数值计算方法

线性方程组-Gauss消去法

信息管理与工程学院
冯银波

下三角形线性方程组的解法

- 考虑下三角形线性方程组：

$$\begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

- 简记为 $Ly = b$. L是非奇异阵，且$l_{ii} \neq 0, i = 1, \ldots, n$.
- 可依次求出$y_1, y_2, \cdots, y_n$.

$$l_{11}y_1 = b_1 \Rightarrow y_1 = \frac{b_1}{l_{11}}$$

$$l_{21}y_1 + l_{22}y_2 = b_2 \Rightarrow y_2 = \frac{b_2 - l_{21}y_1}{l_{22}}$$

以此类推，如果已知$y_1, \ldots, y_{i-1}$就可求出y_i,

$$y_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j)/l_{ii}$$

这种解法称为前代法。

前代法：算法

解下三角形方程组：前代法

算法：

用b储存y，节约内存

for j=1:$n-1$

$b(j)= b(j)/L(j,j)$;

$b(j+1:n)= b(j+1:n)- b(j)*L(j+1:n,j)$;

end

$b(n)=b(n)/L(n,n)$;

该算法所需要的加减乘除运算的次数为

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

即该算法的运算量为n^2.

上三角形线性方程组的解法

- 考虑上三角形方程组$Ux=y$，其中，U非奇异且对角元素均不为0.
- 可依次求出$x_n,x_{n-1},\cdots,x_1$.

$$x_n=\frac{y_n}{u_{nn}}$$

如果已知$x_n,\ldots,x_{i+1,}$就可求出x_i:

$$x_i=(y_i-\sum_{j=i+1}^{n}u_{ij}x_j)/u_{ii}.$$

这种解法称为回代法

回代法：算法

解上三角形方程组：回代法

算法：

for $j=n:-1:2$

$y(j)=y(j)/U(j,j)$;

$y(1:j-1)=y(1:j-1)-y(j)*U(1:j-1,j)$;

end

$y(1)=y(1)/U(1,1)$;

该算法的运算量亦为n^2.

启发：对于一般线性方程组

对于一般的线性方程组$Ax=b$,如果我们能够将A分解为$A=LU$,那么原方程的解便可由两步得到：

（1）用前代法解$Ly=b$得y

（2）用回代法解$Ux=y$得x

问题的关键在于如何将A分解为一个下三角矩阵L与一个上三角矩阵U的乘积

分解思路

- 通过一系列初等变换，将A化为上三角阵，并且保证这些初等变换的乘积是一个下三角阵
- 回忆：什么是初等变换?

(1） 交换矩阵的两行（列）；

(2） 以一个非零数k乘矩阵的某一行（列）所有元素 (3） 把矩阵的某一行所有元素乘以一个数k后加到另一行（列）对应的元素

1	0	0	0	0
0	0	0	1	0
0	0	1	0	0
0	1	0	0	0
0	0	0	0	1

1	0	0	0	0
0	3	0	0	0
0	0	1	0	0
0	0	0	1	0
0	0	0	0	1

1	0	0	0	0
0	1	0	0	0
5	0	1	0	0
0	0	0	1	0
0	0	0	0	1

Gauss 变换

考虑如下形式的下三角阵

$$L_k = I - l_k e_k^T,$$

其中，

$$l_k = \left(0, \dots, 0, l_{k+1,k}, \dots, l_{nk}\right)^T,$$

e_k为第k个分量为1的单位列向量，

L_k 称作Guass变换，形式如下：

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

Gauss变换

如果Gauss变换L_k作用于一个列向量$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)^T$,有

$$L_kx=(x_1,\dots,x_k,x_{k+1}-x_kl_{k+1,k},\dots,x_n-x_kl_{nk})^T.$$

如果选取

$$l_{ik}=\frac{x_i}{x_k},给定x_k\neq 0,$$

于是:

$$L_kx=(x_1,\dots,x_k,0,\dots,0)^T.$$

可见，通过多个Gauss变换可以将矩阵上三角化。

三角分解：A=LU

- 三角分解是指将一个方阵A分解为一个下三角矩阵L与一个上三角矩阵U的乘积. 有时简称为***LU*分解**。

举例：对以下矩阵进行三角分解：

$$A=\begin{bmatrix}1 & 4 & 7\\2 & 5 & 8\\3 & 6 & 10\end{bmatrix}$$

第一步，现将第一列的后面两个元素化为0. 取

$$L_1=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\-2 & 1 & 0\\-3 & 0 & 1\end{bmatrix},$$

