第三章 线性方程组解法

讲授:

大型线性方程组计算机求解的常用 方法的构造和原理;

重点论述:

Jacobi迭代法、Seidel迭代法、 Guass消元法及LU分解法的原理、构 造、收敛性等。

第3章 线性方程组解法

§3.4 残性方程组的直接解法



直接方法描述

解线性方程组的直接法有Gauss消元法, LU分解法及一些特殊线性方程组的解法等, 其中Gauss消元法是直接法的基础。

本章的重点是在一般公式推导上, 要注意学习和体会。



以下系数矩阵对应的线性方程组哪个容易求解?或者哪个容易计算行列式和特征值?

$$\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 \\
0 & -2 & 0 \\
0 & 0 & 3
\end{pmatrix}
\qquad
\begin{pmatrix}
1 & 4 & 7 \\
0 & -2 & -9 \\
0 & 0 & 3
\end{pmatrix}
\qquad
\begin{pmatrix}
1 & 4 & 7 \\
6 & -2 & -9 \\
-5 & 8 & 3
\end{pmatrix}$$

对角矩阵 上(下)三角矩阵 满矩阵



例1 Gauss消去法 求解线性方程组 Ax = b

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\ 4x_1 + 3x_2 + 3x_3 + x_4 = 11 & r_2^{(0)} \\ 8x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 5x_4 = 29 & r_3^{(0)} \\ 6x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 8x_4 = 30 & r_4^{(0)} \end{cases}$$

第一步,消去 $r_2^{(0)}$ 、 $r_3^{(0)}$ 和 $r_4^{(0)}$ 中的 x_1 ,即用

$$r_2^{(0)} + \left(-\frac{4}{2}\right) \times r_1^{(0)}$$
 $r_3^{(0)} + \left(-\frac{8}{2}\right) \times r_1^{(0)}$ 和 $r_4^{(0)} + \left(-\frac{6}{2}\right) \times r_1^{(0)}$ 得

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\ x_2 + x_3 + x_4 = 3 & r_2^{(1)} \end{cases}$$
$$3x_2 + 5x_3 + 5x_4 = 13 & r_3^{(1)}$$
$$4x_2 + 6x_3 + 8x_4 = 18 & r_4^{(1)}$$

第二步,消去 $r_3^{(1)}$ 和 $r_4^{(1)}$ 中的 \mathcal{X}_2 ,即用 $r_3^{(1)} + \left(-\frac{3}{1}\right) \times r_2^{(1)}$ 和 $r_4^{(1)} + \left(-\frac{4}{1}\right) \times r_2^{(1)}$ 得

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\ x_2 + x_3 + x_4 = 3 & r_2^{(1)} \\ 2x_3 + 2x_4 = 4 & r_3^{(2)} \\ 2x_3 + 4x_4 = 18 & r_4^{(2)} \end{cases}$$

第三步,消去 $r_4^{(2)}$ 中的 X_3 ,即用

$$r_4^{(1)} + \left(-\frac{2}{2}\right) \times r_3^{(2)}$$
 得

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\ x_2 + x_3 + x_4 = 3 & r_2^{(1)} \\ 2x_3 + 2x_4 = 4 & r_3^{(2)} \\ 2x_4 = 2 & r_4^{(3)} \end{cases}$$

$$2x_{1} + x_{2} + x_{3} = 4 \implies 2x_{1} + k_{2} + k_{3} = 2 - 2$$

$$x_{2} + x_{3} + x_{4} = 3 \implies x_{2} + k_{3} + k_{4} = 1 - 2$$

$$2x_{3} + 2x_{4} = 4 \implies 2x_{3} + 2 + k_{3} = 2 - 2$$

$$2x_{4} = 2 \implies 2x_{4} = 2 - = 1$$

上述为回代求解过程,得 $x = (1,1,1,1)^T$ 。 Gauss消去法的实质是首先通过一系列的初等行变换将增广矩阵 ($A \mid b$) 化成上三角矩阵 ($U \mid c$),然后通过回代求与 Ax = b三角方程组 Ux = c 的解。

