计算方法

第6章 线性方程组的直接法

胡 敏
合肥工业大学 计算机与信息学院
jsjxhumin@hfut.edu.cn
uhnim@163.com

第 6 章　线性方程组的解法

6.2 分解法

- 我们知道对矩阵进行一次初等行变换，就相当于用相应的初等矩阵去左乘原来的矩阵。
- 用以上观点考察Gauss消元法：用矩阵乘法来表示，即可得到求解线性方程组的另一种直接法：矩阵的三角分解。

观察高斯消元法

第1步等价于：$a_{11}^{(1)} \neq 0$时，将$a_{21}^{(1)}, a_{31}^{(1)}, \ldots, a_{n1}^{(1)}$消零，令$l_{i1} = \dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$

则 (1)行$\times(-l_{i1}) + (i)$行　$i = 2,3,\ldots,n$，其矩阵形式为：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & 1 & & & \\ -l_{31} & 0 & 1 & & \\ \cdots & & & \cdots\cdots & \\ -l_{n1} & 0 & 0 & \cdots\cdots & 1 \end{bmatrix}}_{L_1} \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}}_{A^{(1)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}}_{A^{(2)}}$$

观察高斯消元法

同理第2步等价于：若$a_{22}^{(2)} \neq 0$时，用矩阵

$$L_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ddots & \vdots \\ 0 & -l_{n2} & 0 & \ldots & 1 \end{bmatrix} \qquad l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \quad (i = 3,4,\ldots,n)$$

左乘$A^{(2)}$，即有：

$$L_2 A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \ldots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \ldots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \ldots & a_{3n}^{(3)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \ldots & a_{nn}^{(3)} \end{bmatrix} = A^{(3)}$$

观察高斯消元法

以此类推可得

$$L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1A=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}=U$$

观察高斯消元法

又因为

$$L_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \cdots & & & \\ l_{n1} & \cdots & \cdots & 1 \end{bmatrix} \qquad L_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & l_{32} & 1 & \\ & \cdots & & \\ & l_{n2} & & 1 \end{bmatrix}$$

观察高斯消元法

所以，由：$L_{n-1}L_{n-2}\ldots L_2L_1A=U$，

可得：$A=(L_{n-1}L_{n-2}\ldots L_2L_1)^{-1}U$

$$=L_1^{-1}L_2^{-1}\ldots L_{n-2}^{-1}L_{n-1}^{-1}U$$

$$=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn-1} & 1 \end{bmatrix} U = LU$$

其中L为单位下三角阵， U为上三角阵

观察高斯消元法

由此解线性方程组$Ax=b$就等价于解两个三角方程：

$$L(UX)=b \Rightarrow \begin{cases} Ly=b \\ Ux=y \end{cases}$$

因此，关键问题在于能否对矩阵A直接进行LU分解。

Doolittle分解

此分解在于如何算出L,U的各元素，以$n=3$为例

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ l_{21} & 1 & \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ & u_{22} & u_{23} \\ & & u_{23} \end{bmatrix}$$

$k=1$时：$a_{1j}=u_{1j}$ $\therefore u_{1j}=a_{1j}\ (j=1,2,3)$ 第一行

由$a_{21}=u_{11}l_{21}$ 得$l_{21}=\dfrac{a_{21}}{u_{11}}$；

第一列

由$a_{31}=u_{11}l_{31}$ 得$l_{31}=\dfrac{a_{31}}{u_{11}}$

Doolittle分解

$k=2$时： $a_{22}=l_{21}u_{12}+u_{22}$ 得 $u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}$;

第二行

由 $a_{23}=l_{21}u_{13}+u_{23}$ 得 $u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}$;

由 $a_{32}=l_{31}u_{12}+l_{32}u_{23}$ 得 $l_{32}=\dfrac{a_{32}-l_{31}u_{12}}{u_{22}}$

