第二讲 线性方程组的直接解法

- 引言
- 高斯消去法
- 直接三角分解法
- 应用举例
- 向量和矩阵范数
- 误差分析

一、 引言

在科学计算中，经常需要求解含有n个未知量的n个方程构成的线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{0.0}$$

方程组还可以用矩阵形式表示为：$Ax=b$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \qquad x_i = D_i / D$$

若系数矩阵A非奇异，即 $\det(A)\neq 0$,则方程组有惟一解 $x=(x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$.

根据 Gramer（克莱姆）法则，求解方程组（0.0）时，要计算大量的行列式，所需乘法次数大约为

$$N=(n+1)n!(n-1)=(n^2-1)n!$$

当 n 较大时，这个计算量是惊人的。例 如，当 $n=20$ 时，约需乘法次数为 $N=9.7\times 10^{20}$

如果用每秒一亿次的计算机来计算，需要三十万年时间。可见Cramer法则不是一种实用的方法。

因此，必须构造出适合于计算机使用的线性方程组求解方法。

- 直接法：不计舍入误差，通过有限次算术运算求得精确解。
  - ✓ Gauss消元法、主元素法
  - ✓ 适用于低阶稠密方程组（非零元素较多，零元素较少）

- 迭代法：设计迭代公式，产生逼近精确解的近似序列
  - ✓ 收敛性、收敛速度、误差估计问题
  - ✓ 简单迭代法、赛德尔迭代法
  - ✓ 适用于大型稀疏方程组
    - 上万阶，零元素很多，非零元素很少

二、 高斯消去法

Gauss（高斯）消去法是一种规则化的加减消元法

基本思想

通过逐次消元计算把需求解的线性方程组转化成上三角形方程组，也就是把线性方程组的系数矩阵转化为上三角矩阵，从而使一般线性方程组的求解转化为等价（同解）的上三角形方程组的求解。

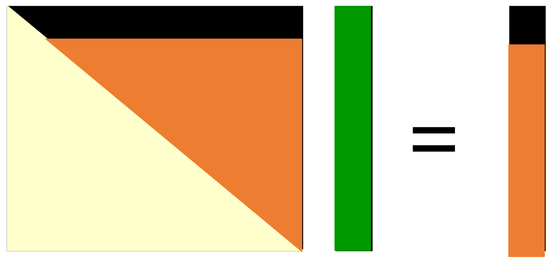
Gauss消去法由消元和回代两个过程组成。

中国古籍《九章算术》，成书于约公元前**250**年

高斯消元法

$$Ax = b$$

首先将A化为上三角阵，再回代求解。



$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots\cdots\cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{22}x_2 + \cdots\cdots\cdots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots = \cdots$$

$$a_{n-1n-1}x_{n-1} + a_{n-1n}x_n = b_{n-1}$$

$$a_{nn}x_n = b_n$$

其中$a_{ii} \neq 0 \quad (i = 1,2,\ldots\ldots,n)$

一、顺序Gauss消去法

例1. 用Gauss消去法解方程组　　用增广矩阵进行计算

消元过程

$$\begin{cases} 2x_1 - 4x_2 + 2x_3 = 2 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3 \\ -3x_1 - 2x_2 + 5x_3 = 1 \end{cases} \qquad [A,b] = \begin{bmatrix} 2 & -4 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 3 \\ -3 & -2 & 5 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} 2x_1 - 4x_2 + 2x_3 = 2 \\ 4x_2 + 2x_3 = 2 \\ -8x_2 + 8x_3 = 4 \end{cases} \qquad \begin{bmatrix} 2 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 4 & 2 & 2 \\ 0 & -8 & 8 & 1 \end{bmatrix}$$

上三角形方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - 4x_2 + 2x_3 = 2 \\ 4x_2 + 2x_3 = 2 \\ 12x_3 = 8 \end{cases} \qquad \begin{bmatrix} 2 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 12 & 8 \end{bmatrix}$$

回代过程

$\Rightarrow$ $x_3 = 2/3 \quad x_2 = 1/6 \quad x_1 = 2/3$

$x_3 = 2/3,\quad x_2 = 1/6,\quad x_1 = 2/3$

这样，对于方程组

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

或者 $Ax=b$

我们用增广矩阵表示，并给出Gauss消去法的具体算法。

$$[A,b]=\left[A^{(1)},b^{(1)}\right]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

$$[A,b]=\left[A^{(1)},b^{(1)}\right]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

顺序Gauss消去法的消元过程可表述如下：

第一步，设 $a_{11}^{(1)}\neq 0$，将第一列中$a_{11}^{(1)}$以下的各元素消成零

即依次用

$$-l_{i1}=-\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\qquad (i=2,3,\ldots,n)$$

行乘数(消元因子)

乘以矩阵$[A^{(1)},b^{(1)}]$的第一行再加到第i行，得到矩阵

$$\left[A^{(2)},b^{(2)}\right]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

其中

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-l_{i1}a_{1j}^{(1)},i,j=2,3,\cdots,n$$

$$b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-l_{i1}b_1^{(1)},i=2,3,\cdots,n$$

第二步，设 $a_{22}^{(2)}\neq 0$ ，将第二列$a_{22}^{(2)}$以下各元素消成零，

即依次用

$$-l_{i2}=-\frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \qquad (i=3,4,\ldots,n)$$

乘以矩阵[$A^{(2)}$，$b^{(2)}$]的第二行再加到第i行，得到矩阵

$$
\left[A^{(2)}, b^{(2)}\right] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{bmatrix}
$$

其中
$$
a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - l_{i2} a_{2j}^{(2)}, \quad i, j = 3, 4, \cdots, n
$$
$$
b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - l_{i2} b_2^{(2)}, \quad i = 3, 4, \cdots, n
$$

如此继续消元下去直到第n－1步结束后，得到矩阵

$$\left[A^{(n)},b^{(n)}\right]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

增广矩阵[$A^{(n)}$，$b^{(n)}$]对应如下上三角形方程组

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)} \end{cases}$$

这是与原线性方程组（1.1）等价的方程组.

对于等价方程组

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ \qquad a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n-1n-1}^{(n-1)}x_{n-1} + a_{n-1n}^{(n-1)}x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \\ \qquad a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)} \end{cases}$$

进行回代求解，可以得到：

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}$$

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}^{(k)}}\left(b_k^{(k)} - a_{kk+1}^{(k)}x_{k+1} - a_{kk+2}^{(k)}x_{k+2} - \cdots - a_{kn}^{(k)}x_n\right)$$

$$= \frac{1}{a_{kk}^{(k)}}\left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)}x_j\right), \quad k = n-1, \cdots, 2, 1$$

于是，采用Gauss消去法求解方程组

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

首先写出增广矩阵

$$[A,b]=\left[A^{(1)},b^{(1)}\right]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

然后进行消元，采用公式

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)}, \quad i, j = k+1, k+2, \cdots, n$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik} b_k^{(k)}, \quad i = k+1, k+2, \cdots, n$$

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad （i=k+1，k+2，\ldots，n） \quad k = 1,2,\cdots,n-1$$

得到相似增广矩阵

$$\left[A^{(n)}, b^{(n)}\right] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

最后进行回代得到方程组的解

$$
\begin{cases}
x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\[2em]
x_i = \left(b_i^{(i)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j \right) \Big/ a_{ii}^{(i)} \quad i=n-1, \ n-2, \ \ldots, \ 1
\end{cases}
$$

在编程计算时，最后的增广矩阵存放的元素是：

$$
\begin{bmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\
l_{21} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\
l_{31} & l_{32} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)}
\end{bmatrix}
$$

$$\left[A^{(n)}, b^{(n)}\right]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2,n-1}^{(2)} & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3,n-1}^{(3)} & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} & b_{n-1}^{(n-1)} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

消元条件：$a_{ii}^{(i)} \neq 0, i=1,2,\cdots,n-1$　　回代条件：$a_{nn}^{(n)} \neq 0$

消元法是将某行的若干倍加到另一行
故A的各阶顺序主子式$D_i(i=1\sim n)$不变

$$D_i=\begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1i} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{i1} & \dots & a_{ii} \end{vmatrix}$$

$D_1=a_{11}^{(1)},\ D_2=a_{11}^{(1)}a_{22}^{(2)},$

$\cdots,\quad D_n=a_{11}^{(1)}a_{22}^{(2)}\cdots a_{nn}^{(n)}$

$D_1=a_{11}^{(1)},\quad D_i=D_{i-1}a_{ii}^{(i)}, i=2\sim n$

消元条件：$D_i \neq 0, i=1\sim n-1$

回代条件：$D_n \neq 0, |A| \neq 0$

用Gauss消去法解方程组，应注意：

1. 适用条件： 原方程组系数矩阵的各阶顺序主子式不等于零。

2．运算量小： 共有乘除法次数为

$$\frac{1}{3}\left(n^3-n\right)+2\times\frac{n(n-1)}{2}+n=\frac{1}{3}(n^3+3n^2-n)$$

而Gramer 法则的乘除法次数为：$(n^2-1)\,n!$

当 n=20 时
$$\begin{cases} N=(n^2-1)n!=9.7\times10^{20} \\ N=\dfrac{1}{3}(n^3+3n^2-n)=3060 \end{cases}$$

✓**结论** 定理 设 $Ax=b$，其中 $A\in \mathrm{R}^{n\times n}$.

