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$\boldsymbol{A}^T=\boldsymbol{A}$,正定$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{E}$)**（正定的问题一般最小值存在且唯一，任意方向加权平方均大于零）

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**：
$$\begin{cases} l_{11}x_1 & =b_1 \\ l_{21}x_1+l_{22}x_2 & =b_2 \\ \cdots\cdots & \cdots \\ l_{n1}x_1+l_{n2}x_2+\cdots+l_{nn}x_n & =b_n \end{cases}$$
简写为 $\boldsymbol{Lx=b}$

解：
$$\begin{cases} x_1=\frac{b_1}{l_{11}} \\ x_i=\frac{b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}x_j}{l_{ii}} \quad (i=2,3,\dots,n) \end{cases}$$
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**：
$$\begin{cases} u_{11}x_1+u_{12}x_2+\cdots+u_{1n}x_n & =b_1 \\ u_{22}x_2+\cdots+u_{2n}x_n & =b_2 \\ \cdots\cdots & \cdots \\ u_{nn}x_n & =b_n \end{cases}$$
简写为 $\boldsymbol{Ux=b}$

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

5.1.3 直接法概述

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

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

再利用上述求解迭代公式，得到解。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为上下三角阵，则有

$$Ax=b \iff \boldsymbol{LUx=b} \iff \begin{cases} \boldsymbol{Ly=b} \\ \boldsymbol{Ux=y} \end{cases}$$

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。先解出y，再解出x。

此法为三角分解法

5.2 高斯消去法

中心思想 改写为**增广矩阵**：$(\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}) \xrightarrow{\text{行变换}} (\boldsymbol{A}^{(n)}|\boldsymbol{b}^{(n)})$ 其中$A^{(n)}$为**上三角阵**，有$A^{(n)}x = b^{(n)}$与原方程组同解

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

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

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

其中：$a_{ij}^{(k+1)} = \underbrace{a_{ij}^{(k)}}_{\text{前一个值}} - \underbrace{\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}}_{\text{倍数}} \underbrace{a_{kj}^{(k)}}_{\text{对应行}} \quad j = k+1, k+2, \ldots, n$

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

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

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

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

当行列式$|A| \neq 0$时，各个对角元素$a_{ii}^{(i)} \neq 0$，称它们为**主元素**

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

注意： 若A非奇异，则上述过程可行，但**无法事先判断**。因为可能

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，只能在计算中中断

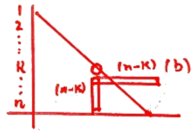
5.2.2 gauss 消去法的运算量

消元过程

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

在第k步中：$a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}a_{kj}^{(k)}\quad j=k+1,k+2,\dots,n$

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



消元第 k 步

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$a_{kk}^{(k)}=\max_{k\le i\le n}\left|a_{ik}^{(k)}\right|$

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

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

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

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

$$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{A^{(n)}} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \cdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

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$D_1, D_2, \ldots, D_k \neq 0$

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

带行交换的消元过程

换行： 记$I_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & 0 & \cdots & 1 & & \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & & & 1 & \cdots & 0 & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}\begin{matrix} \\ \\ \\ \text{第}k\text{行} \\ \\ \text{第}i\text{行} \\ \\ \\ \\ \end{matrix}(i > k)$ 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$L_{n-1}\tilde{L}_{n-2}\ldots\widetilde{L_2}\widetilde{L_1}PA = U$，从而$PA = LU$，其中$L = \left(L_{n-1}\tilde{L}_{n-2}\ldots\widetilde{L_2}\widetilde{L_1}\right)^{-1}$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$\boldsymbol{PA = LU}$

（适用范围更广）

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$A = LU$存在且唯一，我们接下来讨论求解LU

即找到
$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$
（杜利特尔分解）

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

① 先确定**第一行不变**：$u_{1j} = a_{1j}$

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

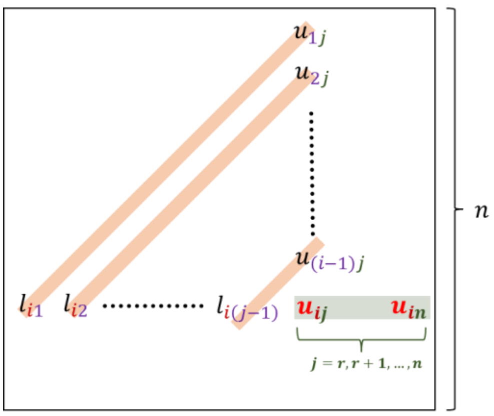
③ 确定**第二行**（已知倍数，易求）：$u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}$ ④ 更新**第二列**：$l_{i2} = \frac{a_{i2} - l_{i1}u_{12}\,\text{更新一次的}}{u_{22}\,\text{现在的元素}}$