于是,

$$L_1A=\begin{bmatrix}1 & 4 & 7\\0 & -3 & -6\\0 & -6 & -11\end{bmatrix}$$

三角分解：A=LU

第二步，现将第二列的最后面一个元素化为0. 取

$$L_2=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&-2&1\end{bmatrix}$$

于是,

$$L_2L_1A=\begin{bmatrix}1&4&7\\0&-3&-6\\0&0&1\end{bmatrix}=U,\text{即为上三角矩阵}$$

同时，L_2L_1为下三角矩阵。定义$L=(L_2L_1)^{-1}$, 则有$A=LU$.

$$L=(L_2L_1)^{-1}=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\3&2&1\end{bmatrix},\text{即为上三角矩阵}$$

则有$A=LU$.

Gauss消去法

对于一般的n阶矩阵，可用同样的方法进行三角分解。

记$A^{(k)}$为对原矩阵作k步Gauss变换后所得到的矩阵，即

$$A^{(k)} = L_k \cdots L_1 A, \qquad k = 1,2,\ldots,n-1$$

$$A^{(0)} = A.$$

假设已求出$k-1$个Gauss变换$L_1,\cdots,L_{k-1}$，

$$A^{(k-1)} = L_{k-1} \cdots L_1 A = \begin{bmatrix} A_{11}^{(k-1)} & A_{12}^{(k-1)} \\ 0 & A_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix},$$

其中 $A_{11}^{(k-1)}$ 是一个 $k-1$阶上三角阵，接下来就是要把$A_{22}^{(k-1)}$的第一列中除第一个元素外的其它元素化为0

Gauss消去法

$$A_{22}^{(k-1)} = \begin{bmatrix} a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

如果$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$,则可确定第k个Gauss变换:

$$L_k = I - l_k e_k^T,$$

$$l_k = \left(0, \dots, 0, l_{k+1,k}, \dots, l_{nk}\right)^{\mathrm{T}}$$

$$= \left(0, \dots, 0, \frac{a_{k+1,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}, \dots, \frac{a_{n,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}\right)^T,$$

e_k为第k个分量为1的单位列向量.

所以进行第k 步变换的前提是 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$. 称 $a_{kk}^{(k-1)}$为主元.

Gauss消去法

当$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$时，第k 步Gauss变换写成具体的矩阵形式：

$$L_k = \begin{array}{cc}
\begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -\dfrac{a_{k+1,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -\dfrac{a_{n,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} & & & 1 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \\ \\ \\ \text{第}k+1\text{行} \\ \\ \\ \end{array} \\ \text{第}k\text{列} & \end{array}$$

注意：每一步的Gauss变换如果存在，则是唯一确定的

Gauss消去法

经第k 步Gauss变换后：

$$A^{(k)} = L_k A^{(k-1)} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{bmatrix}.$$

这里的$A_{11}^{(k)}$比$A_{11}^{(k-1)}$多了一阶，$A_{22}^{(k)}$比$A_{22}^{(k-1)}$少了一阶。

重复下去…

最后可以得到三角分解$A = LU$, 其中

$$U = A^{(n-1)}$$

$$L = (L_{n-1} * \cdots * L_1)^{-1}$$

U是上三角阵, L是下三角阵.

Gauss消去法

Gauss变换的逆变换：

$$L_k = I - l_k e_k^T, \qquad L_k^{-1} = I + l_k e_k^T.$$

注意$e_k^T l_k = 0$.

