第6章 线性方程组的直接法

◆1 消去法

- 约当消去法
- 高斯消去法
- 高斯选主元法

◆2 追赶法

- 三对角方程组
- 追赶法的计算公式
- 追赶法的代数基础

◆3 平方根法

◆4 误差分析

引 言

求解线性方程组的另一类重要方法是直接法。直接法利用一系列递推公式计算有限步能直接得到方程组的精确解（系数矩阵进行递推和更新，未知量保持不变）。当然，实际计算结果仍有误差，譬如舍入误差。舍入误差的积累有时甚至会严重影响解的精度。

求解线性方程组最基本的一种直接法是消去法。这是一个众所周知的古老方法，但用在现代电子计算机上仍然十分有效。

消去法的基本思想是通过一个方程乘或除以某个常数以及将两个方程相加、减这两种手续，逐渐减少方程中变元的数目，最终使得每个方程只含有一个变元，从而得出所求的解。

6.1.1 约当消去法

6.1.1.1 约当消去法

所谓**约当消去法**，其特点是，它的**每一步仅在一个方程中保留某个变元，而从其它的各个方程中消去该变元**，这样经过反复消元后，所给方程组中的每个方程最终被加工成仅含一个变元的形式，从而得出所求的解。

例1：用约当法求解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 4 \\ x_1 + 2x_2 = 7 \end{cases} \qquad (1)$$

第1步，将方程组（1）$_1$中x_1的系数化为1，并从方程组（1）的其余方程中消去x_1，得

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 \\ 4x_2 - x_3 = 2 \\ 2.5x_2 - 1.5x_3 = 6.5 \end{cases} \qquad (2)$$

6.1.1 约当消去法

第2步，将方程组（2）$_2$中x_2的系数化为1，并从方程组（2）的其余方程中消去x_2, 得

$$\begin{cases} x_1 + 1.375x_3 = 0.75 \\ x_2 - 0.25x_3 = 0.5 \\ -0.875x_3 = 5.25 \end{cases} \qquad （3）$$

最后，再将方程组（3）$_3$中x_3的系数化为1，并从其余的方程中消去x_3, 最终得到所求的解，

$$\begin{cases} x_1 = 9 \\ x_2 = -1 \\ x_3 = -6 \end{cases}$$

6.1.1 约当消去法

6.1.1.2 约当消去法的一般形式

考虑一般形式的方程组 Ax=b,

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix},\quad \mathbf{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix},\quad \mathbf{b}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}. \qquad （4）$$

约当消去法分以下n步完成：

第一步：将方程（4）$_1$中x_1的系数化为1，并从其余的方程中消去x_1, 使之变为，

$$\begin{cases} x_1+\sum\limits_{j=2}^{n} a_{1j}^{(1)} x_j = b_1^{(1)} \\ \sum\limits_{j=2}^{n} a_{ij}^{(1)} x_j = b_i^{(1)}, i=2,3,\ldots,n \end{cases} \qquad （6）$$

6.1.1 约当消去法

第二步：将方程（6）$_2$中x_2的系数化为1，并从方程组（6）的其余方程中消去x_2，使之变为x_2，经过k-1步之后，所给的方程组变成如下形式：

$$\begin{cases} x_i + \sum\limits_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k-1)} x_j = b_i^{(k-1)}, i = 1, 2, \ldots, k-1 \\ \sum\limits_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k-1)} x_j = b_i^{(k-1)}, i = k, k+1, \ldots, n \end{cases} \tag{9}$$

第k步： 将方程（9）$_k$中x_k的系数化为1，然后从其余的各个方程中消去x_k，得到，

$$\begin{cases} x_i + \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{ij}^{(k)} x_j = b_i^{(k)}, i = 1, 2, \ldots, k \\ \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{ij}^{(k)} x_j = b_i^{(k)}, i = k+1, k+2, \ldots, n \end{cases} \tag{10}$$

6.1.1 约当消去法

第n步：将x_n的系数化为1，得到方程组的解：

$$\begin{cases} x_1 = b_1^{(n)} \\ \vdots \\ x_i = b_i^{(n)} \\ \vdots \\ x_n = b_n^{(n)} \end{cases} \qquad (13)$$

约当消元法的计算量分析：

由方程组（9）化为方程组（10）需要经过公式（11）和（12）的运算，

公式（11）的计算量：n-k+1，　公式（12）的计算量:(n-k+1)(n-1)

