第五章 解线性方程组的直接法

5.1 直接法与三角形方程组求解

5.1.1 线性方程组的分类

不同类型的方程组由不同的解法:

按系数矩阵**零元素**多少分：稠密（元素满)、稀疏(占生活中的绝大多数 80%，如推荐系统)

按系数矩阵**阶数**分：高阶 4000 阶以上、**低阶**

按系数矩阵**形状**分：**对称正定(对称$\boldsymbol{A^T=A}$,正定$\boldsymbol{X^TAX=E}$)、对角线**

对角占优（对角阵元素的绝对值比其他元素大，一定有解且唯一)、**三角形**方程组

5.1.2 三角形线性方程组的解法

下三角形 **形式**：

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

简写为 $\boldsymbol{Lx=b}$

解：

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{b_1}{l_{11}} \\ x_i = \dfrac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}x_j}{l_{ii}} \quad (i = 2,3,\dots,n) \end{cases}$$

先解出x_1，不断迭代解出x_i（**对角阵元素不能为零**）

上三角形 **形式**：

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n & = b_1 \\ u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n & = b_2 \\ \dots\dots & \dots \\ u_{nn}x_n & = b_n \end{cases}$$

简写为 $\boldsymbol{Ux=b}$

解：

$$\begin{cases} x_n = b_n/u_{nn} \\ x_i = \dfrac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j}{u_{ii}} \quad (i = n-1, n-2, \dots, 2,1) \end{cases}$$

5.1.3 直接法概述

高斯消去法 设方程组$Ax=b$，其中$A=\left(a_{ij}\right)_{n\times n}$，$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)^T$ $b=(b_1,b_2,\dots,b_n)^T$

增广矩阵：$(A|b)\xrightarrow{\text{行变换}}\left(A^{(n)}\middle|b^{(n)}\right)$ 其中$A^{(n)}$为**上三角阵**，则$A^{(n)}x=b^{(n)}$与原方程组同解

称此方法为**高斯消去法**

三角分解法 若有$A=LU$（任意矩阵皆可如此变换)，其中L,U为三角阵，则有

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

通常L为下三角(将原阵对角线下元素消为零的**倍数**)，U为上三角。此法为三角分解法

5.2 高斯消去法

5.2.1 消元与回代计算

消元 例如：$(A|b)=\left(\begin{array}{ccc|c}1&1&1&6\\1&3&-2&1\\2&-2&1&1\end{array}\right)\xrightarrow[r_3-2r_1]{r_2-r_1}\left(\begin{array}{ccc|c}1&1&1&6\\0&2&-3&-5\\0&-4&-1&-11\end{array}\right)\xrightarrow{r_3+2r_2}\left(\begin{array}{ccc|c}1&1&1&6\\0&2&-3&-5\\0&0&-7&-21\end{array}\right)$ **对角行变换**

将其变为**上三角阵**。一般情况，设$\det A\neq 0$

① **第一次消元**： $(A^{(1)}|b^{(1)})=\begin{pmatrix}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}&\dots&a_{1n}^{(1)}&b_1^{(1)}\\a_{21}^{(1)}&a_{22}^{(1)}&\dots&a_{2n}^{(1)}&b_2^{(1)}\\\dots&\dots&\dots&\dots&\dots\\a_{n1}^{(1)}&a_{n2}^{(1)}&\dots&a_{nn}^{(1)}&b_n^{(1)}\end{pmatrix}\rightarrow\begin{pmatrix}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}&\dots&a_{1n}^{(1)}&b_1^{(1)}\\0&a_{22}^{(2)}&\dots&a_{2n}^{(2)}&b_2^{(2)}\\\dots&\dots&\dots&\dots&\dots\\0&a_{n2}^{(2)}&\dots&a_{nn}^{(2)}&b_n^{(2)}\end{pmatrix}=(A^{(2)}|b^{(2)})$

其中：$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-\underset{\text{比值}}{\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}}\ \underset{\text{第一行}}{a_{1j}^{(1)}}\quad j=1,2,\dots,n\qquad b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}b_1^{(1)}\quad i=2,3,\dots,n$

