

Numerical Computing Methods

数值计算方法

LI, Xiao Peng

李晓鹏

(Email: x.p.li@szu.edu.cn)

Shenzhen University

18 Sep. 2023

解线性方程组的直接法

- ① Gauss消去法
- ② Gauss列主元素消去法
- ③ 直接三角分解法
- ④ 平方根法
- ⑤ 追赶法

解线性方程组的直接法

① Gauss消去法

② Gauss列主元素消去法

③ 直接三角分解法

④ 平方根法

⑤ 追赶法

研究对象与特点

大量的科学与工程实际问题常常可以归结为求解含有多个未知量 x_1, x_2, \dots, x_n 的线性代数方程组求解。

即求：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (2.1)$$

其矩阵表示形式为:

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

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

当线性方程组的阶数较高时，用我们熟悉的克莱姆法则并不实际。

克拉默法则

克拉默法则是一种解决线性方程组的解析方法，适用于方程数等于未知数个数的情况，即 $n \times n$ 的系统。该方法是以瑞典数学家加布里埃尔·克拉默命名的。

克拉默法则可以通过如下步骤求解该线性方程组：

1. 首先计算矩阵 A 的行列式 $|A|$ 。
2. 对每一个未知数 x_i ，通过将 A 中的第 i 列替换为 b ，并计算得到的新矩阵的行列式 $|A_i|$ 。
3. 每一个未知数 x_i 可以通过 $x_i = \frac{|A_i|}{|A|}$ 计算得出。

用这种方式，你就能求出方程组的唯一解。

Remark: 克莱姆法则虽然在理论上可以求解任何 $n \times n$ 线性方程组（行列式不为 0 的情况下），但由于计算复杂度较高（大约为 $(n+1)! + n$ ），当 $n = 20$ 时，每秒 1 亿次运算速度的计算机要算 30 多万年！因此，对于大规模问题，通常会使用数值方法如高斯消元法、LU 分解等。

线性代数方程组求解

常用的线性代数方程组解法可分为直接法和迭代法两种

1. **直接法:** 只包含有限次四则运算。若在计算过程中都不发生舍入误差的假定下, 计算结果就是原方程组的精确解。
2. **迭代法:** 把方程组的解向量看作是某种极限过程的极限, 而且实现这一极限过程每一步的结果是把前一步所得的结果施行相同的演算步骤得到的。

Remark: 由于运算过程中舍入误差的存在, 实际上直接方法得到的解也是方程组的近始解。

将原方程化为一个或两个三角形方程组求解：包括

1. Gauss 消去法
2. 直接三角分解法

三角形方程组的解法:

对于如下所示的下三角方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 & = b_2 \\ & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n & = b_n \end{cases}$$

当 $a_{ii} \neq 0, (i = 1, 2, \dots, n)$ 时, 有如下解法

$$\begin{cases} x_1 & = b_1/a_{11} \\ x_k & = (b_k - a_{k1}x_1 - a_{k2}x_2 - \cdots - a_{k,k-1}x_{k-1})/a_{kk} \\ & (k = 2, \dots, n) \end{cases}$$

上述方法称为**前推算法**

例：求解所示的下三角方程组

$$\begin{cases} 5x_1 & = 10 \\ 2x_1 + 2x_2 & = 6 \\ x_1 + 3x_2 + 4x_3 & = 5 \end{cases}$$

例题

例：求解所示的下三角方程组

$$\begin{cases} 5x_1 & = 10 \\ 2x_1 + 2x_2 & = 6 \\ x_1 + 3x_2 + 4x_3 & = 5 \end{cases}$$

解：

$$x_1 = 2, x_2 = 1, x_3 = 0$$

对于如下所示的下三角方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (2.2)$$

当 $a_{ii} \neq 0, (i = 1, 2, \dots, n)$ 时, 有如下解法

$$\begin{cases} x_n = b_n/a_{nn} \\ x_k = (b_k - a_{k,k+1}x_{k+1} - \cdots - a_{k,n}x_n)/a_{kk} \\ (k = n-1, n-2, \dots, 1) \end{cases}$$

上述方法称为回代算法

例题

例：求解所示的下三角方程组

$$\begin{cases} 6x_1 + 2x_2 - x_3 = 12 \\ 4x_2 + x_3 = 6 \\ 2x_3 = 4 \end{cases}$$

例题

例：求解所示的下三角方程组

$$\begin{cases} 6x_1 + 2x_2 - x_3 = 12 \\ 4x_2 + x_3 = 6 \\ 2x_3 = 4 \end{cases}$$

解：

$$x_1 = 2, x_2 = 1, x_3 = 2$$

由于三角形方程组的求解过程很简单，因此只要能将方程组化为等价的三角形方程组，则很容易求解。

Gauss 消去法

Gauss 消去法的基本思想就是通过逐步消元将线性方程组 (2.1) 化为系数矩阵为上三角形矩阵的同解方程组，然后用回代算法解此三角形方程组，并得到原方程组的解。

1. 将线性方程组 $Ax = b$ 化为上三角形方程组 (2.2) 的计算过程叫**消元**；
2. 自下而上解方程组 (2.2)，计算 $x_n, x_{n-1}, \dots, x_2, x_1$ 的过程叫**回代**。

消元: 矩阵的初等变换:

- 交换矩阵的两行（列）
- 以一个非零数 c 乘矩阵的某一行（列）
- 把矩阵的某一行（列）的 c 倍加于另一行（列）上

设系数矩阵 \mathbf{A} ($\det \mathbf{A} \neq 0$) 非奇异, 则 Gauss 消去法的具体过程描述如下:

构造 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的增广矩阵

$$(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = (\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

使用矩阵的**行初等变换**将增广矩阵化简为**上三角矩阵**。

Gauss消去法

计算行乘数: $m_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}, i = 2, 3, \dots, n$

第*i*行的元素减去第一行的对应元素乘以 m_{i1}

$$\Rightarrow (\mathbf{A}^{(2)}, \mathbf{b}^{(2)}) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