第k步的计算量:(n-k+1)n，　第1至n步的总计算量：

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

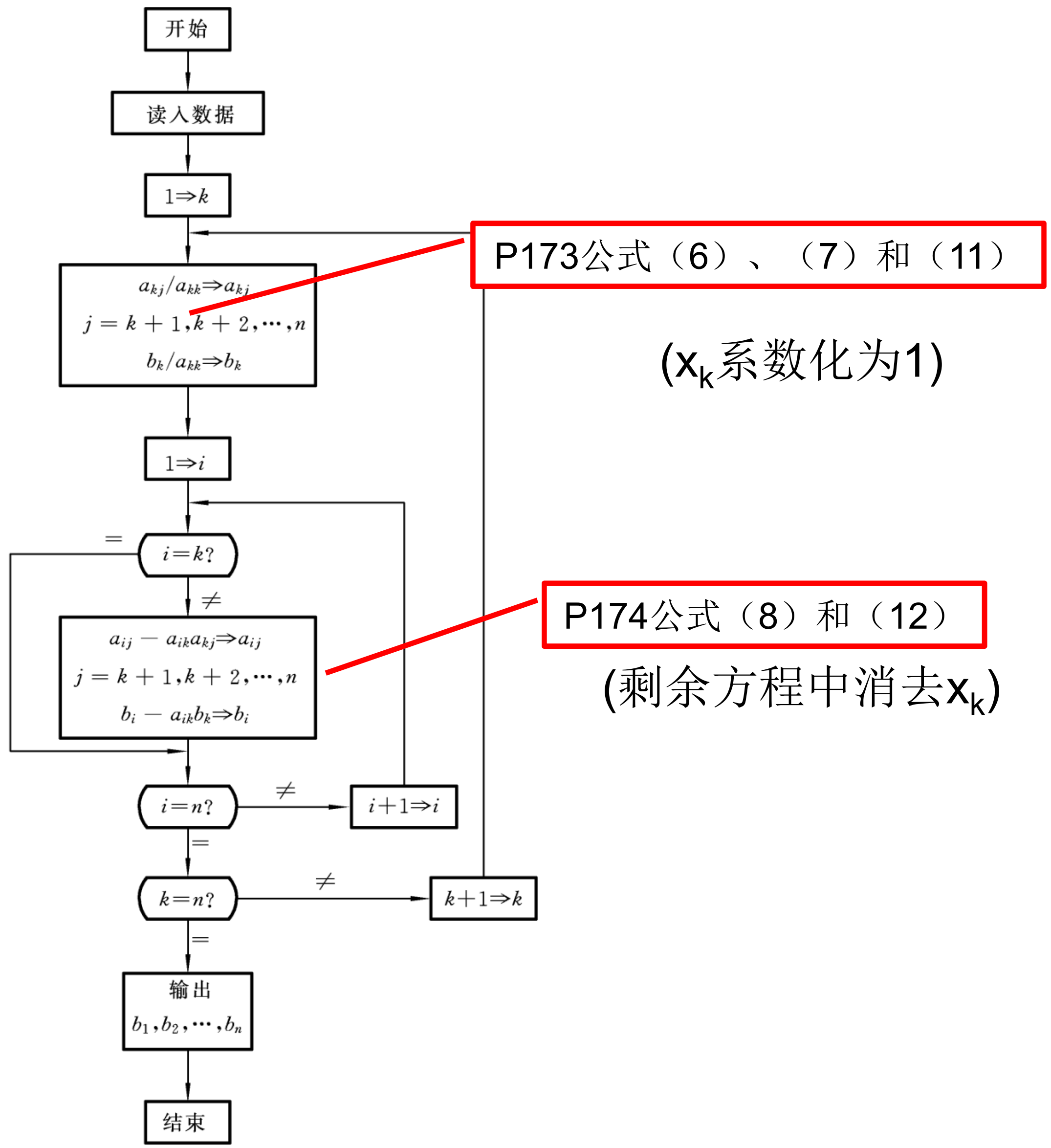

图**6-1** 约当消元法算法流程

6.1.2 高斯消去法

高斯消去法是约当消去法的一种改进。

高斯消去法的求解过程**分为消元过程和回代过程两个环节**。**消元过程**将所给的**方程组加工成上三角方程组**。所归结的方程成组再通过回代过程得出它的解。

高斯消去法由于添加了回代的过程，算法结构稍复杂，但这种算法的改进**明显减少了计算量**。

6.1.2 高斯消去法

例2：用高斯消去法求解方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 4 \\ x_1 + 2x_2 = 7 \end{cases} \qquad (1)$$

第1步，将方程组（1）$_1$中x_1的系数化为1，从方程组（1）的其余方程中消去x_1, 得

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 \\ 4x_2 - x_3 = 2 \\ 2.5x_2 - 1.5x_3 = 6.5 \end{cases} \qquad (2)$$

第2步，将方程组（2）$_2$中x_2的系数化为1，**不改变方程（2）$_1$**，然后从方程组（2）的其余方程中消去x_2, 得

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 \\ x_2 - 0.25x_3 = 0.5 \\ -0.875x_3 = 5.25 \end{cases} \qquad (3)$$

6.1.2 高斯消去法

第3步，将方程组（3）$_3$中x_3的系数化为1，得，

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 \\ x_2 - 0.25x_3 = 0.5 \\ x_3 = -6 \end{cases} \tag{4}$$

第4步，回代操作，将方程（4）$_3$回代到方程（14）$_2$，然后再回代到方程（14）$_1$，即得到方程组的解：

$$\begin{cases} x_1 = 9 \\ x_2 = -1 \\ x_3 = -6 \end{cases} \tag{5}$$

6.1.2 高斯消去法

6.1.2.1 高斯消去法的一般形式

考虑一般形式的方程组 Ax=b,

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix},\quad \mathbf{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix},\quad \mathbf{b}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}. \qquad (4)$$

高斯消去法分**消元过程**和**回代过程**两个环节，

（1）消元过程

第1步：将方程（4）$_1$中x_1的系数化为1，并从其余的方程中消去x_1，使之变为，

$$\begin{cases} x_1+\sum_{j=2}^{n} a_{1j}^{(1)}x_j=b_1^{(1)} \\ \sum_{j=2}^{n} a_{ij}^{(1)}x_j=b_i^{(1)}, i=2,3,\ldots,n \end{cases} \qquad (6)$$

6.1.2 高斯消去法

第2步：将方程（6）$_2$中x_2的系数化为1，并从方程（6）$_{3\sim n}$中消去x_2, 得，

$$\begin{cases} x_2 + \sum_{j=3}^{n} a_{2j}^{(2)} x_j = b_2^{(2)} \\ \sum_{j=3}^{n} a_{ij}^{(2)} x_j = b_i^{(2)}, i = 3, 4, \ldots, n. \end{cases}$$

继续操作，经过k-1步消元后，得到由k-1个系数为1的k-1个方程和变元$x_j (j = k, k+1, \ldots, n)$的n-k+1个方程组成的方程组，

$$\begin{cases} x_i + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j = b_i^{(i)}, i = 1, 2, \ldots, k-1. \\ \sum_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k-1)} x_j = b_i^{(k-1)}, i = k, k+1, \ldots, n. \end{cases} \quad (16)$$

6.1.2 高斯消去法

第k步对x_k的系数化为1，得：

$$\begin{cases} x_k + \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j = b_k^{(k)} \\ \sum_{j=k+1}^{n} a_{ij}^{(k)} x_j = b_i^{(k)}, i = k+1, k+2, \ldots, n. \end{cases}$$

最终得到下列方程组，

$$x_i + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j = b_i^{(i)}, i = 1, 2, \ldots, k, k+1, .., n. \qquad (19)$$

（2）回代过程

对方程组（19）自下而上的逐步回代得，

$$x_i = b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j, i = n, n-1, .., 1. \qquad (20)$$