同样有：$e_k^T l_{k+1} = \cdots = e_k^T l_{n-1} = 0$.

$$L_{k-1}^{-1} L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{k,k-1} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{n,k-1} & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & l_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{k,k-1} & 1 & & \\ & & l_{k+1,k-1} & l_{k+1,k} & 1 & \\ & & \vdots & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{n,k-1} & l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix}$$

Gauss消去法

不需要通过将$n-1$个Gauss变换乘起来再求逆去得到L

$$
\begin{aligned}
L &= L_1^{-1} * \cdots * L_{n-1}^{-1} \\
&= (I + l_1 e_1^T) * (I + l_2 e_2^T) * \cdots * (I + l_{n-1} e_{n-1}^T) \\
&= I + l_1 e_1^T + \cdots + l_{n-1} e_{n-1}^T
\end{aligned}
$$

L的形式如下：

$$
L = I + [l_1, l_2, \cdots, l_{n-1}, 0] = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}
$$

L是主对角元素全为1的下三角矩阵

这种计算三角分解的方法称作Gauss消去法

Gauss消去法

- 现在我们知道了$A=LU$分解过程以及L,U各自的计算方法。
- 关于计算过程的存储问题：
- $A^{(n-1)}$矩阵中，上三角部分用于存储U，下三角部分全为0，所以可以将L的下三角部分存储在$A^{(n-1)}$的下三角部分。

算法：（Gauss消去法）

for $k=1{:}n-1$

$A(k+1{:}n,k)=A(k+1{:}n,k)/A(k,k);$

$A(k+1{:}n,k+1{:}n)=A(k+1{:}n,k+1{:}n)-A(k+1{:}n,k)*A(k,k+1{:}n);$

end

Gauss消去法

该算法需要的加减乘除运算次数为

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

思考：Gauss消去法每一次变换时都要求主元不为0，那么，在什么情况下可以保证整个消去过程所碰到的主元都不为0?

主元不为0的判别条件

定理：主元$a_{kk}^{(i-1)}$(i = 1, ..., k)均不为0的充要条件是A的i阶顺序主子阵$A_i(i=1,\dots,k)$都是非奇异的。

证明：对k用数学归纳法。当$k=1$时，定理显然成立。假设定理对$1,\dots,k-1$都成立，下面只需证“若$A_1,\dots,A_{k-1}$非奇异，则A_k非奇异的充要条件是$a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$”. 经$k-1$次Gauss变化之后，

$$A^{(k-1)}=L_{k-1}\cdots L_1A=\begin{bmatrix} A_{11}^{(k-1)} & A_{12}^{(k-1)} \\ 0 & A_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix},$$

其中

$$A_{11}^{(k-1)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1,k-1}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2,k-1}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{k-1,k-1}^{(k-2)} \end{bmatrix}.$$

主元不为0的判别条件

证明继续：

所以，$A^{(k-1)}$的k阶顺序主子阵A_k的行列式为

$$\det A_k^{(k-1)} = a_{kk}^{(k-1)} * \det A_{11}^{(k-1)}.$$

注意，Gauss变换矩阵的任意顺序主子式的值均为1，所以经$k-1$次变换之后，原矩阵A的k阶顺序主子式的值与$A^{(k-1)}$的k阶顺序主子式的值相同。

所以，我们有

$$\det A_k = a_{kk}^{(k-1)} * \det A_{11}^{(k-1)}.$$

因此，A_k非奇异的充要条件是$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$. 证毕.

三角分解的存在性与唯一性

定理：若$A \in \mathbf{R}^{n\times n}$的顺序主子阵$A_k \in \mathbf{R}^{k\times k}$ $(k = 1, \ldots, n-1)$均非奇异，则存在唯一的单位下三角阵$L \in \mathbf{R}^{n\times n}$和上三角阵$U \in \mathbf{R}^{n\times n}$，使得$A = LU$.

