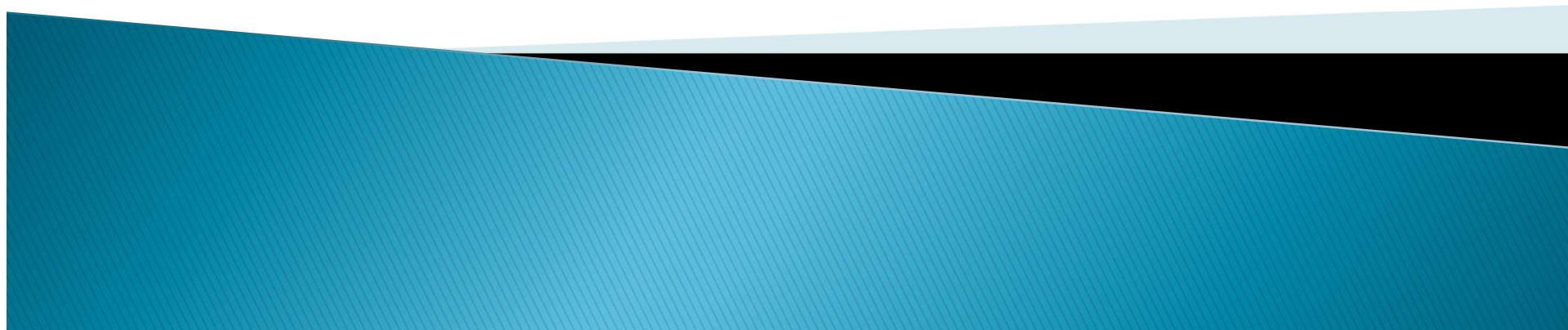




科学计算

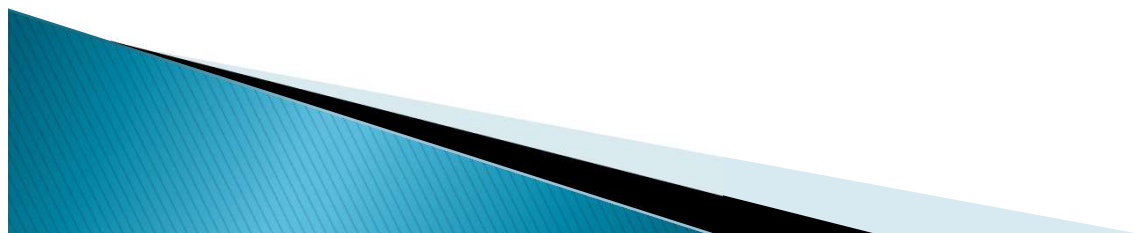
赖俊

浙江大学数学科学学院



第六章 解线性方程组的直接法

- ▶ Gauss消去法
- ▶ 主元素法
- ▶ LU分解
- ▶ LL^T 分解和 LDL^T 分解



引言

- ▶ 解线性代数方程组

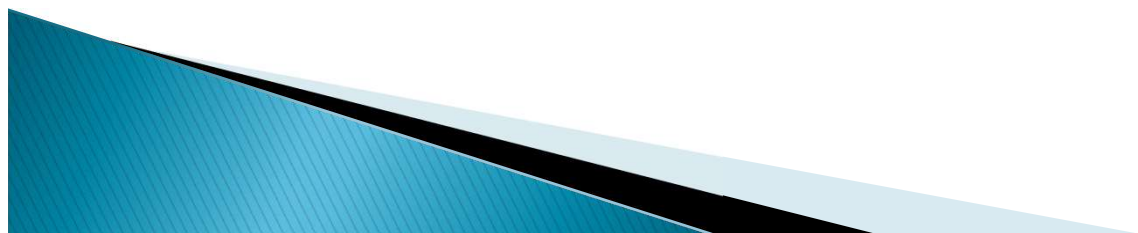
$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots\dots\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

- ▶ 矩阵方程 $Ax = b$

常用增广矩阵表示 $(A | b)$

- ▶ 解法

- 直接法: 用有限步计算得到准确解
- 迭代法: 给出一个近似解序列



直接法

- ▶ Crame法则

计算量太大, 以 $(n + 1)!$ 计, 不实用

($11! = 39916800$)

- ▶ 高斯消去法

计算量以 n^3 计 .