最终得到

$$\Rightarrow (\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{b}^{(n)}) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

当 $a_{ii} \neq 0, (i = 1, 2, \dots, n)$ 时, 有如下解法

$$\begin{cases} x_n &= b_n/a_{nn} \\ x_k &= (b_k - a_{k,k+1}x_{k+1} - \dots - a_{k,n}x_n)/a_{kk} \\ &(k = n-1, n-2, \dots, 1) \end{cases}$$

Remark: 在消去过程中, 消去过程能够进行的前提条件是 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 。当 $\det A \neq 0$ 时方程组存在唯一解, 但未必能满足 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 的条件。要使 Gauss 顺序消去法能够求得方程组的解, 应满足如下的定理:

定理: 用高斯顺序消去法能够求解方程组 $Ax = b$ 的解的充要条件为 A 的各阶顺序主子式均不为零。

1. 当 $\det A \leq 0$, $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 此时高斯顺序消去法能进行下去, 但不能求出唯一解。
2. 当 $a_{kk}^{(k)} \neq 0 (k = 1, 2, \dots, n)$ 均不为零时, 高斯顺序消去法能进行下去. 但当 $|a_{kk}^{(k)}| \approx 0$ 或相对于 $|a_{ik}^{(k)}| (i = k + 1, k + 2, \dots, n)$ 比较小时, 计算时产生的舍入误差将导致计算结果误差增大。
3. 由于舍入误差的原因, Gauss 顺序消去法不是一个实用的方法, 实用中应该采用选主元的 Gauss 消去法。

例：求解所示的下三角方程组

$$2x_1 + 3x_2 - x_3 + 4x_4 = 10,$$

$$3x_1 - x_2 + 2x_3 + x_4 = 5,$$

$$x_1 + x_2 - 2x_3 - 3x_4 = -4,$$

$$4x_1 - 2x_2 + x_3 + 2x_4 = 8.$$

例题

例：求解所示的下三角方程组

$$2x_1 + 3x_2 - x_3 + 4x_4 = 10,$$

$$3x_1 - x_2 + 2x_3 + x_4 = 5,$$

$$x_1 + x_2 - 2x_3 - 3x_4 = -4,$$

$$4x_1 - 2x_2 + x_3 + 2x_4 = 8.$$

$$(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = (\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}) = \begin{bmatrix} 2 & 3 & -1 & 4 & 10 \\ 3 & -1 & 2 & 1 & 5 \\ 1 & 1 & -2 & -3 & -4 \\ 4 & -2 & 1 & 2 & 8 \end{bmatrix}$$

例题

$$(\mathbf{A}^{(2)}, \mathbf{b}^{(2)}) = \begin{bmatrix} 2 & 3 & -1 & 4 & 10 \\ 0 & -5.5 & 3.5 & -5 & -10 \\ 0 & -0.5 & -1.5 & -5 & -9 \\ 0 & -8 & 3 & -6 & -12 \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{A}^{(3)}, \mathbf{b}^{(3)}) = \begin{bmatrix} 2 & 3 & -1 & 4 & 10 \\ 0 & -5.5 & 3.5 & -5 & -10 \\ 0 & 0 & -1.8182 & -4.5455 & -8.0909 \\ 0 & & -2.0909 & -1.2727 & -2.5455 \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{A}^{(4)}, \mathbf{b}^{(4)}) = \begin{bmatrix} 2 & 3 & -1 & 4 & 10 \\ 0 & -5.5 & 3.5 & -5 & -10 \\ 0 & 0 & -1.8182 & -4.5455 & -8.0909 \\ 0 & & & 6.5000 & 11.8499 \end{bmatrix}$$

解线性方程组的直接法

① Gauss消去法

② Gauss列主元素消去法

③ 直接三角分解法

④ 平方根法

⑤ 追赶法

Gauss列主元素消去法

在 Gauss 消元过程中, 位于矩阵 $(\mathbf{A}^{(k)}, \mathbf{b}^{(k)})$ 的主对角线上 (k, k) 位置上的元素 $a_{kk}^{(k)}$ 称为第 k 步的主元。

$$(\mathbf{A}^{(k)}, \mathbf{b}^{(k)}) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

例题

下面举例说明“小主元”对解的精度的影响

例: 用 Gauss 消去法解线性方程组

$$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 \\ -2 & 1.072 & 5.643 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

用8位十进制尾数的浮点数计算。增广矩阵

$$(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = (\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}) = \begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{bmatrix}$$

例题

在Gauss消去法中，“小主元”在计算机有限字长下可能会造成较大舍入误差。

$$(\mathbf{A}^{(2)}, \mathbf{b}^{(2)}) = \begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ 0.2 \times 10^9 & 0.3 \times 10^9 & 0.1 \times 10^9 & \\ 0.4 \times 10^9 & 0.6 \times 10^9 & 0.2 \times 10^9 & \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{A}^{(3)}, \mathbf{b}^{(3)}) = \begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ 0.2 \times 10^9 & 0.3 \times 10^9 & 0.1 \times 10^9 & \\ & 0 & 0 & \end{bmatrix}$$

Gauss列主元素消去法

这一结果表示方程组有无限多个解。计算机将给出“无唯一解”信息。但是，实际上，原方程组有唯一解。

在计算过程中舍入误差增大迅速，造成计算解与真解相差甚远，这一方法就是不稳定的方法，反之，在计算过程中的舍入误差增大能得到控制，该方法就是稳定的。**小主元是不稳定的根源**，这就需要采用“选主元素”技术，即选取绝对值最大的元素作为主元。

称每一步都按列选主元的 Gauss 消去法为 Gauss 列主元素消去法，满足

$$|a_{kk}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|, k = 1, 2, \dots, n - 1 \quad (2.3)$$

例题

例: 用 Gauss 列主元素消去法解方程组

$$\begin{aligned}(\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}) &= \begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{bmatrix} \\ \Rightarrow (\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}) &= \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