我们来观察Gauss消去法求Ax = b的解,增广矩阵(A|b) 化成上三角矩阵(U|c) 的过程,其中

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 11 \\ 29 \\ 30 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{P}(A | b)$

三次消元过程写成矩阵的形式分别为:

$$\boldsymbol{L}_{1}\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -2 & 1 & & \\ -4 & & 1 & \\ -3 & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & \\ 4 & 3 & 3 & 1 & \\ 8 & 7 & 9 & 5 & \\ 6 & 7 & 9 & 8 & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & 1 & 1 & \\ 0 & 3 & 5 & 5 & \\ 0 & 4 & 6 & 8 & \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L}_{2}(\boldsymbol{L}_{1}\boldsymbol{A}) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & -3 & 1 & \\ & -4 & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 5 & 5 \\ 0 & 4 & 6 & 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L}_{3}(\boldsymbol{L}_{2}\boldsymbol{L}_{1}\boldsymbol{A}) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{U}$$

再注意到:

所以,刚才的计算过程可以表示为

$$L_3^{-1}L_{23}^{-1}L_{12}^{-1}L_1A = L_1^{-1}L_2^{-1}L_3^{-1}$$



$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_{1}^{-1} \boldsymbol{L}_{2}^{-1} \boldsymbol{L}_{3}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 3 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

从而有

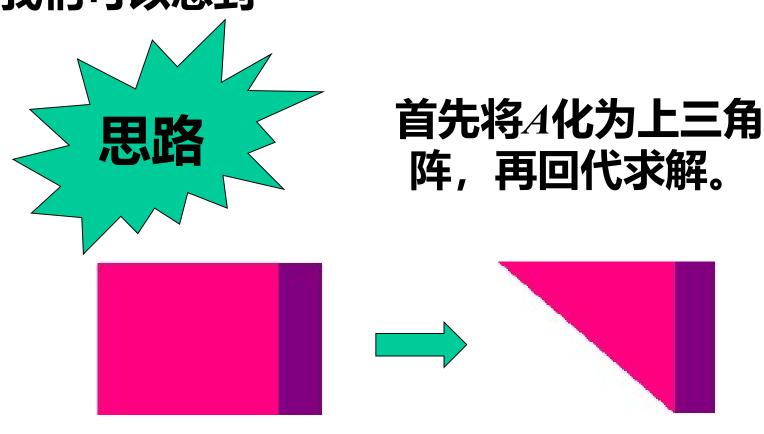
$$= \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 3 & 2 & 2 \\ 6 & 4 & 9 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A = LU$$

则称其为矩阵A的 LU分解, 也称 Doolittle 分解。

Doolittle方法求解线性方程组:

下面对一般n阶方阵 A 进行 LU分解。通过前例我们可以想到



步骤如下:

第一步 第
$$i$$
行 — 第 1 行 × $\frac{a_{i1}}{a_{11}}$, $i = 2, \dots, n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

运算量(乘除法): (n-1)*(n+1)

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -l_{n1} & & 1 \end{pmatrix}$$

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, i = 2, \dots, n$$

行乘子(数)
$$\frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, i = 2, \dots, n$$

$$\boldsymbol{L}_{1}(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & b_{1}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_{2}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_{n}^{(1)} \end{pmatrix}$$

第二步: 第
$$i$$
行 - 第 2 行 × $\frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$, $i = 3, \dots, n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

$$\downarrow \qquad \qquad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

运算量: (n-2)*(1+n-1)=(n-2)n

第k步: 第i行 - 第k行 ×
$$l_{i,k}$$
 (= $\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$), $i = k+1, \dots, n$

$L_{k}\cdots L_{2}L_{1}(A\mid b)=$

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{n,k} & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1,1}^{(0)} & \cdots & a_{1,k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1,n}^{(0)} & b_{1}^{(0)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & a_{1,k+1}^{(k-1)} & a_{1,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{1,n}^{(k-1)} & b_{1}^{(k-1)} \\ & & & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k,n}^{(k-1)} & b_{k}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{n,n}^{(k)} & b_{n}^{(k)} \end{bmatrix}$$

