第二章　矩阵分解与方程组求解

数值分析

南京理工大学数统学院

2.1 高斯消去法

设 $A=(a_{i,j})\in\mathbb{R}^{n\times n}$，$b=(b_1,b_2,\cdots,b_n)^T\in\mathbb{R}^n$，求解线性方程组

$$Ax=b. \tag{1}$$

如果 A 是一个下三角矩阵，即 $a_{i,j}=0(j>i)$ 且 $a_{i,i}\neq 0$；或者是上三角矩阵，即对于 $a_{i,j}=0(i>j)$ 且 $a_{i,i}\neq 0$，方程的求解都非常容易，只需要一个循环迭代就可以得到（上三角: 回代法; 下三角: 前代法）。

2.1 高斯消去法

设 $A=(a_{i,j})\in\mathbb{R}^{n\times n}$，$b=(b_1,b_2,\cdots,b_n)^T\in\mathbb{R}^n$，求解线性方程组

$$Ax=b. \tag{1}$$

如果 A 是一个下三角矩阵，即 $a_{i,j}=0(j>i)$ 且 $a_{i,i}\neq 0$；或者是上三角矩阵，即对于 $a_{i,j}=0(i>j)$ 且 $a_{i,i}\neq 0$，方程的求解都非常容易，只需要一个循环迭代就可以得到（上三角: 回代法; 下三角: 前代法）。

高斯消去法的基本思想：将不是三角矩阵的系数矩阵A 利用行变换逐次消元，变成上三角矩阵，再对上三角矩阵方程进行求解。

第 1 步：记 $A^{(1)}=A$, $b^{(1)}=b$，并设 $a_{11}\neq 0$，从第 2 个方程到第 n 个方程消去未知量 x_1，即对 $i,j=2,3,\cdots,n$，计算

$$\begin{cases} l_{i1}=a_{i,1}^{(1)}\Big/a_{1,1}^{(1)}; \\ a_{i,1}^{(2)}:=0,\quad a_{i,j}^{(2)}:=a_{i,j}^{(1)}-l_{i,1}a_{1,j}^{(1)}; \\ b_i^{(2)}:=b_i^{(1)}-l_{i,1}b_1^{(1)}, \end{cases}$$

第 1 步：记 $A^{(1)}=A$，$b^{(1)}=b$，并设 $a_{11}\neq 0$，从第 2 个方程到第 n 个方程消去未知量 x_1，即对 $i,j=2,3,\cdots,n$，计算

$$\begin{cases} l_{i1}=a_{i,1}^{(1)}\Big/a_{1,1}^{(1)}; \\ a_{i,1}^{(2)}:=0,\quad a_{i,j}^{(2)}:=a_{i,j}^{(1)}-l_{i,1}a_{1,j}^{(1)}; \\ b_i^{(2)}:=b_i^{(1)}-l_{i,1}b_1^{(1)}, \end{cases}$$

这一步等价于: $L_1A^{(1)}x=L_1b^{(1)}$，记$A^{(2)}=L_1A^{(1)}$，$b^{(2)}=L_1b^{(1)}$，其中

$$L_1=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ -l_{n1} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ A^{(2)}=\begin{pmatrix} \mathbf{a_{1,1}^{(1)}} & a_{1,2}^{(1)} & \cdots & a_{1,n}^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(2)} & \cdots & a_{2,n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n,2}^{(2)} & \cdots & a_{n,n}^{(2)} \end{pmatrix},\ b^{(2)}=\begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

第 2 步：设 $a_{2,2}^{(2)} \neq 0$，从第 3 个方程到第 n 个方程消去未知量 x_2，即对 $i,j=3,4,\cdots,n$，计算

$$\begin{cases} l_{i2} = a_{i,2}^{(2)} \Big/ a_{2,2}^{(2)}; \\ a_{i,2}^{(3)} := 0, \quad a_{i,j}^{(3)} := a_{i,j}^{(2)} - l_{i,2} a_{2,j}^{(2)}; \\ b_i^{(3)} := b_i^{(2)} - l_{i,2} b_2^{(2)}, \end{cases}$$

