计算方法

第6章 线性方程组的直接法

胡 敏
合肥工业大学 计算机与信息学院
jsjxhumin@hfut.edu.cn

第 6 章 线性方程组的解法

6.1 消去法

6.2 追赶法

6.3 平方根法

6.4 误差分析

6.2 追赶法

1、三对角方程组

在解常微分方程的边值问题、热传导方程以及船提放样中建立的三次样条函数等工程问题时，经常遇到下面形式的线性方程组。

$$\begin{cases} b_1x_1+c_1x_2 & = f_1 \\ a_2x_1+b_2x_2+c_2x_3 & = f_2 \\ \qquad\cdots & \\ \qquad a_kx_{k-1}+b_kx_k+c_kx_{k+1} & = f_k \\ \qquad\cdots & \\ \qquad\qquad a_{n-1}x_{n-2}+b_{n-1}x_{n-1}+c_{n-1}x_n & = f_{n-1} \\ \qquad\qquad\qquad a_nx_{n-1}+b_nx_n & = f_n \end{cases} \tag{25}$$

这样的方程组我们称为三对角线性方程组。

其系数矩阵

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & a_k & b_k & c_k & & \\ & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \qquad (26)$$

称为三对角矩阵，其非零元素集中分布在主对角线及其邻近的两条次对角线上。

方程组的矩阵形式为

$$AX = f$$

其中

$$X = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$$

$$f = (f_1, f_2, \cdots, f_n)^T$$

定理3： 假设矩阵（26）为对角占优，即成立

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| \\ |b_i| > |a_i| + |c_i|, \qquad i = 2,3,\cdots,n \\ |b_n| > |a_n| \end{cases} \tag{27}$$

则它是非奇异的，方程组（25）有唯一解。

证：　当n=2时，有条件（27）可以知道

$$\det(A)=\begin{vmatrix} b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}=b_1b_2-a_2c_1\neq 0$$

进一步考察 n>2时的情形

将A的第二行减去第一行的 $\dfrac{a_2}{b_1}$ 倍，得

$$\left[\begin{array}{c|ccc} b_1 & c_1 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & A_{n-1} & \\ 0 & & & \end{array}\right]$$

$$A_{n-1}=\begin{pmatrix} b_2-\frac{c_1}{b_1}a_2 & c_2 & & & \\ a_3 & b_2 & c_3 & & \\ & & \ddots & & \\ & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

An-1是n-1阶三对角阵

据条件（27）

$$|b_2-\frac{c_1}{b_1}a_2|\geq|b_2|-|\frac{c_1}{b_1}a_2|\geq|b_2|-|a_2|>|c_2|$$

所以An-1是对角占优的

而 $\det(A)=b_1\det(A_{n-1}),\qquad b_1\neq 0$

同理可得

$$\det(A)=b_1\det(A_{n-1})=b_1(b_2-\frac{c_1}{b_1}a_2)\det(A_{n-2}),\qquad b_1\neq 0,b_2-\frac{c_1}{b_1}a_2\neq 0$$

An-2仍然是对角占优的，反复下去可得

$$\det(A)=b_1\det(A_{n-1})=d_1d_2d_3\cdots d_{n-2}\det(A_2),$$

$$d_1\neq 0,d_2\neq 0,d_3\neq 0,\cdots d_{n-2}\neq 0,$$

A2仍然是对角占优的，故det(A2) $\neq 0$

所以,det(A) $\neq 0$

即矩阵A是非奇异的，方程组（25）有唯一解。

2、追赶法的计算公式

追赶法实际上是高斯消去法的一种简化形式，它同样分消元与回代两个过程。

(1) 消元过程

先将（25）第一个方程中x_1的系数化为1

$$\begin{cases} b_1x_1 + c_1x_2 & = f_1 \\ a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 & = f_2 \\ \cdots & \\ a_kx_{k-1} + b_kx_k + c_kx_{k+1} & = f_k \\ \cdots & \\ a_{n-1}x_{n-2} + b_{n-1}x_{n-1} + c_{n-1}x_n & = f_{n-1} \\ a_nx_{n-1} + b_nx_n & = f_n \end{cases}$$

$$x_1 + \frac{c_1}{b_1}x_2 = \frac{f_1}{b_1}$$

记 $u_1 = \frac{c_1}{b_1}$ $\quad y_1 = \frac{f_1}{b_1}$ $\Rightarrow$ $x_1 + u_1x_2 = y_1$

