线性代数方程组

浙江大学控制学院

降落小组

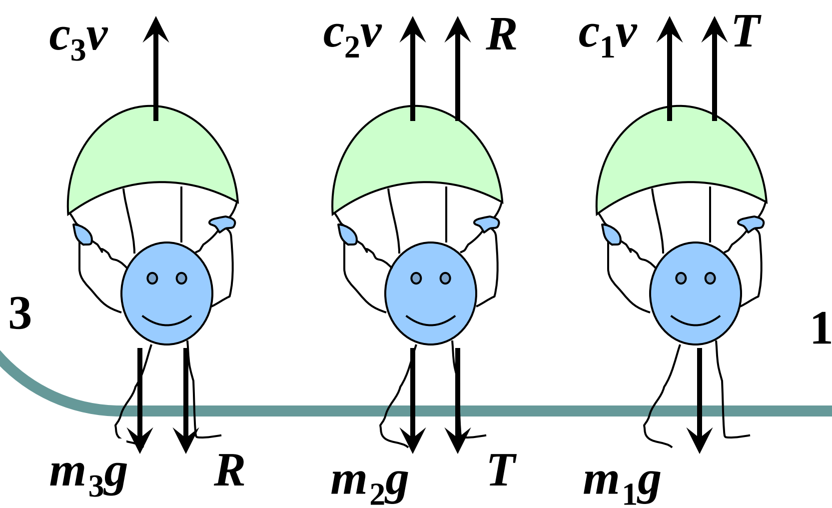
- 三个降落伞构成的降落小组通过无重力的绳子连接以5m/s的速度自由降落。计算每段绳子的张力和这个小组的加速度。参数如下

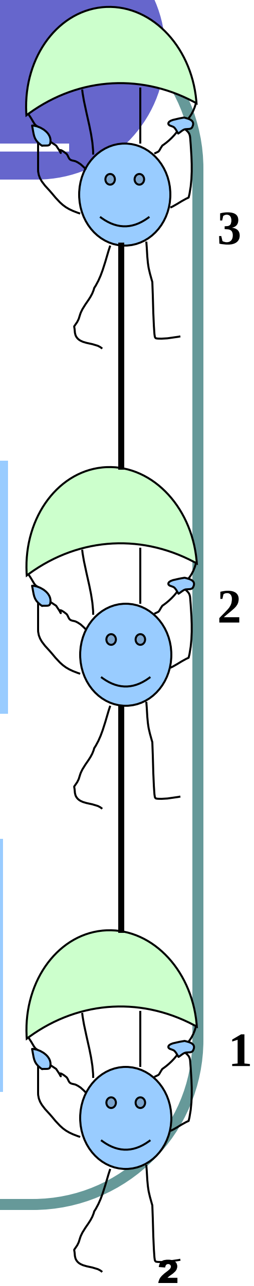
降落伞	质量（kg）	阻力系数（kg/s）
1	70	10
2	60	14
3	40	17

$$\begin{cases} m_1 g - T - c_1 v = m_1 a \\ m_2 g + T - c_2 v - R = m_2 a \\ m_3 g - c_3 v + R = m_3 a \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{bmatrix} 70 & 1 & 0 \\ 60 & -1 & 1 \\ 40 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ T \\ R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 636 \\ 518 \\ 307 \end{bmatrix}$$





线性代数方程组

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

- 矩阵形式： $AX=b$

$$\mathrm{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = (a_{ij})_{n\times n}$$

$$X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix}^T, b = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix}^T$$

- **增广矩阵**

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

线性方程组系数矩阵的类型

- 低阶稠密矩阵
- 大型稀疏矩阵（矩阵中0元素较多）
- 三对角矩阵（非0元素集中于主对角线及相邻两对角线上）

线性方程组的数值解法

- 直接法：
  - 经过有限步算术运算，可求得方程组的精确解的方法。（若在计算过程中没有舍入误差）
  - 可预先估算使用机器时间，计算量小，但要占用较多内存，程序复杂。一般说来，适用于方程组的系数矩阵阶数不太高的问题。
- 迭代法：
  - 用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解的方法
  - 迭代法具有占存储单元少，程序设计简单，原始系数矩阵在迭代过程中不变等优点，但计算工作量有时较大。适宜计算系数矩阵为稀疏矩阵的问题。
  - 存在收敛性及收敛速度等问题，对方程组的系数矩阵有一定的要求，才能保证迭代过程的收敛

本章内容

- 高斯消去法
- LU分解、特殊矩阵和矩阵求逆
- 误差分析、条件数
- 迭代方法

小规模线性方程组

- 图解法
- 克莱姆法则（Cramer’s Rule）
- 消去法
- 计算机方法

非计算机方法

图解法

- 两个方程组成的方程组

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

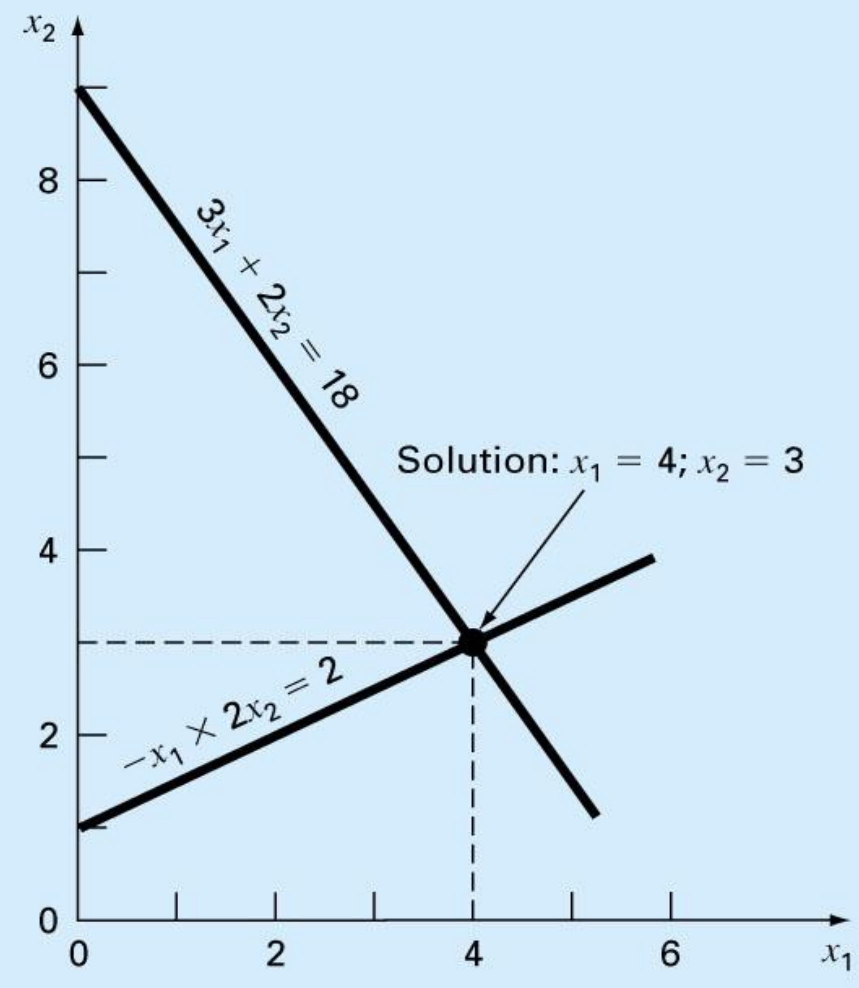
- 对两个方程同时解x_2：

$$x_2 = -\left(\frac{a_{11}}{a_{12}}\right)x_1 + \frac{b_1}{a_{12}} \quad \Rightarrow \quad x_2 = (\text{slope})x_1 + \text{intercept}$$

