第五章

线性方程组直接解法

—— 矩阵三角分解法

本讲内容

- **一般线性方程组**
  - **LU 分解与 PLU 分解**
- **对称正定线性方程组**
  - **Cholesky 分解 —— 平方根法**
- **对角占优三对角线性方程组**
  - **追赶法**

LU 分解

- 什么是矩阵的三角分解
  - 将一个矩阵分解成结构简单的三角矩阵的乘积

- Gauss 消去法对应的矩阵三角分解

矩阵的 LU 分解 $A = LU$

矩阵的 LDR 分解 $A = LDR$

克洛脱 (Crout) 分解 $A = LU$

矩阵的 LU 分解

- **LU 分解 --- 待定系数法（ Doolittle 分解）**
- **列主元 LU 分解**

LU 分解

- 利用矩阵乘法直接计算 LU 分解 —— 待定系数法

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

$$L \quad \times \quad U \quad = \quad A$$

①比较等式两边的第一行得：$u_{1j}=a_{1j}$ $(j=1,\ldots,n$ $\boxed{U\text{ 的第一行}}$

比较等式两边的第一列得：$l_{i1}=a_{i1}/u_{11}$ $(i=2,\ldots$ $\boxed{L\text{ 的第一列}}$

②比较等式两边的第二行得：$u_{2j}=a_{2j}-l_{21}u_{1j}$ $(j=$ $\boxed{U\text{ 的第二行}}$

比较等式两边的第二列得：$l_{i2}=\left(a_{i2}-l_{i1}u_{12}\right)/u_{22}$ $($ $\boxed{L\text{ 的第二列}}$

计算 LU 分解

第 k 步：此时 U 的前 k-1 行和 L 的前 k-1 列已经求出

比较等式两边的第 k 行得：

$$\boxed{u_{kj}=a_{kj}-\left(l_{k1}u_{1j}+\cdots+l_{k,k-1}u_{k-1,j}\right)=a_{kj}-\sum_{i=1}^{k-1}l_{ki}u_{ij}}$$

$$(j=k,\ \ldots,\ n)$$

比较等式两边的第 k 列得：

$$\boxed{l_{ik}=\left(a_{ik}-l_{i1}u_{1k}-\cdots-l_{i,k-1}u_{k-1,k}\right)\Big/u_{kk}=\left(a_{ik}-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}u_{jk}\right)\Bigg/u_{kk}}$$

$$(i=k+1,\ \ldots,\ n)$$

直到第 n 步，便可求出矩阵 L 和 U 的所有元素。

- **这种计算 LU 分解的方法也称为 Doolittle 分解**

LU 分解

算法：(LU 分解)

for $k = 1$ to n

$$a_{kj} \leftarrow u_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} u_{ij} \;, \quad j = k, \ldots, n$$

$$a_{ik} \leftarrow l_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} u_{jk} \right) \Big/ u_{kk} \;, \quad i = k+1, \ldots, n$$

end

运算量：$(n^3 - n)/3$

demo_5_2.m

为了节省存储空间，通常用 A 的绝对下三角部分来存放 L (对角线元素无需存储)，用 A 的上三角部分来存放 U

LU 分解算法

算法：(LU 分解求解方程组)

% 先计算 LU 分解

for $k = 1$ **to** n

$$a_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} a_{ij}\ ,\quad j = k, k+1, \ldots, n$$

$$a_{ik} = \frac{1}{a_{kk}}\left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} a_{ij} a_{jk}\right),\quad i = k+1, k+2, \ldots, n$$

end

% 解三角方程组 $Ly = b$ 和 $Ux = y$

$$y_1 = b_1\ ,\qquad y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} y_k\ ,\quad i = 2, 3, \ldots, n$$

$$x_n = \frac{y_n}{a_{nn}},\qquad x_i = \frac{1}{a_{ii}}\left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_k\right),\quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

