2018-2019学年第一学期

计 算 方 法

第二章 解线性方程组的直接法

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

本章内容

第二章 解线性方程组的直接法

✓ §1 直接法与三角形方程组的求解

§2 Gauss列主元素消去法

✓ 2-1 主元素的作用

✓ 2-2 带有行交换的矩阵分解

2-3 列主元消去法的算法设计

本章内容

第二章 解线性方程组的直接法

✔ §3 直接三角分解法

3-1 基本的三角分解法

3-2 部分选主元的Doolittle分解

§4 平方根法

✔ 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

§1 直接法与三角形方程组求解

- 线性方程组的求解在科学计算中非常普遍的使用，在本书多个章节都有涉及。

- 线性方程组的基本形式：

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

§1 直接法与三角形方程组求解

- 线性方程组的矩阵形式：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}, \tag{1.1}$$

其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

- 当 $\det(\boldsymbol{A})\neq 0$，方程组(1.1)的解存在且唯一。
- 注：$\det(\boldsymbol{A})=|\boldsymbol{A}|$ 是矩阵行列式。

§1 直接法与三角形方程组求解

- 线性方程组在医疗健康领域应用广泛：
  - 疾病诊断和治疗模型
  - 生物医学成像（磁共振、CT、超声等）
  - 开发医疗器械（估计重要仪器材料参数等）
  - 医学信号图像处理与机器学习

- 例：计算用药剂量
  - 某药物的最优剂量和病人的年龄、体重、病史有关，则可以建立如下线性方程

$$\text{药量} = \text{年龄} \times x_1 + \text{体重} \times x_2 + \text{病史} \times x_3$$

  - 取三个病人样本，可建立方程组，求解 x_1，x_2，x_3
  - 求解后的方程组可用于求解新病人的最优药量

§1 直接法与三角形方程组求解

- 线性方程组的分类：
  - 稠密和稀疏（根据系数矩阵含零元多少）
  - 高阶和低阶（根据阶数的高低）
  - 对称正定、三对角线、对角占优等（根据系数矩阵的形状性质）
- 不同类型的线性方程组有不同的解法。
- 两类基本解法：直接法（本章）和迭代法（第六章§2）

§1 直接法与三角形方程组求解

- 直接法：
  - 对于给定的方程组，在没有舍入误差的假设下，能在预定的运算次数内求得精确解。
  - 将原方程化为一个或两个三角形方程组求解：包括Gauss消去法和直接三角分解法
  - 计算代价高，适用于低阶线性方程组。
- 迭代法
  - 基于一定的递推格式，产生逼近方程组精确解的近似序列。
  - 收敛性是其为迭代法的前提，存在收敛速度与误差估计问题。
  - 简单实用，适用于大型线性方程组和非线性方程。

§1 直接法与三角形方程组求解

- Gauss消去法：对增广矩阵 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})=(\boldsymbol{A}^{(1)},\boldsymbol{b}^{(1)})$ 施以行初等变换，化 $\boldsymbol{A}^{(1)}$ 为上三角形矩阵 $\boldsymbol{A}^{(n)}$， $\boldsymbol{b}^{(1)}$ 为 $\boldsymbol{b}^{(n)}$。则有与(1.1)同解的对应增广矩阵的上三角形方程组

$$\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(n)} \tag{1.2}$$

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

- 增广矩阵：系数矩阵右边添上方程组等号右边常数列所得矩阵
- 行初等变换：
  1） 以一个非零的数乘矩阵的某一行
  2） 把矩阵的某一行的倍数加到另一行
  3） 互换矩阵中两行的位置

§1 直接法与三角形方程组求解

- Gauss消去法设法消去方程组的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的主对角线下的元素，而将 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 化为等价的上三角形方程组，然后再通过回代过程便可以获得方程组的解。
- 消元与回代计算：
  - 将线性方程组(1.1)化为上三角形方程组(1.2) 的计算过程叫消元；
  - 自下而上解方程组(1.2)，计算 $x_n, x_{n\text{-}1}, \ldots, x_2, x_1$ 的过程叫回代。

§1 直接法与三角形方程组求解

- 设 $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$，记 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的增广矩阵为

$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})=(\boldsymbol{A}^{(1)},\boldsymbol{b}^{(1)})=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

- 1. 计算行乘数：$m_{i1}=a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$，$i=2,3,\cdots,n$
- 2. 第 i 行的元素减去第一行的对应元素乘以 m_{i1}

$$\xrightarrow{a_{11}\neq 0}(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)})=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

