科学计算/计算方法(Scientific Computing)

第六章 线性方程组的解法: 直接法

任课老师: Xiao-liang Cheng(程晓良)

Department of Mathematics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, P.R. China.

since 2018

线性方程组的解法

1. 问题简介

线性方程组的解法

线性方程组的解法

线性方程组：大规模

记线性方程组为：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad\cdots \qquad\quad \cdots \qquad\quad \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{1.1}$$

这里$a_{ij}(i,j=1,2,\cdots,n)$ 为方程组的系数，$b_i(i=1,2,\cdots,n)$ 为方程组自由项.

本章所讨论的线性方程组的系数矩阵都是非奇异的.

方程组(1.1)的矩阵形式为:

$$AX = b \tag{1.2}$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

线性方程组的数值解法可以分为直接法和迭代法两类.

所谓直接法，就是在不考虑舍入误差的前提下，能够通过有限步的四则运算即能求得线性方程组（1.1）准确解的方法.

而迭代法是从所给的初始向量$x^{(0)}$ 开始, 用设计好的迭代公式计算出向量序列: $x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots, x^{(k)}, \cdots$, 收敛到方程组（1.1）的解的方法.

直接法的特点是计算精度高, 但是计算时需要较多的存储空间, 计算工作量比较大. 直接法比较适合于规模不是很大的线性方程组以及非零元集中在对角元附近的大型稀疏线性方程组.

迭代法的特点是不改变矩阵非零元的位置, 因此能保持稀疏矩阵的稀疏性, 适合于求解大型稀疏线性方程组.

下三角方程组：前代法

若线性方程组是下三角方程组：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & = & b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 & = & b_2 \\ \cdots\cdots & & \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n & = & b_n \end{cases} \tag{2.1}$$

则我们可以用一个称为前代的方法方便地求解.前代法如下：先从第1个方程求出x_1，代入第2 个方程求出x_2，这样逐次向前代入即可求出解的所有分量.计算公式如下:

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{b_1}{a_{11}} \\ x_i = \dfrac{b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} \cdot x_j}{a_{ii}}, \quad i = 2, 3, \cdots, n \end{cases} \tag{2.2}$$

上三角方程组: 后代法

若线性方程组是上三角方程组:

$$\left\{\begin{array}{rcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \cdots\cdots & & \\ a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}\right. \tag{2.3}$$

则我们可以用一个称为回代的方法方便地求解.回代法如下：先从第n个方程求出x_n，代入第$n-1$ 个方程求出x_{n-1}，这样逐次向后代入即可求出解的所有分量.

$$\left\{\begin{array}{l} x_n = \dfrac{b_n}{a_{nn}} \\ x_i = \dfrac{b_i - \displaystyle\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\cdot x_j}{a_{ii}}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{array}\right. \tag{2.4}$$

前代法和回代法的计算量都是 n^2 次四则运算.

Gauss 消去法就是将一般的线性方程组等价地变换为一个上三角方程组，然后用回代法求解. 记线性方程组为:

$$\left\{\begin{array}{lcl} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\ \cdots\cdots & & \\ a_{n1}^{(1)}x_1 + a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)} \end{array}\right. \tag{2.5}$$

设$a_{11}^{(1)} \neq 0$, 经过一次消元后，得到：

$$\left\{\begin{array}{lcl} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\ \cdots\cdots & & \\ a_{n2}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)} \end{array}\right. \tag{2.6}$$

计算公式是：

$$
\begin{cases}
a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - a_{1j}^{(1)} * a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)} \\
b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - b_1^{(1)} * a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)} \\
i, j = 2, \cdots, n
\end{cases}
\tag{2.7}
$$

一般地，设经过$k-1$ 次消元后，得到的方程组为：

$$
\left\{
\begin{array}{llllll}
a_{11}^{(1)}x_1 & +a_{12}^{(1)}x_2 & +\cdots\cdots & & +a_{1n}^{(1)}x_n & =b_1^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)}x_2 & +\cdots\cdots & & +a_{2n}^{(2)}x_n & =b_2^{(2)} \\
 & & & & \cdots\cdots & \\
 & & a_{k,k}^{(k)}x_k+\cdots & & +a_{k,n}^{(k)}x_n & =b_k^{(k)} \\
 & & a_{k+1,k}^{(k)}x_k+\cdots & & +a_{k+1,n}^{(k)}x_n & =b_{k+1}^{(k)} \\
 & & & & \cdots\cdots & \\
 & & a_{n,k}^{(k)}x_k+\cdots & & +a_{n,n}^{(k)}x_n & =b_n^{(k)}
\end{array}
\right.
\tag{2.8}
$$

