第一章：线性方程组的直接解法
—大道至简

教师: 胡俊

北京大学数学科学学院

September 18, 2019

目录

目录

下三角形方程组解法

$$Ly = b \qquad L = \begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

假设$l_{ii} \neq 0,\ i = 1, 2, \cdots, n.$

$$y_1 = b_1 / l_{11}. \quad l_{21} y_1 + l_{22} y_2 = b_2, \quad y_2 = (b_2 - l_{21} y_1)/l_{22}$$

$$\cdots$$

$$y_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j)/l_{ii}, \quad i = 3, \cdots, n.$$

解下三角形方程组: **前代法**

for $j = 1 : n-1$

$\quad b(j) = b(j)/L(j,j)$

$\quad b(j+1:n) = b(j+1:n) - b(j)L(j+1:n,j)$

end

$b(n) = b(n)/L(n,n)$.

上三角方程组：回代法

同样，对于上三角形方程组

$$Ux = y$$

$$x_i = (y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j)/u_{ii}$$

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

解上三角形方程组: 回代法

for $j = n : -1 : 2$

$y(j) = y(j)/U(j,j)$

$y(1:j-1) = y(1:j-1) - y(j)U(1:j-1,j)$

end

$y(1) = y(1)/U(1,1).$

$$L_k = I - l_k e_k^T, \quad l_k = (0, \cdots, 0, l_{k+1,k}, \cdots, l_{nk})^T \leftarrow \text{Gauss 向}$$

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \text{Gauss变换}$$

对给定的向量$x = (x_1, \cdots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$, 有

$$L_k x = (x_1, \cdots, x_k, x_{k+1} - x_k l_{k+1,k}, \cdots, x_n - x_k l_{nk})^T.$$

Gauss变换

若取

$$l_{ik} = \frac{x_i}{x_k}, \ i = k+1, \cdots, n$$

便有

$$L_k x = (x_1, \cdots, x_k, 0, \cdots, 0)^T.$$

Gauss变换的性质$(e_k^T l_k = 0)$

$$(I - l_k e_k^T)(I + l_k e_k^T) = I - l_k e_k^T l_k e_k^T = I$$

即

$$L_k^{-1} = I + l_k e_k^T.$$

再如, 设$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则有

$$L_k A = (I - l_k e_k^T) A = A - l_k (e_k^T A)$$

即Gauss变换作用一个矩阵就相当于对该矩阵进行秩1修正.

三角分解的计算

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 10 \end{bmatrix}$$

首先计算一个Gauss变换L_1使得L_1A的第1列的后两个元素为0.
容易算出

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

这样

$$L_1A = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & -6 & -11 \end{bmatrix}$$

三角分解的计算

然后再计算Gauss变换L_2, 使得$L_2(L_1A)$的第2列的最后一个元素为0, 即取

$$L_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

便有

$$L_2(L_1A) = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

三角分解的计算

对于一般的n阶矩阵A, 在一定条件下, 我们可以计算$n-1$个Gauss 变换$L_1, \cdots, L_{n-1}$，使得$L_{n-1} \cdots L_1 A$为上三角矩阵.

事实上, 记$A^{(0)} = A$, 并假定已求出$k-1$个Gauss 变换$L_1, \cdots, L_{k-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ $(k < n)$ 使得

$$A^{(k-1)} = L_{k-1} \cdots L_1 A = \begin{bmatrix} A_{11}^{(k-1)} & A_{12}^{(k-1)} \\ 0 & A_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

其中$A_{11}^{(k-1)}$是$k-1$阶上三角阵, $A_{22}^{(k-1)}$为

$$A_{22}^{(k-1)} = \begin{bmatrix} a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix}.$$

如果$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, 则我们就又可以确定一个Gauss变换L_k, 使得$L_k A^{(k-1)}$中第k列的最后$n-k$个元素为零.

$$L_k = I - l_k e_k^T$$

其中

$$l_k = (0, \cdots, 0, l_{k+1,k}, \cdots, l_{nk})^T,\ l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}},\ i = k+1, \cdots, n.$$

因为$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, 故L_k是唯一确定的. 对于这样确定的L_k

$$A^{(k)} = L_k A^{(k-1)} = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{bmatrix} & \begin{array}{c} k \\ n-k \end{array} \\ \begin{array}{cc} k & n-k \end{array} & \end{array}$$

