2018-2019学年第一学期

计 算 方 法

第五讲：解线性方程组的直接法 – 3

第二章 §4-5

主讲人：张治国

zgzhang@szu.edu.cn

深圳大学 医学部 生物医学工程学院

SHENZHEN UNIVERSITY HEALTH SCIENCE CENTER SCHOOL OF BIOMEDICAL ENGINEERING

上节课回顾

- 介绍了基本的直接三角分解法（主要是Doolittle分解算法），研究 $\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{U}$ 的元素和 $\boldsymbol{A}$ 的元素之间的直接关系。
- 介绍了Doolittle分解法的紧凑格式，可用于解矩阵方程。
- 简介了可避免“小主元”的部分选主元Doolittle分解法。

本节课内容

第二章　解线性方程组的直接法

§4 平方根法 $\longrightarrow$ 对称正定线性方程组

4-1　对称正定矩阵的三角分解

4-2　平方根法的数值稳定性

§5 追赶法 $\longrightarrow$ 三对角线方程组

§ 4 平方根法

- 在工程计算（例如医学成像）中，经常遇到求解对称正定线性方程组（$\det \boldsymbol{A} > 0,\ \boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}$）的问题。如能设计出保持系数矩阵对称性的算法，就会为提高算法的空间和时间效率提供方便。
- 因此，把对称正定矩阵的一般 $\boldsymbol{LU}$ 分解转化为对称的两个三角形矩阵的乘积是很必要的。

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- 设 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶对称正定矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子式全部大于零，由定理2.1，$\boldsymbol{A}$ 可分解为一个单位下三角形矩阵 $\tilde{\boldsymbol{L}}$ 和一个上三角形矩阵 $\tilde{\boldsymbol{U}}$ 的乘积，即

$$\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{U}} \tag{4.1}$$

- 设 $\boldsymbol{A}_k, \tilde{\boldsymbol{L}}_k, \tilde{\boldsymbol{U}}_k$ 依次为$\boldsymbol{A}, \tilde{\boldsymbol{L}}, \tilde{\boldsymbol{U}}$ 的 k 阶顺序主子阵，则有

$$\det \boldsymbol{A}_k = \det \tilde{\boldsymbol{L}}_k \cdot \det \tilde{\boldsymbol{U}}_k = \prod_{i=1}^{k} \tilde{u}_{ii} > 0$$

三角矩阵的行列式为对角线元素相乘

对于 $k = 1,2,\cdots,n$ 成立。所以

$$\tilde{u}_{kk} = \frac{\det \boldsymbol{A}_k}{\det \boldsymbol{A}_{k-1}} > 0 \text{ , } k = 1,2,\cdots,n$$

即 $\tilde{\boldsymbol{U}}$ 的对角线元素全部大于0。

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- 令

$$D = \begin{bmatrix} \tilde{u}_{11} & & & & \\ & \tilde{u}_{22} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \tilde{u}_{n-1,n-1} & \\ & & & & \tilde{u}_{nn} \end{bmatrix},$$

$$U = \begin{bmatrix} 1 & \tilde{u}_{12}/\tilde{u}_{11} & \cdots & \tilde{u}_{1,n-1}/\tilde{u}_{11} & \tilde{u}_{1n}/\tilde{u}_{11} \\ & 1 & \cdots & \tilde{u}_{2,n-1}/\tilde{u}_{22} & \tilde{u}_{2n}/\tilde{u}_{22} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & \tilde{u}_{n-1,n}/\tilde{u}_{n-1,n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

- 则 $\widetilde{U} = DU = D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} U$ (4.2)

其中 $D^{\frac{1}{2}} = diag\left(\sqrt{\widetilde{u}_{11}}, \sqrt{\widetilde{u}_{22}}, \cdots, \sqrt{\widetilde{u}_{nn}}\right)$

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- 将(4.2)式代入(4.1)式，得

$$\boldsymbol{A}=\left(\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\right)\left(\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{U}\right)=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}_1 \tag{4.3}$$

其中 $\boldsymbol{L}=\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}$ 为非奇异的下三角矩阵，$\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{U}$ 为非奇异的上三角矩阵，而且 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}_1$ 的对角元恰好是 $\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}$ 的对角元，所以都是正数。

- 因 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^T$，故

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{U}_1^T\boldsymbol{L}^T \tag{4.4}$$