设$a_{kk}^{(k)} \neq 0$,则经过k 次消元后，得到：

$$\left\{\begin{array}{llllll}
a_{11}^{(1)}x_1 & +a_{12}^{(1)}x_2 & +\cdots\cdots & & +a_{1n}^{(1)}x_n & =b_1^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)}x_2 & +\cdots\cdots & & +a_{2n}^{(2)}x_n & =b_2^{(2)} \\
 & & & & \cdots\cdots & \\
 & & a_{kk}^{(k)}x_k & +a_{k,k+1}^{(k)}x_{k+1}+\cdots & +a_{kn}^{(k)}x_n & =b_k^{(k)} \\
 & & & a_{k+1,k+1}^{(k+1)}x_{k+1}+\cdots & +a_{k+1,n}^{(k+1)}x_n & =b_{k+1}^{(k+1)} \\
 & & & & \cdots\cdots & \\
 & & & a_{n,k+1}^{(k+1)}x_{k+1}+\cdots & +a_{n,n}^{(k+1)}x_n & =b_n^{(k+1)}
\end{array}\right. \tag{2.9}$$

计算公式是：

$$\left\{\begin{array}{l}
a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-a_{kj}^{(k)}*a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} \\
b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-b_k^{(k)}*a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} \\
i,j=k+1,\cdots,n
\end{array}\right. \tag{2.10}$$

经过$n-1$ 次消元后，最后得到上三角方程组：

$$\left\{\begin{array}{rcl} a_{11}^{(1)}x_1+a_{12}^{(1)}x_2+\cdots+a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2+\cdots+a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\ \cdots\cdots & & \\ a_{nn}^{(n)}x_n & = & b_n^{(n)} \end{array}\right. \tag{2.11}$$

接着，用回代法求解这个上三角方程组，就能得到线性方程组的解.

从上面的消去过程可以看到，Gauss 消去法能够顺序进行的条件是主元素$a_{11}^{(1)}, a_{22}^{(2)}, \cdots, a_{nn}^{(n)}$ 全不为零.然而，主元素是在计算过程中产生的，是否能够在原始矩阵上给出判别条件呢？下面的定理回答了这个问题.

定理1: 约化主元素$a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 1, \cdots, k)$ 的充分必要条件是主子矩阵$A_i (i = 1, \cdots, k)$ 非奇异，这里$k \leq n$.

用数学归纳法易证.

以上定理要求A 的顺序主子矩阵非奇异. 然而，对于线性方程组只要A 非奇异就存在唯一解. 但是，A 非奇异不能保证A的顺序主子矩阵非奇异，例如：

$$\left\{\begin{aligned} 2x_2+3x_3 &= 5\\ 3x_1+4x_2+5x_3 &= 12\\ 3x_1+5x_2+8x_3 &= 16\end{aligned}\right.$$

这个方程组是非奇异的，但不能按顺序进行Gauss消元法. 然而，只要在方程组中适当地改变方程的次序：

$$\left\{\begin{aligned} 3x_1+4x_2+5x_3 &= 12\\ 2x_2+3x_3 &= 5\\ 3x_1+5x_2+8x_3 &= 16\end{aligned}\right.$$

即使能够按顺序消元，也存在精度的问题. 如

$$\begin{cases} 0.00001x_1 + 2x_2 = 1, \\ 2x_1 + 3x_2 = 2. \end{cases}$$

若用顺序消元法求解(4位浮点运算), 则可得解$x_1 = 0.0000, x_2 = 0.5000$. 和准确值$x_1 = 0.250001\cdots$, $x_2 = 0.4999998\cdots$相差甚远.

为了减少计算中舍入误差的影响，每次消元前，应选择绝对值尽可能大的值作为约化的主元.