注意到剩下的方程中，实际上只有第二个方程中含有变量x_1，因此消元手续可以简化。利用上式可将第二个方程化为

$$x_2 + u_2 x_3 = y_2$$

这样一步一步地顺序加工（25）的每个方程，设第$k-1$个方程已经变成

$$x_{k-1} + u_{k-1} x_k = y_{k-1}$$

再利用上式子从第k个方程中消去x_{k-1}，

第k个方程　$a_k x_{k-1} + b_k x_k + c_k x_{k+1} = f_k$

得：　$(b_k - u_{k-1} a_k) x_k + c_k x_{k+1} = f_k - y_{k-1} a_k$

同除 $\left(b_k - u_{k-1}a_k\right)$， 得

$$x_k + \frac{c_k}{b_k - u_{k-1}a_k} x_{k+1} = \frac{f_k - y_{k-1}a_k}{b_k - u_{k-1}a_k} \qquad k = 2, 3, \cdots, n$$

记

$$u_k = \frac{c_k}{b_k - u_{k-1}a_k} \qquad y_k = \frac{f_k - y_{k-1}a_k}{b_k - u_{k-1}a_k}$$

则有 $x_k + u_k x_{k+1} = y_k$

这样做$n-1$步以后，便得到：

$$\begin{cases} x_1 + u_1 x_2 = y_1 \\ x_2 + u_2 x_3 = y_2 \\ \quad\vdots \\ x_{n-1} + u_{n-1} x_n = y_{n-1} \\ x_n = y_n \end{cases} \qquad (28)$$

其中系数 $u_1 = \dfrac{c_1}{b_1} \qquad y_1 = \dfrac{f_1}{b_1}$

$$u_i = \frac{c_i}{b_i - u_{i-1}a_i} \qquad i = 2,3,\cdots,n-1 \qquad (29)$$

$$y_i = \frac{f_i - y_{i-1}a_i}{b_i - u_{i-1}a_i} \qquad i = 2,3,\cdots,n$$

(2) 回代过程

对加工得到的方程组（28）自下而上逐步回代，即可依次求出x_n，x_{n-1}，…，x_1，计算公式为：

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - u_i x_{i+1} \end{cases} \qquad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \tag{30}$$

上述算法就是**追赶法**，它的消元过程与回代过程分别称作“**追**”过程与“**赶**”过程。

综合追与赶的过程，得如下计算公式：

追过程

$$
\begin{cases}
u_1 = \dfrac{c_1}{b_1} \qquad y_1 = \dfrac{f_1}{b_1} \\[2ex]
u_i = \dfrac{c_i}{b_i - u_{i-1}a_i} & i = 2, 3, \cdots, n-1 \\[2ex]
y_i = \dfrac{f_i - y_{i-1}a_i}{b_i - u_{i-1}a_i} & i = 2, 3, \cdots, n
\end{cases}
$$

$$u_1 \to u_2 \to \cdots \to u_{n-1}$$

$$y_1 \to y_2 \to \cdots \to y_n$$

赶过程

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

追赶法的原理与高斯消去法相同，但计算时撇开了大量的零元素，从而大大地节省了计算量。其计算量大约为5n 次乘除法。

为保证追赶法的计算过程不中断，必须保证（29）式中的分母全不为零。由定理一可得。

定理4 设（26）为对角占优，则式（29）式中的分母

$$d_1 = b_1, d_i = b_i - u_{i-1}a_i, \quad i = 2,3,\cdots,n$$

全不为0

$u_0 = 0, y_0 = 0$

$1 \le i \le n$

$d_i = b_i - u_{i-1} a_i$

$d_i = 0$

T

打印 d_i=0的信息
停止计算

F

$y_i = (f_i - y_{i-1} a_i) d_i$

i=n

T

F

$u_i = c_i / d_i$

$x_n = y_n$

$n-1 \ge i \ge 1$

$x_i = y_i - u_i x_{i+1}$

打印方程组的解 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 停止计算

3、追赶法的代数基础

追赶法实际上就是通过消元，把系数矩阵

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & a_k & b_k & c_k & & \\ & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

