# 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

- 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<mark>有限次</mark>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
- . . . .

### 适用范围:

- 大型稀疏方程组
- . . .



高斯消去法

## 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。

6

设 
$$a_{11}^{(1)} \neq 0$$
,

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

设 
$$a_{11}^{(1)} \neq 0$$
,

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

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

设 
$$a_{11}^{(1)} \neq 0$$
,

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

$$(2)+(1)\times\left(-\frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right)$$

$$(3)+(1)\times\left(-\frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\right)$$

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

$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} + a_{1j}^{(1)} \times \left( -\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \right), & i, j = 2, 3, \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} + b_1^{(1)} \times \left( -\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \right), & i = 2, 3. \end{cases}$$

设 
$$a_{22}^{(2)} \neq 0$$
,

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

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

设 
$$a_{22}^{(2)} \neq 0$$
,

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

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

$$a_{12}^{(2)} x_2 + a_{13}^{(2)} x_3 = b_2^{(2)}$$
 $a_{23}^{(3)} x_3 = b_3^{(3)}$ 

$$\begin{cases} a_{33}^{(3)} = a_{33}^{(2)} + a_{23}^{(2)} \times \left( -\frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \right), \\ b_3^{(3)} = b_3^{(2)} + b_2^{(2)} \times \left( -\frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \right). \end{cases}$$

## 一般情形: 考察 n 元线性方程组

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

## 其中

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

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, \cdots, n-1 for i = k+1, \cdots, n  l_{ik} = a_{ik}^{(k)} \ / \ a_{kk}^{(k)},  for j = k+1, \cdots, n+1  a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} \ - \ l_{ik} \cdot a_{kj}^{(k)}  end end
```

## 可得

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

## 回代公式

end

$$\begin{array}{rcll} x_n & = & b_n^{(n)} \ / \ a_{nn}^{(n)} \\ & \text{for i = n-1, n-2, } \cdots \text{, 1} \\ & x_i & = & \left( b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j \right) \ / \ a_{ii}^i \end{array}$$

14

注

■ 若遇到  $a_{kk}^{(k)} = 0$ ,则消去过程无法进行;

# 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

## 定义:列主元消去法

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

#### 定义:列主元消去法

在消元过程中,每次选主元时,<mark>仅依次按列选取绝对值最大的元</mark> 素作为主元,它只进行<mark>行交换</mark>,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。

例

## 用列主元消去法求解

$$\left(\begin{array}{ccccc}
2 & 1 & 2 & 5 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{array}\right)$$

$$\begin{pmatrix}
2 & 1 & 2 & 5 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 & 5 \\ 5 & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} 5 & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 - \frac{2}{5}r_1} \begin{pmatrix} 5 & -1 & 1 & 8 \\ 1.4 & 1.6 & 1.8 \\ -2.8 & -4.2 & -5.6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
2 & 1 & 2 & 5 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 - \frac{2}{5}r_1}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
1.4 & 1.6 & 1.8 \\
-2.8 & -4.2 & -5.6
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_3}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
-2.8 & -4.2 & -5.6 \\
1.4 & 1.6 & 1.8
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
2 & 1 & 2 & 5 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 - \frac{2}{5} r_1}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
1.4 & 1.6 & 1.8 \\
-2.8 & -4.2 & -5.6
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_3}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
-2.8 & -4.2 & -5.6 \\
1.4 & 1.6 & 1.8
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3 + \frac{1}{2} r_2}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
-2.8 & -4.2 & -5.6 \\
-0.5 & -1
\end{pmatrix}$$

```
for k = 1, 2, \dots, n-1
   find i_k \in k, \dots, n s.t. |a_{i_k,k}^{(k)}| = \max_{k \leqslant i \leqslant n} |a_{ik}^{(k)}|;
   interchange the k, i_k-th rows in [A^{(k)}, b^{(k)}] ;
   for i = k+1, \dots, n
      l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{ik}^{(k)};
       for j = k+1, \dots, n+1
          a_{ii}^{(k+1)} = a_{ii}^{(k)} - l_{ik} \cdot a_{ki}^{(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<mark>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  $\left(A^{(2)}\mid b^{(2)}\right)$ ;</mark>

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;

. . . . . .

# 全主元消去法

## 例

## 用全主元消去法求解

# 全主元消去法

$$\begin{pmatrix}
x_1 & x_2 & x_3 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
x_1 & x_2 & x_3 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
x_1 & x_2 & x_3 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
x_1 & x_2 & x_3 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 - \frac{2}{5} r_1}$$