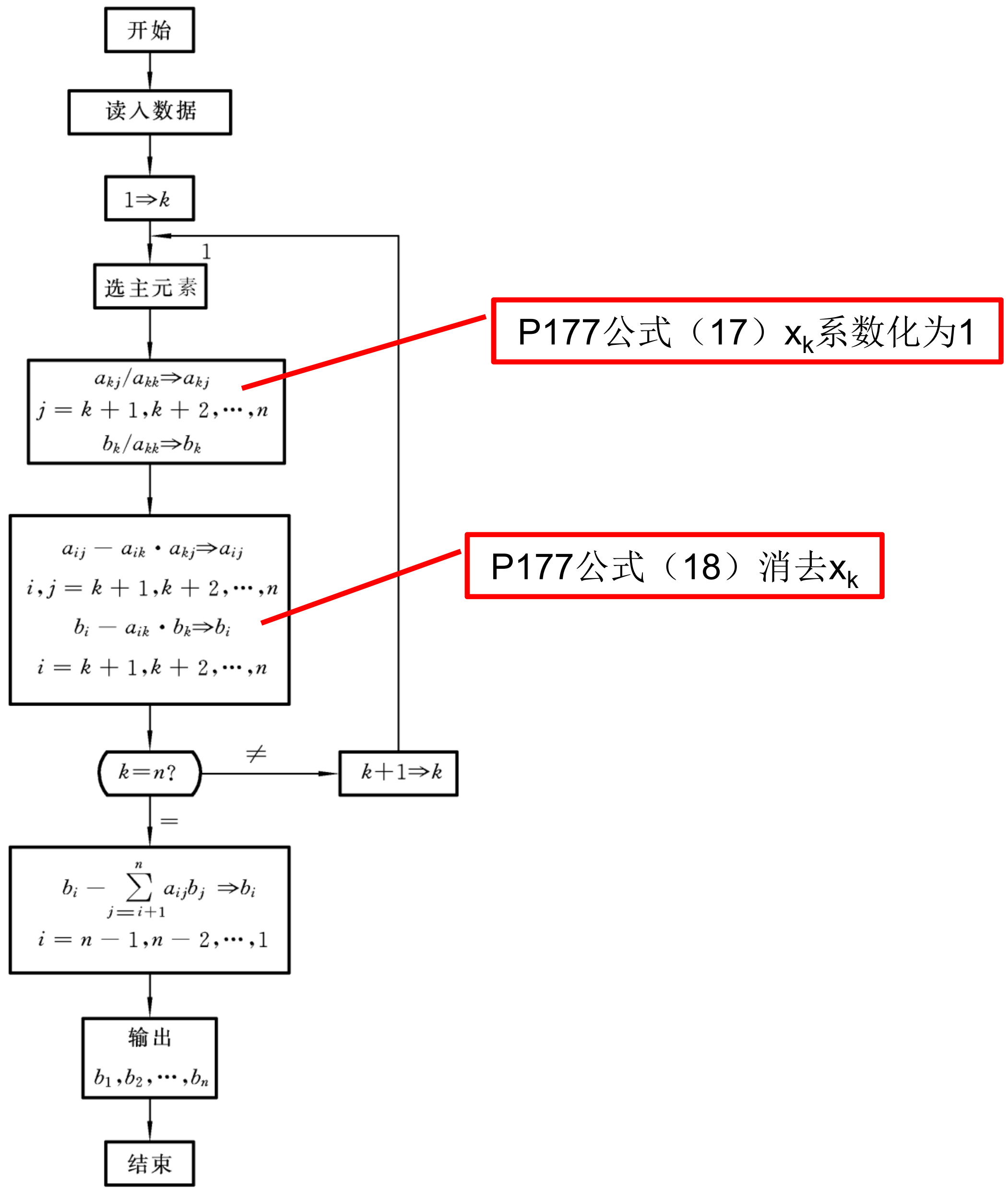

图6-2 高斯消去法算法流程

6.1.2 高斯消去法

注：高斯消去法能顺利实施的条件之一是：计算第k步时要满足 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0, k=1,2,..,n.$。

定理1： 假设方程组（4）的系数矩阵A是对角占优矩阵，则 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0, k=1,2,..,n.$。

（证明见板书）

注：高斯消去法能顺利进行的充要条件：系数矩阵A的前n-1阶顺序主子式 $\Delta_k \neq 0$。

6.1.3 高斯列主元消去法

例3：考察方程组（为什么实行列主元消去法？）

$$\begin{cases} 10^{-5}x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases} \qquad (23)$$

用高斯消去法求解，首先将式（23）$_1$中x_1的系数化为1，然后从（23）$_2$消去x_1得，

$$\begin{cases} x_1 + 10^5 x_2 = 10^5 \\ (1-10^5)x_2 = 2-10^5 \end{cases} \qquad (24)$$

若取四位浮点十进制进行计算（科学计数法，保留四位有效数字），则有，

$$1-10^5 \triangleq -10^5 \qquad\qquad 2-10^5 \triangleq -10^5$$

于是，$1-10^5=-99999=-9.9999*10^4 \triangleq -1.000*10^5$，因此，化简后的方程组为：

$$\begin{cases} x_1 + 10^5 x_2 = 10^5 \\ x_2 = 1 \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

(解失真！)

6.1.3 高斯列主元消去法

解失真的根源是：在x_1的系数太小，使得方程（24）$_2$中x_2的系数在化为1的过程中出现计算机舍入误差。因此，**需要在消元之前先调整方程的次序**。

依据x_1的系数大小，将方程组（23）中两个方程的次序进行调整，调整后的方程组变为：

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ 10^{-5} x_1 + x_2 = 1 \end{cases}$$

消元得，

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ (1-10^{-5}) x_2 = 1 \end{cases}$$

