

# 线性方程组的直接解法

邓建松

2022 年 9 月 6 日

# 线性方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 结构分析、网络分析、大地测量、数据分析、最优化及非线性方程组和微分方程组数值解等，都常常遇到线性方程的求解问题

# 线性方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

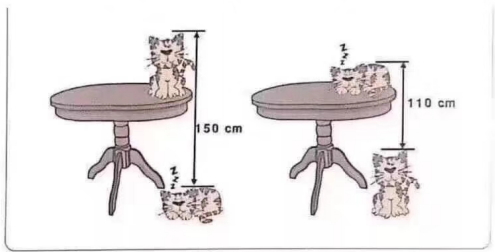
选主元三角分解

平方根法

- 结构分析、网络分析、大地测量、数据分析、最优化及非线性方程组和微分方程组数值解等，都常常遇到线性方程的求解问题
- 这也是一个历史悠久的问题：《九章算术》中就记载有消元法

今有上禾三秉，中禾二秉，下禾一秉，实三十九斗；上禾二秉，中禾三秉，下禾一秉，实三十四斗；上禾一秉，中禾二秉，下禾三秉，实二十六斗。问上、中、下禾实一秉各几何？

小学生作业，我感觉我幼儿园都没毕业



桌子有多高？

- A 110 cm
- B 120 cm
- C 130 cm
- D 140 cm
- E 150 cm

# 求解方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 求解大型线性方程组是计算机问世后才有可能的事情

# 求解方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 求解大型线性方程组是计算机问世后才有可能的事情
- 直接法（精确法）：在没有舍入误差的情况下经过有限次运算可求得方程组的精确解

# 求解方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 求解大型线性方程组是计算机问世后才有可能的事情
- 直接法（精确法）：在没有舍入误差的情况下经过有限次运算可求得方程组的精确解
- 迭代法：采取逐次逼近方法，从一个初始向量出发，按照一定的计算格式，得到一个向量的无穷序列，其极限是方程组的精确解。只经过有限次运算得不到精确解

# Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- Gauss消去法是一类最基本的直接求解方法



# Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- Gauss消去法是一类最基本的直接求解方法
- 它是目前求解中小规模（阶数一般不超过1000）线性方程组的最常用方法

# Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- Gauss消去法是一类最基本的直接求解方法
- 它是目前求解中小规模（阶数一般不超过1000）线性方程组的最常用方法
- 用于系数矩阵没有任何特殊结构的方程组

# 下三角形方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

考虑下三角形方程组  $Ly = b$ , 其中  $b = (b_1, \dots, b_n)^T$  已知,  $y = (y_1, \dots, y_n)^T$  未知, 而系数阵  $L$  是已知的非奇异下三角阵, 即

$$L = \begin{pmatrix} \ell_{11} & & & \\ \ell_{21} & \ell_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \cdots & \ell_{nn} \end{pmatrix}$$

# 求解方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

矩阵非奇异，等价于  $\ell_{ii} \neq 0, i = 1, \dots, n$

- $y_1 = b_1/\ell_{11}$

# 求解方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

矩阵非奇异，等价于  $\ell_{ii} \neq 0, i = 1, \dots, n$

- $y_1 = b_1/\ell_{11}$
- $y_2 = (b_2 - \ell_{21}y_1)/\ell_{22}$

# 求解方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

矩阵非奇异，等价于  $\ell_{ii} \neq 0, i = 1, \dots, n$

- $y_1 = b_1/\ell_{11}$
- $y_2 = (b_2 - \ell_{21}y_1)/\ell_{22}$
- .....

# 求解方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

矩阵非奇异，等价于  $\ell_{ii} \neq 0, i = 1, \dots, n$

- $y_1 = b_1 / \ell_{11}$

- $y_2 = (b_2 - \ell_{21}y_1) / \ell_{22}$

- .....