§1 直接法与三角形方程组求解

- 一般形式：$k=1,2,\cdots,n$

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

- 1. 计算行乘数：$m_{ik}=a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$，$i=k+1,k+2,\cdots,n$
- 2. 第 i 行的元素减去第 k 行的对应元素乘以 m_{ik}

$$\xrightarrow{\boldsymbol{A}^{(k)}\text{非奇异}}(\boldsymbol{A}^{(n)},\boldsymbol{b}^{(n)})=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

§1 直接法与三角形方程组求解

- 设 $a_{ii}^{(i)} \neq 0,\ i = 1,2,\dots,n$, 则 $\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(n)}$ 的解为：

$$
\begin{cases}
x_n = \dfrac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}, \\[2ex]
x_i = \dfrac{-\sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j + b_i^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}}, i = n-1, n-2, \dots, 2, 1.
\end{cases}
\tag{1.3}
$$

§1 直接法与三角形方程组求解

- 直接三角分解法：将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解为两个简单的三角形矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 的乘积

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U} \tag{1.4}$$

其中 $$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

- 注：在(1.4)中，若 $\boldsymbol{L}$ 是下三角型矩阵，则 $\boldsymbol{U}$ 一定是上三角型矩阵，反之亦然。
- 因此，解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 转化为解三角型方程

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \tag{1.5}$$

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \tag{1.6}$$

§1 直接法与三角形方程组求解

- 下三角形方程组 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$ 的第 i 个方程为

$$l_{i1}y_1+l_{i2}y_2+\cdots+l_{ii}y_i=b_i,\ i=1,2,\cdots,n \tag{1.7}$$

- 假设 $l_{ii}^{(i)}\neq 0$，则可依次解得

$$\begin{cases} y_1=\dfrac{b_1}{l_{11}}, \\[2ex] y_i=\dfrac{-\sum\limits_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j+b_i}{l_{ii}}, i=2,3,\ldots,n. \end{cases} \tag{1.8}$$

§1 直接法与三角形方程组求解

- 上三角形方程组 $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$ 的第 i 个方程为

$$u_{ii}x_i + u_{i,i+1}x_{i+1} + \cdots + u_{in}x_n = b_i,\ i = 1,2,\cdots,n \qquad (1.9)$$

- 假设 $u_{ii}^{(i)} \neq 0$, 则可依次解得

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{y_n}{u_{nn}}, \\ x_i = \dfrac{-\sum\limits_{j=i+1}^{n} u_{ij}y_j + y_i}{u_{ii}}, i = n-1, n-2, \ldots, 2, 1. \end{cases} \qquad (1.10)$$

§1 直接法与三角形方程组求解

- 例：

$$A=\begin{bmatrix}1&-1&1\\2&0&3\\-1&1&-2\end{bmatrix}=LU,\quad b=\begin{bmatrix}1\\5\\-2\end{bmatrix},$$

$$L=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\-1&0&1\end{bmatrix},\quad U=\begin{bmatrix}1&-1&1\\0&2&1\\0&0&-1\end{bmatrix}.$$

方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，求解

$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})=\underset{(\boldsymbol{A}^{(1)},\boldsymbol{b}^{(1)})}{\begin{bmatrix}1&-1&1&1\\2&0&3&5\\-1&1&-2&-2\end{bmatrix}}\to\underset{(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)})}{\begin{bmatrix}1&-1&1&1\\0&2&1&3\\0&0&-1&-1\end{bmatrix}}\begin{matrix}m_{21}=2\\m_{31}=-1\end{matrix}$$

通过回代解得

$$x_3=(-1)/(-1)=1,\ x_2=(3-1\cdot x_3)/2=1,\ x_1=(1-1\cdot x_3-(-1)\cdot x_2)/(-1)=1$$

§1 直接法与三角形方程组求解

- 直接法在无舍入误差的假设下可以通过有限步运算获得精确解。但由于计算机字长有限，浮点数据和运算过程中不断产生舍入误差。这些误差的传播积累会影响计算精度。如何避免舍入误差的增长是算法设计时必须考虑的问题。

- 在直接法中，若将矩阵的全部元素都存贮，当方程组的阶数很高时，所占的存贮空间将很大。因此，算法设计时应当注意节省内存。

- 消去法要考虑两个细节： $a_{ii}^{(i)}=0$ 和 $\boldsymbol{A}$ 为奇异矩阵。

§2 Gauss 列主元素消去法

2-1 主元素的作用

- 在Gauss消元过程中，位于矩阵 $\boldsymbol{A}^{(k)}, k=1,2,\ldots,n$ 的主对角线(k, k)位置上的元素 $a_{kk}^{(k)}$ 称为主元素。