算量: (n - k)*(1 + n - k + 1)=(n - k)(n - k + 2)

n-1步以后,我们可以得到变换后的矩阵为:

$$L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_{2}L_{1}(A | b) = (U | c)$$

$$egin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \ dots & dots & dots & dots & dots \ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} & b_n^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{L}_{n-2}\cdots\boldsymbol{L}_{2}\boldsymbol{L}_{1})^{-1}$$

$$\begin{pmatrix}
1 & & & & \\
l_{2,1} & 1 & & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & 1 & \\
l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1
\end{pmatrix}$$

$$L^{-1}(A \mid b) = (U \mid c)$$

$$A = LU$$

$$\boldsymbol{L}^{-1}(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{c})$$

$$A = LU$$

$$Ax = b \Leftrightarrow L(Ux) = b \Leftrightarrow \begin{cases} Lc = b \\ Ux = c \end{cases}$$

第k步运算量:

$$(n-k)*(1+n-k+1)=(n-k)(n-k+2)$$

因此, n-1步的总运算量为:

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

Gauss消去法求解n阶线性方程组的总计算量(乘除法次数)为:

$$\left(\frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5n}{6}\right) + \left(\frac{n^2}{2} + \frac{n}{2}\right) =$$

$$\frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3} = 3060 \ (n = 20)$$

当n较大时,它和同阶的。

3) Gauss消元法可使用的条件

定理1: $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0, \forall k \Leftrightarrow A$ 的所有顺序主子式都不为零。

定理2: A的所有顺序主子式 $\neq 0 \Rightarrow$ 可以用 Gauss消元法求解。

4) Gauss消元法的改进

缺点1: 要求 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0(k=1,2,\cdots,n)$

缺点2:在使用Gauss消元法进行计算机求解时, 人们发现有时求出的解是错误的。

如果某个 $a_{kk}^{(k-1)}$ 很小的话,会引入大的误差。



例: 研究线性方程组

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

的Gauss消元法求解结果,假设计算在4位浮点十进制数的计算机上求解。

AE: $\begin{cases} 0.0001x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$

$$a_{22}^{(1)} = a_{22}^{(0)} + m_{21}a_{12}^{(0)} = 0.1000 \times 10^{1} - 0.1000 \times 10^{5}$$
 $= 0.00001 \times 10^{5} - 0.1000 \times 10^{5} = -0.09999 \times 10^{5}$
 $= -0.1000 \times 10^{5}$

$$\Rightarrow \begin{cases} 0.1000 \times 10^{-3} x_1 + 0.1000 \times 10^1 x_2 = 0.1000 \times 10^1 \\ 0.1000 \times 10^1 x_1 + 0.1000 \times 10^1 x_2 = 0.2000 \times 10^1 \end{cases}$$

用Gauss消元法,计算过程进行对阶舍入,得

$$\begin{cases} 0.1000 \times 10^{-3} x_1 + 0.1000 \times 10^1 x_2 = 0.1000 \times 10^1 \\ -0.1000 \times 10^5 x_2 = -0.1000 \times 10^5 \end{cases} \Rightarrow x_2 = 1, x_1 = 0 \times 10^{-3} = 0.1000 \times 10^{-$$

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ 0.0001x_1 + x_2 = 1 \end{cases}$$

用Gauss消元法求解得 $x_1 = 1, x_2 = 1$

其准确解为

$$x_1 = \frac{10000}{9999}, x_2 = \frac{9998}{9999}$$

可以接受。



主元: 消元法中用作分母的数;

主方程:主元所在的方程。

列主元消元法、全主元消元法

例:用列主元与全主元方法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 1 \\ 5x_1 + 4x_2 + 10x_3 = 0 \\ 3x_1 - 0.1x_2 + x_3 = 2 \end{cases}$$