此时，仍然有$1-10^{-5} \triangleq 1$，因而上述方程组的实际形式是：

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

方程组的解为：

$$\begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

6.1.3 高斯列主元消去法

什么是高斯列主元消去法？

从方程组（16）中各个x_k系数$a_{kk}^{(k-1)}, a_{k+1,k}^{(k-1)}, \dots, a_{n,k}^{(k-1)}$,中按绝对值最大挑选出最大值，称之为第k步的**主元素**。假设主元素在第$l(k \le l \le n)$个方程，即$\left|a_{lk}^{(k-1)}\right| = \max\limits_{k \le i \le n} \left|a_{ik}^{(k-1)}\right|$，若$l \ne k$，则现将第$l$个方程与第$k$个方程互换位置，使得新的$a_{kk}^{(k-1)}$成为主元素，然后再进行消元，这一过程称为选列主元。

定理2：设所给方程组（4）对称且是对角占优矩阵，则$a_{kk}^{(k-1)}(k=1,2,\dots,n)$全是主元素。

（自己看书P180）

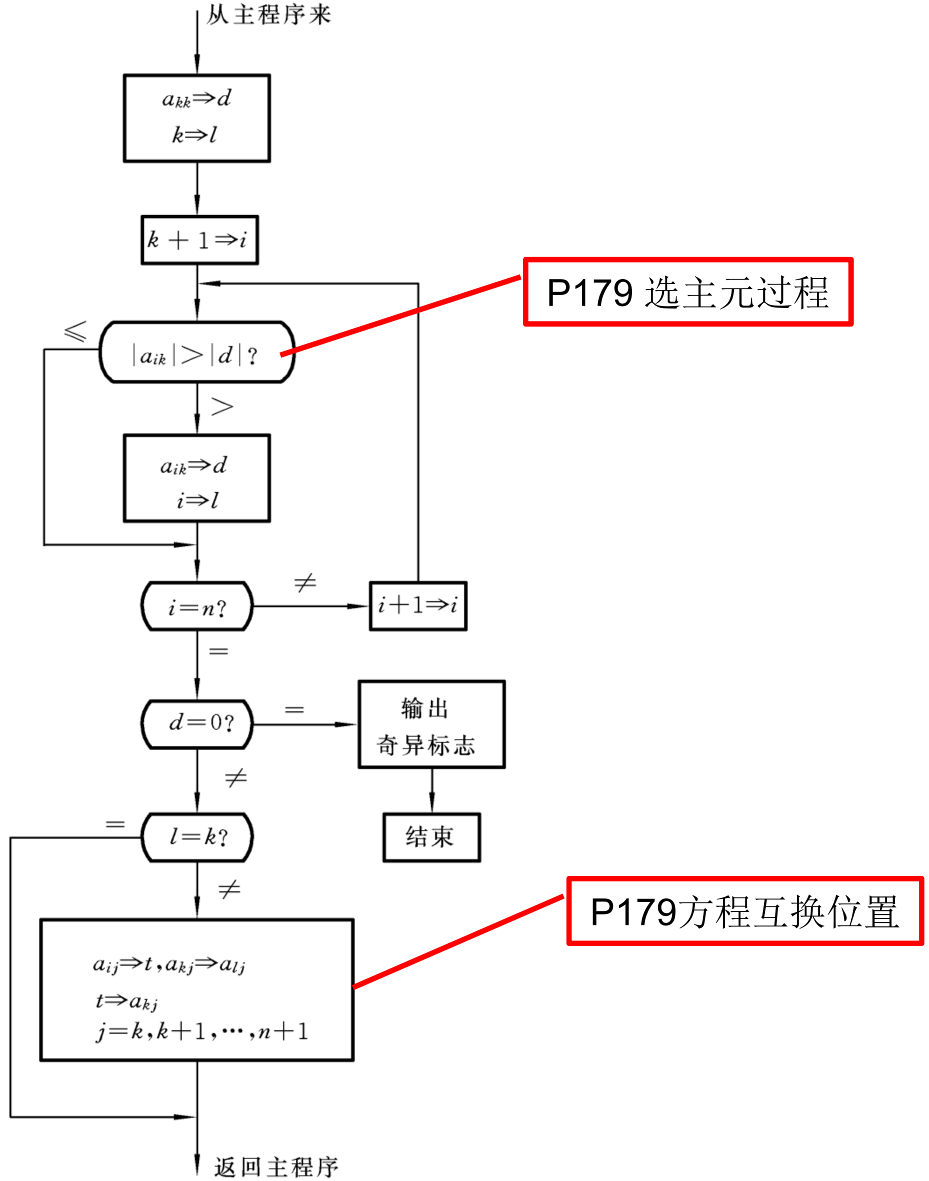

图6-3 高斯选主元消去法算法流程

6.2 追赶法

6.2.1 三对角方程组

考虑下列形式的方程组，

$$\begin{cases} b_1x_1 + c_1x_2 = f_1 \\ a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 = f_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n-1}x_{n-2} + b_{n-1}x_{n-1} + c_{n-1}x_n = f_{n-1} \\ a_nx_{n-1} + b_nx_n = f_n \end{cases} \qquad (25)$$

用矩阵形式可以表示为$\mathbf{Ax} = \mathbf{f}$，其中，

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \mathbf{0} \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ \mathbf{0} & & a_n & b_n \end{bmatrix}, (26) \qquad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix}$$

A称为三对角矩阵，其特点是非零元素集中分布在主对角线及其相邻两条次对角线上。

6.2 追赶法

定理3：假设矩阵（26）为对角占优矩阵，即下式成立，

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| \\ |b_i| > |a_i| + |c_i|, i = 2, 3, \ldots, n-1 \\ |b_n| > |a_n| \end{cases} \qquad (27)$$

则它是非奇异的，此时方程组（25）有唯一解。

（证明见板书）

6.2 追赶法

6.2.2 追赶法的计算公式

先用高斯消元法求解方程组（25），第一步消元操作：

$$\begin{cases} x_1 + u_1 x_2 = y_1 \\ x_2 + u_2 x_3 = y_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ x_{n-1} + u_{n-1} x_n = y_{n-1} \\ x_n = y_n \end{cases} \qquad (28)$$

其中系数，

$$\begin{aligned} & u_1 = c_1 / b_1, y_1 = f_1 / b_1 \\ & u_i = c_i / (b_i - u_{i-1} a_i), i = 2, 3, \ldots, n-1 \\ & y_i = (f_i - y_{i-1} a_i) / (b_i - u_{i-1} a_i), i = 2, 3, \ldots, n \end{aligned} \qquad (29)$$