(1) 如果$a_{kk}^{(k)}\neq 0(k=1,2,\cdots,n)$，则可通过高斯消去法将 $Ax=b$ 约化为等价的三角形方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}.$$

(2)如果 A为非奇异矩阵，则可通过高斯消去法(及交换两行的初等变换)将方程组 $Ax=b$ 约化为

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}.$$

? 矩阵A在什么条件下才能保证 $a_{kk}^{(k)}\neq 0(k=1,2,\cdots,n)$.

定理 约化的主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i=1,2,\cdots,k)$的充要条件是矩阵 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0 (i=1,2,\cdots,k)$. 即

$$D_1 = a_{11} \neq 0,$$

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (i=1,2,\cdots,k).$$

推论 如果 A 的顺序主子式 $D_k \neq 0 (k=1,2,\cdots,n-1)$, 则

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} = D_1, \\ a_{kk}^{(k)} = D_k / D_{k-1} \quad (k=2,3,\cdots,n). \end{cases}$$

二 列主元Gauss消去法

顺序Gauss消去法计算过程中的 $a_{kk}^{(k)}$ 称为主元素，在第k步消元时要用它作除数,则可能会出现以下几种情况:

- 若出现 $a_{kk}^{(k)}=0$，消元过程就不能进行下去。
- $a_{kk}^{(k)}\neq 0$，消去过程能够进行，但若$|a_{kk}^{(k)}|$ 过小，也会造成舍入误差积累很大导致计算解的精度下降。

例 在四位十进制的限制下，用顺序Gauss消去法求解如下方程组

$$\begin{cases} 0.012x_1+0.01x_2+0.167x_3=0.6781 \\ x_1+0.8334x_2+5.91x_3=12.1 \\ 3200x_1+1200x_2+4.2x_3=981 \end{cases}$$

此方程组具有四位有效数字的精确解为

$$x_1 = 17.46,\quad x_2 = -45.76,\quad x_3 = 5.546$$

如果用顺序Gauss消去法求解，消元过程如下

$$\begin{bmatrix} \boxed{0.0120} & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \\ 1.000 & 0.8334 & 5.910 & 12.10 \\ 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \end{bmatrix} \longrightarrow$$

$$\begin{bmatrix} 0.0120 & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \\ 0 & \boxed{0.1000 \times 10^{-3}} & 8.010 & -44.41 \\ 0 & -1467 & -4454 \times 10 & -1798 \times 10^{2} \end{bmatrix} \longrightarrow$$

$$\begin{bmatrix} 0.0120 & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \\ 0 & 0.1000 \times 10^{-3} & -8.010 & -44.41 \\ 0 & 0 & -1175 \times 10^{5} & -6517 \times 10^{5} \end{bmatrix}$$

经回代求解得

$$x_3 = 5.546,\ x_2 = 100.0,\ x_1 = -104.0$$

和此方程组的精确解相比

$$x_3 = 5.546,\ x_2 = -45.76,\ x_1 = 17.46$$

有较大的误差。

对于此例，由于顺序Gauss消去法中的主元素绝对值非常小，使消元乘数绝对值非常大，计算过程中出现大数吃掉小数现象，产生较大的舍入误差，最终导致计算所求得的两个解 $x_1 = -104.0$ 和 $x_2 = 100.0$ 已完全失真。

为避免这种现象发生，可以对原方程组作等价变换，再利用顺序Gauss消去法求解。

写出原方程组的增广矩阵：

$$\begin{bmatrix} 0.0120 & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \\ 1.000 & 0.8334 & 5.910 & 12.10 \\ \boxed{3200} & 1200 & 4.200 & 981.0 \end{bmatrix} \longrightarrow$$

针对第一列找出绝对值最大的元素，进行等价变换：

$$\begin{bmatrix} \boxed{3200} & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 1.000 & 0.8334 & 5.910 & 12.10 \\ 0.0120 & 0.0100 & 0.1670 & 0.6781 \end{bmatrix} \longrightarrow$$

$$\begin{bmatrix} 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 0 & \boxed{0.4584} & 5.909 & 11.79 \\ 0 & 0.5500\times10^{-2} & 0.1670 & 0.644 \end{bmatrix} \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \begin{bmatrix} 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 0 & 0.4584 & 5.909 & 11.79 \\ 0 & 0 & 0.0961 & 0.5329 \end{bmatrix}$$

求得方程的解为：$x_3=5.546$，$x_2=-45.76$，$x_1=17.46$

精确解为：$x_3=5.546$，$x_2=-45.76$，$x_1=17.46$

由此可见，第二种Gauss消去法的精度明显高于顺序Gauss消去法，我们称它为列主元Gauss消去法。

列主元Gauss消去法与顺序Gauss消去法的不同之处在于：

- 后者是按自然顺序取主元素进行消元
- 前者在每步消元之前先选取主元素然后再进行消元

下面将列主元Gauss消去法的计算步骤叙述如下：

给定线性方程组 $Ax=b$，记$[A^{(1)}, b^{(1)}]=[A,b]$，列主元Gauss消去法的具体过程如下：

1. 首先在增广矩阵$[A^{(1)},b^{(1)}]$第一列的n个元素中选取绝对值最大的一个作为主元素，并把此主元素所在的行与第一行交换，即

$$\left|a_{k1}^{(1)}\right|=\max_{1\le i\le n}\left|a_{i1}^{(1)}\right|,\quad a_{kj}^{(1)}\leftrightarrow a_{1j}^{(1)}, b_k^{(1)}\leftrightarrow b_1^{(1)}$$

2. 其次进行第一步消元得到增广矩阵$[A^{(2)},b^{(2)}]$，在矩阵$[A^{(2)},b^{(2)}]$ 第二列的后 $n-1$个元素中选取绝对值最大的一个作为主元素，并把此主元素所在的行与第二行交换，即

$$\left|a_{k2}^{(2)}\right|=\max_{2\le i\le n}\left|a_{i2}^{(2)}\right|,\quad a_{kj}^{(2)}\leftrightarrow a_{2j}^{(2)}, b_k^{(2)}\leftrightarrow b_2^{(2)}$$

3. 再进行第二步消元得到增广矩阵$[\boldsymbol{A}^{(3)}, \boldsymbol{b}^{(3)}]$。按此方法继续进行下去，经过$n-1$步选主元和消元运算，得到增广矩阵$[\boldsymbol{A}^{(n)}, \boldsymbol{b}^{(n)}]$，它对应的方程组

$$\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(n)}$$

是一个与原方程组等价的上三角形方程组，可进行回代求解。

容易证明，只要$\det(\boldsymbol{A})\neq 0$，列主元Gauss消去法就可以顺利完成，即不会出现主元素为零或者绝对值太小的情形出现。

列主元Gauss消去算法

用列主元Gauss消去法求解线性方程组Ax＝b

- 输入：$A=(a_{ij})$，$b=(b_1, \ldots, b_n)^T$，维数n
- 输出：方程组解$x_1, \ldots, x_n$，或方程组无解信息

1： 对于k＝1，2，…，n－1，循环执行步2到步5

2： 按列选主元素 a_{ik}，即确定下标 i 使

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

3： 若a_{ik}＝0，输出 'no unique solution'，停机

4： 若$i \neq k$，换行

$$a_{kj} \leftrightarrow a_{ij}, j = k, \cdots, n$$

$$b_k \leftrightarrow b_i$$

5：消元计算，对于$i=k+1$，…，n，计算

$$l_{ik} \Leftarrow a_{ik} / a_{kk}$$

$$a_{ik} \Leftarrow a_{ik} - l_{ik} a_{kj}, j = k+1, \cdots, n$$

$$b_i \Leftarrow b_i - l_{ik} b_k$$

6：若 $a_{nn}=0$ 输出 no unigue solution，停机

7：回代求解

$$x_n \Leftarrow b_n / a_{nn}$$

$$x_i \Leftarrow \frac{1}{a_{ii}} \left[bi - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j \right], \quad i = n-1, \cdots, 2, 1$$

