有度为1的顶点，一定不是哈密尔顿图，只可能有哈密尔顿路；若图是哈密尔顿图，则图中2度顶点关联的边必属于所有哈密尔顿圈；一个顶点关联的边再多，一个哈密尔顿圈只能用其两条边。



不是哈密尔顿图，因图中二度顶点所关联的8条边（红边）已构成圈，而此圈不是哈密尔顿圈。

问题：一个旅行售货员想访问若干城市（假定各城镇之间均有路可通），然后返回。问如何安排路线使其能恰好访问每个城镇一次且走过的总路程最短？这个问题称为旅行售货员问题，它的图论模型为：在赋权完全图G中求具有最小权的哈密尔顿圈，这个圈称为最优圈。

求最优圈，目前还没有一个理想的算法。

一个可行解法：

（1）任取G的一个哈密尔顿圈C。

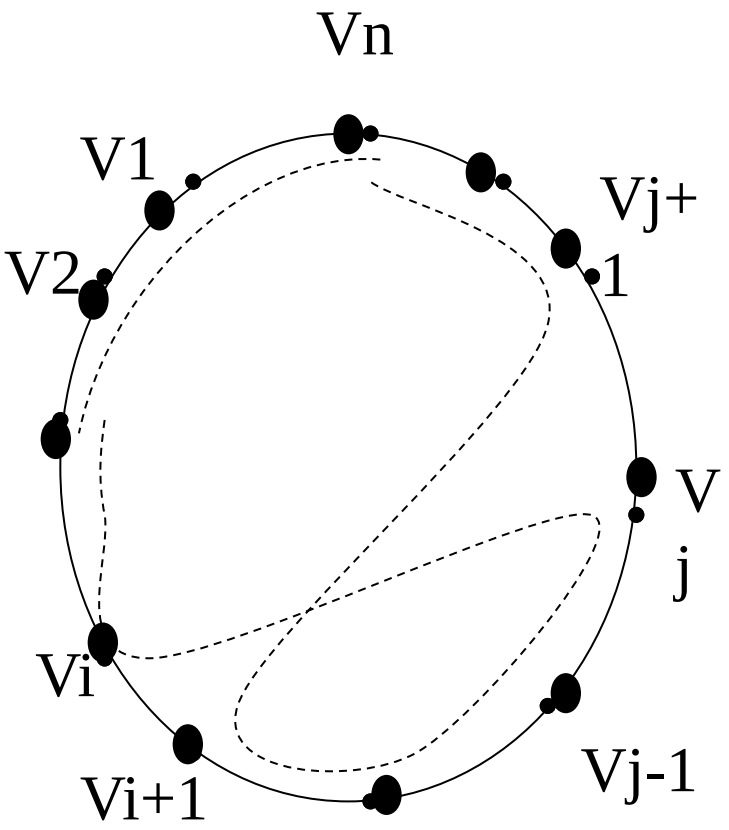
（2）修改C为C_{ij} 使C_{ij}比C优，其方法为：设$C=v_1\,v_2\ldots v_n\,v_1$，若存在整数$i$，$j$，满足$0<i+1<j<n$，且

$$w(v_iv_j)+w(v_{i+1}v_{j+1})<w(v_i\,v_{i+1})+w(v_j\,v_{j+1})$$

则

$$C_{ij}=v_1\,v_2\ldots v_i\,v_j\,v_{j-1}\cdots v_{i+1}\,v_{j+1}\,v_{j+2}\cdots v_nv_1$$

