计算方法及MATLAB实现

郑勋烨　编著

主审：高世臣　褚宝增　王祖朝　王翠香

副审：李少琪　李明霞　赵琳琳　赵俊芳

国防工业出版社

§5.3 矩阵三角分解法

5.3.3 三对角矩阵的追赶法

(Crout Factorization for Tri-diagonal Matrix)

【 **定义** 5.3.2 **严格对角占优矩阵**（ SDD ）】 (Strictly Diagonal Dominant Matrix)

一个 n 阶矩阵 A 称为 严格对角占优矩阵（ SDD ），如果它的每个主对角元的绝对值严格大于同一行的所有其他元素绝对值的总和．即

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|, \quad j \neq i$$

若存在某一个主对角元 a_{kk} ， 其绝对值 非严格 大于 (即可能等于) 同一行的所有其他元素绝对值，即

$$|a_{kk}| \geq \sum_{j=1}^{n} |a_{kj}|, \quad j \neq k$$

则称矩阵 A 为 弱对角占优矩阵(Weak Diagonal Dominant Matrix) (WDD).

注记 1. 我们这里定义的 *严格对角占优矩阵*（ SDD ）事实上是 *行占优* 的，即在同一行里比较元素绝对值；当然也可以类似定义 *列占优* 的，即 $|a_{ii}| > \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|, \quad i \neq j$. 但通常所说的就是 *行占优* 的严格对角占优矩阵.

注记 2. *严格对角占优矩阵*（ SDD ）一定是非奇异阵 (行列式非零). 这个结论我们将在后面证明. 但 *弱对角占优矩阵*(Weak Diagonal Dominant Matrix)（ WDD ）则需要另外施加所谓“不可约”的条件，才是非奇异阵.

【 释例 5.3.2　三阶严格对角占优矩阵 】

验证如下 3 阶矩阵是否严格对角占优矩阵:

$$A=\begin{pmatrix} 7 & 2 & 0 \\ 3 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -6 \end{pmatrix},\quad B=\begin{pmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

【 **解答** 】

由于 $7 > 2, 5 > 3 + 1, 6 > 5$ ，故 A 是严格对角占优矩阵．而由于 $6 < 4 + 3$,(或由于 $2 < 4$ ，或由于 $1 < 3$) 故 B 非严格对角占优矩阵.

【**定义** 5.3.4 **三对角矩阵**（ Tri-diagonal Matrix ）】一个 n 阶矩阵 A 称为 *三对角矩阵*（ Tri-diagonal Matrix ），如果满足所谓 *三对角条件*：元素的行标与列标之距离大于 1 时，元素为 0. 即 $|i-j|>0$ 时 $a_{ij}=0$. 形式上看，其所有非零元素集中在主对角线和其腋下与肩上的对角线上．即具有形式

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

【**定义** 5.3.5 **严格对角占优的三对角矩阵**（Tri-diagonal SDD Matrix)】

严格对角占优的三对角矩阵 A 形如

$$
A = \begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
$$

满足:

(0)三对角条件：元素的行标与列标之距离大于 1 时，元素为 0. 即 $|i-j|>1$ 时 $a_{ij}=0$.

以及如下的 严格对角占优条件:

(1) $|b_1|>|c_1|>0$;

(2) $|b_i|>|a_i|+|c_i|$;

(3) $|b_n|>|a_n|>0$;

【**命题** 3A. **3 阶严格对角占优的三对角矩阵的追赶法** (LU Method for Tri-diagonal Matrix)】严格对角占优的 3 阶三对角矩阵 A 满足

(1)$|b_1| > |c_1| > 0$;

(2)$|b_2| > |a_2| + |c_2|$;

(3)$|b_3| > |a_3| > 0$;

则可唯一分解为二对角阵 $A = LU$ 形式. 其中 L 为下二对角方阵, U 为单位上二对角方阵. 即

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ 0 & a_3 & b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & \\ r_2 & \alpha_2 & \\ & r_3 & \alpha_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & \\ & 1 & \beta_2 \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

