数值计算方法

线性方程组的解法

张晓平

2018 年 9 月 10 日

武汉大学数学与统计学院

Table of contents

1. 高斯消去法

2. 三角形方程组和三角分解

3. 选主元三角分解

4. 平方根法及改进的平方根法

5. 追赶法

线性方程组的求解问题是一个古老的数学问题

- 《九章算术》：详细记载了消元法
- 19 世纪初，西方有了Gauss 消去法
- 求解大型线性方程组则是在 20 世纪计算机问世后才成为可能

线性方程组数值解法的分类

- 直接法
- 迭代法

直接法

- 定义：在没有舍入误差的情况下经过有限次运算可求得精确解的方法
- 举例：
  - 高斯消去法
  - 平方根法
  - 追赶法
  - $\cdots$
- 适用范围：
  - 低阶稠密矩阵方程组
  - 某些大型稀疏方程组（如大型带状方程组）
  - $\cdots$

迭代法

- 定义：采取逐次逼近的方法，亦即从一个初始向量出发，按照一定的计算格式，构造一个无穷序列，其极限才是方程组的精确解，只经过有限次运算得不到精确解
- 举例：
  - Jacobi 迭代
  - Gauss-Seidel 迭代
  - 超松弛迭代
  - $\cdots$
- 适用范围：
  - 大型稀疏方程组
  - $\cdots$

高斯消去法

高斯消去法

顺序消去法

顺序消去法

定义 1.1: 顺序消去法

在逐步消元的过程中，把系数矩阵约化成上三角矩阵，从而将原方程组约化为容易求解的等价三角方程组，再通过回代过程逐一求出各未知数。

顺序消去法

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 &= b_1^{(1)} \quad (1) \\ {\color{blue}a_{21}^{(1)}}x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 &= b_2^{(1)} \quad (2) \\ {\color{blue}a_{31}^{(1)}}x_1 + a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 &= b_3^{(1)} \quad (3) \end{cases}$$

顺序消去法

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，

$$
\begin{cases}
a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 & = & b_1^{(1)} & (1) \\
a_{21}^{(1)} x_1 + a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 & = & b_2^{(1)} & (2) \\
a_{31}^{(1)} x_1 + a_{32}^{(1)} x_2 + a_{33}^{(1)} x_3 & = & b_3^{(1)} & (3)
\end{cases}
$$

$$
\xRightarrow[(3)+(1)\times\left(-\frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right)]{(2)+(1)\times\left(-\frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right)}
$$

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，

$$\left\{\begin{array}{lcl} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 & = & b_1^{(1)} \quad (1) \\ a_{21}^{(1)} x_1 + a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 & = & b_2^{(1)} \quad (2) \\ a_{31}^{(1)} x_1 + a_{32}^{(1)} x_2 + a_{33}^{(1)} x_3 & = & b_3^{(1)} \quad (3) \end{array}\right.$$

$$\xrightarrow[(3)+(1)\times\left(-\frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right)]{(2)+(1)\times\left(-\frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right)} \left\{\begin{array}{rcl} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 & = & b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 & = & b_2^{(2)}, \\ a_{32}^{(2)} x_2 + a_{33}^{(2)} x_3 & = & b_3^{(2)}. \end{array}\right.$$

顺序消去法

$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} + a_{1j}^{(1)} \times \left(-\dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right), \quad i,j = 2,3, \\ b_{i}^{(2)} = b_{i}^{(1)} + b_{1}^{(1)} \times \left(-\dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right), \quad i = 2,3. \end{cases}$$

顺序消去法

设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$,

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 & = & b_1^{(1)}, \\ a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 & = & b_2^{(2)}, \\ a_{32}^{(2)} x_2 + a_{33}^{(2)} x_3 & = & b_3^{(2)}. \end{cases}$$

$$\xRightarrow{(3) + (2) \times \left(-\frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}\right)}$$

顺序消去法

设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$，

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 & = & b_1^{(1)}, \\ a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 & = & b_2^{(2)}, \\ a_{32}^{(2)} x_2 + a_{33}^{(2)} x_3 & = & b_3^{(2)}. \end{cases}$$

$$\xRightarrow{(3)+(2)\times\left(-\frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}\right)} \begin{cases} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 & = & b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 & = & b_2^{(2)} \\ a_{33}^{(3)} x_3 & = & b_3^{(3)} \end{cases}$$

顺序消去法

$$\begin{cases} a_{33}^{(3)} = a_{33}^{(2)} + a_{23}^{(2)} \times \left(-\dfrac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \right), \\ b_{3}^{(3)} = b_{3}^{(2)} + b_{2}^{(2)} \times \left(-\dfrac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \right). \end{cases}$$

顺序消去法

一般情形： 考察 n 元线性方程组

$$\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(1)},$$

其中

$$\boldsymbol{A}^{(1)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix},\quad X=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix},\quad b^{(1)}=\begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

顺序消去法

若约化的主元 $a_{kk}^{(k)} \neq 0 \ (k = 1, 2, \cdots, n)$，则经过

顺序消元法

```
for k = 1, 2, ⋯, n-1
  for i = k+1, ⋯, n
    l_ik = a_ik^(k) / a_kk^(k),
    for j = k+1, ⋯, n+1
      a_ij^(k+1) = a_ij^(k) - l_ik · a_kj^(k)
    end
  end
end
```

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k)} \,/\, a_{kk}^{(k)}, \qquad a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} \cdot a_{kj}^{(k)}$$

可得

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

顺序消去法

回代公式

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

for i = n-1, n-2, ⋯, 1

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

end

顺序消去法

- 若遇到 $a_{kk}^{(k)}=0$，则消去过程无法进行；

顺序消去法

- 若遇到 $a_{kk}^{(k)}=0$，则消去过程无法进行；
- 若 $a_{kk}^{(k)}$ 不为零但很小，尽管消去过程可以进行下去，但用其做除数，会引起计算结果的严重失真。

$$\begin{cases} 0.00001x_1+2x_2 & = & 2, \\ x_1+x_2 & = & 3. \end{cases}$$

高斯消去法

列主元消去法

列主元消去法

定义 1.2: 列主元消去法

在消元过程中，每次选主元时，仅依次按列选取绝对值最大的元素作为主元，它只进行行交换，而不产生未知数次序的调换。

列主元消去法

定义 1.3: 列主元消去法

在消元过程中，每次选主元时，仅依次按列选取绝对值最大的元素作为主元，它只进行行交换，而不产生未知数次序的调换。

列主元消去法能有效地避免顺序消元过程中的两个问题，它是直接法中最常用的一种方式。

列主元消去法

例 1.1

用列主元消去法求解

$$
\begin{cases}
2x_1 + x_2 + 2x_3 = 5, \\
5x_1 - x_2 + x_3 = 8, \\
x_1 - 3x_2 - 4x_3 = -4.
\end{cases}
$$

列主元消去法

$$\left(\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 2 & 5 \\ \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)$$

列主元消去法

$$\left(\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 2 & 5 \\ \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right) \xRightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \left(\begin{array}{ccc:c} \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)$$

列主元消去法

$$\left(\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 2 & 5 \\ \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right) \xRightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \left(\begin{array}{ccc:c} \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)$$

$$\xRightarrow[r_3 - \frac{1}{5} r_1]{r_2 - \frac{2}{5} r_1} \left(\begin{array}{ccc:c} \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ & 1.4 & 1.6 & 1.8 \\ & \color{red}{-2.8} & -4.2 & -5.6 \end{array}\right)$$

列主元消去法

$$\left(\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 2 & 5 \\ \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right) \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \left(\begin{array}{ccc:c} \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow[r_3 - \frac{1}{5} r_1]{r_2 - \frac{2}{5} r_1} \left(\begin{array}{ccc:c} \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ & 1.4 & 1.6 & 1.8 \\ & \color{red}{-2.8} & -4.2 & -5.6 \end{array}\right) \xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_3} \left(\begin{array}{ccc:c} \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ & \color{red}{-2.8} & -4.2 & -5.6 \\ & \color{red}{1.4} & 1.6 & 1.8 \end{array}\right)$$

列主元消去法

$$
\left(\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 2 & 5 \\ 5 & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\left(\begin{array}{ccc:c} 5 & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)
$$

$$
\xrightarrow[r_3-\frac{1}{5}r_1]{r_2-\frac{2}{5}r_1}
\left(\begin{array}{ccc:c} 5 & -1 & 1 & 8 \\ & 1.4 & 1.6 & 1.8 \\ & -2.8 & -4.2 & -5.6 \end{array}\right)
\xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_3}
\left(\begin{array}{ccc:c} 5 & -1 & 1 & 8 \\ & -2.8 & -4.2 & -5.6 \\ & 1.4 & 1.6 & 1.8 \end{array}\right)
$$

$$
\xrightarrow{r_3+\frac{1}{2}r_2}
\left(\begin{array}{ccc:c} 5 & -1 & 1 & 8 \\ & -2.8 & -4.2 & -5.6 \\ & & -0.5 & -1 \end{array}\right)
$$

