数值计算方法

线性方程组的解法

张晓平

2019 年 9 月 9 日

武汉大学数学与统计学院

Table of contents

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
  - · · ·
- 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）
  - · · ·

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：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 $a_{11}^{(1)} \neq 0$,

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

顺序消去法

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，

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

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

顺序消去法

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，

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

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

顺序消去法

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

顺序消去法

设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$，

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

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

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

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

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
```

顺序消去法

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, $\cdots$, 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

注

- 若遇到 $a_{kk}^{(k)}=0$，则消去过程无法进行；

顺序消去法

注

- 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：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：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

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

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

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

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_{i_k,k}^{(k)}| = max_{k≤i≤n} |a_{ik}^{(k)}|;
  interchange the k, i_k-th rows in [A^{(k)}, b^{(k)}] ;
  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
```

高斯消去法

全主元消去法

全主元消去法

定义：全主元消去法

全主元消去法选主元的范围更大，对于 $\left(A^{(1)} \mid b^{(1)}\right)$ 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 $\left(A^{(2)} \mid b^{(2)}\right)$；

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；

$\cdots\cdots$

全主元消去法

例

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

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

全主元消去法

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

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

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

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

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

高斯消去法

选主元消去法的应用

选主元消去法的应用：求逆矩阵

应用一：矩阵的求逆

$$\left(\begin{array}{c:c} A & E \end{array} \right) \xRightarrow{Gauss-Jordan\ \ Elimination} \left(\begin{array}{c:c} E & A^{-1} \end{array} \right)$$

例

求矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 11 & -3 & -2 \\ -23 & 11 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

的逆矩阵.

选主元消去法的应用：求逆矩阵

$$\left(\begin{array}{rrr:ccc} 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

选主元消去法的应用：求逆矩阵

$$\left(\begin{array}{rrr:rrr} 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \xRightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \left(\begin{array}{rrr:rrr} \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

选主元消去法的应用：求逆矩阵

$$\left(\begin{array}{ccc:ccc} 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \xRightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \left(\begin{array}{ccc:ccc} \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

选主元消去法的应用：求逆矩阵

$$
\left(\begin{array}{rrr:rrr}
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
{\color{red}-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{array}\right)
\xRightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\left(\begin{array}{rrr:rrr}
{\color{red}-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{array}\right)
$$

$$
\xRightarrow[r_1 \div (-23)]{r_2 + \frac{11}{23} r_1,\quad r_3 + \frac{1}{23} r_1}
\left(\begin{array}{rrr:rrr}
{\color{red}1} & -0.478 & -0.044 & 0 & -0.044 & 0 \\
0 & {\color{red}2.261} & -1.522 & 1 & 0.478 & 0 \\
0 & -1.522 & 2.044 & 0 & 0.044 & 1
\end{array}\right)
$$

选主元消去法的应用：求逆矩阵

$$\left(\begin{array}{rrr:rrr} 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \xRightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \left(\begin{array}{rrr:rrr} \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

$$\xRightarrow[r_1 \div (-23)]{r_2 + \frac{11}{23} r_1,\quad r_3 + \frac{1}{23} r_1} \left(\begin{array}{rrr:rrr} \color{red}{1} & -0.478 & -0.044 & 0 & -0.044 & 0 \\ 0 & \color{red}{2.261} & -1.522 & 1 & 0.478 & 0 \\ 0 & -1.522 & 2.044 & 0 & 0.044 & 1 \end{array}\right)$$

$$\xRightarrow[r_2 \div (2.261)]{r_1 + \frac{478}{2261} r_2,\quad r_3 + \frac{1522}{2261} r_2} \left(\begin{array}{rrr:rrr} 1 & 0 & -0.365 & 0.211 & 0.057 & 0 \\ 0 & \color{red}{1} & -0.673 & 0.442 & 0.211 & 0 \\ 0 & 0 & \color{red}{1.019} & 0.673 & 0.365 & 1 \end{array}\right)$$