$$\xrightarrow{r_3 - \frac{1}{5} r_1}
\begin{pmatrix}
x_1 & x_2 & x_3 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1.4 & 1.6 & 1.8 \\
-2.8 & -4.2 & -5.6
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
x_1 & x_2 & x_3 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
5 & -1 & 1 & 8 \\
2 & 1 & 2 & 5 \\
1 & -3 & -4 & -4
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 - \frac{2}{5}r_1}
\begin{pmatrix}
x_1 & x_2 & x_3 \\
5 & -1 & 1 & 8 \\
1.4 & 1.6 & 1.8 \\
-2.8 & -4.2 & -5.6
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_3}
\begin{pmatrix}
x_1 & x_3 & x_2 \\
5 & 1 & -1 & 8 \\
-4.2 & -2.8 & -5.6 \\
1.6 & 1.4 & 1.8
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 5 & -1 & 1 & 8 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} 5 & -1 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 & 5 \\ 1 & -3 & -4 & -4 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 - \frac{2}{5} r_1} \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ 5 & -1 & 1 & 8 \\ 1.4 & 1.6 & 1.8 \\ -2.8 & -4.2 & -5.6 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_3} \begin{pmatrix} 5 & 1 & -1 & 8 \\ -4.2 & -2.8 & -5.6 \\ 1.6 & 1.4 & 1.8 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3 + \frac{8}{21} r_2} \begin{pmatrix} x_1 & x_3 & x_2 \\ 5 & -1 & 1 & 8 \\ -2.8 & -4.2 & -5.6 \\ 1/3 & -1/3 \end{pmatrix}$$

高斯消去法

选主元消去法的应用

应用一: 矩阵的求逆
$$\left(\begin{array}{c}A \mid E\end{array}\right) \xrightarrow{Gauss-Jordan\ Elimination} \left(\begin{array}{c}E \mid A^{-1}\end{array}\right)$$

例

求矩阵

$$A = \left(\begin{array}{rrr} 11 & -3 & -2 \\ -23 & 11 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \end{array}\right)$$

的逆矩阵.

$$\begin{pmatrix}
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
-23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
-23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
-23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
-23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ -23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} -23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 + \frac{11}{23}r_1, \quad r_3 + \frac{1}{23}r_1} \qquad \begin{pmatrix} 1 & -0.478 & -0.044 & 0 & -0.044 & 0 \\ 0 & 2.261 & -1.522 & 1 & 0.478 & 0 \\ 0 & -1.522 & 2.044 & 0 & 0.044 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
-23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
-23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 + \frac{11}{23}r_1, \quad r_3 + \frac{1}{23}r_1}
\xrightarrow{r_1 \div (-23)}
\begin{pmatrix}
1 & -0.478 & -0.044 & 0 & -0.044 & 0 \\
0 & 2.261 & -1.522 & 1 & 0.478 & 0 \\
0 & -1.522 & 2.044 & 0 & 0.044 & 1
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_1 + \frac{478}{2261}r_2, \quad r_3 + \frac{1522}{2261}r_2}
\xrightarrow{r_2 \div (2.261)}$$

$$\begin{pmatrix}
1 & 0 & -0.365 & 0.211 & 0.057 & 0 \\
0 & 1 & -0.673 & 0.442 & 0.211 & 0 \\
0 & 0 & 1.019 & 0.673 & 0.365 & 1
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
-23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2}
\begin{pmatrix}
-23 & 11 & 1 & 0 & 1 & 0 \\
11 & -3 & -2 & 1 & 0 & 0 \\
1 & -2 & 2 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 + \frac{11}{23} r_1, \quad r_3 + \frac{1}{23} r_1}
\xrightarrow{r_1 \div (-23)}
\begin{pmatrix}
1 & -0.478 & -0.044 & 0 & -0.044 & 0 \\
0 & 2.261 & -1.522 & 1 & 0.478 & 0 \\
0 & -1.522 & 2.044 & 0 & 0.044 & 1
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_1 + \frac{478}{2261} r_2, \quad r_3 + \frac{1522}{2261} r_2}
\xrightarrow{r_2 \div (2.261)}
\begin{pmatrix}
1 & 0 & -0.365 & 0.211 & 0.057 & 0 \\
0 & 1 & -0.673 & 0.442 & 0.211 & 0 \\
0 & 0 & 1.019 & 0.673 & 0.365 & 1
\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_1 + \frac{365}{1019} r_3, \quad r_2 + \frac{673}{1019} r_3}
\xrightarrow{r_3 \div (1.019)}
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0.452 & 0.188 & 0.358 \\
0 & 1 & 0.886 & 0.452 & 0.660 \\
0 & 0 & 1 & 0.660 & 0.358 & 0.981
\end{pmatrix}$$

$$A^{-1}$$

#### 选主元消去法的应用:求行列式

#### 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

#### 定义:下三角形方程组

考察

$$Ly = b \tag{1}$$

其中  $b=(b_1,\cdots,b_n)^T\in\mathbb{R}^n$  已知, $y=(y_1,\cdots,y_n)^T\in\mathbb{R}^n$  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  $l_{ii} \neq 0$ ,  $i = 1, 2, \dots$ , n.