注：若$a_{11}^{(1)}$，则在第一列中至少有一个元素不等于 0，可交换该行后再消元

② **第k次消元**：$(A^{(k)}|b^{(k)})=\begin{pmatrix}a_{11}^{(1)}&\dots&a_{1k}^{(1)}&\dots&a_{1n}^{(1)}&b_1^{(1)}\\&\ddots&\dots&\dots&\dots&\dots\\&&a_{kk}^{(k)}&\dots&a_{kn}^{(k)}&b_k^{(k)}\\&&\dots&\dots&\dots&\dots\\&&a_{nk}^{(k)}&\dots&a_{nn}^{(k)}&b_n^{(k)}\end{pmatrix}$

$$\rightarrow\begin{pmatrix}a_{11}^{(1)}&\dots&a_{1k}^{(1)}&a_{1(k+1)}^{(1)}&\dots&a_{1n}^{(1)}&b_1^{(1)}\\&\ddots&\vdots&\vdots&\dots&\vdots&\vdots\\&&a_{kk}^{(k)}&a_{k(k+1)}^{(k)}&\dots&a_{kn}^{(k)}&b_k^{(k)}\\&&0&a_{(k+1)(k+1)}^{(k+1)}&\dots&a_{(k+1)n}^{(k+1)}&b_{k+1}^{(k+1)}\\&&\vdots&\vdots&\dots&\vdots&\vdots\\&&0&a_{n(k+1)}^{(k+1)}&\dots&a_{nn}^{(k+1)}&b_n^{(k+1)}\end{pmatrix}=(A^{(k+1)}|b^{(k+1)})$$

其中：$a_{ij}^{(k+1)}=\underset{\text{自己行}}{a_{ij}^{(k)}}-\underset{\text{倍数}}{\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}}\ \underset{\text{对应行}}{a_{kj}^{(k)}}\quad j=k+1,k+2,\dots,n$

$b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}b_k^{(k)}\qquad i=k+1,k+2,\dots,n$

为了**减少计算量**，令单独变量倍数$m_{ik}=\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$ 则$a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-m_{ik}\,a_{kj}^{(k)}\quad j=k+1,k+2,\dots,n$

$b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-m_{ik}\,b_k^{(k)}\qquad i=k+1,k+2,\dots,n$

③ **主元素**： 当$k=n-1$时，得到**上三角阵** $(A^{(n)}|b^{(n)})=\begin{pmatrix}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}&\dots&a_{1n}^{(1)}&b_1^{(1)}\\&a_{22}^{(2)}&\dots&a_{2n}^{(2)}&b_2^{(2)}\\&&\ddots&\dots&\dots\\&&&a_{nn}^{(n)}&b_n^{(n)}\end{pmatrix}$

当$|A|\neq 0$时，$a_{ii}^{(i)}\neq 0$ 称为主元素

回代 对于主元素$(A^{(n)}|b^{(n)})=\begin{pmatrix}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}&\dots&a_{1n}^{(1)}&b_1^{(1)}\\&a_{22}^{(2)}&\dots&a_{2n}^{(2)}&b_2^{(2)}\\&&\ddots&\dots&\dots\\&&&a_{nn}^{(n)}&b_n^{(n)}\end{pmatrix}$ $\begin{cases}x_n=\frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}\\x_i=\frac{b_i^{(i)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}^{(i)}x_j}{a_{ii}^{(i)}}\end{cases}\ (i=n-1,n-2,\dots,2,1)$

注意： 若 A 非奇异，则上述过程可行，但**无法事先判断**。故可能

① 某一步找不到非零元

② 到最后一步得$a_{nn}^{(n)}=0$，无法回代，需在计算中中断

5.2.2 gauss 消去法的运算量

$$m_{ik}=\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

消元过程　在**第k步**中：$a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}a_{kj}^{(k)}\quad j=k+1,k+2,\dots,n$

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

除法：$n-k$　　**乘法**：$(n-k)(n-k+1)$　　**共**：$(n-k)(n-k+2)$次

共$n-1$步，所以有$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+2)=\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5}{6}n$

回代过程

$$\begin{cases}x_n=\frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}\\ x_i=\frac{b_i^{(i)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}^{(i)}x_j}{a_{ii}^{(i)}}\quad(i=n-1,n-2,\dots,2,1)\end{cases}$$

求x_i中，**乘法**$n-i$次，**除**1次，**共**$n-i+1$次，所以**共有** $\sum_{k=1}^{n-1}(n-i+1)+1=\frac{n^2}{2}-\frac{n}{2}$

总和次数　$MD=\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}=\frac{n^3}{3}+O(n^2)$