方法一 根据一般形式的 3 阶矩阵的 Crout 分解公式，我们有

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} =$$

$$
= \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} - \dfrac{a_{12}}{a_{11}} a_{21} & 0 \\ a_{31} & a_{32} - \dfrac{a_{12}}{a_{11}} a_{31} & a_{33} - l_{31} u_{13} - l_{32} u_{23} \end{pmatrix} \times
$$

$$
\begin{pmatrix} 1 & \dfrac{a_{12}}{a_{11}} & \dfrac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & 1 & \dfrac{a_{23} - a_{21} u_{13}}{l_{22}} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
$$

故而

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ 0 & a_3 & b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & \\ r_2 & \alpha_2 & \\ & r_3 & \alpha_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & \\ & 1 & \beta_2 \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} b_1 & & \\ a_2 & b_2 - a_2\beta_1 & \\ & a_3 & b_3 - a_3\beta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \dfrac{c_1}{b_1} & \\ & 1 & \dfrac{c_2}{\alpha_2} \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

方法二　或者，依然利用展开矩阵乘积并比较对应位置的元素的待定系数法，同样有

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & & \\ r_2 & \alpha_2 & \\ & r_3 & \alpha_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & \\ & 1 & \beta_2 \\ & & 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_1\beta_1 & \\ r_2 & r_2\beta_1 + \alpha_2 & \alpha_2\beta_2 \\ & r_3 & r_3\beta_2 + \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ 0 & a_3 & b_3 \end{pmatrix}$$

（ 0 ）初始元素： $\alpha_1 = b_1;$ $\alpha_1\beta_1 = c_1 \Rightarrow \beta_1 = \dfrac{c_1}{\alpha_1} = \dfrac{c_1}{b_1};$

（ 1 ） $a_i = r_i, i = 2, 3; \Rightarrow r_2 = a_2, r_3 = a_3$ ，即下二对角阵腋下元素等于三对角阵腋下元素；

（ 2 ） $b_2 = r_2\beta_1 + \alpha_2 \Rightarrow \alpha_2 = b_2 - r_2\beta_1 = b_2 - a_2\dfrac{c_1}{b_1}$ ；

（ 3 ） $\alpha_2\beta_2 = c_2 \Rightarrow \beta_2 = \dfrac{c_2}{\alpha_2} = \dfrac{c_2}{b_2 - a_2\dfrac{c_1}{b_1}}$ ；

（ 4 ） $b_3 = r_3\beta_2 + \alpha_3 \Rightarrow \alpha_3 = b_3 - r_3\beta_2$ ；

于是

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ 0 & a_3 & b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & \\ r_2 & \alpha_2 & \\ & r_3 & \alpha_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & \\ & 1 & \beta_2 \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} b_1 & & \\ a_2 & b_2 - a_2\beta_1 & \\ & a_3 & b_3 - a_3\beta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{c_1}{b_1} & \\ & 1 & \frac{c_2}{\alpha_2} \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

【 定理 4. **严格对角占优三对角矩阵的追赶法** (Crout Factorization for Tri-diagonal SDD Matrix) **】**

严格对角占优的三对角矩阵 A 满足:

(0)三对角条件：元素的行标与列标之距离大于 1 时，元素为 0. 即 $\mid i-j \mid > 1$ 时 $a_{ij}=0$.

以及如下的 严格对角占优条件:

(1)$|b_1| > |c_1| > 0$;

(2)$|b_i| > |a_i| + |c_i|$;

(3)$|b_n| > |a_n| > 0$;

则 A 是非奇异矩阵 (从而以严格对角占优的三对角矩阵作为系数矩阵的方程组存在唯一解)，且可唯一分解为二对角阵乘积 $A = LU$ 形式. 其中 L 为下二对角方阵, U 为单位上二对角方阵. 即

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix}
\alpha_1 & & & & & & \\
r_2 & \alpha_2 & & & & & \\
 & r_3 & \alpha_3 & & & & \\
 & & \ddots & \ddots & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & & \\
 & & & & r_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\
 & & & & & r_n & \alpha_n
\end{pmatrix}
$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & & & & & \\ & 1 & \beta_2 & & & & \\ & & 1 & \beta_3 & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