- ▶ 直接法

- 解线性代数方程组
- 求行列式
- 求逆矩阵



三角方程组

- ▶ 例1: 向前代入消去法

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & & & 3 \\ 2 & 1 & & 1 \\ -1 & 2 & 1 & -7 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & & & 3 \\ & 1 & & -5 \\ & & 1 & 6 \end{array} \right]$$

- ▶ 例2: 向后代入消去法(回代)

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 3 & 3 \\ & 3 & 1 & -5 \\ & & 6 & 6 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & & & 2 \\ & 1 & & -2 \\ & & 1 & 1 \end{array} \right]$$



三角方程组

- ▶ 一般情况

$$u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n = g_1$$

$$u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n = g_2$$

.....

$$u_{nn}x_n = g_n$$

- ▶ 算法: 当 $u_{11}u_{22} \cdots u_{nn} \neq 0$ 时, 可解出

$$x_n = \frac{g_n}{u_{nn}}$$

for $k = n - 1 : 1$

$$x_k = \frac{g_k - u_{k,k+1}x_{k+1} - \cdots - u_{kn}x_n}{u_{kk}}$$

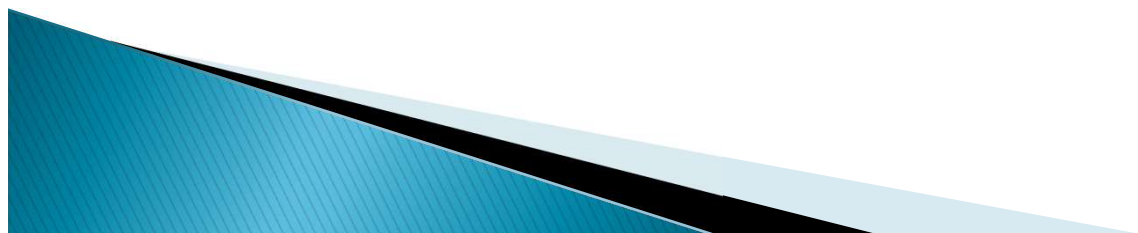
end



三角方程组

▶ 算法注记

- 程序实现时 x, g 可共用一组单元, 即回代就地完成
- 回代加法和乘法运算各 $\frac{n(n-1)}{2}$, 除法 n 次
- 亦可解出一未知数即代入其它方程, 消去该未知数
- 其它形式三角方程组可类似计算



Gauss消去法算例

▶ 例1:

▶
$$\left[\begin{array}{ccc|cc} 2 & 2 & 3 & 3 & 7 \\ 4 & 7 & 7 & 1 & 18 \\ -2 & 4 & 5 & -7 & 7 \end{array} \right]$$

$k = 1:$

2行减1行2倍

3行减1行(-1)倍

$k = 2:$

3行减2行2倍

回代

2	2	3	3	7
4	7	7	1	18
-2	4	5	-7	7
2	2	3	3	7
2	3	1	-5	4
-1	6	8	-4	14
2	2	3	3	7
2	3	1	-5	4
-1	2	6	6	6
1			2	1
	1		-2	1
		1	1	1

顺序消元

▶ 算法

```
for  $k = 1:n - 1$ 
    if  $a_{kk} \neq 0$ 
        for  $i = k + 1:n$ 
             $m_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$       { $m_{ik}$ 可置于 $a_{ik}$ }
             $i\text{行} = i\text{行} - k\text{行} \times m_{ik}$  {前 $k$ 列元素不在内}
        end
    else stop
    end
end
```



Gauss消去法运算量

乘除法运算工作量

第 k 步消元: $m_{ik} : n - k$ 次除法, $a_{ij}^{(k+1)} : (n - k)^2$ 次乘法,
 $b_i^{(k+1)} : n - k$ 次乘法, $(i, j = k + 1, \dots, n)$.

