

解线性方程组的直接解法

- 自然科学和工程技术中很多问题的解决常常归结为解线性方程组。例如，三次样条插值，常规基函数的多项式插值，最小二乘法求实验数据的曲线曲面拟合问题等。

根据考虑因素的不同，可以将线性方程组作如下分类：

■按系数矩阵中零元素的个数，可分为：

- 稠密线性方程组；
- 稀疏线性方程组。约占实际问题所产生方程组的80%。

■按系数矩阵中未知量的个数，可分为：

- 高阶线性方程组；如含1000个未知量的方程组
- 低阶线性方程组。

■按系数矩阵的形状，可分为：

- 三角形线性方程组；
- 三对角线性方程组。如三次样条插值所产生的方程组；
- 对称正定方程组。

线性方程组的解法，一般有两类：

■ **直接法** 直接法就是通过有限步的算术运算，可以求得线性方程组的精确解的方法。但是在实际计算中，由于存在舍入误差，这种方法也只能求得线性方程组的近似解。这类方法是求解**低阶稠密矩阵方程组及某些大型稀疏方程组**（例如，带状方程组）的有效方法。

■ **迭代法** 迭代法就是用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解的方法。迭代法是解**大型稀疏矩阵方程组**的重要方法。

对于解线性方程组的求解，消去法是一种简单而有效的方法。其基本思想是：用逐步消去未知数的方法，把原方程组 $Ax = b$ 化为与其等价的三角形方程组，而求解三角形方程组只需回代即可。

由线性代数可知，上述过程就是只使用行得初等变换将原方程组系数矩阵化为上三角矩阵，从而将问题转化为求解简单方程组的问题。

引例：用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 & (1) \\ 4x_2 - x_3 = 5 & (2) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (3) \end{cases}$$

解 第一步，将方程 (1) 乘上 **-2** 加到方程 (3) 上去，消去 (3) 中的未知数 x_1 ，得到

$$-4x_2 - x_3 = -11 \quad (4)$$

第二步，将方程 (2) 加到方程 (4) 上去，消去方程 (4) 中的未知数 x_2 ，得到与原方程组等价的三角形方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ 4x_2 - x_3 = 5 \\ -2x_3 = -6 \end{cases} \quad \longrightarrow \quad x^* = (1, 2, 3)^T$$

显然此方程组是容易求解的。

上述过程相当于

$$(A|b) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 6 \\ 0 & 4 & -1 & \vdots & 5 \\ 2 & -2 & 1 & \vdots & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{(-2) \times r_1 + r_3 \rightarrow r_3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 6 \\ 0 & 4 & -1 & \vdots & 5 \\ 0 & -4 & -1 & \vdots & -11 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 + r_3 \rightarrow r_3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 6 \\ 0 & 4 & -1 & \vdots & 5 \\ 0 & 0 & -2 & \vdots & -6 \end{bmatrix}$$

其中 r_i 为矩阵的第 i 行。

2.1 高斯消去法

设有线性方程组

[illegible]

其矩阵形式

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} & \cdots & \mathbf{a}_{1n} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} & \cdots & \mathbf{a}_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{a}_{m1} & \mathbf{a}_{m2} & \cdots & \mathbf{a}_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{b}_m \end{pmatrix}$$

简记为 $Ax = b$.

下面讨论求解一般线性方程组的高斯消去法。

将 (2.1) 记为 $A^{(1)}x = b^{(1)}$, 其中

$$A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)}) = (a_{ij}), \quad b^{(1)} = b.$$

(1) 第1步 ($k=1$). 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 首先计算乘数

$$m_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)} \quad (i = 2, 3, \dots, m)$$

用 $-m_{i1}$ 乘 (2.1) 的第一个方程, 加到第 i 个方程上,
消去 (2.1) 中从第2个方程到第 m 个方程中的未知数
 x_1 , 得到与 (2.1) 等价的方程组

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{11}^{(1)} & \mathbf{a}_{12}^{(1)} & \cdots & \mathbf{a}_{1n}^{(1)} \\ \mathbf{0} & \mathbf{a}_{22}^{(2)} & \cdots & \mathbf{a}_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{a}_{m2}^{(2)} & \cdots & \mathbf{a}_{mn}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1^{(1)} \\ \mathbf{b}_2^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{b}_m^{(2)} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