证明思路：由以上分析易证“存在性”。“唯一性”可通过反证法证明。

例题

例：用直接三角分解法解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 18 \\ 20 \end{pmatrix}$$

解：（1）对于 $r=1$，

$$u_{11}=1 \qquad u_{12}=2 \qquad u_{13}=3$$

$$l_{21}=2 \qquad l_{31}=3$$

（2）对于 $r=2$，

$$u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}=5-2\times 2=1$$

$$u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}=2-2\times 3=-4$$

$$l_{32}=\frac{(a_{32}-l_{31}u_{12})}{u_{22}}=\frac{(1-3\times 2)}{1}=-5$$

例题

（3）$r=3$

$$u_{33}=a_{33}-(l_{31}u_{13}+l_{32}u_{23})=5-(3\times 3+(-5)\cdot(-4))=-24$$

于是

$$A=\begin{pmatrix}1 & & \\ 2 & 1 & \\ 3 & -5 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ & 1 & -4\\ & & -24\end{pmatrix}=LU$$

（4）求解：

$Ly=b$　得到

$y_1=14$

$y_2=b_2-l_{21}y_1=18-2\times 14=-10$

$y_3=b_3-(l_{31}y_1+l_{32}y_2)=20-(3\times 14+(-5)(-10))=-72$

从而 $y=(14,-10,-72)^T$

例题

由 $Ux=y$ 得到

$$x_3 = \frac{y_3}{u_{33}} = \frac{-72}{-24} = 3$$

$$x_2 = \frac{(y_2 - u_{23}x_3)}{u_{22}} = \frac{-10-(-4\times 3)}{1} = 2$$

$$x_1 = \frac{y_1 - (u_{12}x_2 + u_{13}x_3)}{u_{11}} = \frac{14-(2\times 2+3\times 3)}{1} = 1$$

$$x = (1, 2, 3)^T$$

Gauss消去法的缺陷

（1）Gauss消去法要求每一步变换时都有$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$，即主元不为0.

（2）即使主元不为0，但是主元很小时也容易产生较大误差。

例

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + 1.00x_2 = 1.00 \\ 1.00x_1 + 1.00x_2 = 2.00 \end{cases}$$

它的精确解为：

$$x_1 = \frac{10000}{9999} \approx 1.00010$$

$$x_2 = \frac{9998}{9999} \approx 0.99990$$

用顺序消去法，第一步以 0.0001 为主元，从第二个方程中消 x_1 后可得：

$$-10000x_2 = -10000 \qquad x_2 = 1.00$$

假设采用3位10进制浮点数

回代可得 $x_1 = 0.00$

显然，这不是解。

Gauss消去法的数值不稳定性

$$A = \begin{bmatrix} 0.0001 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -10000 & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_1 A = \begin{bmatrix} 0.0001 & 1 \\ 0 & -10000 \end{bmatrix} = U$$

$$L = L_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10000 & 1 \end{bmatrix}$$

假设采用3位10
进制浮点数

$$Ly = b \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10000 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -10000 \end{bmatrix}$$

$$Ux = y \Rightarrow \begin{bmatrix} 0.0001 & 1 \\ 0 & -10000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -10000 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Gauss消去法的缺陷

- 小数做分母产生误差的原因：

  溢出、大数吃小数、敏感方程（误差放大）

- 如果交换两个方程的位置，用x_1的系数1作为主元，可以得到

$$x_1 = 1.00, x_2 = 1.00,$$

  比之前精确了很多！

- 在消元过程中适当选取主元素是十分必要的。误差分析的理论和计算实践均表明：顺序消元法在系数矩阵A为对称正定时，可以保证此过程对舍入误差的数值稳定性，对一般的矩阵则必须引入选取主元素的技巧，方能得到满意的结果。

Gauss消去法的改进

交换两行顺序后：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0.0001 & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -0.0001 & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_1 A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = U$$

$$L = L_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0.0001 & 1 \end{bmatrix}$$

假设采用3位10
进制浮点数

$$Ly = b \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0.0001 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$Ux = y \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

全主元Gauss消去法

在Gauss消去过程中，如果$a_{kk}^{(k-1)}$太小，则从$k+1$行～n行、$k+1$列～n列的子矩阵中寻找最大的元素，通过行列互换将其放到(k,k)的位置作为主元进行下一次Gauss变换，这种方法就是全主元Gauss消去法。

具体做法：

引入置换矩阵$I_{pq}=[e_1,\ldots,e_{p-1},e_q,e_{p+1},\ldots,e_{q-1},e_p,e_{q+1},\ldots,e_n]$. I_{pq}左乘矩阵A，便是将A的第p行与第q行做了互换.