经过第 1 次消元, 得

$$(\mathbf{A}^{(2)}, \mathbf{b}^{(2)}) = \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0.3716 \times 10^1 & 0.18015 \times 10^1 & 0.5 & \\ 0.2 \times 10^1 & 0.3 \times 10^1 & 0.1 \times 10^1 & \end{bmatrix}$$

例题

经过第 2 次消元, 得

$$(\mathbf{A}^{(3)}, \mathbf{b}^{(3)}) = \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ & 0.3716 \times 10^1 & 0.18015 \times 10^1 & 0.5 \\ & & 0.18655541 \times 10^1 & 0.68513854 \end{bmatrix}$$

回代求得解

$$\bar{\mathbf{x}} = [-0.49105820, -0.05088607, 0.36725739]^T$$

实际上, 方程组的 9 位有效数字精确解为

$$\mathbf{x} = [-0.491058227, -0.050886075, 0.3672573984]^T$$

可见用 Gauss 列主元素法计算, 得到了一个高精度的近似解。

例题

例: 用 Gauss 列主元素消去法解方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ 2 & 5 & 3 & -2 \\ -2 & -2 & 3 & 5 \\ 1 & 3 & 2 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}$$

例题

例: 用 Gauss 列主元素消去法解方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ 2 & 5 & 3 & -2 \\ -2 & -2 & 3 & 5 \\ 1 & 3 & 2 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}$$

解:

$$(\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}) = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 & -1 \\ 2 & 5 & 3 & -2 & 3 \\ -2 & -2 & 3 & 5 & 15 \\ 1 & 3 & 2 & 5 & 9 \end{bmatrix}$$

例题

$$(\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}) = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 3 & -2 & 3 \\ 1 & 2 & 1 & -2 & -1 \\ -2 & -2 & 3 & 5 & 15 \\ 1 & 3 & 2 & 5 & 9 \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{A}^{(2)}, \mathbf{b}^{(2)}) = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 3 & -2 & 3 \\ 0 & -0.5 & -0.5 & -1 & -2.5 \\ 0 & 3 & 6 & 3 & 18 \\ 0 & 0.5 & 0.5 & 6 & 7.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 3 & -2 & 3 \\ 0 & 3 & 6 & 3 & 18 \\ 0 & -0.5 & -0.5 & -1 & -2.5 \\ 0 & 0.5 & 0.5 & 6 & 7.5 \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{A}^{(3)}, \mathbf{b}^{(3)}) = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 3 & -2 & 3 \\ 0 & 3 & 6 & 3 & 18 \\ 0 & 0 & 0.5 & -0.5 & 0.5 \\ 0 & 0 & -0.5 & 5.5 & 4.5 \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{A}^{(4)}, \mathbf{b}^{(4)}) = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 3 & -2 & 3 \\ 0 & 3 & 6 & 3 & 18 \\ 0 & 0 & 0.5 & -0.5 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 5 \end{bmatrix}$$

消元过程与系数矩阵的分解

Gauss 消元过程可用矩阵乘法实现，分两种情况：

1. 不带行交换的消元过程
2. 带有行交换的消元过程

不带行交换的消元过程

令

$$\mathbf{L}_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & 0 \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & & \\ & 0 & -m_{k+2,k} & & 1 & & \\ & & \vdots & & & 0 & \\ & & -m_{n,k} & & & & 1 \end{bmatrix}$$

其中, $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, i = k + 1, k + 2, \dots, n$ (对角元素作分母)

矩阵 \mathbf{L}_k (高斯(Gauss)变换) 为指标是 k 的初等下三角矩阵。显然:

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

例题

例

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -2 & 2 & -2 \\ 4 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$
$$\mathbf{L}_1 = ?$$

例题

例

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

$$\mathbf{L}_1 = ?$$

$$\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L}_1 \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 4 & 1 \end{bmatrix}$$

不带行交换的消元过程

于是, Gauss 消元过程可表示为

$$\mathbf{L}_{n-1}\mathbf{L}_{n-2}\cdots\mathbf{L}_1(\mathbf{A},\mathbf{b}) = (\mathbf{A}^{(n)},\mathbf{b}^{(n)})$$

因此

$$\begin{aligned}\mathbf{L}_{n-1}\mathbf{L}_{n-2}\cdots\mathbf{L}_1\mathbf{A} &= \mathbf{A}^{(n)} \\ \Rightarrow \mathbf{A} &= \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\cdots\mathbf{L}_{n-1}^{-1}\mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{LU}\end{aligned}$$

不带行交换的消元过程

其中

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1^{-1} \mathbf{L}_2^{-1} \cdots \mathbf{L}_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ m_{21} & 1 & & & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & & \\ m_{n-1,1} & m_{n-1,2} & \cdots & \cdots & & 1 & \\ m_{n,1} & m_{n,2} & \cdots & \cdots & m_{mn,n-1} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{A}^{(n)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{21}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

例题

例：用矩阵乘法将下述矩阵化为上三角矩阵。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & -2 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 4 \\ 6 & 4 & 2 & 6 \end{bmatrix}$$

例题

例：用矩阵乘法将下述矩阵化为上三角矩阵。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & -2 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 4 \\ 6 & 4 & 2 & 6 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{L}_1\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 6 \\ 0 & 1 & 2 & 9 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & 4 & 6 \end{bmatrix}$$

例题

$$\mathbf{L}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -4 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & -18 \end{bmatrix}$$

不带行交换的消元过程

不带行交换的 Gauss 消元过程产生了一个单位下三角形矩阵L和一个上三角矩阵U，且

$$A = LU \quad (2.4)$$

称之为矩阵 A 的 **LU 分解**。

定理: 设 n 阶方阵 A 的顺序主子式 D_1, D_2, \dots, D_{n-1} 均不为 0，则 A 的 LU 分解式 (2.4) 式存在且唯一。

带有行交换的消元过程

在第 k 步消元时，先交换 (A^k, \mathbf{b}^k) 的第 k 行与 i_k 行后再消元，即

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

$$\mathbf{I}_{i_k k} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & & \\ & & 0 & & & & 1 & & \\ & & & 1 & & & & & \\ & & & & \dots & & & & \\ & 1 & & & & & 0 & & \\ & & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