第 2 步：设 $a_{2,2}^{(2)} \neq 0$，从第 3 个方程到第 n 个方程消去未知量 x_2，即对 $i, j = 3, 4, \cdots, n$，计算

$$\begin{cases} l_{i2} = a_{i,2}^{(2)} \Big/ a_{2,2}^{(2)}; \\ a_{i,2}^{(3)} := 0, \quad a_{i,j}^{(3)} := a_{i,j}^{(2)} - l_{i,2} a_{2,j}^{(2)}; \\ b_i^{(3)} := b_i^{(2)} - l_{i,2} b_2^{(2)}, \end{cases}$$

这一步等价于: $L_2 A^{(2)} x = L_2 b^{(2)}$，记$A^{(3)} = L_2 A^{(2)}$, $b^{(3)} = L_2 b^{(2)}$，其中

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & -l_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & -l_{n,2} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \; A^{(3)} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} & \cdots & a_{1,n}^{(1)} \\ 0 & \mathbf{a_{2,2}^{(2)}} & a_{2,3}^{(2)} & \cdots & a_{2,n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{3,3}^{(3)} & \cdots & a_{3,n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n,3}^{(3)} & \cdots & a_{n,n}^{(3)} \end{pmatrix}, \; b^{(3)} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(3)} \\ \vdots \\ b_n^{(3)} \end{pmatrix}$$

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

$$\left.\begin{aligned} a_{1,1}^{(1)}x_1 + a_{1,2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1,n}^{(1)}x_n &= b_1^{(1)} \\ a_{2,2}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2,n}^{(2)}x_n &= b_2^{(2)} \\ &\vdots \\ a_{n,n}^{(n)}x_n &= b_n^{(n)} \end{aligned}\right\}$$

即 $A^{(n)}x = b^{(n)}$，其中

$$A^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \cdots & a_{1,2}^{(1)} \\ & a_{2,2}^{(2)} & & a_{2,n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n}^{(n)} \end{pmatrix}, \quad b^{(n)} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

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

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} \Big/ a_{n,n}^{(n)}, \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{k,j}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{k,k}^{(k)}, \quad k = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

从上述消去和回代的过程，可以很清楚地计算出总的计算量（即加法和乘法）约为 $O(n^3)$，比采用 Grammer 法则所需的 $O(n \cdot n!)$ 少很多，用美国 Summit 超级计算求解一个 25 阶的线性方程组，只需要约 0.8×10^{-14} 秒（采用 Grammer 法则需要 61.5 年！）。但如果 n 特别大，则高斯消去法的计算量仍然很大。

综上，高斯消去法分两大过程进行：

(1)消元过程： 经过 $n-1$ 步消元将原方程组化成等价的上三角形方程组

$$A^{(n)}x = b^{(n)}.$$

其算法可描述为：

对 $k=1,2,\cdots,n-1$, 对 $i=k+1,\cdots,n$ 计算

$$\begin{cases} l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}; \\ a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik}a_{kj}^{(k)}; \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik}b_k^{(k)}, \quad j = k+1,\cdots,n. \end{cases}$$

(2)回代过程： 利用逐步回代，求解三角形方程组。算法可描述为：

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}; \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)}, \quad k = n-1, n-2, \cdots, 1. \end{cases}$$

(2)回代过程： 利用逐步回代，求解三角形方程组。算法可描述为：

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}; \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)}, \quad k = n-1, n-2, \cdots, 1. \end{cases}$$

从上面消去法过程可以看出，高斯消去步骤能够顺序进行的条件是主元素 $a_{11}^{(1)}, a_{22}^{(2)}, \cdots, a_{n-1,n-1}^{(n-1)}$ 全不为 0，回代步骤还要求 $a_{nn}^{(n)} \neq 0$。

1. **定理**：设$A \in R^{n\times n}$，对$k = 1, 2, \cdots, n$，Gauss顺序消去过程的主元素$a_{11}^{(1)} \neq 0, a_{22}^{(2)} \neq 0, \cdots, a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 的充要条件是 A 的顺序主子式 $\Delta_1 \neq 0$, $\Delta_2 \neq 0, \cdots, \Delta_k \neq 0$。

1. **定理**：设$A \in R^{n\times n}$，对$k = 1,2,\cdots,n$，Gauss顺序消去过程的主元素$a_{11}^{(1)} \neq 0, a_{22}^{(2)} \neq 0, \cdots, a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 的充要条件是 A 的顺序主子式 $\Delta_1 \neq 0, \Delta_2 \neq 0, \cdots, \Delta_k \neq 0$。
2. **推论**: 若 A 的顺序主子式均不为零，则可用顺序Gauss消去法求出方程组 $Ax=b$ 的解。