列主元消去法

```
for k = 1, 2, ⋯, n-1
  find i_k ∈ k,⋯,n s.t. |a^{(k)}_{i_k,k}| = max_{k≤i≤n} |a^{(k)}_{ik}| ;
  interchange the k, i_k-th rows in [A^{(k)}, b^{(k)}] ;
  for i = k+1, ⋯, n
    l_{ik} = a^{(k)}_{ik} / a^{(k)}_{kk};
    for j = k+1, ⋯, n+1
      a^{(k+1)}_{ij} = a^{(k)}_{ij} - l_{ik} · a^{(k)}_{kj};
    end
  end
end
```

高斯消去法

全主元消去法

定义 1.4: 全主元消去法

全主元消去法选主元的范围更大，对于 $(A^{(1)} \mid b^{(1)})$ 来说，在整个系数矩阵中选主元，即将绝对值最大的元素经过行列变换使其置于 $a_{11}^{(1)}$ 的位置，然后进行消元过程得到 $(A^{(2)} \mid b^{(2)})$；

接下来在该矩阵中划掉第一行第一列后剩余的 $n-1$ 阶子系数矩阵中选主元，并通过行、列交换置其于 $a_{22}^{(2)}$ 的位置，然后进行消元；

……

例 1.2

用全主元消去法求解

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + 2x_3 = 5, \\ 5x_1 - x_2 + x_3 = 8, \\ x_1 - 3x_2 - 4x_3 = -4. \end{cases}$$

全主元消去法

$$\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \color{blue}{x_1} & \color{blue}{x_2} & \color{blue}{x_3} \end{array} \\ \left(\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 2 & 5 \\ \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right) \end{array}$$

全主元消去法

$$
\begin{array}{cccc}
x_1 & x_2 & x_3 & \\
\multicolumn{4}{c}{\left(\begin{array}{rrr:r} \color{red}{2} & 1 & 2 & 5 \\ \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)}
\end{array}
\xRightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{array}{cccc}
x_1 & x_2 & x_3 & \\
\multicolumn{4}{c}{\left(\begin{array}{rrr:r} \color{red}{5} & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)}
\end{array}
$$

全主元消去法

$$
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \end{array} \\
\left(\begin{array}{ccc:c}
2 & 1 & 2 & 5 \\
{\color{red}5} & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{array}\right)
\end{array}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \end{array} \\
\left(\begin{array}{ccc:c}
{\color{red}5} & -1 & 1 & 8 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{array}\right)
\end{array}
$$

$$
\xrightarrow[r_3 - \frac{1}{5} r_1]{r_2 - \frac{2}{5} r_1}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \end{array} \\
\left(\begin{array}{ccc:c}
{\color{red}5} & -1 & 1 & 8 \\
 & 1.4 & 1.6 & 1.8 \\
 & {\color{red}-2.8} & -4.2 & -5.6
\end{array}\right)
\end{array}
$$

全主元消去法

$$
\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \end{array} \\ \left(\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 2 & 5 \\ 5 & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right) \end{array}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \end{array} \\ \left(\begin{array}{ccc:c} 5 & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right) \end{array}
$$

$$
\xrightarrow[r_3 - \frac{1}{5} r_1]{r_2 - \frac{2}{5} r_1}
\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \end{array} \\ \left(\begin{array}{ccc:c} 5 & -1 & 1 & 8 \\ & 1.4 & 1.6 & 1.8 \\ & -2.8 & -4.2 & -5.6 \end{array}\right) \end{array}
\xrightarrow[c_2 \leftrightarrow c_3]{r_2 \leftrightarrow r_3}
\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} x_1 & x_3 & x_2 & \end{array} \\ \left(\begin{array}{ccc:c} 5 & 1 & -1 & 8 \\ & -4.2 & -2.8 & -5.6 \\ & 1.6 & 1.4 & 1.8 \end{array}\right) \end{array}
$$

全主元消去法

$$
\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \\ \end{array}
\left(\begin{array}{ccc:c} 2 & 1 & 2 & 5 \\ {\color{red}5} & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \\ \end{array}
\left(\begin{array}{ccc:c} {\color{red}5} & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{array}\right)
$$

$$
\xrightarrow[r_3 - \frac{1}{5} r_1]{r_2 - \frac{2}{5} r_1}
\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & x_3 & \\ \end{array}
\left(\begin{array}{ccc:c} {\color{red}5} & -1 & 1 & 8 \\ & 1.4 & 1.6 & 1.8 \\ & {\color{red}-2.8} & -4.2 & -5.6 \end{array}\right)
\xrightarrow[c_2 \leftrightarrow c_3]{r_2 \leftrightarrow r_3}
\begin{array}{cccc} x_1 & x_3 & x_2 & \\ \end{array}
\left(\begin{array}{ccc:c} {\color{red}5} & 1 & -1 & 8 \\ & {\color{red}-4.2} & -2.8 & -5.6 \\ & {\color{red}1.6} & 1.4 & 1.8 \end{array}\right)
$$

$$
\xrightarrow{r_3 + \frac{8}{21} r_2}
\begin{array}{cccc} x_1 & x_3 & x_2 & \\ \end{array}
\left(\begin{array}{ccc:c} {\color{red}5} & -1 & 1 & 8 \\ & {\color{red}-2.8} & -4.2 & -5.6 \\ & & 1/3 & -1/3 \end{array}\right)
$$

三角形方程组和三角分解

三角形方程组和三角分解

三角方程组的解法

定义 2.1: 下三角形方程组

考察

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{b} = (b_1, \cdots, b_n)^T \in \mathbb{R}^n$ 已知，$\boldsymbol{y} = (y_1, \cdots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$ 未知，而

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix},$$

且 $l_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \cdots, n.$

三角方程组的解法

1 由方程组 (1) 的第一个方程

$$l_{11}y_1 = b_1$$

可得

$$y_1 = \frac{b_1}{l_{11}}.$$

2 由方程组 (1) 的第二个方程

$$l_{21}y_1 + l_{22}y_2 = b_2$$

可得

$$y_2 = \frac{b_2 - l_{21}y_1}{l_{22}}.$$

3 一般地，若已求得 $y_1, \cdots, y_{i-1}$，则由方程组 (1) 的第 i 个方程

$$l_{i1}y_1 + l_{i2}y_2 + \cdots + l_{i,i-1}y_{i-1} + l_{ii}y_i = b_i$$

可得

$$y_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j}{l_{ii}}.$$

三角方程组的解法

解下三角形方程组：前代法

```
for j = 1:n-1
  b(j) = b(j) / L(j, j)
  b(j+1:n) = b(j+1:n) - b(j)L(j+1:n, j)
end
b(n) = b(n) / L(n, n)
```

三角方程组的解法

解下三角形方程组：前代法

```
for j = 1:n-1
  b(j) = b(j) / L(j, j)
  b(j+1:n) = b(j+1:n) - b(j)L(j+1:n, j)
end
b(n) = b(n) / L(n, n)
```

该算法所需加、减、乘、除的次数：

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

即该算法的运算量为 n^2.

fs.m

```
function b = fs(L, b, n)
for j = 1:n-1
    b(j) = b(j) / L(j,j);
    b(j+1:n) = b(j+1:n) - b(j) * L(j+1:n, j);
end
b(n) = b(n) / L(n,n);
end
```

定义 2.2: 上三角方程组

察

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{y} = (y_1, \cdots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$ 已知，$\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ 未知，而

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{1n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{nn} \end{bmatrix},$$

且 $u_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \cdots, n.$

三角方程组的解法

1 由方程组 (2) 的第 n 个方程

$$u_{nn}x_n = y_n$$

得

$$x_n = \frac{y_n}{u_{nn}}.$$

2 由方程组 (2) 的第 $n-1$ 个方程

$$u_{n-1,n-1}x_{n-1} + u_{n-1,n}x_n = y_n$$

得

$$x_{n-1} = \frac{y_n - u_{n-1,n}x_n}{u_{nn}}.$$

三角方程组的解法

3 一般地，若已求得 $x_n, \cdots, x_{i+1}$，则由方程组 (2) 的第 i 个方程

$$u_{ii}x_i + u_{i,i+1}x_{i+1} + \cdots + u_{i,n}x_n = y_i$$

得

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

三角方程组的解法

解上三角方程组：回代法

```
for j = n-1:-1:2
  y(j) = y(j) / U(j,j)
  y(1:j-1) = y(1:j-1) - y(j)U(1:j-1,j)
end
y(1) = y(1) / U(1,1)
```