消元过程乘除法次数: $\sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n$

回代过程乘除法次数: $\sum_{k=1}^n k = \frac{1}{2}n(n+1)$

总的乘除法运算次数: $\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$

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

$$\sum_{k=1}^n k^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$



Gauss消去法

- 如果矩阵 A 本身是三对角矩阵，则计算量可以进一步降低到 $O(n)$ ，此时消去法也称为追赶法

$$A = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & 0 & 0 & 0 \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ 0 & a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 \\ 0 & 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}$$

Gauss消去法求行列式

▶ 行列式

- $\det(A_k) = \det(U_k) = u_{11}u_{22} \cdots u_{kk}, k = 1, 2, \cdots, n$
 U 是顺序消元过程结束时的上三角矩阵. A_k 和 U_k 分别是 A 和 U 的 k 阶主子阵
- 例1中系数矩阵的行列式等于 $2 \times 3 \times 6 = 36$.

定理 约化的主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 1, 2, \cdots, k) \Leftrightarrow A$ 的顺序主子式 $D_i \neq 0 (i = 1, 2, \cdots, k)$, 即

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0, (i = 1, 2, \cdots, k).$$



Gauss消去法求逆矩阵

▶ 逆矩阵

- 解 n 个方程组 $(A|I)$, 其中 I 是单位矩阵.
- 需加法乘法各为 $n^3 + O(n^2)$
- 例中系数矩阵的逆, 写出增广矩阵, 消元得

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 7 & 7 & 0 & 1 & 0 \\ -2 & 4 & 5 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \longrightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 5 & -2 & 1 \end{array} \right)$$

最后解出

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 7/36 & 1/18 & -7/36 \\ 0 & 1 & 0 & -17/18 & -4/9 & -1/18 \\ 0 & 0 & 1 & 5/6 & -1/3 & 1/6 \end{array} \right)$$

Gauss消去法矩阵解释

▶ 消去法矩阵解释

- 消第 k 个元, (2), 相当于左乘矩阵 $M_k = I - m_k e_k^T$

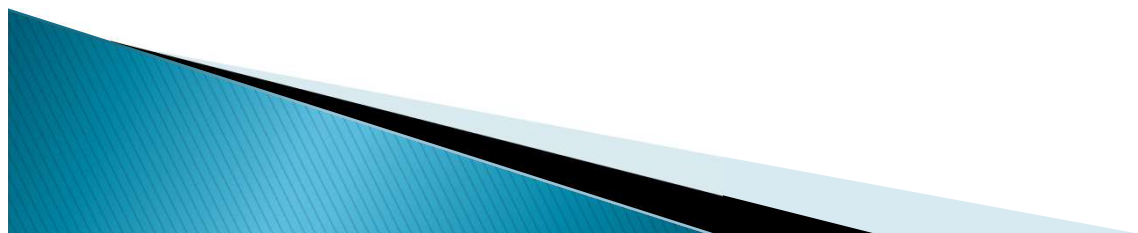
$$m_k = (0, \dots, 0, m_{k+1,k}, \dots, m_{nk})^T, \quad e_k \text{ 单位向量}$$

- 消元结果得上三角方程组

- $M(A|b) = (U|g), M = M_{n-1}M_{n-2} \cdots M_1$

- $MA = U, Mb = g$

- $A = LU, L = M^{-1} =$
$$= M_1^{-1} \cdots M_{n-2}^{-1} M_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$