1. **定理**：设$A \in R^{n\times n}$，对$k = 1,2,\cdots,n$，Gauss顺序消去过程的主元素$a_{11}^{(1)} \neq 0,\ a_{22}^{(2)} \neq 0,\ \cdots,\ a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 的充要条件是 A 的顺序主子式 $\Delta_1 \neq 0,\ \Delta_2 \neq 0,\ \cdots,\ \Delta_k \neq 0$。

2. **推论**: 若 A 的顺序主子式均不为零，则可用顺序Gauss消去法求出方程组 $Ax = b$ 的解。

3. **定义**: 设$A = (a_{ij})_{n\times n} \in R^{n\times n}$，若$|a_{ii}| > \sum\limits_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}|$，$i = 1,2,\cdots,n$，则称$A$为严格对角占优阵.

   若$|a_{ii}| \geq \sum\limits_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}|$，$i = 1,2,\cdots,n$，且其中至少一个式子取严格不等号，则称$A$ 为弱对角占优阵.

4. **定理**：若n阶线性方程组$Ax = b$的系数矩阵是严格对角占优的，则Gauss消去过程的主元$a_{kk}^{(k)} \neq 0,\ k = 1, 2, \cdots, n$.

4. **定理**：若n阶线性方程组$Ax=b$的系数矩阵是严格对角占优的，则Gauss消去过程的主元$a_{kk}^{(k)}\neq 0,\ k=1,2,\cdots,n$.

证明: 因为$|a_{11}^{(1)}|>\sum_{j=2}^{n}|a_{1j}^{(1)}|$, 故$|a_{11}^{(1)}|>0$, 可进行Gauss消去的第一步, 得到$A^{(2)}$.

4. **定理**：若n阶线性方程组$Ax=b$的系数矩阵是严格对角占优的, 则Gauss消去过程的主元$a_{kk}^{(k)}\neq 0,\ k=1,2,\cdots,n$.

证明: 因为$|a_{11}^{(1)}|>\sum\limits_{j=2}^{n}|a_{1j}^{(1)}|$, 故$|a_{11}^{(1)}|>0$, 可进行Gauss消去的第一步, 得到$A^{(2)}$.

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=2,j\neq i}^{n}|a_{ij}^{(2)}| &= \sum_{j=2,j\neq i}^{n}\left|a_{ij}^{(1)}-\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\cdot a_{1j}^{(1)}\right| \le \sum_{j=2,j\neq i}^{n}|a_{ij}^{(1)}|+\sum_{j=2,j\neq i}^{n}\left|\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\cdot a_{1j}^{(1)}\right| \\
&= \sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}^{(1)}|-|a_{i1}^{(1)}|+\left|\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right|\cdot\sum_{j=2,j\neq i}^{n}|a_{1j}^{(1)}| \\
&< |a_{ii}^{(1)}|-\left|\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right|\left(|a_{11}^{(1)}|-\sum_{j=2}^{n}|a_{1j}^{(1)}|+|a_{1i}^{(1)}|\right) < |a_{ii}^{(1)}|-\left|\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right|\cdot|a_{1i}^{(1)}| \\
&< \left|a_{ii}^{(1)}-\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\cdot a_{1i}^{(1)}\right| = |a_{i,i}^{(2)}|,\quad i=2,3,\cdots,n.
\end{aligned}
$$

在实际计算中，当要用到主元素 $a_{k,k}^{(k)}$ 虽然不等于 0，但很接近于 0，可能引起很大的误差。

例： 用 3 位十进制浮点运算求解

$$\begin{cases} 1.00 \times 10^{-5} x_1 + 1.00 x_2 = 1.00 \\ 1.00 x_1 + 1.00 x_2 = 2.00 \end{cases}$$

在实际计算中，当要用到主元素 $a_{k,k}^{(k)}$ 虽然不等于 0，但很接近于 0，可能引起很大的误差。

例： 用 3 位十进制浮点运算求解

$$\begin{cases} 1.00 \times 10^{-5} x_1 + 1.00 x_2 = 1.00 \\ 1.00 x_1 + 1.00 x_2 = 2.00 \end{cases}$$