选主元消去法的应用：求逆矩阵

$$\left(\begin{array}{rrr|rrr} 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \xRightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \left(\begin{array}{rrr|rrr} \color{red}{-23} & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

$$\xRightarrow[r_1 \div (-23)]{r_2 + \frac{11}{23} r_1,\quad r_3 + \frac{1}{23} r_1} \left(\begin{array}{rrr|rrr} \color{red}{1} & -0.478 & -0.044 & 0 & -0.044 & 0 \\ 0 & \color{red}{2.261} & -1.522 & 1 & 0.478 & 0 \\ 0 & -1.522 & 2.044 & 0 & 0.044 & 1 \end{array}\right)$$

$$\xRightarrow[r_2 \div (2.261)]{r_1 + \frac{478}{2261} r_2,\quad r_3 + \frac{1522}{2261} r_2} \left(\begin{array}{rrr|rrr} 1 & 0 & -0.365 & 0.211 & 0.057 & 0 \\ 0 & \color{red}{1} & -0.673 & 0.442 & 0.211 & 0 \\ 0 & 0 & \color{red}{1.019} & 0.673 & 0.365 & 1 \end{array}\right)$$

$$\xRightarrow[r_3 \div (1.019)]{r_1 + \frac{365}{1019} r_3,\quad r_2 + \frac{673}{1019} r_3} \left(\begin{array}{rrr|rrr} 1 & 0 & 0 & \color{blue}{0.452} & \color{blue}{0.188} & \color{blue}{0.358} \\ 0 & \color{red}{1} & 0 & \color{blue}{0.886} & \color{blue}{0.452} & \color{blue}{0.660} \\ 0 & 0 & \color{red}{1} & \color{blue}{0.660} & \color{blue}{0.358} & \color{blue}{0.981} \end{array}\right)$$

$$\color{blue}{A^{-1}}$$

应用二：求行列式

设有矩阵

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

用主元消去法将其化为上三角矩阵，并设对角元素为 b_{11}, b_{22}, $\cdots$, b_{nn}, 故 A 的行列式为

$$\det(A) = (-1)^m b_{11} b_{22} \cdots b_{nn},$$

其中 m 为所做行、列交换的次数。

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

三角方程组的解法

定义：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

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

三角方程组的解法

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

前代法

```
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
```

三角方程组的解法

前代法

```
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
```

算法复杂度

所需加、减、乘、除的次数为 $\sum_{i=1}^{n}(2i-1)=n^2$, 即该算法的运算量为 n^2.

定义：上三角方程组

考察

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

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

回代法

```
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

回代法

```
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
```

算法复杂度

同前代法一样，回代法的运算量也为 $O(n^2)$.

三角方程组的解法

定义：一般线性方程组

察

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

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

三角方程组的解法

定义：一般线性方程组

察

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

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

若 A 能分解成一个下三角阵 L 和一个上三角阵 U 的乘积，即

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

则 (3) 的解 x 可通过以下两步算得：

1. 利用前代法求解 $Ly = b$，得 y；
2. 利用回代法求解 $Ux = y$，得 x。

三角形方程组和三角分解

Gauss 变换

定义：矩阵三角分解

将矩阵 A 分解为一个下三角阵 L 和一个上三角阵 U 的乘积，最自然的做法是通过一系列初等变换，逐步将 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。

Gauss 变换

定义：Gauss 变换 (矩阵)

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

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

定义：Gauss 变换 (矩阵)

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

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

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：L_k 的逆

$$L_k^{-1} = I + l_k e_k^T$$

性质：L_k 的逆

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

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

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

注：$\boldsymbol{e}_k^T\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 行，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_k$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 列。

Gauss 变换

性质

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

注：$\boldsymbol{e}_k^T\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 行，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_k$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 列。

例

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

性质

若 $j < k$，则

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

Gauss 变换

性质

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

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 $\boldsymbol{e}_j^T\boldsymbol{l}_k=0$。

例

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

Gauss 变换

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

Gauss 变换

$$\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} \xrightarrow{\boldsymbol{L}_1} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{A}}$$

Gauss 变换

$$
\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}}
\xrightarrow{\boldsymbol{L}_1}
\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \\ & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \\ & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}}
$$

$$
\xrightarrow{\boldsymbol{L}_2}
\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \\ & & {\color{red}*} & {\color{red}*} \\ & & {\color{red}*} & {\color{red}*} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}}
$$

Gauss 变换

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \ast & \ast & \ast & \ast \\ \ast & \ast & \ast & \ast \\ \ast & \ast & \ast & \ast \\ \ast & \ast & \ast & \ast \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} \xrightarrow{\boldsymbol{L}_1} \underbrace{\begin{bmatrix} \ast & \ast & \ast & \ast \\ & \ast & \ast & \ast \\ & \ast & \ast & \ast \\ & \ast & \ast & \ast \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}}$$

$$\xrightarrow{\boldsymbol{L}_2} \underbrace{\begin{bmatrix} \ast & \ast & \ast & \ast \\ & \ast & \ast & \ast \\ & & \ast & \ast \\ & & \ast & \ast \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}} \xrightarrow{\boldsymbol{L}_3} \underbrace{\begin{bmatrix} \ast & \ast & \ast & \ast \\ & \ast & \ast & \ast \\ & & \ast & \ast \\ & & & \ast \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_3\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}}$$

Gauss 变换

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

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

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

Gauss 变换

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

$$
\boldsymbol{L}_2 \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & -3 & 1 & \\ & -4 & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & 3 & 5 & 5 \\ & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix}
$$

Gauss 变换

$$
\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix}
$$

Gauss 变换

$$
\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix}
$$

$$
\boldsymbol{L}_3\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & & 2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{U}.
$$

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

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

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

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，

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

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。

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。

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

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

Gauss 变换

由

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

可知

Gauss 变换

由

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

可知

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

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

Gauss 变换

由

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

可知

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

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

Gauss 变换

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 个主对角元以下的元素均为 0，无需存储，这些位置恰好用于存储 l_k 中的非 0 元。

Gauss 变换

LU 分解 (matlab code)