等价变换为矩阵

$$U=\begin{pmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \qquad (31)$$

矩阵U是比A更简单的稀疏矩阵，其非零元素集中分布在主对角线及它上面的次对角线上，且主对角线上元素全为1。这种矩阵称为单位上二对角阵。

定理5 设矩阵（26）为对角占优，则它可唯一地分解成矩阵L和U的乘积

$$A = LU$$

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & a_k & b_k & c_k & & \\ & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

其中

$$L = \begin{pmatrix} d_1 & & & & \\ a_2 & d_2 & & & \\ & a_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & d_{n-1} & \\ & & & a_n & d_n \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

证　将矩阵关系式A=LU按矩阵乘法规则展开，有

$$b_1 = d_1$$

$$c_i = d_i u_i \qquad i = 1, 2, \cdots, n-1$$

$$b_{i+1} = a_{i+1} u_i + d_{i+1}$$

由定理4知　$d_i \neq 0$

$$d_1 = b_1$$

取　$u_i = c_i / d_i \qquad i = 1, 2, \cdots, n-1$

$$d_{i+1} = b_{i+1} - a_{i+1} u_i$$

用 d_i, u_i 构造L 和U，则必有A=LU

从而方程组 $Ax=f$ 的求解等价为

$$\begin{cases} Ly = f \\ Ux = y \end{cases}$$

先解 $Ly=f$ 即

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & \\ a_2 & d_2 & & & \\ & a_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & d_{n-1} & \\ & & & a_n & d_n \end{pmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

得

$$\begin{cases} d_1 y_1 = f_1 \\ a_i y_{i-1} + d_i y_i = f_i \qquad i = 2,3,\cdots,n \end{cases}$$

故 $\begin{cases} y_1 = f_1 / d_1 \\ y_i = (f_i - a_i y_{i-1}) / d_i \quad i = 2,3,\cdots,n \end{cases}$

再解 $Ux=y$ 即

$$\begin{pmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

得 $\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - u_i x_{i+1} \qquad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$

例　用追赶法解三对角方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 3 \\ x_1 + 2x_2 - 3x_3 = -3 \\ 3x_2 - 7x_3 + 4x_4 = -10 \\ 2x_3 + 5x_4 = 2 \end{cases}$$

解： 这里

$$b_1 = 2, c_1 = 1, f_1 = 3$$

$$a_2 = 1, b_2 = 2, c_2 = -3, f_2 = -3$$

$$a_3 = 3, b_3 = -7, c_3 = 4, f_2 = -10$$

$$a_4 = 2, b_4 = 5, \quad f_4 = 2$$

$$u_1=\frac{c_1}{b_1}=\frac{1}{2},u_2=\frac{c_2}{b_2-u_1a_2}=\frac{-3}{2-1/2}=-2,u_3=\frac{c_3}{b_3-u_2a_3}=\frac{4}{-7-(-2)3}=-4$$

$$y_1=\frac{f_1}{b_1}=\frac{3}{2},y_2=\frac{f_2-y_1a_2}{b_2-u_1a_2}=\frac{-3-1.5}{2-1/2}=-3,$$

$$y_3=\frac{f_3-y_2a_3}{b_3-u_2a_3}=\frac{-10+9}{-7-(-2)\times 3}=1,y_4=\frac{f_4-y_3a_4}{b_4-u_3a_4}=\frac{0}{13}=0$$

由回代公式得 $\begin{cases} x_n=y_n \\ x_i=y_i-u_ix_{i+1} \end{cases}$ $\qquad i=n-1,n-2,\cdots,1$

$$x_4=y_4=0,x_3=y_3-u_3x_4=1,$$

$$x_2=y_2-u_2x_3=-1,x_1=y_1-u_1x_2=2$$

补充：矩阵三角分解法

高斯消去法有很多变形，有的是高斯消去法的改进、改写，有的是用于某一类特殊矩阵的高斯消去法的简化. 下面我们将介绍矩阵的直接三角分解法，解特殊方程组用的平方根法及追赶法.