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  $y_1, \dots, y_{i-1}$ ,则由方程组 (1) 的第 i 个方程

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

可得

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

#### 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
```

#### 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

$$Ux = y \tag{2}$$

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

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

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

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

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

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

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

得

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

#### 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
```

#### 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  $O(n^2)$ .

#### 定义:一般线性方程组

察

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

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

#### 定义:一般线性方程组

察

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

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

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

#### 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。

#### 定义: Gauss 变换 (矩阵)

$$l_k = (0, \dots, 0, l_{k+1,k}, \dots, l_{nk})^T$$

#### 定义: Gauss 变换 (矩阵)

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

对于 
$$x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$$
, 
$$\mathbf{L}_k \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k, x_{k+1} - l_{k+1,k} x_k, \dots, x_n - l_{nk} x_k)^T.$$

取

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

便有

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

性质: $L_k$  的逆

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

#### 性质: $L_k$ 的逆

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

#### 证明

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

$$\therefore (I + l_k e_k^T)(I - l_k e_k^T) = I - l_k e_k^T l_k e_k^T = I.$$

#### 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:  $e_k^T A$  为 A 的第 k 行,  $A e_k$  为 A 的第 k 列。

#### 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:  $e_k^T A$  为 A 的第 k 行,  $A e_k$  为 A 的第 k 列。

例

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

#### 性质

若 j < k,则

$$\boldsymbol{L}_{j}\boldsymbol{L}_{k} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_{j}\boldsymbol{e}_{j}^{T})(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_{k}\boldsymbol{e}_{k}^{T}) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_{j}\boldsymbol{e}_{j}^{T} - \boldsymbol{l}_{k}\boldsymbol{e}_{k}^{T}.$$

#### 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  $e_j^T l_k = 0$ 。

#### 性质

若 j < k,则

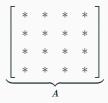
$$\boldsymbol{L}_{j}\boldsymbol{L}_{k} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_{j}\boldsymbol{e}_{j}^{T})(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_{k}\boldsymbol{e}_{k}^{T}) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{l}_{j}\boldsymbol{e}_{j}^{T} - \boldsymbol{l}_{k}\boldsymbol{e}_{k}^{T}.$$

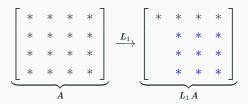
#### 证明

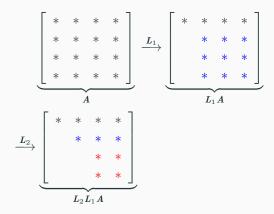
因为当 j < k 时,有  $e_j^T l_k = 0$ 。

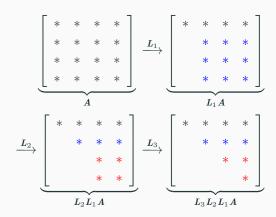
#### 例

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









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

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

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

$$m{L}_1m{A} = \left[ egin{array}{cccc} 2 & 1 & 1 & 0 \ & 1 & 1 & 1 \ & 3 & 5 & 5 \ & 4 & 6 & 8 \end{array} 
ight]$$

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

$$L_2L_1A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & -3 & 1 & \\ & -4 & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & 3 & 5 & 5 \\ & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$m{L}_2m{L}_1m{A} = \left[egin{array}{cccc} 2 & 1 & 1 & 0 \ & 1 & 1 & 1 \ & & 2 & 2 \ & & 2 & 4 \end{array}
ight]$$

$$m{L}_2m{L}_1m{A} = \left[ egin{array}{cccc} 2 & 1 & 1 & 0 \ & 1 & 1 & 1 \ & & 2 & 2 \ & & 2 & 4 \end{array} 
ight]$$

$$m{L}_3 m{L}_2 m{L}_1 m{A} = \left[ egin{array}{cccc} 1 & & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & -1 & 1 \end{array} 
ight] \left[ egin{array}{cccc} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & 2 & 4 \end{array} 
ight] = \left[ egin{array}{cccc} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & & 2 \end{array} 
ight] = m{U}.$$

$$m{L}_1^{-1} m{L}_2^{-1} m{L}_3^{-1} = \left[ egin{array}{cccc} 1 & & & \ 2 & 1 & & \ 4 & 3 & 1 & \ 3 & 4 & 1 & 1 \end{array} 
ight]$$

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

### 对于一般矩阵 A,记 $A^{(1)} = A$ ,则

$$A^{(2)} = L_1 A^{(1)}$$
  
 $A^{(3)} = L_2 A^{(2)} = L_2 L_1 A^{(1)}$   
...