选主元消去法

若进行k次消元计算前，已得到$A^{(k)}x = b^{(k)}$, 则在$\tilde{A}_{n-k}$中选取

$$|a^{(k)}_{i_k,k}| = \max_{k\le i\le n} |a^{(k)}_{i,k}|,$$

并将第k行和第i_k行交换，再进行消去，这就是选列主元的消去法.

在$\tilde{A}_{n-k}$中选取

$$|a^{(k)}_{i_k,j_k}| = \max_{k\le i,j\le n} |a^{(k)}_{i,j}|,$$

并将第k行和第i_k行交换，第k列和第j_k列交换, 再进行消去，这就是选全主元的消去法. (注意列交换时，解分量顺序变了！最后逆对应回去)

选列主元消去法的例子

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, \\ x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 1, \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1. \end{cases}$$

解.

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, \\ x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 1, \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1. \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1, \\ x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 1, \\ x_1 + x_2 + x_3 = 6. \end{cases}$$

$$\begin{cases} 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1, \\ \quad 4x_2 - \frac{5}{2}x_3 = \frac{1}{2}, \\ \quad 2x_2 + \frac{1}{2}x_3 = \frac{11}{2}. \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1, \\ \quad 4x_2 - \frac{5}{2}x_3 = \frac{1}{2}, \\ \quad \frac{7}{4}x_3 = \frac{21}{4}. \end{cases}$$

$$x_3 = 3, \Longrightarrow x_2 = 2, \Longrightarrow x_1 = 1.$$

若将A分解为两个三角形矩阵L,U, 即$A=LU$，则线性方程组$Ax=b$ 就容易求解了，此时只需求解两个三角方程组：

$$\begin{cases} Ly &= b \\ Ux &= y \end{cases} \tag{3.1}$$

这两个方程组可以用前代法和回代法求解.

Gauss消去法的过程的矩阵解析

顺序Gauss消去法的过程就是对系数矩阵A 左乘了$n-1$ 个初等单位下三角矩阵.记经过$k-1$ 次Gauss 消去过程后的方程（2.8）式的系数矩阵为$A^{(k)}$. 于是

$$A^{(k+1)} = L_k A^{(k)} \quad (k = 1, 2, \cdots, n-1) \tag{3.2}$$

其中

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & 1 & & & \\ & & & -a_{k+1,k}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} & 1 & & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & -a_{nk}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} & & & 1 \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

从(3.2) 得到：

$$A^{(n)} = L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1 A \tag{3.4}$$

所以

$$\begin{aligned} A &= (L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1})A^{(n)} \\ &= LU \end{aligned} \tag{3.5}$$

其中

$$\begin{cases} L = L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1} \\ U = A^{(n)} \end{cases} \tag{3.6}$$

L 的计算是比较容易的，我们有：

$$L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & 1 & & & \\ & & & a_{k+1,k}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} & 1 & & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & a_{nk}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} & & & 1 \end{bmatrix} \tag{3.7}$$

和

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ a_{2,1}^{(1)}/a_{1,1}^{(1)} & 1 & & & & \\ a_{3,1}^{(1)}/a_{1,1}^{(1)} & a_{3,2}^{(2)}/a_{2,2}^{(2)} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ . & . & . & \cdots & 1 & \\ a_{n,1}^{(1)}/a_{1,1}^{(1)} & a_{n,2}^{(2)}/a_{2,2}^{(2)} & . & \cdots & a_{n,n-1}^{(n-1)}/a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & 1 \end{bmatrix}$$

以上的LU 分解, L 是单位下三角矩阵,U 是上三角矩阵,这样的分解称为Doolittle(杜利特尔) 分解; 如果在LU 分解中, L 是下三角矩阵,而U 是单位上三角矩阵,这样的分解称为Crout(克劳特) 分解.

定理2:(矩阵三角分解基本定理) 设$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. 若$A$的顺序主子式$det\, A_k \neq 0$, 则存在唯一的Doolittle(杜利特尔) 分解$A = LU$.