解: 这个方程组的正确解显然接近于 $(1.00, 1.00)^T$。

但是系数 $a_{11} = 1.00 \times 10^{-5}$ 与其它系数比较是个较小的数，如果我们用顺序高斯消去法求解，则有

$$l_{21} = \frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = 1.00 \times 10^5$$

$$a_{22}^{(2)} = a_{22}^{(1)} - l_{21}a_{12}^{(1)} = 1.00 - 1.00 \times 10^5$$

$$b_2^{(2)} = b_2^{(1)} - l_{21}b_1^{(1)} = 2.00 - 1.00 \times 10^5$$

在 3 位十进制运算的限制下，得到

$$x_2 = b_2^{(2)}/a_{22}^{(2)} = 1.00$$

回代得 $x_1 = 0.00$，显然这是不正确的解。

事实上，用小数 $a_{11}^{(1)}$ 做除数，使 l_{21} 是个大数，在计算 $a_{22}^{(2)}$ $(b_2^{(2)})$ 的过程中 $a_{22}^{(1)}$ $(b_2)^{(1)}$ 的值完全被掩盖了。如果先交换方程组的两个方程的顺序，再采用消去法，就不会出现上述问题，解得 $x_1 = 1.00$, $x_2 = 1.00$。

事实上，用小数 $a_{11}^{(1)}$ 做除数，使 l_{21} 是个大数，在计算 $a_{22}^{(2)}$ $(b_2^{(2)})$ 的过程中 $a_{22}^{(1)}$ $(b_2)^{(1)}$ 的值完全被掩盖了。如果先交换方程组的两个方程的顺序，再采用消去法，就不会出现上述问题，解得 $x_1 = 1.00$，$x_2 = 1.00$。

为克服主元太小的问题，可用列主元素法：

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

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

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，再按高斯消去法第 1 步消元。

第 k 步：在第 k 到第 n 个方程中，找出 x_k 系数中按模最大的，不妨设

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

交换第 k 个方程与第 r_k 个方程，再按高斯消去法第 k 步消元。

列主元素高斯消去法的具体算法如下：对于 $k = 1, 2, \cdots, n$，计算

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

(2) 如果 $a_{\rho_k k} = 0$，停止计算，否则转下一步

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

(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： 用列主元高斯消去法解方程组

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

解： 对增广矩阵按列选取主元进行高斯消去法

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

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

回代解得$x_3 = 1, x_2 = -1, x_1 = 0.$

高斯消去法可用矩阵形式来表示：

消去过程：$L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1 Ax = L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1 b \Rightarrow A^{(n)}x = b^{(n)}$，其中

$$L_i = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{i+1,i} & \ddots & & \\ & & \vdots & & 1 & \\ & & -l_{n,i} & & & 1 \end{pmatrix}, \quad L_i^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{i+1,i} & \ddots & & \\ & & \vdots & & 1 & \\ & & l_{n,i} & & & 1 \end{pmatrix}$$

由此，可得

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

从而可以得到

$$A=(L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1)^{-1}A^{(n)}=(L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1})A^{(n)}=L\,U$$

其中 $L=(L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1})$ 为主对角线为 1 的下三角矩阵，$L=(l_{i,j})_{n\times n}$，$U=A^{(n)}$ 为上三角矩阵。

由此，高斯消去法可用矩阵形式表示为：

$$Ax=b\Rightarrow\underbrace{LUx=b\Rightarrow Ux=L^{-1}b}_{\text{高斯消元过程}}\Rightarrow\underbrace{x=U^{-1}(L^{-1}b)}_{\text{回代求解过程}}$$

高斯消去法本质上是一个矩阵分解问题（将系数矩阵 A 分解成一个主对角线为 1 的下三角矩阵 L 和一个上三角矩阵 U 的乘积）。

2.2 矩阵的三角分解与方程组求解

基本思想： 将矩阵 A 分解成一个上三角矩阵与一个下三角矩阵乘积

$$A = LU.$$

则线性方程组 $Ax = b$ 的求解就变成了两个三角形方程组

$$\begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

的求解问题。

2.2.1 Doolittle 分解（LU分解）

若矩阵 A 的顺序主子式都非零，则 A 可唯一分解为 $A = LU$ 的形式，其中 L 为一个主对角线为 1 的下三角矩阵，U 为上三角矩阵，即

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{2,1} & 1 & & & \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,n} \\ & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,n} \\ & & u_{3,3} & & u_{3,n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{n,n} \end{pmatrix}$$