$k=3$时： 由 $a_{33}=l_{31}u_{13}+l_{32}u_{23}+u_{33}$

得 $u_{33}=a_{33}-(l_{31}u_{13}+l_{32}u_{23})$

Doolittle分解

- 若矩阵A有分解：A=LU，

  （其中L为单位下三角阵，U为上三角阵）

  则称该分解为Doolittle分解。

  可以证明，**当A的各阶顺序主子式均不为零时，Doolittle分解可以实现并且唯一。**

(杜利特尔Doolittle分解)

Doolittle分解

【定理一】

若矩阵A非奇异，则A能分解为LU的充分必要条件是A的顺序主子行列式不为0。

$$\Delta_1 = a_{11} \neq 0 \qquad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \neq 0$$

$$\ldots, \quad \Delta_n = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{nz} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \neq 0$$

Doolittle分解

【非奇异矩阵】

① 是否为奇异矩阵仅针对方阵而言。

② 看此方阵行列式是否为0：

③ 若等于0，则矩阵为奇异阵；

若不等于0，则为非奇异阵。

- 由$|A| \neq 0$，知矩阵可逆，则可得出结论：

可逆矩阵就是非奇异矩阵，是非奇异矩阵也是可逆矩阵。

Doolittle分解

- 【定理二】

  若非奇异矩阵A有LU分解，则此分解是唯一的。

Doolittle分解

- A的各阶顺序主子式均不为零，即

$$A_k = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (k = 1,2,\ldots n)$$

Doolittle分解

- 例，请举一个例子：矩阵A为非奇异矩阵，但不存在LU分解。

例：$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$，由 $\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -1$，知矩阵为非奇异阵。

若：$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ a & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} b & d \\ 0 & c \end{bmatrix}$ 必有 $\begin{cases} b = 0 \\ ab = 1 \end{cases}$，

故不存在LU分解。

Doolittle分解

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

其中

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

比较式 $A=LU$ 两端的元素，按下图所示顺序逐框进行，先求u_{kj}，后求l_{ik}. 由第一框可得

$$u_{1j}=a_{1j}\quad (j=1,2,\cdots,n)\qquad\qquad l_{i1}=\frac{a_{i1}}{u_{11}}\quad (i=2,3,\cdots,n)$$

$$\begin{array}{cccccc}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{kn} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nn}
\end{array}
\Rightarrow
\begin{array}{cccccc|l}
u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1k} & \cdots & u_{1n} & \text{第1框} \\
l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2k} & \cdots & u_{2n} & \text{第2框} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \\
l_{k1} & l_{k2} & \cdots & u_{kk} & \cdots & u_{kn} & \text{第}k\text{框} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nk} & \cdots & u_{nn} & \text{第}n\text{框}
\end{array}$$

Doolittle分解

第2框：

比较第2行： $a_{2j} = l_{21}u_{1j} + u_{2j} \quad j = 2,\cdots,n \quad \Rightarrow u_{2j} = a_{1j} - l_{21}u_{1j}$

比较第2列： $a_{i2} = l_{i1}\mathrm{u}_{12} + l_{i2}\mathrm{u}_{22} \quad i = 3,\cdots,n \quad \Rightarrow l_{i2} = \dfrac{a_{i2} - l_{i1}\mathrm{u}_{12}}{u_{22}}$

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

Doolittle分解

第k框：

比较第k行：
$$a_{kj}=\sum_{r=1}^{k-1}l_{kr}u_{rj}+u_{kj}\quad j=k,\cdots,n\quad\Rightarrow u_{kj}=a_{kj}-\sum_{r=1}^{k-1}l_{kr}u_{rj}$$

K-1次

比较第k列：
$$a_{ik}=\sum_{r=1}^{k-1}l_{ir}u_{rk}+l_{ik}u_{kk}\quad i=k+1,\cdots,n\quad\Rightarrow l_{ik}=\frac{a_{ik}-\sum_{r=1}^{k-1}l_{ir}u_{rk}}{u_{kk}}$$

K-1＋1次

Doolittle分解

分解过程完毕，加上两次反代过程

$$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \quad , \ i = 1, \cdots, n$$

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

总运算量为：

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

Doolittle分解

存储在矩阵的原来位置，且不影响计算

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

Doolittle分解

例1.试用*Doolittle*分解求解方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 5 & -6 \\ 4 & 13 & -19 \\ -6 & -3 & -6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 19 \\ -30 \end{bmatrix}$$

例6.10 求矩阵$A=\begin{bmatrix}2&1&4\\4&4&1\\6&5&12\end{bmatrix}$的$LU$ (Doolittle)分解.