例题

例:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \\ -1 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{I}_{23} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

例题

例:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \\ -1 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{I}_{23} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{23}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \\ -1 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

问题: $\mathbf{A}\mathbf{I}_{23} = ?$

例题

例:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \\ -1 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{I}_{23} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{23}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \\ -1 & -2 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

问题: $\mathbf{A}\mathbf{I}_{23} = ?$ 交换两列

Gauss消去法的运算量

- 计算机中，完成一次乘法的时间远超过一次加法。因此，若一个算法中，乘法与加法运算次数相当，通常用乘、除法的次数来衡量运算量大小。
- 在第 k 步消元计算中，做乘法 $(n-k)(n-k+1)$ 次、除法 $(n-k)$ 次。因此， $(n-1)$ 步消元共做乘除法的总次数

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k)(n-k+1) = \frac{n^2}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5n}{6}$$

- 回代过程共做乘除法的次数:

$$\sum_{i=1}^n (n-i+1) = \frac{n^2}{2} + \frac{n}{2}$$

- Gauss 消去法中乘除法的总次数为

$$MD = \frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3} = \frac{n^3}{3} + O(n^2)$$

矩阵运算中的乘除法计算

如果已知， A 和 x ，要得到 b ，一共需要执行多少次乘法？

$$Ax = b$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

用 Gauss 列主元消去法解线性方程组 $Ax = b$ ，其算法可分成四个模块：

1. 选主元；
2. 换行；
3. 消元；
4. 回代

算法的自然语言表达：

1. 输入方程组维数 N ，增广矩阵 $[A, b]$ ，控制条件转移精度 EPS ；

2. 对于 $k = 1, 2, \dots, N - 1$

- 2.1 $A(k, k) \Rightarrow P, k \Rightarrow I_0$

- 2.2 对于 $i = k, k + 1, \dots, N$ ，如果 $|A(i, k)| > |P|$ ，则

$$A(i, k) \Rightarrow P, \quad i \Rightarrow I_0$$

- 2.3 如果 $|P| \leq EPS$ ，转 7

- 2.4 如果 $I_0 = k$ ，转 2.6，否则

消元过程与系数矩阵的分解

2.5 对于 $j = k, \dots, N + 1$

$$\mathbf{A}(k, j) \Rightarrow \omega; \mathbf{A}(I_0, j) \Rightarrow \mathbf{A}(k, j); \omega \Rightarrow \mathbf{A}(I_0, j)$$

2.6 对于 $i = k + 1, \dots, N$

2.6.1 $\mathbf{A}(i, k) / \mathbf{A}(k, k) \Rightarrow \mathbf{A}(i, k)$

2.6.2 对于 $j = k, \dots, N + 1$

$$\mathbf{A}(i, j) - \mathbf{A}(i, k) * \mathbf{A}(k, j) \Rightarrow \mathbf{A}(i, j)$$

/ 回代求解

3. 如果 $\mathbf{A}(N, N) = 0$, 转 7

4. $\mathbf{A}(N, N + 1) / \mathbf{A}(N, N) \Rightarrow A(N, N + 1)$

5. 对于 $k = N - 1, \dots, 2, 1$

5.1 $W = 0$

5.2 对于 $j = k + 1, \dots, N, W = W + A(k, j) * A(j, N + 1)$

5.3 $\mathbf{A}(k, N + 1) - W \Rightarrow A(k, N + 1)$

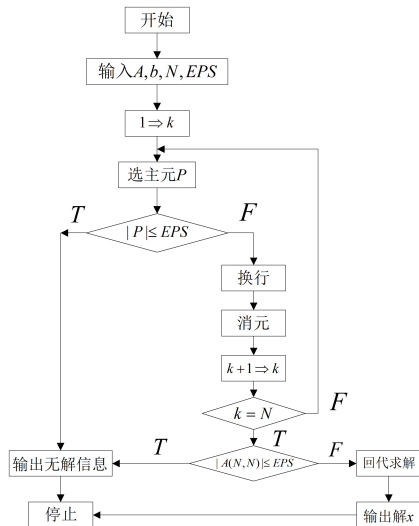
5.4 $\mathbf{A}(k, N + 1) / A(k, k) \Rightarrow A(k, N + 1)$

消元过程与系数矩阵的分解

6. 输出解 $x^T = [A(1, N + 1), A(2, N + 1), \dots, A(N, N + 1)]^T$, 转8
7. 输出 EXI = 1
8. 停机

消元过程与系数矩阵的分解

算法表达的流程图



解线性方程组的直接法

① Gauss消去法

② Gauss列主元素消去法

③ 直接三角分解法

④ 平方根法

⑤ 追赶法

直接三角分解法

基本三角分解法

Doolittle 分解: 把矩阵 A 分解成一个单位下三角阵 L 和一个上三角矩阵 U 的乘积

设 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 的各阶顺序主子式均不为 0, 则

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ & & u_{nn} \end{bmatrix} \equiv LU$$

行号 $r \leq$ 列号 i

$$a_{ri} = \sum_{k=1}^r l_{rk} u_{ki}, \quad (i = r, \dots, n; r = 1, 2, \dots, n)$$

行号 $i >$ 列号 r

$$a_{ir} = \sum_{k=1}^r l_{ik} u_{kr}, \quad (i = r + 1, \dots, n; r = 1, 2, \dots, n - 1)$$

Doolittle分解 (杜利特尔)

1) 当 $r = 1$ 时, 解得

$$(U \text{ 的第 } 1 \text{ 行不变}) \quad u_{1i} = a_{1i}, \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$(L \text{ 的第 } 1 \text{ 列}) \quad l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}, \quad (i = 2, 3, \dots, n)$$