- 由于主元素在计算时做除数，因此应当避免主元素过小。

- 例：用Gauss消去法解线性方程组，用8位十进制尾数的浮点数计算

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

2-1 主元素的作用

- 解：增广矩阵：$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{bmatrix}$
- 行乘数分别为：

$$m_{21} = -1/10^{-8} = -10^{8}, \qquad m_{31} = -2/10^{-8} = -2\times10^{8}$$

- 则 $a_{22}^{(2)} = fl(a_{22} - m_{21}a_{12}) = fl(3.712 + 2\times10^{8})$

$$= 0.000\,000\,00\times10^{9} + 0.2\times10^{9} = 0.2\times10^{9}$$

$$a_{23}^{(2)} = fl(a_{23} - m_{21}a_{13}) = fl(4.623 + 0.3\times10^{9}) = 0.3\times10^{9}$$

$$b_{2}^{(2)} = fl(b_{2} - m_{21}b_{1}) = fl(2 + 10^{8}) = 0.1\times10^{9}$$

- 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。

2-1 主元素的作用

- 矩阵表示计算结果：
- 经第一步消元，得

$$(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)})=\begin{bmatrix}10^{-8} & 2 & 3 & 1\\ & 0.2\times10^{9} & 0.3\times10^{9} & 0.1\times10^{9}\\ & 0.4\times10^{9} & 0.6\times10^{9} & 0.2\times10^{9}\end{bmatrix}$$

- 经第二步消元，得

$$(\boldsymbol{A}^{(3)},\boldsymbol{b}^{(3)})=\begin{bmatrix}10^{-8} & 2 & 3 & 1\\ & 0.2\times10^{9} & 0.3\times10^{9} & 0.1\times10^{9}\\ & & 0 & 0\end{bmatrix}$$

- 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。

2-1 主元素的作用

- 解决“小主元”带来的舍入误差问题的方法：在第 k 列主对角元以下（含主对角元）$a_{ik}^{(k)}\ (k \le i \le n)$ 中挑选绝对值最大者 $a_{i_k k}^{(k)}$，通过交换 $(\boldsymbol{A}^{(k)}, \boldsymbol{b}^{(k)})$ 的第 k 与 i_k 行对应元素，使 $a_{i_k k}^{(k)}$ 仍在主对角线上，仍记为 $a_{kk}^{(k)}$，并称之为第 k 步消元的列主元素。
- 每一步都按列选主元的Gauss消去法称为Gauss列主元素消去法，满足

$$|a_{kk}^{(k)}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k)}|,\ k = 1,2,\cdots,n-1. \tag{2.1}$$

- 实验表明，利用Gauss列主元素消去法解“良态”线性方程组，效果良好。

2-1 主元素的作用

- 例：用Gauss列主元素消去法解前例中方程组
- 解：

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

$$\xrightarrow{r_1\leftrightarrow r_3}\begin{bmatrix}-2 & 1.072 & 5.643 & 3\\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2\\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1\end{bmatrix}$$

- 经过第1次消元，得

$$(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)})=\begin{bmatrix}-2 & 1.072 & 5.643 & 3\\ & 0.3716\times10^{1} & 0.18015\times10^{1} & 0.5\\ & 0.2\times10^{1} & 0.3\times10^{1} & 0.1\times10^{1}\end{bmatrix}$$

2-1 主元素的作用

- 经过第2次消元，得

$$(\boldsymbol{A}^{(3)},\boldsymbol{b}^{(3)})=\begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ & 0.3716\times10^{1} & 0.18015\times10^{1} & 0.5 \\ & & 0.18655541\times10^{1} & 0.68513854 \end{bmatrix}$$

- 回代求得解

$$\bar{x}=(-0.49105820\ ,-0.05088607\ ,0.36725739\ )^{T}$$

- 实际上，方程组的精确解为

$$x=(-0.491058227\ ,-0.050886075\ ,0.3672573984\ )^{T}$$

- 可见，用Gauss列主元素法计算，得到了一个高精度的近似解。

2-2 带有行交换的消元过程

- 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) 带行交换的消元过程
- 不带行交换的消元过程

令

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

其中 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, \ i = k+1, k+2, \cdots, n$

- 矩阵 $\boldsymbol{L}_k$ 称为指标是 k 的初等下三角矩阵。

2-2 带有行交换的消元过程

- 显然 $$L_k(A^{(k)}, b^{(k)}) = (A^{(k+1)}, b^{(k+1)})$$

$$L_k A^{(k)} = A^{(k+1)},\ L_k b^{(k)} = b^{(k+1)}$$

- 例：设

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -2 & 2 & -2 \\ 4 & 2 & 1 \end{bmatrix} \quad L_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad L_1 A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 4 & 1 \end{bmatrix}$$