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

其中  $A_{11}^{(k)}$  是 k-1 阶上三角阵,

$$m{A}_{22}^{(k)} = \left[ egin{array}{ccc} a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ dots & & dots \\ a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{array} 
ight]$$

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

$$m{L}_k = m{I} - m{l}_k m{e}_k^T,$$
  $m{l}_k = (0, \cdots, 0, l_{k+1,k}, \cdots, l_{nk})^T,$   $m{l}_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}, \quad i = k+1, \cdots, n$ 

则

$$m{A}^{(k+1)} = m{L}_k m{A}^{(k)} = \left[egin{array}{ccc} m{A}_{11}^{(k+1)} & m{A}_{12}^{(k+1)} \ & m{A}_{22}^{(k+1)} \end{array}
ight]$$

其中  $A_{11}^{(k+1)}$  是 k 阶上三角阵。

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

$$m{L}_k = m{I} - m{l}_k m{e}_k^T, \ m{l}_k = (0, \cdots, 0, l_{k+1,k}, \cdots, l_{nk})^T, \ l_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}, \quad i = k+1, \cdots, n$$

则

$$m{A}^{(k+1)} = m{L}_k m{A}^{(k)} = \left[ egin{array}{ccc} m{A}_{11}^{(k+1)} & m{A}_{12}^{(k+1)} \ & m{A}_{22}^{(k+1)} \end{array} 
ight]$$

其中  $A_{11}^{(k+1)}$  是 k 阶上三角阵。

如此进行 n-1 步,最终所得矩阵  $A^{(n)}$  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

$$A = LU$$
,

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

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1}$$
  
=  $I + l_1 e_1^T + l_2 e_2^T \cdots + l_{n-1} e_{n-1}^T$ .

由

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

可知

由

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

可知

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

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

由

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

可知

- **A**<sup>(k+1)</sup> 与 **A**<sup>(k)</sup> 的前 k 行元素相同。

  因为 e<sub>k</sub><sup>T</sup>**A**<sup>(k)</sup> 是 **A**<sup>(k)</sup> 的第 k 行, l<sub>k</sub> 的前 k 个分量为 0。
- $A^{(k+1)}$  中第 k+1 到 n 行元素需要更新

$$a_{ik}^{(k+1)} = 0,$$
  $i = k+1, \dots, n,$   $a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)}, \quad i, j = k+1, \dots, n$ 

#### 存储方式

- $A^{(k)}$  中第  $k+1 \sim n$  行元素在计算出  $A^{(k+1)}$  以后不再有用,故  $A^{(k)}$  中相应位置上的元素可用新值更新。
- 由于  $A^{(k+1)}$  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。