定义 如果 L为单位下三角阵，U为上三角阵，则称$A=LU$为杜里特尔(Doolittle)分解；如果 L为下三角阵，U为单位上三角阵，则称$A=LU$为克劳特(Crout)分解.

1、 直接三角分解法(LU分解)

在6.1已经通过高斯消去法得到一个将A分解为一个单位下三角矩阵L和一个上三角矩阵U的乘积，$A=LU$，其中

$$L=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & 1 & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix},\quad U=A^{(n)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1\,n-1}^{(1)} & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2\,n-1}^{(2)} & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} \\ & & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}.$$

由已知的定理知这种分解是唯一的.

将高斯消去法改写为紧凑形式，可以直接从矩阵A的元素得到计算L、U元素的递推公式，而不需要任何中间步骤，这就是所谓直接三角分解法．一旦实现了矩阵A的LU分解，那么求解$Ax=b$的问题就等价于求两个三角形方程组．

① $Ly=b$，求y；

② $Ux=y$，求x．

1. 不选主元的三角分解法

设A为非奇异矩阵，且有分解式$A=LU$，其中L为单位下三角矩阵，U为上三角矩阵，即

$$A=\begin{bmatrix}1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{nn}\end{bmatrix}.$$

其中

$$L=\begin{bmatrix}1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1\end{bmatrix}, U=\begin{bmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{nn}\end{bmatrix}.$$

比较式 $A=LU$ 两端的元素, 按下图所示顺序逐框进行，先求u_{kj}，后求l_{ik}. 由第一框可得

$$u_{1j}=a_{1j} \quad (j=1,2,\cdots,n) \qquad l_{i1}=\frac{a_{i1}}{u_{11}} \quad (i=2,3,\cdots,n)$$

$$\begin{array}{cccccc}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{kn} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nn}
\end{array}
\Rightarrow
\begin{array}{ccccccl}
u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1k} & \cdots & u_{1n} & \text{第1框} \\
l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2k} & \cdots & u_{2n} & \text{第2框} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \\
l_{k1} & l_{k2} & \cdots & u_{kk} & \cdots & u_{kn} & \text{第}k\text{框} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nk} & \cdots & u_{nn} & \text{第}n\text{框}
\end{array}$$

假设前k -1框元素已求出，则由

$$a_{kj}=\sum_{s=1}^{k-1}l_{ks}u_{sk}+u_{kj}\quad (j=k,k+1,\cdots,n)$$

$$a_{ik}=\sum_{s=1}^{k-1}l_{is}u_{sk}+l_{ik}u_{kk}\quad (i=k+1,k+2,\cdots,n)$$

得

$$\begin{cases} u_{kj}=a_{kj}-\sum_{s=1}^{k-1}l_{ks}u_{sj}\quad (j=k,k+1,\cdots,n); & (6.2) \\ l_{ik}=\left[a_{ik}-\sum_{s=1}^{k-1}l_{is}u_{sk}\right]/u_{kk}\quad (i=k+1,k+2,\cdots,n) & (6.3) \end{cases}$$

有了矩阵 A 的LU分解计算公式，解线性方程组

$$Ax=b$$

就转化为依次解下三角方程组 $Ly=b$

与上三角方程组 $Ux=y$

其计算公式如下：

$$\begin{cases} y_k = b_k - \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks} y_s \quad (k=1,2,\cdots,n); & \Leftarrow \ Ly=b \\ x_k = \left(y_k - \sum_{s=K+1}^{n} u_{ks} x_s \right) / u_{kk} \quad (k=n,n-1,\cdots,1) & \Leftarrow \ Ux=y \end{cases}$$

矩阵A的分解公式(6.2),(6.3)又称为杜里特尔(Doolittle)分解.