```
function A = LUDecomposition(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
```

Gauss 变换

算法复杂度

运算次数为

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

Gauss 变换

定义：主元

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

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

主元 $a_{ii}^{(i)}(i=1,\cdots,k)$ 均不为 0 的充分必要条件是 $\boldsymbol{A}$ 的 i 阶顺序主子式 $\boldsymbol{A}_i(i=1,\cdots,k)$ 均非奇异。

Gauss 变换

定理

主元 $a_{ii}^{(i)}\,(i=1,\cdots,k)$ 均不为 0 的充分必要条件是 $\boldsymbol{A}$ 的 i 阶顺序主子式 $\boldsymbol{A}_i(i=1,\cdots,k)$ 均非奇异。

证明（用数学归纳法）：

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

定理

主元 $a_{ii}^{(i)}(i=1,\cdots,k)$ 均不为 0 的充分必要条件是 $\boldsymbol{A}$ 的 i 阶顺序主子式 $\boldsymbol{A}_i(i=1,\cdots,k)$ 均非奇异。

证明（用数学归纳法）：

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

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

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

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

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

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

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

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：矩阵三角分解的条件

若 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子阵均非奇异，则存在唯一的单位下三角阵 $\boldsymbol{L}$ 和上三角阵 $\boldsymbol{U}$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$.

三角形方程组和三角分解

Doolittle 分解

Doolittle 分解

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

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Doolittle 分解

图 1: Doolittle 分解运算次序：先行后列，先 U 后 L

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

Crout 分解

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

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：**先列后行，先 L 后 U**

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Crout 分解

图 2: Crout 分解运算次序：先列后行，先 L 后 U

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

Doolittle 分解

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj} \quad i,\ j = 1, 2, \cdots, n$$

$$l_{ii} = 1,\ l_{ij} = 0(j > i),\ u_{ij} = 0(i > j)$$

Doolittle 分解

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj} \quad i,\ j = 1, 2, \cdots, n$$

$$l_{ii} = 1,\ l_{ij} = 0(j > i),\ u_{ij} = 0(i > j)$$

- 先算 U 的第 k 行 $(j \geqslant k)$

$$a_{kj} = \sum_{r=1}^{n} l_{kr} u_{rj} = \sum_{r=1}^{k} l_{kr} u_{rj} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj} + l_{kk} u_{kj}$$

Doolittle 分解

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj} \quad i,\ j = 1, 2, \cdots, n$$

$$l_{ii} = 1,\ l_{ij} = 0(j > i),\ u_{ij} = 0(i > j)$$

- 先算 U 的第 k 行 $(j \geqslant k)$

$$a_{kj} = \sum_{r=1}^{n} l_{kr} u_{rj} = \sum_{r=1}^{k} l_{kr} u_{rj} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj} + l_{kk} u_{kj}$$

$$\Longrightarrow \quad u_{kj} = a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}$$

Doolittle 分解

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj} \quad i,\ j = 1, 2, \cdots, n$$

$$l_{ii} = 1,\ l_{ij} = 0 (j > i),\ u_{ij} = 0 (i > j)$$

Doolittle 分解

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj} \quad i,\ j = 1, 2, \cdots, n$$

$$l_{ii} = 1,\ \ l_{ij} = 0(j > i),\ \ u_{ij} = 0(i > j)$$

- 再算 L 的第 k 列 $(i > k)$

$$a_{ik} = \sum_{r=1}^{n} l_{ir} u_{rk} = \sum_{r=1}^{k} l_{ir} u_{rk} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk} + l_{ik} u_{kk}$$

Doolittle 分解

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj} \quad i,\ j = 1, 2, \cdots, n$$

$$l_{ii} = 1,\ l_{ij} = 0(j > i),\ u_{ij} = 0(i > j)$$

- 再算 L 的第 k 列 $(i > k)$

$$a_{ik} = \sum_{r=1}^{n} l_{ir} u_{rk} = \sum_{r=1}^{k} l_{ir} u_{rk} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk} + l_{ik} u_{kk}$$

$$\Longrightarrow \quad l_{ik} = \frac{a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}}{u_{kk}}$$

先行后列