简记为 $A^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)}$,

其中 $A^{(2)}, \mathbf{b}^{(2)}$ 的元素计算公式为

$$\begin{cases} \mathbf{a}_{ij}^{(2)} = \mathbf{a}_{ij}^{(1)} - m_{i1}\mathbf{a}_{1j}^{(1)}, & (i = 2, \cdots, m; \quad j = 2, \cdots, n) \\ \mathbf{b}_i^{(2)} = \mathbf{b}_i^{(1)} - m_{i1}\mathbf{b}_1^{(1)}, & (i = 2, \cdots, m) \end{cases}$$

(2) 第 k 次消元 ($k = 1, 2, \dots, s = \min(m-1, n)$).

设上述第1步至第 $k-1$ 步消元过程计算已经完成,
即已计算好与(2.1)等价的方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{mk}^{(k)} & \cdots & a_{mn}^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

简记为 $A^{(k)}x = b^{(k)}$.

设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 计算乘数

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} \quad (i = k + 1, \dots, m)$$

用 $-m_{ik}$ 乘 (2.3) 的第 k 个方程, 加到第 i 个方程。消去从第 $k + 1$ 个方程到第 m 个方程中的未知数 x_k , 得到与 (2.1) 等价的方程组 $A^{(k+1)}x = b^{(k+1)}$ 。

$A^{(k+1)}, b^{(k+1)}$ 元素的计算公式为

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik}a_{kj}^{(k)}, & (i = k + 1, \dots, m; \quad j = k + 1, \dots, n) \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik}b_k^{(k)}, & (i = k + 1, \dots, m) \end{cases} \quad (2.4)$$

(3) 继续上述过程, 且设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0 (k = 1, 2, \dots, s)$, 直到完成第 s 步消元计算。

最后得到与原方程组等价的方程组 $A^{(s+1)}x = b^{(s+1)}$, 其中 $A^{(s+1)}$ 为上梯形。

特别当 $m = n$ 时, 等价的方程组为 $A^{(n)}x = b^{(n)}$, 即

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

由 (2.1) 约化为 (2.5) 的过程称为消元过程。

如果 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是非奇异矩阵, 且 $a_{kk}^{(k)} \neq 0 (k = 1, 2, \dots, n-1)$,

求解三角形方程组 (2.5), 得到求解公式

$$\begin{cases} x_n = b^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\ x_k = (b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k)} x_j) / a_{kk}^{(k)}, (k = n-1, n-2, \dots, 1) \end{cases} \quad (2.6)$$

(2.5) 的求解过程 (2.6) 称为回代。

消元过程中, 若 $a_{kk}^{(k)} = 0$, 如 $a_{11}^{(1)}$. 这时由于 A 为非奇异矩阵, 所以其第一列一定有元素不等于零。

例如 $a_{i_1 1} \neq 0$, 于是可交换两行元素 (即 $r_1 \leftrightarrow r_{i_1}$), 将 $a_{i_1 1}$ 调到 $(1,1)$ 位置, 然后消元过程就可继续了。

定理4 设 $Ax = b$, 其中 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$

(1) 如果 $a_{kk}^{(k)} \neq 0 (k = 1, 2, \dots, n)$, 则可通过高斯消去法将 $Ax = b$ 约化为等价的三角形方程组 (2.5);

(2) 如果 A 为非奇异矩阵, 则可通过高斯消去法将方程组 $Ax = b$ 约化为 (2.5)。

数 $a_{kk}^{(k)}$ 称为约化的**主元素**。

高斯主元素消去法

由高斯消去法知，在消元过程中可能出现 $a_{kk}^{(k)} = 0$ ，这时消去法将无法进行。

即使主元素 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ，但很小时，用其作除数，也会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，最后也使得计算解不可靠。

下面，我们用一个例子来说明小主元的危害性。

例 求解方程组

$$\begin{cases} 0.00001x_1 + x_2 = 1 \\ 2x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