三角分解的计算

其中$A_{11}^{(k)}$是k阶上三角阵. 从$k=1$出发, 如此进行$n-1$步, 最终所得矩阵$A^{(n-1)}$即为我们所要求的上三角形式. 现令

$$L=(L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1)^{-1},\quad U=A^{(n-1)},$$

则$A=LU$. 这样只要证明L是下三角矩阵, 则我们就实现了A的三角分解.

$$\begin{aligned} L &= L_1^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1} \\ &= (I+l_1e_1^T)(I+l_2e_2^T)\cdots(I+l_{n-1}e_{n-1}^T) \end{aligned}$$

注意到$e_j^T l_i=0$如$j<i$, 有

$$\begin{aligned} (I+l_1e_1^T)(I+l_2e_2^T) &= I+l_1e_1^T+l_2e_2^T+l_1e_1^Tl_2e_2^T \\ &= I+l_1e_1^T+l_2e_2^T \end{aligned}$$

故

$$L = I + l_1 e_1^T + \cdots + l_{n-1} e_{n-1}^T$$

即L具有形式

$$L = I + [l_1, l_2, \cdots, l_{n-1}, 0] = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

由此可见, L不仅是一个单位下三角矩阵, 而且是非常容易得到.

问题: L_k作用$A^{(k-1)}$后, $A^{(k-1)}$的哪些元素作了改变?

$$A^{(k)} = L_k A^{(k-1)} = (I - l_k e_k^T) A^{(k-1)} = A^{(k-1)} - l_k e_k^T A^{(k-1)}$$

注意到$e_k^T A^{(k-1)}$是$A^{(k-1)}$的第k行以及l_k的前k个分量为0, 我们知$A^{(k)}$和$A^{(k-1)}$的前k行元素相同, 而

$$a_{ik}^{(k)} = 0, \; i = k+1, \cdots, n,$$
$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik} a_{kj}^{(k-1)}, \; i, j = k+1, \cdots, n.$$

$A^{(k)}$与L_k的存储, 例如一个4×4的矩阵A在经过两步消元后, 形式

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & a_{14}^{(0)} \\ l_{21} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} \\ l_{31} & l_{32} & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \\ l_{41} & l_{42} & a_{43}^{(2)} & a_{44}^{(2)} \end{bmatrix}$$

Gauss消去法:

for $k = 1 : n-1$

$A(k+1:n,k) = A(k+1:n,k)/A(k,k)$

$A(k+1:n,k+1:n) = A(k+1:n,k+1:n) - A(k+1:n,k)A(k,k+1:n)$

end

该算法所需要的加, 减, 乘, 除运算次数

$$\sum_{k=1}^{n-1}((n-k)+2(n-k)^2) = \frac{n(n-1)}{2} + \frac{n(n-1)(2n-1)}{3}$$

$$= \frac{2}{3}n^3 + O(n^2).$$

Gauss消去法

Theorem 1.1

主元$a_{ii}^{(i-1)}$ $(i=1,2,\cdots,k)$均不为零的充分与必要条件是A的i阶顺序主子式A_i $(i=1,\cdots,k)$都是非奇异的.

证明:

对k用归纳法. 当$k=1$时, $A_1=a_{11}^{(0)}$, 定理显然成立. 假定定理直至$k-1$ 成立. 下面只需证明“若$A_1,\cdots,A_{k-1}$非奇异, 则A_k 非奇异的充要条件是$a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$”即可.

由归纳假设知, $a_{ii}^{(i-1)}\neq 0, i=1,\cdots,k-1$. 因此, Gauss 消去法过程至少可进行$k-1$步, 即有$L_1,\cdots,L_{k-1}$使得

$$A^{(k-1)}=L_{k-1}\cdots L_1A=\begin{bmatrix} A_{11}^{(k-1)} & A_{12}^{(k-1)} \\ 0 & A_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix},$$

其中$A_{11}^{(k-1)}$是对角元为$a_{ii}^{(i-1)}$, $i=1,\cdots,k-1$的上三角阵.