例 求矩阵 $A=\begin{bmatrix}2 & 1 & 4\\ 4 & 4 & 1\\ 6 & 5 & 12\end{bmatrix}$ 的LU (Doolittle)分解.

解 用紧凑形式计算

$u_{11}=2$ $u_{12}=1$ $u_{13}=4$

$l_{21}=\frac{4}{2}=2$ $u_{22}=4-2\times1=2$ $u_{23}=1-2\times4=-7$

$l_{31}=\frac{6}{2}=3$ $l_{32}=\frac{5-3\times1}{2}=1$ $u_{33}=12-3\times4-1\times(-7)$

$=7$

$u_{11}=2$ $u_{12}=1$ $u_{13}=4$

$l_{21}=\frac{4}{2}=2$ $u_{22}=4-2\times1=2$ $u_{23}=1-2\times4=-7$

$l_{31}=\frac{6}{2}=3$ $l_{32}=\frac{5-3\times1}{2}=1$ $u_{33}=12-3\times4-1\times(-7)$

$=7$

所以
$$\begin{bmatrix}2&1&4\\4&4&1\\6&5&12\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\3&1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&1&4\\0&2&-7\\0&0&7\end{bmatrix}$$

得行列式 $\det(A)=2\cdot2\cdot7=28$

由于在计算机实现时当u_{ri}计算好后a_{ri}就不用了，因此计算好L,U的元素后就存放在A的相应位置.例如

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & u_{34} \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & u_{44} \end{bmatrix}.$$

最后在存放A的数组中得到L,U的元素.

由直接三角分解计算公式，需要计算形如$\sum a_i b_i$的式子，可采用“双精度累加”，以提高精度.

6.3 平方根法（自学）

实际问题中$Ax=b$，系数矩阵A大多是**对称正定矩阵**，即A是对称的且对任何非零向量 x 都有$x^TAx>0$。本节将对这类方程组导出更有效的三角分解求解方法，称之为平方根法。所谓**平方根法**，就是利用对称正定矩阵的三角分解而得到求解对称正定方程组的一种有效方法，目前在计算机上广泛应用平方根法解此类方程组.

定理6(对称正定矩阵的三角分解或乔雷斯基(Cholesky)分解)

如果A为n阶对称正定矩阵，则存在一个实的非奇异下三角矩阵L使$A=LL^T$，当限定L的对角元素为正时，这种分解是唯一的.

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & & & \text{对称} \\ a_{21} & a_{22} & & \\ \vdots & \vdots & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

下面我们用直接分解方法来确定计算L元素的递推公式，因为

$$A=\begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{nn} \end{pmatrix}.$$

$$a_{ij}=\left(l_{i1},l_{i2},\cdots,l_{ii},0,\cdots 0\right)\begin{bmatrix} l_{1j} \\ l_{2j} \\ \vdots \\ l_{jj} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

其中$l_{ii}>0(i=1,2,\cdots,n)$. 由矩阵乘法及$l_{jk}=0$(当$j<k$时),得

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

于是得到解对称正定方程组$Ax=b$的平方根法计算公式

对于 $j=1,2,\cdots,n$

$$(1).\ l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^{2}\right)^{\frac{1}{2}}\quad (j=1,2,\cdots,n)\qquad (35)$$

$$(2).\ l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}\right)\Big/ l_{jj}\quad (i=j+1,\cdots,n);$$

$$j=1\text{时} l_{11}=(a_{11})^{\frac{1}{2}},\ l_{i1}=\frac{a_{i1}}{l_{11}},\ i=2,3,\cdots,n$$

关于方程组 $Ax=b$ ，如果对系数矩阵进行了平方根分解 $A=LL^T$，则将方程组化为： $Ly=b$, $L^Tx=y$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \vdots & l_{n1} \\ & l_{22} & l_{32} & \vdots & l_{n2} \\ & & l_{33} & \vdots & l_{n3} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