根据这个分解式，行列交替来计算 U 和 L，具体做法就是:

用 L 第 k 行，乘 U 的每一列，对比 A 的第 k 行 $\Rightarrow$ U 的第 k 行;

用 L 每一行，乘 U 的第 k 列，对比 A 的第 k 列 $\Rightarrow$ L 的第 k 列;

可以看到，U 是按照行依次计算，而 L 是按照列依次计算。需要注意的是，L 的第一行已知为 1 ，由此很容易得到 U 的第一行为 $u_{1,j} = a_{1,j}$，$j = 1, 2, \cdots, n$。

对于其他部分，具体计算公式是：对 $k = 2, 3, \cdots, n$

$$\begin{cases} \text{(行计算)} u_{k,j} = a_{k,j} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{k,r} u_{r,j}, & j = k, k+1, \cdots, n \\ \text{(列计算)} l_{i,k} = \dfrac{1}{u_{k,k}} \left(a_{i,k} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{i,r} u_{r,k} \right), & i = k+1, \cdots, n \end{cases}$$

在得到 A 的 Doolittle 分解 $A = LU$ 后，可将方程 $Ax = b$ 即 $L(Ux) = b$ 的求解分为两步：

1. 第一步，求解 $Ly = b$ 如下（前代法，从第 1 项开始往后算）：

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

2. 第二步，求解 $Ux = y$ 如下（回代法，从第 n 项开始往前算）：

$$x_i = \frac{1}{u_{i,i}} \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{i,k} x_k \right), \quad i = n, n-1, \cdots, 1.$$

例： 用 Doolittle 方法求解下面的方程

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

解： 第 1 步，对系数矩阵作 Doolittle 分解，即

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

第一步，求解 $Ly = b$ 得

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

第二步，求解 $Ux = y$ 得

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

2.2.2 Cholesky 分解

定理： 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称正定矩阵，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

$$A = LL^T$$

注：这里并不要求 L 的主对角线元素为 1。

利用矩阵的 Cholesky 分解来求解线性方程组的方法称为 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 $L^T x = y$，只需要存储矩阵 L 即可。

Cholesky 分解计算公式:

$$
\begin{aligned}
A &= LL^T \\
&= \begin{pmatrix} l_{11} & & & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & l_{nn} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

对于$j = 1, 2, \cdots, n$,

$$
\begin{cases}
l_{jj} = \left(a_{jj} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \\
l_{ij} = \dfrac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right), \quad i = j+1, \cdots, n.
\end{cases}
$$

例： 用 Cholesky 方法求解下面的方程

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

解： 第 1 步，对系数矩阵作 Cholesky 分解，即

$$L = \begin{pmatrix} 2 & & \\ -0.5 & 2 & \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix}$$

第一步，求解 $Ly = b$ 得

$$y = (1, -1/4, 15/8)^T.$$

第二步，求解 $Ux = y$ 得

$$x = (-45/128, -49/32, 15/8)^T.$$

定理: 若 A 是对称矩阵，但非正定也非负定，只要顺序主子式非零，则存在唯一的单位下三角矩阵 L 和对角矩阵 D，使得 $A = LDL^T$，即

$$
\begin{aligned}
A &= LDL^T \\
&= \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} d_{11} & & & 0 \\ & d_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_{nn} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} d_{11} & & & 0 \\ s_{21} & d_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ s_{n1} & s_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

其中 $s_{ij} = l_{ij} d_{jj}$.

比较元素得, 对于$j=1,2,\cdots,n$

$$\begin{cases} d_{jj}=a_{jj}-\sum\limits_{k=1}^{j-1} s_{jk}l_{jk}, \\ s_{ij}=a_{ij}-\sum\limits_{k=1}^{j-1} s_{ik}l_{jk}, \qquad i=j+1,\cdots,n, \\ l_{ij}=s_{ij}/d_{jj}, \qquad i=j+1,\cdots,n. \end{cases}$$

此时，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 $L^Tx=D^{-1}y$，即

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

这一方法称为改进平方根法。

2.2.3 三对角矩阵追赶法

定义： 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，如果对 $|i-j| > m$，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

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & & & a_n & b_n \end{pmatrix}.$$

设 A 是三对角矩阵，如果 A 的顺序主子式皆非零，则有如下三角分解

$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ l_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & 0 \\ & u_2 & \ddots & \\ & & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & & u_n \end{pmatrix}.$$