- $$y_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \ell_{ij}y_j}{\ell_{ii}}$$

# 前代法

- 前述方法称为前代法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法



# 前代法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 前述方法称为前代法
- 实现时为了节省存储空间，可以把 $y_i$ 放在 $b_i$ 所用的存储单元中

# 前代法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 前述方法称为前代法
- 实现时为了节省存贮空间，可以把 $y_i$ 放在 $b_i$ 所用的存贮单元中
- 具体实现时可以在算出 $y_i$ 时，马上从后面各项 $b_i$ 中减去相应的量

# 前代法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 前述方法称为前代法
- 实现时为了节省存贮空间，可以把 $y_i$ 放在 $b_i$ 所用的存贮单元中
- 具体实现时可以在算出 $y_i$ 时，马上从后面各项 $b_i$ 中减去相应的量
- 运算量：

$$\sum_{i=1}^n (2i - 1) = n^2$$

# 上三角形方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

考虑上三角形方程组  $Ux = y$ , 其中  $y = (y_1, \dots, y_n)^T$  已知,  $x = (x_1, \dots, x_n)^T$  未知, 而系数阵  $U$  是已知的非奇异上三角阵, 即

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

# 解法：回代法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

从方程组的最后一个方程出发依次求解

$$x_i = \frac{y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij}x_j}{u_{ii}}, i = n, n-1, \dots, 1$$

- 算法的运算量还是 $n^2$

# 一般方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

对于一般的线性方程组  $Ax = b$ , 如果能把  $A$  分解为  $A = LU$ , 那么

- 用前代法求解  $Ly = b$

# 一般方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

对于一般的线性方程组  $Ax = b$ , 如果能把  $A$  分解为  $A = LU$ , 那么

- 用前代法求解  $Ly = b$
- 用回代法求解  $Ux = y$

# 一般方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

对于一般的线性方程组  $Ax = b$ , 如果能  
把  $A$  分解为  $A = LU$ , 那么

- 用前代法求解  $Ly = b$
- 用回代法求解  $Ux = y$
- 所以关键是如何进行分解



# 初等变换

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

期望通过一系列初等变换把 $A$ 约化为上三角阵，而这些变换的乘积是一个下三角阵，即

- 对于一个任意给定的向量 $x \in \mathbb{R}^n$ ，找一个尽可能简单的下三角阵，使 $x$ 经这一矩阵作用之后的第 $k + 1$ 至 $n$ 个分量都是零

# 初等变换

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

期望通过一系列初等变换把 $A$ 约化为上三角阵，而这些变换的乘积是一个下三角阵，即

- 对于一个任意给定的向量 $x \in \mathbb{R}^n$ ，找一个尽可能简单的下三角阵，使 $x$ 经这一矩阵作用之后的第 $k + 1$ 至 $n$ 个分量都是零
- 下三角阵的乘积仍是下三角阵

# Gauss变换

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

Gauss变换矩阵定义为

$$L_k = I - \ell_k \mathbf{e}_k^T,$$

其中

$$\ell_k = (0, 0, \dots, 0, \ell_{k+1,k}, \dots, \ell_{nk})^T$$

称为Gauss向量

# Gauss变换

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -\ell_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -\ell_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}$$

# 消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

由于

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

所以取

$$\ell_{ik} = \frac{x_i}{x_k}, \quad i = k+1, \dots, n$$

即有

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

# Gauss变换矩阵的性质

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 逆容易计算：由于 $\mathbf{e}_k^T \ell_k = 0$ , 所以

$$(I - \ell_k \mathbf{e}_k^T)(I + \ell_k \mathbf{e}_k^T) = I,$$

从而

$$L_k^{-1} = I + \ell_k \mathbf{e}_k^T$$

# Gauss变换矩阵的性质

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 逆容易计算：由于 $\mathbf{e}_k^T \ell_k = 0$ , 所以

$$(I - \ell_k \mathbf{e}_k^T)(I + \ell_k \mathbf{e}_k^T) = I,$$

从而

$$L_k^{-1} = I + \ell_k \mathbf{e}_k^T$$

- Gauss变换作用于矩阵 $A$ 相当于对矩阵进行秩1的修正

$$L_k A = A - \ell_k (\mathbf{e}_k^T A)$$

# 三角分解的计算

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

Mathematica 1.1.3.nb

- 对一般 $n$ 阶矩阵 $A$ , 在一定的条件下, 可以得到 $n - 1$ 个Gauss变换 $L_1, \dots, L_{n-1}$ , 使得 $L_{n-1} \cdots L_1 A$ 为上三角矩阵