解得

$$y_j = \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} y_k \right) \Big/ l_{jj}, \quad j = 1,2,\cdots,n$$

$$x_j = \left(y_j - \sum_{k=j+1}^{n} l_{kj} y_k \right) \Big/ l_{jj}, \quad j = n, n-1, \cdots, 1$$

于是，关于系数矩阵是对称正定矩阵的线性方程组 $Ax=b$的求解，分两步进行：

第一步：系数矩阵的**平方根分解**

$$l_{jj} = (a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2)^{\frac{1}{2}}, \quad j = 1,2,\cdots,n$$

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

第二步：解等价方程组

$$y_j = \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} y_k \right) \Big/ l_{jj}, \quad j = 1,2,\cdots,n$$

$$x_j = \left(y_j - \sum_{k=j+1}^{n} l_{kj} y_k \right) \Big/ l_{jj}, \quad j = n, n-1, \cdots, 1$$

例3 用平方根法求解对称正定方程组

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{pmatrix}.$$

解 首先对A进行Cholesky分解

$$A=LL^T=\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -0.5 & 2 & 0 \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -0.5 & 0.5 \\ 0 & 2 & 1.5 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

求解$Ly=b$，得 $y_1=2, y_2=3.5, y_3=1.$

求解$L^Tx=y$，得 $x_1=1, x_2=1, x_3=1.$

2.改进平方根法

平方根法不必选主元，精度高，稳定性好，是最有效算法之一。

平方根法解正定方程组的缺点是需要进行开方运算。为避免开方运算，我们改用单位三角阵作为分解阵，即把对称正定矩阵A分解成

$$A = LDL^T$$ 的形式，其中

$$A = LDL^T = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}.$$

$$D=\begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix}$$

为对角阵，而

$$L=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

是单位下三角阵, 这里分解公式为

$$\begin{cases} l_{ij}=(a_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{ik} l_{jk})/d_j & j=1,2,\cdots,i-1 \\ d_i=a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{ik}^2 & i=1,2,\cdots,n \end{cases}$$

据此可逐行计算 $d_1 \to l_{21} \to d_2 \to l_{31} \to l_{32} \to d_3 \to \cdots$

运用这种矩阵分解方法,方程组Ax=b即$L(DL^T x) = b$

可归结为求解两个上三角方程组

$$Ly = b \quad \text{和} \quad L^T x = D^{-1} y$$

其计算公式分别为 $y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \qquad i = 1,2,\cdots,n$

和 $$x_i = y_i / d_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k \qquad i = n, n-1, \cdots, 1$$

求解方程组的上述算法称为改进的平方根法。这种方法总的计算量约为 $n^3/6$ 即仅为高斯消去法计算量的一半。

1. 方程组的病态

首先考察一个例子.

例4　设有方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}. \qquad (36)$$

记为$Ax=b$，它的精确解为$x=(2,0)^T$.

现在考虑常数项的微小变化对方程组解的影响，即考察方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix}. \qquad (37)$$

也可表示为$A(x+\delta x)=b+\delta b$，其中$\delta b=(0,0.0001)^T$, $y=x+\delta x$, x为(36)的解．显然方程组(37)的解为$x+\delta x=(1, 1)^T$.

我们看到(36)的常数项b的第2个分量只有1/1000的微小变化，方程组的解却变化很大．这样的方程组称为**病态方程组**.

定义 如果矩阵A或常数项b 的微小变化(小扰动)，引起方程组$Ax=b$解的巨大变化，则称此方程组为**"病态"方程组**, 其系数矩阵 A 称为**"病态"矩阵**(相对于方程组而言), 否则称方程组为**"良态"方程组**，A称为**"良态"矩阵**.

应该注意，矩阵的“病态”性质是矩阵本身的特性，下面我们希望找出刻画矩阵“病态”性质的量. 设有方程组

$$Ax=b$$

其中A为非奇异矩阵，x为上式的精确解. 以下我们研究方程组的系数矩阵A (或b)的微小误差(小扰动)时对解的影响.