```
for k = 1:n
  for j = k, ···, n  % 计算第 k 行
```

$$u_{kj} = a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{lr} u_{rj}$$

```
  end
  for i = k+1, ···, n % 计算第 k 列
```

$$l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}) / u_{kk}$$

```
  end
end
```

例

利用 Doolittle 分解求解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & -4 \\ -3 & -4 & -12 & 13 \\ 2 & 10 & 0 & -3 \\ 4 & 14 & 9 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 5 \\ 10 \\ 7 \end{pmatrix}$$

Doolittle 分解

解

1 计算 U 的第一行，L 的第一列，得

$$u_{11} = 1, \quad u_{12} = 2, \quad u_{13} = 3, \quad u_{14} = -4,$$

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}} = -3, \quad l_{31} = \frac{a_{31}}{u_{11}} = 2, \quad l_{31} = \frac{a_{31}}{u_{11}} = 4.$$

Doolittle 分解

解

2 计算 U 的第二行，L 的第二列，得

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 2, \quad u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = -3,$$

$$u_{24} = a_{24} - l_{21}u_{14} = 1,$$

$$l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}u_{12}}{u_{22}} = 3, \quad l_{42} = \frac{a_{42} - l_{41}u_{12}}{u_{22}} = 3.$$

解

3 计算 U 的第三行，L 的第三列，得

$$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} = 3,$$

$$u_{34} = a_{34} - l_{31}u_{14} - l_{32}u_{24} = 2,$$

$$l_{43} = \frac{a_{43} - l_{41}u_{13} - l_{42}u_{23}}{u_{33}} = 2.$$

解

3 计算 U 的第三行，L 的第三列，得

$$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} = 3,$$

$$u_{34} = a_{34} - l_{31}u_{14} - l_{32}u_{24} = 2,$$

$$l_{43} = \frac{a_{43} - l_{41}u_{13} - l_{42}u_{23}}{u_{33}} = 2.$$

4 计算 U 的第四行，得

$$u_{44} = a_{44} - l_{41}u_{14} - l_{42}u_{24} - l_{43}u_{34} = -4,$$

Doolittle 分解

解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & -4 \\ -3 & -4 & -12 & 13 \\ 2 & 10 & 0 & -3 \\ 4 & 14 & 9 & -13 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -3 & 1 & & \\ 2 & 3 & 1 & \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & -4 \\ & 2 & -3 & 1 \\ & & 3 & 2 \\ & & & -4 \end{pmatrix}$$

Doolittle 分解

解

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ -3 & 1 & & \\ 2 & 3 & 1 & \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 5 \\ 10 \\ 7 \end{pmatrix}$$

求得

$$\boldsymbol{y} = (-2,\ -1,\ 17,\ -16)^T.$$

解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & -4 \\ & 2 & -3 & 1 \\ & & 3 & 2 \\ & & & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ 17 \\ -16 \end{pmatrix}$$

求得

$$\boldsymbol{x} = (1,\ 2,\ 3,\ 4)^T.$$

三角形方程组和三角分解

对称矩阵的三角分解

对称矩阵的三角分解

定理

若 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶对称矩阵，且 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子式都不为 0，则 $\boldsymbol{A}$ 可惟一分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^T,$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{D}$ 为对角阵。

对称矩阵的三角分解

证明

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

因为 $u_{ii}\neq 0(i=1,\cdots,n)$，故 $\boldsymbol{U}$ 可分解为

$$
\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & \frac{u_{1n}}{u_{11}} \\ & 1 & \cdots & \frac{u_{2n}}{u_{22}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}=\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}_1
$$

其中 $\boldsymbol{D}$ 为对角矩阵，$\boldsymbol{U}_1$ 为单位上三角阵。

证明

于是

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}_1),$$

因为 $\boldsymbol{A}$ 为对角阵，故

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{U}_1^T\boldsymbol{D}^T\boldsymbol{L} = \boldsymbol{U}_1^T(\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^T).$$

由 LU 分解的惟一性即得

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{U}_1^T.$$

证毕。 $\square$

选主元三角分解

选主元三角分解

例

求

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

的 LU 分解

选主元三角分解

例

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。

选主元三角分解

例

求

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

的 LU 分解

选主元三角分解

例

求

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

的 LU 分解

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

选主元三角分解

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

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

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

选主元三角分解

例

设

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

求

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

选主元三角分解

例

设

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

求

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

近似解:

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

精确解:

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

选主元三角分解

交换方程次序

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

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

近似解

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

选主元三角分解

图 3: 置换矩阵

$$
\boldsymbol{I}_{pq} = \begin{array}{c} \\ \left(\begin{array}{ccccccc} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 0 & \cdots & 1 & & \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ & & 1 & \cdots & 0 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{array}\right) \\ \begin{array}{ccccccc} & & {\color{blue}p} & & {\color{blue}q} & & \end{array} \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ {\color{blue}p} \\ \\ {\color{blue}q} \\ \\ \\ \end{array}
$$

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

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$|a_{pq}^{(k)}| = \max\left\{|a_{ij}^{(k)}|:\ k \leqslant i,\ j \leqslant n\right\}$

选主元三角分解

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

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$|a_{pq}^{(k)}| = \max\left\{|a_{ij}^{(k)}|：\ k \leqslant i,\ j \leqslant n\right\}$

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

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

选主元三角分解

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

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

2.2 计算 Gauss 变换

