线性方程组的直接解法

邓建松

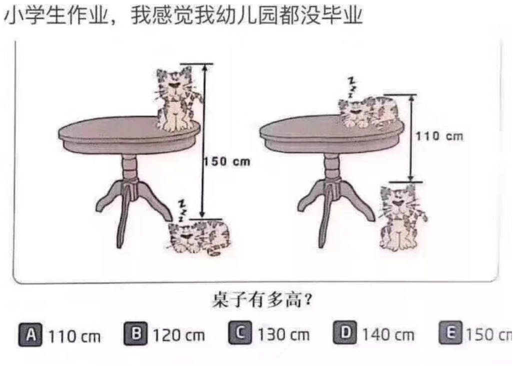
线性方程组

- 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

- 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
150 cm
110 cm
桌子有多高？
A 110 cm
B 120 cm
C 130 cm
D 140 cm
E 150 cm

求解方法

- 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

- 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

- 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

- Gauss消去法是一类最基本的直接求解方法

Gauss消去法

- 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

- 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

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

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

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

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

求解方法

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

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

求解方法

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

- $y_1 = b_1/\ell_{11}$
- $y_2 = (b_2 - \ell_{21}y_1)/\ell_{22}$
- ……
- $y_i = \dfrac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \ell_{ij}y_j}{\ell_{ii}}$

前代法

- 前述方法称为**前代法**

前代法

- 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

前代法

- 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

- 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

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

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

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

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

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

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

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

Gauss变换矩阵定义为

$$L_k = I - \ell_k e_k^T,$$

其中

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

称为**Gauss向量**

Gauss变换

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

消去

由于

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

所以取

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

即有

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

Gauss变换矩阵的性质

- 逆容易计算：由于$e_k^T \ell_k = 0$, 所以

$$(I - \ell_k e_k^T)(I + \ell_k e_k^T) = I,$$

从而

$$L_k^{-1} = I + \ell_k e_k^T$$

Gauss变换矩阵的性质

- 逆容易计算：由于$e_k^T\ell_k = 0$, 所以
$$(I - \ell_k e_k^T)(I + \ell_k e_k^T) = I,$$
从而
$$L_k^{-1} = I + \ell_k e_k^T$$
- Gauss变换作用于矩阵A相当于对矩阵进行秩1的修正
$$L_k A = A - \ell_k (e_k^T A)$$

三角分解的计算

`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$L_1, \ldots, L_{n-1}$, 使得$L_{n-1} \cdots L_1 A$为上三角矩阵

三角分解的计算

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$L_1, \ldots, L_{n-1}$, 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

`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$L_1, \ldots, L_{n-1}$, 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

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

$$\begin{aligned}L&=L_1^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}\\&=(I+\ell_1 e_1^T)\cdots(I+\ell_{n-1}e_{n-1}^T)\\&=I+\ell_1 e_1^T+\cdots+\ell_{n-1}e_n^T\end{aligned}$$

Gauss消去法

- 上述方法称为Gauss消去法

Gauss消去法

- 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

- 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

- 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

- 称Gauss消去过程中的对角元$a_{kk}^{(k-1)}$为主元

主元

- 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

- 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

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

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

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

- 只要A非奇异，那么方程组$Ax = b$就有唯一解

非奇异矩阵

- 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

- 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

- 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

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

例

- 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

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

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

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

实际计算

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

实际计算

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

求解

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

求解

- 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

- 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

- 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

- 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

- 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

定义矩阵

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

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

- 假定消去过程已进行了$k-1$步，即

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

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

- 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

- 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

- 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I_{kp}和I_{kq}

行列交换与Gauss消去

- 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I_{kp}和I_{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

全主元Gauss消去法

- 上述消去过程称为全主元Gauss消去法
- 得到$(L_rP_r\cdots L_1P_1)A(Q_1\cdots Q_r)=U$为上三角阵

全主元Gauss消去法

- 上述消去过程称为全主元Gauss消去法
- 得到$(L_rP_r\cdots L_1P_1)A(Q_1\cdots Q_r)=U$为上三角阵
- 记

$$Q=Q_1\cdots Q_r$$
$$P=P_r\cdots P_1$$
$$L=P(L_rP_r\cdots L_1P_1)^{-1}$$

则$PAQ=LU$

L是单位下三角阵

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

L是单位下三角阵

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

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

- $P_k L^{(k-1)} P_k$是对$L^{(k-1)}$进行第k, p行和k, p列$(k \leqslant p)$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

- $P_k L^{(k-1)} P_k$是对$L^{(k-1)}$进行第k, p行和k, p列($k \leqslant p$)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l_{n-k+1}的第一列发生变化

全主元三角分解

- 如前所得的$PAQ = LU$称为全主元三角分解

全主元三角分解

- 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

- 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

- 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

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

方程组的求解

- 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

- 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

- 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

- 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

- 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L的元素模不一定全不大于1

列主元消去

- 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L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

- 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

- 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

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

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

证明

- 对称正定$\Longrightarrow$不需要进行主元选择的Gauss消去法可行$\Longrightarrow$ 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

- 对称正定$\Longrightarrow$不需要进行主元选择的Gauss消去法可行$\Longrightarrow$ 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

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

- $\tilde{L}^T\tilde{U}^{-1}$是单位上三角阵

证明

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

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

证明

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

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

- 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

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

$$A=LL^T$$

分解的构造

- 从而有$A=\tilde{L}D\tilde{L}^T$, 而且D的对角元全为正数
- 取$L=\tilde{L}\,\mathrm{diag}(\sqrt{u_{11}},\ldots,\sqrt{u_{nn}})$, 则有
$$A=LL^T$$
- 类似可证分解的唯一性

方程组的求解

- 计算A的Cholesky分解$A = LL^T$

方程组的求解

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

方程组的求解

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

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

- 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

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

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

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

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

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

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

- 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

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

- 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

- 也可以按行来进行计算

注解

- 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

- 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

- 在Cholesky分解中用到了开方运算

LDL^T分解

- 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

- 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

比较$A = LDL^T$的对应元素，我们有

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

则对$j = 1, \ldots,$,

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

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

注解

- 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

- 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

- 求得LDL^T分解后，再只需求解

$$Ly = b, \quad DL^T x = y$$

就可以得到方程组的解

方程组求解

- 求得LDL^T分解后，再只需求解

$$Ly = b, \quad DL^T x = y$$

  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

- 求得LDL^T分解后，再只需求解

$$Ly = b, \quad DL^T x = y$$

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$|\ell_{ij}| \leqslant \sqrt{a_{ii}}$，因此分解中的量受控的，从而计算过程稳定

例

- C程序example1_3_1()

例

- C程序example1_3_1()
- C程序example1_3_2()