8：输出 x_1，x_2，…，x_n

有时候在消元过程中可以在系数矩阵所有元素中选择绝对值最大的元素作为主元素（换行换列），这样的Gauss消去法和叫做**全主元Gauss消去法**。

$$\left[A^{(1)},b^{(1)}\right]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & \boxed{a_{33}^{(1)}} & \cdots & a_{3n}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

由于这两种方法的精度差不多，且全主元Gauss消去法程序设计复杂占用机器时间较多，实际应用中一般采用列主元Gauss消去法，它既简单又能保证计算精度。

三．Gauss-Jordan消去法

将在***Gauss***消元第***k***步，变为

$$第i行+\frac{-a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}\times第k行, i=1,\cdots,k-1,k+1,\cdots,n$$

将该行上三角地部分也变为0

消元完成后增广矩阵最后变为一个对角阵。

它的乘除法运算量比***Gauss***消去多.是 $O(\frac{n^3}{2})$

使用于计算多个系数一样的方程组，如

$$AX=B$$ ***X*，*B*** 均为矩阵

Gauss-Jordan消去法一般用来求矩阵的逆也就是解方程

$$AX=e_i,(i=1,2,\cdots,n)$$

例5：用G-J法求$A=\begin{bmatrix}1&2&3\\2&4&5\\3&5&6\end{bmatrix}$的逆矩阵$A^{-1}$.

解：$\left(A\,|\,I_n\right)=\begin{bmatrix}1&2&3&1&0&0\\2&4&5&0&1&0\\3&5&6&0&0&1\end{bmatrix}\rightarrow\begin{bmatrix}3&5&6&0&0&1\\2&4&5&0&1&0\\1&2&3&1&0&0\end{bmatrix}$

$$\to \begin{bmatrix} 1 & 5/3 & 2 & 0 & 0 & 1/3 \\ 0 & 2/3 & 1 & 0 & 1 & -2/3 \\ 0 & 1/3 & 1 & 1 & 0 & -1/3 \end{bmatrix}$$

$$\to \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/2 & 0 & -5/2 & 2 \\ 0 & 1 & 3/2 & 0 & 3/2 & -1 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1 & -1/2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\to \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \left(I_n \mid A^{-1} \right).$$

三、直接三角分解法

一、 Gauss消去法的矩阵运算

从§1中讨论可知，Gauss消去法的消元过程是将增广矩阵$[A, b]=[A^{(1)}, b^{(1)}]$逐步约化为矩阵$[A^{(n)}, b^{(n)}]$。

用矩阵运算的观点来看，消元的每一步计算等价于用一个单位下三角矩阵左乘前一步约化得到的矩阵。

现在说明，在消元过程中，系数矩阵$A=A^{(1)}$是如何经矩阵运算约化为上三角矩阵$A^{(n)}$，即

$$A^{(1)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \Longrightarrow A^{(n)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} ?$$

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}$$

若 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，令 $l_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$， $i=2$，3，…，n，

得到下三角矩阵

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & 1 & & & \\ -l_{31} & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ -l_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

施行第一步消元，我们得到

$$A^{(2)} = L_1 A^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}$$

若 $a_{22}^{(2)} \neq 0$，令 $l_{i2} = a_{i2}^{(2)} / a_{22}^{(2)}$，$i$=2，3，…，$n$，则有

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

施行第二步消元，我们得到

$$A^{(3)} = L_2 A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{3n}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} \end{bmatrix}$$

如此下去，直至施行第$n-1$步消元，得到

$$A^{(n)} = L_{n-1} A^{(n-1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

由此可见，在顺序Gauss消去法的过程中，系数矩阵$A=A^{(1)}$经过一系列单位下三角矩阵的左乘运算约化为上三角矩阵$A^{(n)}$，即

$$A^{(n)}=L_{n-1}A^{(n-1)}=L_{n-1}L_{n-2}A^{(n-2)}=\cdots=L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1A$$

这时 $$A=L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}A^{(n)}$$

由 $$L_k=\begin{bmatrix}1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & & 1\end{bmatrix}$$ 得 $$L_k^{-1}=\begin{bmatrix}1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{k+1k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{nk} & & & 1\end{bmatrix}$$

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

容易验证

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn-1} & 1 \end{bmatrix}$$

则从顺序Gauss消去法的矩阵运算表示式可知，系数矩阵A可分解为一个单位下三角矩阵L和一个上三角矩阵U的乘积，即

$$A = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} A^{(n)} = LU$$

其中$U = A^{(n)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$

我们将*A=LU* 称为矩阵A的三角分解,这时线性方程组为:

$$AX = b \Rightarrow L\underline{UX} = b$$

令 $$UX = Y$$

则有 $$\begin{cases} LY = b \\ UX = Y \end{cases}$$

第一个方程组的系数矩阵为下三角矩阵，第二个方程组的系数矩阵为上三角矩阵，两个方程组都非常容易求解。

高斯消元法与矩阵的因式分解有关

对于 $$\boldsymbol{LY}=\boldsymbol{b}$$

由
$$\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

解得
$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_k = b_k - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} y_i, \quad k = 2,3,\cdots,n \end{cases}$$

对于 $\boldsymbol{UX = Y}$

由

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

求得

$$\begin{cases} x_n = y_n / u_{nn} \\ x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j \right) \Big/ u_{ii}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

可以看出对于方程组：$AX=b$

只要对系数矩阵作了三角分解：$A=LU$

通过如下两组公式很容易求解：

$$\begin{cases} y_1=b_1 \\ y_k=b_k-\sum_{i=1}^{k-1} l_{ki}y_i, \quad k=2,3,\cdots,n \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_n=y_n/u_{nn} \\ x_i=\left(y_i-\sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j\right)\Big/u_{ii}, \quad i=n-1,n-2,\cdots,1 \end{cases}$$

由这个简单的计算过程可知，系数矩阵的三角分解很关键，**如何进行三角分解更容易**？

LU分解的意义：根据A的性质作不同的分解，得到不同的直接法

二、Doolittle分解法

前已述及，若在顺序Gauss消去法的过程中，每步消元的主元素 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，则矩阵A可分解为$A=LU$，L为单位下三角矩阵，U为上三角矩阵，此分解称为A的 Doolittle（杜利特尔）分解。可以证明当$a_{kk}^{(k)} \neq 0$的充要条件是A的各阶顺序主子式不为零，于是有如下定理。

定理2.1 设n阶方阵A的各阶顺序主子式不为零，则存在惟一单位下三角矩阵L和上三角矩阵U使$A=LU$。

根据 A=LU 有等式成立：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

比较等式两端对应元素，有

$$a_{ij} = (l_{i1} \ \ l_{i2} \cdots l_{i\,i-1} \ \ 1 \ \ 0 \ \cdots 0) \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{j-1\,j} \\ u_{jj} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik} u_{kj} = u_{ij} + \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \ i = 1 \sim n$$

先固定i按行求

$$\boldsymbol{u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \quad j = i, i+1, \cdots, n}$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik} u_{kj} = l_{ij} u_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, \ j = 1 \sim n-1$$

再固定j按列求

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

$$\boldsymbol{u_{1j} = a_{1j}, \ \ j = 1,2,\cdots,n \qquad l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}, \ \ i = 2,3,\cdots,n}$$

于是，对于矩阵的三角分解：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

可按照以下公式进行：

$$\begin{cases} u_{1j} = a_{1j}, & j = 1,2,\cdots,n \\ l_{i1} = a_{i1} / u_{11}, & i = 2,3,\cdots,n \end{cases} \quad (2.3)$$

对于 i=2,3, … , n，计算

$$\begin{cases} u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} & j = i, i+1, \cdots, n \\ l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}) / u_{jj} & i = j+1, j+2, \cdots, n \end{cases} \quad (2.4)$$

用计算公式(2.3)、(2.4)对矩阵A作的分解(2.2)称作Doolittle分解。

按框先横后
竖计算元素

$$\begin{array}{lll|l} u_{11} & u_{12} & u_{13}\cdots u_{1n} & \text{第一步} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23}\cdots u_{2n} & \text{第二步} \\ l_{31} & l_{32} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots \quad \vdots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots \quad u_{nn} & \text{第 } n\text{步} \end{array}$$

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \; j = i, i+1, \cdots, n$$

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}}{u_{jj}}, i = j, j+1, \cdots n$$

$$i = 1\text{时} u_{1j} = a_{1j}, \; j = 1 \sim n; \quad j = 1\text{时} l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}, i = 2 \sim n$$