比C优。其中C与C_{ij}的关系如图所示。

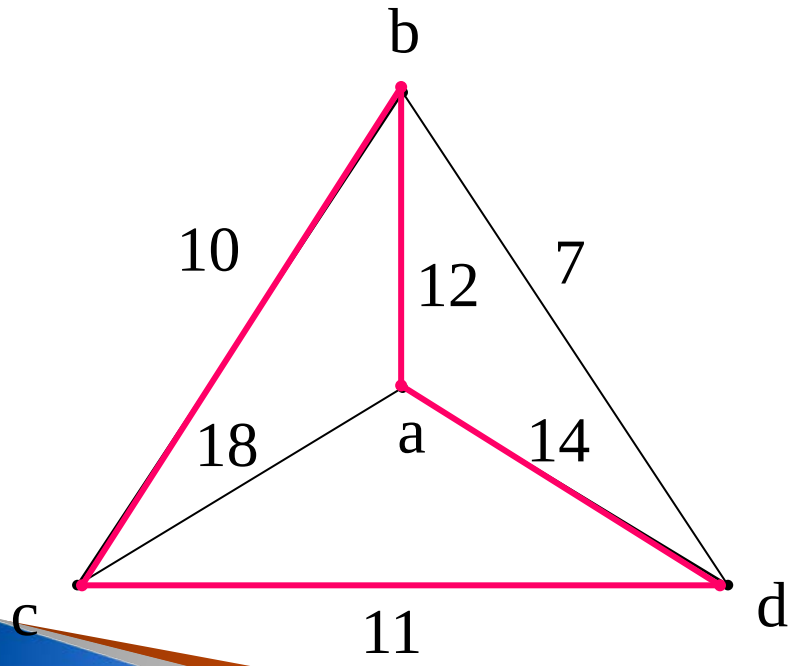


例3 求图（a）所示图的最优图。

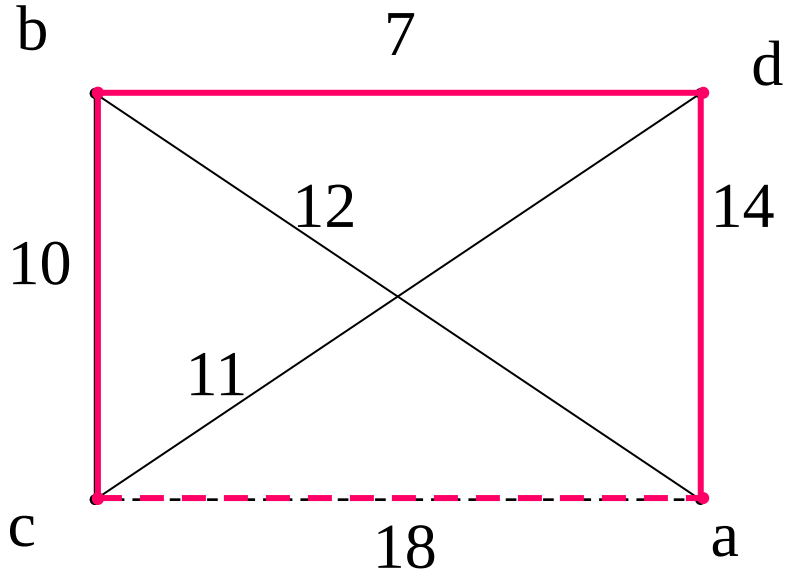
解 任取一个哈密尔顿圈$C = bcadb$，如图（b）。

$\because$ $w(ca) + w(db) = 18+7 = 25 > 23 = w(cd) + w(ab)$

$\therefore$ 取 $C' = b\ c\ d\ a\ b$。



(a)



(b)