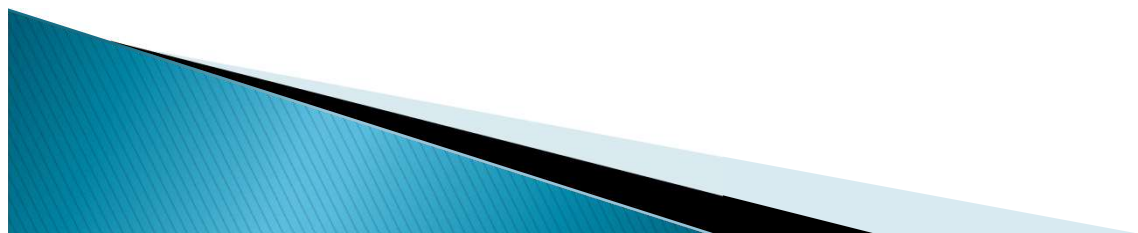
消去法实现LU分解

▶ 例1 (续)

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 3 \\ 4 & 7 & 7 \\ -2 & 4 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ -1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 3 \\ & 3 & 1 \\ & & 6 \end{bmatrix}$$

- ▶ LU分解: 顺序主子式非零, $\det(A_k) \neq 0, k = 1, 2, \dots, n-1$ 则可唯一分解 $A = LU$, 单位下三角阵与上三角阵之积

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



LU分解


▶ 方法

- 消去法实现LU分解
- 直接LU分解(紧凑Gauss消去法)
 - 解方程 $A = LU$ 确定 L_{il}, u_{ki}
 - 追踪顺序消元所得 L, U 元素的历史确定 L_{il}, u_{ki}

▶ 直接LU分解公式

$$u_{ki} = a_{kj} - m_{k1}u_{1j} - m_{k2}u_{2j} - \cdots - m_{k,k-1}u_{k-1,j},$$
$$j = k, k+1, \cdots, n$$

$$m_{ik} = \frac{a_{ik} - m_{i1}u_{1k} - m_{i2}u_{2k} - \cdots - m_{i,k-1}u_{k-1,k}}{u_{kk}}$$

$$i = k, k+1, \cdots, n$$


直接LU分解

▶ 算法:

for $k = 1:n - 1$

for $j = k:n$

$$u_{kj} = a_{kj} - l_{k1}u_{1j} - l_{k2}u_{2j} - \cdots - l_{k,k-1}u_{k-1,j}$$

end

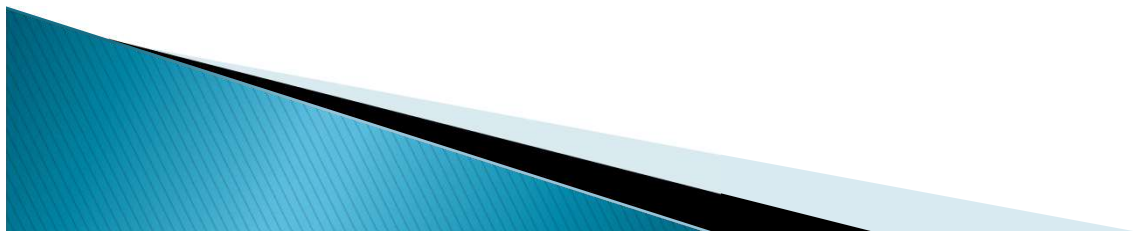
for $i = k + 1:n$

$$l_{ik} = \frac{a_{ik} - l_{i1}u_{1k} - l_{i2}u_{2k} - \cdots - l_{i,k-1}u_{k-1,k}}{u_{kk}}$$

end

end

u_{kj}, l_i 可置 A 中.



直接LU分解

▶ 计算表格

$u_{11}=a_{11}$	$u_{12}=a_{12}$	$u_{13}=a_{13}$
$l_{21}=a_{21}/u_{11}$	$u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}$	$u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}$
$l_{31}=a_{31}/u_{11}$	$l_{32}=(a_{32}-l_{31}u_{12})/u_{22}$	$u_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}-l_{32}u_{23}$