其中

$$\begin{cases} u_1 = b_1; \\ l_i = a_i / u_{i-1}, \quad i = 2, 3, \cdots, n; \\ u_i = b_i - l_i c_{i-1}, \quad i = 2, 3, \cdots, n. \end{cases}$$

三对角方程组$Ax=d$, $d=(d_1,d_2,\cdots,d_n)^T$, 由 $Ly=d$ 及 $Ux=y$, 解得

$$\begin{cases} y_i = d_i - l_i y_{i-1}, \quad i=1,2,\cdots,n; \quad y_0=0; \\ x_i = (y_i - c_i x_{i+1})/u_i, \quad i=n,n-1,\cdots,1, \quad c_n=0,\ x_{n+1}=0. \end{cases}$$

按上述方式求解 $Ax=d$ 的方法称为追赶法，第一个过程称为“追”过程（分解过程），第二个过程称为“赶”过程（求解过程），“追赶法”由此而得名。

例： 用追赶法解三对角方程组

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

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

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_2 & 1 & & \\ & l_3 & 1 & \\ & & l_4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & -1 & & \\ & u_2 & -1 & \\ & & u_3 & -1 \\ & & & u_4 \end{pmatrix}$$

由公式或者比较系数很容易得到

$$u_1 = a_1 = 2,\ l_2 = \frac{a_2}{u_1} = -\frac{1}{2},\ u_2 = b_2 - l_2 c_1 = \frac{3}{2},$$

$$l_3 = \frac{a_3}{u_2} = -\frac{2}{3},\ u_3 = b_3 - l_3 c_2 = \frac{4}{3},$$

$$l_4 = \frac{a_4}{u_3} = -\frac{3}{4},\ u_4 = b_4 - l_4 c_3 = \frac{5}{4}.$$

然后依照“赶”的过程可得方程组的解

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

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

2.3 扰动方程组的误差分析

定理： 设 $A \in \mathbb{C}_n^{n\times n}$，$\delta A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，$b$，$\delta b \in \mathbb{C}^n$。若对 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上某矩阵范数 $\|\cdot\|$ 有$\|A^{-1}\|\,\|\delta A\| < 1$，则

$$Ax = b \quad 与 \quad (A+\delta A)(x+\delta x) = b + \delta b$$

的解满足（相对误差）

$$\frac{\|\delta x\|_v}{\|x\|_v} \le \frac{\|A\|\,\|A^{-1}\|}{1 - \|A\|\,\|A^{-1}\|\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|_v}{\|b\|_v}\right)$$

其中 $\|\cdot\|_v$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上与矩阵范数 $\|\cdot\|$ 相容的向量范数。

定义：设 $A \in \mathbb{C}_n^{n\times n}$，$\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上的矩阵范数，称

$$\mathrm{cond}(A) = \|A\|\,\|A^{-1}\|$$

为矩阵 A 的条件数。

如果方程组系数矩阵条件数大，称该方程组是病态的。

常用的矩阵条件数：

(a) $\mathrm{cond}(A)_\infty = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty$；

(b) $\mathrm{cond}(A)_2 = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \sqrt{\dfrac{\mu_1}{\mu_n}}$，其中 μ_1, μ_n 分别为 $A^H A$ 的最大与最小特征值；

(c) 当 A 为正规矩阵时，$\mathrm{cond}(A)_2 = \left|\dfrac{\lambda_1}{\lambda_n}\right|$，其中 λ_1, λ_n 分别是 A 的按模最大和最小特征值。

例： 设

$$A = \begin{pmatrix} -1 & i & 0 \\ -i & 0 & -i \\ 0 & i & -1 \end{pmatrix}, \delta(A) \in \mathbb{C}^{3\times 3}, 0 \neq b \in \mathbb{C}^3.$$

为使 $Ax = b$ 的解 x 与 $(A + \delta(A))x = b$ 的解 $\hat{x}$ 的相对误差 $\frac{\|\hat{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq 10^{-4}$，问 $\frac{\|\delta(A)\|_2}{\|A\|_2}$ 应满足什么条件（不超过何值）？