- 于是， 消元过程可表示为

$$L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_1 (A, b) = (A^{(n)}, b^{(n)})$$

- 因此

$$L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_1 A = A^{(n)}$$

$$A = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} A^{(n)} = LU$$

2-2 带有行交换的消元过程

- 其中

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ m_{21} & 1 & & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \\ m_{n-1,1} & m_{n-1,2} & \cdots & \cdots & 1 & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

$$U = A^{(n)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

- 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 $A = LU$ 。这称之为矩阵 A 的 LU 分解。

2-2 带有行交换的消元过程

- 例：

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

$$\boldsymbol{L}_2=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -4 & 1 \end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 9 \end{bmatrix}=\boldsymbol{A}^{(2)}=\boldsymbol{U},$$

$$\boldsymbol{L}_1^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{L}_2^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & 4 & 1 \end{bmatrix}.$$

2-2 带有行交换的消元过程

- 带有行交换的消元过程
- 在第 k 步消元时，先交换 $(\boldsymbol{A}^{(k)},\boldsymbol{b}^{(k)})$ 的第 k 行与 i_k 行后再消元，即 $\boldsymbol{L}_k \boldsymbol{I}_{i_k k}(\boldsymbol{A}^{(k)},\boldsymbol{b}^{(k)})=(\boldsymbol{A}^{(k+1)},\boldsymbol{b}^{(k+1)})$，其中

$$
\boldsymbol{I}_{i_k k}=\begin{bmatrix}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & 0 & & & & 1 & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & & & \ddots & & & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & 1 & & & & 0 & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{bmatrix}
$$

- 如果不做交换，则 $i_k=k$，$I_{i_k k}=I$。

2-2 带有行交换的消元过程

- 例：

$$A=\begin{bmatrix}1&2&3&4\\4&3&2&1\\2&4&6&8\\-1&-2&-1&0\end{bmatrix},\quad I_{2,3}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}$$

左乘：行变换

右乘：列变换

$$I_{2,3}A=\begin{bmatrix}1&2&3&4\\2&4&6&8\\4&3&2&1\\-1&-2&-1&0\end{bmatrix},\quad AI_{2,3}=\begin{bmatrix}1&3&2&4\\4&2&3&1\\2&6&4&8\\-1&-1&-2&0\end{bmatrix}$$

2-2 带有行交换的消元过程

- 于是消元过程表示为：

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{I}_{i_{n-1}n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{I}_{i_2 2}\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{I}_{i_1 1}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})=(\boldsymbol{A}^{(n)},\boldsymbol{b}^{(n)})$$

- 定理2.1：设 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异矩阵，则存在排列 $\boldsymbol{P}$ 及其单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和非奇异上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$，使

$$\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$$

其中 $\boldsymbol{P}$ 是一个排列阵 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}_{i_{n-1}n-1}\boldsymbol{I}_{i_{n-1}n-1}\cdots\boldsymbol{I}_{i_2 2}\boldsymbol{I}_{i_1 1}$

定理证明和推广见pp.36-37

2-3 列主元消去法的算法设计

- 用Gauss列主元消去法解线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$，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，增广矩阵系数 a_{ij}，i=1,2,…,N; j=1,2,…,N+1，控制条件件转移精度 eps;
2. 对于 k=1,2,…,N–1

