现代数值计算方法

第三章 解线性方程组的直接法

Back
Close

第三章 解线性方程组的直接法

§3.5 解对称正定方程组的 Cholesky 分解法

对称正定方程组在工程计算中有着广泛而重要的应用. 当方程组的系数矩阵 A 为对称正定时, 存在一个实的非奇异下三角矩阵 L 使

$$A = LL^T, \tag{3.18}$$

且当限定 L 的对角线元素为正时, 这种分解是唯一的.

设

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix},$$

由 $A=LL^T$ 比较 A 和 LL^T 的对应元素, 可求得 L 的元素 l_{ij} 如下：

由 $a_{11}=l_{11}^2,\ a_{i1}=l_{i1}l_{11}$, 得

$$
\begin{aligned}
l_{11} &= \sqrt{a_{11}}, \\
l_{i1} &= a_{i1}/l_{11}, \quad i=2,\cdots,n.
\end{aligned}
$$

假设 L 的第 $k-1$ 列元素已经求得, 下面求 L 的第 k 列元素 $l_{ik},\ i=k,\cdots,n$. 注意到

$$a_{ik}=\sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}l_{kr}+l_{ik}l_{kk},$$

得

$$
\begin{aligned}
l_{kk} &= \Big(a_{kk}-\sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}^2\Big)^{1/2}, \\
l_{ik} &= \Big(a_{ik}-\sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}l_{kr}\Big)/l_{kk}, \quad i=k+1,\cdots,n.
\end{aligned}
\tag{3.19}
$$

上述分解方法称为 Cholesky 分解法. 由于计算的对角线元素需

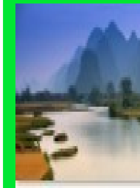
要作 n 次开平方运算, 故 Cholesky 分解法又称为平方根法. 不难验证, Cholesky 分解法的乘除计算总量约为 $n^3/6+O(n^2)$, 为一般矩阵 LU 分解计算量的一半. 虽然如此, 但其增加的 n 个开方运算是非常不利的.

为了避免开方运算, 把矩阵 A 分解成

$$A=LDL^T \tag{3.20}$$

其中 L 为单位下三角矩阵, D 是对角矩阵, 且对角元均不为零. 利用 (3.20) 两边元素对应相等的办法, 可得出计算 L 和 D 的计算公式. 假设 L 和 D 的第 1 至 $k-1$ 列元素已经求得, 以下求它们的第 k 列元素 $l_{ik},\ i=k+1,\cdots,n$ 和 d_k, 这里 $l_{kk}=1$. 比较 $A=LDL^T$ 两边的第 k 列, 得

$$a_{ik}=\sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}d_r l_{kr}+l_{ik}d_k,\quad i=k,\cdots,n.$$



由此得

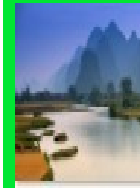
$$
\begin{aligned}
d_k &= a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}^2 d_r, \\
l_{ik} &= \Big(a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} d_r l_{kr}\Big) \Big/ d_k, \quad i = k+1, \cdots, n.
\end{aligned} \tag{3.21}
$$

按 (3.21) 计算, LDL^T 分解可避免开方运算, 但由计算公式不难发现, 乘除运算总量增加了一倍, 又恢复到 $n^3/3 + O(n^2)$.

为了减少乘法运算量, 引入辅助变量 $t_{ik} = l_{ik} d_k$, 并将计算公式 (3.21) 整理如下：

对 $k = 1, 2, \cdots, n$, 计算

$$
\begin{aligned}
t_{ik} &= a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} t_{ij} l_{kj}, \quad i = k+1, \cdots, n, \\
l_{ik} &= t_{ik}/d_k, \quad i = k+1, \cdots, n, \\
d_k &= a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} t_{kj} l_{kj}.
\end{aligned} \tag{3.22}
$$



Back
Close

容易看出, 改进后的 LDL^T 分解乘除运算量约为 $n^3/6+O(n^2)$, 不需要开方运算. 但该算法存储变量 t_{ik}, 存储量几乎增加一倍.

下面我们建立用 Cholesky 分解法求解对称正定方程组的算法步骤.

$$
Ax=b \;\Rightarrow\; LDL^Tx=b \;\Rightarrow\; \begin{cases} Ly=b, \\ Dz=y, \\ L^Tx=z. \end{cases} \tag{3.23}
$$

算法 3.4 (Cholesky 分解法)

步 1　输入对称正定矩阵 A 和右端向量b;

步 2　Cholesky 分解:

$$
d_1=t_{11}=a_{11},\quad l_{i1}=a_{i1}/d_1,\ i=2,\cdots,n,
$$

对 $k=2,\cdots,n$ 计算:

$$
d_k=a_{kk}-\sum_{j=1}^{k-1}t_{kj}l_{kj},
$$

Back
Close

$$t_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} t_{ij} l_{kj}, \quad l_{ik} = t_{ik}/d_k, \ \ i = k+1, \cdots, n.$$

步 3 用向前消去法解下三角方程组 $Ly = b$：

$$y_1 = b_1,$$

对 $k = 2, \cdots, n$ 计算 $y_k = b_k - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj} y_j;$