用4位浮点数进行计算。其精确解为

$$x_1 \approx 0.50000125, \quad x_2 \approx 0.999995.$$

解法1 用高斯消去法

$$(A|b) = \left(\begin{array}{ccc|cc} 0.00001 & 1 & 1 & & \\ & 2 & 1 & 2 & \end{array} \right) \quad m_{21} = -2 / 0.00001 = -2 \times 10^5$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 0.00001 & 1 & 1 \\ 0 & 1 - 2 \times 10^5 & 2 - 2 \times 10^5 \end{pmatrix}$$

由此解出

$$x_1 \approx 0, \quad x_2 \approx 1$$

显然严重失真。

其原因是在消元计算时用了小主元0.00001，使得约化后的方程组元素数量级大大增长，再经舍入使得在计算 x_2 时发生了严重的相消情况，因此经消元后得到的三角形方程组就不准确了。

解法2 交换行，避免绝对值小的主元作除数

$$(A|\mathbf{b}) \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 0.00001 & 1 & 1 \end{pmatrix} m_{21} = -0.00001 / 2 = -0.5 \times 10^{-5}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 0 & 1 - 0.5 \times 10^{-5} & 1 - 0.5 \times 10^{-5} \end{pmatrix}$$

由此求得相当好的近似解

$$x_1 = 0.5000, x_2 = 10^1 \times 0.1000.$$

这个例子告诉我们，在采用高斯消去法解方程组时，小主元可能产生麻烦，故应避免采用绝对值小的主元素。

对一般矩阵来说，最好每一步选取系数矩阵(或消元后的低阶矩阵)中绝对值最大的元素作为主元素，以使高斯消去法具有较好的数值稳定性。这就是**全主元素消去法**。该方法选主元时要花费较多机器时间，目前主要使用的是**列主元消去法**。

本节主要介绍列主元消去法，并假定 (2.1) 的系数矩阵 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为非奇异的。并设其增广矩阵为

$$\mathbf{B} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

首先在 A 的第一列中选取绝对值最大的元素作为主元素，即

$$|a_{i_1,1}| = \max_{1 \leq i \leq n} |a_{i,1}| \neq 0$$

然后交换 B 的第1行与第 i_1 行，并经第1次消元计算得

$$(\mathbf{A}|\mathbf{b}) \rightarrow (\mathbf{A}^{(2)}|\mathbf{b}^{(2)})$$

重复上述过程，设已完成第 $k-1$ 步的选主元素，交换

两行及消元计算， $(A|b)$ 约化为

$$(\mathbf{A}^{(k)}|\mathbf{b}^{(k)}) = \left(\begin{array}{cccccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ & a_{21} & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & b_k \\ & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

第 k 步选主元素（在 $A^{(k)}$ 右下角方阵的第1列内选）

即确定 i_k ，使

$$|a_{i_k, k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}| \neq 0$$

交换 $(A^{(k)} | b^{(k)})$ 第 k 行与 i_k 行的元素，再进行消元计算，

最后将原方程组化为

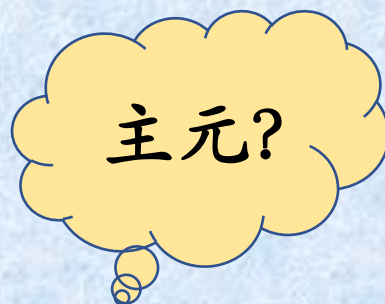
$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

• 例 用列主元消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 1 & r_1 \\ 5x_1 + 4x_2 + 10x_3 = 0 & r_2 \\ 3x_1 - 0.1x_2 + x_3 = 0 & r_3 \end{cases}$$

解：进行行交换 $r_1 \leftrightarrow r_2$ ，再消元得

$$\begin{cases} 5x_1 + 4x_2 + 10x_3 = 0 \\ 1.2x_2 + x_3 = 1 \\ -2.5x_2 - 5x_3 = 2 \end{cases}$$



进行行交换 $r_2 \leftrightarrow r_3$ ，再消元后得

$$\begin{cases} 5x_1 + 4x_2 + 10x_3 = 0 \\ -2.5x_2 - 5x_3 = 2 \\ -1.4x_3 = 1.96 \end{cases} \xrightarrow{\text{回代求解}} \begin{cases} x_3 = -1.4, \\ x_2 = 2, \\ x_1 = 1.2 \end{cases}$$