【证明】

首先我们可以作严格对角占优的三对角矩阵 A 的 Crout 分解 $A = LU$，比较系数得分解矩阵的元素算法流程：

$$\begin{cases} \alpha_1 = b_1, \beta_1 = \dfrac{c_1}{b_1} & \\ a_i = r_i & \Rightarrow r_i = a_i \\ b_i = r_i\beta_{i-1} + \alpha_i & \Rightarrow \alpha_i = b_i - a_i\beta_{i-1} \\ c_i = \alpha_i\beta_i & \Rightarrow \beta_i = \dfrac{c_i}{\alpha_i} \end{cases} \quad i = 2, 3, \cdots, n$$

因此这种分解是唯一存在的，每个元素都由被分解的三对角矩阵的元素按照上述计算公式唯一确定了.

下面我们用数学归纳法证明严格对角占优三对角矩阵的“非奇异”性，从而由 Cramer 法则即可保证以严格对角占优的三对角矩阵作为系数矩阵的方程组存在唯一解.

$n = 1$ 时矩阵退化， $A = b_1$ ，由 严格对角占优条件： $|b_1| > |c_1| > 0$ 立得结论.

$n=2$ 时，由于 A 的行列式的绝对值 (注意行列式自身是个数，可正可负，取了绝对值才非负)

$|det(A)| = |\begin{vmatrix} b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}|$(展开行列式) $= |b_1 b_2 - c_1 a_2|$(用绝对值三角不等式)$\geq |b_1 b_2| - |c_1 a_2| > |c_1 a_2| - |c_1 a_2| = 0$

(用对角占优条件：$|b_1| > |c_1| > 0, |b_2| > |a_2| > 0$)

从而 $det(A) \neq 0$ ，即 $n=2$ 时，严格对角占优的三对角矩阵 A 非奇异.

归纳假设 $n-1$ 时结论成立，则对 n 阶矩阵 A 用 Gauss 消去法将第二行首列元素 a_2 消去为 0，变换成为“分块上三角阵”形式，即得

$$
\begin{bmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & & a_n & b_n
\end{bmatrix}
\quad \underline{r_2 - \frac{a_2}{b_1} r_1} \longrightarrow
$$

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & \\
0 & b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2 & c_2 & & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
$$

记 $n-1$ 阶矩阵

$$A_1 = \begin{pmatrix} b_2 - \frac{c_1}{b_1}a_2 & c_2 & & & & & \\ a_3 & b_3 & c_3 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

则由于 $|b_2 - \frac{c_1}{b_1}a_2|$ (用绝对值三角不等式)$\geq |b_2| - |\frac{c_1}{b_1}a_2|$
$\geq |b_2| - |a_2| > 0$

(用对角占优条件： $|b_1| > |c_1| > 0$, 从而 $|\frac{c_1}{b_1}| < 1$)

从而 $n-1$ 阶矩阵 A_1 是严格对角占优的三对角矩阵，由归纳假设知其非奇异， $det(A_1) \neq 0$ ，从而 $det(A) = b_1|A_1| \neq 0$ ，即阶数为 n 时，严格对角占优的三对角矩阵 A 非奇异.

因此由归纳法知，所有各阶严格对角占优的三对角矩阵 A 均非奇异.

【 证毕 】

【推论. (非严格) 弱对角占优三对角矩阵的追赶法】

弱对角占优的三对角矩阵 A 满足

(1)$|b_1| > |c_1| > 0$;

(2)$|b_i| \geq |a_i| + |c_i|$;(严格不等式改为弱不等式)

(3)$|b_n| > |a_n| > 0$;

则 A 非奇异，且可唯一分解为二对角阵乘积 $A = LU$ 形式.