由此知$A^{(k-1)}$的k阶顺序主子阵有如下形式

$$\begin{bmatrix} A_{11}^{(k-1)} & * \\ 0 & a_{kk}^{(k-1)} \end{bmatrix},$$

若将$L_1,\cdots,L_{k-1}$的k阶顺序主子阵分别记为$(L_1)_k,\cdots,(L_{k-1})_k$, 以及下三角阵的性质可知

$$(L_{k-1})_k\cdots(L_1)_kA_k = \begin{bmatrix} A_{11}^{(k-1)} & * \\ 0 & a_{kk}^{(k-1)} \end{bmatrix},$$

注意L_i是单位下三角阵, 则

$$\mathrm{det}A_k = a_{kk}^{(k-1)}\mathrm{det}A_{11}^{(k-1)}$$

从而A_k非奇异当且仅当$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$. 证明结束.

Theorem 1.2

若$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$的顺序主子式$A_k \in \mathbb{R}^{k\times k}(k = 1, \cdots, n-1)$均非奇异, 则存在唯一的单位下三角阵$L \in \mathbb{R}^{n\times n}$和上三角阵$U \in \mathbb{R}^{n\times n}$使得$A = LU$.

目录

Example 2.1

假定我们在3位10进制的浮点数系下来求解方程组

$$\begin{bmatrix} 0.001 & 1.00 \\ 1.00 & 2.00 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.00 \\ 3.00 \end{bmatrix}.$$

用Gauss消去法,

$$\hat{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1000 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{U} = \begin{bmatrix} 0.001 & 1.00 \\ 0 & -1000 \end{bmatrix},$$

从而得该方程组的计算解为$\hat{x} = (0, 1)^T$, 这与精确解

$$x = (1.002 \cdots, 0.998 \cdots)^T$$

相差甚远.

全主元三角分解

$$\begin{bmatrix} 1.00 & 2.00 \\ 0.001 & 1.00 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.00 \\ 1.00 \end{bmatrix}.$$

$$\hat{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0.001 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{U} = \begin{bmatrix} 1.00 & 2.00 \\ 0 & 1.00 \end{bmatrix}, \quad \hat{x} = (1.00, 1.00)^T.$$

I_{pq}交换矩阵, 即

$$I_{pq} = [e_1, \cdots, e_{p-1}, e_q, e_{p+1}, \cdots, e_{q-1}, e_p, e_{q+1}, \cdots, e_n].$$

全主元三角分解

I_{pq}左乘A交换A的p行与q行, 右乘A交换A的p列与q列.

$$
\begin{aligned}
A^{(k-1)} &= L_{k-1}P_{k-1}\cdots L_1P_1AQ_1\cdots Q_{k-1}\\
&= \begin{bmatrix} A_{11}^{(k-1)} & A_{12}^{(k-1)} \\ 0 & A_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

其中$A_{11}^{(k-1)}$为$k-1$阶上三角阵, $A_{22}^{(k-1)}$为

$$
A_{22}^{(k-1)} = \begin{bmatrix} a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix}
$$

那么, 第k步是先在$A_{22}^{(k-1)}$中选择尽可能大的主元, 即选

$$
|a_{pq}^{(k-1)}| = \max\{|a_{ij}^{(k-1)}|, k \le i, j \le n\}.
$$

如果$a_{pq}^{(k-1)} = 0$, 则说明A的秩为$k-1$, 消去过程结束; 否则交换$A^{(k-1)}$的第k行与第p行以及第k列与q列. 记交换后的$A_{22}^{(k-1)}$为

$$\tilde{A}_{22}^{(k-1)} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_{kk}^{(k-1)} & \cdots & \tilde{a}_{kn}^{(k-1)} \\ \vdots & & \vdots \\ \tilde{a}_{nk}^{(k-1)} & \cdots & \tilde{a}_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

计算Gauss变换$L_k = I - l_k e_k^T$, 其中

$$l_k = (0, \cdots, 0, \tilde{l}_{k+1,k}, \cdots, \tilde{l}_{nk})^T, \ \tilde{l}_{ik} = \frac{\tilde{a}_{ik}^{(k-1)}}{\tilde{a}_{kk}^{(k-1)}}, \ i = k+1, \cdots, n.$$

这样便有

$$A^{(k)} = L_k P_k A^{(k-1)} Q_k \quad = \quad \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{bmatrix} & \begin{array}{c} k \\ n-k \end{array} \\ \begin{array}{cc} k & n-k \end{array} & \end{array}$$