# 三角分解的计算

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

Mathematica 1.1.3.nb

- 对一般 $n$ 阶矩阵 $A$ , 在一定的条件下, 可以得到 $n - 1$ 个Gauss变换 $L_1, \dots, L_{n-1}$ , 使得 $L_{n-1} \cdots L_1 A$ 为上三角矩阵
- 这里的条件就是第 $k$ 步中对角元素不能是零

# 三角分解的计算

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

Mathematica 1.1.3.nb

- 对一般 $n$ 阶矩阵 $A$ , 在一定的条件下, 可以得到 $n - 1$ 个Gauss变换 $L_1, \dots, L_{n-1}$ , 使得 $L_{n-1} \cdots L_1 A$ 为上三角矩阵
- 这里的条件就是第 $k$ 步中对角元素不能是零
- $L_{n-1} \cdots L_1$ 是一个对角元全为1的下三角矩阵

# 三角分解的计算

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

令

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

则  $A = LU$  就是所期望的三角分解 (LU 分解), 因为  $L$  也是一个单位下三角阵, 而且

$$\begin{aligned} L &= L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} \\ &= (I + \ell_1 \mathbf{e}_1^T) \cdots (I + \ell_{n-1} \mathbf{e}_{n-1}^T) \\ &= I + \ell_1 \mathbf{e}_1^T + \cdots + \ell_{n-1} \mathbf{e}_n^T \end{aligned}$$

# Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 上述方法称为Gauss消去法

# Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 上述方法称为Gauss消去法
- 具体实现时，可以在原有的矩阵上存贮中间矩阵和最终的矩阵 $U$

# Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 上述方法称为Gauss消去法
- 具体实现时，可以在原有的矩阵上存贮中间矩阵和最终的矩阵 $U$
- 同时，可以利用 $A$ 的下三角部分存贮 $L$

# Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 上述方法称为Gauss消去法
- 具体实现时，可以在原有的矩阵上存贮中间矩阵和最终的矩阵 $U$
- 同时，可以利用 $A$ 的下三角部分存贮 $L$
- 运算量： $\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$

# 主元

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 称Gauss消去过程中的对角元 $a_{kk}^{(k-1)}$ 为主元



# 主元

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 称Gauss消去过程中的对角元 $a_{kk}^{(k-1)}$ 为主元
- 当且仅当所有的主元均不为零时，上述算法才能进行到底

# 主元

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 称Gauss消去过程中的对角元 $a_{kk}^{(k-1)}$ 为**主元**
- 当且仅当所有的主元均不为零时，上述算法才能进行到底

## 定理

所有主元均不为零当且仅当 $A$ 的各阶顺序主子式均不为零

# 三角分解存在定理

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

## 定理

若 $A$ 的各阶顺序主子式均不为零，则存在唯一的单位下三角阵 $L$ 和上三角阵 $U$ ，使得

$$A = LU$$

# 三角分解存在定理

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

## 定理

若 $A$ 的各阶顺序主子式均不为零，则存在唯一的单位下三角阵 $L$ 和上三角阵 $U$ ，使得

$$A = LU$$

- 唯一性证明需要注意

# 三角分解存在定理

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

## 定理

若 $A$ 的各阶顺序主子式均不为零，则存在唯一的单位下三角阵 $L$ 和上三角阵 $U$ ，使得

$$A = LU$$

- 唯一性证明需要注意
- 若 $A$ 的前 $n - 1$ 个顺序主子式非零，但 $A$ 奇异，定理仍成立：分块证明

# 非奇异矩阵

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 只要 $A$ 非奇异，那么方程组 $Ax = b$ 就有唯一解

# 非奇异矩阵

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 只要 $A$ 非奇异，那么方程组 $Ax = b$ 就有唯一解
- $A$ 非奇异并不能保证其各阶顺序主子式均不为零