第二步回代操作：

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - u_i x_{i+1}, i = n-1, n-2, \ldots, 1 \end{cases} \qquad (30)$$

6.2 追赶法

上述过程称为追赶法，追赶法分为追和赶两个环节：

（1）追的过程（消元过程）：按（29）式顺序计算系数$u_1 \to u_2 \to \cdots \to u_{n-1}$ 和$y_1 \to y_2 \to \cdots \to y_n$ 。

（2）赶的过程（回代过程）：按（30）式逆序求解 $x_n \to x_{n-1} \to \cdots x_1$。

说明：追赶法和高斯消元法原理相同，但是追赶法计算量小，因为方程组系数中有很多零元素。

定理4： 设矩阵（26）为对角占优，则式（29）的分母$d_1 = b_1, d_i = b_i - u_{i-1}a_i, i = 2,3,\ldots,n$ 全不为0.

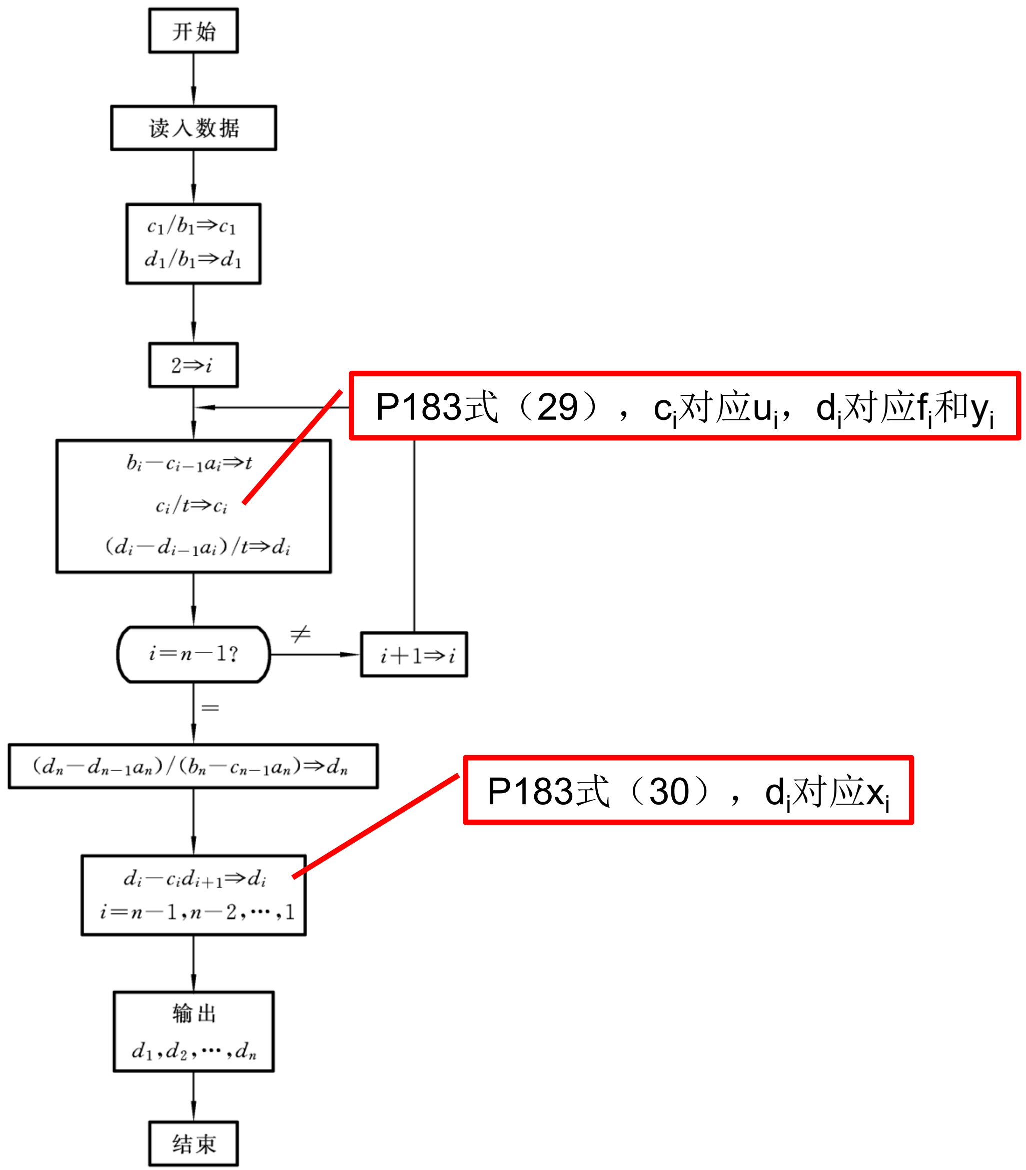
开始
读入数据
$c_1/b_1 \Rightarrow c_1$
$d_1/b_1 \Rightarrow d_1$
$2 \Rightarrow i$
$b_i - c_{i-1}a_i \Rightarrow t$
$c_i/t \Rightarrow c_i$
$(d_i - d_{i-1}a_i)/t \Rightarrow d_i$
$i = n-1?$
$\neq$
$i+1 \Rightarrow i$
$=$
$(d_n - d_{n-1}a_n)/(b_n - c_{n-1}a_n) \Rightarrow d_n$
$d_i - c_i d_{i+1} \Rightarrow d_i$
$i = n-1, n-2, \cdots, 1$
输出
$d_1, d_2, \cdots, d_n$
结束
P183式（29），c_i对应u_i，d_i对应f_i和y_i
P183式（30），d_i对应x_i

图6-4 追赶法算法流程

6.2 追赶法

6.2.3 追赶法的代数基础

定理5：设三对角系数矩阵A对角占优矩阵，则它可以唯一地分解成矩阵L和U的乘积，

A=LU

其中，U为单位上二对角矩阵，L为下二对角矩阵。

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} d_1 & & & & \mathbf{0} \\ a_2 & d_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & d_{n-1} & \\ \mathbf{0} & & & a_n & d_n \end{bmatrix},\mathbf{U}=\begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & \mathbf{0} \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ \mathbf{0} & & & & 1 \end{bmatrix}$$