假设消去法已经进行到了第$k-1$步，即已确定了$k-1$个Gauss变换$L_1,\ldots,L_{k-1}$和$2(k-1)$个初等置换矩阵：

$$P_1,\ldots,P_{k-1} \text{ 和 } Q_1,\ldots,Q_{k-1}$$

使得：

$$A^{(k-1)}=L_{k-1}P_{k-1}\cdots L_1P_1AQ_1\cdots Q_{k-1}=\begin{bmatrix} A_{11}^{(k-1)} & A_{12}^{(k-1)} \\ 0 & A_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix}.$$

全主元Gauss消去法

下一步变换之前，需要先从$A_{22}^{(k-1)}$中寻找绝对值尽可能大的主元，

$$a_{pq}^{(k-1)}=\max\{\left|a_{ij}^{(k-1)}\right|:k\le i,j\le n\}.$$

如果$a_{pq}^{(k-1)}=0$，则说明$A_{22}^{(k-1)}$全为0，消去过程结束；否则交换$A^{(k-1)}$的第p行与第k行、第q列与第k列。交换之后，记

$$\tilde{A}_{22}^{(k-1)}=\begin{pmatrix}\tilde{a}_{kk}^{(k-1)} & \cdots & \tilde{a}_{kn}^{(k-1)}\\ \vdots & & \vdots\\ \tilde{a}_{nk}^{(k-1)} & \cdots & \tilde{a}_{nn}^{(k-1)}\end{pmatrix}.$$

然后做Gauss变换，和之前的Gauss变换一样。

$$L_k=I-l_ke_k^T,\qquad l_k=\left(0,\dots,0,\tilde{l}_{k+1,k},\dots,\tilde{l}_{nk}\right)^{\mathrm{T}}$$
$$=\left(0,\dots,0,\frac{\tilde{a}_{k+1,k}^{(k-1)}}{\tilde{a}_{k,k}^{(k-1)}},\dots,\frac{\tilde{a}_{n,k}^{(k-1)}}{\tilde{a}_{k,k}^{(k-1)}}\right)^T,$$

全主元Gauss消去法

经第k次变换之后，

$$A^{(k)} = L_k P_k A^{(k-1)} Q_k = \begin{bmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{bmatrix},$$

其中， $P_k = I_{kp}, Q_k = I_{kq}$， $A_{11}^{(k)}$ 为k阶上三角阵。

如此进行下去，假设在第r次之后算法终止，则

$$A^{(r)} = L_r P_r \cdots L_1 P_1 A Q_1 \cdots Q_r = U \text{ 为上三角阵。}$$

令

$$Q = Q_1 \cdots Q_r,$$
$$P = P_r \cdots P_1,$$
$$L = P(L_r P_r \cdots L_1 P_1)^{-1},$$

则有 $PAQ = LU$ 问题： L是下三角吗？

全主元Gauss消去法

现在分析$L = P(L_r P_r \cdots L_1 P_1)^{-1} = P_r \cdots P_2 L_1^{-1} P_2 L_2^{-1} \cdots P_r L_r^{-1}$

定义$L^{(1)} = L_1^{-1}$，$L^{(k)} = P_k L^{(k-1)} P_k L_k^{-1}$，$k = 2, \ldots, r$,

则 $L^{(k)}$必然具有以下形式（下面给出证明）

$$L^{(k)} = \begin{bmatrix} L_{11}^{(k)} & 0 \\ L_{21}^{(k)} & I_{n-k} \end{bmatrix},$$