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- 因为 $\boldsymbol{A}$ 的分解式(4.3)是唯一的，而且 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}_1^T$ 都是对角元为正数的下三角型矩阵，$\boldsymbol{U}_1$ 和 $\boldsymbol{L}^T$ 都是对角元为正数的上三角型矩阵，于是

$$\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{L}^T \tag{4.5}$$

- 将(4.5)代入(4.3)得到

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T \tag{4.6}$$

- 综上所述，得对称正定矩阵的分解定理Cholesky分解。

- 定理4.1（Cholesky分解） 设 $\boldsymbol{A}$ 是对称正定矩阵，则存在对角元素全是正数的下三角型矩阵 $\boldsymbol{L}$ ，使(4.6)式存在且唯一。称这种分解为Cholesky分解。

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- $\boldsymbol{L}$ 元素的计算方法:
- 设

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

- 当 $i \geq j$ 时,有 $a_{ij}=\sum_{k=1}^{j} l_{ik} l_{jk}$ 。
- 假定已算出 $\boldsymbol{L}$ 的第1至 $j-1$ 列元素，则

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}+l_{ij} l_{jj},\ i=j, j+1, \cdots, n \qquad (4.7)$$

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- 于是

$$l_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \ j = 1,2,\cdots,n \tag{4.8}$$

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}}, \ i = j+1,\cdots,n \tag{4.9}$$

规定上式中 $\sum_{k=1}^{0} l_{ik} l_{jk} = 0$

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- 方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的求解：
- 对 $\boldsymbol{A}$ 进行Cholesky分解后，解 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 可分为两步：

1. 解 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$

$$\begin{cases} y_1 = \dfrac{b_1}{l_{11}} \\ y_i = \dfrac{b_i - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k}{l_{ii}}, \qquad i = 2,3,\cdots,n \end{cases} \tag{4.10}$$

4-1 对称正定矩阵的三角分解

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

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{y_n}{l_{nn}} \\ x_i = \dfrac{y_i - \sum\limits_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k}{l_{ii}}, \quad i = n-1, \cdots, 2, 1 \end{cases} \tag{4.11}$$

- 称公式(4.8) ~ (4.11)解对称正定线性方程组的方法为平方根法。

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- 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 $\boldsymbol{A}$，只对 $\boldsymbol{A}$ 的下三角部分运算即可。

$$\begin{bmatrix} 4 & & \\ -1 & 17/4 & \\ 1 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix} \xrightarrow{j=1} \begin{bmatrix} \boxed{2} & & \\ -1 & 17/4 & \\ 1 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix}$$

$$\longrightarrow \begin{bmatrix} 2 & & \\ \boxed{-1/2} & 17/4 & \\ \boxed{1/2} & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix} \xrightarrow{j=2} \begin{bmatrix} 2 & & \\ -1/2 & \boxed{2} & \\ 1/2 & 11/4 & 7/2 \end{bmatrix}$$

4-1 对称正定矩阵的三角分解

$$\longrightarrow \begin{bmatrix} 2 & & \\ -1/2 & 2 & \\ 1/2 & \boxed{3/2} & 7/2 \end{bmatrix} \xrightarrow{j=3} \begin{bmatrix} 2 & & \\ -1/2 & 2 & \\ 1/2 & 3/2 & \boxed{1} \end{bmatrix} = \boldsymbol{L}$$

- 解 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$ ，得

$$\boldsymbol{y} = \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{3}{4}\right)^T$$

- 解 $\boldsymbol{L}^T \boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ ，得

$$\boldsymbol{x} = \left(\frac{25}{64}, \frac{13}{16}, -\frac{3}{4}\right)^T$$

4-2 平方根法的数值稳定性

- 平方根法中的分解过程没有选主元，由(4.7)式，得

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

- 因此

$$0 < \max_{1\le k\le j, 1\le j\le n} |l_{jk}| \le \max_{1\le j\le n} \sqrt{a_{jj}} \tag{4.12}$$

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

§ 5 追赶法

- 在一些问题中，要利用到如下三对角线方程组

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{f} \tag{5.1}$$

其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \tag{5.2}$$

且 $\boldsymbol{A}$ 满足

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| > 0 \\ |b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \quad a_i c_i \neq 0, \ i = 2,3,\cdots,n-1 \\ |b_n| > |a_n| > 0 \end{cases} \tag{5.3}$$

- 称 $\boldsymbol{A}$ 为对角占优的三角对角矩阵。

§5 追赶法

- 一个结果：具有形状为(5.2)的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以分解为二对角线的下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和二对角线的上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积。
  - 当 $\boldsymbol{L}$ 的对角元为1时，属于Doolittle分解
  - 当 $\boldsymbol{U}$ 的对角元为1时，属于Crout分解