解

$u_{11}=2$ $\quad u_{12}=1$ $\quad u_{13}=4$

$l_{21}=\frac{4}{2}=2$ $\quad u_{22}=4-2\times1=2$ $\quad u_{23}=1-2\times4=-7$

$l_{31}=\frac{6}{2}=3$ $\quad l_{32}=\frac{5-3\times1}{2}=1$ $\quad u_{33}=12-3\times4-1\times(-7)=7$

$u_{11}=2$ $u_{12}=1$ $u_{13}=4$

$l_{21}=\frac{4}{2}=2$ $u_{22}=4-2\times1=2$ $u_{23}=1-2\times4=-7$

$l_{31}=\frac{6}{2}=3$ $l_{32}=\frac{5-3\times1}{2}=1$ $u_{33}=12-3\times4-1\times(-7)=7$

所以

$$\begin{bmatrix}2&1&4\\4&4&1\\6&5&12\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\3&1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&1&4\\0&2&-7\\0&0&7\end{bmatrix}$$

得行列式 $\det(A)=2\cdot2\cdot7=28$

Doolittle分解

由于在计算机实现时当u_{ri}计算好后a_{ri}就不用了，因此计算好L,U的元素后就存放在A的相应位置.例如

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & u_{34} \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & u_{44} \end{bmatrix}.$$

最后在存放A的数组中得到L,U的元素.

由直接三角分解计算公式，需要计算形如$\sum a_i b_i$的式子，可采用“双精度累加”，以提高精度.

直接分解法大约需要$n^3/3$次乘除法，和高斯消去法计算量基本相同.

如果已经实现了$A=LU$的分解计算，且L,U保存在A的相应位置，则用直接三角分解法解具有相同系数的方程组$Ax=(b_1,b_2,\ldots,b_m)$是相当方便的，每解一个方程组$Ax=b_j$仅需要增加次乘除法运算.

Doolittle分解

(1)输入：$a_{ij}(i,j=1,2,\ldots,n), b_i(i=1,2,\ldots,n)$

(2)分解$A=LU$

1)$a_{i1} \leftarrow l_{i1} = a_{i1}/a_{11}(i=2,3,\ldots,n)$;

2)对$k=2,3,\ldots n$做

$$a_{kj} \leftarrow u_{kj} = a_{kj} - \sum_{t=1}^{k-1} l_{kt}u_{tj}\,(j=k,k+1,\ldots n);$$

$$a_{ik} \leftarrow l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{t=1}^{k-1} l_{it}u_{tk})/u_{kk}(i=k+1,\ldots,n);$$

Doolittle分解

(3)解$Ly=b$和$Ux=y$

1) $y_1=b_1; y_i=b_i-\sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j)(i=2,\dots,n);$

2) $x_n=y_n/a_{nm}; x_i=(y_i-\sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j)/u_{ii}(i=n-1,\dots,2,1);$

(4)输出：方程组的解$x_i(i=1,2,\dots,n).$

6.3 追赶法

1、三对角方程组

在解常微分方程的边值问题、热传导方程以及船堤放样中建立的三次样条函数等工程问题时，经常遇到下面形式的线性方程组。

$$
\begin{cases}
b_1x_1 + c_1x_2 & = f_1 \\
a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 & = f_2 \\
\quad\cdots & \\
\qquad a_kx_{k-1} + b_kx_k + c_kx_{k+1} & = f_k \\
\quad\cdots & \\
\qquad\qquad a_{n-1}x_{n-2} + b_{n-1}x_{n-1} + c_{n-1}x_n & = f_{n-1} \\
\qquad\qquad\qquad a_nx_{n-1} + b_nx_n & = f_n
\end{cases}
\qquad (25)
$$

这样的方程组我们称为三对角线性方程组。

其系数矩阵

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & a_k & b_k & c_k & & \\ & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \quad (26)$$