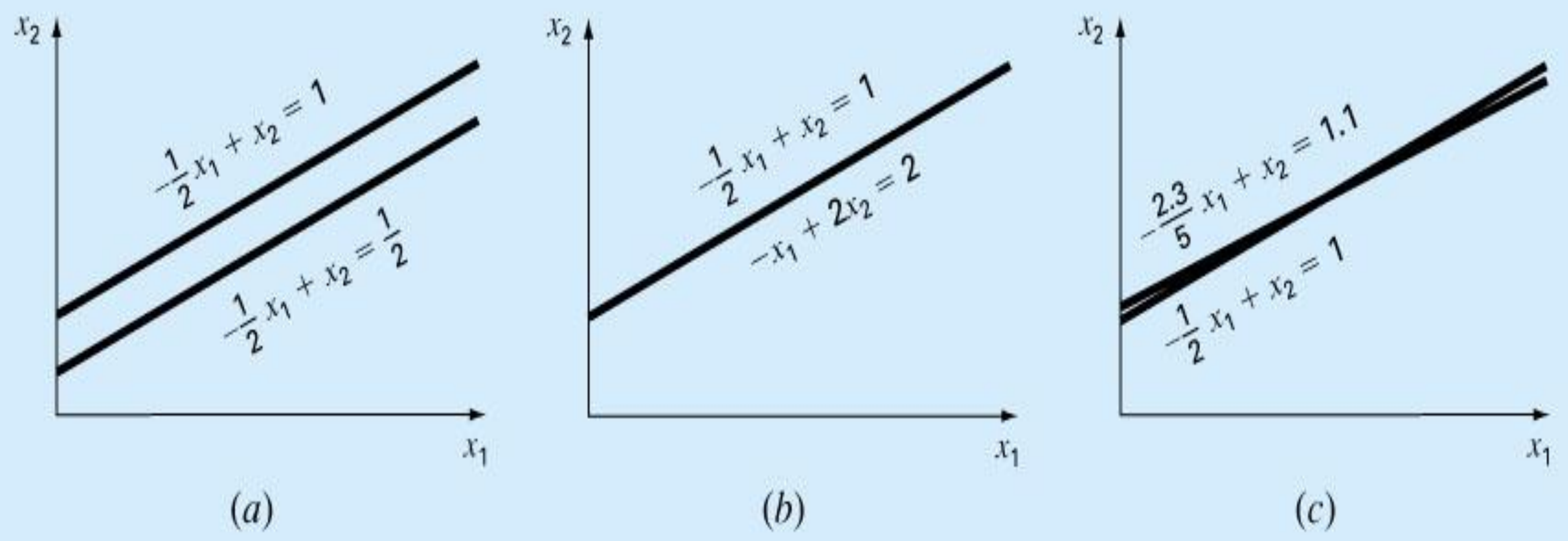
$$x_2 = -\left(\frac{a_{21}}{a_{22}}\right)x_1 + \frac{b_2}{a_{22}}$$

图解法

- 在二维坐标系中画出两条直线，交点即为联立方程组的解
- 三个方程组成的联立方程组：
  - 每个方程是三维空间中的一个平面
  - 三个平面的交点表示方程组的根



图解法



无解　　　　无穷多解　　　　病态情况（斜率接近）

$\underbrace{\text{无解} \quad \text{无穷多解}}_{\text{奇异}}$

行列式和克莱姆法则

- 行列式的计算
  - 二阶

$$D=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}=a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}$$

  - 三阶

$$D=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}=a_{11}D_{11}-a_{12}D_{12}+a_{13}D_{13}$$

$$D_{11}=\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}=a_{22}a_{33}-a_{32}a_{23}$$

$$D_{12}=\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix}=a_{21}a_{33}-a_{31}a_{23}$$

$$D_{13}=\begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix}=a_{21}a_{32}-a_{31}a_{22}$$

行列式和克莱姆法则

- 例：计算第9和10页图中表示的方程组的系数矩阵A的行列式的值。
- 解：P9——
$$D=\begin{vmatrix}3 & 2\\ -1 & 2\end{vmatrix}=8$$
- P10(a)——
$$D=\begin{vmatrix}-1/2 & 1\\ -1/2 & 1\end{vmatrix}=0$$
- P10(b)——
$$D=\begin{vmatrix}-1/2 & 1\\ -1 & 2\end{vmatrix}=0$$

奇异方程组的行列式为0

- P10(c)——
$$D=\begin{vmatrix}-1/2 & 1\\ -2.3/5 & 1\end{vmatrix}=-0.04$$

接近奇异（病态）方程组的行列式接近0

行列式和克莱姆法则

- 克莱姆法则
  - 每个未知数通过一个分式来计算
  - 分式的分母是线性代数方程组的行列式
  - 分子是另外一个行列式，该行列式与方程组系数行列式D只有未知数对应的一列不同，不同的列为常数b_1，b_2，…，b_n
  - 例：计算x_1为

$$x_1 = \frac{\begin{vmatrix} b_1 & a_{12} & a_{13} \\ b_2 & a_{22} & a_{23} \\ b_3 & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}}{D}$$

行列式和克莱姆法则

n＝100，10^{33}次/秒的计算机要算10^{120}年！

- 问题：使用克莱姆法则求解

$$\begin{cases} 0.3x_1 + 0.52x_2 + x_3 = -0.01 \\ 0.5x_1 + x_2 + 1.9x_3 = 0.67 \\ 0.1x_1 + 0.3x_2 + 0.5x_3 = -0.44 \end{cases}$$

- 解：

$$D = \begin{vmatrix} 0.3 & 0.52 & 1 \\ 0.5 & 1 & 1.9 \\ 0.1 & 0.3 & 0.5 \end{vmatrix} = -0.0022$$

$$x_1 = \frac{\begin{vmatrix} -0.01 & 0.52 & 1 \\ 0.67 & 1 & 1.9 \\ -0.44 & 0.3 & 0.5 \end{vmatrix}}{D} = \frac{0.03278}{-0.0022} = -14.9$$

$$x_2 = \frac{\begin{vmatrix} 0.3 & -0.01 & 1 \\ 0.5 & 0.67 & 1.9 \\ 0.1 & -0.44 & 0.5 \end{vmatrix}}{D} = \frac{0.0649}{-0.0022} = -29.5$$

$$x_3 = \frac{\begin{vmatrix} 0.3 & 0.52 & -0.01 \\ 0.5 & 1 & 0.67 \\ 0.1 & 0.3 & -0.44 \end{vmatrix}}{D} = \frac{-0.04326}{-0.0022} = 19.8$$