中国邮路问题

问题：邮递员从邮局出发，递送邮件，然后返回邮局，要求辖区每条街至少走一遍且走过的总路程最短，应如何选择路线？

此问题的图论模型为：在一个连通权图G中找一条包含每条边（允许重复）且边权之和最小的回路。

若图G是一个欧拉图，则找出G的欧拉回路即可。对一般图，其解法为：添加重复边以使G成为欧拉图G^*，并使添加的重复边的边权之和为最小，再求G^*的欧拉回路。

对恰有两个度数为奇的点的图G，可证：需要重复的边正好是从一个奇度点到另一个奇度点的最短路上的边，即问题为欧拉问题与最短路问题的综合。

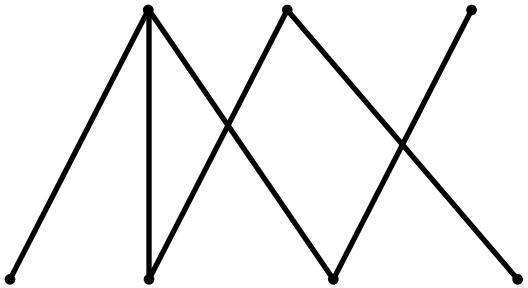
§ 5.6 偶图、匹配及其应用

一、 偶图

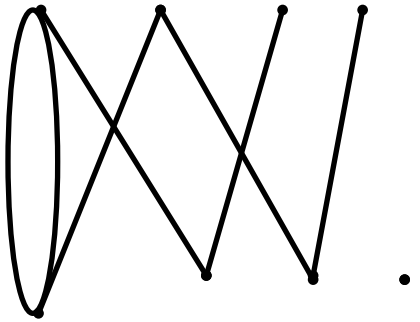
定义1 若图 $G=(V,E)$ 的点集能划分为两个互不相交的非空子集 V_1 与 V_2（$V_1 \cup V_2 = V$），使任意的 $e \in E$，e 的两端点分属于 V_1 与 V_2，则称 G 为偶图，记为$G=(V_1, V_2, E)$。

若偶图 $G=(V_1, V_2, E)$ 为简单图，且V_1的每个点均与V_2的每个点相邻，则称 G 为完全偶图，记为 $K_{m,n}$，其中 m, n分别为 V_1 与 V_2 的点数。