运算量 由于计算机中乘除运算的时间远远超过加减运算的时间，故估计某种算法的运算量时，往往只估计乘除的次数，而且通常以乘除次数的最高次幂为运算量的数量级。

Step k: 设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ，计算因子 $l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$ ($i = k+1, \dots, n$)

且计算 $\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik} b_k^{(k)} \end{cases}$
($i, j = k+1, \dots, n$)

$(n-k)$ 次

$(n-k)^2$ 次

$(n-k)$ 次

共进行 $n-1$ 步

$(n-k)(n-k+2)$ 次

消元乘除次数:

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)(n-k+2) \\ &= \frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5}{6}n \end{aligned}$$

1次除法

$$x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}$$

$$x_i = \frac{b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}} \quad (i = n-1, \dots, 1)$$

(n-i)次乘法
1次除法

回代乘除次数:

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

又因为

消元乘除次数:

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)(n-k+2) \\ &= \frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5}{6}n \end{aligned}$$

高斯消元法的总乘除次数为
 $\frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{1}{3}n$, 运算量为 $\frac{n^3}{3}$ 级。

2.2 矩阵的三角分解

下面借助矩阵理论进一步对高斯消去法作些分析，从而建立高斯消去法与矩阵因式分解的关系。

设 (2.1) 的系数矩阵 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 的各顺序主子式均不为零。由于对 A 施行行的初等变换相当于用初等矩阵左乘 A ，于是对 (2.1) 施行第一次消元后化为 (2.2) 这时 $A^{(1)}$ 化为 $A^{(2)}$ ， $b^{(1)}$ 化为 $b^{(2)}$ ，即

$$L_1 A^{(1)} = A^{(2)}, \quad L_1 b^{(1)} = b^{(2)}$$

其中

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & & & & \\ -\mathbf{m}_{21} & \mathbf{1} & & & \\ -\mathbf{m}_{31} & & \mathbf{1} & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -\mathbf{m}_{n1} & & & & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

一般第 k 步消元, $A^{(k)}$ 化为 $A^{(k+1)}$, $\mathbf{b}^{(k)}$ 化为 $\mathbf{b}^{(k+1)}$,

相当于 $L_k A^{(k)} = A^{(k+1)}$, $L_k \mathbf{b}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k+1)}$,

其中

$$\mathbf{L}_k = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \mathbf{1} & & \\ & & -\mathbf{m}_{k+1,k} & \mathbf{1} & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & -\mathbf{m}_{n,k} & & & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

重复上述过程，最后得到

$$\begin{cases} L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A^{(1)} = A^{(n)} \\ L_{n-1} \cdots L_2 L_1 b^{(1)} = b^{(n)} \end{cases} \quad (3.1)$$

记上三角矩阵 $A^{(n)}$ 为 U ，由 (3.1) 得到

$$A = LU$$

其中

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

单位下三角矩阵

这就是说，高斯消去法实质上产生了一个将 A 分解为两个三角矩阵相乘的因式分解。于是得到如下重要定理，它在解方程组的直接法中起着重要作用。

定理7（矩阵的LU分解）设 A 为 n 阶矩阵，如果 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n-1)$ ，则 A 可分解为一个单位下三角矩阵 L 和一个上三角矩阵 U 的乘积，且这种分解是惟一的。**矩阵的LU分解也称为Doolittle分解。**

证明 根据以上推导，存在性已得证。现证明惟一性。

假定 A 为非奇异矩阵，设

$$A = LU = L_1U_1$$

其中 L, L_1 为单位下三角矩阵， U, U_1 为上三角矩阵。

由于 U_1^{-1} 存在，故

$$L^{-1}L_1 = UU_1^{-1}$$

上式右边为上三角矩阵，左边为单位下三角矩阵，从而上式两边都必须等于单位矩阵，故 $L = L_1, U = U_1$ ，惟一性得证。

此外，满足以下两个条件之一的非奇异矩阵A也可进行LU分解

1. 严格对角占优的矩阵

$$\bullet \begin{cases} |a_{11}| > \sum_{j=2}^n |a_{1j}| \\ |a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|, (i = 2, \dots, n) \end{cases}$$

1. 对称正定矩阵

那么矩阵分解有什么作用呢？

其作用就在于，一旦实现了矩阵 A 的LU分解，那么求解一般方程组 $Ax = b$ 的问题就等价于求解两个三角形方程组：

① $Ly = b$, 求 y ;

② $Ux = y$, 求 x .