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

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

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

   2.3 如果 $|P| \le eps$ ，转7

   2.4 如果 $I_0 = k$ ，转2.6，否则

2-3 列主元消去法的算法设计

2.5 对于 j=k,…,N+1

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

2.6 对于i=k,k+1,…,N

2.6.1 $A(i,k)/A(k,k) \Rightarrow A(i,k)$

2.6.2 对于 j=k,…,N+1

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

3. 如果 $A(N,N)=0$，转7

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

5. 对于k=1,2,…,N-1

5.1 $W=0$

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

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

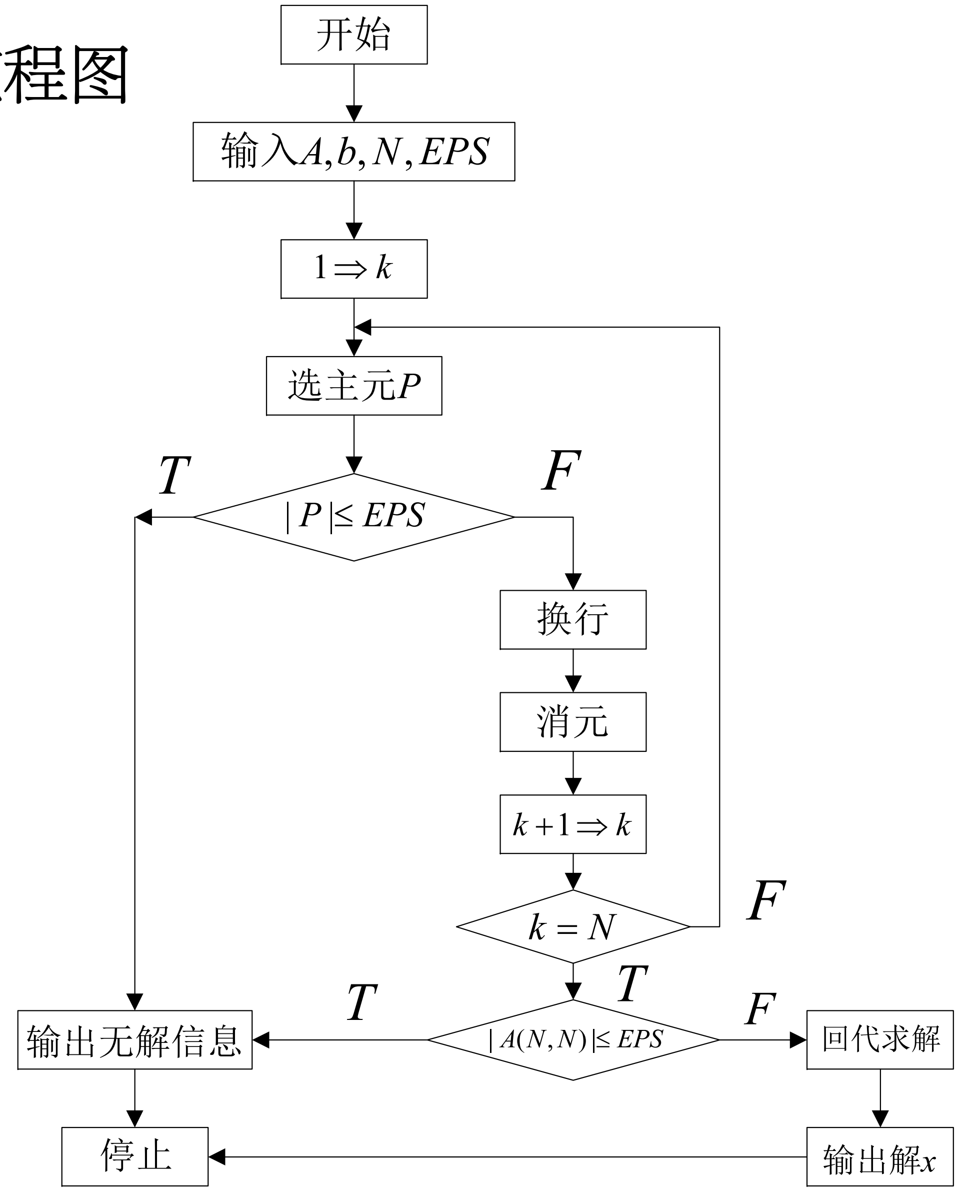
5.4 $A(k,N+1)/A(k,k) \Rightarrow A(k,N+1)$

6. 输出解 $x^T=(A(1,N+1),A(2,N+1),...,A(N,N+1))$ ，转8

7. 输出EXI=1　　　　8. 停机

2-3 列主元消去法的算法设计

- 算法表达的流程图



2-3 列主元消去法的算法设计

- 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

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

2-3 列主元消去法的算法设计

- 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

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

- 当 n 较大时，总计算量为 n^3 量级。
(例：$n=20, MD\approx 2670$)。

§3 直接三角分解法

- 根据定理2.1，系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 如果是非奇异矩阵，则必有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$ 或 $\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$ 成立，其中 $\boldsymbol{P}$ 是排列矩阵，$\boldsymbol{L}$ 是单位下三角矩阵，$\boldsymbol{U}$ 是非奇异上三角矩阵。

- Gauss消去法可以得到 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 的表达式。

- 本节着重研究 $\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{U}$ 的元素和 $\boldsymbol{A}$ 的元素之间的直接关系。

3-1 基本的三角分解法

- Doolittle分解：把矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解成一个单位下三角阵 $\boldsymbol{L}$ 和一个上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积
- 设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$ 的各阶顺序主子式均不为0，则

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \equiv \boldsymbol{LU} \quad (3.1)$$