三角方程组的解法

解上三角方程组：回代法

```
for j = n-1:-1:2
  y(j) = y(j) / U(j,j)
  y(1:j-1) = y(1:j-1) - y(j)U(1:j-1,j)
end
y(1) = y(1) / U(1,1)
```

该算法的运算量也为 n^2.

bs.m

```
function y = bs(U, y, n)
for j = n:-1:2
    y(j) = y(j) / U(j,j);
    y(1:j-1) = y(1:j-1) - y(j) * U(1:j-1, j);
end
y(1) = y(1) / U(1,1);
end
```

三角方程组的解法

定义 2.3: 一般线性方程组

察

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$。

三角方程组的解法

定义 2.4: 一般线性方程组

察

$$Ax = b \tag{3}$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}, x, b \in \mathbb{R}^n$。

若

$$A = LU,$$

即 A 能分解成一个下三角阵 L 和一个上三角阵 U 的乘积，则 (3) 的解 x 可由以下两步得到：

1. 用前代法解 $Ly = b$ 得 y;
2. 用回代法解 $Ux = y$ 得 x。

三角形方程组和三角分解

Gauss 变换

定义 2.5: 矩阵三角分解

将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解为一个下三角阵 $\boldsymbol{L}$ 和一个上三角阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积，最自然的做法是通过一系列初等变换，逐步将 $\boldsymbol{A}$ 约化为上三角阵，并且保证这些初等变换的乘积是一个下三角阵。

定义 2.6: Gauss 变换 (矩阵)

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \boldsymbol{d} & & \ddots & \\ & & -l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \triangleq \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_k \boldsymbol{e}_k^T$$

$$\boldsymbol{l}_k = (0,\ \cdots,\ 0,\ l_{k+1,k},\ \cdots,\ l_{nk})^T$$

定义 2.7: Gauss 变换 (矩阵)

$$
\boldsymbol{L}_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \boldsymbol{d} & & \ddots & \\ & & -l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \triangleq \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_k \boldsymbol{e}_k^T
$$

$$
\boldsymbol{l}_k = (0,\ \cdots,\ 0,\ l_{k+1,k},\ \cdots,\ l_{nk})^T \ \rightarrow\ \text{Gauss 向量}
$$

Gauss 变换

对于 $\boldsymbol{x} = (x_1, \ \cdots, \ x_n)^T \in \mathbb{R}^n$,

$$\boldsymbol{L}_k \boldsymbol{x} = (x_1, \ \cdots, \ x_k, \ x_{k+1} - l_{k+1,k} x_k, \ \cdots, \ x_n - l_{nk} x_k)^T.$$

取

$$l_{ik} = \frac{x_i}{x_k}, \quad i = k+1, \ \cdots, \ n, \quad x_k \neq 0$$

便有

$$\boldsymbol{L}_k \boldsymbol{x} = (x_1, \ \cdots, \ x_k, \ 0, \ \cdots, \ 0)^T.$$

Gauss 变换

性质 2.1: 1

$\boldsymbol{L}_k$ 的逆为

$$\boldsymbol{L}_k^{-1} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{l}_k \boldsymbol{e}_k^T$$

性质 2.2: 1

$\boldsymbol{L}_k$ 的逆为

$$\boldsymbol{L}_k^{-1}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^T$$

证明

$$\because \quad \boldsymbol{e}_k^T\boldsymbol{l}_k=0,$$

$$\therefore \quad (\boldsymbol{I}+\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^T)(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^T)=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_k\boxed{\boldsymbol{e}_k^T\boldsymbol{l}_k}\boldsymbol{e}_k^T=\boldsymbol{I}.$$

Gauss 变换

性质 2.3: 2

$\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{A} = (I - \boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^T)\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A} - \boldsymbol{l}_k(\boldsymbol{e}_k^T\boldsymbol{A}).$

- $\boldsymbol{e}_k^T\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 行。
- 类似地，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_k$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 列。

Gauss 变换

性质 2.4: 2

$$\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{A} = (I - l_k e_k^T)\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A} - l_k(e_k^T\boldsymbol{A}).$$

- $e_k^T\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 行。
- 类似地，$\boldsymbol{A}e_k$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 列。

例 2.2

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

Gauss 变换

性质 2.5: 3

若 $j < k$，则

$$\boldsymbol{L}_j \boldsymbol{L}_k = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_j \boldsymbol{e}_j^T)(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_k \boldsymbol{e}_k^T) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_j \boldsymbol{e}_j^T - \boldsymbol{l}_k \boldsymbol{e}_k^T.$$

性质 2.6: 3

若 $j<k$，则

$$\boldsymbol{L}_j\boldsymbol{L}_k=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_j\boldsymbol{e}_j^T)(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^T)=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_j\boldsymbol{e}_j^T-\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^T.$$

证明.

因为当 $j<k$ 时，有 $\boldsymbol{e}_j^T\boldsymbol{l}_k=0$。 □

性质 2.7: 3

若 $j<k$，则

$$L_jL_k = (I - l_je_j^T)(I - l_ke_k^T) = I - l_je_j^T - l_ke_k^T.$$

证明.

因为当 $j<k$ 时，有 $e_j^T l_k = 0$。 □

例 2.5

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

Gauss 变换

$$\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{bmatrix}}_{A}$$

Gauss 变换

$$\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{bmatrix}}_{A} \xrightarrow{L_1} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \end{bmatrix}}_{L_1 A}$$

Gauss 变换

$$\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{bmatrix}}_{A} \xrightarrow{L_1} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \\ & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \\ & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \end{bmatrix}}_{L_1 A}$$

$$\xrightarrow{L_2} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \\ & & {\color{red}*} & {\color{red}*} \\ & & {\color{red}*} & {\color{red}*} \end{bmatrix}}_{L_2 L_1 A}$$

Gauss 变换

$$\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{bmatrix}}_{A} \xrightarrow{L_1} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \end{bmatrix}}_{L_1 A}$$

$$\xrightarrow{L_2} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & * & * & * \\ & & * & * \\ & & * & * \end{bmatrix}}_{L_2 L_1 A} \xrightarrow{L_3} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & * & * & * \\ & & * & * \\ & & & * \end{bmatrix}}_{L_3 L_2 L_1 A}$$

Gauss 变换

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \color{blue}{2} & 1 & 1 & 0 \\ \color{blue}{4} & 3 & 3 & 1 \\ \color{blue}{8} & 7 & 9 & 5 \\ \color{blue}{6} & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}$$

Gauss 变换

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}$$

$$L_1 A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -2 & 1 & & \\ -4 & & 1 & \\ -3 & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & 3 & 5 & 5 \\ & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix}$$

Gauss 变换

$$
\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} {\color{blue}2} & 1 & 1 & 0 \\ & {\color{red}1} & 1 & 1 \\ & {\color{red}3} & 5 & 5 \\ & {\color{red}4} & 6 & 8 \end{bmatrix}
$$

Gauss 变换

$$L_1 A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & 3 & 5 & 5 \\ & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix}$$

$$L_2 L_1 A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & -3 & 1 & \\ & -4 & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & 3 & 5 & 5 \\ & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

Gauss 变换

$$L_2 L_1 A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

Gauss 变换

$$L_2 L_1 A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$L_3 L_2 L_1 A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & & 2 \end{bmatrix} = U.$$

Gauss 变换

$$\boldsymbol{L}_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 4 & & 1 & \\ 3 & & & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{L}_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & 3 & 1 & \\ & 4 & & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{L}_3^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Gauss 变换

$$L_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 4 & & 1 & \\ 3 & & & 1 \end{bmatrix}, \; L_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & 3 & 1 & \\ & 4 & & 1 \end{bmatrix}, \; L_3^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_1^{-1} L_2^{-1} L_3^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 4 & 3 & 1 & \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Gauss 变换

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 4 & 3 & 1 & \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & & 2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}}$$

Gauss 变换

对于一般矩阵 $\boldsymbol{A}$，记 $\boldsymbol{A}^{(1)}=\boldsymbol{A}$，则

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A}^{(2)} &= \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)} \\
\boldsymbol{A}^{(3)} &= \boldsymbol{L}_2\boldsymbol{A}^{(2)}=\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)} \\
&\cdots \\
\boldsymbol{A}^{(k)} &= \boldsymbol{L}_{k-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & \boldsymbol{A}_{12}^{(k)} \\ & \boldsymbol{A}_{22}^{(k)} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

