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

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

- 矩阵方程 $Ax = b$

  常用增广矩阵表示 $(A \mid b)$
- 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

$$
\begin{aligned}
u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n &= g_1 \\
u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n &= g_2 \\
&\cdots\cdots \\
u_{nn}x_n &= g_n
\end{aligned}
$$

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

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

for $k = n-1:1$

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

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：
- $$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 3 & 3 & 7 \\ 4 & 7 & 7 & 1 & 18 \\ -2 & 4 & 5 & -7 & 7 \end{bmatrix}$$

$k=1$:

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 ≠ 0
            for     i = k + 1:n
             m_ik = a_ik/a_kk        {m_ik可置于a_ik}
         i行= i行− k行× 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

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{第}k\text{步消元：}\ m_{ik}:n-k\text{次除法},a_{ij}^{(k+1)}:(n-k)^2\text{次乘法},\\ b_i^{(k+1)}:n-k\text{次乘法},(i,j=k+1,\cdots,n).\end{array}}$$

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

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

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

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

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

Gauss消去法

- 如果矩阵$\boldsymbol{A}$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
  - $\boldsymbol{det}(\boldsymbol{A_k}) = \boldsymbol{det}(\boldsymbol{U_k}) = u_{11}u_{22}\cdots u_{kk}, k = 1,2,\cdots,n$
    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2×3×6=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$\mathrm{n}^3 + O(n^2)$
  - 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$M_k = I - m_k e_k^T$

    $m_k = \left(0,\cdots,0,m_{k+1,k,\ldots},m_{nk}\right)^{\mathrm{T}}$, e_k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，$det(A_k) \neq 0, k = 1,2,\cdots,n-1$则可唯一分解$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$，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 $i=2:j$

$a_{ij}=a_{ij}-a_{i1}a_{1j}-a_{i2}a_{2j}-\cdots-a_{i,i-1}a_{i-1,j}$ （计算 u_{ij}）

end

for $i=j+1:n$

$a_{ij}=(a_{ij}-a_{i1}a_{1j}-a_{i2}a_{2j}-\cdots-a_{i,j-1}a_{j-1,j})/a_{jj}$ （计算 l_{ij}）

end

for $i=1:j-1$

$a_{ij}=a_{ij}/a_{ii}$ （计算 r_{ij}）

end

end

小主元扩大误差

- 例2　顺序消去法，用精确运算：

$$\begin{bmatrix} 0.0001 & 1 & | & 1 \\ 1 & 1 & | & 2 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 0.0001 & 1 & | & 1 \\ 0 & -9999 & | & -9998 \end{bmatrix}$$

得(10000/9999, 9998/9999) ≈ (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 | −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：

$$\begin{bmatrix} 0.0001 & 1 & | & 1 \\ 1 & 1 & | & 2 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & 1 & | & 2 \\ 0.0001 & 1 & | & 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & 1 & | & 2 \\ 0 & 1 & | & 1 \end{bmatrix}$$

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: $|a_{pk}| = \max(|a_{kk}|, |a_{k+1,k}|, \cdots, |a_{nk}|)$

ⓟ $\leftrightarrow$ ⓚ

$i_k = p$

if $a_{kk} \neq 0$

for i=k+1:n

$m_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$

ⓘ=ⓘ-ⓚ$\times m_{ik}$

end

else **stop**

end

end

列主元素法算例

- 例3 列主元素法解方程组

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

括号内是乘数, $k = 2$时2, 3行交换.

- LU分解

$$\begin{bmatrix} 1 & & \\ & & 1 \\ & 1 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 1 & 1 & \\ 1/2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ & -1 & 1 \\ & & 2 \end{bmatrix}$$

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 $i=k:n$

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

  end

  找 p: $|a_{pk}|=\max(|a_{kk}|,|a_{k+1,k}|,\cdots,|a_{nk}|)$

  ⓟ $\leftrightarrow$ ⓚ

  $i_k=p$

  for $j=k+1:n$

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

  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

$d_1=a_{11}$		
$t_1=a_{21}$ $l_{21}=t_1/d_1$	$d_2=a_{22}-t_1l_{21}$	
$t_1=a_{31}$ $l_{31}=t_1/d_1$	$t_2=a_{32}-t_1l_{21}$ $l_{32}=t_2/d_2$	$d_3=a_{33}-t_1l_{31}-t_2l_{32}$

  - 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