- 也可逐行算, 或逐列算, 或其它可行次序算

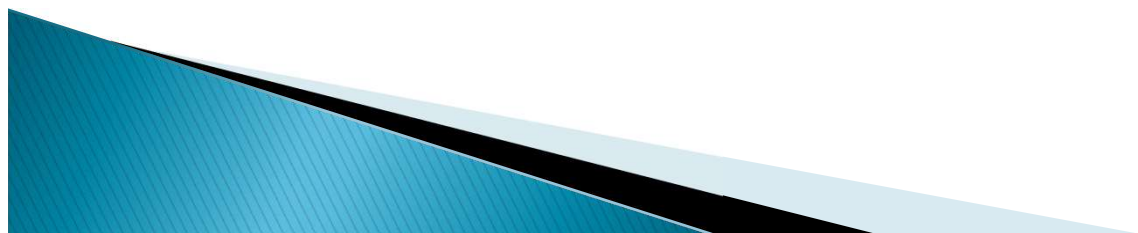
▶ 应用

- 解 $Ax = b$: 分解 $A = LU$

解 $Ly = b$ 求 y

解 $Ux = y$ 求 x

- 计算 $\det(A) = \det(L) \det(U) = u_{11}u_{22} \cdots u_{nn}$



其它形式的分解

- ▶ $A = LU$ (L 下三角矩阵, U 单位上三角矩阵)

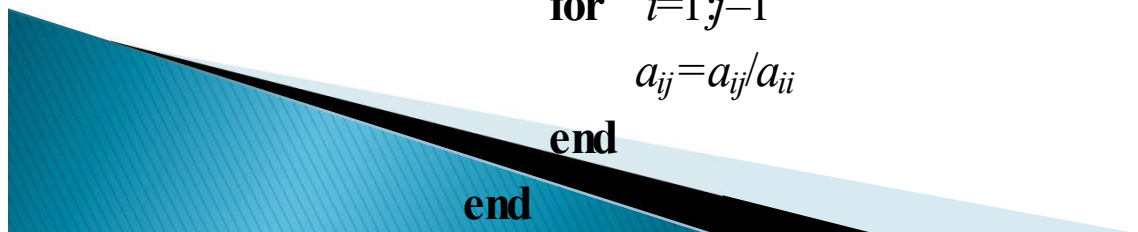
$u_{11}=a_{11}$	$u_{12}=a_{12}$	$u_{13}=a_{13}$
$l_{21}=a_{21}/u_{11}$	$u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}$	$u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}$
$l_{31}=a_{31}/u_{11}$	$l_{32}=(a_{32}-l_{31}u_{12})/u_{22}$	$u_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}-l_{32}u_{23}$

- ▶ LDR
分解

```

for j=1:n
    for i=2:j
         $a_{ij} = a_{ij} - a_{i1}a_{1j} - a_{i2}a_{2j} - \dots - a_{i,i-1}a_{i-1,j}$  (计算  $u_{ij}$ )
    end
    for i=j+1:n
         $a_{ij} = (a_{ij} - a_{i1}a_{1j} - a_{i2}a_{2j} - \dots - a_{i,j-1}a_{j-1,j})/a_{jj}$  (计算  $l_{ij}$ )
    end
    for i=1:j-1
         $a_{ij} = a_{ij}/a_{ii}$  (计算  $r_{ij}$ )
    end
end
end

```



小主元扩大误差

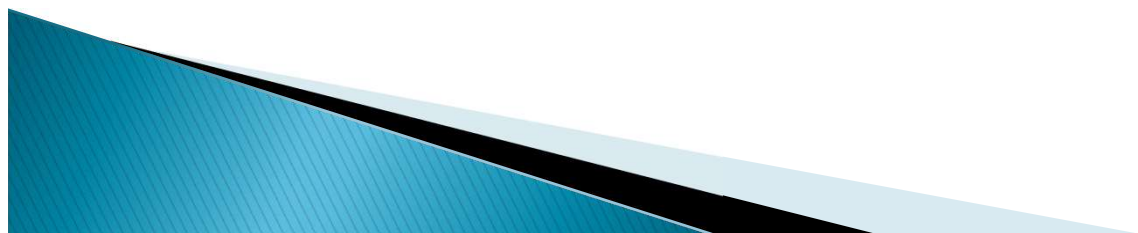
- ▶ 例2 顺序消去法, 用精确运算:

$$\left[\begin{array}{cc|c} 0.0001 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & -9999 & -9998 \end{array} \right]$$

得 $(10000/9999, 9998/9999) \approx (1.0001, 0.9999)$ 若在十进三位尾数舍入的浮点计算机系统中运算, 第二行将是 $(0 - 10000 \mid -10000)$ 得到解 $x_2 = 1, x_1 = 0$. 与真解相去甚远.