步 4 解对角形方程组 $Dz = y$：

对 $k = 1, \cdots, n$, 计算：$z_k = y_k/d_k$ ；

步 5 用回代法解上三角方程组 $L^T x = z$：

$$x_n = z_n,$$

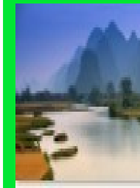
对 $k = n-1, \cdots, 1$ 计算：$x_k = z_k - \sum_{j=k+1}^{n} l_{jk} x_j.$

根据算法 3.4, 编制 MATLAB 程序如下：

- Cholesky 分解法 MATLAB 程序

Back
Close

```
%machol.m
function [x,l,d]=machol(A,b)
%用途：用Cholesky分解法解方程组Ax=b
%LDL'分解
n=length(b); d=zeros(1,n); l=eye(n,n);
d(1)=A(1,1); l(2:n,1)=A(2:n,1)/d(1);
d(2)=A(2,2)-l(2,1)*l(2,1)*d(1);
for i=3:n
   for j=2:(i-1)
      s=0;
      for k=1:(j-1) s=s+d(k)*l(i,k)*l(j,k); end
      l(i,j)=(A(i,j)-s)/d(j);
   end
```



```
    s=0;
    for j=1:(i-1)  s=s+d(j)*l(i,j)*l(i,j); end
    d(i)=A(i,i)-s;
end
%求解下三角方程组Ly=b(向前消去法)
y=zeros(n,1); y(1)=b(1);
for i=2:n
     y(i)=b(i)-l(i,1:i-1)*y([1:i-1]);
end
%求解对角方程组Dz=y
for i=1:n  z(i)=y(i)/d(i); end
%求解上三角方程组L'x=z(回代法)
ll=l'; x=zeros(n,1); x(n)=z(n);
```

```
for i=(n-1):-1:1
    x(i)=z(i)-ll(i,i+1:n)*x(i+1:n);
end
x=x';
```

例 3.10 利用程序 machol.m 计算下列线性方程组的解

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 4 & -3 & 1 \\ -1 & 1 & 2 & 1 & 3 \\ 4 & 2 & 3 & 3 & -1 \\ -3 & 1 & 3 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & -1 & 4 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 14 \\ 4 \\ 16 \\ 18 \end{pmatrix}$$

解 在 MATLAB 命令窗口执行

```
>> A=[2 -1 4 -3 1; -1 1 2 1 3; 4 2 3 3 -1;
     -3 1 3  2 4;  1 3 -1 4 4];
```

Back
Close

```
>> b=[11 14 4 16 18]';
>> [x,l,d]=machol(A,b)
```

得计算结果：

```
x =

    1.0000    2.0000    1.0000   -1.0000    4.0000

l =

    1.0000         0         0         0         0
   -0.5000    1.0000         0         0         0
    2.0000    8.0000    1.0000         0         0
   -1.5000   -1.0000   -0.3514    1.0000         0
    0.5000    7.0000    0.8378   -1.2069    1.0000

d =

    2.0000    0.5000  -37.0000    1.5676    2.6897
```

Back
Close

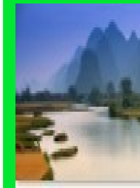
例 3.11 已知方程组

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

试问参数 a, b 满足什么条件时, 可选用 Cholesky 分解法求解该方程组?

解 方程组系数矩阵 A 对称正定时, 可用 Cholesky 分解法求解. 由 $A^T = A$ 可得 $a = -1$. 对称矩阵正定的充分必要条件是其各阶顺序主子式均大于零. 注意到 $D_1 = 2 > 0$, $D_2 = 4 - 1 = 3 > 0$. 而由

$$D_3 = \begin{vmatrix} 2 & -1 & b \\ -1 & 2 & -1 \\ b & -1 & 2 \end{vmatrix} = 4 + 2b - 2b^2 > 0,$$



可得 $-1<b<2$. 故当 $a=-1$, $-1<b<2$ 时, 上述方程组可用 Cholesky 分解法来求解.

§3.6 舍入误差对解的影响

用直接法解线性方程组 $Ax=b\,(\det(A)\neq 0)$, 理应得出准确解 x. 但因为存在舍入误差, 只能得出近似解 $\bar{x}$, 或者说得到近似方程组 $\bar{A}\bar{x}=\bar{b}$ 的准确解. 近似矩阵 $\bar{A}$ 和近似向量 $\bar{b}$ 的误差

$$\delta A=A-\bar{A},\quad \delta b=b-\bar{b}$$

同计算机运算和精度有关. 计算精度越高, $\|\delta A\|$ 和 $\|\delta b\|$ 必然越小. 下面估计$\|\delta A\|$ 和 $\|\delta b\|$ 很小时解的误差 $\delta x=x-\bar{x}$. 注意到 x 和 $\bar{x}$ 分别满足方程组

$$Ax=b,\quad (A-\delta A)(x-\delta x)=b-\delta b.$$

两式相减得

$$(A-\delta A)\delta x=\delta b-\delta Ax.$$

当 $\|\delta A\|$ 很小时, $\|A^{-1}\delta A\|$ 也很小, $A-\delta A=A(I-A^{-1}\delta A)$ 可逆, 于是