未知数消去法

- 两个方程分别乘以常数，使得当两个方程合并时一个未知数可以消去，结果为一个单独的方程，可以求解剩下的未知数，将求解出的未知数代入到原来的方程中，求出另外一个未知数的值。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \end{cases} \begin{matrix} \xrightarrow{\text{乘以}a_{21}} \\ \xrightarrow{\text{乘以}a_{11}} \end{matrix} \begin{cases} a_{11}a_{21}x_1 + a_{12}a_{21}x_2 = a_{21}b_1 \\ a_{11}a_{21}x_1 + a_{22}a_{11}x_2 = a_{11}b_2 \end{cases}$$

$$a_{22}a_{11}x_2 - a_{12}a_{21}x_2 = a_{11}b_2 - a_{21}b_1$$

$$x_2 = \frac{a_{11}b_2 - a_{21}b_1}{a_{22}a_{11} - a_{12}a_{21}}$$

$$x_1 = \frac{a_{22}b_1 - a_{12}b_2}{a_{22}a_{11} - a_{12}a_{21}}$$

原始高斯消去法（高斯顺序消去法）

- 未知数的消去，得到一个只有一个未知数的方程
- 回代，求解剩下的未知数

$$\left[\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & c_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & c_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & c_3 \end{array}\right]$$

$$\Downarrow$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & c_1 \\ & a'_{22} & a'_{23} & c'_2 \\ & & a''_{33} & c''_3 \end{array}\right]$$

Forward elimination

$$\Downarrow$$

$$x_3 = c''_3 / a''_{33}$$
$$x_2 = (c'_2 - a'_{23}x_3)/a'_{22}$$
$$x_1 = (c_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3)/a_{11}$$

Back substitution

原始高斯消去法

主元
(pivotal element)

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

$\xrightarrow{\text{乘以}a_{21}/a_{11}}$

$$
a_{21}x_1 + \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}x_2 + \ldots\ldots + \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{1n}x_n = \frac{a_{21}}{a_{11}}b_1
$$

$\Downarrow$ 方程2减去上式

$$
\left(a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}\right)x_2 + \ldots\ldots + \left(a_{2n} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{1n}\right)x_n = \left(b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}b_1\right)
$$

$\Updownarrow$

$$
a'_{22}x_2 + \ldots\ldots + a'_{2n}x_n = b'_2
$$

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots\ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a'_{22}x_2 + \ldots\ldots + a'_{2n}x_n &= b'_2 \\
&\ldots\ldots \\
a'_{n2}x_2 + \ldots\ldots + a'_{nn}x_n &= b'_n
\end{aligned}
$$

$\longrightarrow$

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots\ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + \ldots\ldots + a'_{2n}x_n &= b'_2 \\
a''_{33}x_3 + \ldots\ldots + a''_{2n}x_n &= b''_3 \\
&\ldots\ldots \\
a''_{n3}x_3 + \ldots\ldots + a''_{nn}x_n &= b''_n
\end{aligned}
$$

$\longleftarrow$

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \ldots\ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 \ldots\ldots + a'_{2n}x_n &= b'_2 \\
a''_{33}x_3 + \ldots\ldots + a''_{3n}x_n &= b''_3 \\
&\ldots\ldots \\
a_{nn}^{(n-1)}x_n &= b_n^{(n-1)}
\end{aligned}
$$

原始高斯消去法

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

- 每一步消元过程相当于对A作一次初等变换。即左乘一个初等下三角矩阵L_i^{-1}

$$L_1^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & 1 & & & \\ -l_{31} & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ -l_{n1} & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$l_{i1}=a_{i1}/a_{11}$

$$L_k^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & -l_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & -l_{nk} & & & 1 \end{bmatrix}$$

$l_{ik}=a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)}$

- 最后得到 $L_{n-1}^{-1}L_{n-2}^{-1}\cdots L_2^{-1}L_1^{-1}A=U$

原始高斯消去法

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \ldots\ldots + a_{1n}x_n = b_1$$
$$a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 \ldots\ldots + a'_{2n}x_n = b'_2$$
$$a''_{33}x_3 + \ldots\ldots + a''_{3n}x_n = b''_3$$
$$\ldots\ldots$$
$$a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)}$$

$$\Rightarrow \quad x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}$$

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

$$i = n-1, n-2, \cdots, 1$$

```
%消去过程
for k=1:n-1
    for i=k+1:n
        factor=a(i,k)/a(k,k);
        for j=k+1:n
            a(i,j)=a(i,j)-factor*a(k,j);
        end
        b(i)=b(i)-factor*b(k);
    end
end
```

```
%回代过程
x(n)=b(n)/a(n,n);
for i=n-1:-1:1
    sum=b(i);
    for j=i+1:n
        sum=sum-a(i,j)*x(j);
    end
    x(i)=sum/a(i,i);
end
```

消去过程的浮点操作个数

$$\frac{2n^3}{3} + O(n^2)$$

回代过程的浮点操作个数

$$n^2 + O(n)$$

原始高斯消去法

- 原始高斯消去法总的浮点操作个数：

$$\frac{2n^3}{3}+O(n^2)+n^2+O(n) \xrightarrow{\text{当}n\text{增加时}} \frac{2n^3}{3}+O(n^2)$$

- 结论：
  - 当方程组规模变大时，计算时间增加很快。浮点操作个数增加接近维数增加量的三次方
  - 大多数计算时间消耗在消去步骤中

高斯消去法——求行列式

- 依据
  - 上三角矩阵的行列式为对角线元素的乘积

$$D = a_{11} a'_{22} a''_{33} \cdots a_{nn}^{(n-1)}$$

- 前向消去的过程中行列式的值不变

原始高斯消去法——例

- 问题：使用原始高斯消去法求解，要求保持6位有效数字的精度

$$\begin{cases} 3x_1 - 0.1x_2 - 0.2x_3 = 7.85 & (1) \\ 0.1x_1 + 7x_2 - 0.3x_3 = -19.3 & (2) \\ 0.3x_1 - 0.2x_2 + 10x_3 = 71.4 & (3) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 3x_1 - 0.1x_2 - 0.2x_3 = 7.85 & (1) \\ 7.00333x_2 - 0.293333x_3 = -19.5617 & (2') \\ -0.190000x_2 + 10.0200x_3 = 70.6150 & (3') \end{cases}$$

(3’)-(2’)×(-0.190000)/7.00333

$$\begin{cases} 3x_1 - 0.1x_2 - 0.2x_3 = 7.85 & (1) \\ 7.00333x_2 - 0.293333x_3 = -19.5617 & (2') \\ 10.0120x_3 = 70.0843 & (3'') \end{cases}$$

$$x_3 = \frac{70.0843}{10.0120} = 7.00000 \Rightarrow x_2 = -2.50000 \Rightarrow x_1 = 3.00000$$