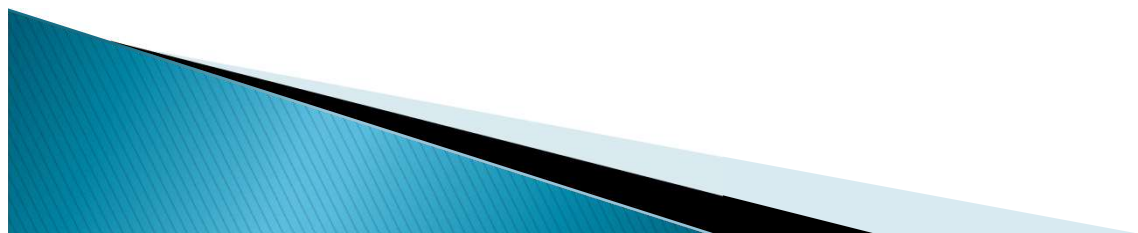
- ▶ 把两个方程(两行)交换次序再消元, 得解 $x_2 = 1, x_1 = 1$, 与真解很近:

$$\left[\begin{array}{cc|c} 0.0001 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 0.0001 & 1 & 1 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{array} \right]$$



主元素法

- ▶ 列主元素法: 在每次消元前先选该列中绝对值最大的做主元(交换两行, 每行包括右端项!).
 - 列主元素法乘数 m_{ik} 绝对值不大于1, 不会增加误差
 - 列主元素法用来求行列式时要注意两行交换行列式变号.
- ▶ 全主元素法: 在整个右下 $(n - k) \times (n - k)$ 矩阵找绝对值最大的做主元(交换行及列).
 - 这对误差控制有利, 但搜索太费时. 通常列主元素法误差控制就已可以了.



列主元素法

```
for k=1:n-1
    找 p:  $|a_{pk}| = \max(|a_{kk}|, |a_{k+1,k}|, \dots, |a_{nk}|)$ 
    ① ↔ ①
     $i_k = p$ 
    if  $a_{kk} \neq 0$ 
        for i=k+1:n
             $m_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$ 
            ① = ① - ① ×  $m_{ik}$ 
        end
    else stop
    end
end
```



列主元素法算例

▶ 例3 列主元素法解方程组

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 0 & 6 \\ 1 & 1 & 2 & 9 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 0 & 6 \\ (1/2) & 0 & 2 & 6 \\ (1) & -1 & 1 & 1 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 0 & 6 \\ (1) & -1 & 1 & 1 \\ (1/2) & 0 & 2 & 6 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \end{array} \right]$$

括号内是乘数, $k = 2$ 时2, 3行交换.

▶ LU分解

$$\left[\begin{array}{ccc} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} 2 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{ccc} 1 & & \\ 1/2 & 0 & 1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} 2 & 2 & 0 \\ & -1 & 1 \\ & & 2 \end{array} \right]$$

即列主元素法实现了LU分解: $PA = LU$, P 是行交换结果的排列阵.