(1) 现设A是精确的，x为$Ax=b$的精确解，当方程组右端有误差δb，受扰解为 $x+\delta x$, 则

$$A(x+\delta x)=b+\delta b,\ Ax=b,\ \delta x=A^{-1}\delta b,$$

$$\|\delta x\| \leqslant \|A^{-1}\|\ \|\delta b\|.$$

又

$$\|b\| \leqslant \|A\|\ \|x\|.$$

$$\frac{1}{\|x\|} \le \frac{\|A\|}{\|b\|} \quad (\text{设} b \ne 0).$$

于是得

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \|A^{-1}\| \|A\| \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}.$$

上式给出了解x的相对误差的上界， 常数项b的相对误差在解中放大$\|A^{-1}\|\ \|A\|$倍.

(2) 现设b是精确的，x为$Ax=b$的精确解，当A有微小误差(小扰动)δA，受扰解为 $x+\delta x$，则

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b,$$

$$(A+\delta A)\delta x= -(\delta A)x. \qquad (38)$$

如果δA不受限制的话, 可能$A+\delta A$奇异, 而

$$(A+\delta A)=A(I+A^{-1}\delta A).$$

$$(A+\delta A)\delta x= -(\delta A)x. \quad (38)$$

当 $\|A^{-1}\delta A\|<1$时, $(I+A^{-1}\delta A)^{-1}$存在. 由(38）式得

$$\delta x= -(I+A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}(\delta A)x.$$

因此

$$\|\delta x\| \le \frac{\|A^{-1}\|\,\|\delta A\|\,\|x\|}{1-\|A^{-1}(\delta A)\|}.$$

设$\|A^{-1}\|\,\|\delta A\|<1$, 即得

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\|A^{-1}\|\,\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A^{-1}\|\,\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}. \qquad (39)$$

定理 设A是非奇异矩阵，$Ax=b\neq 0$，且

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b.$$

如果$\|A^{-1}\|\,\|\delta A\|<1$，则(39)式成立.

如果δA充分小，且在条件$\|A^{-1}\|\,\|\delta A\|<1$下，那么(39)式

说明矩阵A的相对误差$\|\delta A\|/\|A\|$在解中可能放大$\|A^{-1}\|\,\|A\|$倍.

总之，量$\|A^{-1}\|\,\|A\|$越小，由A(或b)的相对误差引起的解的相对误差就越小；量$\|A^{-1}\|\,\|A\|$越大，解的相对误差就可能越大．所以量$\|A^{-1}\|\,\|A\|$事实上刻画了解对原始数据变化的**灵敏程度**，即刻画了方程组的“病态”程度，于是引进下述定义：

补充

(3) 现设x为$Ax=b$的精确解，当A有微小误差(小扰动)δA, 而b同时也有微小误差δb(小扰动)时，受扰解为$x+\delta x$, 则还可以推出相对误差估计式为

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\|A\|\,\|A^{-1}\|}{1-\|A\|\,\|A^{-1}\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right).$$

定义8 设A是非奇异矩阵，称数

$$\mathrm{cond}(A)_v=\|A^{-1}\|_v\|A\|_v\ (v=1,2\text{或}\infty)$$

为矩阵A的**条件数**.

由此看出**矩阵的条件数与范数有关**.

矩阵的条件数是一个十分重要的概念．由上面讨论知,当A的条件数相对的大，即$\mathrm{cond}(A)>>1$时,则(39)是“病态”的(即A是“病态”矩阵，或者说A是**坏条件**的，相对于方程组)，当A的条件数相对的小，则(39)是“良态”的(或者说A是**好条件**的)．注意，方程组病态性质是方程组本身的特性．A的条件数越大, 方程组的病态程度越严重，也就越难用一般的计算方法求得比较准确的解.

例如对前面例8的矩阵作分析

$$A=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{pmatrix},\quad 有\ A^{-1}=\frac{1}{0.0001}\begin{pmatrix}1.0001 & -1\\ -1 & 1\end{pmatrix}.$$

计算其条件数

$$\mathrm{cond}(A)_1=\|A\|_1\cdot\|A^{-1}\|_1$$

$$=2.0001\times 2.0001\times 10^4>4000.$$

由于条件数cond$(A)_1$很大, 可见矩阵A的病态程度十分严重, 故由此方程组的解误差非常大.