证明：将矩阵关系式A=LU按矩阵乘法展开，有

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \mathbf{0} \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & \\ \mathbf{0} & & a_n & b_n & \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_1 & & & & \mathbf{0} \\ a_2 & d_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & d_{n-1} & \\ \mathbf{0} & & & a_n & d_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & \mathbf{0} \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ \mathbf{0} & & & & 1 \end{bmatrix}$$

6.2 追赶法

$$\begin{cases} b_1 = d_1 \\ c_i = d_i u_i, i = 1, 2, \ldots, n-1 \\ b_i = a_{i+1} u_i + d_{i+1} \end{cases}$$

由定理4知$d_i \neq 0$，因此由上式可以唯一确定矩阵L和U，

$$\begin{cases} d_1 = b_1 \\ u_i = c_i / d_i, i = 1, 2, \ldots, n-1, \ \ i = 1, 2, \ldots, n-1 \\ d_{i+1} = b_{i+1} - u_i a_{i+1} \end{cases} \tag{32}$$

定理得证。

6.2 追赶法

LU分解方法求解方程组（25）

令A=LU，方程组（25）Ax=f可分解成LUx=f，进而可以分解成，

$$\begin{cases} Ly = f \\ Ux = y \end{cases}$$

解Ly=f得，

$$\begin{bmatrix} d_1 & & & & \mathbf{0} \\ a_2 & d_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & d_{n-1} & \\ \mathbf{0} & & & a_n & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix}$$

解Ly=f方程组得，

$$\begin{cases} y_1 = f_1 / d_1 \\ y_i = (f_i - a_i y_{i-1}) / d_i, i = 2,3,...,n. \end{cases} \tag{33}$$

6. 2 追赶法

由Ux=y得，

$$\begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & \mathbf{0} \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ \mathbf{0} & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix}$$

其解见式（30），

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - u_i x_{i+1}, i = n-1, n-2, \ldots, 1 \end{cases}$$

总结起来，方程组（25）的求解可归纳为如下三个步骤：

步骤1，按式（32）计算$d_1 \to u_1 \to d_2 \to \cdots \to u_{n-1} \to d_n$；

步骤2，方程组（33）顺序求$y_1 \to y_2 \to \cdots y_n$ ；

步骤3，方程组（30）逆序求$x_n \to x_{n-1} \to \cdots x_1$.

6.3 平方根法

定理6 设

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & \cdots & a_{n2} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

为正定矩阵，则有如下三角阵

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \mathbf{0} \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

使成立，

$$\mathbf{A}=\mathbf{L}\bullet\mathbf{L}^{T} \tag{34}$$

若限定L的**主对角线**元素**取正值**，则这种分解是唯一的。

6.3 平方根法

证明：将矩阵关系式$A=LL^T$直接展开，有

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \mathbf{0} \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & l_{32} & \cdots & l_{n2} \\ & & l_{33} & \cdots & l_{n3} \\ & & & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & & & & l_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & \cdots & a_{n2} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

于是，

$$\begin{cases} a_{11} = l_{11}^2 \\ a_{21} = l_{21}l_{11}, a_{22} = l_{21}^2 + l_{22}^2 \\ a_{31} = l_{31}l_{11}, a_{32} = l_{31}l_{21} + l_{32}l_{22}, a_{33} = l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2 \\ \cdots \end{cases}$$

逐行求出矩阵L的元素，$l_{11} \to l_{21} \to l_{22} \to l_{31} \to l_{32} \to \cdots$，计算公式为：

$$\begin{cases} l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}) / l_{jj}, j = 1, 2, \ldots, i-1 \\ l_{ij} = (a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2)^{\frac{1}{2}}, i = 1, 2, \ldots, n \end{cases} \qquad (35)$$

6.3 平方根法

此外，A的k阶主子矩阵A_k可相应地分解为$A_k = L_k L_k^T$，这里L_k是L的k阶主子矩阵，因此，

$$\det(A_k) = (\det(L_k))^2 = \prod_{i=1}^{k} l_{ii}^2$$

由于A是对称正定矩阵，则$\det(A_k)>0$,于是有，

$$l_{kk}^2 = \frac{\det(A_k)}{\det(A_{k-1})} > 0, k = 2,3,\ldots,n$$

又因为$l_{11}^2 = a_{11} = \det(A_1) > 0$，所以所有的$l_{kk}(k=1,2,\ldots,n)$全是非零常数，如果限定它们取正值，则按计算公式（35）可唯一地确定矩阵L，证毕。

6.3 平方根法

平方根法求解对称正定方程组Ax=b

设对称正定矩阵A可以分解为A=LL^T，则方程组Ax=b可以归结为两个方程组来求解，

$$\begin{cases} Ly = b \\ L^T x = y \end{cases}$$

由Ly=b得，

$$\begin{cases} l_{11}y_1 = b_1 \\ l_{21}y_1 + l_{22}y_2 = b_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ l_{n1}y_1 + l_{n2}y_2 + \cdots + l_{nn}y_n = b_n \end{cases}$$

可按顺序计算出 $y_1 \to y_2 \to \cdots y_n$：

$$y_i = (b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k) / l_{ii}, i = 1, 2, \ldots, n$$

6.3 平方根法

由$L^T x=y$得，

$$\begin{cases} l_{11}x_1 + l_{21}x_2 + \cdots + l_{n1}x_n = y_1 \\ l_{22}x_2 + \cdots + l_{n2}x_n = y_2 \\ \cdots\cdots\cdots \\ l_{nn}x_n = y_n \end{cases}$$

逆序求得$x_n \to x_{n-1} \to \cdots x_1$,

$$x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki}x_k)/l_{ii}, i = n, n-1, \ldots, 1.$$

求解方程组的上述算法因含有开平方算法称为**平方根法**。

6.3 平方根法

6.3.2 改进的平方根法（乔里斯基分解法，Cholesky）

定理7：对称正定矩阵A可分解成A=LDL^T 的形式，其中，

$$\mathbf{D}=\begin{bmatrix} d_1 & & & \mathbf{0} \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & d_n \end{bmatrix}$$