其中$L_{11}^{(k)}$为主对角元全为1，其它元素绝对值均小于等于1的下三角矩阵。$L_{21}^{(k)}$的所有元素绝对值均小于等于1。

由归纳法，假设$L^{(k-1)}$具有以上形式，下证$L^{(k)}$具有以上形式。注意观察 $L^{(k)}$与$L^{(k-1)}$之间的差别：

$$L^{(k-1)} = \begin{bmatrix} L_{11}^{(k-1)} & 0 \\ L_{21}^{(k-1)} & I_{n-k+1} \end{bmatrix}, \qquad L^{(k)} = P_k L^{(k-1)} P_k L_k^{-1}.$$

注意思考，两个P_k是如何作用于$L^{(k-1)}$的

全主元Gauss消去法

$$L^{(k-1)}=\begin{bmatrix} L_{11}^{(k-1)} & 0 \\ L_{21}^{(k-1)} & I_{n-k+1} \end{bmatrix}, \qquad P_k L^{(k-1)} P_k=\begin{bmatrix} L_{11}^{(k-1)} & 0 \\ \tilde{L}_{21}^{(k-1)} & I_{n-k+1} \end{bmatrix}$$

假设第k次变换时的主元位于第p行q列。$\tilde{L}_{21}^{(k-1)}$是由$L_{21}^{(k-1)}$交换了第1行与第$p-k+1$行（相当于$L^{(k-1)}$的第k行与第p行）而得到的。

$$L^{(k)}=P_k L^{(k-1)} P_k L_k^{-1}=\begin{bmatrix} L_{11}^{(k-1)} & 0 \\ \tilde{L}_{21}^{(k-1)} & \tilde{L}_k^{-1} \end{bmatrix},$$

其中，$\tilde{L}_k^{-1}$ 为L_k^{-1}的右下角部分

$$\tilde{L}_k^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \tilde{l}_{k+1,k} & 1 & & & \\ \tilde{l}_{k+2,k} & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \tilde{l}_{n,k} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \qquad \tilde{l}_{i,k}=\frac{\tilde{a}_{i,k}^{(k-1)}}{\tilde{a}_{k,k}^{(k-1)}}\le 1$$

全主元Gauss消去法

所以，$L^{(k)}$也具有以下形式

$$L^{(k)} = \begin{bmatrix} L_{11}^{(k)} & 0 \\ L_{21}^{(k)} & I_{n-k} \end{bmatrix}.$$

由归纳法知， $L = L^{(r)}$具有同样形式, 即为主对角元全为1，其它元素绝对值均小于等于1的下三角矩阵。

最后我们得到了 $PAQ = LU$.

定理：若$A \in \mathbf{R}^{n\times n}$，则存在排列矩阵$P, Q \in \mathbf{R}^{n\times n}$, 以及单位下三角阵$L \in \mathbf{R}^{n\times n}$和上三角阵$U \in \mathbf{R}^{n\times n}$，使得$PAQ = LU$，而且$L$的所有元素均满足$|l_{ij}| \le 1$，$U$的非零对角元的个数恰好等于矩阵A的秩。

注意，该矩阵分解不要求A非奇异。A非奇异可以保证原方程组问题有唯一解。

思考：该定理中为什么没指出唯一性？

全主元三角分解

算法：（全主元三角分解）

for $k = 1:n-1$

确定$p, q(k \le p, q \le n)$，使得

$A(p,q) = \max\{|A(i,j)|: k \le i, j \le n\}$

$A([k,p], 1:n) = A([p,k], 1:n)$;（交换第$k$行与第$p$行）

$A(1:n, [k,q]) = A(1:n, [q,k])$;（交换第$k$列与第$q$列）

$u(k) = p$; $v(k) = q$;（记录置换矩阵P_k, Q_k）

if $A(k,k) \neq 0$

将L的下三角部分存储在A的下三角部分

$A(k+1:n, k) = A(k+1:n, k)/A(k,k)$;

$A(k+1:n, k+1:n) = A(k+1:n, k+1:n) - A(k+1:n, k) * A(k, k+1:n)$;

else

Stop（矩阵奇异）

end

end

全主元Gauss消去法

思考：假设得到了$PAQ = LU$, 如果A满秩，接下来如何求解$Ax = b$?