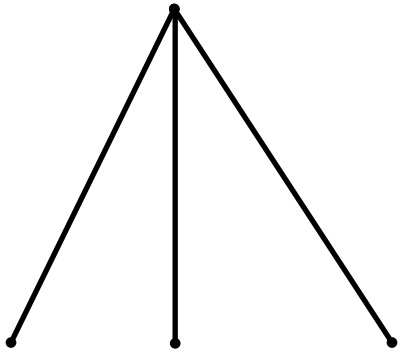
例



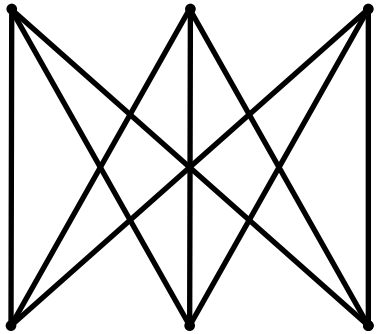
G_1



G_2



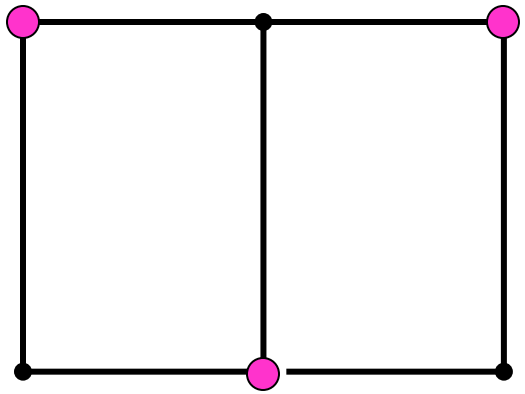
$K_{1,3}$



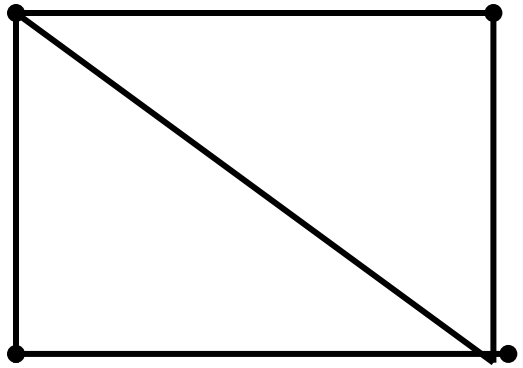
$K_{3,3}$

四个图均为偶图;　　$K_{1,3}$, $K_{3,3}$为完全偶图

例



偶图



不是偶图

定理1 一个图是偶图当且仅当它不含长度为奇的圈时。

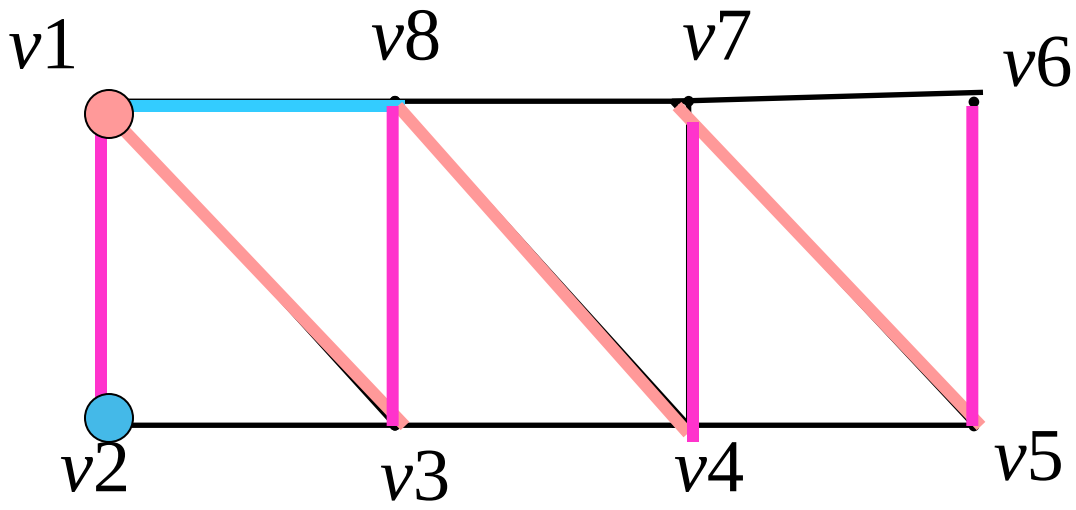
又由定理1知至少两个点的树是偶图。

二. 匹配

定义2 设M是图G的边子集，若任意的$e \in M$，e都不是环，且属于M的边互不相邻，则称M为G的一个匹配。设M为G的一个匹配，对$v \in V(G)$，若v是M中某边的一个端点，则称v为M饱和点，否则称为M非饱和点。

匹配还可分为最大匹配（含边数最多的匹配）和完美匹配（图中的点均为M饱和点的匹配M）等类型。

例1 设图G 为:



G的匹配有：

$M_1 = \{v_1v_8\}$

$M_2 = \{v_1v_3，\ v_8v_4，\ v_7v_5\}$

$M_3 = \{v_1v_2，\ v_8v_3，\ v_7v_4，\ v_6v_5\}$ 等等

对 M_2，点v_1是的饱和点，点v_2是非饱和点。

例1中的M_1 和M_2既不是最大匹配，也不是完美匹配，而M_3是最大匹配，也是完美匹配。

关系：

(1) 完美匹配必是最大匹配，而最大匹配不一定是完美匹配。

(2) 一个图的最大匹配必存在，但完美匹配不一定存在。

(3) 图G 存在完美匹配的一个必要条件是 G 的点数为偶。

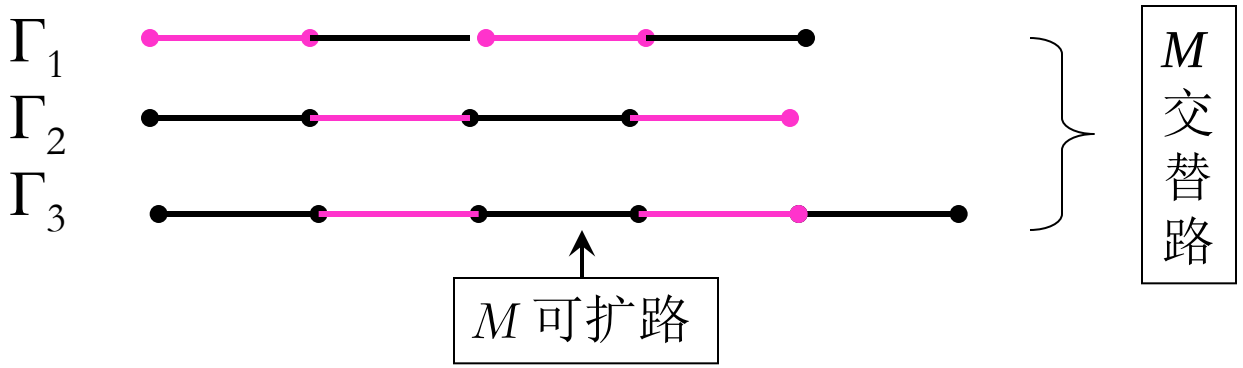
设M为图G的一个匹配

M交替路：G中由M中的边与非M中的边交替组成的路。

M可扩路：起点与终点均为M非饱和点的M交替路。

例如，

取M = {红边}



可看出：对Γ_3，若取Γ_3中非M的边再连同M的不在Γ_3中的边组成M'，则M'的边数比M的边数多，这表明M不是该图的最大匹配。

定理2 G的匹配M是最大匹配当且仅当G不含M可扩路 .