PLU 分解

- 列主元 Gauss 消去法 —— PLU 分解 $\boxed{PA = LU}$

for $k = 1$ to n

$$a_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} a_{ij} a_{jk} \ , \quad i = k, k+1, \ldots, n$$

$$a_{i_k k} = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}| \ , \quad \mathrm{Ip}(k) \leftrightarrow \mathrm{Ip}(i_k)$$

$$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j} \ , \quad j = 1, 2, \ldots, n$$

$$a_{ik} = a_{ik} / a_{kk} \ , \quad i = k+1, \ldots, n$$

$$a_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} a_{ij} \ , \quad j = k+1, \ldots, n$$

end

Matlab程序：上机练习

- 此算法可以用于计算矩阵的行列式和逆

算法：(PLU 分解求解方程组)

for $k = 1$ to n

$$a_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{k\text{-}1} a_{ij} a_{jk}\ , \quad i = k, k+1, \dots, n$$

$$a_{i_k k} = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}|\ , \quad \mathrm{Ip}(k) \leftrightarrow \mathrm{Ip}(i_k)$$

$$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j}\ , \quad j = 1, 2, \dots, n$$

$$a_{ik} = a_{ik} / a_{kk}\ , \quad i = k, k+1, \dots, n$$

$$a_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} a_{ij}\ , \quad j = k, k+1, \dots, n$$

end

% 解三角方程组 $Ly = Pb$ 和 $Ux = y$

$$y_1 = b_{\mathrm{Ip}(1)}\ , \qquad y_i = b_{\mathrm{Ip}(i)} - \sum_{k=1}^{i\text{-}1} a_{ik} y_k\ , \qquad i = 2, 3, \dots, n$$

$$x_n = y_n\ , \qquad x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_k \right), \qquad i = n-1, n-2, \dots, 1$$

对称正定矩阵

- **Cholesky 分解**
- **平方根法**

Cholesky 分解

- 对称正定矩阵的三角分解 —— Cholesky 分解

定理：(Cholesky分解) 若 A 对称正定，则 A 可唯一分解为

$$A = LL^T$$

其中 L 为下三角矩阵，且对角元素都大于 0

定理： 设 A 是对称矩阵，若 A 的所有顺序主子式都不为 0，则 A 可唯一分解为

$$A = LDL^T$$

其中 L 为单位下三角阵，D 为对角矩阵

计算 Cholesky 分解

- 如何计算 Cholesky 分解 —— 待定系数法

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

$$\Rightarrow \boxed{a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} + l_{jj} l_{ij}} \quad (i \geq j)$$

$$j = 1, 2, \ldots, n, \quad i = j, j+1, \ldots, n$$

Cholesky 分解算法

算法：(Cholesky 分解)

for $j = 1$ **to** n

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

$$l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right), \qquad i = j+1, \ldots, n$$

end

平方根法

demo_5_3.m

- 用 Cholesky 分解求解线性方程组 —— 平方根法

$$Ax = b$$

A 对称正定

算法：(解对称正定线性方程组的平方根法)

先计算 *A* 的 Cholesky 分解

然后解方程：$Ly = b$ 和 $L^T x = y$

$$y_1 = b_1 / l_{11}, \quad y_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \right) \Big/ l_{ii} \quad , \quad i = 2, 3, \ldots, n$$

$$x_n = y_n / l_{nn} \quad , \quad x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k \right) \Big/ l_{ii}$$

$$i = n\text{-}1, \ldots, 2, 1$$

三对角矩阵

- Crout 分解
- 追赶法

三对角矩阵 LU 分解

- 对角占优的不可约三对角矩阵的 Crout 分解

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & \\ a_2 & \alpha_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & a_n & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

- 计算过程

(1) 第一步： $\alpha_1 = b_1,\quad \beta_1 = c_1/\alpha_1 = c_1/b_1$

(2) 第二步： $\alpha_i = b_i - a_i\beta_{i-1}\ ,\quad \beta_i = c_i/\alpha_i$ $\qquad i = 2, 3, \ldots, n\text{-}1$

(3) 第三步： $\alpha_n = b_n - a_n\beta_{n-1}$

- 关于对角占优、不可约等性质，会在第六章详细讲述

追赶法

demo_5_4.m

- **三对角线性方程组的求解 —— 追赶法**

$$Ax = f$$

A 三对角矩阵（对角占优不可约）

算法：(追赶法)

$$\beta_1 = c_1/b_1 \ , \quad \beta_i = c_i/\left(b_i - a_i\beta_{i-1}\right)$$ 追

$i = 2, 3, \ldots, n$-1

$$y_1 = f_1/b_1 \ , \quad y_i = \left(f_i - a_i y_{i-1}\right)/\left(b_i - a_i\beta_{i-1}\right)$$ 追

$i = 2, 3, \ldots, n$

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

$i = n$-1, …, 2, 1

- 运算量：约 5n+3n