2018-2019学年第一学期

计 算 方 法

第三讲：解线性方程组的直接法－1

第二章 §1，§2

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

- 介绍了误差分析的基本概念：
  - 舍入误差和截断误差
  - 绝对误差和相对误差
  - 有效数字
- 讨论了浮点数的形式和其带来的基本运算（四则运算，连加连乘）的误差
- 讨论了数值方法的稳定性与算法设计原则

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

§3 直接三角分解法

§4 平方根法

§5 追赶法

本节课内容

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

§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：

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

线性方程组

- 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。

生物医学工程领域的线性方程组

- 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

线性方程组解法

- 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 ）

直接法与迭代法

- 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。

Gauss消去法

- 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

Gauss消去法

- 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 $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_2, x_1$ 的过程叫回代。

Gauss消去法

- 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}

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

Gauss消去法

- 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}

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

Gauss消去法

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

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

直接三角分解法

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

- 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 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 转化为解三角型方程

$$\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b} \tag{1.5}$$

$$\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y} \tag{1.6}$$

直接三角分解法

- 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

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

直接三角分解法

- 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 $\boldsymbol{Ax=b}$，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

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

- 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

$$(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)})=\begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ & 0.3716\times 10^{1} & 0.18015\times 10^{1} & 0.5 \\ & 0.2\times 10^{1} & 0.3\times 10^{1} & 0.1\times 10^{1} \end{bmatrix}$$

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

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ m_{21} & 1 & & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \\ m_{n-1,1} & m_{n-1,2} & \cdots & \cdots & 1 & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

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

- 不带行交换的Gauss消元过程产生了一个单位下三角形矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和一个上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$，且 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$。这称之为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 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 $j=k,\ldots,N+1$

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

2.6 对于$i=k,k+1,\ldots,N$

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

2.6.2 对于 $j=k,\ldots,N+1$

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

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$k=1,2,\ldots,N-1$

5.1 $W=0$

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

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

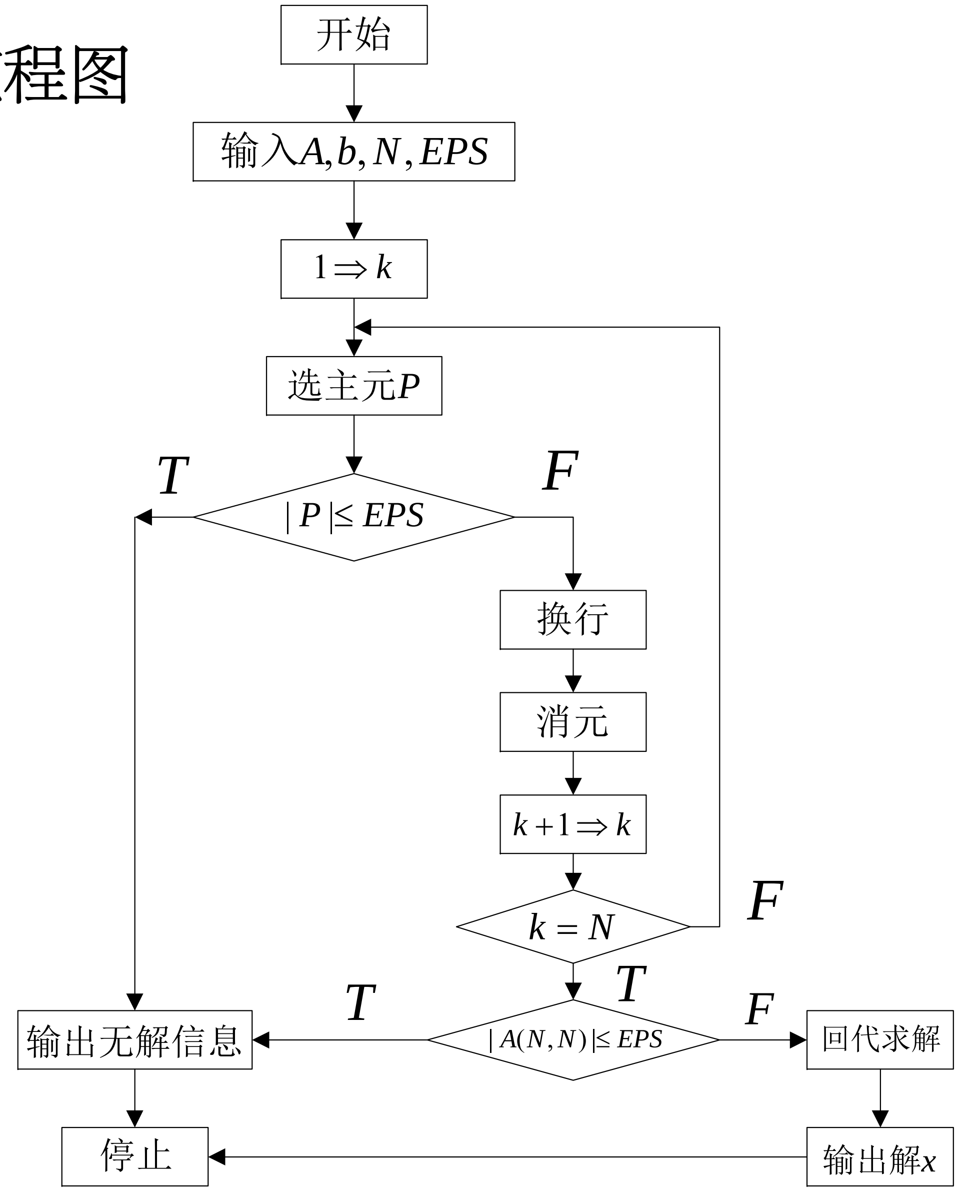
5.4 $A(k,N+1)/A(k,k) \Rightarrow A(k,N+1)$

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



Gauss消去法的运算量

- 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

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

Gauss消去法的运算量

- 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：$n=20, MD\approx 2670$)。

本节课小结

- 介绍了解线性方程组的直接法，主要是Gauss消去法（消去和回代）和它的变形直接三角分解法（通过$\boldsymbol{LU}$分解）。

- 讨论了主元素的作用并介绍了Gauss列主元素消去法以避免小主元引起的误差。

- 简介了Gauss消去法和Gauss列主元素消去法的矩阵乘法形式、算法设计、和复杂度。

作业

习题二：2，3

【选做】习题二：3（MATLAB编程，50分）

作业上交日期：2018年10月09日

下节课内容

第二章 解线性方程组的直接法

§3 直接三角形分解法