- 行号 $r\le$ 列号 i： $a_{ri}=\sum_{k=1}^{r} l_{rk}u_{ki},\ i=r,\cdots,n;\ r=1,2,\cdots,n \qquad (3.2)$
- 行号 $i>$ 列号 r： $a_{ir}=\sum_{k=1}^{r} l_{ik}u_{kr},\ i=r+1,\cdots,n;\ r=1,2,\cdots,n-1 \quad (3.3)$

3-1 基本的三角分解法

- Doolittle分解公式

1) 当 $r=1$ 时，解得

(**U**的第1行不变） $u_{1i}=a_{1i},\ i=1,2,\cdots,n$ (3.4)

(**L**的第1列） $l_{i1}=\dfrac{a_{i1}}{u_{11}},\ i=2,3,\cdots,n$ (3.5)

2) 当 $r>1$ 时，行列元素的计算公式

先由(3.2)算 U 的第 r 行，后由(3.3)算 L 的第 r 列

$$u_{ri}=a_{ri}-\sum_{k=1}^{r-1}l_{rk}u_{ki},\ i=r,\cdots,n;\ r=2,\cdots,n \tag{3.6}$$

$$l_{ir}=\frac{a_{ir}-\sum_{k=1}^{r-1}l_{ik}u_{kr}}{u_{rr}},\ i=r+1,\cdots,n;\ r=2,\cdots,n-1 \tag{3.7}$$

由(3.4)-(3.7)式所表示的矩阵分解为Doolittle分解

3-1 基本的三角分解法

- Crout分解：把矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解成一个下三角阵 $\boldsymbol{L}$ 和一个单位上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积

- 则可以递推得到

先算 $\boldsymbol{L}$ 的第 r 列，
后算 $\boldsymbol{U}$ 的第 r 行

$$l_{ir} = a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki}, \quad i = r, \cdots, n; \quad r = 2, \cdots, n \tag{3.8}$$

$$u_{ri} = \frac{a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr}}{l_{rr}}, \quad i = r+1, \cdots, n; \quad r = 2, \cdots, n-1 \tag{3.9}$$

3-1 基本的三角分解法

- Doolittle分解的求解公式
  - 求 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_r = b_r - \sum_{i=1}^{r-1} l_{ri} y_i , \quad r = 2, \cdots, n \end{cases} \tag{3.10}$$

  - 再求 $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{y_n}{u_{nn}} \\ x_r = \dfrac{y_r - \sum_{i=r+1}^{n} u_{ri} x_i}{u_{rr}} , \quad r = n-1, \cdots, 1 \end{cases} \tag{3.11}$$

3-1 基本的三角分解法

- Crout分解的求解公式
  - 求 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$

$$\begin{cases} y_1 = \dfrac{b_1}{l_{11}} \\ y_r = \dfrac{b_r - \sum\limits_{i=1}^{r-1} l_{ri} y_i}{l_{rr}}, \quad r = 2, \cdots, n \end{cases} \tag{3.12}$$

  - 再求 $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_r = y_r - \sum\limits_{i=r+1}^{n} u_{ri} x_i, \quad r = n-1, \cdots, 1 \end{cases} \tag{3.13}$$

3-1 基本的三角分解法

- 例1. 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：由公式(3.4)和(3.5)，得

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

$$(l_{21}, l_{31}, l_{41})^T = \left(-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, 2\right)^T$$

3-1 基本的三角分解法

对 $r=2,3,4$，用公式(3.6), (3.7)计算，得

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

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

1) 解 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$，可得

$$\boldsymbol{y}=(10,20,-17/11,-16)^T$$

2) 解 $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$，得

$$\boldsymbol{x}=(1,2,3,4)^T$$

3-1 基本的三角分解法

- 计算过程中矩阵变化详细情况：

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

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

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

3-1 基本的三角分解法

- 计算过程中矩阵变化详细情况：

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

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

3-1 基本的三角分解法

- 紧凑格式的Doolittle法：计算机计算时，用二维数组 A 存放增广矩阵 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b})$，数组的元素记为 $A(i, j)$, i=1,2,…,n; j=1,2,…,n+1。分解计算得到 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 的元素冲掉数组 A 相应位置的元素。
- 如用Doolittle法，则

$$A(r,i) \leftarrow u_{ri},\ \ r=1,2,\ldots,n;\, i=r,r+1,\ldots,n+1$$

$$A(i,r) \leftarrow l_{ir},\ \ r=1,2,\ldots,n-1;\, i=r,r+1,\ldots,n$$

其中 $u_{r,n+1}$ 为 y_r，用以冲掉 b_r。

3-1 基本的三角分解法

- 因此，数组 A 元素的计算可按照如下格式进行：

$$\boxed{\begin{array}{l} A(r,i) \leftarrow u_{ri} = A(r,i) - \text{第}r\text{行左方数组元素}A(r,k), k=1,\ldots,r-1,\text{与} \\ \text{第}i\text{列上方数组元素}A(k,i), k=1,\ldots,r-1,\text{对应元乘积之和} \end{array}} \tag{3.14}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} A(i,r) \leftarrow l_{ir} = [A(i,r) - \text{第}i\text{行左方数组元素}A(i,k), k=1,\ldots,r-1,\text{与} \\ \text{第}r\text{列上方数组元素}A(k,r), k=1,\ldots,r-1,\text{对应元乘积之和}] / A(r,r) \end{array}} \tag{3.15}$$