为了表示和存储方便，可以将分解后的两个矩阵用一个矩阵表示

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

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

下面，我们对具体矩阵进行Doolittle 三角分解。

例2-3　利用Doolittle三角分解法分解矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \\ 1 & 8 & 27 & 64 \\ 1 & 16 & 81 & 256 \end{bmatrix} \Longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 6 & 12 \\ 1 & 3 & 6 & 24 \\ 1 & 7 & 6 & 24 \end{bmatrix}$$

解：分解时用到如下公式

$$\begin{cases} u_{1j}=a_{1j}, & j=1,2,\cdots,n \\ l_{i1}=a_{i1}/u_{11}, & i=2,3,\cdots,n \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_{ij}=a_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} & j=i,i+1,\cdots,n \\ l_{ij}=(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj})/u_{jj} & i=j+1,j+2,\cdots,n \end{cases}$$

这时，矩阵的三角分解

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 1 & 4 & 9 & 16\\ 1 & 8 & 27 & 64\\ 1 & 16 & 81 & 256\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 1 & 2 & 6 & 12\\ 1 & 3 & 6 & 24\\ 1 & 7 & 6 & 24\end{bmatrix}$$

可以写成：

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 1 & 4 & 9 & 16\\ 1 & 8 & 27 & 64\\ 1 & 16 & 81 & 256\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 3 & 1 & 0\\ 1 & 7 & 6 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 0 & 2 & 6 & 12\\ 0 & 0 & 6 & 24\\ 0 & 0 & 0 & 24\end{bmatrix}$$

如果我们要求解方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \\ 1 & 8 & 27 & 64 \\ 1 & 16 & 81 & 256 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 10 \\ 44 \\ 190 \end{bmatrix}$$

则由

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \\ 1 & 8 & 27 & 64 \\ 1 & 16 & 81 & 256 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 1 & 0 \\ 1 & 7 & 6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 2 & 6 & 12 \\ 0 & 0 & 6 & 24 \\ 0 & 0 & 0 & 24 \end{bmatrix}$$

得到

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 1 & 0 \\ 1 & 7 & 6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 10 \\ 44 \\ 190 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 2 & 6 & 12 \\ 0 & 0 & 6 & 24 \\ 0 & 0 & 0 & 24 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix}$$

由 $$\begin{bmatrix}1&0&0&0\\1&1&0&0\\1&3&1&0\\1&7&6&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\y_2\\y_3\\y_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\10\\44\\190\end{bmatrix}$$ 解得 $$\begin{bmatrix}y_1\\y_2\\y_3\\y_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\8\\18\\24\end{bmatrix}$$

再由 $$\begin{bmatrix}1&2&3&4\\0&2&6&12\\0&0&6&24\\0&0&0&24\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}y_1\\y_2\\y_3\\y_4\end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix}1&2&3&4\\0&2&6&12\\0&0&6&24\\0&0&0&24\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\8\\18\\24\end{bmatrix}$$

求得方程组的解：

$$x_4=1 \qquad x_3=-1 \qquad x_2=1 \qquad x_1=-1$$

如下的计算公式(2.3)、(2.4)与(2.5)就是求解方程组$Ax=b$ 的 Doolittle 三角分解法（紧凑格式法）,包括分解和回代两步。

$$\begin{cases} u_{1j} = a_{1j}, & j = 1,2,\cdots,n \\ l_{i1} = a_{i1} / u_{11}, & i = 2,3,\cdots,n \end{cases} \quad (2.3)$$

$$\begin{cases} u_{ij} = a_{ij} - \sum_{m=1}^{i-1} l_{im} u_{mj}, & j = i, i+1, \cdots, n \\ l_{ki} = \frac{1}{u_{ii}} \left(a_{ki} - \sum_{m=1}^{i-1} l_{km} u_{mi}\right), & k = i+1, \cdots, n \end{cases} \quad (2.4)$$

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_k = b_k - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} y_i, k = 2,3,\cdots,n \\ x_n = y_n / u_{nn} \\ x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j \right) \Big/ u_{ii}, i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases} \quad (2.5)$$

与高斯消去法计算量基本相同

例2-4 利用Doolittle三角分解方法解线性方程

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -3 & -4 & -12 \\ 2 & 10 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -2 \\ 5 \\ 10 \end{bmatrix}$$

解：进行三角分解$A=LU$，按照公式(5.5)可以对增广矩阵[A,b]作三角分解:

$$\left[\begin{array}{ccc:c} 1 & 2 & 3 & -2 \\ -3 & -4 & -12 & 5 \\ 2 & 10 & 0 & 10 \end{array}\right] \Rightarrow \left[\begin{array}{ccc:c} 1 & 2 & 3 & -2 \\ -3 & 2 & -3 & -1 \\ 2 & 3 & 3 & 17 \end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & -2 \\ -3 & -4 & -12 & 5 \\ 2 & 10 & 0 & 10 \end{array}\right] \Rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & -2 \\ -3 & 2 & -3 & -1 \\ 2 & 3 & 3 & 17 \end{array}\right]$$

这时，相应的方程组为：

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ 17 \end{bmatrix}$$

得到 $x_3 = \dfrac{17}{3}$， $x_2 = 8$， $x_1 = -35$

三、平方根法

在实际应用中，常见一类非常重要的线性方程组$Ax=b$，其中A为对称正定矩阵，即A是对称的且对任何非零向量 x 都有$x^TAx>0$。本节将对这类方程组导出更有效的三角分解求解方法，称之为平方根法。

设A为对称正定矩阵，那么A的所有顺序主子式均大于零，根据定理2.1，存在惟一三角分解$A=LU$，即

$$A=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn-1} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & & & \ddots & \cdots \\ & & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

如果对称正定矩阵A具有如下分解 $A=GG^T$，其中G为下三角矩阵，则称其为对称正定矩阵的 **Cholesky**（乔列斯基）分解。

为表示方便，可以记

$$A = LL^T = \begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn-1} & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} & \cdots & l_{1n} \\ & l_{22} & l_{23} & \cdots & l_{2n} \\ & & l_{33} & \cdots & l_{3n} \\ & & & \ddots & \cdots \\ & & & & l_{nn} \end{bmatrix}$$

给定对称正定方程组 $Ax=b$，对 A 进行 Cholesky分解 $A=LL^T$，则原方程组等价于 $LL^Tx=b$

即： $LL^Tx=b$，等价于

$$Ly=b \qquad L^Tx=y$$

解此方程组即可得到原方程组的解x ，这就是求解方程组的平方根法。

下面，我们通过比较矩阵的对应元素给出对称正定矩阵的平方根分解法。已知

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn-1} & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} & \cdots & l_{1n} \\ & l_{22} & l_{23} & \cdots & l_{2n} \\ & & l_{33} & \cdots & l_{3n} \\ & & & \ddots & \cdots \\ & & & & l_{nn} \end{bmatrix}$$

于是，根据计算公式

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

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

可以对对称正定矩阵进行平方根分解

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \vdots & l_{n1} \\ & l_{22} & l_{32} & \vdots & l_{n2} \\ & & l_{33} & \vdots & l_{n3} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & l_{nn} \end{bmatrix}$$

关于方程组 $Ax=b$，如果对系数矩阵进行了平方根分解 $A=LL^T$，则将方程组化为：$Ly=b$，$L^Tx=y$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \vdots & l_{n1} \\ & l_{22} & l_{32} & \vdots & l_{n2} \\ & & l_{33} & \vdots & l_{n3} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & l_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

解得

$$y_j=\left(b_j-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}y_k\right)\Big/ l_{jj}, \quad j=1,2,\cdots,n$$

$$x_j=\left(y_j-\sum_{k=j+1}^{n} l_{kj}y_k\right)\Big/ l_{jj}, \quad j=n,n-1,\cdots,1$$

于是，关于系数矩阵是对称正定矩阵的线性方程组$Ax=b$的求解，分两步进行：

第一步：系数矩阵的平方根分解

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

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

第二步：解等价方程组

$$y_j=\left(b_j-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}y_k\right)\Big/l_{jj},\quad j=1,2,\cdots,n$$

$$x_j=\left(y_j-\sum_{k=j+1}^{n}l_{kj}y_k\right)\Big/l_{jj},\quad j=n,n-1,\cdots,1$$

例2-6 用平方根法求解对称正定方程组

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{bmatrix}$$

解：首先进行A 的Cholesky 分解

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

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

$$A=LL^T=\begin{bmatrix} 2 & & \\ -0.5 & 2 & \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & -0.5 & 0.5 \\ & 2 & 1.5 \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

求解$Ly=b$:

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -0.5 & 2 & 0 \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{bmatrix}$$