很接近准确结果(3, -2.5, 7)，但未知数x3的值与真实值仍然有微小的差异

原始高斯消去法的缺陷

- 被0除
  - 消去和回代中都存在这个问题
- 舍入误差
  - 大规模问题中，每一个计算结果都依赖于前面的结果
- 病态方程组
- 奇异方程组
  - 两个方程组完全相等时，n个未知数而只有n-1个方程
  - 对大规模方程组，不容易发现这种奇异性
  - 利用奇异方程组的行列式为0进行判断

病态方程组

- 问题：

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 &= 10 \\ 1.1x_1 + 2x_2 &= 10.4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 &= 10 \\ 1.05x_1 + 2x_2 &= 10.4 \end{aligned}$$

- 解：

$$x_1 = \frac{2\times10 - 2\times10.4}{1\times2 - 2\times1.1} = 4$$

$$x_2 = \frac{1\times10.4 - 1.1\times10}{1\times2 - 2\times1.1} = 3$$

$$x_1 = \frac{2\times10 - 2\times10.4}{1\times2 - 2\times1.05} = 8$$

$$x_2 = \frac{1\times10.4 - 1.1\times10}{1\times2 - 2\times1.05} = 1$$

解显著变化！

$$\begin{aligned} &8 + 2\times1 = 10 = 10 \\ &1.1\times8 + 2\times1 = 10.8 \cong 10.4 \end{aligned}$$

误差检查的结果！

病态方程组的判别

- 行列式的值？
  - 标量因子会对行列式产生影响，但对解没有影响
    - 良态方程组 $\begin{aligned} 3x_1 + 2x_2 &= 18 \\ -x_1 + 2x_2 &= 2 \end{aligned}$ $D = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = 8$
    - 病态方程组 $\begin{aligned} x_1 + 2x_2 &= 10 \\ 1.1x_1 + 2x_2 &= 10.4 \end{aligned}$ $D = -0.2$
    - 病态方程组×10 $\begin{aligned} 10x_1 + 20x_2 &= 100 \\ 11x_1 + 20x_2 &= 104 \end{aligned}$ $D = -20$
  - 对方程组进行缩放使得任何一行中的最大系数等于1，然后计算行列式的值

$\begin{aligned} x_1 + 0.667x_2 &= 6 \\ -0.5x_1 + x_2 &= 1 \end{aligned}$ $D = 1.333$ $\begin{aligned} 0.5x_1 + x_2 &= 5 \\ 0.55x_1 + x_2 &= 5.2 \end{aligned}$ $D = -0.05$

病态方程组的判别——其他方法

- 矩阵求逆和矩阵标准化
- 稍微改变系数然后求解，如果得到彻底不同的解，则方程组很可能是病态的。

解求精技术

- 使用扩展精度
- 选主元
  - 列主元消去法（Partial pivoting）——实用方法
  - 全主元消去法（Complete pivoting）
- 缩放
  - 缩放之后的系数用来确定是否需要交换主元，但实际消去和回代中仍使用原系数值

列主元消去法

Matlab中求最大可用max

- 从第一列中选出绝对值最大的元素

$$\left|a_{11}\right| = \max_{1\le i\le n}\left|a_{i1}\right|$$

交换

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots\cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots\cdots & a_{11} & b_2 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots\cdots & a_{in} & b_i \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots\cdots & a_{nn} & b_n \end{bmatrix}$$

- 顺序消元
- 第k步

$$|a_{i_k k}^{(k)}| = \max_{k\le i\le n} |a_{ik}^{(k)}| \qquad 记 l = i_k$$

若$l\neq k$，则交换第k行与l行的所有对应元素，再进行顺序消元。

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots\cdots & a_{1n} & b_1 \\ & a_{22} & \cdots\cdots & a_{11} & b_2 \\ & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ & a_{kk} & \cdots\cdots & a_{kn} & b_k \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ & a_{nk} & \cdots\cdots & a_{nn} & b_n \end{bmatrix}$$

全主元消去法

- 从 $a_{ij}(i,j=1,2,\ldots,n)$ 中选择绝对值最大者作为主元，进行消元

$$\tilde{A}_{n-k}=\begin{bmatrix} a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k,n}^{(k-1)} \\ a_{k+1,k}^{(k-1)} & a_{k+1,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k-1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{nk}^{(k-1)} & a_{n,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{n,n}^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

- 第k步，选主元 $|a_{i_k,j_k}^{(k-1)}|=\max\limits_{k\le i,j\le n}|a_{i,j}^{(k-1)}|$

- 执行消元过程

在进行列交换时，所求未知数的顺序同时要交换。

工作量大！

列主元消去法——例1

- 问题：使用高斯消去法求解(准确解为(1/3,2/3))

$$\begin{aligned} 0.0003x_1 + 3.0000x_2 &= 2.0001 \\ 1.0000x_1 + 1.0000x_2 &= 1.0000 \end{aligned}$$

- 高斯顺序消去：

$$\begin{aligned} x_1 + 10000x_2 &= 6667 \\ -9999x_2 &= -6666 \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} x_2 &= \frac{2}{3} \\ x_1 &= \frac{2.0001-3(2/3)}{0.0003} \end{aligned}$$

有效位数	x_2	x_1	x_1的百分比相对误差的绝对值
3	0.667	-3.33	1099
4	0.6667	0.0000	100
5	0.66667	0.30000	10
6	0.666667	0.330000	1
7	0.6666667	0.3330000	0.1

列主元消去法——例1（续）

- 选主元

$$\begin{aligned} 1.0000x_1 + 1.0000x_2 &= 1.0000 \\ 0.0003x_1 + 3.0000x_2 &= 2.0001 \end{aligned}$$

- 高斯消去：

$$\begin{aligned} 1.0000x_1 + 1.0000x_2 &= 1.0000 \\ 2.9997x_2 &= 1.9998 \end{aligned}$$

$$x_2 = \frac{2}{3}, \quad x_1 = \frac{1-(2/3)}{1}$$

有效位数	x_2	x_1	x_1的百分比相对误差的绝对值
3	0.667	0.333	0.1
4	0.6667	0.3333	0.01
5	0.66667	0.33333	0.001
6	0.666667	0.333333	0.0001
7	0.6666667	0.3333333	0.00001

列主元消去法——例2

- 问题：5位有效数字，舍去

$$\begin{aligned} 10x_1 - 7x_2 &= 7 \\ -3x_1 + 2.099x_2 + 6x_3 &= 3.901 \\ 5x_1 - x_2 + 5x_3 &= 6 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2.099 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 3.901 \\ 6 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{消去}} \begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & -0.001 & 6 & 6.001 \\ 0 & 0 & 15005 & 15004 \end{bmatrix}$$

回代

$$x_3 = \frac{15004}{15005} = 0.99993$$

$$x_2 = \frac{6.001 - 6x_3}{-0.001} = -1.5$$

$$x_1 = \frac{7 + 7x_2 - 0x_3}{10} = -0.3500$$

$$[X]_{exact} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

与真实解相差巨大！

列主元消去法——例2（续）

$$\begin{bmatrix}10 & 7 & 0\\ -3 & 2.099 & 6\\ 5 & -1 & 5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}7\\ 3.901\\ 6\end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix}10 & -7 & 0\\ 0 & \boxed{\begin{matrix}-0.001\\ 2.5\end{matrix}} & \begin{matrix}6\\ 5\end{matrix}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}7\\ 6.001\\ 2.5\end{bmatrix}$$