3-1 基本的三角分解法

- 由于在计算 $\boldsymbol{U}$ 的方程(3.6)和解 $\boldsymbol{y}$ 的方程(3.10) 遵循相似的规则，因此系数矩阵的Doolittle分解和解方程组 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$ 可以同时进行。
- 以 $N = 3$ 为例，r 表示分解步数：

$$A = (\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}) = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{bmatrix} \to \begin{array}{c} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & u_{34} \end{bmatrix} \begin{matrix} r=1 \\ r=2 \\ r=3 \end{matrix} \\ \equiv \\ \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & y_1 \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & y_2 \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & y_3 \end{bmatrix} \end{array}$$

3-1 基本的三角分解法

- 紧凑格式的Doolittle分解过程中数组 A 的变化（$N=3$）：

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r=1} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ l_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix} \xrightarrow{r=2} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ l_{31} & l_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r=3} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & u_{34} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & y_1 \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & y_2 \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & y_3 \end{bmatrix}$$

3-1 基本的三角分解法

- 例2：用紧凑格式的Doolittle法解例1中的方程组

解：

(1) 分解得到 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}$，并得到 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$ 的解 $\boldsymbol{y}$

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

$$\xrightarrow{r=1}\begin{bmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 & 10 \\ -3/2 & -4 & -12 & 13 & 5 \\ 1/2 & 2 & 3 & -4 & -2 \\ 2 & 14 & 9 & -13 & 7 \end{bmatrix}$$

3-1 基本的三角分解法

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

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

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

3-1 基本的三角分解法

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

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

(2) 解 $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$，计算得：

$$\boldsymbol{x}=(1,2,3,4)^T$$

3-2 部分选主元的Doolittle分解

- Doolittle分解法的 u_{rr} 或Crout法中的 l_{rr} $(r = 1,2,\ldots,n)$称为主元素。
- 为避免“小主元”做除数，算法中需要加入选主元措施。
- 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。

3-2 部分选主元的Doolittle分解

- 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

$$
A \to \begin{bmatrix}
u_{11} & & & & \cdots & u_{1r} & \cdots & u_{1n} & u_{1,n+1} \\
l_{21} & u_{22} & & & & & & & \vdots \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & & & & \vdots \\
 & & & & u_{r-1,r-1} & u_{r-1,r} & \cdots & u_{r-1,n} & u_{r-1,n+1} \\
l_{r1} & l_{r2} & \cdots & & l_{r,r-1} & a_{rr} & \cdots & a_{rn} & a_{r,n+1} \\
\vdots & \vdots & & & \vdots & \vdots & & & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & & l_{n,r-1} & a_{nr} & \cdots & a_{nn} & a_{n,n+1}
\end{bmatrix}
$$

3-2 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 $A(i,r)$，

  $$A(i,r) \leftarrow S_i = A(i,r) - \sum_{k=1}^{r-1} A(i,k)A(k,r) \qquad (3.16)$$

  由(3.6)得出

  $$i = r, \cdots, n;\ r = 1, \cdots, n-1$$

  2. 选绝对值最大的S_i，即确定行号 i_r，使满足

  $$|S_{i_r}| = \max_{r \le i \le N} |S_i|$$

  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

  $$u_{rr} = A(r,r)$$

3-2 部分选主元的Doolittle分解

4. 分解计算：

$$A(i,r) \leftarrow l_{ir} = \frac{A(i,r)}{A(r,r)}, \qquad (3.17)$$

由(3.7)得出

$$i = r+1,\cdots,n; r = 1,2,\cdots,n-1$$

$$A(r,i) \leftarrow u_{ri} = A(r,i) - \sum_{k=1}^{r-1} A(r,k)A(k,i), \qquad (3.18)$$