解: 1) 列主元法

$$\begin{bmatrix}
1 & 2 & 3 & 1 \\
5 & 4 & 10 & 0 \\
3 & -0.1 & 1 & 2
\end{bmatrix}
\rightarrow
\begin{bmatrix}
5 & 4 & 10 & 0 \\
1 & 2 & 3 & 1 \\
3 & -0.1 & 1 & 2
\end{bmatrix}$$



$$\begin{bmatrix} 1 & 0.8 & 2 & 0 \\ 0 & 1.2 & 1 & 1 \\ 0 & \boxed{-2.5} & -5 & 2 \end{bmatrix} \xrightarrow{\begin{bmatrix} 1 & 0.8 & 2 & 0 \\ 0 & -2.5 & -5 & 2 \\ 0 & 1.2 & 1 & 1 \end{bmatrix}}$$

得到解:
$$x_1 = 1.2, x_2 = 2, x_3 = -1.4$$



Gauss消元法例见书

$$\begin{bmatrix}
x_1 & x_2 & x_3 & b \\
1 & 2 & 3 & 1 \\
5 & 4 & 10 & 0 \\
3 & -0.1 & 1 & 2
\end{bmatrix}
\xrightarrow{\begin{bmatrix}
x_3 & x_2 & x_1 & b \\
10 & 4 & 5 & 0 \\
3 & 2 & 1 & 1 \\
1 & -0.1 & 3 & 2
\end{bmatrix}
\xrightarrow{\begin{bmatrix}
x_3 & x_2 & x_1 & b \\
10 & 4 & 5 & 0 \\
0 & 0.8 & -0.5 & 1 \\
0 & -0.5 & 2.5 & 2
\end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} x_3 & x_1 & x_2 & b \\ 10 & 5 & 4 & 0 \\ 0 & \boxed{2.5} & -0.5 & 2 \\ 0 & -0.5 & 0.8 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x_3 & x_1 & x_2 & b \\ 10 & 5 & 4 & 0 \\ 0 & \boxed{2.5} & -0.5 & 2 \\ 0 & 0 & 0.7 & 1.4 \end{bmatrix}$$

回代得到解
$$\chi_1 =$$

回代得到解
$$x_1 = 1.2, x_2 = 2, x_3 = -1.4$$

二、LU分解法

1、基本思想

$$Ax = b \longleftrightarrow^{A=LU} LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

2、构造原理

1) Doolittle分解

$$A = LU, L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & 1 & \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn-1} & 1 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$

2) Grout分解

A=LU,L=
$$\begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & 1 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & u_{n-1n} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$
3) LDU分解 都然为三角分解!

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & 1 & \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{m-1} & 1 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} d_1 & & & & \\ & d_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & & 1 & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & u_{n-\ln} \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

· Doolittle分解法的构造过程:

1) 由A=LU 及矩阵乘积和相等概念,有

$$a_{1j} = (1,0,0,\dots,0) \begin{pmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{nj} \end{pmatrix} = u_{1j} \quad \Rightarrow u_{1j} = a_{1j} \quad (j = 1,2,\dots,n)$$

$$a_{lj} = (1,0,0,\cdots,0) \begin{pmatrix} u_{lj} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{nj} \end{pmatrix} = u_{lj} \implies u_{lj} = a_{lj} \quad (j = 1,2,\cdots,n)$$

$$a_{i1} = (l_{i1}, l_{i2}, \cdots; l_{ii-1}, 1, 0, \cdots; 0) \begin{pmatrix} u_{l1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = l_{i1}u_{l1} \implies l_{i1} = a_{i1}/u_{l1} , (i = 2,3,\cdots;n)$$

得出L的第一列和U的第一行元素!



