第五章

线性方程组直接解法

—— 矩阵三角分解法

目录页

Contents

2 矩阵三角分解法

- 一般线性方程组
  LU 分解与 PLU 分解
- 对称正定线性方程组
  Cholesky 分解 / 平方根法
- 对角占优三对角线性方程组
  Crout 分解 / 追赶法

矩阵三角分解

什么是矩阵的三角分解

将一个矩阵分解成结构简单的三角矩阵的乘积。

Gauss 消去法对应的矩阵三角分解

(1) 矩阵的 LU 分解：$A = LU$ → L 单位下三角，U 非奇异上三角

(2) 矩阵的 LDR 分解：$A = LDR$ → L 单位下三角，R 单位上三角，D 对角

(3) 矩阵的克洛脱 (Crout) 分解：$A = \tilde{L}\tilde{U}$ → $\tilde{L}$ 非奇异下三角，$\tilde{U}$ 单位上三角

矩阵的 LU 分解

- **LU** 分解待定系数法（ **Doolittle** 算法）
- 列主元 **LU** 分解 / **PLU**

LU 分解的计算

利用矩阵乘法直接计算 LU 分解 —— 待定系数法

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

$$A \quad = \quad L \quad \times \quad U$$

① 比较等式两边的第一行得： $u_{1j} = a_{1j}$ $(j = 1,\ldots,n)$ ← U 的第一行

比较等式两边的第一列得： $l_{i1} = a_{i1}/u_{11}$ $(i = 2,\ldots,n)$ ← L 的第一列

② 比较等式两边的第二行得: $u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}$ $(j = 2,\ldots,n)$ ← U 的第二行

比较等式两边的第二列得： $l_{i2} = \left(a_{i2} - l_{i1}u_{12}\right)/u_{22}$ $(i = 3,\ldots,n)$ ← L 的第二列

计算 LU 分解

第 k 步：此时 U 的前 k-1 行和 L 的前 k-1 列已经求出

比较等式两边的第 k 行得：

$$u_{kj} = a_{kj} - \left(l_{k1}u_{1j} + \cdots + l_{k,k-1}u_{k-1,j} \right) = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki}u_{ij} \qquad (j = k, \ldots, n)$$

比较等式两边的第 k 列得：

$$l_{ik} = \left(a_{ik} - l_{i1}u_{1k} - \cdots - l_{i,k-1}u_{k-1,k} \right) \big/ u_{kk} = \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}u_{jk} \right) \Big/ u_{kk}$$

$$(i = k+1, \ldots, n)$$

以此类推，直到第 n 步，便可求出矩阵 L 和 U 的所有元素。

† 这种计算 LU 分解的方法也称为 **Doolittle 分解**。

LU 分解算法

运算量：$(n^3 - n)/3$

for k = 1 to n

$$a_{kj} \leftarrow u_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} u_{ij}\ , \quad j = k, k+1, \ldots, n$$

$$a_{ik} \leftarrow l_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} u_{jk} \right) \Big/ u_{kk}\ , \quad i = k+1, k+2, \ldots, n$$

end

ex51.m

† 为了节省存储空间，通常用 A 的绝对下三角部分来存放 L (对角线元素无需存储)，用 A 的上三角部分来存放 U。

LU 分解求解方程组

% 先计算 LU 分解

for $k = 1$ **to** n

$$a_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} a_{ij} \ , \quad j = k, k+1, \ldots, n$$

$$a_{ik} = \frac{1}{a_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} a_{ij} a_{jk} \right), \quad i = k+1, k+2, \ldots, n$$

end

% 解三角方程组 $Ly = b$ 和 $Ux = y$

$$y_1 = b_1 \ , \qquad y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} y_k \ , \qquad i = 2, 3, \ldots, n$$

$$x_n = \frac{y_n}{a_{nn}}, \qquad x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_k \right) \ , \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

列主元 LU 分解（PLU）

$$PA = LU$$

for k = 1 to n

$$a_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} a_{ij} a_{jk} \ , \quad i = k, k+1, \dots, n$$

$$a_{i_k k} = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}| \ , \quad \mathrm{Ip}(k) \leftrightarrow \mathrm{Ip}(i_k)$$

$$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j} \ , \quad j = 1, 2, \dots, n$$

$$a_{ik} = a_{ik} / a_{kk} \ , \quad i = k+1, \dots, n$$

$$a_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} a_{ij} \ , \quad j = k+1, \dots, n$$

end

MATLAB 编程：上机练习

† 此算法可用于计算矩阵的行列式和逆。

PLU 分解求解方程组

$$PA = LU$$

for $k = 1$ to n

$$a_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{k\text{-}1} a_{ij} a_{jk} \ , \quad i = k, k+1, \ldots, n$$

$$a_{i_k k} = \max_{k \le i \le n} \left| a_{ik} \right| \ , \quad \mathrm{Ip}(k) \leftrightarrow \mathrm{Ip}(i_k)$$

$$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j} \ , \quad j = 1, 2, \ldots, n$$

$$a_{ik} = a_{ik} / a_{kk} \ , \quad i = k, k+1, \ldots, n$$

$$a_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} a_{ij} \ , \quad j = k, k+1, \ldots, n$$

end

% 解三角方程组 $Ly = Pb$ 和 $Ux = y$

$$y_1 = b_{\mathrm{Ip}(1)} \ , \qquad y_i = b_{\mathrm{Ip}(i)} - \sum_{k=1}^{i\text{-}1} a_{ik} y_k \ , \quad i = 2, 3, \ldots, n$$

$$x_n = y_n \ , \qquad x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_k \right) , \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