列主元LU分解

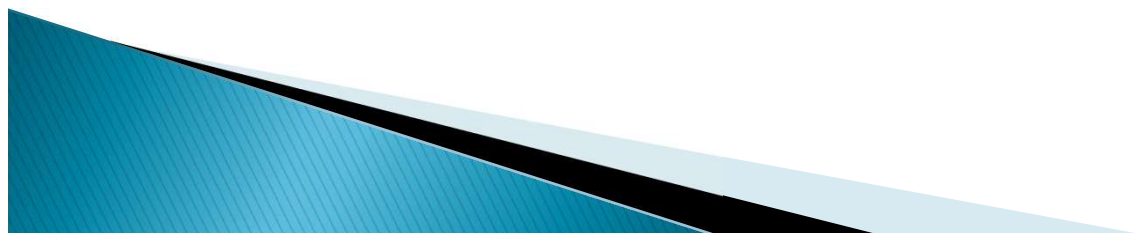
- ▶ 列主元素法实现LU分解
 - 如上例, 只要记住交换历史
- ▶ 直接列主元LU分解
 - 修改直接LU分解加入选主元
 - 算法如右 (可就地完成: l_{ik}, u_{kj} 置A中)

```
for k=1:n-1
    for i=k:n
         $a_{ik} = a_{ik} - l_{i1}u_{1k} - l_{i2}u_{2k} - \dots - l_{i,k-1}u_{k-1,k}$ 
    end
    找 p:  $|a_{pk}| = \max(|a_{kk}|, |a_{k+1,k}|, \dots, |a_{nk}|)$ 
    ① ↔ ①
     $i_k = p$ 
    for j=k+1:n
         $u_{kj} = a_{kj} - l_{k1}u_{1j} - l_{k2}u_{2j} - \dots - l_{k,k-1}u_{k-1,j}$ 
    end ( $u_{kk} = a_{kk}$ )
    for i=k+1:n
         $l_{ik} = a_{ik}/u_{kk}$ 
    end
end
```


实对称阵分解

▶ 对称阵性质

- 顺序主子式非零时可作LU分解 $A = LU$, 且有 $U = DL^T$, D 是 U 对角元构成的对角阵. 因而 $A = LDL^T$, L 单位下三角阵, D 对角阵, 称 LDL^T 分解或改进的Cholesky分解.
- 正定时, 顺序主子式全正, D 可开平方根, 乃有 $A = LL^T$, L 下三角阵, 对角元全正, 称 LL^T 分解或Cholesky分解.
- 对称阵可只存储下(上)三角部分.



LDL^T分解

▶ 计算表格

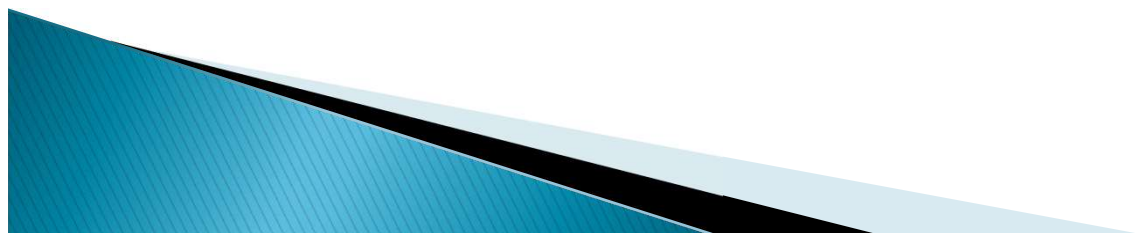
◦ 表格1

$d_1 = u_{11}$ $= a_{11}$	$u_{12} = a_{12}$ $l_{21} = u_{12}/d_1$	$u_{13} = a_{13}$ $l_{31} = u_{13}/d_1$
	$d_2 = u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}$	$u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}$ $l_{32} = u_{23}/d_2$
		$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}$

◦ 表格2

$d_1 = a_{11}$		
$t_1 = a_{21}$ $l_{21} = t_1/d_1$	$d_2 = a_{22} - t_1 l_{21}$	
$t_1 = a_{31}$ $l_{31} = t_1/d_1$	$t_2 = a_{32} - t_1 l_{21}$ $l_{32} = t_2/d_2$	$d_3 = a_{33} - t_1 l_{31} - t_2 l_{32}$

- 注意二表格关系,程序实现时,表格1宜逐列算,表格2宜逐行算.