行交换

$$\begin{bmatrix}10 & -7 & 0\\ 0 & 2.5 & 5\\ 0 & -0.001 & 6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}7\\ 2.5\\ 6.001\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}10 & -7 & 0\\ 0 & 2.5 & 5\\ 0 & 0 & 6.002\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}7\\ 2.5\\ 6.002\end{bmatrix}$$

$$x_3=\frac{6.002}{6.002}=1$$

$$x_2=\frac{2.5-5x_3}{2.5}=-1$$

$$x_1=\frac{7+7x_2-0x_3}{10}=0$$

$$[X]_{exact}=\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ -1\\ 1\end{bmatrix}$$

与真实解一致！

缩放——例子

- 问题：采用3位有效位精度求解方程组 $\begin{aligned} 2x_1 + 100{,}000x_2 &= 100{,}000 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}$
  真实解(1.00002, 0.99998)
- 解1： $\begin{aligned} 2x_1 + 100{,}000x_2 &= 100{,}000 \\ -50{,}000x_2 &= -50{,}000 \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} x_2 &= 1 \\ x_1 &= 0 \end{aligned}$ **x_2是正确的，但是因为舍入误差，x_1误差100%**
- 解2： $\begin{aligned} 0.00002x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ 0.00002x_1 + x_2 &= 1 \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ x_2 &= 1.00 \end{aligned} \Rightarrow x_1 = x_2 = 1$
- 解3： $\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ 2x_1 + 100{,}000x_2 &= 100{,}000 \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ 100{,}000x_2 &= 100{,}000 \end{aligned} \Rightarrow x_1 = x_2 = 1$
- 通过缩放确定是否交换主元，但方程不需要缩放就可以求得正确解

高斯消去法——例

- 已知火箭在三个不同时刻的速度如下表所示，且速度在5<t<12时可用多项式 $v(t)=a_1t^2+a_2t+a_3$ 近似，求t=6，7.5，9和11时刻的速度。
- 解：

$$\begin{bmatrix} t_1^2 & t_1 & 1 \\ t_2^2 & t_2 & 1 \\ t_3^2 & t_3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 25 & 5 & 1 \\ 64 & 8 & 1 \\ 144 & 12 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 106.8 \\ 177.2 \\ 279.2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 25 & 5 & 1 \\ 0 & -4.8 & -1.56 \\ 0 & 0 & 0.7 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 106.8 \\ -96.21 \\ 0.735 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0.2900 \\ 19.70 \\ 1.050 \end{bmatrix}$$

$t(s)$	$v(m/s)$
5	106.8
8	177.2
12	279.2

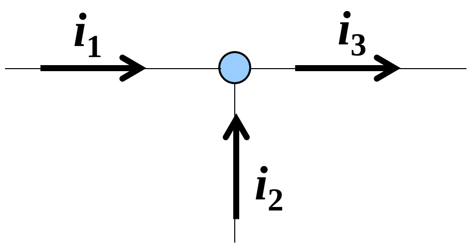
线性代数方程组——例

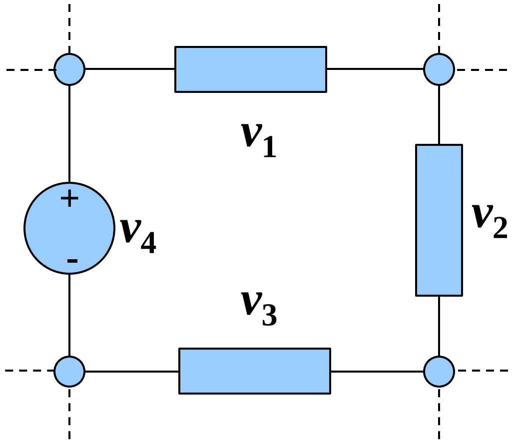
- 试应用基尔霍夫电流电压定律确定电阻电路中不同位置的电流和电压。
  - 电流定律：流过节点的所有电流代数和为0

    $$\sum i = 0$$

  - 电压定律：任何回路的所有支路的电压代数和为0

    $$\sum v = 0$$



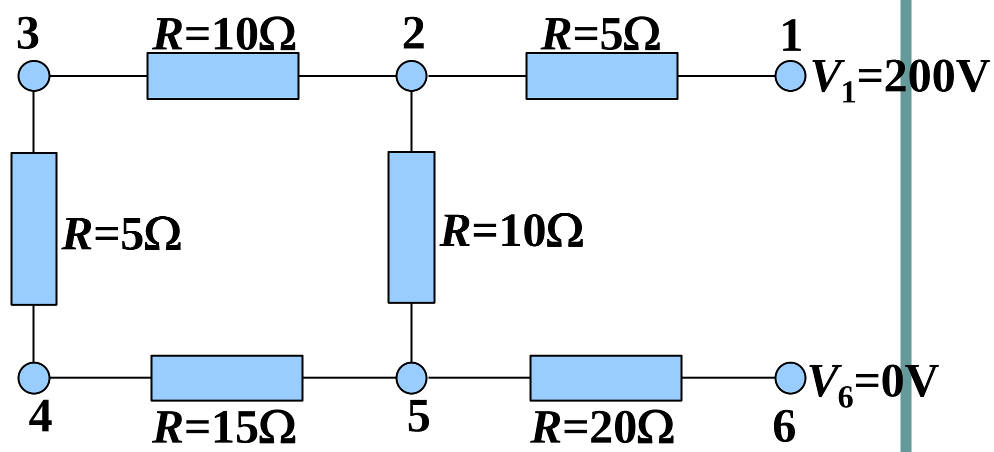


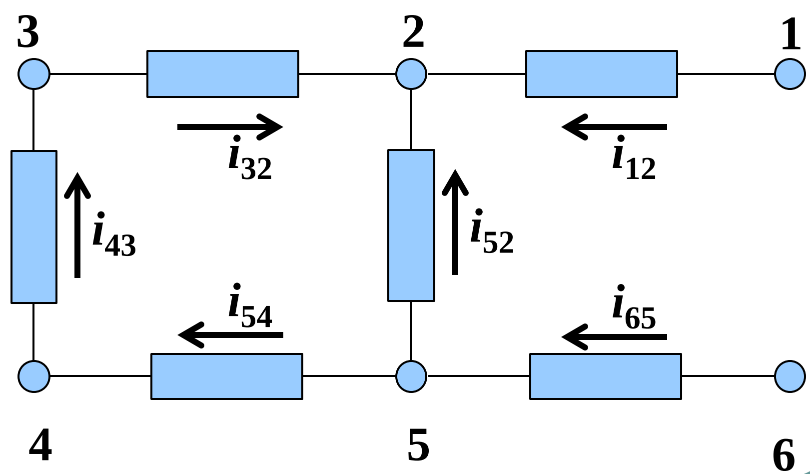
线性代数方程组——例

- 考虑图中的电路
  - 为每个电流假设一个方向
  - 对每个节点应用基尔霍夫电流定律
  - 对两个回路应用基尔霍夫电压定律

$$
\begin{aligned}
i_{12}+i_{52}+i_{32}&=0\\
i_{65}-i_{52}-i_{54}&=0\\
i_{43}-i_{32}&=0\\
i_{54}-i_{43}&=0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
-i_{54}R_{54}-i_{43}R_{43}-i_{32}R_{32}+i_{52}R_{52}&=0\\
-i_{65}R_{65}-i_{52}R_{52}+i_{12}R_{12}-200&=0
\end{aligned}
$$