#### 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
```

### 算法复杂度

#### 运算次数为

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

### 定义:主元

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

### 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。

### 定理

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

#### 证明 (用数学归纳法):

 $1^{\circ}$  当 k=1 时, $a_{11}^{(1)} \neq 0 \iff A_1$  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):

- $1^{\circ}$  当 k=1 时, $a_{11}^{(1)} \neq 0 \iff A_1$  非奇异。
- $2^{\circ}$  假设定理直到 k-1 成立,下证:若  $A_1$ ,  $\cdots$  , $A_{k-1}$  非奇异,则 $A_k$  非奇异  $\iff a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 。

### 证明 (续):

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

$$m{A}^{(k)} = m{L}_{k-1} \cdots m{L}_1 m{A} = \left[egin{array}{cc} m{A}_{11}^{(k)} & m{A}_{12}^{(k)} \ & m{A}_{22}^{(k)} \end{array}
ight]$$

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

$$\left[\begin{array}{cc} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & * \\ & a_{kk}^{(k)} \end{array}\right]$$

#### 证明 (续):

记  $L_1$ ,  $\cdots$ ,  $L_{k-1}$  的 k 阶顺序主子阵为  $(L_1)_k$ ,  $\cdots$ ,  $(L_{k-1})_k$ , 则

$$(\boldsymbol{L}_{k-1})_k \cdots (\boldsymbol{L}_1)_k \boldsymbol{A}_k = \left[ \begin{array}{cc} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & * \\ & a_{kk}^{(k)} \end{array} \right]$$

#### 证明 (续):

记  $L_1$ ,  $\cdots$ ,  $L_{k-1}$  的 k 阶顺序主子阵为  $(L_1)_k$ ,  $\cdots$ ,  $(L_{k-1})_k$ , 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

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

#### 证明 (续):

记  $L_1$ ,  $\cdots$ ,  $L_{k-1}$  的 k 阶顺序主子阵为  $(L_1)_k$ ,  $\cdots$ ,  $(L_{k-1})_k$ , 则

$$(\boldsymbol{L}_{k-1})_k \cdots (\boldsymbol{L}_1)_k \boldsymbol{A}_k = \left[ \begin{array}{cc} \boldsymbol{A}_{11}^{(k)} & * \\ & a_{kk}^{(k)} \end{array} \right]$$

从而有

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

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

#### 推论:矩阵三角分解的条件

若 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 L 和上三角阵 U,使得 A=LU.

# 三角形方程组和三角分解

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

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

#### 图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

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

图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

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

图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

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

图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

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

图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

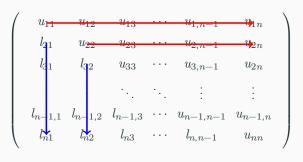


图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

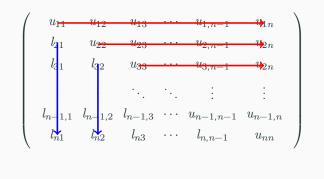


图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

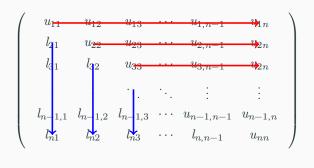


图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

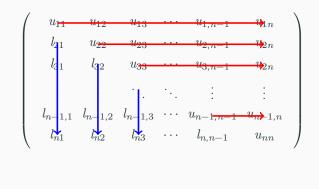


图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L

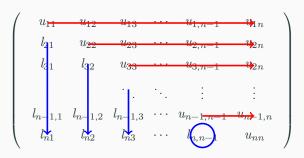
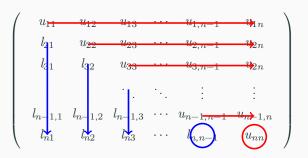


图 1: Doolittle 分解运算次序: 先行后列, 先 U 后 L



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

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

#### 图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

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

图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

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

图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

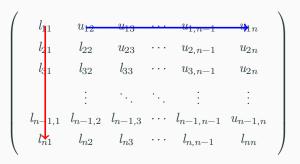


图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

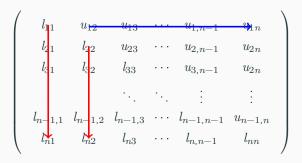


图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

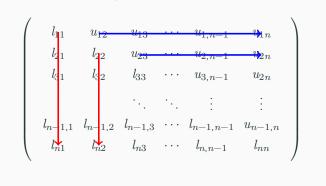


图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

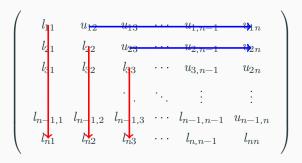


图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

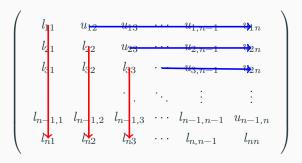


图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

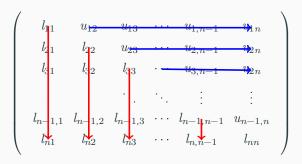


图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U

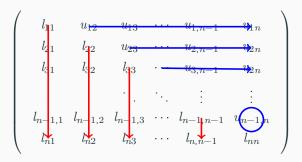
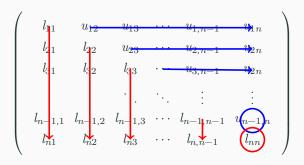


图 2: Crout 分解运算次序: 先列后行, 先 L 后 U



$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$
  $i, j = 1, 2, \dots, n$   
 $l_{ii} = 1, l_{ij} = 0 (j > i), u_{ij} = 0 (i > j)$ 

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$
  $i, j = 1, 2, \dots, n$   
 $l_{ii} = 1, l_{ij} = 0 (j > i), u_{ij} = 0 (i > j)$ 

• 先算 U 的第 k 行  $(j \ge k)$ 

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

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$
  $i, j = 1, 2, \dots, n$   
 $l_{ii} = 1, l_{ij} = 0 (j > i), u_{ij} = 0 (i > j)$ 

• 先算 U 的第 k 行  $(j \ge k)$ 

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

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

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$
  $i, j = 1, 2, \dots, n$   
 $l_{ii} = 1, l_{ij} = 0 (j > i), u_{ij} = 0 (i > j)$ 

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$
  $i, j = 1, 2, \dots, n$   
 $l_{ii} = 1, l_{ij} = 0 (j > i), u_{ij} = 0 (i > j)$ 

■ 再算 L 的第 k 列 (i > k)

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

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$
  $i, j = 1, 2, \dots, n$   
 $l_{ii} = 1, l_{ij} = 0 (j > i), u_{ij} = 0 (i > j)$ 

■ 再算 L 的第 k 列 (i > k)

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

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

#### 先行后列

for 
$$k=1:n$$