可以看到，当$n=20$时，总次数约为 2670 次，比使用克莱姆法则9.7×10^{20}次极端减少。

5.3 高斯列主元素消去法

5.3.1 主元素的作用

作用　在消元过程中以主元素$a_{kk}^{(k)}$依次作除法计算：$m_{ik}=\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$

注意　① 若消元过程中对角线元素出现$a_{kk}^{(k)}=0$，则消元无法继续

② 若$a_{kk}^{(k)}\neq0$，但其值较小，则会产生较大误差

③ 为**避免小主元作除数**，在$A^{(k)}$的第k列主对角线以下元素$a_{ik}^{(k)}(k\le i\le n)$中**挑选绝对值最大者**，并通过行变换，使之位于主对角线上作为主元素，仍记为$a_{kk}^{(k)}$，然后在进行消元计算。即$a_{kk}^{(k)}=\max\limits_{k\le i\le n}\left|a_{ik}^{(k)}\right|$

第k列主对角元以下元素绝对值最大者作主元（该行与第k行**整体对调**），称每一步都按列选主元的消去法为 **gauss 列主元素消去法**

例题　1. 用舍入三位有效数字求解线性方程组 $\begin{cases}0.0300x_1+58.9x_2=59.2\\ 5.31x_1-6.10x_2=47.0\end{cases}$

① **不选主元**的 Gauss 消去法计算结果：$x_1=-10.0,x_2=1.01$，此解无效

② **按列选主元**的 Gauss 消去法计算结果：$x_1=10.0,x_2=1.00$，此解有效

5.3.2 算法设计

本节略去

详细内容参阅教学课件

5.3.3 消元过程与系数矩阵的分解

不带行变换的消元过程

第k步：$\left(A^{(k)}\middle|b^{(k)}\right)\xrightarrow[i=k+1,k+2,\dots,n]{r_i-m_{ik}r_k}\left(A^{(k+1)}\middle|b^{(k+1)}\right)$ 相当于用**一系列的系数矩阵左乘**：$L_k\left(A^{(k)}\middle|b^{(k)}\right)=\left(A^{(k+1)}\middle|b^{(k+1)}\right)$

其中：$L_k=\begin{pmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&1&&&\\&&-m_{k+1,k}&1&&\\&&\vdots&&\ddots&\\&&-m_{n,k}&0&\cdots&1\end{pmatrix}$，$k=1,2,\dots,n$

可得到$L_{n-1}L_{n-2}\dots L_2L_1A^{(1)}=A^{(n)}\Rightarrow A=A^{(1)}=(L_{n-1}L_{n-2}\dots L_2L_1)^{-1}A^{(n)}=LU$

其中$L=L_1^{-1}L_2^{-1}\dots L_{n-1}^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&&\\m_{21}&1&&&\\m_{31}&m_{32}&1&&\\\dots&\dots&\dots&\ddots&\\m_{n1}&m_{n2}&m_{n3}&\dots&1\end{pmatrix}$称为**单位下三角阵**

$U=A^{(n)}=\begin{pmatrix}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}&\dots&a_{1n}^{(1)}\\&a_{22}^{(2)}&\dots&a_{2n}^{(2)}\\&&\ddots&\dots\\&&&a_{nn}^{(n)}\end{pmatrix}$称为**上三角阵**。 显然有$|A|=|U|$，称$\boldsymbol{A=LU}$**为矩阵**$\boldsymbol{A}$**的**$\boldsymbol{LU}$**分解**

注意：由归纳法可得：$a_{ii}^{(i)}\neq 0\Leftrightarrow A$的顺序主子式$D_1,D_2,\dots,D_k\neq 0$

定理 3.1 基本定理 若A的顺序主子式$D_1,D_2,\dots,D_{n-1}\neq 0$，则$A$的$LU$分解存在且唯一。

带行交换的消元过程

换行： 记 $I_{ik}=\begin{array}{cc}\begin{pmatrix}1&&&&&&&\\&\ddots&&&&&&\\&&1&&&&&\\&&&0&\cdots&1&&\\&&&\vdots&\ddots&\vdots&&\\&&&1&\cdots&0&&\\&&&&&&1&\\&&&&&&&\ddots\\&&&&&&&&1\end{pmatrix}&\begin{array}{l}\text{第}k\text{行}\\ \\ \text{第}i\text{行}\end{array}\end{array}$ $(i>k)$则交换$\left(A^{(k)}\middle|b^{(k)}\right)$中的$k$行和$i$行再消元可以表示为