为对角阵，而

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} 1 & & & & \mathbf{0} \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

是单位下三角阵。

6.3 平方根法

如何计算L和D？

A=LDL^T

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & \mathbf{0} \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & & \mathbf{0} \\ & d_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & d_{n-1} & \\ \mathbf{0} & & \cdots & & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & l_{31} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & l_{32} & \cdots & l_{n2} \\ & & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & l_{n,n-1} \\ & & \cdots & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & \cdots & a_{n2} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

可以逐行求出矩阵L和D的元素 $d_1 \to l_{12} \to d_2 \to l_{31} \to l_{31} \to l_{32} \to d_3 \to \cdots.$ ，

$$\begin{cases} l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} d_k l_{ik} l_{jk}) / d_j, j = 1, 2, \ldots, i-1. \\ d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{ik}^2, i = 1, 2, \ldots, n. \end{cases}$$

6.3 平方根法

6.3.2 改进的平方根法（乔里斯基分解法，Cholesky）

令$A=LDL^T$，方程组$Ax=b$可以重新写为：$L(DL^Tx)=b$，方程组的求解可归纳为求解如下两个方程组：

$$\begin{cases} Ly = b \\ L^T x = D^{-1} y \end{cases}$$

其计算公式分别为：

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \quad ,i=1,2,\ldots,n.$$

和

$$x_i = y_i / d_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k \quad ,i=n,n-1,\ldots,1.$$

上述求解方程组的算法称为改进的平方根法，也称为Cholesky方法（乔里斯基）。其优点是不用进行开方运算。

6.4 误差分析

考察方程组1，

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{bmatrix} \qquad (36)$$

解得，$x_1=1$和$x_2=1$，

假设右端项存在微小扰动误差，变为，

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} \qquad (37)$$

解得，$x_1=2$和$x_2=0$。

可以发现尽管右端项有微小的扰动，其解就有很大的变化。

6.4 误差分析

考察方程组2，

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 5.001 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 7.001 \end{bmatrix}$$

解得，$x_1=1$和$x_2=1$，

对系数矩阵和右端项添加微小扰动误差，变为，

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 4.999 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 7.002 \end{bmatrix}$$

解得，$x_1=2$和$x_2=8.5$。

可以发现当系数矩阵和右端项有微小的扰动，其解也会有发生的变化。解对系数矩阵和右端项的扰动比较敏感，称这类方程组为**病态方程组**。

几何学解释：方程组的解为两条接近平行的直线的交点，当其中一条直线的斜率稍微有变化时，新的交点和原交点相差比较远。

6.4 误差分析

方程组病态程度分析：

首先分析右端项b的扰动对解的影响：以δb表示右端b的扰动，相应地解x产生的扰动为δx，则有，

$$A(x+\delta x)=b+\delta b$$

消去Ax=b得，

$$A\delta x=\delta b$$

由矩阵范数的定义得，

$$\|\delta x\|=\|A^{-1}\delta b\|\le\|A^{-1}\|\|\delta b\|$$

另一方面有，

$$\|x\|\ge\frac{\|Ax\|}{\|A\|}=\frac{\|b\|}{\|A\|}$$

于是有，

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\|A\|\|A^{-1}\|\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \qquad （38）$$

6.4 误差分析

其次考虑系数矩阵A的扰动对解的影响：令δA表示A的扰动，相应的解x的扰动仍记为δx，得，

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b$$

消去Ax=b得，

$$A\delta x+\delta A(x+\delta x)=0$$

故有，

$$\|\delta x\|=\|A^{-1}\delta A(x+\delta x)\|\le\|A^{-1}\|\|\delta A\|(\|x\|+\|\delta x\|)$$

若δA足够的小，使得

$$\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1$$

于是有，

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\frac{\|A^{-1}\|\|\delta A\|}{1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|} \qquad (39)$$

记 $cond(A)\equiv\|A^{-1}\|\|A\|$ 称为矩阵A的条件数。

6.4 误差分析

误差估计式（38）和（39）可分别表示为，

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le cond(A)\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

和

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{cond(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-cond(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$$

上述两个式子表明，右端项b和系数矩阵A的扰动对解的影响与条件数cond(A)的大小有关，cond(A)越大，扰动对解的影响就越大。因而条件数的值刻画了方程组的病态程度。

注：矩阵的条件数与矩阵范数有关，记 $cond_p(A)=\|A^{-1}\|_p\|A\|_p$ 。

取p=∞,方程组（36）的条件数 $cond_\infty(A)=\|A\|_\infty\|A^{-1}\|_\infty \approx 4\times10^4$ 。

6.4 误差分析

定理8：设 $\tilde{x}$ 是方程组**Ax=b**的一个近似解，其精确解为 x^*，**r**为 $\tilde{x}$ 的余量，$r = b - A\tilde{x}$ 则有

$$\frac{\|x^* - \tilde{x}\|}{\|x^*\|} \le cond(A)\frac{\|r\|}{\|b\|}$$

证明：由于 $Ax^* = b, A(x^* - \tilde{x}) = r$ ，故有

$$\|b\| = \|Ax^*\| \le \|A\|\|x^*\|$$

$$\|x^* - \tilde{x}\| = \|A^{-1}r\| \le \|A^{-1}\|\|r\|$$

$$cond(A)\frac{\|r\|}{\|b\|} = \frac{\|A\|\|A^{-1}\|\|r\|}{\|b\|} \ge \frac{\|A\|\|A^{-1}r\|}{\|b\|} \ge \frac{\|A\|\|x^* - \tilde{x}\|}{\|b\|} \ge \frac{\|A\|\|x^* - \tilde{x}\|}{\|Ax^*\|} \ge \frac{\|A\|\|x^* - \tilde{x}\|}{\|A\|\|x^*\|} = \frac{\|x^* - \tilde{x}\|}{\|x^*\|}$$