称为三对角矩阵，其非零元素集中分布在主对角线及其邻近的两条次对角线上。

方程组的矩阵形式为

$$AX = f$$

其中 $$X = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$$

$$f = (f_1, f_2, \cdots, f_n)^T$$

定理3： 假设矩阵（26）为**对角占优**，即成立

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| \\ |b_i| > |a_i| + |c_i|, \qquad i = 2,3,\cdots,n \\ |b_n| > |a_n| \end{cases} \qquad (27)$$

则它是非奇异的，方程组（25）有唯一解。

证：　当n=2时，有条件（27）可以知道

$$\det(A)=\begin{vmatrix} b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}=b_1b_2-a_2c_1\neq 0$$

进一步考察 n>2时的情形

将A的第二行减去第一行的 $\dfrac{a_2}{b_1}$ 倍，得

$$\left[\begin{array}{c|ccc} b_1 & c_1 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & A_{n-1} & \\ 0 & & & \end{array}\right]$$

$$A_{n-1}=\begin{pmatrix} b_2-\frac{c_1}{b_1}a_2 & c_2 & & & \\ a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

A_{n-1}是n-1阶**三对角阵**

据条件（27）

$$|b_2-\frac{c_1}{b_1}a_2|\geq|b_2|-|\frac{c_1}{b_1}a_2|\geq|b_2|-|a_2|>|c_2|$$

所以An-1是对角占优的

而 $\det(A) = b_1 \det(A_{n-1}), \quad b_1 \neq 0$

同理可得

$$\det(A) = b_1 \det(A_{n-1}) = b_1(b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2)\det(A_{n-2}), \quad b_1 \neq 0, b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2 \neq 0$$

An-2仍然是对角占优的，反复下去可得

$$\det(A) = b_1 \det(A_{n-1}) = d_1 d_2 d_3 \cdots d_{n-2} \det(A_2),$$

$$d_1 \neq 0, d_2 \neq 0, d_3 \neq 0, \cdots d_{n-2} \neq 0,$$

A2仍然是对角占优的，故det(A2) $\neq 0$

所以,det(A) $\neq 0$

即矩阵A是非奇异的，方程组（25）有唯一解。

2、三对角方程的追赶法

- 对于系数矩阵为三对角阵，这种特殊而又简单的方程组，用前面介绍的方法求解很不经济，大量零元既占内存又浪费机时，
- 可根据顺序消元法的思想导出一个简便的算法—追赶法。

三对角方程的追赶法

如果A满足$Doolittle$分解,则有 $A=LU$

其中

$$L=\begin{pmatrix} d_1 & & & & \\ a_2 & d_2 & & & \\ & a_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & d_{n-1} & \\ & & & a_n & d_n \end{pmatrix} \quad U=\begin{pmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

三对角方程的追赶法

从而方程组 $Ax=f$ 的求解等价为

$$\begin{cases} Ly = f \\ Ux = y \end{cases}$$

先解 $Ly=f$ 即

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & \\ a_2 & d_2 & & & \\ & a_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & d_{n-1} & \\ & & & a_n & d_n \end{pmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

得

$$\begin{cases} d_1 y_1 = f_1 \\ a_i y_{i-1} + d_i y_i = f_i \qquad i = 2,3,\cdots,n \end{cases}$$

三对角方程的追赶法

故
$$\begin{cases} y_1 = f_1 / d_1 \\ y_i = (f_i - a_i y_{i-1}) / d_i \quad i = 2,3,\cdots,n \end{cases}$$

再解 $Ux=y$ 即

$$\begin{pmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

得
$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - u_i x_{i+1} \qquad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

三对角方程的追赶法

- 解三对角阵的**追赶法**
  - 追的过程：顺序求解y_i的过程
  - 赶的过程：逆序求解x_i的过程

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & a_i & b_i & c_i & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 & & & & \\ a_2 & d_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & a_i & d_i & \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & a_n & d_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & & & \\ & 1 & u_2 & & & & \\ & & 1 & \ddots & & & \\ & & & \ddots & u_{i-2} & & \\ & & & & 1 & u_{i-1} & \\ & \cdots & & & & 1 & u_i & \cdots \\ & & & & & & 1 & \ddots \\ & & & & & & & \ddots & u_{n-1} \\ & & & & \vdots & & & & 1 \end{bmatrix}$$