2) 第 $r > 1$ 列元素的计算公式

$$u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki}, \quad (i = r, \dots, n; r = 2, \dots, n)$$

$$l_{ir} = \frac{a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr}}{u_{rr}}, \quad (i = r + 1, \dots, n; r = 2, \dots, n - 1)$$

先算 U 的第 r 行, 后算 L 的第 r 列, 依次交替进行

Doolittle分解 (杜利特尔)

如何记忆 Doolittle 分解的求解公式？

$$\begin{array}{ccccccc} \mathbf{u}_{11} & \mathbf{u}_{12} & \mathbf{u}_{13} & \cdots & \mathbf{u}_{1n} & \text{Step1} & \\ \mathbf{l}_{21} & \mathbf{u}_{22} & \mathbf{u}_{23} & \cdots & \mathbf{u}_{2n} & \text{Step3} & \\ \mathbf{l}_{31} & \mathbf{l}_{32} & \mathbf{u}_{33} & \cdots & \mathbf{u}_{3n} & \text{Step5} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ \mathbf{l}_{n1} & \mathbf{l}_{n2} & \mathbf{l}_{n3} & \cdots & \mathbf{u}_{nn} & \text{Step2n-1} & \\ \text{Step2} & \text{Step4} & \text{Step6} & \cdots & \text{Step2(n-1)} & & \end{array}$$

先算 U 的第 r 行, 后算 L 的第 r 列, 依次交替进行

Crout分解 (克劳特)

若 $A = LU$ 分解中, U 为**单位**上三角阵, L 为下三角阵, 则

$$l_{ir} = a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki}, \quad \begin{array}{l} i = r, \dots, n \\ r = 2, \dots, n \end{array}$$
$$u_{ri} = \frac{a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr}}{l_{rr}}, \quad \begin{array}{l} i = r + 1, \dots, n \\ r = 2, \dots, n - 1 \end{array}$$

先算 L 的第 r 列, 后算 U 的第 r 行.

直接三角分解法

$$A = LU \Rightarrow L(Ux) = b$$

Doolittle 分解的求解公式:

$$\text{先求 } Ly = b: \begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_r = b_r - \sum_{i=1}^{r-1} l_{ri}y_i, \quad r = 2, \dots, n \end{cases}$$

$$\text{再求 } Ux = y: \begin{cases} x_n = \frac{y_n}{u_{nn}} \\ x_r = \frac{y_r - \sum_{i=r+1}^n u_{ri}x_i}{u_{rr}}, \quad r = n-1, \dots, 1 \end{cases}$$

Crout 分解的求解公式:

$$\text{先求 } Ly = b: \begin{cases} y_1 = \frac{b_1}{l_{11}} \\ y_r = \frac{b_r - \sum_{i=1}^{r-1} l_{ri}y_i}{l_{rr}}, \quad r = 2, \dots, n \end{cases}$$

$$\text{再求 } Ux = y: \begin{cases} x_n = y_n \\ x_r = y_r - \sum_{i=r+1}^n u_{ri}x_i, \quad r = n-1, \dots, 1 \end{cases}$$

例题

例: 用 Doolittle 法解方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3 & -4 & -12 & 13 \\ 1 & 2 & 3 & -4 \\ 4 & 14 & 9 & -13 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 5 \\ -2 \\ 7 \end{bmatrix}$$

例题

例: 用 Doolittle 法解方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3 & -4 & -12 & 13 \\ 1 & 2 & 3 & -4 \\ 4 & 14 & 9 & -13 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 5 \\ -2 \\ 7 \end{bmatrix}$$

解: Doolittle 分解公式得

$$(u_{11}, u_{12}, u_{13}, u_{14}) = (a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{14}) = (2, 10, 0, -3)$$

$$(l_{21}, l_{31}, l_{41})^T = (-3/2, 1/2, 2)^T$$

$$(u_{22}, u_{23}, u_{24}) = (11, -12, 17/2) \quad (l_{32}, l_{42})^T = (-3/11, -6/11)^T$$

$$(u_{33}, u_{34}) = (-3/11, -2/11) \quad l_{43} = -9 \quad u_{44} = -4$$

- 1) 解 $Ly = b$, 可得 $y = (10, 20, -17/11, -16)^T$
- 2) 解 $Ux = y$, 得 $x = (1, 2, 3, 4)^T$

例题

计算过程中矩阵变化详细情况:

$$\begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3 & -4 & -12 & 13 \\ 1 & 2 & 3 & -4 \\ 4 & 14 & 9 & -13 \end{bmatrix} \xrightarrow{r=1} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3/2 & -4 & -12 & 13 \\ 1/2 & 2 & 3 & -4 \\ 2 & 14 & 9 & -13 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r=2} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 \\ 1/2 & -3/11 & 3 & -4 \\ 2 & -6/11 & 9 & -13 \end{bmatrix} \xrightarrow{r=3} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 \\ 1/2 & -3/11 & -3/11 & -2/11 \\ 2 & -6/11 & -9 & -13 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r=4} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 \\ 1/2 & -3/11 & -3/11 & -2/11 \\ 2 & -6/11 & -9 & -4 \end{bmatrix}$$

例题

$$(A^4, b^4) = \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 \\ 1/2 & -3/11 & -3/11 & -2/11 \\ 2 & -6/11 & -9 & -4 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -3/2 & 1 & & & \\ 1/2 & -3/11 & 1 & & \\ 2 & -6/11 & -9 & 1 & \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ & 11 & -12 & 17/2 \\ & & -3/11 & -2/11 \\ & & & -4 \end{bmatrix}$$