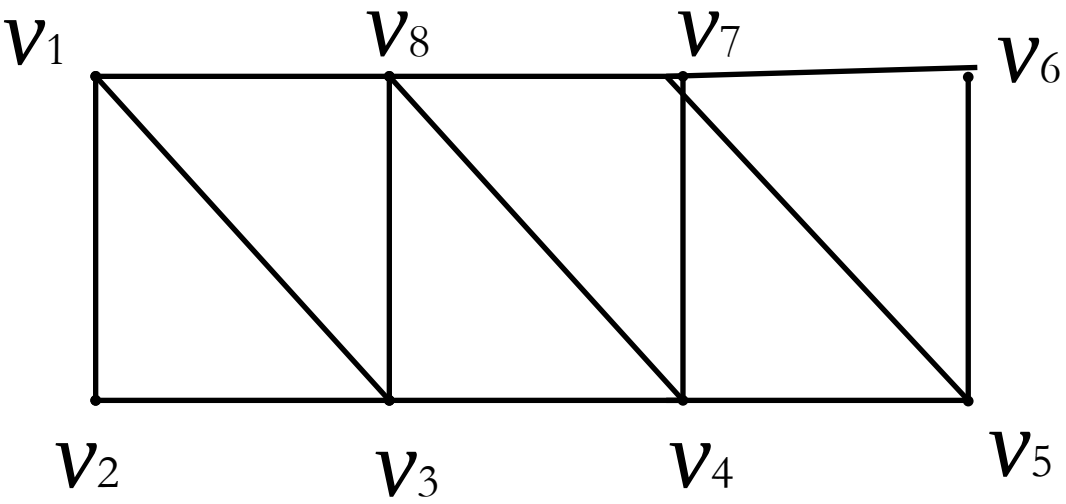
三. 偶图的匹配

取图 G 的一个顶点子集S，令

$$N(S) = \{ v \mid \text{存在 } u \in S，\text{且}v\text{与}u\text{相邻}\}$$

称 $N(S)$ 为 S 的邻集。

例如图



中

取 $S = \{v_1, v_2\}$，则 $N(S) = \{v_8, v_3, v_1, v_2\}$

1．偶图存在最大或完美匹配的条件

设偶图$G=(V_1, V_2, E)$，则有下列必要或充分条件：

① G 存在饱和 V_1 的每个点的匹配，当且仅当对任意的 $S \subseteq V_1$，有 $|N(S)| \geq |S|$

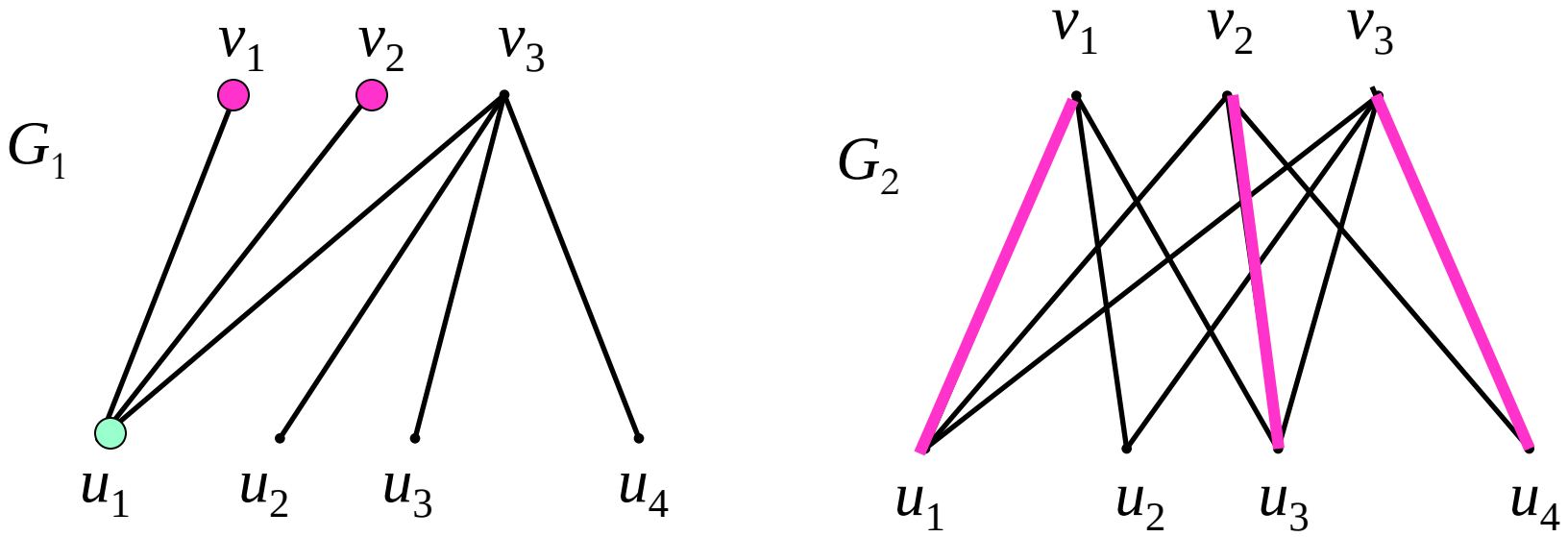
即 $N(S)$ 的点数不少于S的点数。

② 若存在正整数 t，满足任意的 $v \in V_1$，有 $d(v) \geq t$，同时对任意的 $u \in V_2$，有 $d(u) \leq t$，则G存在饱和 V_1 的每个点的匹配。

③ 若G 为k正则 偶图， $k>0$，则 G 存在完美匹配。

④ 若 $|V_1|>|V_2|$，则不存在饱和 V_1 的每个点的匹配。

例2 判断图G_1与图G_2（如下图所示）是否存在饱和V_1的每个点的匹配，其中$V_1=\{v_1, v_2, v_3\}$。



解 对G_1，取$S=\{v_1, v_2\}$，则 $N(S)=\{u_1\}$，有 $|N|(S)|<|S|$。由条件①，G_1不存在饱和V_1的每个点的匹配。

对G_2，因对任意的$v\in V_1$，有 $d(v)\geq 3$，对任意的$u\in V_2$，有$d(u)\leq 3$。由条件②知V_1存在饱和V_1的每个点的匹配。实际上，匹配$M=\{v_1u_1, v_2u_3, v_3u_4\}$ 即满足要求。