得 $y_1=2$，$y_2=3.5$，$y_3=1$

再求解 $L^Tx=y$:

$$\begin{bmatrix} 2 & -0.5 & 0.5 \\ 0 & 2 & 1.5 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 \\ 3.5 \\ 1 \end{bmatrix}$$

得 $x_1=1$，$x_2=1$，$x_3=1$

关于对称正定方程组

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{bmatrix}$$

也可以用一般的三角分解法求解，这时由

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 & 4 \\ -1 & 4.25 & 2.75 & 6 \\ 1 & 2.75 & 3.5 & 7.25 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 & 4 \\ -0.25 & 4 & 3 & 7 \\ 0.25 & 0.75 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

求得 $x_1=1$，$x_2=1$，$x_3=1$

四、追赶法

追赶法是专门用于求解三对角方程组的。这类方程组经常出现于用差分方法或有限元方法求解二阶常微分方程边值问题、热传导问题及三次样条函数插值等问题，三对角方程组$Ax=b$的系数矩阵具有如下形式：

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

设A为一个三对角矩阵，那么它的顺序主子式均不为零的一个充分条件是：

$$|b_1|>|c_1|>0, |b_n|>|a_n|>0$$

$$|b_i| \geq |c_i| + |a_i|, c_i a_i \neq 0, i = 2, \cdots, n-1$$

在此条件下，可对A进行三角分解，设

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

比较矩阵的对应元素，根据矩阵乘法规则，可得到

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \gamma_i = a_i, \quad i = 2,3,\cdots,n \\ \alpha_1 = b_1 \quad \alpha_i = b_i - \gamma_i \beta_{i-1}, \quad i = 2,3,\cdots,n \\ \beta_i = \dfrac{c_i}{\alpha_i}, \quad i = 1,2,\cdots,n-1 \end{cases}$$

对于三对角方程组$Ax = b$，设A的三角分解为$A = LU$，则原方程组等价于

$$Ly = b, \quad Ux = y$$

由$Ly=b$，即
$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

解得
$$y_1 = b_1 / \alpha_1$$
$$y_i = (b_i - \gamma_i y_{i-1}) / \alpha_i, \quad i = 2, \cdots, n$$

由$Ux=y$，即
$$\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

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

于是，对于三对角矩阵方程组 $\boldsymbol{Ax=b}$，如下的两组公式便构成了构成了解三对角方程组的追赶法：

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

$$\begin{cases} y_1 = b_1/\alpha_1, y_i = (b_i - \gamma_i y_{i-1})/\alpha_i, & i = 2,\cdots,n \\ x_n = y_n, x_i = y_i - \beta_i x_{i+1}, & i = n-1,\cdots,1 \end{cases}$$

例 解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & & \\ -1 & 3 & 2 & \\ & -1 & 3 & 2 \\ & & -1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 11 \\ 15 \\ 9 \end{pmatrix}$$

解

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & & \\ -1 & 3 & 2 & \\ & -1 & 3 & 2 \\ & & -1 & 3 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

所以

$$A = \begin{pmatrix} 3 & & & \\ -1 & \frac{11}{3} & & \\ & -1 & \frac{39}{11} & \\ & & -1 & \frac{139}{39} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \frac{2}{3} & & \\ & 1 & \frac{6}{11} & \\ & & 1 & \frac{22}{39} \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

解方程 $\begin{pmatrix} 3 & & & \\ -1 & \frac{11}{3} & & \\ & -1 & \frac{39}{11} & \\ & & -1 & \frac{139}{39} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 11 \\ 15 \\ 9 \end{pmatrix}$，得 $\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{3} \\ \frac{40}{11} \\ \frac{205}{39} \\ 4 \end{pmatrix}$

再解方程 $\begin{pmatrix} 1 & \frac{2}{3} & & \\ & 1 & \frac{6}{11} & \\ & & 1 & \frac{22}{39} \\ & & & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{3} \\ \frac{40}{11} \\ \frac{205}{39} \\ 4 \end{pmatrix}$，得 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$

例　用追赶法求解三对角方程组

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

解：首先进行系数矩阵的三角分解

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \gamma_i = a_i, \quad i = 2,3,\cdots,n \\ \alpha_1 = b_1 \qquad \alpha_i = b_i - \gamma_i \beta_{i-1}, \quad i = 2,3,\cdots,n \\ \beta_i = \dfrac{c_i}{\alpha_i}, \quad i = 1,2,\cdots,n-1 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \frac{5}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

求解方程组$Ly=y$，即

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \frac{5}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

得 到 $y_1=1/2$，$y_2=1/3$，$y_3=1/4$，$y_4=1$

再求解方程组 $Ux=y$，即

$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \\ 1 \end{bmatrix}$$

得 到 $x_1=1$，$x_2=1$，$x_3=1$，$x_4=1$

当三对角矩阵A满足对角占优条件时，追赶法是数值稳的。

追赶法具有计算程序简单，存贮少，计算量小的优点。

解三对角方程组$Ax=b$的追赶法，用四个一维数组存放方程组数据 $\{a_i, b_i, c_i, d_i\}$，d_i——常数项。

- 输入 方程组数据 $\{a_i, b_i, c_i, d_i, n\}$
- 输出 计算解$x=(x_1, x_2, \dots, x_n)^T$

根据以下算法编写程序

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

Summary

Cramer rule	Gauss elimination	LU factorization	Gauss-Jordan elimination	Square root /improved square root	追赶法
(n+1)!	**$n^3/3$**	**$n^3/3$**	**$n^3/2$**	**$n^3/6$**	**5n-4**
	Row/column/complete Pivoting Only eliminating elements in a column below the diagonal one	No pivoting Directly factorization	column pivoting Eliminating elements in a row except for the diagonal element	A symmetric and positive definite No pivoting	A三对角，弱对角占优

四、应用举例

1. 可以用以求矩阵 A 的行列式

如果对矩阵 A 作了三角分解 $A=LU$：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

则可以求得行列式的值为

$$\det A = \det L \cdot \det U \quad = u_{11} u_{22} \cdots u_{nn}$$

2. 可以用以求可逆矩阵 A 的逆矩阵 A^{-1}

令 $A^{-1}=(X_1\ X_2\ \ldots X_n)$, $E=(e_1\ e_2\ \ldots e_n)$

则由 $AA^{-1}=E$ 得到

$$A(X_1\ X_2\ \ldots X_n)=(e_1\ e_2\ \ldots e_n)$$

推得 $AX_k=e_k$, $k=1, 2, \ldots, n$

如果 $A=LU$, 则有

$$\begin{cases} UY_k=e_k \\ LX_k=Y_k \end{cases} \quad k=1, 2, \ldots, n$$

解出 X_k, $k=1, 2, \ldots, n$, 便可求得逆矩阵

例　用列主元素法求 **det(*A*)** 的值，其中

$$A=\begin{bmatrix} 11 & -3 & -2 \\ -23 & 11 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \end{bmatrix}$$

解：由矩阵***A***的***LU***分解过程，可知

$$|A|=a_{11}^{(1)}a_{22}^{(2)}\cdots a_{n-1,n-1}^{(n-1)}a_{n,n}^{(n)}$$

因此，若用列主元素法求行列式的值，只须将每一步的主元素相乘即可，当然要注意行列式的值的符号改变. 其计算过程如下所示:

$$|\boldsymbol{A}| = \begin{vmatrix} 11 & -3 & -2 \\ -23 & 11 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \end{vmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 11.0000 & -3.0000 & -2.0000 \\ -23.0000 & 11.0000 & 1.0000 \\ 1.0000 & -2.0000 & 2.0000 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{bmatrix} -23.0000 & 11.0000 & 1.0000 \\ 11.0000 & -3.0000 & -2.0000 \\ 1.0000 & -2.0000 & 2.0000 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{bmatrix} -23.0000 & 11.0000 & 1.0000 \\ 0.0000 & 2.2609 & -1.5217 \\ 0.0000 & -1.5217 & 2.0435 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{bmatrix} -23.0000 & 11.0000 & 1.0000 \\ 0.0000 & 2.2609 & -1.5217 \\ 0.0000 & 0.0000 & 1.0192 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow |\boldsymbol{A}| = 53.0000$$

➢ 利用高斯-约当（Gauss-Jordan）法计算A^{-1}

例如： 对矩阵 $A=\begin{bmatrix} -1 & 8 & -2 \\ -6 & 49 & -10 \\ -4 & 34 & -5 \end{bmatrix}$，求$A^{-1}$.

