第7章　线性方程组的直接解法

§7.1 Gauss 消去法

考虑方程组$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$. Gauss 消去法的基本思想是：将系数矩阵$\boldsymbol{A}$ 逐次消去成上三角矩阵，再逐次向后回代求出方程组的解。

§7.1 Gauss 消去法

考虑方程组$Ax = b$. Gauss 消去法的基本思想是：将系数矩阵A 逐次消去成上三角矩阵，再逐次向后回代求出方程组的解。

第1步：从第2个方程到第n 个方程消去未知量x_1,

设$a_{11} \neq 0$, 令$l_{i1} = -\dfrac{a_{i1}}{a_{11}}$, 计算

$$\begin{cases} a_{i1} := 0; \\ a_{ij} := a_{ij} + l_{i1}a_{1j}; \\ b_i := b_i + l_{i1}b_1, \quad i, j = 2, 3, \cdots, n \end{cases}$$

这一步的运算等价于用初等矩阵

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \mathbf{0} \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

左乘方程组两端

$$L_1 A x = L_1 b$$

第2步：设方程组 $L_1Ax = L_1b$ 中$a_{22} \neq 0$, 从第3个方程到第n 个方程消去未知量x_2,

$$\begin{cases} l_{i2} := -\dfrac{a_{i2}}{a_{22}}; \\ a_{i2} := 0; \\ a_{ij} := a_{ij} + l_{i2}a_{2j}; \\ b_i := b_i + l_{i2}b_2, \quad i, j = 3, 4, \cdots, n \end{cases}$$

这一步的运算等价于用初等矩阵

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & \mathbf{0} & \\ 0 & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & l_{n2} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

左乘方程组两端

$$L_2 L_1 A x = L_2 L_1 b$$

在完成$n-1$ 步后，原方程组就化为与其等价的上三角形方程组

$$\left.\begin{aligned} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n&=b_1\\ a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n&=b_2\\ &\vdots\\ a_{nn}x_n&=b_n \end{aligned}\right\}$$

利用逐次回代把$x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$ 计算出来

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{b_n}{a_{nn}} \\ x_k = \dfrac{1}{a_{kk}}\left(b_k - \displaystyle\sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}x_j\right), \\ \qquad k = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

1. $a_{ii}(i = 1, 2, \cdots, k)$ 全不为0 的充要条件是A 的顺序主子式$\Delta_i \neq 0$, $i = 1, 2, \cdots, k$，其中$k \leq n$。
2. 若A 的的顺序主子式均不为零，则可用Gauss 消去法求出方程组$Ax = b$ 的解。

Gauss 消去法中每步要用到主元素a_{ii} 作除数，当主元素绝对值很小时，可能引起很大的舍入误差，为克服这个缺点，可用部分主元素法（或称列主元素法）：

Gauss 消去法中每步要用到主元素a_{ii} 作除数，当主元素绝对值很小时，可能引起很大的舍入误差，为克服这个缺点，可用部分主元素法（或称列主元素法）：

第1步：在x_1 的系数中，即系数矩阵A 的第一列中取按模最大者作为主元，设

$$|a_{r1}| = \max_{1\leq i\leq n} |a_{i1}|$$

交换第1个方程与第r 个方程，即把a_{r1} 换在a_{11} 的位置上，再按Gauss 消去法第1步消元。

第k 步：在第k 到第n 个方程中找出未知数x_k 系数中按模最大者，设

$$|a_{r_k k}| = \max_{k \le j \le n} |a_{jk}|$$

交换第k 个方程与第r_k 个方程，即把$a_{r_k k}$ 换在a_{kk} 的位置上，再按Gauss 消去法第k 步消元。

部分主元素算法如下：对于$k=1,2,\cdots,n$, 计算

(1) 找$\rho_k \geq k$, 使得$|a_{\rho_k k}| = \max\{|a_{ik}|, i \geq k\}$,

(2) 如果$a_{\rho_k k} = 0$, 停止计算，否则

(3) $a_{kj} \leftrightarrow a_{\rho_k k}, \quad j = k, k+1, \cdots, n$, $b_k \leftrightarrow b_{\rho_k}$

(4) 计算$l_{ik} = \dfrac{a_{ik}}{a_{kk}}, \quad i = k+1, k+2, \cdots, n$

(5) $a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj}, \quad i, j = k+1, \cdots, n,$