令$x = Qx'$

$$LUx' = PAx = Pb$$

$$Ly = Pb$$

$$Ux' = y$$

$$x = Qx'$$

如果A不满秩，如何验证$Ax = b$是否有解

- 关键在于求解$Ux' = y$那一步

结合全主元三角分解的算法思考：如果我们像上帝一样提前知道所有主元出现的位置，提前对A做好行列变换，再做普通的LU分解，得到的结果是一样的。

全主元Gauss消去法的优缺点

思考：全主元Gauss消去法，与Gauss消去法相比有什么优点？

- 全主元Gauss消去法不需要假定所有的顺序主子阵非奇异
- 由于主元的选择，可以更好的减小误差

思考：全主元Gauss消去法，与Gauss消去法相比有什么缺点？

- 每一步都要挑选主元，花费了大量的运算。在A非奇异的情况下，需要进行n-1次全主元Gauss消去，花费在挑选主元上的运算量为：

包括和0比较大小

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

次两两元素之间的比较和相应的逻辑判断

列主元Gauss消去法

列主元Gauss消去法与全主元Gauss消去法的区别仅在于：每次选主元时，只在$A_{22}^{(k-1)}$的第一列中寻找绝对值最大的元素，即

$$\left|a_{pk}^{(k-1)}\right| = \max\left\{\left|a_{pk}^{(k-1)}\right| : k \le i \le n\right\}.$$

这样，花费在挑选主元的运算量降为$O(n^2)$. 每次选好主元后，只需做行交换，不需做列交换。

因此，按照列主元消去法，最终可以得到：

$$PA = LU,$$

其中，$U = A^{(n-1)}$, $P = P_{n-1} \cdots P_1$, $L = P(L_{n-1}P_{n-1} \cdots L_1P_1)^{-1}$.

列主元三角分解

算法：（列主元三角分解）

for $k=1:n-1$

　　确定$p(k\le p\le n)$，使得

　　$A(p,k)\ =\max\{|A(i,k)|:k\le i\le n\};$

　　$A([k,p],1:n)=A([p,k],1:n)$;（交换第$k$行与第$p$行）

　　$u(k)=p$;（记录置换矩阵P_k）

　　if $A(k,k)\ne 0$

将L的下三角部分存储在A的下三角部分

　　　　$A(k+1:n,k)=A(k+1:n,k)/A(k,k);$

　　　　$A(k+1:n,k+1:n)=A(k+1:n,k+1:n)-A(k+1:n,k)*A(k,k+1:n);$

　　else

　　　　Stop（矩阵奇异）; $\longrightarrow$ 或 continue;

　　end

end

列主元Gauss消去法

思考：假设得到了$PA = LU$, 如果A满秩，接下来如何求解$Ax = b$? 如果A不满秩呢？

Matlab三角分解的相关指令

- x=A\b;　求Ax=b的解
- x=A^(-1)*b;　求Ax=b的解
- x=inv(A)*b;　求Ax=b的解
- x=linsolve(A,b); 求Ax=b的解
- [L,U,P]=lu(A);　A的列主元分解
- [L,U]=lu(A);　A的LU分解,其中L是经过置换的，即LU=PA

利用LU分解求逆矩阵

$$AX = I, \qquad X = (X_1, \dots, X_n) = A^{-1}$$

已知 $PA = LU$，如何计算 X？

按照$i = 1, \dots, n$的顺序依次求解线性方程组：

$$LUX_i = e_i$$

便可得到X。

有一些细节需要注意，比如，求解$Ly = e_i$时，y的前$i - 1$个分量必为0，不需要计算，于是只需要求解一个$n - i + 1$阶的下三角方程组即可。

一般矩阵求逆的运算量为$O(2n^3)$

作业

1 / 对下列线性方程组的系数矩阵进行LU分解(不选主元)，并求解该线性方程组：

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 5 & 2 \\ 4 & 3 & 30 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 5 \\ 32 \end{pmatrix}$$

2 / 教材第一章课后习题4、7、8、10。

3 / 教材第一章上机习题1（只考虑Gauss列主元消去法）。