杜利特尔分解法: 待定系数法

当A的顺序主子式全不为零，分解唯一. 则设$A = LU$,

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

则由$A = LU$可确定出L, U. 具体计算顺序: 第一步求U的第一行元和L的第一列元，第二步求U的第二行元和L的第二列元，依次求出. 即

$$u_{ki} = a_{ki} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj} u_{ji}, \ i = k, k+1, \cdots, n.$$

$$l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} u_{jk}) / u_{kk}, \ i = k+1, k+2, \cdots, n.$$

选列主元的消去法的矩阵分解形式

设矩阵A 非奇异，对A 作选主元LU 分解的每一步可以分为二个子步：选主元和消元.我们先引入一个记号：记I_{i_1,i_2} 为单位矩阵I 中的第i_1 行与第i_2 行交换后的矩阵. 为了方便起见，记$A = A^{(1)}$.

第一步，(1) 选主元.在$A^{(1)}$ 的第1列，即$A^{(1)}(1:n,1)$ 中选择绝对值最大的元素$a^{(1)}_{i_1,1}$ ，将$A^{(1)}$ 中的第1行与第i_1 行作交换.相当于$I_{1,i_1}A^{(1)}$. (2)对$I_{1,i_1}A^{(1)}$ 做消元运算，记为$A^{(2)}$. 于是$A^{(2)} = L_1 I_{1,i_1} A^{(1)}$.

第k 步，记经过$k-1$ 步运算后的矩阵为$A^{(k)}$. (1) 选主元.在$A^{(k)}$ 的第k 列的第k 行到第n 行，即$A^{(k)}(k:n,k)$ 中选择绝对值最大的元素$a^{(k)}_{i_k,k}$ ，将$A^{(k)}$ 中的第k 行与第i_k 行作交换.相当于$I_{k,i_k}A^{(k)}$. (2)对$I_{k,i_k}A^{(k)}$ 做消元运算，记为$A^{(k+1)}$. 于是$A^{(k+1)} = L_k I_{k,i_k} A^{(k)}$.

经过$n-1$ 步运算后的矩阵为$A^{(n)}$.此时已经是上三角矩阵.我们得到:

$$U=A^{(n)}=(L_{n-1}I_{n-1,i_{n-1}})(L_{n-2}I_{n-2,i_{n-2}})\cdots(L_1I_{1,i_1})A \quad (3.9)$$

所以

$$A=(I_{1,i_1}L_1^{-1})(I_{2,i_2}L_2^{-1})\cdots(I_{n-1,i_{n-1}}L_{n-1}^{-1})U \quad (3.10)$$

我们记

$$P=I_{n-1,i_{n-1}}I_{n-2,i_{n-2}}\cdots I_{1,i_1} \quad (3.11)$$

则

$$PA=(I_{n-1,i_{n-1}}I_{n-2,i_{n-2}}\cdots I_{2,i_1})L_1^{-1}(I_{2,i_2}\cdots I_{n-1,i_{n-1}})(I_{n-1,i_{n-1}}\cdots I_{3,i \quad (3.12)$$

记

$$\begin{cases} \hat{L}_j = I_{n-1,i_{n-1}} \cdots I_{j+1,i_{j+1}} L_j^{-1} I_{j+1,i_{j+1}} \cdots I_{n-1,i_{n-1}} \\ j = 1, 2, \cdots, n-2 \end{cases} \tag{3.13}$$

由初等排列矩阵I_{ij} 和矩阵L_j 的性质容易证明$\hat{L}_j(j = 1, \cdots, n-1))$ 对角元以下的非零元在第j 列(why?). 令

$$L = \hat{L}_1 \cdot \hat{L}_2 \cdots \hat{L}_{n-1} \tag{3.14}$$

则L 是单位下三角矩阵.从(3.9)–(3.14) 得到

$$PA = LU \tag{3.15}$$

从上式可知，对矩阵A 的选列主元的LU 分解，相当于先将A 按主元次序排列好，然后再进行顺序LU 分解.

三对角方程组的追赶法

在线性方程组$Ax = b$ 中,假设A 具有如下的形式:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n+1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix} \tag{3.16}$$

我们称为三对角方程组.它在微分方程数值解等领域经常出现.