· Doolittle分解法的构造过程:

2) 同理, 有

$$i \leq j:$$

$$a_{ij} = (l_{i1}, l_{i2}, \dots, l_{ii-1}, 1, 0, \dots, 0) \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{nj} \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + u_{ij} \Rightarrow u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}$$

Doolittle分解计算公式:

$$i > j:$$

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

$$\Rightarrow l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}) / u_{jj}$$

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i \le j$$

$$l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}) / u_{jj}, \quad i > j$$

Doolittle分解算法

1)利用公式

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}$$
, $i \le j$, $l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}) / u_{jj}$, $i > j$

计算出Doolittle分解的L和U矩阵

- 2) 回代求解 Ly = b,得解 y^*
- 3) 回代求解 $Ux = y^*$, 得Ax=b的解x

上述过程求解的方法称为Doolittle分解方法或三角分解法。



3、分析

2) Doolittle分解的紧凑格式



3、分析

1)A可以进行Doolittle分解的条件

定理1、

非奇异矩阵A的Doolittle分解是唯一的。

定理2、

若A的各阶顺序主子式不为零 ,则A有唯一的Doolittle分解。

易知:能进行Gauss消元法就能做Doolittle分解。

例:用LU分解法求解线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3 \\ 4x_1 + 7x_2 + 7x_3 = 1 \\ -2x_1 + 4x_2 + 5x_3 = -7 \end{cases}$$

解:

因为没有指定用哪种LU分解,这里使用 Doolittle分解法做之。用紧凑格式计算。



求解

$$Ly = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -7 \end{pmatrix} \Rightarrow y_1 = 3, \quad y_2 = -5, \quad y_3 = 6$$

求解

$$Ux = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -5 \\ 6 \end{pmatrix} \Rightarrow x_3 = 1, \quad x_2 = -2, \quad x_1 = 2$$

LU分解在矩阵求逆中的应用

- · 针对单个线性方程组, LU分解与Gauss消元计算量相同, 但针对稀疏矩阵相同, 右端项不同的一系列线性方程组, LU分解有优势;
- 矩阵求逆可转化为相同系数矩阵,不同右端项的n个方程组求解
- · 科学计算中尽量减少直接求逆的运算,可 减少计算量,减少舍入误差

$$X=A^{-1}B$$
 $(A,B\in\mathbb{R}^{n\times n})$

$$AX=B.$$

$$X=(x^{(1)}x^{(2)}\cdots x^{(n)}),B=(b^{(1)}b^{(2)}\cdots b^{(n)})$$
得 n 个线性方程组
$$Ax^{(k)}=b^{(k)} \qquad (k=1,2,\cdots,n)$$

三、特殊线性方程组解法

1、基本思想

利用系数矩阵的特殊性消除无效的零元计算来构造 求解公式以提高效率。

1) 追赶法

 $\begin{cases} b_{1}x_{1} + c_{1}x_{2} &= d_{1} \\ a_{i}x_{i-1} + b_{i}x_{i} + c_{i+1}x_{i+1} = d_{i} & (i = 2, 3, \dots, n-1) \\ a_{n}x_{n-1} + b_{n}x_{n} = d_{n} & (b_{1}, c_{1}) \end{cases}$

三对角方程组

$$(i = 2, 3, \dots, n-1)$$

$$A = \begin{pmatrix} b_{1} & c_{1} & & & & & & \\ a_{2} & b_{2} & c_{2} & & & & & \\ & a_{3} & \ddots & \ddots & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \ddots & b_{n-1} & c_{n-1} & \\ & & & a_{n} & b_{n} \end{pmatrix}$$

三对角矩阵

带状矩阵

带状矩阵的三角分解



三对角矩阵的LU分解

$$\begin{pmatrix}
b_{1} & c_{1} \\
a_{2} & b_{2} & c_{2} \\
a_{3} & & & & \\
& & \ddots & \ddots & \\
& & & \ddots & b_{n-1} & c_{n-1} \\
& & & a_{n} & b_{n}
\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}
1 \\
p_{2} & 1 \\
& & \ddots & \ddots \\
& & & p_{n} & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
q_{1} & r_{1} \\
& q_{2} & r_{2} \\
& & \ddots & \ddots \\
& & & & r_{n-1}
\end{pmatrix} = LU$$



2) 追赶法构造过程:

仿照Doolittle方法,有

$$b_1 = q_1, \quad c_1 = r_1 \implies q_1 = b_1, \quad r_1 = c_1$$

 $k \ge 2$,

$$b_k = (0, \dots, 0, p_k, 1, 0, \dots, 0)$$
 $\begin{pmatrix} \vdots \\ r_{k-1} \\ q_k \\ \vdots \end{pmatrix}$ (k-1)行

$$= p_k r_{k-1} + q_k \Rightarrow q_k = b_k - p_k c_{k-1}$$



2) 追赶法构造过程:

 $k \ge 2$,

$$c_{k} = (0, \dots, 0, p_{k}, 1, 0, \dots, 0) \begin{pmatrix} \vdots \\ r_{k} \\ q_{k+1} \\ \vdots \end{pmatrix}^{k \uparrow \overline{\jmath}} = r_{k} \implies r_{k} = c_{k}$$

 $k \ge 2$

$$a_{k} = (0, \dots, 0, p_{k}, 1, 0, \dots, 0) \begin{pmatrix} \vdots \\ q_{k-1} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}^{(k-1)/7\overline{7}} = p_{k}q_{k-1} \implies p_{k} = a_{k}/q_{k-1}$$



追赶法求解公式为:

$$q_{1} = b_{1}, \quad y_{1} = d_{1}$$

$$\begin{cases} p_{k} = a_{k} / q_{k-1} \\ q_{k} = b_{k} - p_{k} c_{k-1} \\ y_{k} = d_{k} - p_{k} y_{k-1} \end{cases} \quad (k = 2, 3, \dots, n)$$

$$x_{n} = y_{n} / q_{n}$$

$$x_{k} = (y_{k} - c_{k} x_{k+1}) / q_{k} \quad (k = n-1, n-2, \dots, 1)$$

用追赶法来求解三对角线性方程组, 计算量只是5n-4,这比Gauss消元法的计算 量要小很多。



追赶法算法

1) 计算

$$q_1 = b_1, r_k = c_k; (k = 1, 2, \dots, n-1), \begin{cases} p_k = a_k / q_{k-1} \\ q_k = b_k - p_k c_{k-1} \end{cases}$$
 $(k = 2, 3, \dots, n)$

2) 由
$$Ly = d$$
,得 $y_1 = d_1, y_k = d_k - p_k y_{k-1}$ ($k = 2, 3, \dots, n$)

3) 由Ux = y,得

$$x_n = y_n / q_n, x_k = (y_k - c_k x_{k+1}) / q_k$$
 $(k = n-1, n-2, \dots, 1)$

用上述过程求解 的方法称为追赶法解法。



对称矩阵的Cholesky分解

将对称正定阵A做LU分解,得到L和U,进一步

$$U = \begin{bmatrix} u_{ij} \\ u_{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{11} \\ u_{22} \\ u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ * \end{bmatrix} \xrightarrow{*} D\widetilde{U}$$

即 $A = L(D\widetilde{U})$,由 A 对称,得 $L(D\widetilde{U}) = \widetilde{U}^T(DL^T)$ 由 A 的 LU 分解的唯一性 \longrightarrow $L = \widetilde{U}^T$ 即 $A = LDL^T$

$$记 D^{1/2} =
 \begin{bmatrix}
 \sqrt{u_{11}} \\
 \sqrt{u_{22}}
 \end{bmatrix}
 见 \widetilde{L} = LD^{1/2}$$
是下三角矩阵

对称正定阵的分解为:

$$A = \widetilde{L}\widetilde{L}^T$$

定理: (Cholesky分解)

对任意n阶对称正定矩阵 A,均存在下三角矩阵L 使 $A=LL^{T}$ 成立,称其为对称正定矩阵 A的Cholesky分解. 进一步地,如果规定 L 的对角元为正数,则 L是唯一确定的。