$b_i = b_i - l_{ik} b_k, \quad i = k+1, \cdots, n.$

例：用Gauss 消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 &= 0 \\ 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 3 \\ -x_1 \qquad\quad - 3x_3 &= 2 \end{cases}$$

解：对增广矩阵进行Gauss 消去法

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \\ -1 & -3 & 0 & 2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

所以

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \\ \quad -2x_2 + x_3 = 3 \\ \quad \frac{1}{2}x_3 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

回代得到$x_3 = 1, x_2 = -1, x_1 = 1$.

例：用列主元法解方程组

$$\begin{cases} -3x_1 + 2x_2 + 6x_3 = 4 \\ 10x_1 - 7x_2 = 7 \\ 5x_1 - x_2 + 5x_3 = 6 \end{cases}$$

解：对增广矩阵按列选取主元进行Gauss 消去法

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 & 4 \\ 10 & -7 & 0 & 7 \\ 5 & -1 & 5 & 6 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ -3 & 2 & 6 & 4 \\ 5 & -1 & 5 & 6 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & -\frac{1}{10} & 6 & \frac{61}{10} \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \\ 0 & -\frac{1}{10} & 6 & \frac{61}{10} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \\ 0 & 0 & \frac{31}{5} & \frac{31}{5} \end{pmatrix}$$

回代解得$x_3 = 1, x_2 = -1, x_1 = 0$.

§7.2 三角分解解法

将A 分解成一个上三角矩阵与一个下三角矩阵的乘积

$$A = LR.$$

线性方程组$Ax = b$ 的求解就变成了两个三角形方程组

$$\begin{cases} Ly = b \\ Rx = y \end{cases} \tag{1}$$

的求解问题。

1. Doolittle 方法

作A 的Doolittle分解

$$A = LR$$

其中$L = (l_{ij})$ 是单位下三角矩阵，$R = (r_{ij})$ 是上三角矩阵，再求解(1)。

计算公式是

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \tag{2}$$

$$x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} r_{ik} x_k \right) \Big/ r_{ii}, \quad i = n, n-1, \cdots, 1. \tag{3}$$

例：用Doolittle方法求解

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 4 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -1 \\ 5 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

解：第1步，对系数矩阵作Doolittle分解，即

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \frac{1}{3} & 1 & & \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{5} & 1 & \\ -\frac{1}{6} & \frac{1}{10} & -\frac{9}{37} & 1 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 & -1 \\ & \frac{10}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ & & \frac{37}{10} & -\frac{9}{10} \\ & & & \frac{191}{74} \end{pmatrix}.$$

第2步，由（2）得

$$y = (6, 3, 23/5, -191/74)^T.$$

第3步，由（3）得

$$x = (1, -1, 1, -1)^T.$$

2. Cholesky 方法

设$A \in C^{n\times n}$ 是Hermite 正定矩阵，则存在唯一的对角元素为正的下三角矩阵L，使A 有Cholesky 分解

$$A = LL^H$$

利用A 的Cholesky 分解来求解线性方程组$Ax = b$ 的方法称为Cholesky 方法或平方根法。这样求解线性方程组$Ax = b$ 转化为求解下三角方程组$Ly = b$ 和上三角方程组$L^Hx = y$.

Cholesky 分解$A = LL^H$ 也可以修改为$A = LDL^H$，其中L 为单位下三角矩阵，D 为对角线元素大于零的对角矩阵。事实上令

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{11} & & & 0 \\ & d_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \bar{l}_{21} & \cdots & \bar{l}_{n1} \\ & 1 & \cdots & \bar{l}_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} d_{11} & & & 0 \\ s_{21} & d_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ s_{n1} & s_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \bar{l}_{21} & \cdots & \bar{l}_{n1} \\ & 1 & \cdots & \bar{l}_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}$$

其中$s_{ij} = l_{ij} d_{jj}$.