工作安排问题

问题：n 个工人 $x_1, x_2, \ldots, x_n$，n 件工作 $y_1, y_2, \ldots, y_n$。已知 x_i 能胜任 k_i 件工作，$i=1, 2, \ldots, n$。问能否存在一种工作安排方案，使每个人都能分配到他所能胜任的一件工作。假定每件工作只能一人做，若能，又如何安排？

建模：以工人和工作为点，当且仅当 x_i 能胜任工作 y_j 时则连线，得偶图 $G=(V_1, V_2, E)$。于是一种符合要求的安排对应 G 中一个完美匹配。所以此问题实际上是求偶图的完美匹配问题.

进一步：若不要求人数与工作数相等，则问题是求偶图的饱和V_1的每个点的匹配问题，其中V_1是工人的集合；进一步，若问：能否存在一种安排使尽可能多的人能分到他能胜任的工作或使尽可能多的工作被分配，则问题为求偶图的最大匹配问题。

求偶图的最大匹配的方法，称为匈牙利算法

算法思想：先任取一个匹配 M，然后寻找M 可扩路。若不存在 M 可扩路，则 M 为最大匹配；若存在，则将可扩路中 M 与非 M 的边互换，得到一个比 M 多一条边的匹配 M'，再对 M' 重复上面过程。

算法是从V_1 的每个非饱和点出发寻找 M 可扩路的。若从V_1 的每个非饱和点出发都无 M 可扩路，则 M 必无可扩路，从而 M 是最大匹配。这是因偶图中不可能存在两个端点均在 V_2 中的 M 可扩路。

匈牙利算法

给定偶图$G=(V_1, V_2, E)$。

(1) 任取一个匹配M。

(2) 若V_1中每个点均为M饱和点，则停（输出M）；否则继续（3）。

(3) 取V_1的非饱和点x_0，令$X=\{x_0\}$，$Y=\Phi$。

(4) 若$N(X)=Y$，则将x_0也作为M饱和点对待，转(2)；否则取$y\in N(X)\setminus Y$。

(5) 若y为饱和点，则转（6）；否则转（7）。

(6) 存在$z\in V_1$，有$yz\in M$，令$X=X\cup\{z\}$，$Y=Y\cup\{y\}$，转（4）。

(7) 存在x_0到y的M可扩路Γ，令

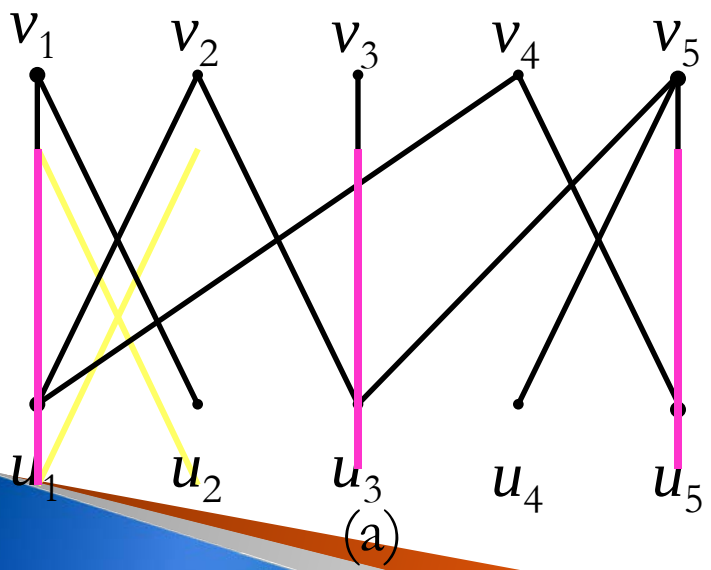
$M=(M\cup E(\Gamma))\setminus(M\cap E(\Gamma))$，转（2）。

例3 求图G（如图（a）所示）的最大匹配，其中$V_1=\{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$。