- 以Crout分解为例，令 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$

其中 $\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$

§5 追赶法

- 则有 $$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & a_i & b_i & c_i & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \tag{5.4}$$

$$= \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & \gamma_i & \alpha_i & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & & & & \\ & 1 & \beta_2 & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & 1 & \beta_{i-1} & & & \\ & & & & 1 & \beta_i & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

§ 5 追赶法

- 可得

$$\begin{cases} a_i = \gamma_i & i = 2, \cdots, n \\ b_1 = \alpha_1; \quad b_i = \gamma_i \beta_{i-1} + \alpha_i & i = 2, \cdots, n \\ c_i = \alpha_i \beta_i & i = 1, \cdots, n-1 \end{cases} \tag{5.5}$$

- 从(5.5)中解得

$$\begin{cases} \gamma_i = a_i & i = 2, \cdots, n \\ \alpha_1 = b_1; \quad \alpha_i = b_i - \gamma_i \beta_{i-1} & i = 2, \cdots, n \\ \beta_i = c_i / \alpha_i & i = 1, \cdots, n-1 \end{cases} \tag{5.6}$$

- 从形式上看，计算为一递推过程（形象称之为“追”）：

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

§5 追赶法

- 解方程组(5.1)分为两步：

  1）解方程组 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{f}$，即

$$\begin{cases}\alpha_1 y_1 = f_1 \\ \gamma_i y_{i-1} + \alpha_i y_i = f_i, \qquad i = 2,\cdots,n\end{cases} \tag{5.7}$$

  解得

$$\begin{cases}y_1 = f_1/\alpha_1 \\ y_i = (f_i - \gamma_i y_{i-1})/\alpha_i, \qquad i = 2,\cdots,n\end{cases} \tag{5.8}$$

  2）解方程组 $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$，即

$$\begin{cases}x_i + \beta_i x_{i+1} = y_i, \qquad i = 1,2,\cdots,n-1 \\ x_n = y_n\end{cases} \tag{5.9}$$

  解得

$$\begin{cases}x_n = y_n \\ x_i = y_i - \beta_i x_{i+1}, \quad i = n-1,\cdots,2,1\end{cases} \tag{5.10}$$

- 形象地称回代求解过程(5.10)为“赶”的过程。

§ 5 追赶法

- 由公式(5.6)、(5.8)、和(5.10)求解方程组(5.1)的方法称为"追赶法"。
- 追赶法不选取主元，也是稳定的。
- 运算复杂度和资源：追赶法共用 $5n-4$ 次乘除法，可以用4个一维数组存放方程组(5.1)的三条对角线和常数项，共占 $4n-2$ 个单元。

§ 5 追赶法

- 例：用追赶法解线性方程组

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

$$\begin{cases} \gamma_i = a_i \\ \alpha_1 = b_1, \\ \alpha_i = b_i - \gamma_i \beta_{i-1} \\ \beta_i = c_i / \alpha_i \\ y_1 = f_1 / \alpha_1 \\ y_i = (f_i - a_i y_{i-1}) / \alpha_i \end{cases}$$

i	α_i	β_i	y_i
1	3	1/3	1/3
2	7/3	3/7	–2/7
3	15/7	7/15	11/15
4	38/15		–11/38

- 最终解得， $\boldsymbol{x} = \left(\frac{21}{38}, -\frac{25}{38}, \frac{33}{38}, -\frac{11}{38} \right)^T$

本节课小结

- 介绍了两类针对特定形式线性方程组的解法。
- 对于对称正定线性方程组，介绍了平方根法（Cholesky分解）。
- 对于三对角线方程组，介绍了追赶法。

本章小结

- 线性方程组的数值解法是科学计算的基础，在各种数值方法中都有涉及。
- 直接法的基本做法是将线性方程组约化为等价的三角形方程组再求解。
- 在约化过程中，选主元是为了保证方法数值稳定性采取的必要措施。但对于特殊的稀疏矩阵（如对称正定矩阵和三对角线对角占优矩阵），即使不选主元，方法也是稳定的。

本章小结

- Gauss列主元素消去法和选主元的Doolittle法都是解不是特别“病态”的线性方程组的有效方法。但是对于大型稀疏线性方程组，使用列主元消去法会大大改变系数的稀疏结构，因此最好选用不改变系数结构的方法求解。

- 线性方程组的数值解法仍未完全解决的问题：
  （1）大型线性方程组的存储和求解；
  （2）病态问题的判定和解法。

作业

习题二：16(1)，17(1)

作业上交日期：2018年10月23日

下节课内容

第三章 插值法与最小二乘法

§1 插值法