其中 $\boldsymbol{A}_{11}^{(k)}$ 是 $k-1$ 阶上三角阵，$\boldsymbol{A}_{22}^{(k)}$ 为

$$
\boldsymbol{A}_{22}^{(k)}=\begin{bmatrix} a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kk}^{(k)} \\ \boldsymbol{d} & & \boldsymbol{d} \\ a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}
$$

Gauss 变换

若 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，则可确定一个 Gauss 变换 $\boldsymbol{L}_k$，使得 $\boldsymbol{L}_k \boldsymbol{A}^{(k)}$ 第 k 列的最后 $n-k$ 个元素为 0。取

$$\boldsymbol{L}_k = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_k \boldsymbol{e}_k^T,$$

$$\boldsymbol{l}_k = (0,\ \cdots,\ 0,\ l_{k+1,k},\ \cdots,\ l_{nk})^T,$$

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, \quad i = k+1,\ \cdots,\ n$$

则

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)} = \boldsymbol{L}_k \boldsymbol{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k+1)} & \boldsymbol{A}_{12}^{(k+1)} \\ & \boldsymbol{A}_{22}^{(k+1)} \end{bmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{A}_{11}^{(k+1)}$ 是 k 阶上三角阵。

Gauss 变换

若 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，则可确定一个 Gauss 变换 $\boldsymbol{L}_k$，使得 $\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{A}^{(k)}$ 第 k 列的最后 $n-k$ 个元素为 0。取

$$\boldsymbol{L}_k = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^T,$$

$$\boldsymbol{l}_k = (0, \ \cdots, \ 0, \ l_{k+1,k}, \ \cdots, \ l_{nk})^T,$$

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, \quad i = k+1, \ \cdots, \ n$$

则

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)} = \boldsymbol{L}_k\boldsymbol{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k+1)} & \boldsymbol{A}_{12}^{(k+1)} \\ & \boldsymbol{A}_{22}^{(k+1)} \end{bmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{A}_{11}^{(k+1)}$ 是 k 阶上三角阵。

如此进行 $n-1$ 步，最终所得矩阵 $\boldsymbol{A}^{(n)}$ 即为所要求的上三角形式。

Gauss 变换

上述步骤可描述为

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{(n)}.$$

令 $\boldsymbol{L}=(\boldsymbol{L}_{n-1}\ \cdots\ \boldsymbol{L}_1)^{-1}$ 及 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{A}^{(n)}$，则

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U},$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 是一个单位上三角阵。事实上，由于 $\boldsymbol{e}_j^T\boldsymbol{l}_i=0\ (j<i)$，则

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L} &= \boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}\\
&= (\boldsymbol{I}+\boldsymbol{l}_1\boldsymbol{e}_1^T)(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{l}_2\boldsymbol{e}_2^T)\cdots(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{l}_{n-1}\boldsymbol{e}_{n-1}^T)\\
&= \boldsymbol{I}+\boldsymbol{l}_1\boldsymbol{e}_1^T+\boldsymbol{l}_2\boldsymbol{e}_2^T\cdots+\boldsymbol{l}_{n-1}\boldsymbol{e}_{n-1}^T.
\end{aligned}$$

Gauss 变换

$$A^{(k+1)} = L_k A^{(k)} = (I - l_k e_k^T) A^{(k)} = A^{(k)} - l_k e_k^T A^{(k)}.$$

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)} = \boldsymbol{L}_k\boldsymbol{A}^{(k)} = (I - l_k e_k^T)\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{A}^{(k)} - l_k \boldsymbol{e}_k^T \boldsymbol{A}^{(k)}.$$

- $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 与 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的前 k 行元素相同。

  因为 $\boldsymbol{e}_k^T\boldsymbol{A}^{(k)}$ 是 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的第 k 行，l_k 的前 k 个分量为 0。

Gauss 变换

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)} = \boldsymbol{L}_k \boldsymbol{A}^{(k)} = (I - l_k e_k^T)\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{A}^{(k)} - l_k \boldsymbol{e}_k^T \boldsymbol{A}^{(k)}.$$

- $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 与 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的前 k 行元素相同。

  因为 $\boldsymbol{e}_k^T \boldsymbol{A}^{(k)}$ 是 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的第 k 行，l_k 的前 k 个分量为 0。
- $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 中第 $k+1$ 到 n 行元素需要更新

$$\begin{aligned} a_{ik}^{(k+1)} &= 0, & i &= k+1, \cdots, n, \\ a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ik}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)}, & i,j &= k+1, \cdots, n \end{aligned}$$

存储方式:

- $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 中第 $k+1\sim n$ 行元素在计算出 $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 以后不再有用，故 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 中相应位置上的元素可用新值更新。
- 由于 $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 中的第 k 列对角线以下的元素均为 0，无需存储，故这些位置可用于存储 l_k 中的非 0 元。

Gauss 变换

计算三角分解：Gauss 消去法

```
for k = 1:n-1
  A(k+1:n, k) = A(k+1:n, k) / A(k, k)
  A(k+1:n, k+1:n) = A(k+1:n, k+1:n)
                  - A(k+1:n, k) A(k, k+1:n)
end
```

Gauss 变换

计算三角分解：Gauss 消去法

```
for k = 1:n-1
  A(k+1:n, k) = A(k+1:n, k) / A(k, k)
  A(k+1:n, k+1:n) = A(k+1:n, k+1:n)
                  - A(k+1:n, k) A(k, k+1:n)
end
```

运算次数：

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

LU 分解的 matlab 代码

```
function A = GsLU(A)
[m n] = size(A);
for k = 1:n-1
  A(k+1:n, k) = A(k+1:n, k) / A(k, k);
  A(k+1:n, k+1:n) = A(k+1:n, k+1:n)
                  - A(k+1:n, k) * A(k, k+1:n);
end
end
```

$a_{kk}^{(k)}$ $(k=1,\ \cdots,n-1)$ 称作主元。

定义 2.8: 三角分解的条件

当且仅当主元 $a_{kk}^{(k)}(k=1,\cdots,n-1)$ 均不为 0 时，算法 1 才能进行到底。

Gauss 变换

定理 2.1

主元$a_{ii}^{(i)}(i=1,\cdots,k)$均不为0

$\Longleftrightarrow$ $\boldsymbol{A}$的i阶顺序主子阵$\boldsymbol{A}_i(i=1,\cdots,k)$非奇异。

Gauss 变换

定理 2.2

$$\text{主元} a_{ii}^{(i)} (i=1,\cdots,k) \text{均不为0}$$

$$\Longleftrightarrow \quad \boldsymbol{A}\text{的}i\text{阶顺序主子阵}\boldsymbol{A}_i (i=1,\cdots,k)\text{非奇异。}$$

证明（用数学归纳法）：

1° 当 $k=1$ 时，$a_{11}^{(1)} \neq 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{A}_1$ 非奇异。

Gauss 变换

定理 2.3

$$\text{主元}a_{ii}^{(i)}(i=1,\cdots,k)\text{均不为}0$$

$\Longleftrightarrow$ $\boldsymbol{A}$的i阶顺序主子阵$\boldsymbol{A}_i(i=1,\cdots,k)$非奇异。

证明（用数学归纳法）：

1° 当 $k=1$ 时，$a_{11}^{(1)}\neq 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{A}_1$ 非奇异。

2° 假设定理直到 $k-1$ 成立，下证：若 $\boldsymbol{A}_1$，$\cdots$，$\boldsymbol{A}_{k-1}$ 非奇异，则$\boldsymbol{A}_k$ 非奇异 $\Longleftrightarrow$ $a_{kk}^{(k)}\neq 0$。

证明（续）：

由归纳假设，$a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 1, \cdots, k-1)$，故

$$\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{L}_{k-1} \cdots \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & \boldsymbol{A}_{12}^{(k)} \\ & \boldsymbol{A}_{22}^{(k)} \end{bmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{A}_{11}^{(k)}$ 是 $k-1$ 阶上三角阵，而 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的 k 阶顺序主子阵形如

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & * \\ & a_{kk}^{(k)} \end{bmatrix}$$

Gauss 变换

证明（续）：

记 $\boldsymbol{L}_1$，$\cdots$，$\boldsymbol{L}_{k-1}$ 的 k 阶顺序主子阵为 $(\boldsymbol{L}_1)_k$，$\cdots$，$(\boldsymbol{L}_{k-1})_k$，则

$$(\boldsymbol{L}_{k-1})_k \ \cdots (\boldsymbol{L}_1)_k \ \boldsymbol{A}_k = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & * \\ & a_{kk}^{(k)} \end{bmatrix}$$