解:

$$[A \mid I]=\begin{bmatrix} -1 & 8 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ -6 & 49 & -10 & 0 & 1 & 0 \\ -4 & 34 & -5 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 95 & -28 & 18 \\ 0 & 1 & 0 & 10 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & -8 & 2 & -1 \end{bmatrix}$$

故 $$A^{-1}=\begin{bmatrix} 95 & -28 & 18 \\ 10 & -3 & 2 \\ -8 & 2 & -1 \end{bmatrix}$$

五、向量和矩阵的范数

向量范数　　三维欧氏空间中向量长度概念的推广

➢**向量的数量积、欧氏范数及其性质**

定义　　设 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T, y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^T\in \mathrm{R}^n$(或 C^n).

将实数 $(x,y)=y^Tx=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i$　或复数 $(x,y)=y^Hx=\sum_{i=1}^{n}x_i\bar{y}_i$)

称为向量 x,y 的数量积.

将非负实数 $\|x\|_2=(x,x)^{\frac{1}{2}}=\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$

或 $\|x\|_2=(x,x)^{\frac{1}{2}}=\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}$

称为向量 x 的欧氏范数.

定理 设 $x, y \in \mathbf{R}^n$（或$\mathbf{C}^n$），

1. $(x, x) = 0$，当且仅当$x = 0$ 时成立；
2. $(\alpha x, y) = \alpha(x, y)$，$\alpha$为实数

   (或$(x, \alpha y) = \bar{\alpha}(x, y)$，$\alpha$为复数)
3. $(x, y) = (y, x)$ (或$(x, y) = \overline{(y, x)}$)；
4. $(x_1 + x_2, y) = (x_1, y) + (x_2, y)$；
5. (Cauchy-Schwarz不等式) $|(x, y)| \le \|x\|_2 \cdot \|y\|_2$，

   等号当且仅当 x 与 y 线性相关时成立；
6. 三角不等式 $\|x + y\|_2 \le \|x\|_2 + \|y\|_2$.

***R^n*空间的向量范数 || · || 对任意 $x \in R^n$，**

满足下列条件：

(1) $\|x\| \geq 0$; $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$ （正定性）

(2) $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$ 对任意 $\alpha \in C$ （齐次性）

(3) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ （三角不等式）

在向量空间$R^n(C^n)$中，设$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$

常用的向量x的范数有

$$\|\boldsymbol{x}\|_2=(\ |\boldsymbol{x}_1|^2+|\boldsymbol{x}_2|^2+\cdots+|\boldsymbol{x}_n|^2\ )^{1/2} \qquad \text{--------(1)}$$

x的2－范数或欧氏范数

$$\|x\|_1=|x_1|+|x_2|+\cdots+|x_n| \qquad \text{--------(2)}$$

x的1－范数

$$\|x\|_\infty=\max_{1\le i\le n}|x_i| \qquad \text{--------(3)}$$

x的∞－范数或最大范数

$$\|x\|_p=(\ |x_1|^p+|x_2|^p+\cdots+|x_n|^p\ )^{1/p} \qquad \text{--------(4)}$$

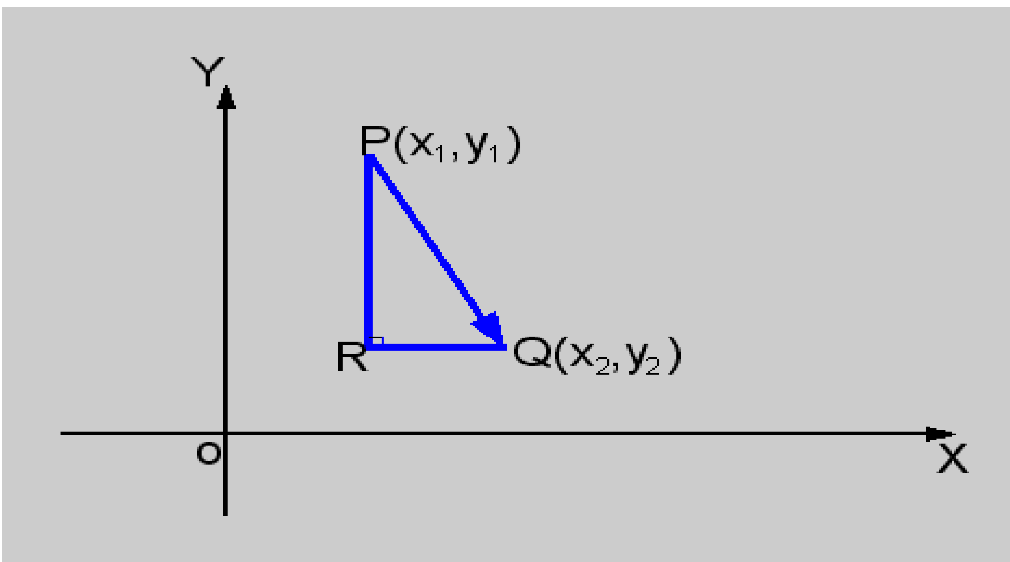
x的p－范数，$p\ge1$

下述范数的几何意义是:

$$\|x\|_\infty = \max(|x_2 - x_1|, |y_2 - y_1|)$$

$$\|x\|_1 = |x_2 - x_1| + |y_2 - y_1|$$

$$\|x\|_2 = \sqrt{(y_2 - y_1)^2 + (x_2 - x_1)^2}$$



可以看出: $\|x\|_\infty \le \|x\|_2 \le \|x\|_1$

例 求下列向量的各种常用范数

$$x = (1, 4, 3, -1)^T$$

$$\|x\|_2 = (1^2 + 4^2 + 3^2 + (-1)^2)^{1/2} = \sqrt{27} = 3\sqrt{3};$$

$$\|x\|_1 = |1| + |4| + |3| + |-1| = 9;$$

$$\|x\|_\infty = \max\{1, 4, 3, -1\} = 4.$$

例4.设$A\in R^{n\times n}$为对称正定矩阵，定义

$\|x\|_A=\sqrt{(Ax,x)}=\sqrt{(x^TAx)}$,试证明$\|x\|_A$为

R^n上的一种向量范数。

证明：（1）因为$A\in R^{n\times n}$为对称正定矩阵，故当

x=0时$\|x\|_A=0$；当$x\neq 0$时$x^TAx\succ 0$；故$\|x\|_A\succ 0$；

(2)$\|\alpha x\|_A=[\alpha x^TA(\alpha x)]^{1/2}=[\alpha^2x^TAx]^{1/2}=|\alpha|.\|x\|_A$；

(3)因为A为对称正定，故A可唯一地分解为$A=L^TL$,

L为具有正对角元的下三角阵。则

$\|x\|_A=(x^TAx)^{1/2}=(x^TL^TLx)^{1/2}=\|Lx\|_2$,则有

$\|x+y\|_A=\|L(x+y)\|_2\leq\|Lx\|_2+\|Ly\|_2=\|x\|_A+\|y\|_A$

故$\|x\|_A$为R^n上的一种向量范数。

主要性质

性质1：$\| -x \| = \| x \|$

性质2：$| \, \| x \| - \| y \| \, | \leqslant \| x-y \|$

性质3： 向量范数 $\| x \|$ 是 R^n 上向量x的连续函数.

范数等价：设 $\| \cdot \|_A$ 和 $\| \cdot \|_B$ 是R上任意两种范数，若存在常数 C_1、$C_2 > 0$ 使得 $C_1 \| \vec{x} \|_B \le \| \vec{x} \|_A \le C_2 \| \vec{x} \|_B$ 则称 $\| \cdot \|_A$ 和 $\| \cdot \|_B$ 等价。

定理　　R^n 上一切范数都等价。

显然 $\|x\|_1$和$\|x\|_2$ 是$\|x\|_p$在$p=1$和$p=2$时的特例

并且由于

$$\max_{1\le i\le n}|x_i| \le \left(|x_1|^p+|x_2|^p+\cdots+|x_n|^p\right)^{1/p} \le \left(n\max_{1\le i\le n}|x_i|^p\right)^{1/p}$$

$$= n^{1/p}\max_{1\le i\le n}|x_i| \to \max_{1\le i\le n}|x_i| \quad (p\to\infty)$$

$\|x\|_p \to \|x\|_\infty \ (p\to\infty$时), 所以$\|x\|_\infty$ 也是$\|x\|_p$的特例

且 $\|x\|_\infty \le \|x\|_2 \le \|x\|_1$

注意:一般有向量的等价关系

$$c_1\|x\|_p \le \|x\|_q \le c_2\|x\|_p \quad (p\ne q, p, q=1,2,\infty; c_1, c_2\in \boldsymbol{R}^+)$$

譬如，有定义知

$$\|x\|_{\infty}=\max_{1\le i\le n}|x_i|\le\sum_{i=1}^{n}|x_i|=\|x\|_1\le\sum_{i=1}^{n}\max_{1\le i\le n}|x_i|$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\|x\|_{\infty}=n\|x\|_{\infty},\text{故有}\|x\|_{\infty}\le\|x\|_1\le n\|x\|_{\infty}$$

矩阵范数

定义　设‖•‖是以n阶方阵为变量的实值函数,

且满足条件:

（1）非负性:　　　$\|A\|\geq 0$,且$\|A\|=0$当且仅当$A=0$

（2）齐次性:　　　$\|\alpha A\|=|\alpha|\,\|A\|,\ \alpha\in R$

（3）三角不等式: $\|A+B\|\leq\|A\|+\|B\|$

（4）相容性:　　　$\|AB\|\leq\|A\|\|B\|$

则称‖A‖为矩阵A的范数.