其中$A_{11}^{(k)}$是k阶上三角阵, $P_k = I_{kp}, Q_k = I_{kq} \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

全主元三角分解

设全主元Gauss消去法到r步终止, 则得到初等变换阵P_k, Q_k及初等下三角阵$L_k, k = 1, \cdots, r$, 使得

$$L_r P_r \cdots L_1 P_1 A Q_1 \cdots Q_r = U$$

令

$$Q = Q_1 \cdots Q_r,\ P = P_r \cdots P_1$$
$$L = P(L_r P_r \cdots L_1 P_1)^{-1},$$

则有

$$PAQ = LU,$$

$$L = P_r \cdots P_2 L_1^{-1} P_2 L_2^{-1} P_3 \cdots P_r L_r^{-1}$$

全主元三角分解

Theorem 2.2

L是单位下三角矩阵，且对角线以下元素的绝对值小于等于1.

Proof:

用数学归纳法，令$L^{(1)} = L_1^{-1}$, $L^{(k)} = P_k L^{(k-1)} P_k L_k^{-1}$. 则有

$$L^{(k)} = \begin{array}{cl} \begin{bmatrix} L_{11}^{(k)} & 0 \\ L_{21}^{(k)} & I_{n-k} \end{bmatrix} & \begin{array}{l} k \\ n-k' \end{array} \\ \begin{array}{cc} k \quad & \quad n-k \end{array} & \end{array} \tag{1}$$

其中$L_{11}^{(k)}$为k阶单位下三角阵，且对角线以下元素的绝对值小于等于1. $L_{21}^{(k)}$的元素绝对值小于等于1.

当$k = 1$时，结论是显然的. 假定对$k-1$已证(1).

全主元三角分解

注意到$P_k = I_{kp}$, 其中$p \geq k$, 所以

$$L^{(k)} = P_k L^{(k-1)} P_k L_k^{-1} = P_k \begin{bmatrix} L_{11}^{(k-1)} & 0 \\ L_{21}^{(k-1)} & I_{n-k+1} \end{bmatrix} P_k L_k^{-1}$$

$$P_k \begin{bmatrix} L_{11}^{(k-1)} & 0 \\ L_{21}^{(k-1)} & I_{n-k+1} \end{bmatrix} P_k \xrightarrow[\text{交换第}k\to\text{第}p\text{列}]{\text{交换第}k\to\text{第}p\text{行}} \begin{bmatrix} L_{11}^{(k-1)} & 0 \\ \tilde{L}_{21}^{(k-1)} & I_{n-k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11}^{(k)} & 0 \\ \tilde{L}_{21}^{(k)} & I_{n-k} \end{bmatrix}$$

其中$\tilde{L}_{21}^{(k-1)}$是由$L_{21}^{(k-1)}$交换了第1行和第$p-k+1$ 行而得到的.

全主元三角分解

而

$$
L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & * & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & * & & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_k & 0 \\ * & I_{n-k} \end{bmatrix}
$$

$$
\underset{\substack{\downarrow \\ \text{第}k\text{列为零}}}{\begin{bmatrix} L_{11}^{(k)} & 0 \\ \tilde{L}_{21}^{(k)} & I_{n-k} \end{bmatrix}} \underset{\substack{\downarrow \\ \text{只第}k\text{列}}}{\begin{bmatrix} I_k & 0 \\ * & I_{n-k} \end{bmatrix}} = \begin{bmatrix} L_{11}^{(k)} & 0 \\ L_{21}^{(k)} & I_{n-k} \end{bmatrix}
$$

证明结束.

全主元三角分解

Theorem 2.3

$PAQ = LU$, 其中L为单位下三角阵且$|l_{ij}| \le 1$, U上三角阵, 且非零对角元的个数正好等于矩阵A的秩.