解： 因为 $|\lambda \mathrm{I} - A| = (\lambda+1)(\lambda-1)(\lambda+2)$，所以

$$\mathrm{cond}_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = 2$$

从而

$$\frac{\|\hat{x}-x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\mathrm{cond}_2(A)}{1-\mathrm{cond}_2(A)\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2}} \frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2} \leq 10^{-4},$$

$$\frac{2}{1-2\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2}} \frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2} \leq 10^{-4},$$

从而得到

$$\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2} \leq \frac{1}{2.0002} \times 10^{-4} \leq \frac{1}{2} \times 10^{-4} = 5 \times 10^{-5}.$$

定理： 设$A \in R^{n\times n}$, $b \in R^n$, $b \neq 0$, A 非奇异, x是方程组$Ax = b$的精确解, $\tilde{x}$ 是方程组的一个近似解, 对应$\tilde{x}$的剩余向量$r = b - A\tilde{x}$, 则有

$$\frac{1}{\mathrm{cond(A)}} \frac{||r||}{||b||} \leq \frac{||\tilde{x} - x||}{||x||} \leq \mathrm{cond}(A) \frac{||r||}{||b||}. \tag{2}$$

2.4 五点差分格式

传热学中带有稳定热源或内部无热源的稳定温度场的温度分布、流体动力学中不可压缩流体的稳定无旋流动、弹性力学中平衡问题及电磁学中静电场的电势等均满足泊松方程，因此，研究其数值求解方法具有重要意义。

考虑二维 Poisson 方程:

$$-\Delta u = -\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega,$$

Ω 是 xy 平面上一有界区域, 其边界 $\partial\Omega$ 为分段光滑曲线, 在 $\partial\Omega$ 上 u 满足下列边值条件之一:

$$u|_{\partial\Omega} = \alpha(x,y), \quad \text{(第一边值条件)}$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}\right|_{\partial\Omega} = \beta(x,y), \quad \text{(第二边值条件)}$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} + k(x,y)u\right|_{\partial\Omega} = \gamma(x,y), \quad k \geq 0, \quad \text{(第三边值条件)}$$

其中 f, α, β, γ, k 都是连续函数, $\mathbf{n}$ 为边界外法向.

五点差分格式的建立

(i) 区域剖分: 网格点或节点: (ih_1, jh_2), 记为 (x_i, y_j) 或 (i,j), $(i,\ j=0,\pm 1,\cdots)$, h_1, h_2 分别为 x, y 方向步长.

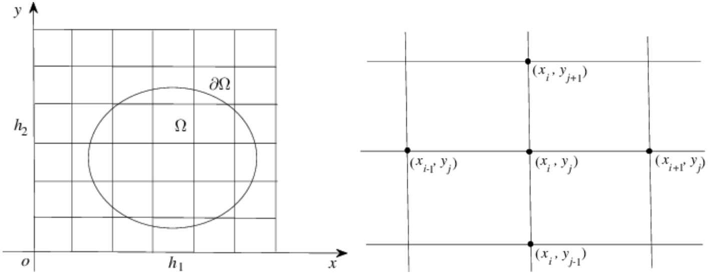

Figure: 区域离散剖分示意图

如果两网格点 (x_i, y_j) 和 $(x_{i'}, y_{j'})$ 满足 $\left|\frac{x_i - x_{i'}}{h_1}\right| + \left|\frac{y_j - y_{j'}}{h_2}\right| \leq 1$, 则称这两个网格点是相邻的.

网格点分类 (仅考虑位于 $\Omega \cup \partial\Omega$ 的网格点):

内点: 四个相邻节点都属于 $\Omega \cup \partial\Omega$ 的节点,
全部内点的集合记作 Ω_h;

界点: 四个相邻节点至少有一个不属于 $\Omega \cup \partial\Omega$ 的节点,
全体界点的集合记为 $\partial\Omega_h$.