# 非奇异矩阵

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 只要 $A$ 非奇异, 那么方程组 $Ax = b$ 就有唯一解
- $A$ 非奇异并不能保证其各阶顺序主子式均不为零
- 从而 $A$ 非奇异并不能保证Gauss消去过程的完整进行



# 非奇异矩阵

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 只要 $A$ 非奇异, 那么方程组 $Ax = b$ 就有唯一解
- $A$ 非奇异并不能保证其各阶顺序主子式均不为零
- 从而 $A$ 非奇异并不能保证Gauss消去过程的完整进行
- 主元非零, 但很小, 也会导致一些问题。Mathematica1.2.1.nb

# 例

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 取  $A = \begin{pmatrix} 1/1000 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ ,  $b = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$

# 例

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 取  $A = \begin{pmatrix} 1/1000 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ ,  $b = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$
- 方程  $Ax = b$  精确解为

$$x = \begin{pmatrix} \frac{500}{499} \\ \frac{997}{998} \end{pmatrix}$$

# 例

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

设计算精度只有三位浮点数，即第一个有效数字开始共三位。

- 矩阵  $A = \begin{pmatrix} 1.00 \times 10^{-3} & 1.00 \\ 1.00 & 2.00 \end{pmatrix}$ ,  
 $b = \begin{pmatrix} 1.00 \\ 3.00 \end{pmatrix}$

# 例

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

设计算精度只有三位浮点数，即第一个有效数字开始共三位。

- 矩阵  $A = \begin{pmatrix} 1.00 \times 10^{-3} & 1.00 \\ 1.00 & 2.00 \end{pmatrix}$ ,

$$b = \begin{pmatrix} 1.00 \\ 3.00 \end{pmatrix}$$

- 方程  $Ax = b$  精确解为

$$x = \begin{pmatrix} 1.00 \\ 1.00 \end{pmatrix}$$

# 实际计算

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

$$\bullet L = \begin{pmatrix} 1.00 & 0.00 \\ 1.00 \times 10^3 & 1.00 \end{pmatrix}$$

# 实际计算

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- $L = \begin{pmatrix} 1.00 & 0.00 \\ 1.00 \times 10^3 & 1.00 \end{pmatrix}$
- $L^{-1}A = \begin{pmatrix} 1.00 \times 10^{-3} & 1.00 \\ 0 & -1.00 \times 10^3 \end{pmatrix}$

# 实际计算

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- $L = \begin{pmatrix} 1.00 & 0.00 \\ 1.00 \times 10^3 & 1.00 \end{pmatrix}$
- $L^{-1}A = \begin{pmatrix} 1.00 \times 10^{-3} & 1.00 \\ 0 & -1.00 \times 10^3 \end{pmatrix}$
- 这里注意在三位精度  
下  $1.00 \times 10^3 - 3.00 = 1.00 \times 10^3$



# 求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 由  $Ly = b$  得到  $y = (1.00, -1.00 \times 10^3)^T$

# 求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 由  $Ly = b$  得到  $y = (1.00, -1.00 \times 10^3)^T$
- 由  $Ux = y$  得到  $x = (0.00, 1.00)^T$

# 求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 由  $Ly = b$  得到  $y = (1.00, -1.00 \times 10^3)^T$
- 由  $Ux = y$  得到  $x = (0.00, 1.00)^T$
- 与精确解的近似值  $(1.00, 1.00)^T$  相差甚远

# 解决方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 问题主要是由于小主元引起的，使得运算时发生精度丢失

# 解决方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 问题主要是由于小主元引起的，使得运算时发生精度丢失
- 交换矩阵的两行，即交换两个方程的顺序，重复上述过程，得到近似解为 $(1.00, 1.00)^T$

# 解决方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 问题主要是由于小主元引起的，使得运算时发生精度丢失
- 交换矩阵的两行，即交换两个方程的顺序，重复上述过程，得到近似解为 $(1.00, 1.00)^T$
- 交换矩阵的两列，这时相当于交换两个变量的顺序