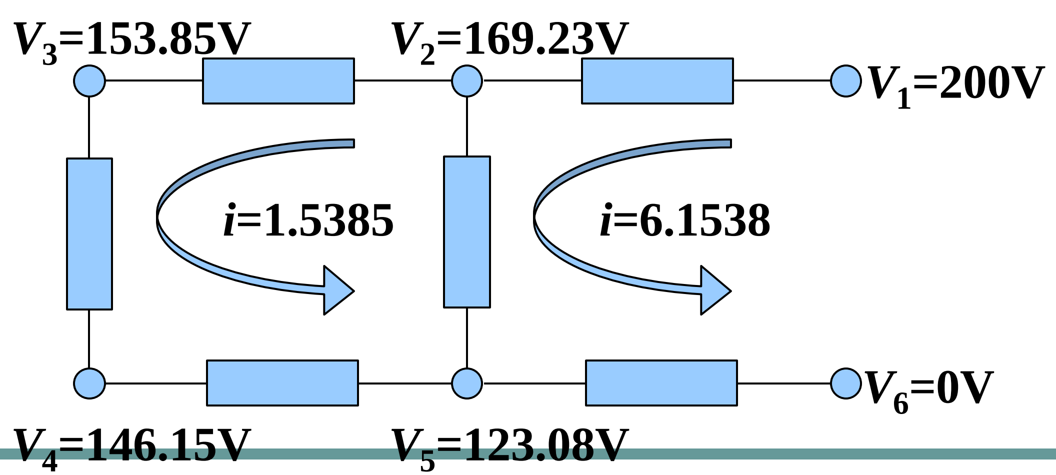




线性代数方程组——例

- 求解包含6个电流未知数的方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 10 & -10 & 0 & -15 & -5 \\ 5 & -10 & 0 & -20 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i_{12} \\ i_{52} \\ i_{32} \\ i_{65} \\ i_{54} \\ i_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 200 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} i_{12} \\ i_{52} \\ i_{32} \\ i_{65} \\ i_{54} \\ i_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6.1538 \\ -4.6154 \\ -1.5385 \\ -6.1538 \\ -1.5385 \\ -1.5385 \end{bmatrix}$$



高斯-约当法

- 高斯消去法的变形
- 将所有方程中的未知数都消去
- 除以主元进行标准化
- 消去的结果为一个单位阵
- 只需要消去，不需要回代

- 针对高斯消去法的改进可用于高斯约当法
- 乘/除法浮点操作个数为

$$\frac{n^3}{2}+n^2-\frac{n}{2} \xrightarrow{\text{当}n\text{增加时}} \frac{n^3}{2}+O(n^2)$$

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

$$\Downarrow$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & \cdots & 0 & b_1^{(n)} \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & b_2^{(n)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b_n^{(n)} \end{array}\right]$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{array}{lllll} x_1 & & & & = b_1^{(n)} \\ & x_2 & & & = b_2^{(n)} \\ & & \cdots & & \\ & & & x_n & = b_n^{(n)} \end{array}$$

高斯-约当法——例

- 采用高斯-约当法求解方程组

$$\begin{cases} 3x_1 - 0.1x_2 - 0.2x_3 = 7.85 \\ 0.1x_1 + 7x_2 - 0.3x_3 = -19.3 \\ 0.3x_1 - 0.2x_2 + 10x_3 = 71.4 \end{cases}$$

$$\begin{matrix} 3 & -0.1 & -0.2 & 7.85 \\ 0.1 & 7 & -0.3 & -19.3 \\ 0.3 & -0.2 & 10 & 71.4 \end{matrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -0.0333333 & -0.0666667 & 2.61667 \\ 0.1 & 7 & -0.3 & -19.3 \\ 0.3 & -0.2 & 10 & 71.4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -0.0333333 & -0.0666667 & 2.61667 \\ 0 & 7.00333 & -0.293333 & -19.5617 \\ 0 & -0.190000 & 10.0200 & 70.6150 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -0.0333333 & -0.0666667 & 2.61667 \\ 0 & 1 & -0.0418848 & -2.79320 \\ 0 & -0.190000 & 10.0200 & 70.6150 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -0.0680629 & 2.52356 \\ 0 & 1 & -0.0418848 & -2.79320 \\ 0 & 0 & 10.0120 & 70.0843 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -0.0680629 & 2.52356 \\ 0 & 1 & -0.0418848 & -2.79320 \\ 0 & 0 & 1 & 7.00000 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 3.00000 \\ 0 & 1 & 0 & -2.50000 \\ 0 & 0 & 1 & 7.00000 \end{bmatrix}$$

高斯消去法的总结

- 掌握
  - 消去
  - 回代
  - 缺陷
  - 改进
  - 选主元
    - Gauss顺序消去法条件苛刻，且数值不稳定
    - Gauss全主元消去法工作量偏大，需要比较的元素及行列交换工作较多，算法复杂
    - Gauss-Jordan消去法形式上比其他消元法简单，且无回代求解，但计算量大
    - 从算法优化的角度考虑，Gauss列主元消去法比较好

本章内容

- 高斯消去法
- LU分解、特殊矩阵和矩阵求逆
- 误差分析、条件数
- 迭代方法

三角分解（LU分解）

$$A = LU$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

单位下三角矩阵

上三角矩阵

——Doolittle分解

$$L(UX) = B \Rightarrow \begin{cases} LY = B \\ UX = Y \end{cases}$$

- 分解步骤
- 代入步骤
  - 前向
  - 后向

Crout分解：
L为下三角矩阵
U为单位上三角矩阵

Doolittle分解

- 以n=3为例

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

$a_{1j} = u_{1j} \quad j = 1,2,3 \Rightarrow u_{1j} = a_{1j} \quad j = 1,2,3$

$a_{21} = u_{11} l_{21} \Rightarrow l_{21} = \dfrac{a_{21}}{u_{11}}$

$a_{31} = u_{11} l_{31} \Rightarrow l_{31} = \dfrac{a_{31}}{u_{11}}$

$a_{22} = l_{21} u_{12} + u_{22} \Rightarrow u_{22} = a_{22} - l_{21} u_{12}$

$a_{23} = l_{21} u_{13} + u_{23} \Rightarrow u_{23} = a_{23} - l_{21} u_{13}$

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

$a_{33} = l_{31} u_{13} + l_{32} u_{23} + u_{33}$

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

直接三角分解法

三角分解与高斯消去

```
SUB Decompose (a, n)
  DOFOR k = 1, n − 1
    DOFOR i = k+1, n
      factor = a_{i,k}/a_{k,k}
      a_{i,k} = factor
      DOFOR j = k + 1, n
        a_{i,j} = a_{i,j} − factor * a_{k,j}
      END DO
    END DO
  END DO
END Decompose
```