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

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

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

选主元三角分解

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

2.2 计算 Gauss 变换

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

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

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

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，$\boldsymbol{P}_k = \boldsymbol{I}_{kp}$，$\boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{I}_{kq} \in \mathbb{R}^{n \times n}$。

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 $\boldsymbol{L}_k$，$k=1,\cdots,n-1$，使得

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{n-1}=\boldsymbol{U}$$

为上三角阵。改写上式为

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_2\cdots\boldsymbol{P}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{n-1}=\boldsymbol{U}$$

即

$$\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{n-1}=\left(\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_2\cdots\boldsymbol{P}_{n-1}\right)^{-1}\boldsymbol{U}$$

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 $\boldsymbol{L}_k$，$k=1,\cdots,n-1$，使得

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{n-1}=\boldsymbol{U}$$

为上三角阵。改写上式为

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_2\cdots\boldsymbol{P}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{n-1}=\boldsymbol{U}$$

即

$$\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{n-1}=(\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_2\cdots\boldsymbol{P}_{n-1})^{-1}\boldsymbol{U}$$

记

$$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{n-1},\ \boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{P}_1$$
$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{L}_1^{-1}\cdots\boldsymbol{P}_n^{-1}\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}$$

则有

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

选主元三角分解

以下举例说明 L 为一个单位下三角阵。

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

选主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} & & & 1 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 1 & & & \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{P}_1 = I_{14}} \underbrace{\begin{bmatrix} 3 & 10 & 3 & 1 \\ 9 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 12 \\ 2 & 3 & 13 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(1)}} \underbrace{\begin{bmatrix} & & 1 & \\ & 1 & & \\ 1 & & & \\ & & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Q}_1 = I_{13}}$$

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

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

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

选主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{P}_2 = I_{23}} \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 3 & 2 & 1 \\ & 1.3 & 8.5 & 0.8 \\ & 2.8 & 1.9 & 11.9 \\ & 9.3 & 2.5 & 0.8 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(2)}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \\ & 1 & & \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Q}_2 = I_{24}}$$

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

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

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

选主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{P}_3 = I_{34}} \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 2 & 3 \\ & 11.9 & 1.9 & 2.8 \\ & & 8.4 & 1.1 \\ & & 2.4 & 9.1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(3)}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{Q}_3 = I_{34}}$$

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

选主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -0.1 & 1 \end{bmatrix}}_{L_3} \underbrace{\begin{bmatrix} 13 & 1 & 3 & 2 \\ & 11.9 & 2.8 & 1.9 \\ & & 9.1 & 2.4 \\ & & 1.1 & 8.4 \end{bmatrix}}_{\widetilde{A}^{(3)}}$$

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

选主元三角分解

将上述步骤合并，即得

$$
\begin{aligned}
& L_3 P_3 L_2 P_2 L_1 P_1 A Q_1 Q_2 Q_3 = A^{(4)} = U \\
\Longrightarrow \quad & L_3 P_3 L_2 P_2 L_1 P_2 P_3 \underbrace{P_3 P_2 P_1}_{P} A \underbrace{Q_1 Q_2 Q_3}_{Q} = U \\
\Longrightarrow \quad & P A Q = (L_3 P_3 L_2 P_2 L_1 P_2 P_3)^{-1} U \\
\Longrightarrow \quad & P A Q = P_3 P_2 L_1^{-1} P_2 L_2^{-1} P_3 L_3^{-1} U \\
\Longrightarrow \quad & P A Q = L U
\end{aligned}
$$

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

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

以及

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

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

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

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

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

选主元三角分解

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

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

选主元三角分解

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

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

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

选主元三角分解

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

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

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

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。

选主元三角分解

定理

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{P}_{n-1} \cdots \boldsymbol{P}_2 \boldsymbol{L}_1^{-1} \boldsymbol{P}_2 \boldsymbol{L}_2^{-1} \cdots \boldsymbol{P}_{n-1} \boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}$$

是一个单位下三角阵。

定理

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 U，使得

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

且 $|l_{ij}| \leqslant 1$，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 i