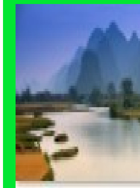
$$\delta x=(A-\delta A)^{-1}(\delta b-\delta Ax)=(I-A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}(\delta b-\delta Ax).$$

故

$$\begin{aligned}\|\delta x\| &= \|(I-A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}(\delta b-\delta Ax)\| \\ &\le \|(I-A^{-1}\delta A)^{-1}\|\cdot\|A^{-1}\|\big(\|\delta b\|+\|\delta Ax\|\big) \\ &\le \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\delta A\|}\big(\|\delta b\|+\|\delta A\|\cdot\|x\|\big)\end{aligned}$$

上面的最后一个不等式用到了定理 2.3. 注意到,

$$\|A^{-1}\delta A\|\le\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\|,\quad \|b\|=\|Ax\|\le\|A\|\cdot\|x\|,$$



从而有

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\|}\Big(\frac{\|A\|\cdot\|\delta b\|}{\|A\|\cdot\|x\|}+\frac{\|A\|\cdot\|\delta A\|}{\|A\|}\Big)$$

$$\le \frac{\|A^{-1}\|\cdot\|A\|}{1-\|A^{-1}\|\cdot\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\Big(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}+\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}\Big)$$

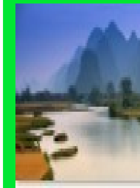
令 $\kappa=\mathrm{Cond}(A)=\|A^{-1}\|\cdot\|A\|$, 则得近似解 $\bar{x}$ 的相对误差估计式

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\frac{\kappa}{1-\kappa\cdot\varepsilon_r(\bar{A})}[\varepsilon_r(\bar{b})+\varepsilon_r(\bar{A})], \tag{3.24}$$

其中

$$\varepsilon_r(\bar{A})=\frac{\|\delta A\|}{\|A\|},\quad \varepsilon_r(\bar{b})=\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}.$$

上式表明, 当 $\varepsilon_r(\bar{A})=\|\delta A\|/\|A\|$ 很小时, 解的相对误差约等于 $\bar{A}$ 与 $\bar{b}$ 的相对误差和的 κ 倍; 而 κ 当很大时, 即使 $\bar{A}$ 与 $\bar{b}$ 的相对误差很小, 解的相对误差也可能很大. 由此可知, 舍入误差对解的影响的大小



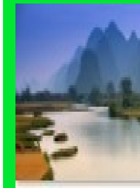
取决于数 κ 的大小, 我们把这个数称为方程组的条件数. 条件数 κ 很大的方程组称为病态方程组, κ 较小的方程组称为良态方程组.

对于病态方程组, 为了得到较准确的近似解, 可以采用以下措施来减少舍入误差的影响：(1) 采用高精度计算；(2) 采用数值稳定性较好的算法, 如全主元 Gauss 消去法等；(3) 采用迭代改善计算解的办法.

所谓迭代改善计算解 $\bar{x}$, 目的是设法求取修正量 Δx, 使 $\bar{x}+\Delta x$ 满足原方程组 $Ax=b$, 即

$$A(\bar{x}+\Delta x)=b, \quad A\Delta x=r=b-A\bar{x}.$$

实际计算时, 方程组 $A\Delta x=r$ 不大可能准确求解, 从而必须反复求解 $A\Delta x=r$ 和修正 $\bar{x}$, 使 $\bar{x}$ 逐渐接近真解. 这一过程称为迭代改善. 为节省计算量, 最好事先将系数矩阵 A 进行 LU 分解：$A=LU$, 反复求解 $A\Delta x=r$ 改为反复求解 $Ly=r$ 和 $U\Delta x=y$. 为保证计算精度, 计



Back
Close

算残矢量 r 最好采用高精度计算. 迭代改善过程可表述如下：

(1) LU 分解：$A = LU$；

(2) 高精度计算：$r = b - A\bar{x}$；

(3) 求解：$Ly = r$ 和 $U\Delta x = y$, 置 $\bar{x} := \bar{x} + \Delta x$；

(4) 当 $\|\Delta x\|$ 很小时, 停算, 否则, 转 (2).

例 3.12 已知方程组

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

的解为 $x = (1,\ -1,\ 2)^T$. 如果右端有微小扰动 $\|\delta b\|_\infty = 0.5 \times 10^{-6}$, 估计由此引起的解的相对误差.

Back
Close

解 记方程组的系数矩阵为 A. 由于

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 1.5 \\ -2 & 1 & -1 \end{pmatrix},$$

从而 $\mathrm{cond}(A)_\infty = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty = 5 \times 4.5 = 22.5$. 故由公式

$$\frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty} \leq \mathrm{cond}(A)_\infty \frac{\|\delta b\|_\infty}{\|b\|_\infty}$$

可得

$$\frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty} \leq 22.5 \times \frac{0.5 \times 10^{-6}}{2} = 5.625 \times 10^{-6}.$$

由上述结果可以看出, 解的相对误差是右端扰动量的 11 倍多.

作业：P58: 3.6; 3.13; 3.14.