下面研究如何进行对称正定矩阵的Cholesky分解. 当然,上述的证明过程提供一种计算Cholesky分解的方法. 我们还可以使用下面将要介绍的直接分解方法。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{22} & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{nn} \end{pmatrix}$$

$$a_{11} = l_{11}^{2} \qquad \Rightarrow l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

$$a_{21} = l_{21}l_{11} \qquad \Rightarrow l_{21} = a_{21}/l_{11}$$

$$\cdots a_{n1} = l_{n1}l_{11} \qquad \Rightarrow l_{n1} = a_{n1}/l_{11}$$

$$a_{22} = l_{21}^{2} + l_{22}^{2} \qquad \Rightarrow l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^{2}}$$

利用矩阵乘法规则和利用的下三角结构得到

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

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

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

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

$$A = LL^{T}$$

$$\det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{L}) \det(\mathbf{L}^T) = \prod_{j=1}^n l_{jj}^2$$

$$Ax = b \Leftrightarrow L(L^Tx) = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ L^Tx = y \end{cases}$$

P47 例4 用cholesky方法求解线性方程组

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 2 \\ -0.5 & 2 \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix}$$

- (2) 求解Ly=b,得 $y=\{2,3.5,1\}^T$
- (3) 求解 $L^{T}x=y$,得 $x=\{1,1,1\}^{T}$

第3章 线性方程组解法

§3.5 线性方程组解对系数的敏感性



考虑线性方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.00001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 8.00001 \end{pmatrix}$$

它有准确解为: $x = (1,1)^T$ 。

如果方程组的系数矩阵以及右端项发生微小的

变化,得
$$\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 5.99999 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 8.00002 \end{pmatrix}$$

它有准确解: $x = (10,-2)^T$,可以看出,方程组的解变化非常大。

定义 如果线性方程组Ax=b中,A或b的元素的微小变化,就会引起方程组解的巨大变化,则称方程组为"病态"方程组,矩阵A称为"病态"矩阵. 否则称方程组为"良态"方程组,矩阵A称为"良态"矩阵。

我们需要一种能刻画矩阵和方程组"病态" 标准的量。

1、解对系数敏感性的相对误差

设方程组Ax=b的解为 x^*

$$Ax = b$$
 $\xrightarrow{\text{Hohs}}$ $(A + \delta A)x = b + \delta b$, $\delta, \delta b$ 是批动

扰动方程组的准确解为 $x^* + \delta x$ 有

$$Ax^* = b;$$

 $(A + \delta A)(x^* + \delta x) = b + \delta b \quad (*)$

考察
$$x^*$$
的相对误差 $\frac{\delta x}{x^*}$ 限。



1)考虑 $\delta A=0$,即扰动方程组为 $Ax=b+\delta b$;

则有 $Ax^* = b, \ A(x^* + \delta x) = b + \delta b$

相减,有 $A\delta x = \delta b$

设A可逆,有

$$\delta x = A^{-1}\delta b \Longrightarrow \|\delta x\| \le \|A^{-1}\| \cdot \|\delta b\|$$

对Ax=b取范数,有

$$\left\|x^*\right\| \ge \frac{\left\|b\right\|}{\left\|A\right\|}$$

得到

相对误差 放大因子

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

2)考虑 δb =0,即扰动方程组为 $(A+\delta A)x=b$;

可得

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x^*\|} \le \frac{\|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1 - \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$$

3)一般情况
$$(A+\delta A)x=b+\delta b$$
;

$$\|A\|\cdot\|A^{-1}\|$$

$$\frac{\|\mathcal{S} x\|}{\|x^*\|} \le \frac{\|A\| \cdot \|A^{-1}\|}{1 - \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\mathcal{S} A\|}{\|A\|}} (\frac{\|\mathcal{S} A\|}{\|A\|} + \frac{\|\mathcal{S} b\|}{\|b\|})$$



A的条件数:

$$Cond_{p}(A) = ||A||_{p} \cdot ||A^{-1}||_{p}$$

条件数值越大,解对系数越敏感,方程组越病态。

病态方程组有专门的解法。



条件数的几何意义

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 非奇异,则

$$\min \left\{ \frac{\|\delta A\|_{2}}{\|A\|_{2}} : A + \delta A \, \text{奇异} \right\}$$

$$= \frac{1}{\|A^{-1}\|_{2} \cdot \|A\|_{2}} = \frac{1}{\operatorname{cond}_{2}(A)}$$

即在谱范数下,一个矩阵的条件数的倒数正好等于该矩阵与全体奇异矩阵所成集合的相对距离.