定义：设‖•‖是一种向量范数

$$\|A\| = \sup_{x\in R^n, x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \sup_{x\in R^n, \|x\|=1} \|Ax\|$$

称之为由向量范数派生的矩阵算子范数.

常用的矩阵范数

$$(1)\quad \|A\|_1 = \max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}| \qquad \text{---------(5)}$$

A的每列绝对值之和的最大值, 称A的列范数

$$(2)\quad \|A\|_\infty = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| \qquad \text{---------(6)}$$

A的每行绝对值之和的最大值, 称A的行范数

$$(3)\quad \|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)} \qquad \text{---------(7)}$$

称A的2－范数

其中$\lambda_{max}(A^TA)$为A^TA的特征值的绝对值的最值

$$(4)\quad \|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2} \qquad \text{---------(8)}$$

— 向量$\|\cdot\|_2$的推广 Frobenius 范数

例题：设$\|A\|_s, \|A\|_t$为$R^{n\times n}$上任意两种矩阵算子范数，证明存在乘数c_1, c_2，使对一切$A\in R^{n\times n}$满足

$$c_1\|A\|_s \le \|A\|_t \le c_2\|A\|_s.$$

证明：

$$\|A\|_s = \max_{x\ne 0}\frac{\|Ax\|_s}{\|x\|_s}, \qquad \|A\|_t = \max_{x\ne 0}\frac{\|Ax\|_t}{\|x\|_t},$$

有向量范数的等价性知：

$$a_1\|x\|_s \le \|x\|_t \le a_2\|x\|_s \qquad a_1\|Ax\|_s \le \|Ax\|_t \le a_2\|Ax\|_s$$

$$\frac{a_1\|Ax\|_s}{a_2\|x\|_s} \le \frac{\|Ax\|_t}{\|x\|_t} \le \frac{a_2\|Ax\|_s}{a_1\|x\|_s},\ 令C_1 = \frac{a_1}{a_2}, C_2 = \frac{a_2}{a_1},\ 则$$

$$C_1 \frac{\|\mathrm{Ax}\|_s}{\|x\|_s} \leq \frac{\|\mathrm{Ax}\|_t}{\|x\|_t} \leq C_2 \frac{\|\mathrm{Ax}\|_s}{\|x\|_s}$$

从而有

$$\max_{x\neq 0} C_1 \frac{\|\mathrm{Ax}\|_s}{\|x\|_s} \leq \max_{x\neq 0} \frac{\|\mathrm{Ax}\|_t}{\|x\|_t} \leq \max_{x\neq 0} C_2 \frac{\|\mathrm{Ax}\|_s}{\|x\|_s},$$

则

$$C_1 \|A\|_s \leq \|A\|_t \leq C_2 \|A\|_s$$

例如，

$$\|\mathrm{A}\|_2^2 = \lambda_{\max}(A^T A) \le \lambda_1(A^T A) + \lambda_2(A^T A) + \cdots + \lambda_n(A^T A)$$

$$= tr(A^T A) = \sum_{i=1}^{n} a_{i1}^2 + \sum_{i=1}^{n} a_{i2}^2 + \cdots + \sum_{i=1}^{n} a_{in}^2$$

$$= \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} a_{ij}^2 = \|A\|_F^2$$；又由于

$$\|\mathrm{A}\|_2^2 = \lambda_{\max}(A^T A) \ge \frac{1}{n}[\lambda_1(A^T A) + \lambda_2(A^T A) + \cdots + \lambda_n(A^T A)]$$

$$= \frac{1}{n}\|A\|_F^2$$

故 $\frac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_F \le \|\mathrm{A}\|_2 \le \|A\|_F$

例5　　求矩阵A的各种常用范数

$$A=\begin{array}{cc}\begin{pmatrix}1 & 2 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix} & \begin{array}{c}3\\ 4\\ 2\end{array}\\ \begin{array}{ccc}2 & 5 & 2\end{array} & \end{array}$$

解:

$$\|A\|_1 = \max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}| \quad = \max_{1\le j\le n}\{2,5,2\} = 5$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| \quad = \max_{1\le i\le n}\{3,4,2\} = 4$$

由于 $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$

例5 求矩阵A的各种常用范数

$$A=\begin{pmatrix}1 & 2 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

解(续): 由于 $\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}$

因此先求A^TA的特征值

$$A^TA=\begin{pmatrix}1 & -1 & 0\\ 2 & 2 & 1\\ 0 & -1 & 1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 2 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2 & 0 & 1\\ 0 & 9 & -1\\ 1 & -1 & 2\end{pmatrix}$$

特征方程为

$$\det(\lambda I-A^TA)=\begin{vmatrix}\lambda-2 & 0 & -1\\ 0 & \lambda-9 & 1\\ -1 & 1 & \lambda-2\end{vmatrix}=0$$

例5 求矩阵A的各种常用范数

$$A=\begin{pmatrix}1 & 2 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

解(续): 由于 $\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}$

因此先求A^TA的特征值

特征方程为 $\det(\lambda I-A^TA)=\begin{vmatrix}\lambda-2 & 0 & -1\\ 0 & \lambda-9 & 1\\ -1 & 1 & \lambda-2\end{vmatrix}=0$

可得A^TA的特征值为

$$\lambda_1=9.1428,\lambda_2=2.9211,\lambda_3=0.9361$$

$$\lambda_{\max}(A^TA)=9.1428 \qquad \|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}=3.0237$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_1 = 5 \qquad \|\boldsymbol{A}\|_\infty = 4 \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)} = 3.0237$$

$$\|A\|_F = \sqrt{2+9+2} = 3.6056$$

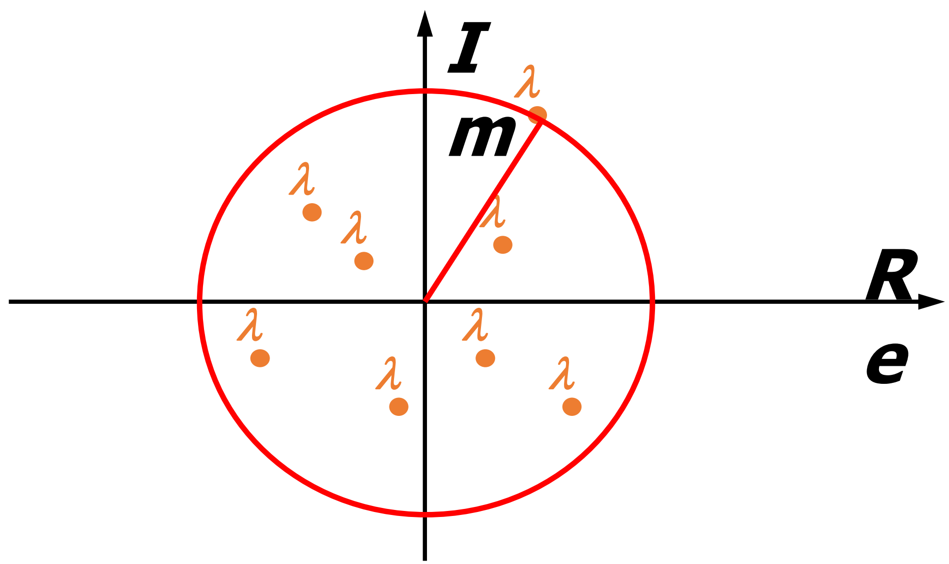
$\|A\|_1$ $\|A\|_\infty$	$\|A\|_2$	$\|A\|_F$
容易计算	计算较复杂	较少使用
使用最广泛	对矩阵元素的变化比较敏感	
	性质较好	
	使用最广泛	

定义2.4 设$A\in R^{n\times n}$的特征值为$\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$,称

$$\rho(A)=\max\{|\lambda_1|,|\lambda_2|,\cdots,|\lambda_n|\} \qquad \text{---------(9)}$$

为矩阵A的谱半径

显然 $\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}=\sqrt{\rho(A^TA)}$



定理3 **设A为n阶方阵,则对任意算子范数 $\|\cdot\|$ 有**

$$\rho(A) \le \|A\|$$

证明：

由算子范数的相容性，得到 $\|Ax\| \le \|A\| \cdot \|x\|$

将任意一个特征根 λ 所对应的特征向量 u 代入

$$|\lambda| \cdot \|u\| = \|\lambda u\| = \|Au\| \le \|A\| \cdot \|u\|$$

即 $|\lambda| \leqslant \|A\|$. 故 $\rho(A) \leqslant \|A\|$.