1) 解 $Ly = b$, 可得 $y = [10, 20, -17/11, -16]^T$

2) 解 $Ux = y$, 得 $x = [1, 2, 3, 4]^T$

紧凑格式的 Doolittle

由于在计算 U 和解 y 的方程中, 遵循相似的规则, 因此, 提出如下方法:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & u_{34} \end{bmatrix} \begin{matrix} r = 1 \\ r = 2 \\ r = 3 \end{matrix}$$

$r = 1 \quad r = 2$

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & u_{34} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & y_1 \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & y_2 \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & y_3 \end{bmatrix}$$

1) 解 $Ly = b$, 可得 y ←省略

2) 解 $Ux = y$, 得 x

例：用紧凑格式的 Doolittle 法解上述例题中的方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3 & -4 & -12 & 13 \\ 1 & 2 & 3 & -4 \\ 4 & 14 & 9 & -13 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 5 \\ -2 \\ 7 \end{bmatrix}$$

例题

解:

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 & 10 \\ -3 & -4 & -12 & 13 & 5 \\ 1 & 2 & 3 & -4 & -2 \\ 4 & 14 & 9 & -13 & 7 \end{bmatrix} \xrightarrow{r=1} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 & 10 \\ -3/2 & -4 & -12 & 13 & 5 \\ 1/2 & 2 & 3 & -4 & -2 \\ 2 & 14 & 9 & -13 & 7 \end{bmatrix} \\ &\xrightarrow{r=2} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 & 10 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 & 20 \\ 1/2 & -3/11 & 3 & -4 & -2 \\ 2 & -6/11 & 9 & -13 & 7 \end{bmatrix} \\ &\xrightarrow{r=3} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 & 10 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 & 20 \\ 1/2 & -3/11 & -3/11 & -2/11 & -17/11 \\ 2 & -6/11 & -9 & -13 & 7 \end{bmatrix} \\ &\xrightarrow{r=4} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 & 10 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 & 20 \\ 1/2 & -3/11 & -3/11 & -2/11 & -17/11 \\ 2 & -6/11 & -9 & -4 & -16 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

例题

$$\xrightarrow{r=4} \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 & 10 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 & 20 \\ 1/2 & -3/11 & -3/11 & -2/11 & -17/11 \\ 2 & -6/11 & -9 & -4 & -16 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -3/2 & 1 & & & \\ 1/2 & -3/11 & 1 & & \\ 2 & -6/11 & -9 & 1 & \end{bmatrix} \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ & 11 & -12 & 17/2 \\ & & -3/11 & -2/11 \\ & & & -4 \end{bmatrix} \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 10 \\ 20 \\ -\frac{17}{11} \\ -16 \end{bmatrix}$$

解 $\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y}$ 计算得: $\mathbf{x} = [1, 2, 3, 4]^T$

部分选主元的 Doolittle 分解

Doolittle 法或 Crout 法中的 u_{rr} 或 l_{rr} ($r = 1, 2, \dots, n$) 称为主元素 Δ

部分选主元Doolittle法: 在每一步分解时, 先选列主元, 再进行分解计算。过程描述如下:

设用紧凑格式的 Doolittle 法已完成了第 $r - 1$ 步分解:

$$\mathbf{A} \rightarrow \begin{bmatrix} u_{11} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & u_{1r} & \cdots & u_{1n} & u_{1,n+1} \\ l_{21} & u_{22} & & & & & & & \vdots \\ \vdots & l_{32} & \ddots & & & & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & & & & \vdots \\ & & & & u_{r-1,r-1} & u_{r-1,r} & \cdots & u_{r-1,n} & u_{r-1,n+1} \\ l_{r1} & l_{r2} & & & l_{r,r-1} & a_{rr} & \cdots & a_{rn} & a_{r,n+1} \\ \vdots & & & & & & & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & & & l_{n,r-1} & a_{nr} & \cdots & a_{nn} & a_{n,n+1} \end{bmatrix}$$

部分选主元的Doolittle分解

第 r 步分解：首先在数组 A 的第 r 列主对角元以下 (含主对角元) 选主元, 步骤如下:

1. 计算中间量 S_i , 并存入 $A(i, r)$,

$$\mathbf{A}(i, r) \leftarrow \mathbf{S}_i = \mathbf{A}(i, r) - \sum_{k=1}^{r-1} \mathbf{A}(i, k)\mathbf{A}(k, r)$$
$$(i = r, \dots, n)$$

2. 选绝对值最大的 S_i , 即确定行号 i_r , 使满足

$$|\mathbf{S}_{i_r}| = \max_{r \leq i \leq N} |\mathbf{S}_i|$$

3. **换行**: 如果 $i_r \neq r$, 则交换数组 A 中的第 r 行与 i_r 行, 其中, 新位置主元素仍记为

$$\mathbf{u}_{rr} = \mathbf{A}(r, r)$$

4. 分解计算:

$$\mathbf{A}(i, r) \leftarrow l_{ir} = \frac{\mathbf{A}(i, r)}{\mathbf{A}(r, r)},$$

$$(i = r + 1, \dots, n; r = 1, 2, \dots, n - 1)$$

$$\mathbf{A}(r, i) \leftarrow u_{ri} = \mathbf{A}(r, i) - \sum_{k=1}^{r-1} \mathbf{A}(r, k)\mathbf{A}(k, i)$$

$$(i = r + 1, \dots, n + 1; r = 1, \dots, n)$$

例题

例：用部分选主元的 Doollittle 法解方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 \\ 2 & -4 & 6 \\ 4 & -9 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

例题

例：用部分选主元的 Doolittle 法解方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 \\ 2 & -4 & 6 \\ 4 & -9 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

解：用紧凑式对数组 A 进行分解如下：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 & 1 \\ 2 & -4 & 6 & 4 \\ 4 & -9 & 2 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow[\substack{r=1 \\ A(i,1) \leftarrow s_i \\ i=1,2,3}]{\substack{r_1 \leftrightarrow r_3}} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 & 1 \\ 2 & -4 & 6 & 4 \\ 4 & -9 & 2 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{分解}} \begin{bmatrix} 4 & -9 & 2 & 1 \\ 1/2 & -4 & 6 & 4 \\ 1/4 & -1 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