对称正定矩阵

- **Cholesky** 分解与平方根法
- **LDL**^{T} 分解与改进的平方根法

Cholesky 分解

对称正定矩阵的三角分解 —— **Cholesky 分解**

定理：(Cholesky 分解)

若 A 对称正定，则 A 可唯一分解为

$$A = LL^T$$

其中 L 为下三角矩阵，且对角元素都大于 0。

证明：板书

Cholesky 分解

对称正定矩阵的三角分解 —— LDL^T 分解

定理：(LDL^T 分解)

设 A 是对称矩阵，若 A 的所有顺序主子式都不为 0，则 A 可唯一分解为

$$A = LDL^T$$

其中 L 为单位下三角阵，D 为对角矩阵。

证明：利用 LU 分解定理，自行练习

Cholesky 分解的计算 — 待定系数法

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

$$\Rightarrow \quad \boxed{a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} + l_{jj} l_{ij}} \quad (i \geq j)$$

$$j = 1, 2, \ldots, n, \quad i = j, j+1, \ldots, n$$

Cholesky 分解算法

算法： **Cholesky 分解**

for $j = 1$ **to** n

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

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

end

平方根法

用 **Cholesky** 分解求解线性方程组 —— 平方根法

$$\boldsymbol{Ax = b} \qquad (A \text{ 对称正定})$$

算法： 解对称正定线性方程组的平方根法

先计算 A 的 **Cholesky** 分解，然后解方程：$Ly = b$ 和 $L^T x = y$

$$y_1 = b_1 / l_{11}, \quad y_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \right) \Big/ l_{ii}, \qquad i = 2, 3, \ldots, n$$

$$x_n = y_n / l_{nn}, \quad x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k \right) \Big/ l_{ii} \qquad i = n\text{-}1, \ldots, 2, 1$$

改进的 Cholesky 分解

$$A = LDL^T = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} d_k l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} + l_{ij} d_j} \quad (i \geq j)$$

$$j = 1, 2, \ldots, n, \quad i = j+1, j+2, \ldots, n$$

改进的 Cholesky 分解

算法： **Cholesky 分解**

for $j = 1$ **to** n

$$d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 d_k \ ,$$

$$l_{ij} = \frac{1}{d_j}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk}\right), \qquad i = j+1, \ldots, n$$

end

† 优点：避免开方运算

改进的平方根法

用 **LDL^T** 分解求解线性方程组 —— 改进的平方根法

$$Ax = b \qquad (A \text{ 对称正定})$$

算法：解对称正定线性方程组的改进平方根法

先计算 A 的 **LDL^T** 分解，然后解方程：$Ly = b$ 和 $L^Tx = y$

$$y_1 = b_1\ , \quad y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k\ , \qquad i = 2, 3, \ldots, n$$

$$x_n = y_n / d_n\ , \quad x_i = y_i / d_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k\ , \quad i = n\text{-}1, \ldots, 2, 1$$

三对角矩阵

- 三对角矩阵的 **Crout** 分解
- 求解三对角线性方程组的追赶法

三对角矩阵 Crout 分解

对角占优的不可约三对角矩阵的 Crout 分解

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & \\ a_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & a_{n-1} & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & \\ a_1 & \alpha_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

计算过程

(1) 第一步： $\alpha_1 = b_1, \quad \beta_1 = c_1/\alpha_1 = c_1/b_1$

(2) 第二步： $\alpha_i = b_i - a_{i-1}\beta_{i-1}\,, \quad \beta_i = c_i/\alpha_i$ 　　$i = 2, 3, \ldots, n\text{-}1$

(3) 第三步： $\alpha_n = b_n - a_{n-1}\beta_{n-1}$

† 为了编程方便，这里 a 的下标从 1 开始（教材是从 2 开始）

† 关于对角占优、不可约等性质，会在第六章详细讲述

追赶法

三对角线性方程组的求解 —— 追赶法

$$Ax = b$$

(*A* 三对角矩阵且对角占优不可约)

算法：追赶法

$$\beta_1 = c_1 / b_1 \;,\quad \beta_i = c_i \big/ \left(b_i - a_{i-1}\beta_{i-1} \right)$$

追

i = 2, 3, …, n-1

$$y_1 = f_1 / b_1 \;,\quad y_i = \left(f_i - a_{i-1} y_{i-1} \right) \big/ \left(b_i - a_{i-1}\beta_{i-1} \right)$$

追

i = 2, 3, …, n

$$x_n = y_n \;,\quad x_i = y_i - \beta_i x_{i+1}$$

赶

i = n-1, …, 2, 1

† 运算量：约 5n+3n