定理得证。

例题选讲：6.1. 追赶法的变形与推广

例2: 将题1三对角矩阵A分解为A=UL的形式，其中U为上二对角矩阵，而L则为单位下二对角矩阵。

解：先考虑n=4时的情形，

$$\begin{bmatrix} d_1 & u_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & u_2 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & u_3 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & l_3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & l_4 & 1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 \\ 0 & 0 & a_4 & b_4 \end{bmatrix}$$

按矩阵乘法对应元素相乘（思路）得，

规律：按行计算，先下后上。

$$u_i = c_i, i = 1,2,3.$$

$$d_4 = b_4, \qquad l_4 = a_4 / d_4$$

$$d_3 = b_3 - c_3 l_4, \quad l_3 = a_3 / d_3$$

$$d_2 = b_2 - c_2 l_3, \quad l_2 = a_2 / d_2$$

$$d_1 = b_1 - c_1 l_2$$

例题选讲：6. 1. 追赶法的变形与推广

一般地，三对角矩阵A可分解为上二对角矩阵U与单位下二对角矩阵L的乘积，

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & d_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & l_{n-1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & l_n & 1 \end{bmatrix}$$

U和L矩阵元素的计算顺序为：按行计算，先下后上。

$$d_n \to l_n \to d_{n-1} \to l_{n-1} \to \cdots \to d_2 \to l_2 \to d_1$$

矩阵元素计算公式：

$$\begin{cases} d_n = b_n \\ l_{i+1} = a_{i+1} / d_{i+1}, i = n-1, n-2, \ldots, 1 \\ d_i = b_i - c_i l_{i+1} \end{cases}$$

例题选讲：6. 1. 追赶法的变形与推广

题3: 基于题2的矩阵分解求解三对角方程组（25）。

$$\begin{cases} b_1x_1 + c_1x_2 = f_1 \\ a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 = f_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n-1}x_{n-2} + b_{n-1}x_{n-1} + c_{n-1}x_n = f_{n-1} \\ a_nx_{n-1} + b_nx_n = f_n \end{cases} \qquad (25)$$

解：令A=UL，将Ax=f分解为两个方程组的求解，即Uy=f和Lx=y，其求解过程分为“赶”（从后向前）和“追”（从前向后）两个环节。

第一环节：解Uy=f，

$$\begin{bmatrix} d_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & d_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} y_n = f_n / d_n \\ y_i = (f_i - c_iy_{i+1}) / d_i, i = n-1, n-2, \ldots, 1 \end{cases}$$

逆序计算出$y_n \to y_{n-1} \to \cdots \to y_1$（从后向前）。

例题选讲：6. 1. 追赶法的变形与推广

第二环节：解Lx=y，

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & l_{n-1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & l_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = y_1 \\ x_i = y_i - l_i x_{i-1}, i = 2,3,\ldots,n \end{cases}$$

按顺序计算出 $x_1 \to x_2 \to \cdots \to x_n$ （从前向后）。

例题选讲：6.2.三角分解的两种模式

定义：设A为n阶矩阵(n≥2).称A=LU为矩阵A的三角分解，其中L是下三角矩阵，U是上三角矩阵。

为了保证分解的唯一性，引入如下定义：

定义：如果L是单位下三角阵，U是上三角阵，称三角分解A=LU为Doolittle分解；如果L是下三角阵，U是单位上三角阵，则称A=LU为Crout分解。

定理：如果n阶(n≥2)矩阵A的前n-1个顺序主子式不为零，则A有惟一的Doolittle分解和惟一的Crout分解。

$$L=\begin{bmatrix} 1 & & & & \mathbf{0} \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix},U=\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & u_{n-1n} \\ \mathbf{0} & & & & u_{nn} \end{bmatrix} \quad L=\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \mathbf{0} \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix},U=\begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & 1 & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & u_{n-1n} \\ \mathbf{0} & & & & 1 \end{bmatrix}$$

例题选讲：6. 2. 三角分解的两种模式

题1：设L为下三角阵，$L=(l_{ij})_{n\times n}$，当j>i时 $l_{ij}=0$，试导出方程组Lx=b的求解公式。

（求解见板书）

题2：设U为上三角阵，$U=(u_{ij})_{n\times n}$，当i>j时 $u_{ij}=0$，试导出方程组Ux=b的求解公式。

（求解见板书）

题3：设L为下三角阵，$L=(l_{ij})_{n\times n}$，当j>i时 $l_{ij}=0$，试求出 $L^{-1}=(x_{ij})_{n\times n}$ 的计算公式。

（求解见板书）

题4：考察四阶方阵 $A=(a_{ij})_{4\times 4}$ 的Doolittle分解A=LU，并针对n阶方阵A列出分解公式。

（求解见板书）

题5：基于矩阵A的Doolittle分解A=LU，试给出方程组Ax=b的求解公式。

（求解见板书）

例题选讲：6. 2. 三角分解的两种模式

题6：考察矩阵$A=(a_{ij})_{n\times n}$的Crout分解，并基于这种分解求解方程组Ax=b.

解：类似于Doolittle分解，由A=LU得，

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \mathbf{0} \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & 1 & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & u_{n-1n} \\ \mathbf{0} & & & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

对i=1,2,…,n逐行求出矩阵L和U的元素，

$$\begin{cases} l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj},\ j = 1, 2, \ldots, i. \\ u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}) / l_{ii},\ j = i+1, i+2, \ldots, n. \end{cases}$$

令Ly=b和Ux=y，得到求解y和x的表达式为，

$$\begin{cases} y_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j) / l_{ii}, i = 1, 2, \ldots, n. \\ x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j, i = n, n-1, \ldots, 1. \end{cases}$$

例题选讲：6.3.对称的乔里斯基分解

题3： 设

$$A=\begin{bmatrix} A_1 & a_1 \\ a_1^T & a_{nn} \end{bmatrix}$$

为n阶对称正定矩阵，又 $A_1=L_1D_1L_1^T$，其中L_1为单位下三角阵，D_1为具有正对角元素的对角阵，试确定c_1与d_n使成立，

$$A=\begin{bmatrix} L_1 & 0 \\ c_1^T & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & d_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} L_1 & 0 \\ c_1^T & 1 \end{bmatrix}^T$$

（求解见板书）