该定理表明,当矩阵A十分病态时,就说明A已十分接近一个奇异矩阵。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.00001 \end{pmatrix} \qquad \det(\mathbf{A}) = 0.00002$$

思考: 是否可以用行列式刻划矩阵的病态?

注意到
$$\operatorname{cond}(A) = \operatorname{cond}(A^{-1})$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 300000.5 & -300000 \\ -100000 & 100000 \end{pmatrix} \quad \det(\mathbf{A}^{-1}) = 50000 = \det(\mathbf{A})^{-1}$$

病态方程的经验判断

判断一个矩阵是否病态需要计算条件数,而计算矩阵的逆非常的麻烦,因此实际计算时通常用实际经验来代替条件数的计算。

常用的判断方法有:

- 1. 在对矩阵进行三角化时出现小主元,大多数情形下 是病态的;
- 2.最大特征值与最小特征值之比非常大(按绝对值);

- 4.系数矩阵A的元素之间数量级相差很大,并且无一定的规则;

【例 3-11】 设 A 是 n 阶非奇异阵, 证明:

$$Cond(A) \geqslant \frac{\|A\|}{\|A - B\|}$$

其中, $\|\cdot\|$ 是矩阵的算子范数, $Cond(A) = \|A\|\cdot\|A^{-1}\|$, B 为任意 n 阶奇异阵.

证明:因为 $Cond(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$,所以本题不等式的证明可转化为证明 $\|A^{-1}\| \cdot \|A - B\| \ge 1$

因为由范数的相容性及矩阵运算,有

$$\|I - A^{-1}B\| = \|A^{-1}(A - B)\| \le \|A^{-1}\| \cdot \|A - B\|$$

这样若能证明 $\|I-A^{-1}B\| \ge 1$,则可得证明结果.

考虑到是矩阵算子范数问题,故引入向量参与证明.

注意到矩阵 B 是奇异矩阵,由线性方程组理论,有对应的齐次方程组 Bx=0 有非零解向量 y 满足等式 By=0,用 A^{-1} 左乘之,得 $A^{-1}By=0$. 由向量和矩阵的运算法则,有

$$\mathbf{y} = (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}) \mathbf{y}$$

两边取范数有

$$||y|| = ||(I - A^{-1}B)y|| \le ||I - A^{-1}B|| \cdot ||y||$$

因为 $\|y\| > 0$,上面不等式同除 $\|y\|$,则得 $\|I - A^{-1}B\| \ge 1$.

在科学计算中,有时人们用残向量 $r=A\bar{x}-b$ 的无穷范数 $\|r\|_{\infty}$ 来检验所求出的计算解 \bar{x} 是否准确,认为若 $\|r\|_{\infty}$ 很小,则 \bar{x} 就当然准确性高. 但应该注意这并不总是对的,实际上,设 \bar{x} * 为准确解,则计算解 \bar{x} 可以写为 $\bar{x}=x^*+\delta x$,有 $\delta x=\bar{x}-x^*$. 此外由 $r=A\bar{x}-b$ 可得

$$A(x^* + \delta x) = A\bar{x} = b + r$$

将r看作 δ b,由误差关系式(3-35),可得

$$\frac{\|\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|}{\|\boldsymbol{x}^*\|} \leqslant \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \frac{\|\boldsymbol{r}\|}{\|\boldsymbol{b}\|} = \operatorname{Cond}(\boldsymbol{A}) \frac{\|\boldsymbol{r}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$$

这说明解的相对误差限不但与 $\|r\|$ 成正比,还与条件数 Cond(A)成正比.因此,根据 $\|r\|_{\infty}$ 很小来认为计算解就准确性高是不对的,因为我们根据这个结论是完全可以构造出 $\|r\|_{\infty}$ 很小,但计算解失真很大的例子.