# 初等置换矩阵

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

## 定义矩阵

$$I_{pq} = (e_1, \dots, e_{p-1}, e_q, e_{p+1}, \dots, \\ e_{q-1}, e_p, e_{q+1}, \dots, e_n)$$

用这个矩阵左乘 $A$ 交换第 $p$ 行和第 $q$ 行，右乘 $A$ 交换第 $p$ 列和第 $q$ 列

# 行列交换与Gauss消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 假定消去过程已进行了 $k-1$ 步，即

$$\begin{aligned} A^{(k-1)} &= L_{k-1} P_{k-1} \cdots L_1 P_1 A Q_1 \cdots Q_{k-1} \\ &= \begin{pmatrix} A_{11}^{(k-1)} & A_{12}^{(k-1)} \\ 0 & A_{22}^{(k-1)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

其中 $L_i$ 为Gauss变换， $P_i$ ,  $Q_i$ 为初等置换矩阵， $A_{11}^{(k-1)}$ 为 $k-1$ 阶上三角阵



# 行列交换与Gauss消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 那么在第 $k$ 步我们先在 $A_{22}^{(k-1)}$ 中选择元素 $a_{pq}^{(k-1)}$ ，其模在所有元素中最大

# 行列交换与Gauss消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 那么在第 $k$ 步我们先在 $A_{22}^{(k-1)}$ 中选择元素 $a_{pq}^{(k-1)}$ ，其模在所有元素中最大
  - 如果 $a_{pq}^{(k-1)} = 0$ ，则 $A$ 为奇异阵

# 行列交换与Gauss消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 那么在第 $k$ 步我们先在 $A_{22}^{(k-1)}$ 中选择元素 $a_{pq}^{(k-1)}$ ，其模在所有元素中最大
  - 如果 $a_{pq}^{(k-1)} = 0$ ，则 $A$ 为奇异阵
- 交换 $A^{(k-1)}$ 的 $k, p$ 行与 $k, q$ 列，相当于左、右乘 $l_{kp}$ 和 $l_{kq}$

# 行列交换与Gauss消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 那么在第 $k$ 步我们先在 $A_{22}^{(k-1)}$ 中选择元素 $a_{pq}^{(k-1)}$ ，其模在所有元素中最大
  - 如果 $a_{pq}^{(k-1)} = 0$ ，则 $A$ 为奇异阵
- 交换 $A^{(k-1)}$ 的 $k, p$ 行与 $k, q$ 列，相当于左、右乘 $l_{kp}$ 和 $l_{kq}$
- 然后进行Gauss变换

# 全主元Gauss消去法

- 上述消去过程称为全主元Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

# 全主元Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 上述消去过程称为全主元Gauss消去法
- 得到 $(L_r P_r \cdots L_1 P_1)A(Q_1 \cdots Q_r) = U$ 为上三角阵

# 全主元Gauss消去法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 上述消去过程称为全主元Gauss消去法
- 得到 $(L_r P_r \cdots L_1 P_1)A(Q_1 \cdots Q_r) = U$ 为上三角阵
- 记

$$Q = Q_1 \cdots Q_r$$

$$P = P_r \cdots P_1$$

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

则 $PAQ = LU$

# $L$ 是单位下三角阵

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

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法



# $L$ 是单位下三角阵

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- $L = P_r \cdots P_2 L_1^{-1} P_2 L_2^{-1} \cdots P_r L_r^{-1}$
- 记  $L^{(1)} = L_1^{-1}$ ,  $L^{(k)} = P_k L^{(k-1)} P_k L_k^{-1}$

# $L$ 是单位下三角阵

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- $L = P_r \cdots P_2 L_1^{-1} P_2 L_2^{-1} \cdots P_r L_r^{-1}$
- 记  $L^{(1)} = L_1^{-1}$ ,  $L^{(k)} = P_k L^{(k-1)} P_k L_k^{-1}$
- 归纳证明  $L^{(k)}$  具有形式

$$L^{(k)} = \begin{pmatrix} L_{11}^{(k)} & 0 \\ L_{21}^{(k)} & I_{n-k} \end{pmatrix}$$