比较元素得

$$\begin{cases} d_{11} = a_{11}; \\ s_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} s_{ik}\bar{l}_{jk}; \\ l_{ij} = s_{ij}/d_{jj}, \qquad j = 1, 2, \cdots, i-1; \\ d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ik}\bar{l}_{ik}. \end{cases} \tag{4}$$

解方程组$Ax = b$ 转化为求解下三角方程组$Ly = b$ 和上三角方程组$L^H x = D^{-1}y$，即

$$\begin{cases} y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k; \\ x_i = y_i / d_{ii} - \sum_{k=i+1}^{n} \bar{l}_{ki} x_k, \qquad i = 1, 2, \cdots, n. \end{cases} \tag{5}$$

这一方法称为改进平方根法。

例：用改进平方根法求解方程组$Ax=b$，其中

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}=\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

解：按(4) 计算分解式

$$
\begin{aligned}
i=1: &\quad d_{11}=1; \\
i=2: &\quad s_{21}=2, \quad l_{21}=2, \quad d_{22}=1; \\
i=3: &\quad s_{31}=1, \quad l_{31}=1, \\
&\quad s_{32}=-2, \quad l_{32}=-2, \quad d_{33}=9; \\
i=4: &\quad s_{41}=-3, \quad s_{41}=-3, \\
&\quad s_{42}=1, \quad l_{42}=1, \\
&\quad s_{43}=6, \quad l_{43}=\frac{2}{3}, \quad d_{44}=1.
\end{aligned}
$$

依照(5) 解方程组得

$y_1 = 1,\ y_2 = 0,\ y_3 = 15,\ y_4 = 1;$

$x_4 = 1,\ x_3 = 1,\ x_2 = 1,\ x_1 = 1.$

3. 三对角方程组的追赶法

定义：设$A \in C^{n\times n}$，如果对$|i-j|>m$ 时，有$a_{ij}=0$，我们就称A 是带宽为$2m+1$ 的带状矩阵。带宽为3 的带状矩阵称为三对角矩阵，形如

$$A=\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & 0 \\ u_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & u_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & & & u_n & a_n \end{pmatrix}. \tag{6}$$

设A 是三对角矩阵(6)，如果A 的顺序主子式皆非零，则A 有如下三角分解

$$A = PQ = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ p_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & p_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 & r_1 & & 0 \\ & q_2 & \ddots & \\ & & \ddots & r_{n-1} \\ 0 & & & q_n \end{pmatrix}.$$

其中

$$\begin{cases} q_i = a_i - p_i c_{i-1}, \quad i = 1, 2, \cdots, n; c_0 = 0; \\ p_i = u_i / q_{i-1}, \quad i = 2, 3, \cdots, n; \\ p_1 = 0. \end{cases} \tag{7}$$

从$Py = b$ 及$Qx = y$ 得

$$\begin{cases} y_i = b_i - p_i y_{i-1}, \quad i = 1, 2, \cdots, n; y_0 = 0; \\ x_i = (y_i - c_i x_{i+1})/q_i, \quad i = n, n-1, \cdots, 1; x_{n+1} = 0. \end{cases} \tag{8}$$

按(7) 及(8) 求解x 的方法称为追赶法，第一个过程称为“追”过程，第二个过程称为“赶”过程，“追赶法”由此而得名。

例：用追赶法解三对角方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

解：设系数矩阵有分解

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ p_2 & 1 & & \\ & p_3 & 1 & \\ & & p_4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 & r_1 & & \\ & q_2 & r_2 & \\ & & q_3 & r_3 \\ & & & q_4 \end{pmatrix}$$

由公式(7) 得

$$r_1 = c_1 = -1,\ r_2 = c_2 = -1,\ r_3 = c_3 = -1,$$

$$q_1 = a_1 = 2,\ p_2 = \frac{u_2}{q_1} = -\frac{1}{2},\ q_2 = a_2 - p_2c_1 = \frac{3}{2},$$
$$p_3 = \frac{u_3}{q_2} = -\frac{2}{3},\ q_3 = a_3 - p_3c_2 = \frac{4}{3},$$
$$p_4 = \frac{u_4}{q_3} = -\frac{3}{4},\ q_4 = a_4 - p_4c_3 = \frac{5}{4}.$$

依照(8) 得方程组的解

$$y_1 = 1,\ y_2 = \frac{1}{2},\ y_3 = \frac{1}{3},\ y_4 = \frac{5}{4};$$

$$x_4 = 1,\ x_3 = 1,\ x_2 = 1,\ x_1 = 1.$$