由矩阵乘法 $a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$， 得

(1) $b_1 = d_1$， $c_1 = d_1 u_1$， $(u_1 = c_1 / d_1)$ $\Rightarrow \begin{cases} d_1 = b_1 \\ u_1 = c_1 / b_1 \end{cases}$，

（2） $b_i = a_i u_{i-1} + d_i$ $\Rightarrow d_i = b_i - a_i u_{i-1}, (i = 2, \cdots, n)$

(3) $c_i = d_i u_i$ $\Rightarrow u_i = \dfrac{c_i}{d_i} = \dfrac{c_i}{b_i - a_i u_{i-1}} (i = 2, \cdots, n-1).$

$$\begin{cases} u_1 = c_1 / b_1 \\ u_i = c_i / (b_i - a_i u_{i-1}), (i = 2, \cdots, n-1) \end{cases}$$

解（25）的追赶法计算公式

计算次数

（1）分解计算公式（$A=LU$）

$$\begin{cases} u_1 = c_1/b_1 \\ u_i = c_i/(b_i - a_i u_{i-1})\ (i=2,\cdots,n \end{cases}$$

1次

2(n-2)次

（2）求解 $Ly=f$ 逆推公式

$$\begin{cases} y_1 = f_1/b_1 \\ y_i = (f_i - a_i y_{i-1})/(b_i - a_i u_{i-1}),(i= \end{cases}$$

1次

3(n-1)次

$$\begin{bmatrix} & & & & \\ a_2 & d_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & a_i & d_i & \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & a_n & d_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_i \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

（3）求解 $Ux=y$ 逆推公式

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

n-1次

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \ddots & \ddots & u_{i-1} & & \\ & & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & u_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

说明 1. 计算过程（1）和（2）将称为追的过程，（3）称为赶的过程

2.乘除法的次数：6n−6次.　若令 $b_i - a_i u_{i-1} = p_i$，则计算量为(6n−6)−(n−2)次，即5n−4次,但此时需贮存 $u_i\ (i=2,\cdots,n)$，尽管计算量小,但增加了计算机的内存，两者各有利弊.这实际上也是衡量一种计算方法好坏的标准：两者兼顾.

6.4 平方根法（自学）

实际问题中$Ax=b$，系数矩阵A大多是对称正定矩阵，即A是对称的且对任何非零向量 x 都有$x^TAx>0$。本节将对这类方程组导出更有效的三角分解求解方法，称之为平方根法。所谓平方根法，就是利用对称正定矩阵的三角分解而得到求解对称正定方程组的一种有效方法，目前在计算机上广泛应用平方根法解此类方程组.

定理6(对称正定矩阵的三角分解或乔雷斯基(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矩阵L使$A=LL^T$，当限定L的对角元素为正时，这种分解是唯一的.

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & & & \text{对称} \\ a_{21} & a_{22} & & \\ \vdots & \vdots & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

下面我们用直接分解方法来确定计算L元素的递推公式，因为

$$A=\begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{nn} \end{pmatrix}.$$

$$a_{ij}=\left(l_{i1},l_{i2},\cdots,l_{ii},0,\cdots 0\right)\begin{bmatrix} l_{1j} \\ l_{2j} \\ \vdots \\ l_{jj} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

其中$l_{ii}>0(i=1,2,\cdots,n)$. 由矩阵乘法及$l_{jk}=0$(当$j<k$时),得

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}l_{jk}=\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}+l_{ij}l_{jj},$$

于是得到解对称正定方程组$Ax=b$的平方根法计算公式

对于 $j=1,2,\cdots,n$

$$\text{(1).}\quad l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2\right)^{\frac{1}{2}}\quad (j=1,2,\cdots,n)\qquad (35)$$

$$\text{(2).}\quad l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}\right)\Big/ l_{jj}\quad (i=j+1,\cdots,n);$$

$$j=1\text{时}\, l_{11}=(a_{11})^{\frac{1}{2}},\ l_{i1}=\frac{a_{i1}}{l_{11}},\ i=2,3,\cdots,n$$