其中  $L_{11}^{(k)}$  是所有元素之模均不大于1的  $k$  阶单位下三角阵,  $L_{21}^{(k)}$  是所有元素模均不大于1的  $(n-k) \times k$  阶矩阵

# 归纳证明之关键

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- $P_k L^{(k-1)} P_k$  是对  $L^{(k-1)}$  进行第  $k, p$  行和  $k, p$  列 ( $k \leq p$ ) 交换, 因此只有  $L_{21}^{(k-1)}$  交换了两行——类似于魔方中的局部交换技术

# 归纳证明之关键

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- $P_k L^{(k-1)} P_k$  是对  $L^{(k-1)}$  进行第  $k, p$  行和  $k, p$  列 ( $k \leq p$ ) 交换, 因此只有  $L_{21}^{(k-1)}$  交换了两行——类似于魔方中的局部交换技术
- 再右乘  $L_k^{-1}$  则使得  $I_{n-k+1}$  的第一列发生变化

# 全主元三角分解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 如前所得的  $PAQ = LU$  称为全主元三角分解

# 全主元三角分解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 如前所得的 $PAQ = LU$ 称为全主元三角分解

## 定理

对于 $n$ 阶方阵, 存在排列矩阵 $P, Q$ 以及单位下三角阵 $L$ 和上三角阵 $U$ 使得 $PAQ = LU$ , 其中 $L$ 的所有元素模均不大于1,  $U$ 的非零对角元的个数恰好等于 $A$ 的秩

# 选主元的运算量

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 当 $A$ 非奇异时，选主元需要进行比较的次数

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

# 选主元的运算量

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 当 $A$ 非奇异时，选主元需要进行比较的次数

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

- 这个计算量几乎是进行Gauss消去的计算量的一半



# 方程组的求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 设经全主元Gauss消去后得到 $PAQ = LU$ , 那么 $PA = LUQ^{-1}$

# 方程组的求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 设经全主元Gauss消去后得到 $PAQ = LU$ , 那么 $PA = LUQ^{-1}$
- 求解 $Ly = Pb$ 得到 $y$

# 方程组的求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 设经全主元Gauss消去后得到  $PAQ = LU$ , 那么  $PA = LUQ^{-1}$
- 求解  $Ly = Pb$  得到  $y$
- 求解  $Uz = y$  得到  $z$

# 方程组的求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 设经全主元Gauss消去后得到  $PAQ = LU$ , 那么  $PA = LUQ^{-1}$
- 求解  $Ly = Pb$  得到  $y$
- 求解  $Uz = y$  得到  $z$
- 计算  $x = Qz$  得到解  $x$ , 这里即根据记录的交换指标对  $z$  进行元素交换即得到  $x$

# 列主元消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在第 $k$ 步中只在 $A_{22}^{(k-1)}$ 的第 $k$ 列的元素中寻找模最大的元素，如此得到 $PA = LU$ , 称为列主元三角分解

# 列主元消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在第 $k$ 步中只在 $A_{22}^{(k-1)}$ 的第 $k$ 列的元素中寻找模最大的元素，如此得到 $PA = LU$ , 称为列主元三角分解
- 这里 $P$ 的元素模不一定全不大于1

# 列主元消去

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在第 $k$ 步中只在 $A_{22}^{(k-1)}$ 的第 $k$ 列的元素中寻找模最大的元素，如此得到 $PA = LU$ , 称为列主元三角分解
- 这里 $P$ 的元素模不一定全不大于1
- 例子：C代码example1\_2\_2()

# 对称正定线性方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 对一般的方阵，为了消除LU分解的局限性和误差的积累，我们采用选取主元的方法



# 对称正定线性方程组

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 对一般的方阵，为了消除LU分解的局限性和误差的积累，我们采用选取主元的方法
- 对于对称正定矩阵而言，不必要选取主元

# Cholesky分解定理

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

## 定理

若 $A$ 为对称正定的，那么存在唯一的对角元均为正数的下三角阵 $L$ 满足

$$A = LL^T$$

上式称为Cholesky分解，  
 $L$ 称为 $A$ 的Cholesky因子

# 证明

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 对称正定 $\implies$ 不需要进行主元选择的Gauss消去法可行 $\implies$ 存在单位下三角阵 $\tilde{L}$ 和上三角阵 $U$ , 使得 $A = \tilde{L}U$