$L_kI_{ik}\left(A^{(k)}\middle|b^{(k)}\right)=\left(A^{(k+1)}\middle|b^{(k+1)}\right)$

设当$n=4$时，有$L_3I_{i_33}L_2I_{i_22}L_1I_{i_11}A=A^{(4)}=U\Rightarrow L_3\left(I_{i_33}L_2I_{i_33}\right)\left(I_{i_33}I_{i_22}L_1I_{i_22}I_{i_33}\right)\left(I_{i_33}I_{i_22}I_{i_11}\right)A=U$

令 $\tilde{L}_2=I_{i_33}L_2I_{i_33}$，$\tilde{L}_1=I_{i_33}I_{i_22}L_1I_{i_22}I_{i_33}$，$P=I_{i_33}I_{i_22}I_{i_11}$ 称为**排列阵**，可以**表示所有的行变换**。

易知当$i,k>k$时，$\tilde{L}_k=I_{ij}L_kI_{ij}$与$L_k$形状相同，只是交换了第$k$列对角线以下的$i$、$j$行元素，故 $\tilde{L}=L_3\widetilde{L_2}\widetilde{L_1}$仍为单位下三角阵。

一般地有$L_{n-1}\tilde{L}_{n-2}\dots\widetilde{L_2}\widetilde{L_1}PA=U$，从而$PA=LU$，其中$L=\left(L_{n-1}\tilde{L}_{n-2}\dots\widetilde{L_2}\widetilde{L_1}\right)^{-1}$为单位下三角阵

定理 3.2 若$|A|\neq 0$，则存在排列阵P，以及单位下三角阵L和非奇异上三角阵U，使得$PA=LU$

5.4 直接三角分解法

基本思想 如果有三角阵LU，使得$A = LU$，则方程组 $Ax = b \Leftrightarrow LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$

对于不同的A的情况，有不同求解方法：

① 如果$\boldsymbol{A}$**稠密**，使用**杜利特尔分解**(L单位下三角)、**克劳特分解**(U单位上三角)

② $\boldsymbol{A}$**三对角线**，使用**追赶法** ③ $\boldsymbol{A}$**对称正定**，使用**平方根法**

5.4.1 三角分解

问题 设A的**各阶顺序主子式不为 0**，则$A = LU$，问如何求解出LU

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

简化版本 $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$

简化推导 作初等行变换将**第一列消为零**：$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$

将**第二行变为零**：$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}$ $u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}$

更新 $l_{32} = \dfrac{a_{32} - l_{31}u_{12\,\text{更新一次的}}}{u_{22\,\text{现在的元素}}}$ 最后更新$u_{33} = (a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23})$

① 先确定第一行不变。所以$u_{1j} = a_{1j}$

② 更新第一列（将第一列消为零）：$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}$ 由于没有做任何变换

③ 确定第二行（已知倍数，易求）：$u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}$ ④ 更新第二列：$l_{i2} = \frac{a_{i2} - l_{i1}u_{12}}{u_{22}}$

⑤ 更新第三行：$u_{3j} = a_{3j} - l_{31}u_{1j} - l_{32}u_{2j}$ ⑥ 更新第三列：$u_{i3} = \frac{a_{i3} - l_{i1}u_{13} - l_{i2}u_{23}}{u_{33}}$

⑦ 更新第四行：$u_{4j} = a_{4j} - l_{41}u_{1j} - l_{42}u_{2j} - l_{43}u_{3j}$ 更新三次

$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}$ $l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}}{u_{jj}}$

一般推导 ① 主对角线(含)上边：$a_{ri} = \sum_{k=1}^{n} l_{rk}u_{ki} \xrightarrow{k>r \Rightarrow l_{kr}=0} \sum_{k=1}^{r} l_{rk}u_{ki}$ $\begin{pmatrix} i = r, r+1, \ldots, n \\ r = 1,2,\ldots,n \end{pmatrix}$

② 主对角线下边：$a_{ri} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kr} \xrightarrow{k>r \Rightarrow u_{kr}=0} \sum_{k=1}^{r} l_{ik}u_{kr}$ $\begin{pmatrix} i = r+1, r+2, \ldots, n \\ r = 1,2,\ldots,n-1 \end{pmatrix}$

求u_{ij},l_{ij} 设$r = 1, a_{1i} = l_{11}u_{1i} \Rightarrow u_{1i} = a_{1i}$ $(i = 1,2,\ldots,n)$