通常使用的条件数, 有

(1) $\text{cond}(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty$;

(2) A的谱条件数;

$$cond(A)_2 = \left\|A^{-1}\right\|_2 \left\|A\right\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}}.$$

当A为对称矩阵时

$$cond(A)_2 = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}.$$

其中λ_1, λ_n为A的绝对值最大和绝对值最小的特征值.

条件数的性质:

(1). 对任何非奇异矩阵, 都有$\mathrm{cond}(A)_v \geq 1$. 事实上

$$cond(A)_v = \|A^{-1}\|_v \|A\|_v \geq \|A^{-1}A\|_v = \|I\|_v = 1.$$

(2). 设A为非奇异矩阵且$c\neq 0$(常数), 则

$$\mathrm{cond}(cA)_v=\mathrm{cond}(A)_v.$$

(3). 如果A为正交矩阵, 则$\mathrm{cond}(A)_2=1$; 如果A为非奇异矩阵, R为正交矩阵, 则

$$\mathrm{cond}(RA)_2=\mathrm{cond}(AR)_2=\mathrm{cond}(A)_2.$$

由性质1知，$1\le \mathrm{cond}(A)$，即$\mathrm{cond}(A)$总是大于等于1的数．条件数反映了方程组的“病态程度”.条件数越小，方程组的状态越好，条件数很大时，称方程组为病态方程组．但多大的条件数才算病态则要视具体问题而定，病态的说法只是相对而言.

条件数的计算是困难的，这首先在于要算A^{-1}，而求A^{-1}比解$Ax=b$的工作量还大，当A确实病态时，A^{-1}也求不准确；其次要求范数，特别是求$\|A\|_2$，$\|A^{-1}\|_2$又十分困难，因此实际工作中一般不先去判断方程组的病态.但是必须明白，在解决实际问题的全过程中，发现结果有问题，同时数学模型中有线性方程组出现，则方程组的病态可能是出问题的环节之一.

病态方程组无论选用什么方法去解,都不能根本解决原始误差的扩大,即使采用全主元消去法也不行.可以试用加大计算机字长,比如用双精度字长计算,或可使问题相对得到解决.如仍不行,则最好考虑修改数学模型,避开病态方程组.

如第3章中提到的拟合问题中出现的正则方程组,就往往呈现病态,此时解决问题的方法之一是避开正则方程组,采用正交多项式拟合的方法,尽管后者比前者在理论上和实际计算中都复杂得多.

定理23(事后误差估计) 设A为非奇异矩阵，x是方程组$Ax=b\neq 0$的精确解. 再设$\bar{x}$是此方程组的近似解，$r=b-\bar{A}x$，则

$$\frac{\|x-\bar{x}\|}{\|x\|}\le cond(A)\cdot\frac{\|r\|}{\|b\|}. \qquad (6.11)$$

证明 由$x-\bar{x}=A^{-1}r$，得

$$A(x^{*}-x)=r$$

$$\|x-\bar{x}\|\le\|A^{-1}\|\,\|r\|, \qquad (6.12)$$

又有

$$\|b\|=\|Ax\|\le\|A\|\,\|x\|,\ \frac{1}{\|x\|}\le\frac{\|A\|}{\|b\|}, \qquad (6.13)$$

由(6.12)及(6.13)即得到(6.11).

(6.11)式说明，近似解$\bar{x}$的精度(误差界)不仅依赖于剩余r的“大小”，而且依赖于A的条件数. 当A是病态时，即使有很小的剩余r，也不能保证$\bar{x}$是高精度的近似解.

习题

P197 1（2）、2（1）、3、9

1.理解掌握高斯消去法并会用该方法解方程组.

2. 理解列主元素消去法,会用列主元素消去法解方程组.

3.理解并会用杜里特尔分解法解简单的方程组;
理解解三对角线方程组的解法.

4.会求矩阵的条件数。