【 注记．追赶法对于非奇异三对角矩阵的普适性 】

(严格或弱) 对角占优的三对角矩阵 A 可唯一分解为二对角阵 $A = LU$ 形式．其中 L 为下二对角方阵， U 为单位上二对角方阵．但“对角占优”条件仅是“非奇异”的充分条件，远非必要的．事实上，追赶法对于非对角占优但却非奇异的三对角矩阵具有普适性，即 非奇异三对角矩阵 作为系数矩阵的方程组都可以用追赶法求惟一解．只是在工程实践中对角占优的三对角矩阵越发常见和重要罢了．

【 算法 4. **对角占优的三对角矩阵的追赶法的求解方程组意义 】** 对角占优的三对角矩阵作 Crout 分解 $A = LU$ 后，方程组 $Ax = f$ 等价于 $LUx = f$, 若令 $y = Ux$, 则等价于依次连续求解两个三角形方程组： $Ly = f$ 和 $Ux = y$.

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n
\end{pmatrix}
$$

$$= \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}$$

1. 先正向前追，求解下二对角形方程组 $Ly = f$ 获得过渡向量 y：

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & & & \\ r_2 & \alpha_2 & & & & & \\ & r_3 & \alpha_3 & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & r_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\ & & & & & r_n & \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}$$

2. 再倒向后赶，求解单位上二对角形方程组 $Ux=y$ 获得解向量 x：

$$\begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & & & & & \\ & 1 & \beta_2 & & & & \\ & & 1 & \beta_3 & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix}$$

I. 正向追的过程：

(1) 求系数 β_i :
$$\begin{cases} \beta_1 = \dfrac{c_1}{b_1} \\ \beta_i = \dfrac{c_i}{\alpha_i} \end{cases} \quad i = 2, 3, \cdots, n,$$

(2) 由 $Ly = f$ 求过渡未知元

$$y_i : \begin{cases} y_1 = \dfrac{f_1}{b_1} \\ y_i = \dfrac{f_i - a_i y_{i-1}}{b_i - a_i \beta_{i-1}} \end{cases} \quad i = 2, 3, \cdots, n$$

II. 倒向赶的过程：由 $Ux = y$ 求初始未知元 x_i:

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - \beta_i x_{i+1} \end{cases} \quad i = n-1, n-2, n-3, \cdots, 2, 1$$

【命题 3B. SDD 三对角矩阵的追赶法的计算量】
SDD 三对角矩阵的追赶法的（乘除法）计算量约为 $5n-4$.

【说明】

SDD 三对角矩阵的追赶法的计算量，用来求解：(1) 系数 β_i；(2) 追赶法求解两个二角形方程组：$Ly=b$ 和 $Ux=y$.

a. 乘除法计算量：$5n-4$.

b. 加减法计算量：$3n-3$.

即 SDD 三对角矩阵的追赶法的（乘除法）计算量约为 $5n-4$. 比 Gauss 消去法的计算量 $\dfrac{n^3}{3}$ 要少得多.

【例 1. 三对角矩阵的追赶法】用三对角矩阵的追赶法求解非齐次线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 & = 1 \\ x_1 + 3x_2 + x_3 & = 2 \\ x_2 + 2x_3 & = 1 \end{cases}$$

作三对角系数矩阵的 LU(Crout) 分解

$$A=\begin{pmatrix}2&1&0\\1&3&1\\0&1&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha_1&&\\r_2&\alpha_2&\\&r_3&\alpha_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\beta_1&\\&1&\beta_2\\&&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}2&&\\1&\alpha_2&\\&1&\alpha_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\frac{1}{2}&\\&1&\beta_2\\&&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}2&0&0\\1&3-1\cdot\frac{1}{2}&0\\0&1&\alpha_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\frac{1}{2}&\\&1&\frac{1}{3-1\cdot\frac{1}{2}}\\&&1\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 1 & 2 - 1 \cdot \dfrac{2}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \\ & 1 & \dfrac{2}{5} \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{8}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \\ & 1 & \frac{2}{5} \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

连续求解方程组 $Ly = b$ 和 $Ux = y$, 即

$$Ly = b : \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{8}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{3}{5} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

$$Ux = y: \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \\ & 1 & \frac{2}{5} \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{3}{5} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$