$a_{i1} = l_{i1}u_{11} \Rightarrow l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}$ $(i = 2,3,\ldots,n)$

一般地，有 $\left.\begin{array}{l} u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} \quad (j = r, r+1, \ldots, n) \\ l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}}{u_{jj}} \quad (i = j+1, j+2, \ldots, n) \end{array}\right\} j = 2,3,\ldots,n-1$

k 是中间参数，表示更新第几行。从第一行开始，直到$i-1$为止。更新次数只和行有关：对第i行求，就更新$i-1$次。 所有的倍数(l_{ik})都是第i行的。

最后，$r = n$，$u_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}u_{kn}$

注意 ① 计算第i行的u只用到了该行的l和u，计算第i列时只用到该列前的l和u

② $u_{ij} = a_{ij}$ −第i行左方元素与第i列上方元素之积

$$l_{ir} = (a_{ir} - 第i行左方元素与第r列上方元素之积)/u_{rr}$$

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

③ 图示

④ 先计算l，后计算u，可以推证克劳特分解

5.4.2 求解方程组

下三角方程组 $\quad Ly = b \quad$ $\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_r = b_r - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} y_k & r = 2,3,\dots,n \end{cases}$

上三角方程组 $\quad Ux = y \quad$ $\begin{cases} x_n = \dfrac{y_n}{u_{nn}} \\ x_r = (y_r - \sum_{i=r+1}^{n} u_{ri} x_i)/u_{rr} & r = n-1, n-2, \dots, 2, 1 \end{cases}$

例题

1. 用杜利特尔法解方程组$\begin{pmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3 & -4 & -12 & 13 \\ 1 & 2 & 3 & -4 \\ 4 & 14 & 9 & -13 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 5 \\ -2 \\ 7 \end{pmatrix}$

$$A \to \begin{pmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3/2 & & & \\ 1/2 & & & \\ 4/2 & & & \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 \\ 1/2 & -3/11 & & \\ 4/2 & -6/11 & & \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -3/2 & 11 & -12 & 17/2 \\ 1/2 & -3/11 & -3/11 & -2/11 \\ 4/2 & -6/11 & -9 & \end{pmatrix}$$

$$\to \begin{pmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ -\frac{3}{2} & 11 & -12 & \frac{17}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{3}{11} & -\frac{3}{11} & -\frac{2}{11} \\ \frac{4}{2} & -\frac{6}{11} & -9 & -4 \end{pmatrix} y = \begin{pmatrix} 10 \\ 20 \\ -\frac{17}{11} \\ -16 \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow y_1 = b_1 \\ \leftarrow y_2 = b_2 - l_{21} y_1 \\ \leftarrow y_3 = b_3 - l_{31} y_1 - l_{32} y_2 \\ \leftarrow y_4 = b_4 - l_{41} y_1 - l_{42} y_2 - l_{43} y_3 \end{matrix}$$

$$\to \begin{pmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ & 11 & -12 & \frac{17}{2} \\ & & -\frac{3}{11} & -\frac{2}{11} \\ & & & -4 \end{pmatrix} y = \begin{pmatrix} 10 \\ 20 \\ -\frac{17}{11} \\ -16 \end{pmatrix} \qquad x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow (y_1 - u_{14} x_4 - u_{13} x_3 - u_{12} x_2)/u_{11} \\ \leftarrow (y_2 - u_{24} x_4 - u_{23} x_3)/u_{22} \\ \leftarrow (y_3 - u_{34} x_4)/u_{33} \\ \leftarrow y_4/u_{44} \end{matrix}$$

5.4.3 紧凑格式

注意到**求y_r的公式与求u_{ri}的公式相仿**，故可将杜利特尔分解与解$Ly = b$同时进行，即对**增广矩阵同时作变换**：

$$(A|b) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \xrightarrow{r=1} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} & y_1 \\ l_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \xrightarrow{r=2} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} & y_1 \\ l_{21} & u_{22} & \dots & u_{2n} & y_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

$$\to \cdots \xrightarrow{r=n} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} & y_1 \\ l_{21} & y_{22} & \dots & y_{2n} & y_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & u_{nn} & y_n \end{pmatrix}$$ 称为**紧凑格式**，随后再解$Ux = y$即可