例题

$$\begin{array}{l} \begin{array}{l} r=2 \\ A(i,2) \\ i=2,3 \\ \longrightarrow \end{array} \left[\begin{array}{cccc} 4 & -9 & 2 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 6 & 4 \\ 1/4 & 5/4 & 3 & 1 \end{array} \right] \xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_3} \left[\begin{array}{cccc} 4 & -9 & 2 & 1 \\ 1/4 & 5/4 & 3 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 6 & 4 \end{array} \right] \\ \\ \begin{array}{l} \text{分解} \\ \longrightarrow \end{array} \left[\begin{array}{cccc} 4 & -9 & 2 & 1 \\ 1/4 & 5/4 & 5/2 & 3/4 \\ 1/2 & 2/5 & 6 & 4 \end{array} \right] \xrightarrow{r=3} \begin{array}{l} \text{分解} \\ \longrightarrow \end{array} \left[\begin{array}{cccc} 4 & -9 & 2 & 1 \\ 1/4 & 5/4 & 5/2 & 3/4 \\ 1/2 & 2/5 & 4 & 32/10 \end{array} \right] \end{array}$$

于是

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ 1/4 & 1 & & \\ 1/2 & 2/5 & 1 & \end{bmatrix} \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 4 & -9 & 2 \\ & 5/4 & 5/2 \\ & & 4 \end{bmatrix} \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3/4 \\ 32/10 \end{bmatrix}$$

解 $\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y}$, 得 $\mathbf{x} = [-2.4, -1, 0.8]^T$

部分选主元的Doolittle分解

紧凑格式的 Doolittle 法还可用于解矩阵方程:

$$\mathbf{AX} = \mathbf{B}$$

其中 $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m)$, $\mathbf{B} = (\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_m)$

例题

例: 用部分选主元Doolittle法解矩阵方程 $AX = B$, 其中

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 2 & -2 & 3 & -3 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 4 & 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -8 & -16 \\ -20 & -40 \\ -2 & -4 \\ 4 & 8 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \\ x_{41} & x_{42} \end{bmatrix}$$

例题

例: 用部分选主元Doolittle法解矩阵方程 $AX = B$, 其中

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 2 & -2 & 3 & -3 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 4 & 3 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -8 & -16 \\ -20 & -40 \\ -2 & -4 \\ 4 & 8 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \\ x_{41} & x_{42} \end{bmatrix}$$

解:

$$(A, B) = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & -8 & -16 \\ 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & -2 & -4 \\ 1 & -1 & 4 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{l} \xrightarrow{r=1} \\ r_1 \leftrightarrow r_2 \end{array} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1 & -1 & 2 & -1 & -8 & -16 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & -2 & -4 \\ 1 & -1 & 4 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

部分选主元的Dolittle分解

$$\xrightarrow{\text{分解}} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1/2 & -1 & 2 & -1 & -8 & -16 \\ 1/2 & 1 & 1 & 0 & -2 & -4 \\ 1/2 & -1 & 4 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[\substack{\text{计算} \\ s_3, s_4}]{\rightarrow} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1/2 & 0 & 2 & -1 & -8 & -16 \\ 1/2 & 2 & 1 & 0 & -2 & -4 \\ 1/2 & 0 & 4 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[r_2 \leftrightarrow r_3]{\rightarrow} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1/2 & 2 & 1 & 0 & -2 & -4 \\ 1/2 & 0 & 2 & -1 & -8 & -16 \\ 1/2 & 0 & 4 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

直接三角分解法

$$\xrightarrow{\text{分解}} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1/2 & 2 & -1/2 & 3/2 & 8 & 16 \\ 1/2 & 0 & 2 & -1 & -8 & -16 \\ 1/2 & 0 & 4 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{计等 } S_3, S_4} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1/2 & 2 & -1/2 & 3/2 & 8 & 16 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & -1 & -8 & -16 \\ 1/2 & 0 & 5/2 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3 \leftrightarrow r_4} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1/2 & 2 & -1/2 & 3/2 & 8 & 16 \\ 1/2 & 0 & 5/2 & 3 & 4 & 8 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & -1 & -8 & -16 \end{bmatrix}$$

下省略（见P48-50）

直接三角分解法

解线性方程组的直接法

① Gauss消去法

② Gauss列主元素消去法

③ 直接三角分解法

④ 平方根法

⑤ 追赶法

定义: 设 A 为 n 阶 ($n \geq 2$) **对称正定矩阵**, L 是非奇异下三角矩阵, 称 $A = LL^T$ 为矩阵 A 的 Cholesky 分解。

定理: n 阶 ($n \geq 2$) 对称正定矩阵 A , 一定存在如下的分解式

1. $A = LDL^T$, 其中 L 为单位下三角阵, D 是对角元全为正的对角阵, 且这种分解式唯一;
2. $A = LL^T$, 其中 L 为下三角阵, 当限定 L 的对角元为正时, $A = LL^T$ (Cholesky 分解) 的分解式唯一。

平方根法

$A = LL^T$ 中 L 元素的计算方法:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} & \end{bmatrix}$$

假定已算出 L 的第 1 至 $j-1$ 列元素, 则

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

于是

$$l_{jj} = \sqrt{\left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)}, \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$
$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}}{l_{jj}}, \quad (i = j+1, \dots, n)$$

规定: $\sum_{k=1}^0 l_{ik}l_{jk} = 0$

平方根法

方程 $Ax = b$ 的求解:

对 A 进行 Cholesky 分解后, 解 $Ax = b$ 可分为两步:

1. 解 $Ly = b$:
$$\begin{cases} y_1 = \frac{b_1}{l_{11}} \\ y_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k}{l_{ii}}, \quad i = 2, 3, \dots, n \end{cases}$$