全主元Gauss消去法: 三角分解

for $k=1:n-1$

  确定$p,q\ (k\le p,q\le n)$使得

    $|A(p,q)|=\max\{|A(i,j)|: i=k:n, j=k:n\}$

  $A(k,1:n)\leftrightarrow A(p,1:n)$(交换$k$行和$p$行)

  $A(1:n,k)\leftrightarrow A(1:n,q)$(交换$k$列和$q$列)

  $u(k)=p$ (记录置换矩阵P_k)

  $v(k)=q$ (记录置换矩阵Q_k)

  if $A(k,k)\neq 0$

    $A(k+1:n,k)=A(k+1:n,k)/A(k,k)$

    $A(k+1:n,k+1:n)=A(k+1:n,k+1:n)-A(k+1:n,k)A(k,k+1:n)$

  else

    stop (矩阵奇异)

  end

end

选主元的逻辑判断次数 $\sum_{k=1}^{n-1}(n-k+1)^2=\frac{1}{3}n^3+O(n^2)$

第k步, 只在$A_{22}^{(k-1)}$的第k列上寻找主元

$$|a_{pk}^{(k-1)}| = \max\{|a_{ik}^{(k-1)}|, k \leq i \leq n\}$$

只要A非奇异, 列主元Gauss消去法就可进行到底, 最终得到分解

$$PA = LU,$$

其中

$$U = A^{(r)}$$

$$P = P_r \cdots P_1, \; L = P(L_r P_r \cdots L_1 P_1)^{-1}.$$

列主元Gauss消去法: 三角分解

for $k = 1 : n-1$
  确定$p\ (k \le p \le n)$使得
    $|A(p,k)| = \max\{|A(i,k)| : i = k : n\}$
  $A(k, 1:n) \leftrightarrow A(p, 1:n)$(交换$k$行和$p$行)
  $u(k) = p$ (记录置换矩阵P_k)
  if $A(k,k) \neq 0$
    $A(k+1:n, k) = A(k+1:n, k)/A(k,k)$
    $A(k+1:n, k+1:n) = A(k+1:n, k+1:n) - A(k+1:n, k)A(k, k+1:n)$
  else
    stop (矩阵奇异)
  end
end

列主元Gauss消去法

$$\begin{cases} PA = LU \\ Ly = Pb \\ Ux = y \end{cases}$$

目录

Theorem 3.1

(Cholesky分解定理)$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$对称正定, 则存在一个对角元均为正数的下三角阵$L \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 使得

$$A = LL^T.$$

上式中的L称作A的*Cholesky*因子.

证明:
由于A正定, 则A的全部主子式均为正. 则存在唯一单位下三角阵$\tilde{L}$ 和上三角阵U,

$$A = \tilde{L}U.$$

令

$$D = \mathrm{diag}(u_{11}, \cdots, u_{nn}),\ \tilde{U} = D^{-1}U,$$

则有

$$A = \tilde{L}D\tilde{U} = \tilde{U}^T D\tilde{L}^T = A^T$$

从而

$$\begin{array}{ccc} \tilde{U}^{-T}\tilde{L} & = & D\tilde{L}^T\tilde{U}^{-1}D^{-1} \\ \big\downarrow & & \big\downarrow \\ \textbf{单位下三角阵} & = & \textbf{上三角阵} \end{array}$$

因而$D\tilde{L}^T\tilde{U}^{-1}D^{-1}$为单位阵$\Rightarrow \tilde{U}^{-T} = \tilde{L}^{-1}$. 于是$A = \tilde{L}D\tilde{L}^T$.
$x^T\tilde{L}D\tilde{L}^Tx > 0, \forall x \Rightarrow D$正定. 令

$$L = \tilde{L}\mathrm{diag}(\sqrt{u_{11}}, \cdots, \sqrt{u_{nn}}),$$

得$A = LL^T$. 证明结束.

若线性方程组$Ax=b$的系数矩阵正定时, 可按如下方式求解.

$$\left.\begin{array}{rcl} Ly=b & \Rightarrow & y \\ L^T x = y & \Rightarrow & x \end{array}\right\} Ax=b$$

$$L=\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

平方根法

比较$A=LL^T$两边对应元素, 得关系式

$$a_{ij}=\sum_{p=1}^{j} l_{ip}l_{jp}, \quad 1\le j\le i\le n\,(L^T\text{第}j\text{列为}L\text{ 的第}j\text{行}).$$

先求L的第1列, 再第2列, 以此下去.
首先, 由$a_{11}=l_{11}^2$, 得

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

再由$a_{i1}=l_{11}l_{i1}$, 得

$$l_{i1}=a_{i1}/l_{11},\ i=1,2,\cdots,n.$$

这样得到L的第1列. 假定已经确定L的前$k-1$列的元素.