# 证明

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 对称正定 $\implies$ 不需要进行主元选择的Gauss消去法可行 $\implies$ 存在单位下三角阵 $\tilde{L}$ 和上三角阵 $U$ , 使得 $A = \tilde{L}U$
- 用 $U$ 的对角元构造矩阵 $D$ ,  $\tilde{U} = D^{-1}U$ , 则

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

# 证明

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 对称正定 $\implies$ 不需要进行主元选择的Gauss消去法可行 $\implies$ 存在单位下三角阵 $\tilde{L}$ 和上三角阵 $U$ , 使得 $A = \tilde{L}U$
- 用 $U$ 的对角元构造矩阵 $D$ ,  $\tilde{U} = D^{-1}U$ , 则

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

- 我们可有

$$\tilde{L}^T \tilde{U}^{-1} = D^{-1} \tilde{U}^{-T} \tilde{L} D$$

# 证明

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

$$\tilde{L}^T \tilde{U}^{-1} = D^{-1} \tilde{U}^{-T} \tilde{L} D$$

- $\tilde{L}^T \tilde{U}^{-1}$  是单位上三角阵

# 证明

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

$$\tilde{L}^T \tilde{U}^{-1} = D^{-1} \tilde{U}^{-T} \tilde{L} D$$

- $\tilde{L}^T \tilde{U}^{-1}$  是单位上三角阵
- $D^{-1} \tilde{U}^{-T} \tilde{L} D$  是单位下三角阵

# 证明

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

$$\tilde{L}^T \tilde{U}^{-1} = D^{-1} \tilde{U}^{-T} \tilde{L} D$$

- $\tilde{L}^T \tilde{U}^{-1}$  是单位上三角阵
- $D^{-1} \tilde{U}^{-T} \tilde{L} D$  是单位下三角阵
- 所以两者都是单位阵, 即  $\tilde{U} = \tilde{L}^T$



# 分解的构造

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 从而有  $A = \tilde{L}D\tilde{L}^T$ , 而且  $D$  的对角元全为正数

# 分解的构造

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 从而有  $A = \tilde{L}D\tilde{L}^T$ , 而且  $D$  的对角元全为正数
- 取  $L = \tilde{L} \operatorname{diag}(\sqrt{u_{11}}, \dots, \sqrt{u_{nn}})$ , 则有

$$A = LL^T$$

# 分解的构造

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 从而有  $A = \tilde{L}D\tilde{L}^T$ , 而且  $D$  的对角元全为正数
- 取  $L = \tilde{L} \operatorname{diag}(\sqrt{u_{11}}, \dots, \sqrt{u_{nn}})$ , 则有

$$A = LL^T$$

- 类似可证分解的唯一性

# 方程组的求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 计算 $A$ 的Cholesky分解 $A = LL^T$

# 方程组的求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 计算 $A$ 的Cholesky分解 $A = LL^T$
- 求解 $Ly = b$ 得 $y$

# 方程组的求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 计算 $A$ 的Cholesky分解 $A = LL^T$
- 求解 $Ly = b$ 得 $y$
- 求解 $L^Tx = y$ 得 $x$

# 平方根法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在计算分解时，可不必按前方法进行，而是采用待定系数法

# 平方根法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在计算分解时，可不必按前方法进行，而是采用待定系数法
- 待定下三角阵  $L = (\ell_{ij})$ ，比较  $A = LL^T$  两边对应的元素，可得

$$a_{ij} = \sum_{p=1}^j \ell_{ip} \ell_{jp}, \quad 1 \leq j \leq i \leq n$$



# 平方根法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在计算分解时，可不必按前方法进行，而是采用待定系数法
- 待定下三角阵  $L = (l_{ij})$ ，比较  $A = LL^T$  两边对应的元素，可得

$$a_{ij} = \sum_{p=1}^j l_{ip}l_{jp}, \quad 1 \leq j \leq i \leq n$$

- 由  $a_{11} = l_{11}^2$  得  $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$