5.4.4 部分选主元的杜丽特尔分解

方法 $\quad u_{rr}$为主元素，为避免小主元作除数，加入选主元措施——行变换，相当于$PA = LU$分解，方法如下：

设矩阵A经过第$r-1$步分解为 $A \to \begin{pmatrix} \dots & & & \dots \\ \vdots & a_{rr} & \dots & a_{rn} & a_{rn+1} \\ & \dots & & \dots \\ \vdots & a_{nr} & \dots & a_{nn} & a_{nn+1} \end{pmatrix}$

每次更换，先求一列，再根据其中最大换行，再除上u_{rr}，再计算行剩余内容。

分解 $\quad$ 第r步分解可得：

① 计算**中间量s_i**，并存入a_{ir} $\qquad a_{ir} \leftarrow s_i = a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} a_{ik} a_{kr} \quad (i = r, r+1, \dots, n)$

② 选择**绝对值最大的$s_i = a_{ir}$**，即确定行号i_0，使得$|s_{i_0}| = \max\limits_{k \le i \le n} |s_i|$

③ 如果$i_0 \neq r$，则交换i_0行与r行

④ $a_{ir} \leftarrow l_{ir} = \frac{a_{ir}}{a_{rr}}(i = r+1,\dots,n)$ 先计算l_{ir}

$a_{ir} \leftarrow u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} a_{rk} \neq a_{ki}$ $(i = k+1,\dots,n,n+1)$ 再计算u_{ri}和y_r，其中$r = 1,2,\dots,n-1$

5.4.5 解矩阵方程$AX = B$

方法　矩阵方程$AX = B$相当于**系列方程组**$A(x_1,x_2,\dots,x_n) = (b_1,b_2,\dots,b_n)$

设$PA = LU$，则因为$PAX = PB$，所以$LUX = PB \Leftrightarrow \begin{cases} LY = PB \\ UX = Y \end{cases}$ 其中$Y = (y_1,y_2,\dots,y_n)$

例题　1. 解方程$AX = B$，其中$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 2 & -2 & 3 & -3 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 4 & 3 \end{pmatrix}$　$B = \begin{pmatrix} -8 & -16 \\ -20 & -40 \\ -2 & -4 \\ 4 & 8 \end{pmatrix}$　$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \\ x_{41} & x_{42} \end{pmatrix} = (x_1,x_2)$

选择**主元杜利特尔分解**　① $(A|B) \to (LU|y_1y_2)$

② $U(x_1,x_2) = (y_1,y_2)$ 相当于解 $Ux_1 = y_1$，$Ux_2 = y_2$

5.5 平方根法

在工程计算中常遇到线性方程组的系数矩阵为**正定矩阵**，下面讨论正定矩阵的三角分解

5.5.1 对称正定矩阵的分解

正定阵　$X^TAX > 0$ 任意非零X　（或各阶顺序主子式大于零）

定理 5.1　**乔累斯基分解**：设A是正定矩阵，则**存在唯一的对角元素全为正的下三角阵L**，**使$A = LL^T$**

证明　若A正定，则A的各阶顺序主子式全部大于 0，则存在**唯一分解$A = \tilde{L}\tilde{U}$**(L*单位下三角*，U*上三角*)

设$A_k,\widetilde{L_k},\widetilde{U_k}$依次为$A,\tilde{L},\tilde{U}$的$k$阶顺序主子式阵，则有$|A_k| = |\widetilde{L_k}||\widetilde{U_k}| = \prod_{i=1}^{k}\tilde{u}_{ii} > 0$

其中$\tilde{u}_{ii}$为$\tilde{U}$的对角元　可得$\tilde{u}_{kk} = \frac{|A_k|}{|A_{k-1}|} > 0$　其中$|A_0| \triangleq 1$

令$D = \begin{pmatrix} \tilde{u}_{11} & & & \\ & \tilde{u}_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \tilde{u}_{nn} \end{pmatrix}$ 则D可逆，故$A = \tilde{L}DD^{-1}\tilde{U}$

有 $D^{-1}\tilde{U} = \begin{pmatrix} \tilde{u}_{11}^{-1} & & & \\ & \tilde{u}_{22}^{-1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \tilde{u}_{nn}^{-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{u}_{11} & & & \\ & \tilde{u}_{22} & * & \\ & & \ddots & \\ & & & \tilde{u}_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & * & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} = U$ 为单位上三角阵