```
function [u, v, A] = myLUFullPivot(A)
n = size(A, 1);
u = zeros(n, 1); v = zeros(n, 1);
eps = 1e-10;
for k = 1:n-1
    % find p
    [m, p1] = max(abs(A(k:n, k:n)));
    [~, q] = max(m);
    p = p1(q);
    p = p+k-1; q = q+k-1;
    % interchange k-th and p-th column
    tmp = A(k, 1:n); A(k, 1:n) = A(p, 1:n); A(p, 1:
    n) = tmp;
```

选主元三角分解 ii

```
    tmp = A(1:n, k); A(1:n, k) = A(1:n, q); A(1:n,
    q) = tmp;
    u(k) = p; v(k) = q;
    if abs(A(k,k)) > eps
        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
        return
    end
end
end
```

选主元三角分解 i

```
n = 4;
ONE = ones(n);
A =   8*(tril(ONE,-1)-tril(ONE,-2)) ...
    +   (tril(ONE, 1)-tril(ONE, 0)) ...
    + 6*eye(n);
%b = [7; 15*ones(n-2,1); 14];
b = [8 23 38 48]';

n = size(A, 1);
[u, v, A] = myLUFullPivot(A);

for k = 1:n-1
    if u(k) > k
        tmp = b(k);
```

选主元三角分解 ii

```
        b(k) = b(u(k));
        b(u(k)) = tmp;
    end
end
b = TrilForward (A,b);

b = TriuBackward(A,b)
for k = n-1:-1:1
    if v(k) > k
        tmp = b(k);
        b(k) = b(v(k));
        b(v(k)) = tmp;
    end
end
```

列主元三角分解

例

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

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

列主元三角分解

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

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

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

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

列主元三角分解

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

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \\ & 1 & & \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{P}_2} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(1)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \end{bmatrix}}_{\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)}}$$

列主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & \frac{3}{7} & 1 & \\ & \frac{2}{7} & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_2} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \end{bmatrix}}_{\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(2)}}$$

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

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

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & 0 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{P}_3} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(2)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \end{bmatrix}}_{\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(2)}}$$

列主元三角分解

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & \frac{3}{7} & 1 & \\ & \frac{2}{7} & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}_3} \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \end{bmatrix}}_{\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(2)}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ & & & \frac{2}{3} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}^{(3)}}$$

证毕。 $\square$

选主元三角分解 i

```
function [u, A] = myLUColPivot(A)
n = size(A, 1); u = zeros(n, 1); eps = 1e-10;
for k = 1:n-1
    % find p
    [~, p] = max(abs(A(k:n, k)));
    p = p+k-1;
    % interchange k-th and p-th column
    tmp = A(k, 1:n);
    A(k, 1:n) = A(p, 1:n);
    A(p, 1:n) = tmp;
    u(k) = p;
    if abs(A(k,k)) > eps
        A(k+1:n, k) = A(k+1:n, k) / A(k, k);
```

选主元三角分解 ii