又由于这两个方程组中的系数矩阵均为三角阵，因此求解是非常简单的。

例2 用直接三角分解法解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 18 \\ 20 \end{pmatrix}$$

解 首先有等式

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$

依次计算其中元素得

$$u_{11} = a_{11} = 1, u_{12} = a_{12} = 2, u_{13} = a_{13} = 3,$$

$$l_{21} = a_{21} / u_{11} = 2 / 1 = 1, l_{31} = a_{31} / u_{11} = 3 / 1 = 3,$$

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 5 - 2 \times 2 = 1, \quad u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = 2 - 2 \times 3 = -4,$$

$$l_{32} = (a_{32} - l_{31}u_{12}) / u_{22} = (1 - 3 \times 2) / 1 = -5,$$

$$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} = 5 - 3 \times 3 - (-5) \times (-4) = -24.$$

从而

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & -24 \end{pmatrix}$$

最后求解 $Ly = (14, 18, 20)^T$, 得 $y = (14, -10, -72)^T$,

求解 $Ux = (14, -10, -72)^T$, 得 $x = (1, 2, 3)^T$.

LU分解的其他变形情况（了解即可）：

1. 矩阵A有唯一的LDR分解： $A=LDR$ 。其中，L为单位下三角阵，D为对角阵，R为单位上三角阵。
2. A有唯一的Crout分解： $A = \bar{L}\bar{U}$ 。其中， \bar{L} 为下三角阵， \bar{U} 为单位上三角阵。

对应的算法就是按照对应的分解格式进行分解，最后求出递推公式。教材上只给出了递推公式。

矩阵的三角分解之平方根法

平方根法是利用**对称正定矩阵**的三角分解而得到的求解对称正定方程组的一种有效方法。

设 A 为对称矩阵，且 A 的所有顺序主子式均不为零，由定理7知， A 可惟一分解为

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$

利用 A 的对称性, 可将 U 再分解为

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & & & & \\ & u_{22} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & u_{nn} & \\ & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \dots & \dots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & 1 & \frac{u_{23}}{u_{22}} & \dots & \frac{u_{2n}}{u_{22}} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & 1 & \end{pmatrix} = DU_0$$

其中 D 为对角阵, U_0 为单位上三角阵。

于是

$$A = LU = LDU_0 \quad (3.4)$$

又

$$A = A^T = U_0^T(DL^T)$$

由分解的惟一性，得

$$U_0^T = L.$$

代入 (3.4) 得到对称矩阵 A 的分解式 $A = LDL^T$.

另一方面：

设 A 为对称正定矩阵，则在分解式 $A = LDL^T$ 中， D 的对角元素 d_i 均为正数。

于是

$$\begin{aligned} D &= \begin{pmatrix} d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{d_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{d_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{d_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{d_n} \end{pmatrix} \\ &= D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

则可得

$$A = LDL^T = LD^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} L^T = (LD^{\frac{1}{2}})(LD^{\frac{1}{2}})^T = \boxed{L_1 L_1^T},$$

其中 $L_1 = LD^{\frac{1}{2}}$ 为下三角矩阵。

定理10 (对称阵的三角分解定理) 设 A 为 n 阶对称阵, 且 A 的所有顺序主子式均不为零, 则 A 可惟一分解为

$$A = LDL^T$$

其中 D 为对角阵, L 为单位下三角阵。

定理11 (对称正定矩阵的三角分解或Cholesky分解)

如果 A 为 n 阶对称正定矩阵, 则存在一个实的非奇异下三角阵 L , 使 $A = LL^T$, 当限定 L 的对角元素为正时, 这种分解是惟一的。

可以用直接分解方法来确定计算 L 元素的公式。

Cholesky分解 (LL^T 分解) 和 LDL^T 分解求解线性方程组的思路

1. **分解过程**: 使用递推公式算出对应分解的三角矩阵中的元素。
2. **回代过程**: 求解简单线性方程组。如 $Ly = b, L^Tx = y$ 。

2.3 解三对角方程组的追赶法

实际问题中，通常要求解系数矩阵为对角占优的
三对角线方程组

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

简记为 $Ax = f$. 其中, 当 $|i - j| > 1$ 时, $a_{ij} = 0$, 且

$$(1) |b_1| > |c_1| > 0;$$

$$(2) |b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \quad a_i, c_i \neq 0 \quad (i = 2, 3, \dots, n-1);$$

$$(3) |b_n| > |a_n| > 0.$$

算法 2.7 求解三对角方程组的追赶法.