关于方程组 $Ax=b$ ，如果对系数矩阵进行了平方根分解 $A=LL^T$，则将方程组化为： $Ly=b$, $L^Tx=y$

$$
\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \vdots & l_{n1} \\ & l_{22} & l_{32} & \vdots & l_{n2} \\ & & l_{33} & \vdots & l_{n3} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}
$$

解得

$$
y_j = \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} y_k \right) \Big/ l_{jj}, \quad j = 1,2,\cdots,n
$$

$$
x_j = \left(y_j - \sum_{k=j+1}^{n} l_{kj} y_k \right) \Big/ l_{jj}, \quad j = n, n-1, \cdots, 1
$$

于是，关于系数矩阵是对称正定矩阵的线性方程组 $Ax=b$的求解，分两步进行：

第一步：系数矩阵的平方根分解

$$l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2\right)^{\frac{1}{2}}, \quad j=1,2,\cdots,n$$

$$l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}\right)/l_{jj}, \quad i=j,j+1,\cdots,n$$

第二步：解等价方程组

$$y_j=\left(b_j-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}y_k\right)\Big/ l_{jj}, \quad j=1,2,\cdots,n$$

$$x_j=\left(y_j-\sum_{k=j+1}^{n} l_{kj}y_k\right)\Big/ l_{jj}, \quad j=n,n-1,\cdots,1$$

例3 用平方根法求解对称正定方程组

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{pmatrix}.$$

解 首先对A进行Cholesky分解

$$A=LL^T=\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -0.5 & 2 & 0 \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -0.5 & 0.5 \\ 0 & 2 & 1.5 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

求解$Ly=b$，得 $y_1=2, y_2=3.5, y_3=1.$

求解$L^Tx=y$，得 $x_1=1, x_2=1, x_3=1.$

2.改进平方根法

平方根法不必选主元，精度高，稳定性好，是最有效算法之一。

平方根法解正定方程组的缺点是需要进行开方运算。为避免开方运算，我们改用单位三角阵作为分解阵，即把对称正定矩阵A分解成

$A = LDL^T$ 的形式，其中

$$A = LDL^T = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}.$$

$$D=\begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix}$$

为对角阵，而

$$L=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

是单位下三角阵, 这里分解公式为

$$\begin{cases} l_{ij}=(a_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{ik} l_{jk})/d_j & j=1,2,\cdots,i-1 \\ d_i=a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{ik}^2 & i=1,2,\cdots,n \end{cases}$$

据此可逐行计算 $d_1 \to l_{21} \to d_2 \to l_{31} \to l_{32} \to d_3 \to \cdots$

运用这种矩阵分解方法，方程组Ax=b即 $L(DL^T x) = b$

可归结为求解两个上三角方程组

$$Ly = b \quad 和 \quad L^T x = D^{-1} b$$

其计算公式分别为 $y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \qquad i = 1,2,\cdots,n$

和 $x_i = y_i / d_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k \qquad i = n, n-1, \cdots, 1$

求解方程组的上述算法称为改进的平方根法。这种方法总的计算量约为 $n^3/6$ ，即仅为高斯消去法计算量的一半。

1. 方程组的病态

首先考察一个例子.

例4 设有方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}. \qquad (36)$$

记为$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，它的精确解为$\boldsymbol{x}=(2,0)^{\mathrm{T}}$.

现在考虑常数项的微小变化对方程组解的影响，即考察方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix}. \qquad (37)$$

它的精确解为$\boldsymbol{x}=(1,1)^{\mathrm{T}}$.

式（37）也可表示为$A(x+\delta x)=b+\delta b$，其中

$\delta b=(0,0.0001)^T$, $y=x+\delta x$, x为(36)的解. 方程组(37)的解为 $x+\delta x=(1, 1)^T$.

式(36)的常数项b的第2个分量只有1/1000的微小变化，方程组的解却变化很大. 这样的方程组称为病态方程组.