- 前向消去将A约简为

$$U=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} \\ 0 & 0 & a'_{33} \end{bmatrix}$$

- U是前向消去的结果
- L也是前向消去的产物

$$l_{21}=\frac{a_{21}}{u_{11}}=\frac{a_{21}}{a_{11}}$$

$$l_{31}=\frac{a_{31}}{u_{11}}=\frac{a_{31}}{a_{11}}$$

高斯消去中为了消去第二（三）行第一列元素，与第一行相乘的因子

高斯消去法如下表示：

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

因此，L为：

$$L=L_1L_2\cdots L_{n-2}L_{n-1}$$

$$l_{32}=\frac{a_{32}-l_{31}u_{12}}{u_{22}}=\frac{a'_{32}}{a'_{22}}$$

高斯消去中为了消去三行第二列元素，与第二行相乘的因子

上述LU分解算法，L的下三角部分存储在U的下三角部分，可以节省存储。

三角分解——例

- 方程组的系数矩阵高斯消去的LU分解

$$\begin{cases} 3x_1 - 0.1x_2 - 0.2x_3 = 7.85 \\ 0.1x_1 + 7x_2 - 0.3x_3 = -19.3 \\ 0.3x_1 - 0.2x_2 + 10x_3 = 71.4 \end{cases}$$

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -0.1 & -0.2 \\ 0.1 & 7 & -0.3 \\ 0.3 & -0.2 & 10 \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} 3 & -0.1 & -0.2 \\ 0 & 7.00333 & -0.293333 \\ 0 & 0 & 10.0120 \end{bmatrix}$$

消去a_{21}和a_{31}的因子为

$$f_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}} = \frac{0.1}{3} = 0.0333333$$

$$f_{31} = \frac{a_{31}}{a_{11}} = \frac{0.3}{3} = 0.100000$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.0333333 & 1 & 0 \\ 0.100000 & -0.0271300 & 1 \end{bmatrix}$$

消去a'_{32}的因子为

$$f_{32} = \frac{a'_{32}}{a'_{22}} = \frac{-0.19}{7.00333} = -0.0271300$$

$$LU = \begin{bmatrix} 3 & -0.1 & -0.2 \\ 0.0999999 & 7 & -0.3 \\ 0.3 & -0.2 & 9.99996 \end{bmatrix}$$

舍入误差引起了细微的差异。

Doolittle分解

- 定理：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。

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

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

$$a_{ki} = \sum_{j=1}^{\min(k,i)} l_{kj} u_{ji}$$

$$l_{ii} = 1$$

Doolittle分解

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

- 计算顺序
  - 1 求U的第一行元素和L的第一列元素

    当$k=1$时，由$l_{11}=1$得 $u_{1i}=a_{1i}$ $\quad i=1,2,\dots,n$

    当$i=1$时，可得 $l_{k1}=a_{k1}/u_{11}$ $\quad k=2,\dots,n$
  - 2 求U的第二行元素和L的第二列元素
  - …
  - 求出U的前k-1行与L的前k-1列后，第k步中计算U的第k行、L的第k列元素的公式为：

如果出现u_{ii}=0或绝对值很小的情况，需要进行行交换。同时对右端向量b进行相应的交换。

$$\begin{cases} u_{ki} = a_{ki} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj} u_{ji} & i = k, \cdots, n \\ l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} u_{jk}) / u_{kk} & i = k+1, \cdots, n; \ k \neq n \end{cases}$$

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

三角分解（LU分解）——代入

- 向前代入求解$LY=B$

$$y_1 = b_1$$
$$y_k = b_k - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj} y_j \quad k = 2, \cdots, n$$

- 向后代入求解$UX=Y$

$$x_n = y_n / u_{nn}$$
$$x_k = (y_k - \sum_{j=k+1}^{n} u_{kj} x_j) / u_{kk}$$
$$k = n-1, \cdots, 1$$

LU分解方法——例

- 求解方程组

$$\begin{cases} 3x_1 - 0.1x_2 - 0.2x_3 = 7.85 \\ 0.1x_1 + 7x_2 - 0.3x_3 = -19.3 \\ 0.3x_1 - 0.2x_2 + 10x_3 = 71.4 \end{cases}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.0333333 & 1 & 0 \\ 0.100000 & -0.0271300 & 1 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} 3 & -0.1 & -0.2 \\ 0 & 7.00333 & -0.293333 \\ 0 & 0 & 10.0120 \end{bmatrix}$$

$$LY = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.0333333 & 1 & 0 \\ 0.100000 & -0.0271300 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.85 \\ -19.3 \\ 71.4 \end{bmatrix} \Rightarrow Y = \begin{bmatrix} 7.85 \\ -19.5617 \\ 70.0843 \end{bmatrix}$$

$$UX = \begin{bmatrix} 3 & -0.1 & -0.2 \\ 0 & 7.00333 & -0.293333 \\ 0 & 0 & 10.0120 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = Y = \begin{bmatrix} 7.85 \\ -19.5617 \\ 70.0843 \end{bmatrix} \Rightarrow X = \begin{bmatrix} 3 \\ -2.5 \\ 7.00003 \end{bmatrix}$$

三角分解与高斯消去法的比较

- 三角分解的计算量为
  - 分解：$\dfrac{n^3-n}{3}$　代入：n^2
  - 随着n的增加，两种方法的计算量相当
- 直接三角分解法是从矩阵A的元素直接由关系式$A=LU$确定L和U的元素，不必像Gauss消去法那样计算那些中间结果
- 高斯消去法求解方程组时，右端项必须提前知道，三角分解则不需要（采用列主元三角分解时，$PA=LU$）
- 在实现$A=LU$分解后，解具有相同系数矩阵的方程组$AX=B_j$相当方便，每解一个方程组只需求解两个三角形方程组，用n^2次乘除法运算即可完成求解。

矩阵求逆

- 逆矩阵A^{-1}

$$AA^{-1}=A^{-1}A=I$$

- 以n=3为例
  - A^{-1}各列分别通过 $AX=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$ $AX=\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}$ $AX=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$ 计算
  - LU分解方法的优势在于多个右边常数向量的求解
- LU分解计算逆矩阵的计算量为 $\frac{n^3-n}{3}+n\times n^2=\frac{4n^3-n}{3}$
- 高斯消去计算逆矩阵的计算量（只考虑乘除操作）为

$$n\left(\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}\right)=\frac{n^4}{3}+\frac{n^3}{2}$$