平方根法

由

$$a_{kk}=\sum_{p=1}^{k}l_{kp}^2=\sum_{p=1}^{k-1}l_{kp}^2+l_{kk}^2\ \ (\text{前}k-1\text{列已知})$$

于是

$$l_{kk}=\sqrt{a_{kk}-\sum_{p=1}^{k-1}l_{kp}^2}\ (\text{平方根法的由来}).$$

再由

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

得

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

Cholesky分解: 平方根法

for $k = 1 : n$

  $A(k,k) = \sqrt{A(k,k)}$

  $A(k+1:n,k) = A(k+1:n,k)/A(k,k)$

  for $l = k+1 : n$

    $A(l:n,l) = A(l:n,l) - A(l:n,k)A(l,k)$

  end

end

容易算出, 该算法的运算量是$\frac{1}{3}n^3$, 仅是Gauss消去法运算量的一半.

LDL^T分解

为了避免开方, 可求A之如下形式分解

$$A = LDL^T,$$

其中L是单位下三角矩阵, D是对角元素均为正数的对角矩阵. 由

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} + l_{ij} d_j, \quad 1 \le j \le i \le n.$$

由此可确定l_{ij}和d_j的计算公式如下:

$$v_k = d_k l_{jk}, \quad , k = 1, \cdots, j-1,$$

$$d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} v_k,$$

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

这里$j = 1, 2, \cdots, n$.

计算LDL^T分解: 平方根法

计算LDL^T分解: 平方根法

for $j = 1 : n$

    for $i = 1 : j-1$

        $v(i) = A(j,i)A(i,i)$

    end

    $A(j,j) = A(j,j) - A(j,1:j-1)v(1:j-1)$

    $A(j{+}1:n,j) = \big(A(j{+}1:n,j) - A(j{+}1:n,1:j{-}1)v(1:j{-}1)\big)/A(j,j)$

end

此外, 对于Cholesky分解的计算过程是稳定的. 由

$$a_{ii} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik}^2$$

得

$$|l_{ij}| \leq \sqrt{a_{ii}}.$$

说明Cholesky分解中的量l_{ij}能够得以控制, 因此其计算过程是稳定的.

目录

带状高斯消去法

$$A^{(0)} = \begin{bmatrix} \alpha_1^{(0)} & \theta_1^{(0)} & \xi_1^{(0)} & & & & & \\ \beta_1^{(0)} & \alpha_2^{(0)} & \theta_2^{(0)} & \xi_2^{(0)} & & & & \\ \gamma_1^{(0)} & \beta_2^{(0)} & \alpha_3^{(0)} & \theta_3^{(0)} & \xi_3^{(0)} & & & \\ & \gamma_2^{(0)} & \beta_3^{(0)} & \alpha_4^{(0)} & \theta_4^{(0)} & \xi_4^{(0)} & & \\ & & \gamma_3^{(0)} & \beta_4^{(0)} & \alpha_5^{(0)} & \theta_5^{(0)} & \xi_5^{(0)} & \\ & & & \gamma_4^{(0)} & \beta_5^{(0)} & \alpha_6^{(0)} & \theta_6^{(0)} & \xi_6^{(0)} \\ & & & & \gamma_5^{(0)} & \beta_6^{(0)} & \alpha_7^{(0)} & \theta_7^{(0)} \\ & & & & & \gamma_6^{(0)} & \beta_7^{(0)} & \alpha_8^{(0)} \end{bmatrix}$$