定义 如果矩阵A或常数项b 的微小变化(小扰动), 引起方程组$Ax=b$解的巨大变化，则称此方程组为“病态”方程组, 其系数矩阵 A 称为“病态”矩阵(相对于方程组而言), 否则称方程组为“良态”方程组, A称为“良态”矩阵.

应该注意，矩阵的“病态”性质是矩阵本身的特性,下面我们希望找出刻画矩阵“病态”性质的量. 设有方程组

$$Ax=b$$

其中A为非奇异矩阵，x为上式的精确解. 以下我们研究方程组的系数矩阵A (或b)的微小误差(小扰动)时对解的影响.

(1) 现设A是精确的，x为$Ax=b$的精确解，当方程组右端有误差δb，受扰解为 $x+\delta x$，则

$$A(x+\delta x)=b+\delta b,\ Ax=b,\ \delta x=A^{-1}\delta b,$$

$$\|\delta x\|\leqslant\|A^{-1}\|\ \|\delta b\|.$$

又

$$\|b\|\leqslant\|A\|\ \|x\|.$$

$$\frac{1}{\|x\|}\leq\frac{\|A\|}{\|b\|}\quad (设b\neq 0).$$

于是得

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\leq\|A^{-1}\|\|A\|\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}.$$

上式给出了解x的相对误差的上界，常数项b的相对误差在解中放大$\|A^{-1}\|\ \|A\|$倍.

(2) 现设b是精确的，x为$Ax=b$的精确解，当A有微小误差(小扰动)δA，受扰解为 $x+\delta x$, 则

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b,$$

$$(A+\delta A)\delta x=-(\delta A)x. \qquad （38）$$

如果δA不受限制的话, 可能$A+\delta A$奇异, 而

$$(A+\delta A)=A(I+A^{-1}\delta A).$$

$\|\delta A\|$应当相当小,

当 $\|A^{-1}\delta A\|<1$时, $(I+A^{-1}\delta A)^{-1}$存在. 由(38）式得

$$\delta x=-(I+A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}(\delta A)x.$$

定理 设$\|\cdot\|$为矩阵的算子范数，且$\|B\|<1$，则$I\pm B$为非奇异矩阵，且有估计 $\|(I\pm B)^{-1}\|\le\dfrac{1}{1-\|B\|}$。

$$\delta x=-(I+A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}(\delta A)x.$$

设$\|A^{-1}\|\ \|\delta A\|<1$, 即得
$$\|\delta x\|\le\frac{\|A^{-1}\|\,\|\delta A\|\,\|x\|}{1-\|A^{-1}(\delta A)\|}$$
因此

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\frac{\|A^{-1}\|\,\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A^{-1}\|\ \|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}. \qquad (39)$$

定理 设A是非奇异矩阵，$Ax=b\neq0$，且
$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b.$$

如果$\|A^{-1}\|\ \|\delta A\|<1$，则(39)式成立.

如果δA充分小，且$\|A^{-1}\|\,\|\delta A\|<1$下，则(39)式说明矩阵$A$的相对误差$\|\delta A\|/\|A\|$在解中可能放大$\|A^{-1}\|\,\|A\|$倍.

总之，量$\|A^{-1}\|\,\|A\|$越小，由A(或b)的相对误差引起的解的相对误差就越小；量$\|A^{-1}\|\,\|A\|$越大，解的相对误差就可能越大. 所以量$\|A^{-1}\|\,\|A\|$事实上刻画了解对原始数据变化的灵敏程度，即刻画了方程组的“病态”程度。

(3) 现设x为$Ax=b$的精确解，当A有微小误差(小扰动)δA, 而b同时也有微小误差δb(小扰动)时，受扰解为$x+\delta x$, 则还可以推出相对误差估计式为

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\|A\|\,\|A^{-1}\|}{1-\|A\|\,\|A^{-1}\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right).$$

实际工作中一般不先去判断方程组的病态.但是必须明白，在解决实际问题的全过程中, 发现结果有问题，同时数学模型中有线性方程组出现，则方程组的病态可能是出问题的环节之一.