2. 解 $L^T x = y$, 因 $l'_{ik} = l_{ki}$, 故

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

称以上公式解对称正定线性方程组的方法为平方根法。

例题

例：用平方根法解对称正定方程组

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 17/4 & 11/4 \\ 1 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

例题

例：用平方根法解对称正定方程组

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 17/4 & 11/4 \\ 1 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解：分解 A , 只对 A 的下三角部分运算即可。

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} 4 & & \\ -1 & 17/4 & \\ 1 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix} \xrightarrow{r=1} \begin{bmatrix} 2 & & \\ -1 & 17/4 & \\ 1 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix} \\ \rightarrow & \begin{bmatrix} 2 & & \\ -1/2 & 17/4 & \\ 1/2 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix} \xrightarrow{r=2} \begin{bmatrix} 2 & & \\ -1/2 & 2 & \\ 1/2 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & & \\ -1/2 & 2 & \\ 1/2 & 3/2 & 7/2 \end{bmatrix} \xrightarrow{r=3} \begin{bmatrix} 2 & & \\ -1/2 & 2 & \\ 1/2 & 3/2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 2 & & \\ -1/2 & 2 & \\ 1/2 & 3/2 & 1 \end{bmatrix}$$

解 $\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b}$, 得

$$\mathbf{y} = [0, 1/2, -3/4]^T$$

解 $\mathbf{L}^T\mathbf{x} = \mathbf{y}$,

$$\mathbf{x} = [25/64, 13/16, -3/4]^T$$

平方根法的数值稳定性

已知

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

平方根法中的分解过程没有选主元，由上式得

$$\sum_{k=1}^j l_{jk}^2 = a_{jj}, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

因此

$$0 < \max_{\substack{1 \leq k \leq j \\ 1 \leq j \leq n}} |l_{jk}| \leq \max_{1 \leq j \leq n} \sqrt{a_{jj}}$$

说明分解过程中 L 的元素的数量级不会增长，舍入误差积累不会明显增长，故平方法是数值稳定的。相反，选主元引起的行交换会破坏矩阵的对称性。

解线性方程组的直接法

① Gauss消去法

② Gauss列主元素消去法

③ 直接三角分解法

④ 平方根法

⑤ 追赶法

矩阵对角占优的概念

设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

- 若对于 $i = 1, 2, 3, \dots, n$, 不等式 $|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|$ 均成立, 且至少对某个 i_0 有 $|a_{i_0 i_0}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i_0}}^n |a_{i_0 j}|$, 则称矩阵 A **按行对角占优**。
- 若对于 $i = 1, 2, 3, \dots, n$, 均有 $|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|$, 则对称矩阵 A **按行严格对角占优**。

类似地, 也有按列对角占优和按列严格对角占优的概念。

追赶法

在一些问题中, 要利用到如下三对角线方程组

$$Ax = f$$

$$\text{其中 } A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & \\ & & & a_n & b_n & \end{bmatrix} \quad f = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

且 A 满足严格对角占优条件

$$|b_1| > |c_1| > 0$$

$$|b_i| > |a_i| + |c_i|, a_i * c_i \neq 0 \quad i = 2, 3, \dots, n - 1$$

$$|b_n| > |a_n| > 0$$

当 A 严格对角占优时, 可以证明各阶顺序主子式非零。

当 A 为上述三对角阵时, A 有更特殊的三角分解形式 $A = LU$:

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

当 L 的对角元为 1 时, 属于 Doolittle 分解;
当 U 的对角元为 1 时, 属于 Crout 分解。

追赶法 (Crout 分解)

则由

$$A = LU$$

可得

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

进一步, 解得

$$\begin{cases} \gamma_i = a_i & i = 2, \dots, n, \\ \alpha_1 = b_1, \quad \alpha_i = b_i - \gamma_i \beta_{i-1} & i = 2, \dots, n, \\ \beta_i = c_i / \alpha_i & i = 1, 2, \dots, n-1 \end{cases}$$

从形式上看, 计算为一**递推过程**: “追” 的过程

$$\alpha_1 \rightarrow \beta_1 \rightarrow \alpha_2 \rightarrow \beta_2 \rightarrow \cdots \rightarrow \alpha_{n-1} \rightarrow \beta_{n-1} \rightarrow \alpha_n$$

解方程组 $Ax = LUx = f$ 分为两步:

1) 解方程组 $Ly = f$, 即

$$\begin{cases} \alpha_1 y_1 = f_1 \\ \alpha_i y_{i-1} + \alpha_i y_i = f_i \quad (i = 2, \cdots, n) \end{cases}$$

解得

$$\begin{cases} y_1 = \frac{f_1}{\alpha_1} \\ y_i = \frac{f_i - a_i y_{i-1}}{\alpha_i} \quad (i = 2, \cdots, n) \end{cases} \quad (2.5)$$

2) 解方程组 $Ux = y$, 即

$$\begin{cases} x_i + \beta_i x_{i+1} = y_i & i = 1, 2, \dots, n-1 \\ x_n = y_n \end{cases}$$

得

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - \beta_i x_{i+1}, & i = n-1, \dots, 2, 1 \end{cases}$$

形象地称回代求解过程为“赶”的过程。

因此, 由上述过程求解方程组 $Ax = f$ 的方法称为“追赶法”。

例题

例: 用追赶法解线性方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 & & & \\ -1 & 1 & 2 & & \\ & -1 & 1 & 2 & \\ & & -1 & 1 & 2 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 7 \\ 9 \\ 11 \\ 1 \end{bmatrix}$$

例题

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

$$L = \begin{bmatrix} 2 & & & & \\ -1 & 2 & & & \\ & -1 & 2 & & \\ & & -1 & 2 & \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 1 & 1 & & & \\ & 1 & 1 & & \\ & & 1 & 1 & \\ & & & 1 & 1 \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

求解方程组 $Ly = b$, $y = [3, 5, 7, 9, 5]^T$

求解方程组 $Ux = y$, $x = [1, 2, 3, 4, 5]^T$