即矩阵A的谱半径不超过矩阵的任何一种算子范数

定理4 若$\boldsymbol{A}$对称，则有 $\|A\|_2 = \rho(A)$

证明： $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)} = \sqrt{\lambda_{\max}(A^2)}$

若λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征根，则λ^2 必是 $\boldsymbol{A}^2$ 的特征根。

$\Rightarrow \quad \lambda_{\max}(A^2) = \lambda^2(A)$ 对某个 $\boldsymbol{A}$ 的特征根λ 成立

又对称矩阵的特征根为实数，即 $\lambda^2(\boldsymbol{A})$ 为非负实数，

故得证。 ∎

六、误差分析

1 问题的提出

设方程组**A*x*=b,**

其中， $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 为非奇异阵，

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T, \qquad b = (b_1, b_2, \cdots, b_n)^T$$

由于原始数据 a_{ij}， b_i往往是观测数据，难免带有误差，因此，下面讨论原始数据的微小变化对线性方程组的解的影响。

误差分析_算例

例:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

的准确解为 $x^* = (1, 0, 0)^T$

当向量***b***有较小的扰动时, 即 $b = (\frac{1}{2}+\varepsilon, \frac{1}{3}+\varepsilon, \frac{1}{4}+\varepsilon)^T$

这时方程组的准确解为 $x^* = (1+12\varepsilon, -60\varepsilon, 60\varepsilon)^T$

如当 $\varepsilon = 0.01$ 时 $x^* = (1.1200 \quad -0.6000 \quad 0.6000)^T$

说明右端项的微小变化引起了解的很大扰动，其原因是由方程组本身的状态所决定的.

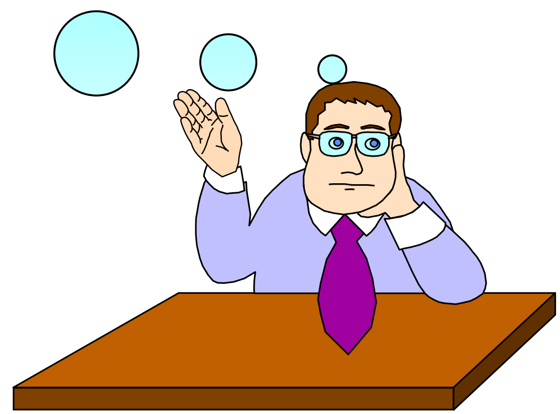
数值算例 $\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 3.00001 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 8.00002 \end{bmatrix}$ $\quad \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 2.99999 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 8.00003 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.5 \\ -3 \end{bmatrix}$$

perturbation

perturbation

It's funny that such small perturbations in the coefficients lead to so big change in the solution!



定义 称**cond (*A*)=** $\|A\|\cdot\|A^{-1}\|$ 为矩阵***A***的条件数**.**

当**cond(*A*)>>1**时，则方程组是“病态”的；

当**cond(*A*)**较小时，则方程组是“良态”的**.**

通常的条件数有：:

$$(1)\quad \boldsymbol{Cond}(\boldsymbol{A})_{\infty} = \|\mathrm{A}\|_{\infty} \,.\, \|\boldsymbol{A}^{-1}\|_{\infty}$$

$$(2)\quad \boldsymbol{Cond}(\boldsymbol{A})_{2} = \|\boldsymbol{A}\|_{2} \cdot \|\mathrm{A}^{-1}\|_{2} = \sqrt{\lambda_{\boldsymbol{max}}(\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A}) \,/\, \lambda_{\boldsymbol{min}}(\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A})}$$

特别地，若 ***A*** 对称，则 $cond\,(A)_2 = \dfrac{\max|\lambda|}{\min|\lambda|}$

证明：如果A是正交矩阵，则$cond(A)_2=1$

证明：因为A是正交的，故$A^TA=AA^T=I, A^{-1}=A^T$

从而有$\|A\|_2=\sqrt{\rho(A^TA)}=\sqrt{I}=1;\|A^{-1}\|_2=\sqrt{\rho(AA^T)}=1$

故$cond(A)_2=\|A\|_2\|A^{-1}\|_2=1.$

同时我们容易证明：

$\mathrm{cond}(\mathrm{A})\geq 1$; $cond(A)=Cond(A^{-1})$

$cond(\alpha A)=cond(A)$; $cond(AB)\leq cond(A)cond(B)$

$cond(A^TA)_2=cond(A)^2$

例：**Hilbert 阵** $H_n = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{bmatrix}$

$cond(H_2)_\infty = 27$ $\quad$ $cond(H_3)_\infty \approx 748$

$cond(H_6)_\infty = 2.9 \times 10^6$ $\quad$ $cond(H_n)_\infty \to \infty$ as $n \to \infty$

注：一般判断矩阵是否病态，并不计算A^{-1}，而由经验得出。

- ☞ 行列式很大或很小（如某些行、列近似相关）；
- ☞ 元素间相差大数量级，且无规则；
- ☞ 主元消去过程中出现小主元；
- ☞ 特征值相差大数量级。

例 $A=\begin{pmatrix} 1 & 0.99 \\ 0.99 & 0.98 \end{pmatrix}$，$\vec{b}=\begin{pmatrix} 1.99 \\ 1.97 \end{pmatrix}$ 精确解为 $\vec{x}=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

计算$cond(A)_2$。

$$A^{-1}=\begin{pmatrix} -9800 & 9900 \\ 9900 & -10000 \end{pmatrix}$$

解：考察 $\boldsymbol{A}$ 的特征根

$$\det(\lambda I - A) = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{l} \lambda_1 = 1.980050504 \\ \lambda_2 = -0.000050504 \end{array}$$

$$cond\,(A)_2 = \left| \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right| \approx \mathbf{39206 >> 1}$$

测试病态程度：

给 $\vec{b}$ 一个扰动 $\delta \vec{b} = \begin{pmatrix} -0.97 \times 10^{-4} \\ 0.106 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$，其相对误差为

$$\frac{\|\delta \vec{b}\|_2}{\|\vec{b}\|_2} \approx 0.513 \times 10^{-4} < 0.01\%$$

此时精确解为 $\vec{x}^* = \begin{pmatrix} 3 \\ -1.0203 \end{pmatrix}$

$$\delta \vec{x} = \vec{x}^* - \vec{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2.0203 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \frac{\|\delta \vec{x}\|_2}{\|\vec{x}\|_2} \approx \mathbf{2.0102 > 200\%}$$

对病态方程组可采取以下措施：

1. 采用高精度运算，减轻病态影响，例如采用双倍字长运算。

2. 用预处理方法改善A的条件数，即选择非奇异矩阵P,Q，$PAQ(Q^{-1})x=Pb$ 与 $Ax=b$ 等价，而 $B=PAQ$ 的条件数比 A 改善，令$y=Q^{-1}x$, $f=Pb$,则求出$By=f$的解y,原方程组的解为$x=Qy$. 一般选P,Q为对角阵或三角阵。

3. 平衡方法，当A中元素数量级相差很大时，可采用行或列平衡法改善A的条件数。设A非奇异，计算

$$s_i = \max_{1\le j\le n}\left|a_{ij}\right| (i=1,2,\cdots,n),$$

$$令 D = diag(\frac{1}{s_1},\frac{1}{s_2},\cdots,\frac{1}{s_n})$$

求$Ax=b$等价于求$DAx=Db$，DA的条件数得到改善。

小结

[高斯消去法]是解线性方程组直接方法的基础。将线性方程组约化为等价的三角形方程组再求解是直接法的基本解法。在约化过程中，引进选主元素的技巧是为了保证方法的数值稳定性所采取的必要措施。如全选主元消元法；列选主元素消元法等。

[直接三角分解法]是高斯消元法的变形。从代数上看，直接三角分解法和高斯消元法本质上是一致的。但从实际应用效果来看是有差异的。如用**Doolittle**分解法解具有相同系数矩阵但右端向量不同的方程组$AX=B=(b_1, b_2, \ldots, b_m)$是相当便利的，每解一个方程组 $AX=b_i$仅需增加 n^2 次乘除法运算。

本章习题

- P.197. 第2题
- P.199. 第12题、第13题、第15题、第18题、第19大题第（1）小题
- P.200. 第31题、第33题