 for  $j=k$ ,  $\cdots$ ,  $n$  % 计算第  $k$  行  $u_{kj}=a_{kj}-\sum_{r=1}^{k-1}l_{lr}u_{rj}$  end for  $i=k+1$ ,  $\cdots$ ,  $n$  % 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

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

# 解

1 计算 U 的第一行,L 的第一列,得

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

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

# 解

#### 2 计算 U 的第二行,L 的第二列,得

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 2$$
,  $u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = -3$ ,  $u_{24} = a_{24} - l_{21}u_{14} = 1$ ,  $l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}u_{12}}{u_{22}} = 3$ ,  $l_{42} = \frac{a_{42} - l_{41}u_{12}}{u_{22}} = 3$ .

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

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

解

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

#### 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

$$y = (-2, -1, 17, -16)^T$$
.

### Doolittle 分解

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

$$x = (1, 2, 3, 4)^T$$
.

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

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

其中 L 为单位下三角阵,D 为对角阵。

#### 对称矩阵的三角分解

#### 证明

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

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

$$m{U} = \left[ egin{array}{cccc} u_{11} & & & & & \\ & u_{22} & & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & u_{nn} \end{array} 
ight] \left[ egin{array}{cccc} 1 & rac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & rac{u_{1n}}{u_{11}} \\ 1 & \cdots & rac{u_{2n}}{u_{22}} \\ & & \ddots & dots \\ & & & 1 \end{array} 
ight] = m{D} m{U}_1$$

其中 D 为对角矩阵, $U_1$  为单位上三角阵。

### 对称矩阵的三角分解

#### 证明

于是

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

因为 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。

例

求

$$\boldsymbol{A} = \left[ \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right]$$

的 LU 分解

例

求

$$\mathbf{A} = \left[ \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right]$$

的 LU 分解

A 非奇异,但 Gauss 消去第一步就会失效。

例

求

$$\mathbf{A} = \left[ \begin{array}{cc} 10^{-20} & 1\\ 1 & 1 \end{array} \right]$$

的 LU 分解

例

求

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

的 LU 分解

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

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

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

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

例

设

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

求

$$Ax = b$$

例

设

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

求

$$Ax = b$$

近似解:

$$\widetilde{\boldsymbol{x}} = \left[ \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right]$$

精确解:

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

#### 交换方程次序

$$\left[\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 1 & 10^{-20} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} x_2 \\ x_1 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array}\right]$$

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

近似解

$$\widehat{\boldsymbol{x}} pprox \left[ egin{array}{c} -1 \\ 1 \end{array} 
ight]$$

图 3: 置换矩阵

#### 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

$$P_1, \cdots, P_{k-1}, Q_1, \cdots, Q_{k-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

使得

$$m{A}^{(k)} = m{L}_{k-1} m{P}_{k-1} \cdots m{L}_1 m{P}_1 m{A} m{Q}_1 \cdots m{Q}_{k-1} = \left[ egin{array}{cc} m{A}_{11}^{(k)} & m{A}_{12}^{(k)} \ 0 & m{A}_{22}^{(k)} \end{array} 
ight]$$

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  $R(A)=k-1$ ,停止!

- 2 第 k 步: 选 $|a_{pq}^{(k)}|=\max\left\{|a_{ij}^{(k)}|\colon\ k\leqslant i,\ j\leqslant n
  ight\}$ 
  - 2.1 若  $a_{pq}^{(k)} = 0$ , 则 R(A) = k 1, 停止!
    - 若  $a_{pq}^{(k)} \neq 0$ , 交换  ${\bf A}^{(k)}$  的第 k、p 行及第 k、q 列, 记交换后的  ${\bf A}_{22}^{(k)}$  为

$$\widetilde{m{A}}_{22}^{(k)} = \left[egin{array}{ccc} \widetilde{a}_{kk}^{(k)} & \cdots & \widetilde{a}_{kn}^{(k)} \ dots & & dots \ \widetilde{a}_{nk}^{(k)} & \cdots & \widetilde{a}_{nn}^{(k)} \end{array}
ight]$$

2.2 计算 Gauss 变换

$$egin{aligned} oldsymbol{L}_k &= oldsymbol{I} - oldsymbol{l}_k e_k^T \ oldsymbol{l}_k &= (0, \ \cdots, \ 0, \ \widetilde{l}_{k+1,k}, \ \cdots, \ \widetilde{l}_{n,k})^T \ \widetilde{l}_{i,k} &= \widetilde{a}_{ik}^{(k)}/\widetilde{a}_{kk}^{(k)}, \ i = k+1, \ \cdots, \ n. \end{aligned}$$

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

2.2 计算 Gauss 变换

$$egin{aligned} oldsymbol{L}_k &= oldsymbol{I} - oldsymbol{l}_k oldsymbol{e}_k^T \ oldsymbol{l}_k &= (0, \ \cdots, \ 0, \ \widetilde{l}_{k+1,k}, \ \cdots, \ \widetilde{l}_{n,k})^T \ \widetilde{l}_{i,k} &= \widetilde{a}_{ik}^{(k)}/\widetilde{a}_{kk}^{(k)}, \ i = k+1, \ \cdots, \ n. \end{aligned}$$

则

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

其中  $A_{11}^{(k+1)}$  为 k 阶上三角阵, $P_k = I_{kp}$ , $Q_k = I_{kq} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 。

#### 全主元 Gauss 消去法的矩阵表述

存在置换矩阵  $P_k$ ,  $Q_k$  和初等下三角阵  $L_k$ ,  $k=1,\cdots,n-1$ , 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

$$L_{n-1}P_{n-1}\cdots L_1 \frac{\mathbf{P}_2\cdots \mathbf{P}_{n-1}\mathbf{P}_{n-1}\cdots \mathbf{P}_2}{\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\cdots \mathbf{Q}_{n-1}} = U$$

即

$$P_{n-1}\cdots P_2P_1AQ_1\cdots Q_{n-1}=(\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_2\cdots \boldsymbol{P}_{n-1})^{-1}U$$

#### 全主元 Gauss 消去法的矩阵表述

存在置换矩阵  $P_k$ ,  $Q_k$  和初等下三角阵  $L_k$ ,  $k=1,\cdots,n-1$ , 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

$$L_{n-1}P_{n-1}\cdots L_1\frac{P_2\cdots P_{n-1}P_{n-1}\cdots P_2}{P_1}AQ_1\cdots Q_{n-1}=U$$

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

$$Q = Q_1 \cdots Q_{n-1}, P = P_{n-1} \cdots P_1$$
  