而$A = \tilde{L}DD^{-1}\tilde{U} = \tilde{L}DU = A^T = U^T(\tilde{L}D)^T = U^T(D\tilde{L}^T)$　由分解唯一性可知 $\tilde{L} = U^T \Rightarrow A = \tilde{L}D\tilde{L}^T$

记 $D^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\tilde{u}_{11}} & & & \\ & \sqrt{\tilde{u}_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{\tilde{u}_{nn}} \end{pmatrix}$ 则有$A = \left(\tilde{L}D^{\frac{1}{2}}\right)\left(\tilde{L}D^{\frac{1}{2}}\right)^T = LL^T$ 唯一

5.5.2 计算

条件　有$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{nn} \end{pmatrix}$

解法　则有 $a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik}\tilde{l}_{kj} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik}l_{jk} \xrightarrow{i \geq j} \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk} + l_{ij}l_{jj}$　$i = j,j+1,j+2,\dots,n$

$$\Longrightarrow \left.\begin{aligned} i=j,\ l_{jj}&=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2\right)^{1/2} \\ i>j,\ l_{ij}&=\frac{a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}}{l_{jj}} \qquad i=j+1,\dots,n \end{aligned}\right\} j=1,2,\dots,n$$

注意 ① 按列计算l

② 在编程时，$A(j,j)\Leftarrow l_{jj}=Sqrt(A(j,j)-\sum_{k=1}^{j-1}A(j,k)^2)$

$$A(i,j)\Leftarrow l_{ij}=\frac{A(i,j)-\sum_{k=1}^{j-1}A(i,k)A(j,k)}{A(j,j)}$$

5.5.3 解方程组

基本形式 $Ax=b\Leftrightarrow LL^TX=b\Leftrightarrow\begin{cases}Ly=b\\L^Tx=y\end{cases}$

求解 ① 下三角方程组 $Ly=b$ $\begin{cases}y_1=b_1/l_{11}\\ y_i=\left(b_i-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}y_k\right)/l_{ii} \quad i=2,3,\dots,n\end{cases}$

② 上三角方程组 $L^Tx=y$ $\begin{cases}x_n=y_n/l_{nn}\\ x_i=(y_i-\sum_{k=i+1}^{n}l_{ik}x_k)/l_{ii} \quad i=n-1,n-2,\dots,2,1\end{cases}$

注意 ① **不能选主元作行变换**——破坏对称性

② 平方根法是**数值稳定**的

③ 可将A存在一维数组中以节省空间，但编程较麻烦

④ 该方法**不可使用增广矩阵，最后 L 有用**

例题

1. 用平方根法求解 $\begin{pmatrix}4&-1&1\\-1&4.75&2.75\\1&2.75&3.5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4\\6\\7.25\end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix}4&&\\-1&4.75&\\1&2.75&3.5\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}2&&\\-1/2&4.75&\\1/2&2.75&3.5\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}2&&\\-1/2&\sqrt{4.5}&\\1/2&\sqrt{2}&3.5\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}2&&\\-1/2&\sqrt{4.5}&\\1/2&\sqrt{2}&\sqrt{1.25}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&&\\-1/2&2.121&\\1/2&1.414&1.118\end{pmatrix}=L$$

5.6 追赶法

对角占优的三对角线矩阵 在解**三次样条差值问题**或**常微分方程边值问题**时，要解**三对角方程组**$Ax=f$，其中

$$A=\begin{pmatrix}b_1&c_1&&&&\\a_2&b_2&c_2&&&\\&a_3&b_3&c_3&&\\&&\ddots&\ddots&\ddots&\\&&&a_{n-1}&b_{n-1}&c_{n-1}\\&&&&a_n&b_n\end{pmatrix}\qquad f=\begin{pmatrix}f_1\\f_2\\f_3\\\vdots\\f_n\end{pmatrix}$$

且A满足有 $|b_1|>|c_1|>0$ $|b_n|>|a_n|>0$

$|b_i|>|a_i|+|c_i|$ $a_ic_i\neq0,\ \ i=2,3,\dots,n-1$

这是一个对角占优阵。

5.6.1 矩阵分解

克劳特分解 $A=LU$，可知满足有

$$\begin{pmatrix}b_1&c_1&&&&\\a_2&b_2&c_2&&&\\&a_3&b_3&c_3&&\\&&\ddots&\ddots&\ddots&\\&&&a_{n-1}&b_{n-1}&c_{n-1}\\&&&&a_n&b_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha_1&&&\\\gamma_2&\alpha_2&&\\&\ddots&\ddots&\\&&\gamma_n&\alpha_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\beta_1&&&\\&1&\beta_2&&\\&&\ddots&\ddots&\\&&&1&\beta_{n-1}\\&&&&1\end{pmatrix}$$