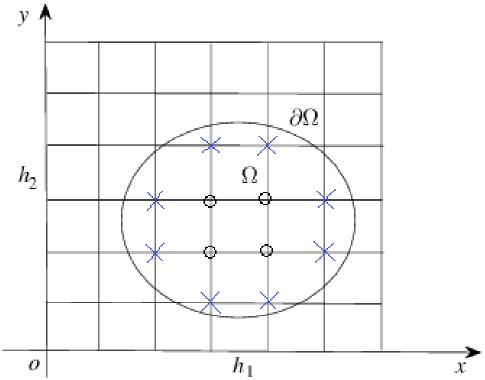

Figure: 剖分内点和界点示意图

(ii) 方程离散(内点处，Taylor 展开法):

设 (x_i, y_j) 为任意内点, $[\Delta u]_{i,j} = \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_{i,j} + \left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right]_{i,j}$ 的差商近似:

($[\quad]_{i,j}$ 表示方括号内的函数在点 (x_i, y_j) 的取值)

主要思想：利用(x_i, y_j)及其附近节点构造偏导数的近似。

采用方法：Taylor展开，将解在(x_i, y_j)附近节点作Taylor 展开。

对于充分光滑的函数 u, 固定 $y=y_j$, 在 x 方向, 利用 Taylor 展开,

$$u(x_{i-1},y_j)=u(x_i,y_j)-h_1\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_{i,j}+\frac{h_1^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_{i,j}-\frac{h_1^3}{6}\left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right]_{i,j}+\mathrm{O}(h_1^4),$$

$$u(x_{i+1},y_j)=u(x_i,y_j)+h_1\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_{i,j}+\frac{h_1^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_{i,j}+\frac{h_1^3}{6}\left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right]_{i,j}+\mathrm{O}(h_1^4),$$

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_{i,j}=\frac{u(x_{i+1},y_j)-2u(x_i,y_j)+u(x_{i-1},y_j)}{h_1^2}+\mathrm{O}(h_1^2). \qquad (3)$$

类似地, 固定 $x = x_i$, 在 y 方向, 利用 Taylor 展开,

$$u(x_i, y_{j-1}) = u(x_i, y_j) - h_2 \left[\frac{\partial u}{\partial y}\right]_{i,j} + \frac{h_2^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right]_{i,j} - \frac{h_2^3}{6}\left[\frac{\partial^3 u}{\partial y^3}\right]_{i,j} + \mathrm{O}(h_2^4),$$

$$u(x_i, y_{j+1}) = u(x_i, y_j) + h_2 \left[\frac{\partial u}{\partial y}\right]_{i,j} + \frac{h_2^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right]_{i,j} + \frac{h_2^3}{6}\left[\frac{\partial^3 u}{\partial y^3}\right]_{i,j} + \mathrm{O}(h_2^4),$$

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right]_{i,j} = \frac{u(x_i, y_{j-1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j+1})}{h_2^2} + \mathrm{O}(h_2^2). \tag{4}$$

舍去 (3)-(4) 中的二阶无穷小量, 并将其中的精确解 $u(x_i, y_j)$ 用数值解 u_{ij} 代替, 记 $f_{ij} = f(x_i, y_j)$, 得五点差分格式:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h_1^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{h_2^2} = -f_{ij}, \tag{5}$$

其截断误差为 $\mathrm{O}(h_1^2 + h_2^2)$.

如果取为正方形网格 $h_1 = h_2 = h$, 则泊松方程五点差分格式为:

$$u_{ij} - \frac{1}{4}(u_{i-1,j} + u_{i,j-1} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1}) = \frac{h^2}{4} f_{ij}. \tag{6}$$

(iii) 边界条件处理*

(iv) 差分方程求解假设求解区域为$\Omega = [0,1]\times[0,1]$，边界条件取为第一类齐次边界。在$x, y$方向均取步长为$h$的等距剖分，

$$x_i = ih,\ i = 0,1,\cdots,I;\quad y_j = jh,\ j = 0,1,\cdots,J.$$

将所有内节点按行从左到右排成$(I-1)(J-1)$维列向量U:

$$U = (u_{1,1}, u_{2,1}, \cdots, u_{I-1,1}, u_{1,2}, u_{2,2}, \cdots, u_{I-1,2}, \cdots\cdots, \\ u_{1,J-1}, u_{2,J-1}, \cdots, u_{I-1,J-1})^T.$$

五点差分格式(6)形成如下线性方程组：

$$AU = F, \tag{7}$$

其中

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ A_2 & A_1 & A_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & A_2 & A_1 & A_2 \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & A_2 & A_1 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & -1 & 4 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}_{(\mathrm{I}-1)\times(\mathrm{I}-1)},$$

$$A_2 = -I_{(\mathrm{I}-1)\times(\mathrm{I}-1)},$$

A为$(I-1)(J-1)$阶的块三对角矩阵，也是带宽$2I-1$的带状阵，严格对角占优，本章所学算法均可用于该问题求解。