 $L = P_{n-1} \cdots P_2 L_1^{-1} \cdots P_n^{-1} L_{n-1}^{-1}$ 

则有

$$PAQ = LU$$

#### 以下举例说明 L 为一个单位下三角阵。

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

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

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

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

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

$$\begin{bmatrix}
1 & & & \\
 & 1 & \\
 & 1 & \\
 & & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
13 & 3 & 2 & 1 \\
 & 1.3 & 8.5 & 0.8 \\
 & 2.8 & 1.9 & 11.9 \\
 & 9.3 & 2.5 & 0.8
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
1 & & & 1 \\
 & & 1 \\
 & & 1
\end{bmatrix}$$

$$P_2 = I_{23} \qquad A^{(2)} \qquad Q_2 = I_{24}$$

$$= \begin{bmatrix}
13 & 1 & 2 & 3 \\
 & 11.9 & 1.9 & 2.8 \\
 & 0.8 & 8.5 & 1.3 \\
 & 0.8 & 2.5 & 9.3
\end{bmatrix}$$

$$\widetilde{A}^{(2)}$$

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

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

$$\begin{bmatrix}
1 & & & \\
& 1 & & \\
& & 1 \\
& & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
13 & 1 & 2 & 3 \\
& & 11.9 & 1.9 & 2.8 \\
& & 8.4 & 1.1 \\
& & 2.4 & 9.1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
1 & & & \\
& 1 & & \\
& & 1 \\
& & & 1
\end{bmatrix}$$

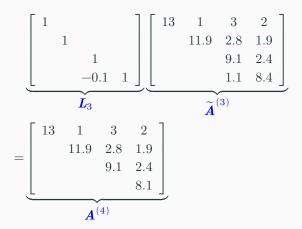
$$P_3 = I_{34}$$

$$A^{(3)}$$

$$Q_3 = I_{34}$$

$$= \begin{bmatrix}
13 & 1 & 3 & 2 \\
& 11.9 & 2.7 & 1.9 \\
& & 9.1 & 2.4 \\
& & 1.1 & 8.4
\end{bmatrix}$$

$$\widetilde{A}^{(3)}$$



#### 将上述步骤合并,即得

$$L_3P_3L_2P_2L_1P_1AQ_1Q_2Q_3 = A^{(4)} = U$$

$$\implies L_3P_3L_2P_2L_1P_2P_3\underbrace{P_3P_2P_1}_{P}A\underbrace{Q_1Q_2Q_3}_{Q} = U$$

$$\implies PAQ = (L_3P_3L_2P_2L_1P_2P_3)^{-1}U$$

$$\implies PAQ = P_3P_2L_1^{-1}P_2L_2^{-1}P_3L_3^{-1}U$$

$$\implies PAQ = LU$$

观察 
$$L = P_3 P_2 L_1^{-1} P_2 L_2^{-1} P_3 L_3^{-1}$$
, 设

$$P_2 = I_{23}, P_3 = I_{34}$$

以及

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

$$\boldsymbol{L}_{1}^{-1} \overset{\boldsymbol{P}_{2} \bullet}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_{3} & & 1 & \\ *_{2} & 1 & & \\ *_{4} & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_{1}^{-1} \stackrel{P_{2} \bullet}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_{3} & 1 & & \\ *_{2} & 1 & & \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} \qquad \stackrel{\bullet P_{2}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ *_{3} & 1 & & \\ *_{2} & 1 & & \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\stackrel{\bullet P_2}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_3 & 1 \\ *_2 & 1 \\ *_4 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{c} \boldsymbol{L}_{1}^{-1} \stackrel{P_{2} \bullet}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} & \stackrel{\bullet P_{2}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} \\ \\ \stackrel{\bullet L_{2}^{-1}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 0_{3} & 1 \\ *_{2} & 0_{3} & 1 \\ *_{4} & 0_{4} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\stackrel{\bullet P_2}{\Longrightarrow} \begin{vmatrix} 1 \\ *_3 & 1 \\ *_2 & 1 \\ *_4 & 1 \end{vmatrix}$$

$$\begin{array}{c} \boldsymbol{L}_{1}^{-1} \stackrel{P_{2} \bullet}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} & \stackrel{\bullet P_{2}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} \\ \stackrel{\bullet L_{2}^{-1}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} & \stackrel{P_{3} \bullet}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{4} & 0_{4} & 1 \\ *_{2} & 0_{3} & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_{1}^{-1} \xrightarrow{P_{2} \bullet} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\bullet P_{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\bullet L_{2}^{-1}} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{P_{3} \bullet} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\bullet P_{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & & 1 \\ *_{4} & @_{4} & & 1 \\ *_{2} & @_{3} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_{1}^{-1} \xrightarrow{P_{2} \bullet} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\bullet P_{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\bullet L_{2}^{-1}} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{P_{3} \bullet} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\bullet P_{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\bullet L_{3}^{-1}} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & \#_{4} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{c} \boldsymbol{L}_{1}^{-1} \stackrel{P_{2} \bullet}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} & \stackrel{\bullet P_{2}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & 1 \\ *_{4} & & 1 \end{bmatrix} \\ \stackrel{\bullet L_{2}^{-1}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & & 1 \end{bmatrix} & \stackrel{P_{3} \bullet}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \end{bmatrix} \\ \stackrel{\bullet P_{3}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \end{bmatrix} & \stackrel{\bullet L_{3}^{-1}}{\Longrightarrow} \begin{bmatrix} 1 \\ *_{3} & 1 \\ *_{2} & @_{3} & 1 \\ *_{4} & @_{4} & \#_{4} & 1 \end{bmatrix}$$

#### 由此可以看出 L 是一个单位下三角阵。

#### 定理

$$L = P_{n-1} \cdots P_2 L_1^{-1} P_2 L_2^{-1} \cdots P_{n-1} L_{n-1}^{-1}$$

是一个单位下三角阵。

#### 定理

存在置换矩阵 P, Q 以及单位下三角阵 L 和上三角阵 U, 使得

$$PAQ = LU$$
,

且  $|l_{ij}| \leq 1$ , U 的非零对角元的个数正好等于 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)
    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)
    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)) \dots
    + (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
```