比较第i行元素可得：$\begin{cases} \boldsymbol{a_i = \gamma_i} & (i=2,3,\dots,n) \\ b_i = \gamma_i \beta_{i-1} + \alpha_i & (i=2,3,\dots,n) \\ c_i = \alpha_i \beta_i & (i=1,2,\dots,n-1) \end{cases}$ $\quad b_1 = \alpha_1$

$$\Rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{\gamma_i = a_i} & (i=2,3,\dots,n) \\ \alpha_1 = b_1,\quad \boldsymbol{\alpha_i = b_i - \gamma_i \beta_{i-1}} & (i=2,3,\dots,n) \\ \boldsymbol{c_i = \alpha_i \beta_i} & (i=1,2,\dots,n-1) \end{cases}$$

注意 ① 只需要求出 $\{\alpha_i\}\{\beta_i\}$

② 计算顺序 $\alpha_1 \to \beta_1 \to \alpha_2 \to \beta_2 \to \cdots \to \alpha_{n-1} \to \beta_{n-1} \to \alpha_n$ 称为追赶法

5.6.2 解方程组

基本形式 $Ax = f \Leftrightarrow LUx = f \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = f \\ Ux = y \end{cases}$

求解 ① $Ly = f$ 即$\begin{cases} \alpha_1 y_1 = f_1 \\ a_i y_{i-1} + \alpha_i y_i = f_i \quad (i=2,3,\dots,n) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = f_1/\alpha_1 \\ y_i = (f_i - a_i y_{i-1})/\alpha_i \quad i=2,3,\dots,n \end{cases}$

② $Ux = y$ 即$\begin{cases} x_i + \beta_i x_{i+1} = y_i \\ x_n = y_n \end{cases} (i=1,2,\dots,n-1) \Rightarrow \begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - \beta_i x_{i+1} \quad i=n-1,n-2,\dots,2,1 \end{cases}$

注意 ① 此回代称为“赶”

② 由α_i和y_{i-1}可得y_i，将$\{y_i\}$的计算与追合并，则$\alpha_i \to \beta_i \to y_i (i=1,2,\dots,n-1) \to \alpha_n \to y_n$

③ **无须选主元，方法稳定**

④ 对角占优三对角阵必可逆，故解存在且唯一

⑤ 算法次数较少

例题 1. 用追赶法求解$\begin{pmatrix} 2 & 1 & & \\ 1 & 4 & 1 & \\ & 1 & 4 & 1 \\ & & 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 6 \\ 14 \\ -2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & \\ & & \gamma_4 & \alpha_4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 6 \\ 14 \\ -2 \end{pmatrix}$

$$\begin{cases} \alpha_1 = b_1 = 2, & \beta_1 = \frac{c_1}{\alpha_1} = 0.5, & y_1 = \frac{f_1}{\alpha_1} = -1.5 \\ \alpha_2 = b_2 - a_2\beta_1 = 3.5, & \beta_2 = \frac{c_2}{\alpha_2} = 0.2857, & y_2 = \frac{f_2 - a_2 y_1}{\alpha_2} = 2.1429 \\ \alpha_3 = b_3 - a_3\beta_2 = 3.7143, & \beta_3 = \frac{c_3}{\alpha_3} = 0.2692, & y_3 = \frac{f_3 - a_3 y_2}{\alpha_3} = 3.1923 \\ \alpha_4 = b_4 - a_4\beta_3 = 1.7308, & & y_4 = \frac{f_4 - a_4 y_3}{\alpha_4} = -2.99994 \end{cases}$$

$$x_4 = y_4 = -3,$$
$$x_3 = y_3 - \beta_3 x_4 = 4,$$
$$x_2 = y_2 - \beta_2 x_3 = 1,$$
$$x_1 = y_1 - \beta_1 x_2 = -2.$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & 1 & \beta_1 & \\ & & 1 & \beta_1 \\ & & & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix}$$

列表计算:

i	α_i	β_i	y_i		x_i
1	2	0.5	-1.5		-2
2	3.5	0.2857	2.1429		1
3	3.7143	0.2692	3.1923		4
4	1.7308		-3		-3