# 平方根法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在计算分解时，可不必按前方法进行，而是采用待定系数法
- 待定下三角阵  $L = (\ell_{ij})$ ，比较  $A = LL^T$  两边对应的元素，可得

$$a_{ij} = \sum_{p=1}^j \ell_{ip} \ell_{jp}, \quad 1 \leq j \leq i \leq n$$

- 由  $a_{11} = \ell_{11}^2$  得  $\ell_{11} = \sqrt{a_{11}}$
- 由  $a_{i1} = \ell_{11} \ell_{i1}$  得  $\ell_{i1} = a_{i1} / \ell_{11}, i > 1$

# 平方根法

- 设已算出 $L$ 的前 $k - 1$ 列元素

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

# 平方根法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 设已算出 $L$ 的前 $k-1$ 列元素
- 由 $a_{kk} = \sum_{p=1}^k \ell_{kp}^2$ 得到

$$\ell_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{kp}^2}$$

# 平方根法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 设已算出 $L$ 的前 $k-1$ 列元素
- 由 $a_{kk} = \sum_{p=1}^k \ell_{kp}^2$ 得到

$$\ell_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{kp}^2}$$

- 再由 $a_{ik} = \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{ip} \ell_{kp} + \ell_{ik} \ell_{kk}$ 得到

$$\ell_{ij} = \left( a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{ip} \ell_{kp} \right) / \ell_{kk}$$

# 注解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 也可以按行来进行计算

# 注解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 也可以按行来进行计算
- 可以在 $A$ 中存贮新计算出来的 $L$

# 注解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 也可以按行来进行计算
- 可以在 $A$ 中存贮新计算出来的 $L$
- 上述方法的运算量是 $n^3/3$ , 是Gauss消去法的一半



# $LDL^T$ 分解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在Cholesky分解中用到了开方运算

# $LDL^T$ 分解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在Cholesky分解中用到了开方运算
- 为了避免开方，可以计算 $A$ 的如下形式分解

$$A = LDL^T$$

其中 $L$ 是单位下三角阵， $D$ 是对角元均为正数的对角阵

# $LDL^T$ 分解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 在Cholesky分解中用到了开方运算
- 为了避免开方，可以计算 $A$ 的如下形式分解

$$A = LDL^T$$

其中 $L$ 是单位下三角阵， $D$ 是对角元均为正数的对角阵

- 这是Cholesky分解的变形

# 改进的平方根方法

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

比较  $A = LDL^T$  的对应元素, 我们有

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

则对  $j = 1, \dots, n$ ,

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

$$\ell_{ij} = \left( a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{ik} v_k \right) / d_j, \quad i = j+1, \dots, n$$

# 注解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 实际计算时，可以把 $L$ 的严格下三角元素和 $D$ 的对角元存储在 $A$ 的对应位置上

# 注解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 实际计算时，可以把 $L$ 的严格下三角元素和 $D$ 的对角元存储在 $A$ 的对应位置上
- 算法运算量也是 $n^3/3$ , 而且不需要开方运算

# 方程组求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 求得 $LDL^T$ 分解后，再只需求解

$$Ly = b, \quad DL^Tx = y$$

就可以得到方程组的解

# 方程组求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 求得 $LDL^T$ 分解后，再只需求解

$$Ly = b, \quad DL^Tx = y$$

就可以得到方程组的解

- 如此方法是Gauss消去法的一半，而且不需要选主元



# 方程组求解

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- 求得 $LDL^T$ 分解后, 再只需求解

$$Ly = b, \quad DL^Tx = y$$

就可以得到方程组的解

- 如此方法是Gauss消去法的一半, 而且不需要选主元
- 由构造过程可知 $|\ell_{ij}| \leq \sqrt{a_{ii}}$ , 因此分解中的量受控的, 从而计算过程稳定

# 例

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- C程序example1\_3\_1()

# 例

线性方程组的直接解  
法

邓建松

三角形方程组

选主元三角分解

平方根法

- C程序example1\_3\_1()
- C程序example1\_3\_2()