(1)任取一个匹配 $M=\{v_1u_1，\ v_3u_3，\ v_5u_5\}$，如图（a）的红边所示。

(2)显然V_1中存在非饱和点，取其中一个 v_2，令$X=\{v_2\}$，$Y=\Phi$。

① 因$N(X)=\{u_1, u_3\}\neq Y$，故取 $u_1\in N(X)\setminus Y=N(X)=\{u_1, u_3\}$。



(a)

② u_1为非饱和点，且 $v_1u_1\in M$，令 $X=X\cup\{v_1\}=\{v_1,v_2\}$，$Y=Y\cup\{u_1\}=\{u_1\}$。

③ 因$N(X)=\{u_1, u_2, u_3\}\neq Y$，故取 $u_2\in N(X)\setminus Y=\{u_2, u_3\}$。

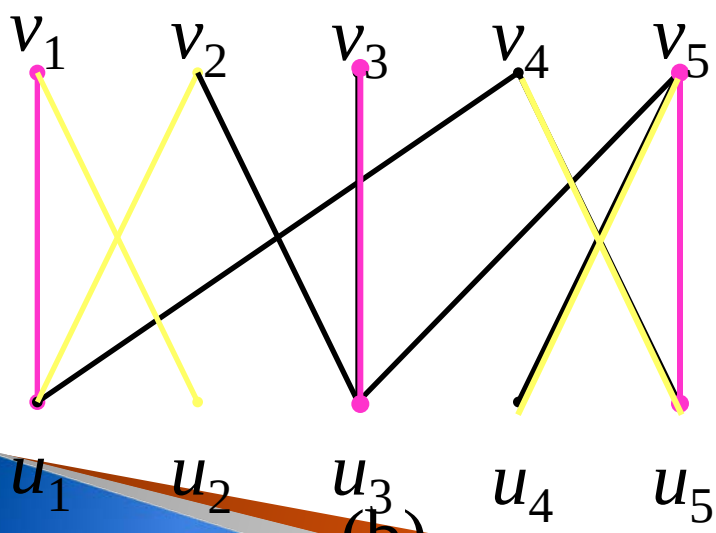
④ u_2 为非饱和点，得M可扩路$\Gamma=v_2u_1v_1u_2$

⑤ 取$M=(M\cup E(\Gamma))\backslash(M\cap E(\Gamma))=\{v_2u_1, v_1u_2, v_3u_3, v_5u_5\}$，如图（b）中的红边。

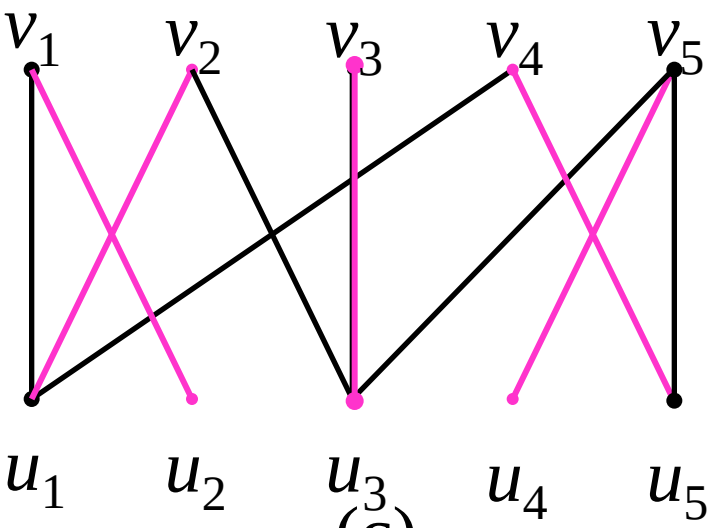
(3)取V_1的非饱和点 v_4。从v_4出发重复（2）的过程得M可扩路 $\Gamma=v_4u_5v_5u_4$

取$M=\{v_1u_2，v_2u_1，v_3u_3，v_4u_5，v_5u_4\}$，如图（c）中红边。

(4)V_1已无非饱和点，故结束。



(b)



(c)