证明（续）：

记 $\boldsymbol{L}_1$，$\cdots$，$\boldsymbol{L}_{k-1}$ 的 k 阶顺序主子阵为 $(\boldsymbol{L}_1)_k$，$\cdots$，$(\boldsymbol{L}_{k-1})_k$，则

$$(\boldsymbol{L}_{k-1})_k \ \cdots (\boldsymbol{L}_1)_k \ \boldsymbol{A}_k = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & * \\ & a_{kk}^{(k)} \end{bmatrix}$$

从而有

$$\det \boldsymbol{A}_k = a_{kk}^{(k)} \det \boldsymbol{A}_{11}^{(k)},$$

证明（续）：

记 $\boldsymbol{L}_1$，$\cdots$，$\boldsymbol{L}_{k-1}$ 的 k 阶顺序主子阵为 $(\boldsymbol{L}_1)_k$，$\cdots$，$(\boldsymbol{L}_{k-1})_k$，则

$$(\boldsymbol{L}_{k-1})_k \ \cdots (\boldsymbol{L}_1)_k \ \boldsymbol{A}_k = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & * \\ & a_{kk}^{(k)} \end{bmatrix}$$

从而有

$$\det \boldsymbol{A}_k = a_{kk}^{(k)} \det \boldsymbol{A}_{11}^{(k)},$$

于是，$\boldsymbol{A}_k$ 非奇异当且仅当 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$。

推论 2.1: 矩阵三角分解的条件

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{A}\text{的各阶顺序主子阵均非奇异} \\ \Longrightarrow \quad & \text{存在唯一的单位下三角阵}\boldsymbol{L}\text{和上三角阵}\boldsymbol{U}\text{，使得}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}. \end{aligned}$$

选主元三角分解

选主元三角分解

例 3.1

求

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

的 LU 分解

例 3.2

求

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

的 LU 分解

A 非奇异，但 Gauss 消去第一步就会失效。

例 3.3

求

$$A=\begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

的 LU 分解

例 3.4

求

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

的 LU 分解

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & 1 - 10^{20} \end{bmatrix}$$

选主元三角分解

设 $\epsilon_{machine} \approx 10^{-16}$，则

$$\widetilde{\boldsymbol{L}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \quad \widetilde{\boldsymbol{U}} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{bmatrix}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{L}}\widetilde{\boldsymbol{U}} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

例 3.5

设

$$A=\begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad b=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

求

$$Ax=b$$

例 3.6

设

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

求

$$Ax = b$$

近似解:

$$\widetilde{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

精确解:

$$x \approx \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

选主元三角分解

交换方程次序

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 10^{-20} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\widehat{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\boldsymbol{U}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 + 10^{-20} \end{bmatrix}$$

近似解

$$\widehat{\boldsymbol{x}} \approx \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

选主元三角分解

图 1: 置换矩阵

$$
\boldsymbol{I}_{pq} = \begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & \\
& \ddots & & & & & \\
& & 0 & \cdots & 1 & & \\
& & \vdots & & \vdots & & \\
& & 1 & \cdots & 0 & & \\
& & & & & \ddots & \\
& & & & & & 1
\end{pmatrix} & \begin{matrix} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \\ \end{matrix} \\
\begin{matrix} \quad & \quad & p & \quad & q & \quad & \quad \end{matrix} &
\end{array}
$$

$$
= \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \cdots & \boldsymbol{e}_{p-1} & \boldsymbol{e}_q & \boldsymbol{e}_{p+1} & \cdots & \boldsymbol{e}_{q-1} & \boldsymbol{e}_p & \boldsymbol{e}_{q+1} & \cdots & \boldsymbol{e}_n \end{pmatrix}
$$

具体步骤：

1 假定消去过程已经进行到了 $k-1$ 步，即已经确定了 $k-1$ 个 Gauss 变换

$$\boldsymbol{L}_1, \ \cdots, \ \boldsymbol{L}_{k-1} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

和 $2(k-1)$ 个初等置换矩阵

$$\boldsymbol{P}_1, \ \cdots, \ \boldsymbol{P}_{k-1}, \ \boldsymbol{Q}_1, \ \cdots, \ \boldsymbol{Q}_{k-1} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

使得

$$\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{L}_{k-1}\boldsymbol{P}_{k-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{k-1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & \boldsymbol{A}_{12}^{(k)} \\ 0 & \boldsymbol{A}_{22}^{(k)} \end{bmatrix}$$

选主元三角分解

2 第 k 步：　选$|a_{pq}^{(k)}| = \max\left\{|a_{ij}^{(k)}|:\ k \le i,\ j \le n\right\}$

选主元三角分解

2 第 k 步:　选$|a_{pq}^{(k)}| = \max\left\{|a_{ij}^{(k)}|:\ k \le i,\ j \le n\right\}$

2.1 若 $a_{pq}^{(k)} = 0$，则 $R(\boldsymbol{A}) = k-1$，停止!

选主元三角分解

2 第 k 步： 选 $|a_{pq}^{(k)}| = \max\left\{|a_{ij}^{(k)}|: \ k \le i, \ j \le n\right\}$

2.1 若 $a_{pq}^{(k)} = 0$，则 $R(\boldsymbol{A}) = k - 1$，停止!

- 若 $a_{pq}^{(k)} \neq 0$，交换 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的第 k、p 行及第 k、q 列，记交换后的 $\boldsymbol{A}_{22}^{(k)}$ 为

$$\tilde{\boldsymbol{A}}_{22}^{(k)} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_{kk}^{(k)} & \cdots & \tilde{a}_{kn}^{(k)} \\ \boldsymbol{d} & & \boldsymbol{d} \\ \tilde{a}_{nk}^{(k)} & \cdots & \tilde{a}_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

选主元三角分解

2 第 k 步： 选$|a_{pq}^{(k)}| = \max\left\{|a_{ij}^{(k)}|:\ k \le i,\ j \le n\right\}$

2 第 k 步： 选$|a_{pq}^{(k)}| = \max\left\{|a_{ij}^{(k)}| : \ k \le i, \ j \le n\right\}$

2.2 计算 Gauss 变换

$$\boldsymbol{L}_k = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_k \boldsymbol{e}_k^T$$

$$\boldsymbol{l}_k = (0, \ \cdots, \ 0, \ \tilde{l}_{k+1,k}, \ \cdots, \ \tilde{l}_{n,k})^T$$

$$\tilde{l}_{i,k} = \tilde{a}_{ik}^{(k)} / \tilde{a}_{kk}^{(k)}, \ i = k+1, \ \cdots, \ n.$$

选主元三角分解

2 第 k 步： 选$|a_{pq}^{(k)}| = \max\left\{|a_{ij}^{(k)}|:\ k \le i,\ j \le n\right\}$

2.2 计算 Gauss 变换

$$\boldsymbol{L}_k = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_k \boldsymbol{e}_k^T$$

$$\boldsymbol{l}_k = (0,\ \cdots,\ 0,\ \tilde{l}_{k+1,k},\ \cdots,\ \tilde{l}_{n,k})^T$$

$$\tilde{l}_{i,k} = \tilde{a}_{ik}^{(k)} / \tilde{a}_{kk}^{(k)},\ i = k+1,\ \cdots,\ n.$$

则

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}^{(k+1)} &= \boldsymbol{L}_k \boldsymbol{P}_k \boldsymbol{A}^{(k-1)} \boldsymbol{Q}_k \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{(k+1)} & \boldsymbol{A}_{12}^{(k+1)} \\ 0 & \boldsymbol{A}_{22}^{(k+1)} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{A}_{11}^{(k+1)}$ 为 k 阶上三角阵，$\boldsymbol{P}_k = \boldsymbol{I}_{kp}$，$\boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{I}_{kq} \in \mathbb{R}^{n \times n}$。

选主元三角分解

全主元 Gauss 消去法的矩阵表述 存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}_k$, $\boldsymbol{Q}_k$ 和初等下三角阵 $\boldsymbol{L}_k$, $k=1,\cdots,n$, 使得

$$\boldsymbol{L}_n \boldsymbol{P}_n \cdots \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{P}_1 \boldsymbol{A} \boldsymbol{Q}_1 \cdots \boldsymbol{Q}_n = U$$