假设A 可以做LU 分解,则L 和U 都是二对角矩阵,它们有如下的形式:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ 0 & l_{32} & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \tag{3.17}$$

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & a_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & u_{22} & a_{23} & 0 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & u_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ & & & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

利用比较系数法,我们得到:

$$\begin{cases} u_{11} = a_{11} \\ l_{i,i-1} = \dfrac{a_{i,i-1}}{u_{i-1,i-1}} \\ u_{ii} = a_{ii} - l_{i,i-1}\, a_{i-1,i} \\ i = 2, 3, \cdots, n \end{cases} \tag{3.18}$$

有了A 的LU 分解,我们可以分二步求$Ax = b$ 的解: $Ly = b$ 和$Ux = y$. 计算公式如下:

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - l_{i,i-1} \cdot y_{i-1} \\ i = 2, 3, \cdots, n \end{cases} \tag{3.19}$$

和

$$\begin{cases} x_n = \frac{y_n}{u_{nn}} \\ x_i = \frac{y_i - a_{i,i+1} \cdot x_{i+1}}{u_{ii}} \\ i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases} \tag{3.20}$$

由公式(3.18),(3.19),(3.20)组成的计算过程称为解三对角方程组的追赶法. 这个方法的计算量大约是$8n$ 次四则运算,是一种快速计算方法.

在存储方面,我们可以用下列的紧缩方法把A, L, U 存储到$\bar{A}, \bar{L}, \bar{U}$中:

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} 0 & a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} \\ a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ a_{n,n-1} & a_{n,n} & 0 \end{bmatrix}, \bar{L} = \begin{bmatrix} 0 \\ l_{2,1} \\ l_{3,2} \\ \vdots \\ l_{n-1,n-2} \\ l_{n,n-1} \end{bmatrix}, \bar{U} = \begin{bmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,2} \\ u_{3,3} \\ \vdots \\ u_{n-1,n-1} \\ u_{n,n} \end{bmatrix} \tag{3.21}$$

再加上向量b, x, y, 总共需要$8n$ 个实数存储单位. 存储量也是很少的.

追赶法的另一种形式

假设A 可以做LR 分解,则L 和R 都是二对角矩阵,它们有如下的形式:

$$L = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ 0 & \gamma_3 & \alpha_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \tag{3.22}$$

$$R = \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & \beta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

即$A = LR$, 具体公式略去.

正定矩阵的平方根法

Cholesky 分解法又称平方根法，是求解对称正定线性方程组的常用方法之一.

设$A \in R^{n\times n}$ 是对称正定矩阵，由Gauss消去法，A 可以分解为：$A = LU$, 其中L是单位下三角矩阵，U是上三角矩阵.
将U写成一个对角阵和单位上三角矩阵的乘积，A是正定对称矩阵，

$$A = LDL^T.$$

D是对角阵，对角线元素均大于零，可以记

$$A = LD^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}L^T = (LD^{\frac{1}{2}})(LD^{\frac{1}{2}})^T = \bar{L}\bar{L}^T.$$

设$A \in R^{n\times n}$ 是对称正定矩阵，则A 可以分解为：

$$A = LL^T \tag{3.23}$$

下面通过待定系数的方法来计算矩阵L. 设

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \tag{3.24}$$

比较方程(3.23) 两边的对应元素, 得关系式

$$a_{ij} = \sum_{p=1}^{j} l_{ip} l_{jp}, \quad 1 \le j \le i \le n \tag{3.25}$$

我们按列计算.首先, 由 $a_{11} = l_{11}^2$, 得 $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$.
再由 $a_{i1} = l_{11} l_{i1}$, 得 $l_{i1} = a_{i1}/l_{11}, \quad i = 1, \cdots, n$.
这样便得到了矩阵L 的第1列元素.假设已经算出L 的前$k-1$ 列元素, 由

$$a_{kk} = \sum_{p=1}^{k} l_{kp}^2 \tag{3.26}$$

得

$$l_{kk} = (a_{kk} - \sum_{p=1}^{k-1} l_{kp}^2)^{\frac{1}{2}} \tag{3.27}$$

再由

$$a_{ik} = \sum_{p=1}^{k-1} l_{ip}l_{kp} + l_{ik}l_{kk}, \quad i = k+1, \cdots, n \tag{3.28}$$

得

$$l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} l_{ip}l_{kp})/l_{kk}, \quad i = k+1, \cdots, n \tag{3.29}$$

这样便又求出了L 的第k 列元素. 由归纳法知，可以求出L 的所有元素.

例. 用平方根法解方程组

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 2 & 2 & -3 \\ -2 & -3 & 14 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}.$$

计算可得$A = LL^T$.

$$L = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & -2 & 3 \end{bmatrix}.$$