对称正定矩阵的平方根法（Cholesky分解）

- 对称阵：$A^T = A$
- 正定阵：$x^T Ax > 0, \forall x \in R^n, x \neq 0$
- 各阶顺序主子式均大于零

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

- 由Doolittle分解，A有唯一分解

$$A = LU$$

- LDR分解：A分解为A=LDR，L、R分别为单位下、上三角阵，D为一个对角阵。
- 对称正定矩阵A有三角分解 A=LDL^T

对称正定矩阵的平方根法（Cholesky分解）

- 假设A是n阶实对称正定矩阵，则必存非奇异下三角矩阵L，使$A=LL^T$，并且当L的主对角元均为正时，这种分解是唯一的。称$A=LL^T$为矩阵A的Cholesky分解。

对称正定矩阵的平方根法（Cholesky分解）

$$A=\begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{nn} \end{bmatrix}=LL^T$$

$$\begin{cases} a_{ii}=\sum_{k=1}^{i} l_{ik} l_{ik} \\ a_{ij}=\sum_{k=1}^{j} l_{ik} l_{jk} \quad i>j \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{jj}=(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2)^{\frac{1}{2}} \\ l_{ij}=(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk})/l_{jj} \end{cases} \quad i=j+1,\ldots,n,\ j=1,2,\ldots,n$$

$$y_k=(b_k-\sum_{j=1}^{k-1} l_{kj} y_j)/l_{kk} \quad k=1,\cdots,n$$

$$x_k=(y_k-\sum_{j=k+1}^{n} l_{jk} x_j)/l_{kk} \quad k=n,\cdots,1$$

对称正定矩阵的平方根法（Cholesky分解）

- 优点
  - 数值稳定
  - 存储量小，可用一维数组存储
  - 计算量小，约需$n^3/6$次乘除法，大约是高斯消去法或Doolittle分解法的一半
- 缺点
  - 存在开方运算，可能会出现根号下负数

改进的Cholesky分解

- 改进的cholesky分解$A=LDL^T$

$$L=\begin{bmatrix}1&&&&\\l_{21}&1&&&\\l_{31}&l_{32}&1&&\\\cdots&\cdots&\cdots&\ddots&\\l_{n1}&l_{n2}&\cdots&l_{nn-1}&1\end{bmatrix}\quad D=\begin{bmatrix}d_1&&&&\\&d_2&&&\\&&\ddots&&\\&&&\ddots&\\&&&&d_n\end{bmatrix}$$

由$A=L(DL^T)$

$$=\begin{bmatrix}1&&&&\\l_{21}&1&&&\\l_{31}&l_{32}&1&&\\\cdots&\cdots&\cdots&\ddots&\\l_{n1}&l_{n2}&\cdots&l_{nn-1}&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}d_1&d_1l_{21}&d_1l_{31}&\cdots&d_1l_{n1}\\&d_2&d_2l_{32}&\cdots&d_2l_{n2}\\&&d_3&\cdots&d_3l_{n3}\\\cdots&\cdots&\cdots&\ddots&\\&&&&d_n\end{bmatrix}$$

可以避免开方运算

$$\begin{cases}d_i=a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}^2d_k\\ l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}d_kl_{jk}\right)\Big/d_j\end{cases}$$

$$i=1,2,\ldots,n;\quad j=1,2,\ldots,i-1$$

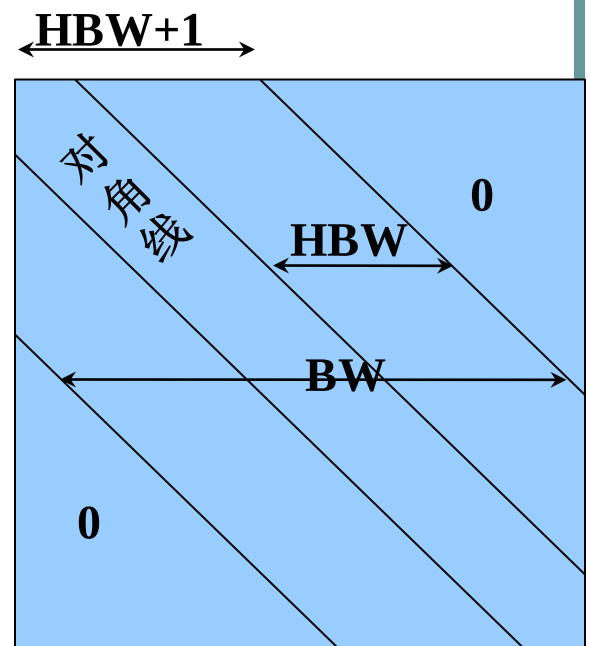
计算中，为了避免重复计算，减少计算量，可令 $c_{ij}=l_{ij}d_j$

$$\begin{cases}d_i=a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}c_{ik}l_{ik}\\ c_{ij}=a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}c_{ik}l_{jk}\\ l_{ij}=c_{ij}/d_j\end{cases}$$

$$i=1,2,\ldots,n;\quad j=1,2,\ldots,i-1$$

带状方程组

- 带状矩阵：
  - 除了主对角线为中心的一个带状范围内的元素不为零，其他元素都为零
  - 带宽BW，半带宽HBW
  - 如果$|i\text{-}j|>\text{HBW}$，$a_{ij}=0$
- 高斯消去或LU分解求解带状方程组效率低



三对角方程组的追赶法（Thomas算法）

- 系数矩阵A的元素满足优对角条件

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

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| \\ |b_i| \ge |a_i| + |c_i|, (a_i c_i \ne 0, i = 2, \cdots, n-1) \\ |b_n| > |a_n| \end{cases}$$

- 可以证明，A非奇异，且各阶顺序主子式都不为0

三对角方程组的追赶法（Thomas算法）

$$A=\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}=LU$$

$$=\begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

- 根据矩阵乘法，可计算待定系数：

(1) $b_1=\alpha_1$, $c_1 = \alpha_1\beta_1$, $\beta_1=c_1/b_1$;

(2) $a_i=\gamma_i$, $b_i = \alpha_i+ \gamma_i\beta_{i-1} = \alpha_i+ a_i\beta_{i-1}$;

$(i=2,\ldots,n)$

(3) $c_i = \alpha_i\beta_i$; $(i=2,\ldots,n-1)$

因此：

$\alpha_1=b_1$, $\beta_1=c_1/b_1$;

$\alpha_i=b_i - a_i\beta_{i-1}$;

$\beta_i=c_i/\alpha_i$; $(i=2,\ldots,n-1)$

$\gamma_i = a_i$

三对角方程组的追赶法（Thomas算法）

$$A=\begin{bmatrix}\alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & 1\end{bmatrix}=LU$$

对于舍入误差是稳定的。

仅需$5n-4$次乘除法运算。

- 根据矩阵乘法，可以得到追赶法的计算公式：

(1)分解计算公式：$A=LU$

$\beta_1=c_1/b_1$

$\beta_i=c_i/(b_i-a_i\beta_{i-1})\qquad i=2,\ldots,n-1$

(2)求解方程组$Ly=f$的递推算式

$y_1=f_1/b_1$

$y_i=(f_i-a_iy_{i-1})/(b_i-a_i\beta_{i-1})\qquad i=2,\ldots,n$

追的过程

(3)求解方程组$Ux=y$的递推算式

$x_n=y_n$

$x_i=y_i-\beta_ix_{i+1}\qquad i=n-1,\ldots,1$

赶的过程