为上三角阵。

选主元三角分解

全主元 Gauss 消去法的矩阵表述 存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}_k$，$\boldsymbol{Q}_k$ 和初等下三角阵 $\boldsymbol{L}_k$，$k=1,\cdots,n$，使得

$$\boldsymbol{L}_n \ \boldsymbol{P}_n \ \cdots \ \boldsymbol{L}_1 \ \boldsymbol{P}_1 \ \boldsymbol{A} \ \boldsymbol{Q}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{Q}_n = U$$

为上三角阵。

令

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}_1 \cdots \boldsymbol{Q}_n, \quad \boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}_n \cdots \boldsymbol{P}_1$$

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{L}_n \boldsymbol{P}_n \cdots \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{P}_1)^{-1} = \boldsymbol{P}_n \cdots \boldsymbol{P}_2 \boldsymbol{L}_1^{-1} \cdots \boldsymbol{P}_n^{-1} \boldsymbol{L}_n^{-1}$$

则有

$$\boldsymbol{PAQ} = \boldsymbol{LU}$$

以下说明 $\boldsymbol{L}$ 为一个单位下三角阵。

选主元三角分解

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} 3 & 10 & 3 & 1 \\ 9 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 12 \\ 2 & 3 & {\color{blue}13} & 1 \end{bmatrix},$$

选主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} & & & 1 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 1 & & & \end{bmatrix}}_{P_1 = I_{14}} \underbrace{\begin{bmatrix} 3 & 10 & 3 & 1 \\ 9 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 12 \\ 2 & 3 & 13 & 1 \end{bmatrix}}_{A^{(1)}} \underbrace{\begin{bmatrix} & & 1 & \\ & 1 & & \\ 1 & & & \\ & & & 1 \end{bmatrix}}_{Q_1 = I_{13}}$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 3 & 2 & 1 \\ 3 & 2 & 9 & 1 \\ 1 & 3 & 2 & 12 \\ 3 & 10 & 3 & 1 \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(1)}}$$

选主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ -0.2 & 1 & & \\ -0.1 & & 1 & \\ -0.2 & & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_1} \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 3 & 2 & 1 \\ 3 & 2 & 9 & 1 \\ 1 & 3 & 2 & 12 \\ 3 & 10 & 3 & 1 \end{bmatrix}}_{\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)}}$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 3 & 2 & 1 \\ & 1.3 & 8.5 & 0.8 \\ & 2.8 & 1.9 & 11.9 \\ & 9.3 & 2.5 & 0.8 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(2)}}$$

选主元三角分解

$$
\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \end{bmatrix}}_{P_2 = I_{23}}
\underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 3 & 2 & 1 \\ & 1.3 & 8.5 & 0.8 \\ & 2.8 & 1.9 & 11.9 \\ & 9.3 & 2.5 & 0.8 \end{bmatrix}}_{A^{(2)}}
\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \\ & 1 & & \end{bmatrix}}_{Q_2 = I_{24}}
$$

$$
= \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 2 & 3 \\ & 11.9 & 1.9 & 2.8 \\ & 0.8 & 8.5 & 1.3 \\ & 0.8 & 2.5 & 9.3 \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(2)}}
$$

$$
\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 & & \\ & 1 & & \\ & -0.1 & 1 & \\ & -0.1 & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_2}
\underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 2 & 3 \\ & 11.9 & 1.9 & 2.8 \\ & 0.8 & 8.5 & 1.3 \\ & 0.8 & 2.5 & 9.3 \end{bmatrix}}_{\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(2)}}
$$

$$
= \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 2 & 3 \\ & 11.9 & 1.9 & 2.8 \\ & & 8.4 & 1.1 \\ & & 2.4 & 9.1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(3)}}
$$

选主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \end{bmatrix}}_{P_3 = I_{34}} \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 2 & 3 \\ & 11.9 & 1.9 & 2.8 \\ & & 8.4 & 1.1 \\ & & 2.4 & 9.1 \end{bmatrix}}_{A^{(3)}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \end{bmatrix}}_{Q_3 = I_{34}}$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 3 & 2 \\ & 11.9 & 2.7 & 1.9 \\ & & 9.1 & 2.4 \\ & & 1.1 & 8.4 \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(3)}}$$

选主元三角分解

$$
\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -0.1 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_3} \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 3 & 2 \\ & 11.9 & 2.8 & 1.9 \\ & & 9.1 & 2.4 \\ & & 1.1 & 8.4 \end{bmatrix}}_{\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(3)}}
$$

$$
= \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 3 & 2 \\ & 11.9 & 2.8 & 1.9 \\ & & 9.1 & 2.4 \\ & & & 8.1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(4)}}
$$

选主元三角分解

将上述步骤合并，即得

$$L_3\ P_3\ L_2\ P_2\ L_1\ P_1\ A\ Q_1\ Q_2\ Q_3 = A^{(4)}$$

$$\Longrightarrow \quad A\ Q = (L_3\ P_3\ L_2\ P_2\ L_1\ P_1)^{-1}\ A^{(4)} = P_1 L_1^{-1}\ P_2\ L_2^{-1}\ P_3\ L_3^{-1}\ A^{(4)}$$

$$\Longrightarrow \quad P_3\ P_2\ P_1\ A\ Q = P_3\ P_2\ L_1^{-1}\ P_2\ L_2^{-1} P_3\ L_3^{-1}\ A^{(4)}$$

$$\Longrightarrow \quad P\ A\ Q = L\ U$$

选主元三角分解

观察 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{P}_3\ \boldsymbol{P}_2\ \boldsymbol{L}_1^{-1}\ \boldsymbol{P}_2\ \boldsymbol{L}_2^{-1}\ \boldsymbol{P}_3\ \boldsymbol{L}_3^{-1}$，设

$$\boldsymbol{P}_2 = I_{23}, \quad \boldsymbol{P}_3 = I_{34}$$

以及

$$\boldsymbol{L}_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_2 & 1 & & \\ *_3 & & 1 & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{L}_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & @_3 & 1 & \\ & @_4 & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{L}_3^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & \#_4 & 1 \end{bmatrix}$$

选主元三角分解

$\boldsymbol{L}_1^{-1}$

选主元三角分解

$$
\boldsymbol{L}_1^{-1} \xrightarrow{\boldsymbol{P}_2 \bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & & 1 & \\ *_2 & 1 & & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix}
$$

选主元三角分解

$$
\boldsymbol{L}_1^{-1} \xRightarrow{\boldsymbol{P}_2\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & & 1 & \\ *_2 & 1 & & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix} \qquad \xRightarrow{\bullet\boldsymbol{P}_2} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & & 1 & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix}
$$

选主元三角分解

$$
L_1^{-1} \xRightarrow{P_2\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & & 1 & \\ *_2 & 1 & & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix} \xRightarrow{\bullet P_2} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & & 1 & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
\xRightarrow{\bullet L_2^{-1}} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & @_3 & 1 & \\ *_4 & @_4 & & 1 \end{bmatrix}
$$

选主元三角分解

$$
L_1^{-1} \xrightarrow{P_2\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & & 1 & \\ *_2 & 1 & & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\bullet P_2} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & & 1 & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
\xrightarrow{\bullet L_2^{-1}} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & @_3 & 1 & \\ *_4 & @_4 & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{P_3\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_4 & @_4 & & 1 \\ *_2 & @_3 & 1 & \end{bmatrix}
$$

选主元三角分解

$$
L_1^{-1} \xRightarrow{P_2\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & & 1 & \\ *_2 & 1 & & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix} \xRightarrow{\bullet P_2} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & & 1 & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
\xRightarrow{\bullet L_2^{-1}} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & @_3 & 1 & \\ *_4 & @_4 & & 1 \end{bmatrix} \xRightarrow{P_3\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_4 & @_4 & & 1 \\ *_2 & @_3 & 1 & \end{bmatrix}
$$

$$
\xRightarrow{\bullet P_3} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_4 & @_4 & 1 & \\ *_2 & @_3 & & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
L_1^{-1} \xrightarrow{P_2\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & & 1 & \\ *_2 & 1 & & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\bullet P_2} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & & 1 & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
\xrightarrow{\bullet L_2^{-1}} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & @_3 & 1 & \\ *_4 & @_4 & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{P_3\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_4 & @_4 & & 1 \\ *_2 & @_3 & 1 & \end{bmatrix}
$$

$$
\xrightarrow{\bullet P_3} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_4 & @_4 & 1 & \\ *_2 & @_3 & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\bullet L_3^{-1}} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & @_3 & 1 & \\ *_4 & @_4 & \#_4 & 1 \end{bmatrix}
$$