3. 矩阵的条件数

定义　设$A \in R^{n\times n}$，$A^{-1}\exists$，数

3.

$$Cond(A) = \| A^{-1} \| \| A \|$$

称为矩阵A的条件数（*Condition Number*）。

由此看出矩阵的条件数与范数有关.

由上面讨论知,当A的条件数相对的大, 即cond(A)>>1时, 方程组的病态程度越严重, 也就越难用一般的计算方法求得比较准确的解.

但多大的条件数才算病态则要视具体问题而定, 病态的说法只是相对而言.

例10 设

$$Ax=\begin{pmatrix}1 & 10^4\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}10^4\\ 2\end{pmatrix}=b, \qquad (5.9)$$

计算条件数$\mathrm{cond}(A)_\infty$.

解 因为

$$A=\begin{pmatrix}1 & 10^4\\ 1 & 1\end{pmatrix}, \quad A^{-1}=\frac{1}{10^4-1}\begin{pmatrix}-1 & 10^4\\ 1 & -1\end{pmatrix},$$

所以得

$$cond(A)_\infty=\frac{(1+10^4)^2}{10^4-1}\approx 10^4.$$

矩阵A的病态程度十分严重, 故由此方程组的解误差非常大.

通常使用的条件数, 有

(1) $\mathrm{cond}(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty$;

(2) A的谱条件数;

$$cond(A)_2 = \left\|A^{-1}\right\|_2 \left\|A\right\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}}.$$

当A为对称矩阵时

$$cond(A)_2 = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}.$$

其中λ_1, λ_n为A的绝对值最大和绝对值最小的特征值.

条件数的性质:

(1). 对任何非奇异矩阵，都有$\text{cond}(A)_v \geq 1$. 事实上

$$cond(A) = \|A^{-1}\| \|A\| \geq \|A^{-1}A\| = \|I\| = 1.$$

(2). 设A为非奇异矩阵且$c \neq 0$(常数), 则

$$\text{cond}(cA)_v = \text{cond}(A)_v.$$

(3). 如果A为正交矩阵，则$\text{cond}(A)_2 = 1$；如果A为非奇异矩阵，R为正交矩阵, 则

$$\text{cond}(RA)_2 = \text{cond}(AR)_2 = \text{cond}(A)_2.$$

病态方程组无论选用什么方法去解, 都不能根本解决原始误差的扩大, 即使采用全主元消去法也不行. 可以试用加大计算机字长, 比如用双精度字长计算, 或可使问题相对得到解决. 如仍不行, 则最好考虑修改数学模型, 避开病态方程组.

4. 精度分析--事后误差估计

设$Ax=b$，$A^{-1}\exists$，x^*是精确解, x 为计算近似解。用计算剩余量$r=b-Ax$ 来检验计算解的精度，是否 r很小, x就是$Ax=b$一个较好的近似解呢？

定理8（事后误差估计）

设x是$Ax=b$ 的近似解，其精确解为 $x^*, r=b-Ax,$

则有
$$\frac{\|x^*-x\|}{\|x^*\|}\le Cond(A)\frac{\|r\|}{\|b\|}。\qquad（40）$$

证明

由$Ax^*=b,$ $A(x^*-x)=r$ 得

$$\|x^*-\mathrm{x}\|\le\|A^{-1}\|\,\|r\|,$$

$$\|b\|=\|Ax^*\|\le\|A\|\,\|x^*\|,\quad \frac{1}{\|x^*\|}\le\frac{\|A\|}{\|b\|},$$

所以式（40）成立。

(40)式说明, 近似解 χ的精度(误差界)不仅依赖于剩余r的“大小”, 而且依赖于A的条件数. 当A是病态时, 即使有很小的剩余r, 也不能保证 x是高精度的近似解.

本课重点:

作业: P.$_{197}$ 1（2）、 2（1）、3、9

1.理解掌握高斯消去法并会用该方法解方程组.

2. 理解列主元素消去法,会用列主元素消去法解方程组.

3.理解并会用杜里特尔分解法解简单的方程组;
理解解三对角线方程组的解法.

4.会求矩阵的条件数。