1) 三角分解过程, 考虑三角分解

$$A = \bar{L} \bar{U} \quad (2-14)$$

即:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_1 & & & & \\ m_2 & l_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & m_{n-1} & l_{n-1} & \\ & & & m_n & l_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

比较上式两边的对应元素, 可得 m_i, l_i, u_i 的计算公式:

$$\begin{cases} l_1 = b_1, u_1 = \frac{c_1}{b_1} \\ m_i = a_i, l_i = b_i - m_i u_{i-1}, u_i = \frac{c_i}{l_i} (i=2, 3, \dots, n-1) \\ m_n = a_n, l_n = b_n - m_n u_{n-1}. \end{cases}$$

我们以追赶法为例来说明其他的三角分解算法地推公式的推导过程。

2) 回代过程,利用三角分解式(2-14),可以把方程组(2-13)化为如下的等价形式:

$$\begin{cases} \bar{L}y = d \\ \bar{U}x = y \end{cases}$$

这两个方程组都是三角方程组,因此,可以递推计算:

$$\begin{cases} y_1 = \frac{d_1}{l_1} \\ y_i = \frac{1}{l_i}(d_i - m_i y_{i-1}) \quad (i=2,3,\dots,n) \end{cases}$$

追的过程

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

赶的过程

追赶法公式实际上就是把高斯消去法用到求解三对角线方程组上去的结果。

例 2.5 用 Cholesky 分解计算线性代数方程组

$$Ax = b, \quad (2-12)$$

这里

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 5 \\ 9 \\ 12 \\ 14 \\ 15 \end{bmatrix}.$$

解 首先用 Cholesky 分解对矩阵 A 进行三角分解：

$$A = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} & 0 \\ l_{51} & l_{52} & l_{53} & l_{54} & l_{55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & l_{41} & l_{51} \\ 0 & l_{22} & l_{32} & l_{42} & l_{52} \\ 0 & 0 & l_{33} & l_{43} & l_{53} \\ 0 & 0 & 0 & l_{44} & l_{54} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & l_{55} \end{bmatrix} = : LL^T.$$

比较两边系数,得

$$\begin{cases} l_{11}=1 & l_{21}=1 & l_{31}=1 & l_{41}=1 & l_{51}=1 \\ l_{22}=1 & l_{32}=1 & l_{42}=1 & l_{52}=1 \\ l_{33}=1 & l_{43}=1 & l_{53}=1 \\ l_{44}=1 & l_{54}=1 \\ l_{55}=1 \end{cases}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix},$$

可以把方程组(2-12)分解为

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

回代计算得到

$$y = \begin{bmatrix} 5 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$



例 2.6 用追赶法求解三对角线代数方程组

$$Ax = b.$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 6 \\ 7 \\ 9 \\ 11 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

解 首先考虑追赶法的三角分解:

$$A = \begin{bmatrix} l_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ m_2 & l_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_3 & l_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_4 & l_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_5 & l_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & u_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & u_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & u_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} =: \bar{L} \bar{U},$$

比较两边系数,得

$$\begin{cases} l_1 = 2, & u_1 = 1; \\ m_2 = -1, & l_2 = 2, & u_2 = 1; \\ m_3 = -1, & l_3 = 2, & u_3 = 1; \\ m_4 = -1, & l_4 = 2, & u_4 = 1; \\ m_5 = -1, & l_5 = 2. \end{cases}$$

于是

$$\bar{L} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \bar{U} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

令

$$\begin{cases} \bar{L}\mathbf{y} = \mathbf{b} \\ \bar{U}\mathbf{x} = \mathbf{y} \end{cases}$$

回代计算,得到

$$y = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \\ 9 \\ 5 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}.$$