选主元三角分解

$$L_1^{-1} \xrightarrow{P_2\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & & 1 & \\ *_2 & 1 & & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\bullet P_2} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & & 1 & \\ *_4 & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\bullet L_2^{-1}} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & @_3 & 1 & \\ *_4 & @_4 & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{P_3\bullet} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_4 & @_4 & & 1 \\ *_2 & @_3 & 1 & \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\bullet P_3} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_4 & @_4 & 1 & \\ *_2 & @_3 & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\bullet L_3^{-1}} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_3 & 1 & & \\ *_2 & @_3 & 1 & \\ *_4 & @_4 & \#_4 & 1 \end{bmatrix}$$

由此可以看出 L 是一个单位下三角阵。

定理 3.1

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L} &= \boldsymbol{P}_n \cdots \boldsymbol{P}_1 (\boldsymbol{L}_n \boldsymbol{P}_n \cdots \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{P}_1)^{-1} \\
&= \boldsymbol{P}_n \cdots \boldsymbol{P}_2 \boldsymbol{L}_1^{-1} \boldsymbol{P}_2 \boldsymbol{L}_2^{-1} \cdots \boldsymbol{P}_n \boldsymbol{L}_n^{-1}
\end{aligned}
$$

是一个单位下三角阵。

选主元三角分解

定理 3.2

存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}$，$\boldsymbol{Q}$ 以及单位下三角阵 $\boldsymbol{L}$ 和上三角阵 $\boldsymbol{U}$，使得

$$\boldsymbol{PAQ} = \boldsymbol{LU},$$

且 $|l_{ij}| \le 1$，U 的非零对角元的个数正好等于 $\boldsymbol{A}$ 的秩。

选主元三角分解

```
for k = 1:n-1
  find p, q(k<=p, q<=n) such that
     |A(p,q)| = max{|A(i,j)|: i=k:n, j=k:n}
  A(k,1:n) <-> A(p,1:n); A(1:n,k) <-> A(1:n,q)
  u(k)=p;    v(k)=q
  if A(k,k)!=0
    A(k+1:n,k) = A(k+1:n,k)/A(k,k)
    A(k+1:n,k+1:n) = A(k+1:n,k+1:n)
                   - A(k+1:n,k)*A(k,k+1:n)
  else
    stop
  end
end
```

例 3.7

对如下矩阵进行列主元三角分解

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix},$$

列主元三角分解

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix},$$

列主元三角分解

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix},$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} & & 1 & \\ & 1 & & \\ 1 & & & \\ & & & 1 \end{bmatrix}}_{P_1} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}}_{A^{(0)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(0)}}$$

列主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & & \\ -\frac{1}{4} & & 1 & \\ -\frac{3}{4} & & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_1} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}}_{\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(0)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(1)}}$$

列主元三角分解

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \end{bmatrix},$$

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \end{bmatrix},$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \\ & 1 & & \end{bmatrix}}_{P_2} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \end{bmatrix}}_{A^{(1)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(1)}}$$

列主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & \frac{3}{7} & 1 & \\ & \frac{2}{7} & & 1 \end{bmatrix}}_{L_2} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(1)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \end{bmatrix}}_{A^{(2)}}$$

列主元三角分解

$$
\boldsymbol{A}^{(2)} = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \end{bmatrix},
$$

列主元三角分解

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \end{bmatrix},$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & 0 \end{bmatrix}}_{P_3} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \end{bmatrix}}_{A^{(2)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(2)}}$$

列主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & \frac{3}{7} & 1 & \\ & \frac{2}{7} & & 1 \end{bmatrix}}_{L_3} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(2)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ & & & \frac{2}{3} \end{bmatrix}}_{A^{(3)}}$$

证毕。 $\square$

列主元三角分解

```
for k = 1:n-1
  find p(k<=p<=n) such that
      |A(p,k)| = max{|A(i,j)|: i=k:n, j=k:n}
  A(k,1:n) <-> A(p,1:n)
  u(k)=p
  if A(k,k)!=0
    A(k+1:n,k) = A(k+1:n,k)/A(k,k)
    A(k+1:n,k+1:n) = A(k+1:n,k+1:n)
        - A(k+1:n,k)*A(k,k+1:n)
  else
    stop
  end
end
```

平方根法及改进的平方根法

平方根法及改进的平方根法

平方根法

适用对象：对称正定矩阵方程组

定义 4.1: 对称正定矩阵

设 $\boldsymbol{A}$ 是 n 阶实对称矩阵，若 $\forall 0 \neq \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$，恒有 $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0$，则称 A 为对称正定矩阵。

平方根法

性质 4.1

若 $\boldsymbol{A}$ 对称正定，则

1. $\boldsymbol{A}$ 非奇异
2. 任一主子矩阵 $\boldsymbol{A}_k$，$k = 1, 2, \cdots, n-1$ 必正定
3. $a_{ii} > 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n$
4. $\lambda_i(\boldsymbol{A}) > 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n$
5. $\det(\boldsymbol{A}) > 0$

平方根法

定理 4.1

对称矩阵$\boldsymbol{A}$正定 $\Longleftrightarrow$ $\boldsymbol{A}$的各阶顺序主子式$|\boldsymbol{A}_i| > 0, \quad i = 1, \cdots, n.$

定理 4.2: Cholesky 分解

若 $\boldsymbol{A}$ 对称正定，则必存在惟一的主对角元皆正的下三角阵 $\boldsymbol{L}$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$。

证明

$\boldsymbol{A}$ 对称正定，则 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子式皆大于 0，从而存在单位下三角阵 $\widetilde{\boldsymbol{L}}$ 使得 $\boldsymbol{A}=\widetilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{D}\widetilde{\boldsymbol{L}}^T$。对于 $\widetilde{\boldsymbol{L}}^T$，存在惟一的向量 $x\in\mathbb{R}^n$ 使得 $\widetilde{\boldsymbol{L}}^T x=e_i$。于是

$$0<x^T\boldsymbol{A}x=x^T\widetilde{\boldsymbol{L}}D\widetilde{\boldsymbol{L}}^T x=(\widetilde{\boldsymbol{L}}^T x)^T D\widetilde{\boldsymbol{L}}^T x=e_i^T De_i=d_i.$$

证明

$\boldsymbol{A}$ 对称正定，则 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子式皆大于 0，从而存在单位下三角阵 $\tilde{\boldsymbol{L}}$ 使得 $\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{L}} \boldsymbol{D} \tilde{\boldsymbol{L}}^T$。对于 $\tilde{\boldsymbol{L}}^T$，存在惟一的向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 使得 $\tilde{\boldsymbol{L}}^T x = e_i$。于是

$$0 < x^T \boldsymbol{A} x = x^T \tilde{\boldsymbol{L}} D \tilde{\boldsymbol{L}}^T x = (\tilde{\boldsymbol{L}}^T x)^T D \tilde{\boldsymbol{L}}^T x = e_i^T D e_i = d_i.$$

所以

$$\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{L}} D \tilde{\boldsymbol{L}}^T = \tilde{\boldsymbol{L}} D^{1/2} D^{1/2} \tilde{\boldsymbol{L}}^T = (D^{1/2} \tilde{\boldsymbol{L}})^T D^{1/2} \tilde{\boldsymbol{L}} \triangleq \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$$

平方根法

若 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的系数矩阵对称正定，则可按如下步骤求其解：

1. 求 $\boldsymbol{A}$ 的 Cholesky 分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$；
2. 求解 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$ 得 $\boldsymbol{y}$；
3. 求解 $\boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 得 $\boldsymbol{x}$。

平方根法

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

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
 & \vdots & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
 & \vdots & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \ddots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \ddots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

图 2: 平方根法运算次序

$$
\begin{array}{ccccc}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & & \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n-1,n} & l_{nn}
\end{array}
$$

平方根法

注意到$l_{ij}=0(j>i)$，由矩阵乘法知

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}l_{jk}=\sum_{k=1}^{j} l_{ik}l_{jk},$$

平方根法

注意到$l_{ij}=0(j>i)$，由矩阵乘法知

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}l_{jk}=\sum_{k=1}^{j} l_{ik}l_{jk},$$

对 $j=1,\cdots,n$,

- 若 $i=j$,

$$a_{jj}=\sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2$$

平方根法

注意到$l_{ij}=0(j>i)$，由矩阵乘法知

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}l_{jk}=\sum_{k=1}^{j} l_{ik}l_{jk},$$

对 $j=1,\cdots,n$,

- 若 $i=j$,

$$a_{jj}=\sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2 \implies l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}l_{jk}\right)^{1/2}$$

平方根法

注意到$l_{ij}=0(j>i)$，由矩阵乘法知

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}l_{jk}=\sum_{k=1}^{j} l_{ik}l_{jk},$$