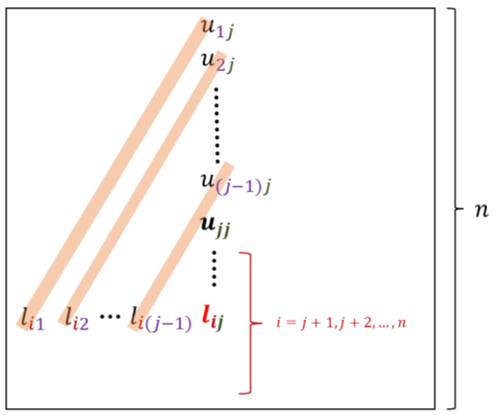
⑤ 更新**第三行**：$u_{3j} = a_{3j} - l_{31}u_{1j} - l_{32}u_{2j}$ ⑥ 更新**第三列**：$u_{i3} = \frac{a_{i3} - l_{i1}u_{13} - l_{i2}u_{23}}{u_{33}}$

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

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

一般推导





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

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

$\boldsymbol{k}$ 是中间参数。更新次数只和行有关：对第$\boldsymbol{i}$行求，就更新$\boldsymbol{i-1}$次。

注意

① $\boldsymbol{u_{ij} = a_{ij}}$ **−第$\boldsymbol{i}$行左方元素与第$\boldsymbol{i}$列上方元素之积**

$\boldsymbol{l_{ij}} = \dfrac{\boldsymbol{a_{ij}}\text{−第}i\text{行左方元素与第}j\text{列上方元素之积}}{\boldsymbol{u_{jj}}}$

$$\left(\begin{array}{c|c|cc} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ \hline l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \hline \vdots & \vdots & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{array}\right)$$

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

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

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

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

$$y = \begin{pmatrix} 10 \\ 20 \\ -\frac{17}{11} \\ -16 \end{pmatrix} \begin{matrix} \longleftarrow y_1 = b_1 \\ \longleftarrow y_2 = b_2 - l_{21} y_1 \\ \longleftarrow y_3 = b_3 - l_{31} y_1 - l_{32} y_2 \\ \longleftarrow y_4 = b_4 - l_{41} y_1 - l_{42} y_2 - l_{43} y_3 \end{matrix} \quad \begin{pmatrix} 2 & 10 & 0 & -3 \\ & 11 & -12 & \frac{17}{2} \\ & & -\frac{3}{11} & -\frac{2}{11} \\ & & & -4 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 10 \\ 20 \\ -\frac{17}{11} \\ -16 \end{pmatrix} \Rightarrow x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \begin{matrix} \longleftarrow y_1 - u_{14} x_4 - u_{13} x_3 - u_{12} x_2 / u_{11} \\ \longleftarrow (y_2 - u_{24} x_4 - u_{23} x_3)/u_{22} \\ \longleftarrow (y_3 - u_{34} x_4)/u_{33} \\ \longleftarrow y_4 / u_{44} \end{matrix}$$

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**:

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

$$\to \cdots \xrightarrow{r=n} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} & y_1 \\ l_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2n} & y_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & u_{nn} & y_n \end{pmatrix}$$ 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 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 $A \to \begin{pmatrix} \cdots & & & & \cdots \\ \vdots & a_{rr} & \cdots & a_{rn} & a_{rn+1} \\ & \cdots & & & \cdots \\ \vdots & a_{nr} & \cdots & a_{nn} & a_{nn+1} \end{pmatrix}$

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 第r步分解可得：

① 计算**中间量s_i**，并存入a_{ir} $\quad a_{ir} \longleftarrow s_i = a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} a_{ik} a_{kr} \quad (i = r, r+1, \dots, n)$ 【计算l的分子部分】

② 选择**绝对值最大的$s_i = a_{ir}$**，即确定行号i_0，使得$|s_{i_0}| = \max_{k \le i \le n} |s_i|$ 【判断最大值】

③ 如果$i_0 \ne r$，则交换i_0行**与r行** 【交换行】

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

$a_{ir} \longleftarrow u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} a_{rk} \ne a_{ki} \ (i = k+1, \dots, n, n+1)$ 【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$\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{B}$相当于**系列方程组**$A(x_1,x_2,\dots,x_n)=(b_1,b_2,\dots,b_n)$

设$\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$，由条件$\boldsymbol{PAX}=\boldsymbol{PB}$，所以$\boldsymbol{LUX}=\boldsymbol{PB}\Leftrightarrow\begin{cases}\boldsymbol{L}Y=\boldsymbol{PB}\\ \boldsymbol{UX}=Y\end{cases}$ 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** $\boldsymbol{Ux_1=y_1}$，$\boldsymbol{Ux_2=y_2}$