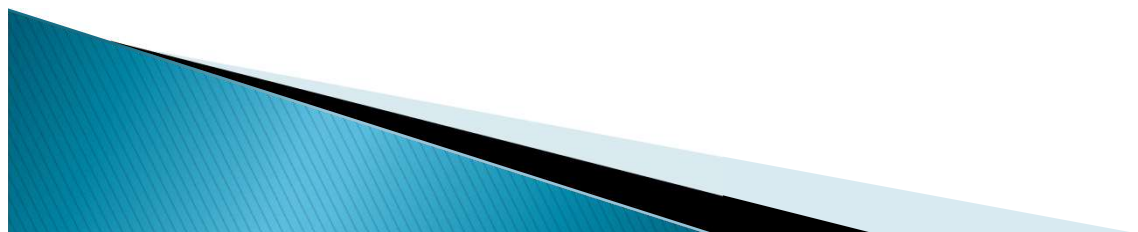


LDL^T分解算例

▶ 例4

- 按表格1计算, L 帮助理解可不写
- 分解后依次求 g, y, x ($Lg = b, Dy = g, L^T x = y$)

1	1	2	2		
(1)	5	0	-4		
(2)	(0)	14	16	y	x
1	(1), 1	(2), 2	2	2	$2+1-2=1$
1	$5-1=4$	$(0-2), -2/4$	$-4-2=-6$	$-6/4=-3/2$	$-3/2+1/2=-1$
2	$-1/2$	$14-4-1=9$	$16-3-4=9$	$9/9=1$	1



LL^T分解

► 计算表格

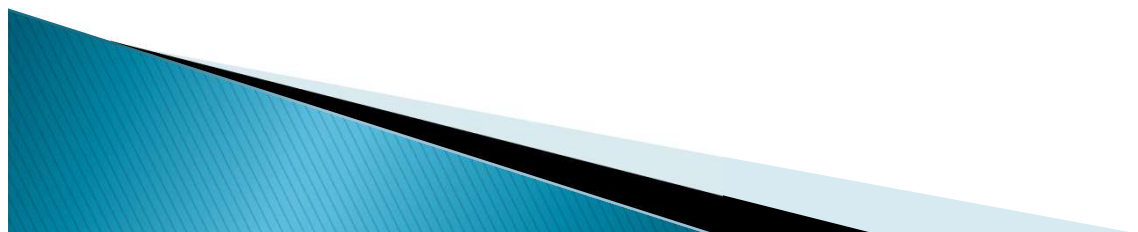
◦ 表格1

$l_{11}=a_{11}^{1/2}$	$l_{21}=a_{12}/l_{11}$	$l_{31}=a_{13}/l_{11}$
	$l_{22}=(a_{22}-l_{21}^2)^{1/2}$	$l_{32}=(a_{23}-l_{21}l_{31})/l_{22}$
		$l_{33}=(a_{33}-l_{31}^2-l_{32}^2)^{1/2}$

◦ 表格2

$l_{11}=a_{11}^{1/2}$		
$l_{21}=a_{21}/l_{11}$	$l_{22}=(a_{22}-l_{21}^2)^{1/2}$	
$l_{31}=a_{31}/l_{11}$	$l_{32}=(a_{32}-l_{31}l_{21})/l_{22}$	$l_{33}=(a_{33}-l_{31}^2-l_{32}^2)^{1/2}$

◦ 二表格逐行逐列计算皆宜.



LL^T分解算例

▶ 例5

- 按表格2计算, L^T 帮助理解可不写
- 分解后依次求 g, x ($Lg = b, L^T x = g$)

1	(1)	(2)	2	
1	5	(0)	-4	
2	0	14	16	
1	1	2	2	2+1-2=1
1	$(5-1=4)^{1/2}=2$	-1	$(-4-2)/2=-3$	$(-3+1)/2=-1$
2	$(0-2)/2=-1$	$(14-4-1=9)^{1/2}=3$	$(16-3-4)/3=3$	3/3=1