```
        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
        return
    end
end
end
```

选主元三角分解 i

```
function myLUColPivotTest()
n = 50;
ONE = ones(n);
A =   8*(tril(ONE,-1)-tril(ONE,-2)) ...
    +   (tril(ONE, 1)-tril(ONE, 0)) ...
    + 6*eye(n);
b = [7; 15*ones(n-2,1); 14]

n = size(A, 1);
[u, A] = myLUColPivot(A);
for k = 1:n-1
   if u(k) > k
       tmp = b(k);
       b(k) = b(u(k));
```

选主元三角分解 ii

```
        b(u(k)) = tmp;
    end
end
b = TrilForward (A,b);
b = TriuBackward(A,b)
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

平方根法

适用对象：对称正定矩阵方程组

定义：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

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

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

平方根法

定理：Cholesky 分解

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

平方根法

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

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

平方根法

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 $\boldsymbol{A} = \widetilde{\boldsymbol{L}}D\widetilde{\boldsymbol{L}}^T$。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

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

所以

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

平方根法

若 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 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 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$ 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 4: 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 4: 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 4: 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 4: 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 4: 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 4: 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 4: 平方根法运算次序

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

平方根法

图 4: 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 4: 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 4: 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 $i=j,$

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

- 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 $i>j$,

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

平方根法

标量形式

for j = 1, 2, $\cdots$, n

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

for i = j+1, j+2, $\cdots$, n

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

end

end

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

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

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

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)：

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

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

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

求解 $\boldsymbol{L}Y = b$，得

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

求解 $\boldsymbol{L}^T X = Y$，得

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

平方根法

```
% Cholesky decomposition of a symmetric matrix
function A = Cholesky(A)
n = size(A, 1);
for j = 1:n
  A(j, j) = sqrt(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

```
clear;
A = [1 0 0; 2 8 0; 1 4 6];
b = [0; -2; 3];
A = Cholesky(A);
b = TrilSolver1(A, b);
b = TriuSolver1(A', b)
```

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 A 是三对角矩阵，它常常是按行严格对角占优的，即

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

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

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

(2)

$$
\begin{aligned}
l_2 u_1 &= a_2 &\implies\quad l_2 &= \frac{a_2}{u_1} \\
l_2 c_1 + u_2 &= b_2 &\implies\quad u_2 &= b_2 - l_2 c_1
\end{aligned}
$$

追赶法

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

(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)

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

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

追赶法

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

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

追赶法

例

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

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:

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

追赶法

例

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:

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

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 $a, b, c,$ ⋮ 分别来存储三条对角线上的元素及右端项的值

2 **l 与 u 的存储**

l 的各元素存储在 a 对应的元素位置，u 的各元素存储在 b 对应的元素位置上

3 **未知量 x 的存储**

x 的各元素存储在 ⋮ 对应的元素位置

平方根法 i

```
function d = TriDiagonalSolver(a, b, c, d)
n = length(a);

% LU decompostion of A
for i = 2:n
    a(i) = a(i) / b(i-1);
    b(i) = b(i) - a(i) * c(i-1);
end

% find y of Ly = d
for i = 2:n
   d(i) = d(i) - a(i) * d(i-1);
end
```

平方根法 ii

```
% find x of Ux = y
d(n) = d(n) / b(n);
for i = n-1:-1:1
   d(i) = (d(i) - c(i) * d(i+1)) / b(i);
end

end
```

平方根法 i

```
clear;
n = 10;
loop = 5;
err = zeros(1, loop)
for k = 1:loop
    x = linspace(0,1,n+2);
    h = 1/(n+1);
    b = 2*ones(1,n);
    a = -[0 ones(1,n-1)];
    c = -[ones(1,n-1) 0];
    d = f(x(2:end-1))*h^2 + [u(x(1)) zeros(1,n-2) u
    (x(n+2))];

    d = TriDiagonalSolver(a,b,c,d);
```

```
    err(k) = max(abs(d-u(x(2:end-1))))
    plot(x(2:end-1), abs(d-u(x(2:end-1))));
    hold on;
    n = 2*n;
end
format long e
err'
```