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} \alpha_1^{(0)} & \theta_1^{(0)} & \xi_1^{(0)} & & & & & \\ 0 & \alpha_2^{(1)} & \theta_2^{(1)} & \xi_2^{(0)} & & & & \\ 0 & \beta_2^{(1)} & \alpha_3^{(1)} & \theta_3^{(0)} & \xi_3^{(0)} & & & \\ & \gamma_2^{(0)} & \beta_3^{(0)} & \alpha_4^{(0)} & \theta_4^{(0)} & \xi_4^{(0)} & & \\ & & \gamma_3^{(0)} & \beta_4^{(0)} & \alpha_5^{(0)} & \theta_5^{(0)} & \xi_5^{(0)} & \\ & & & \gamma_4^{(0)} & \beta_5^{(0)} & \alpha_6^{(0)} & \theta_6^{(0)} & \xi_6^{(0)} \\ & & & & \gamma_5^{(0)} & \beta_6^{(0)} & \alpha_7^{(0)} & \theta_7^{(0)} \\ & & & & & \gamma_6^{(0)} & \beta_7^{(0)} & \alpha_8^{(0)} \end{bmatrix}$$

$$\alpha_2^{(1)} = \frac{\alpha_2^{(0)}\alpha_1^{(0)} - \beta_1^{(0)}\theta_1^{(0)}}{\alpha_1^{(0)}},\ \theta_2^{(1)} = \frac{\theta_2^{(0)}\alpha_1^{(0)} - \beta_1^{(0)}\xi_1^{(0)}}{\alpha_1^{(0)}},\ \beta_2^{(1)} = \frac{\beta_2^{(0)}\alpha_1^{(0)} - \gamma_1^{(0)}\theta_1^{(0)}}{\alpha_1^{(0)}},$$

$$\alpha_3^{(1)} = \frac{\alpha_3^{(0)}\alpha_1^{(0)} - \gamma_1^{(0)}\xi_1^{(0)}}{\alpha_1^{(0)}}.$$

$$
A^{(2)} = \begin{bmatrix}
\alpha_1^{(0)} & \theta_1^{(0)} & \xi_1^{(0)} & & & & & \\
0 & \alpha_2^{(1)} & \theta_2^{(1)} & \xi_2^{(0)} & & & & \\
0 & 0 & \alpha_3^{(2)} & \theta_3^{(2)} & \xi_3^{(0)} & & & \\
 & 0 & \beta_3^{(2)} & \alpha_4^{(2)} & \theta_4^{(0)} & \xi_4^{(0)} & & \\
 & & \gamma_3^{(0)} & \beta_4^{(0)} & \alpha_5^{(0)} & \theta_5^{(0)} & \xi_5^{(0)} & \\
 & & & \gamma_4^{(0)} & \beta_5^{(0)} & \alpha_6^{(0)} & \theta_6^{(0)} & \xi_6^{(0)} \\
 & & & & \gamma_5^{(0)} & \beta_6^{(0)} & \alpha_7^{(0)} & \theta_7^{(0)} \\
 & & & & & \gamma_6^{(0)} & \beta_7^{(0)} & \alpha_8^{(0)}
\end{bmatrix}
$$

$$
\alpha_3^{(2)} = \frac{\alpha_3^{(1)}\alpha_2^{(1)} - \beta_2^{(1)}\theta_2^{(1)}}{\alpha_2^{(1)}},\ \theta_3^{(2)} = \frac{\theta_3^{(0)}\alpha_2^{(1)} - \beta_2^{(1)}\xi_2^{(0)}}{\alpha_2^{(1)}},\ \beta_3^{(2)} = \frac{\beta_3^{(0)}\alpha_2^{(1)} - \gamma_2^{(0)}\theta_2^{(1)}}{\alpha_2^{(1)}},
$$

$$
\alpha_4^{(2)} = \frac{\alpha_4^{(0)}\alpha_2^{(1)} - \gamma_2^{(0)}\xi_2^{(0)}}{\alpha_2^{(1)}}.
$$

$$A^{(7)} = \begin{bmatrix} \alpha_1^{(0)} & \theta_1^{(0)} & \xi_1^{(0)} & & & & & \\ & \alpha_2^{(1)} & \theta_2^{(1)} & \xi_2^{(0)} & & & & \\ & & \alpha_3^{(2)} & \theta_3^{(2)} & \xi_3^{(0)} & & & \\ & & & \alpha_4^{(3)} & \theta_4^{(3)} & \xi_4^{(0)} & & \\ & & & & \alpha_5^{(4)} & \theta_5^{(4)} & \xi_5^{(0)} & \\ & & & & & \alpha_6^{(5)} & \theta_6^{(5)} & \xi_6^{(0)} \\ & & & & & & \alpha_7^{(6)} & \theta_7^{(6)} \\ & & & & & & & \alpha_8^{(7)} \end{bmatrix}$$