对 $j=1,\cdots,n,$

- 若 $i=j,$

$$a_{jj}=\sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2 \quad\Longrightarrow\quad l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}l_{jk}\right)^{1/2}$$

- 若 $i>j,$

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

平方根法

注意到$l_{ij}=0(j>i)$，由矩阵乘法知

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}l_{jk}=\sum_{k=1}^{j} l_{ik}l_{jk},$$

对 $j=1,\cdots,n$,

- 若 $i=j$,

$$a_{jj}=\sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2 \quad\Longrightarrow\quad l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}l_{jk}\right)^{1/2}$$

- 若 $i>j$,

$$l_{ij}l_{jj}=a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk} \quad\Longrightarrow\quad l_{ij}=\frac{a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}}{l_{jj}}$$

标量形式

```
for j = 1, 2, ⋯, n
    l_jj = (a_jj - Σ_{k=1}^{j-1} l_jk^2)^{1/2}
    for i = j+1, j+2, ⋯, n
        l_ij = (a_ij - Σ_{k=1}^{j-1} l_ik l_jk) / l_jj
    end
end
```

$$l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2\right)^{1/2}$$

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

平方根法

向量化

```
for j = 1:n
  A(j, j) = √A(j, j)
  A(j+1:n, j) = A(j+1:n, j) / A(j, j)
  for i = j+1:n
    A(i:n, i) = A(i:n, i) - A(i:n, j) A(i, j)
  end
end
```

平方根法

$$\forall i, a_{ii} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik}^2 \implies |l_{ij}| \le \sqrt{a_{ii}}.$$

这说明，在 Cholesky 分解过程中，$|l_{ij}|$ 的平方不会超过 $\boldsymbol{A}$ 的对角元 a_{ii}，舍入误差受到控制，从而不选主元的平方根法是数值稳定的。

例 4.1

用平方根法求解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 8 & 4 \\ 1 & 4 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & & \\ l_{21} & l_{22} & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix}$$

解

验证 $\boldsymbol{A}$ 的对称正定性：

$$a_{11} = 1 > 0, \quad \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 8 \end{vmatrix} = 8 - 4 > 0,$$

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 8 & 4 \\ 1 & 4 & 6 \end{vmatrix} = 16 > 0.$$

平方根法

解（续）：

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}} = 1,$$

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{l_{11}} = 2 \qquad l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} = 2$$

$$l_{31} = \frac{a_{31}}{l_{11}} = 1 \qquad l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31} l_{21}}{l_{22}} = 1 \qquad l_{33} = \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2} = 2$$

解（续）：

$$
\begin{aligned}
&l_{11}=\sqrt{a_{11}}=1, \\
&l_{21}=\frac{a_{21}}{l_{11}}=2 \qquad l_{22}=\sqrt{a_{22}-l_{21}^2}=2 \\
&l_{31}=\frac{a_{31}}{l_{11}}=1 \qquad l_{32}=\frac{a_{32}-l_{31}l_{21}}{l_{22}}=1 \qquad l_{33}=\sqrt{a_{33}-l_{31}^2-l_{32}^2}=2
\end{aligned}
$$

求解 $\boldsymbol{L}Y=b$，得

$$Y=(0,-1,2)^T.$$

求解 $\boldsymbol{L}^TX=Y$，得

$$X=(1,-1,1)^T.$$

追赶法

追赶法

适用范围： 三对角线性方程组

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

追赶法

系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是三对角矩阵，它常常是按行严格对角占优的，即

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| > 0, \\ |b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \quad a_i \neq 0, \quad c_i \neq 0, \quad i = 2, 3, \cdots, n-1, \\ |b_n| > |a_n| > 0. \end{cases}$$

追赶法

$$
\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & u_3 & c_3 & \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & u_n \end{pmatrix} \tag{1}
$$

$$u_1 = b_1$$

追赶法

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1 & & & & \\
l_2 & 1 & & & \\
 & l_3 & 1 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & l_n & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_1 & c_1 & & & \\
 & u_2 & c_2 & & \\
 & & u_3 & c_3 & \\
 & & & \ddots & \ddots \\
 & & & & u_n
\end{pmatrix}
\tag{2}
$$

$$
l_2 u_1 = a_2 \quad \Longrightarrow \quad l_2 = \frac{a_2}{u_1}
$$

$$
l_2 c_1 + u_2 = b_2 \quad \Longrightarrow \quad u_2 = b_2 - l_2 c_1
$$

追赶法

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & u_3 & c_3 & \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & u_n \end{pmatrix}$$

(2)

$$l_2 u_1 = a_2 \quad \Longrightarrow \quad l_2 = \frac{a_2}{u_1}$$

$$l_2 c_1 + u_2 = b_2 \quad \Longrightarrow \quad u_2 = b_2 - l_2 c_1$$

追赶法

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & u_3 & c_3 & \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & u_n \end{pmatrix}$$

(3)

$$l_3 u_2 = a_3 \quad \Longrightarrow \quad l_3 = \frac{a_3}{u_2}$$

$$l_3 c_2 + u_3 = b_3 \quad \Longrightarrow \quad u_3 = b_3 - l_3 c_2$$

追赶法

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1 & & & & \\
l_2 & 1 & & & \\
 & l_3 & 1 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & l_n & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_1 & c_1 & & & \\
 & u_2 & c_2 & & \\
 & & u_3 & c_3 & \\
 & & & \ddots & \ddots \\
 & & & & u_n
\end{pmatrix}
$$

(3)

$$
\begin{aligned}
l_3 u_2 = a_3 \quad & \Longrightarrow \quad l_3 = \frac{a_3}{u_2} \\
l_3 c_2 + u_3 = b_3 \quad & \Longrightarrow \quad u_3 = b_3 - l_3 c_2
\end{aligned}
$$

追赶法

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1 & & & & \\
l_2 & 1 & & & \\
 & l_3 & 1 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & l_n & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_1 & c_1 & & & \\
 & u_2 & c_2 & & \\
 & & u_3 & c_3 & \\
 & & & \ddots & \ddots \\
 & & & & u_n
\end{pmatrix}
$$

$$
\text{递推关系} \rightarrow \begin{cases} u_1 = b_1, \\ \left.\begin{array}{l} l_i = \dfrac{a_i}{u_{i-1}}, \\ u_i = b_i - l_i c_{i-1} \end{array}\right\} i = 2, 3, \cdots, n \end{cases}
$$

例 5.1

求解微分方程

$$\begin{cases} -u_{xx} = f, \quad x \in (a,b), \\ u(a) = u(b) = 0. \end{cases}$$

追赶法

例 5.2

求解微分方程

$$\begin{cases} -u_{xx} = f, \quad x \in (a,b), \\ u(a) = u(b) = 0. \end{cases}$$

解

1 网格剖分:

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b, \quad h = \frac{b-a}{n}$$

例 5.3

求解微分方程

$$\begin{cases} -u_{xx} = f, \quad x \in (a,b), \\ u(a) = u(b) = 0. \end{cases}$$

解

1 网格剖分:

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b, \quad h = \frac{b-a}{n}$$

2 差分离散:

$$u_{xx}(x_i) \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

追赶法

解（续）：

3 生成矩阵:

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-2} \\ f_{n-1} \end{pmatrix}$$

解（续）：

4 用追赶法求解线性方程组

$$
\begin{pmatrix}
2 & -1 & & & \\
-1 & 2 & -1 & & \\
 & -1 & 2 & -1 & \\
 & & -1 & 2 & -1 \\
 & & & -1 & 2
\end{pmatrix}
= \begin{pmatrix}
1 & & & & \\
-1/2 & 1 & & & \\
 & -2/3 & 1 & & \\
 & & -3/4 & 1 & \\
 & & & -4/5 & 1
\end{pmatrix}
\cdot
\begin{pmatrix}
2 & -1 & & & \\
 & 3/2 & -1 & & \\
 & & 4/3 & -1 & \\
 & & & 5/4 & -1 \\
 & & & & 6/5
\end{pmatrix}
$$

存储方式

1 系数矩阵与右端项的存储

用四个 n 维向量 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}, \boldsymbol{d}$ 分别来存储三条对角线上的元素及右端项的值

2 $\boldsymbol{l}$ 与 $\boldsymbol{u}$ 的存储

$\boldsymbol{l}$ 的各元素存储在 $\boldsymbol{a}$ 对应的元素位置，$\boldsymbol{u}$ 的各元素存储在 $\boldsymbol{b}$ 对应的元素位置上

3 未知量 $\boldsymbol{x}$ 的存储

$\boldsymbol{x}$ 的各元素存储在 $\boldsymbol{d}$ 对应的元素位置