由(3.6)得出

$$i = r+1,\cdots,n+1; r = 1,2,\cdots,n$$

注：以上规定 $\sum_{k=1}^{0} A(r,k)A(k,i) = 0$

3-2 部分选主元的Doolittle分解

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：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 & 1 \\ 2 & -4 & 6 & 4 \\ 4 & -9 & 2 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow[i=1,2,3]{r=1 \atop A(i,1)\leftarrow S_i} \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{matrix}} & \begin{matrix} -1 & 3 & 1 \\ -4 & 6 & 4 \\ -9 & 2 & 1 \end{matrix} \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_3} \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 4 \\ 2 \\ 1 \end{matrix}} & \begin{matrix} -9 & 2 & 1 \\ -4 & 6 & 4 \\ -1 & 3 & 1 \end{matrix} \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{分解}} \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 4 & -9 & 2 & 1 \end{matrix}} \\ \begin{matrix} \boxed{\begin{matrix} 1/2 \\ 1/4 \end{matrix}} & \begin{matrix} -4 & 6 & 4 \\ -1 & 3 & 1 \end{matrix} \end{matrix} \end{bmatrix}$$

3-2 部分选主元的Doolittle分解

$$\xrightarrow[i=2,3]{\substack{r=2\\A(i,2)\leftarrow S_i}}\begin{bmatrix}4 & -9 & 2 & 1\\ 1/2 & \boxed{1/2} & 6 & 4\\ 1/4 & \boxed{5/4} & 3 & 1\end{bmatrix}\xrightarrow{r_2\leftrightarrow r_3}\begin{bmatrix}4 & -9 & 2 & 1\\ 1/4 & \boxed{5/4} & 3 & 1\\ 1/2 & \boxed{1/2} & 6 & 4\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{分解}}\begin{bmatrix}4 & -9 & 2 & 1\\ 1/4 & \boxed{5/4} & \boxed{5/2} & \boxed{3/4}\\ 1/2 & \boxed{2/5} & 6 & 4\end{bmatrix}\xrightarrow[\text{分解}]{r=3}\begin{bmatrix}4 & -9 & 2 & 1\\ 1/4 & 5/4 & 5/2 & 3/4\\ 1/2 & 2/5 & \boxed{4} & \boxed{32/10}\end{bmatrix}$$

于是

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

3-2 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（系数矩阵相同的系列方程组）：

$$AX = B$$

其中 $X = (x_1, x_2, \cdots, x_m)$, $B = (b_1, b_2, \cdots, b_m)$

- 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：

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

3-2 部分选主元的Doolittle分解

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

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

$$\xrightarrow[s_2, s_3, s_4]{\text{计算}} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1/2 & 0 & 2 & -1 & -8 & -16 \\ 1/2 & 2 & 1 & 0 & -2 & -4 \\ 1/2 & 0 & 4 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

3-2 部分选主元的Doolittle分解

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

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

$$\xrightarrow[s_3, s_4]{\text{计算}} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 3 & -3 & -20 & -40 \\ 1/2 & 2 & -1/2 & 3/2 & 8 & 16 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & -1 & -8 & -16 \\ 1/2 & 0 & 5/2 & 3 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

3-2 部分选主元的Doolittle分解

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

$$\vdots$$

下省略（详见pp48-50）

最终解得：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} -7 & -14 \\ 3 & 6 \\ 2 & 4 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$$

3-2 部分选主元的Doolittle分解

- 由于矩阵三角分解的唯一性，直接三角分解法和Gauss消去法的解是一致的（如果不考虑舍入误差）。
- 解 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$ 对应于消元；解 $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$ 对应于回代。
- 直接三角分解法的优势在于
  - （1）内积运算可以采用双精度运算，
  - （2）节省内存。
- 因此，直接三角分解法可为提高解的精度提供方便。

§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

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

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

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

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

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

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

4-1 对称正定矩阵的三角分解

- 将(4.2)式代入(4.1)式，得

$$A = \left(\tilde{L}D^{\frac{1}{2}}\right)\left(D^{\frac{1}{2}}U\right) = LU_1 \tag{4.3}$$

其中 $L = \tilde{L}D^{\frac{1}{2}}$ 为非奇异的下三角矩阵，$U_1 = D^{\frac{1}{2}}U$ 为非奇异的上三角矩阵，而且 L 和 U_1 的对角元恰好是 $D^{\frac{1}{2}}$ 的对角元，所以都是正数。

- 因 $A = A^T$，故

$$LU_1 = U_1^T L^T \tag{4.4}$$

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

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

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

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 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$

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

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

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

- 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 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$ ，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

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

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

本章重点

- 熟练掌握Gauss消去法和直接三角分解法
- 了解针对特殊形式线性方程组使用的数值方法
- 理解选主元的目的和必要，并掌握选主元的解法