5.5 平方根法

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

用该方法对正定矩阵进行三角分解，计算量相比杜利特尔方法大幅减少（转置减少一半）。

5.5.1 对称正定矩阵的分解

正定阵 $\boldsymbol{X^TAX>0}$ 任意非零X （或各阶顺序主子式大于零）

正定的问题一般最小值存在且唯一，任意方向加权平方均大于零

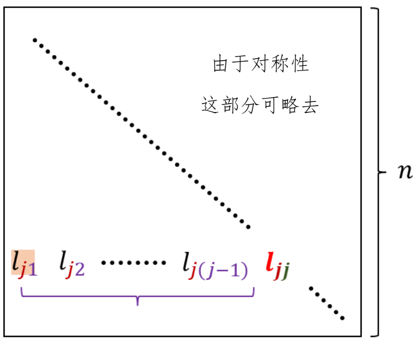
定理 5.1 **乔累斯基分解**：设A是正定矩阵，则存在唯一的对角元素全为正的下三角阵$\boldsymbol{L}$，使$\boldsymbol{A=LL^T}$

证明 略 详见 PPT 或教材

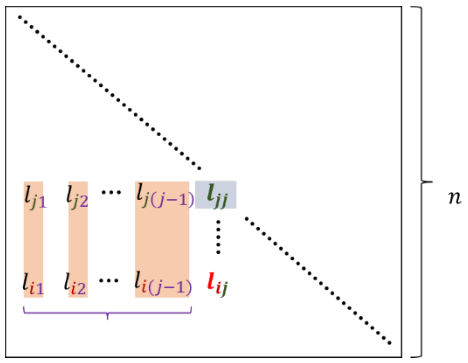
5.5.2 计算

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

解法



$$\boldsymbol{l_{jj}=\sqrt{a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2}}$$



$$\boldsymbol{l_{ij}=\frac{a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}}{l_{jj}}}$$

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

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

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

注意 ① 该方法**不能选主元作行变换**，否则会破坏对称性

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**(实际运算中，也不会计算到后面的列)，**最后L有用**

例题

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

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

随后再$Ly=b$，$L^Tx=y$求解得到最终答案。

5.6 追赶法

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

$$A=\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \quad f=\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

且A满足有 $|b_1|>|c_1|>0 \qquad |b_n|>|a_n|>0$

$|b_i|>|a_i|+|c_i| \qquad a_ic_i\neq 0,\quad i=2,3,\dots,n-1$ 则称其为**对角占优阵**。

5.6.1 矩阵分解

克劳特分解 $A=LU$，可知满足有

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

$$\begin{bmatrix} \gamma_{i-1} & \alpha_{i-1} & & \\ & \gamma_i & \alpha_i & \\ & & \gamma_{i+1} & \alpha_{i+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_{i-1} & & \\ & 1 & \beta_i & \\ & & 1 & \beta_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{i-1} & b_{i-1} & c_{i-1} & & \\ & a_i & b_i & c_i & \\ & & a_{i+1} & b_{i+1} & c_{i+1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \gamma_{i-1}\times 0 + \alpha_{i-1}\times\beta_{i-1} &= c_{i-1} \\ \gamma_i\times\beta_{i-1}+\alpha_i\times 1 &= b_i \\ \gamma_{i+1}\times 1 + \alpha_{i+1}\times 0 &= a_{i+1} \end{aligned}$$

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

$$\Rightarrow \begin{cases} \gamma_i = a_i & (i=2,3,\dots,n) \\ \alpha_1 = b_1, \quad \alpha_i = b_i - \gamma_i\beta_{i-1} & (i=2,3,\dots,n) \\ \frac{c_i}{\alpha_i} = \beta_i & (i=1,2,\dots,n-1) \end{cases} \rightarrow \boxed{\begin{cases} \alpha_i = b_i - a_i\beta_{i-1} \\ \beta_i = c_i/\alpha_i \\ y_i = \frac{f_i - a_i y_{i-1}}{\alpha_i} \end{cases}}$$

此过程称为"追"

注意 ① 只需要求出 $\{\alpha_i\}\{\beta_i\}$，因为$\{\gamma_i\} = \{a_i\}$

② 计算顺序 $\boldsymbol{\alpha_1 \to \beta_1 \to \alpha_2 \to \beta_2 \to \cdots \to \alpha_{n-1} \to \beta_{n-1} \to \alpha_n}$ 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，则有 $\alpha_i \to \beta_i \to y_i \to \cdots \to \alpha_n \to y_n$

③ 此方法**无须选主元，方法稳定。**其实质是把高斯消元法用到求解三对角方程组上的结果

④ 对角占优三对角阵**必可逆**，故**解存在且唯一**

⑤由于A十分简单，算法次数较少（乘除法共$5n-4$次）

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

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

$$\begin{aligned} x_4 &= y_4 = -3, \\ x_3 &= y_3 - \beta_3 x_4 = 4, \\ x_2 &= y_2 - \beta_2 x_3 = 1, \\ x_1 &= y_1 - \beta_1 x_2 = -2. \end{aligned}$$

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

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