目录

计算机多级存储方式: 寄存器(Register), 缓冲器(Cache), 主存(Memory), 磁盘(Disk), 磁带(Tape).
假定完成某计算任务需要运算量为f, 而要存取数的次数为m, 用

$$q = \frac{f}{m}$$

来表示平均每存取一次数可作的运算次数. 这样有

$$f \cdot t_{\text{arith}} + m \cdot t_{\text{mem}} = f \cdot t_{\text{arith}} \left(1 + \frac{1}{q} \frac{t_{\text{mem}}}{t_{\text{arith}}} \right),$$

其中t_{arith}表示做一次运算所需时间,t_{mem}表示存取一次数所需时间. 由此可见, q越大, 就表明执行该任务的效率越高.

数值代数算法: 向量算法, 矩阵-向量运算, 矩阵-矩阵运算
Basic Linear Algebra Subroutines
BLAS1 $x \leftarrow \alpha x$, $\mu \leftarrow x^T y$ 和 $y \leftarrow y + \alpha x$, 向↔向
BLAS2 $y \leftarrow y + \alpha A x$, 矩阵↔向
BLAS3 $C \leftarrow C + \alpha AB$, 矩阵↔矩阵

	f	m	$q = \frac{f}{m}$
$y \leftarrow y + \alpha x$	$2n$	$3n + 1$	$\frac{2}{3}$
$y \leftarrow y + \alpha A x$	$2n^2$	$n^2 + 3n$	2
$C \leftarrow C + \alpha AB$	$2n^3$	$4n^2$	$\frac{1}{2}n$

分块三角分解

设

$$A = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} & \begin{array}{c} b \\ n-b \end{array} \\ \begin{array}{cc} b & \quad n-b \end{array} & \end{array} .$$

令

$$\begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & \tilde{A}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

比较得

$$A_{11} = L_{11}U_{11}, \quad A_{12} = L_{11}U_{12},$$
$$A_{21} = L_{21}U_{11}, \quad A_{22} = \tilde{A}_{22} + L_{21}U_{12}$$

分块三角分解

(1) 计算A_{11}的LU分解: $A_{11} = L_{11}U_{11}$得L_{11} 和U_{11}

(2) 解方程组$L_{21}U_{11} = A_{21}$和$L_{11}U_{12} = A_{12}$得L_{21} 和U_{12}

(3) 计算$\tilde{A}_{22} = A_{22} - L_{21}U_{12}$

可以对$\tilde{A}_{22}$重复上面的过程.

目录

(1) A是对角占优矩阵, 证明$A^{(1)}$也是对角占优的, 其中$L_1A = A^{(1)}$.

(2) 编程实现Gauss消去法计算下列线性方程组, 已知精确解是$x = (x_1, \cdots, x_n)^T = (1, \cdots, 1)^T$

$$\begin{bmatrix} 6 & 1 & & & & \\ 8 & 6 & 1 & & & \\ & 8 & 6 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 8 & 6 & 1 \\ & & & & 8 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 7 \\ 15 \\ 15 \\ \cdots \\ 15 \\ 14 \end{bmatrix}$$

分别取$n = 2, 12, 24, 48, 84$, 计算n取不同值时数值解x^*与精确解x 的误差$\|x^* - x\|_2, \|x^* - x\|_\infty$. 其中

$$\|x\|_2 = (|x_1|^2 + \cdots + |x_n|^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \|x\|_\infty = \max\{|x_i| : i = 1, 2, \cdots, n\}.$$

(3) 证明全主元Gauss消去法得到的U的元素满足对任意i, 有$|u_{ii}| \geq |u_{ij}|, j > i$

(4) 设

$$A = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} & \begin{array}{c} k \\ n-k \end{array}, \\ \begin{array}{cc} k & n-k \end{array} & \end{array}$$

并且A_{11}是非奇异的. 矩阵

$$S = A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$$

称为A_{11}在A中的Schur余阵, 证明: 如果A_{11}有三角分解, 那么经过k步Gauss 消去以后, S正好等于矩阵$A_{22}^{(k-1)}$.

(5) 证明LU分解的唯一性：若A的顺序主子式都是非奇异的，则存在唯一的单位下三角阵L和上三角阵U，使得A=LU.

谢谢！