例

对如下矩阵进行列主元三角分解

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

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

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

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

$$\mathbf{P}_{1}$$

$$\mathbf{A}^{(0)}$$

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

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

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

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 &$$

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

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

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

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

$$\begin{bmatrix}
1 & & & \\
 & 1 & & \\
 & \frac{3}{7} & 1 & \\
 & \frac{2}{7} & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
8 & 7 & 9 & 5 \\
 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\
 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\
 & & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7}
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
8 & 7 & 9 & 5 \\
 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\
 & & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\
 & & & \frac{2}{3}
\end{bmatrix}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(2)}$$

证毕。

109

#### 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)) \dots
    + (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

#### 适用对象: 对称正定矩阵方程组

#### 定义:对称正定矩阵

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

#### 性质

#### 若 A 对称正定,则

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

#### 定理

对称矩阵A正定 $\iff$ A的各阶顺序主子式 $|A_i|>0$ ,  $i=1,\cdots,n$ .

#### 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  $A=LL^T$ 。

#### 证明

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

$$0 < x^{T} \boldsymbol{A} x = x^{T} \widetilde{\boldsymbol{L}} D \widetilde{\boldsymbol{L}}^{T} x = (\widetilde{\boldsymbol{L}}^{T} x)^{T} D \widetilde{\boldsymbol{L}}^{T} x = e_{i}^{T} D e_{i} = d_{i}.$$

#### 证明

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

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

所以

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

若 Ax = b 的系数矩阵对称正定,则可按如下步骤求其解:

- 1. 求 A 的 Cholesky 分解:  $A = LL^T$ ;
- 2. 求解 Ly = b 得 y;
- 3. 求解  $L^T x = y$  得 x。

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

图 4: 平方根法运算次序

图 4: 平方根法运算次序

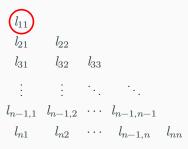


图 4: 平方根法运算次序

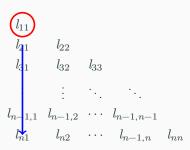


图 4: 平方根法运算次序

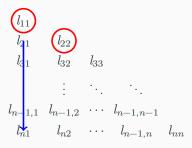


图 4: 平方根法运算次序

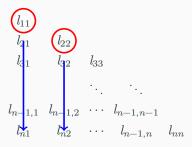


图 4: 平方根法运算次序

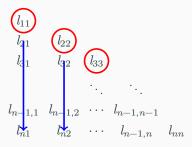


图 4: 平方根法运算次序

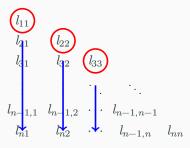


图 4: 平方根法运算次序

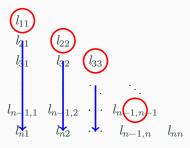


图 4: 平方根法运算次序

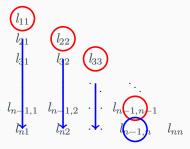
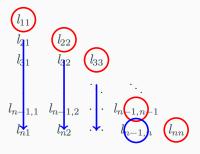


图 4: 平方根法运算次序



## 注意到 $l_{ij} = 0 (j > i)$ , 由矩阵乘法知

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

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,

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

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,

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

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,

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

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,

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

#### 标量形式

$$\begin{array}{l} {\bf for} \ \ {\bf j} \ = \ 1 \,, \ 2 \,, \ \cdots \,, \ {\bf n} \\ \\ l_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2\right)^{1/2} \\ {\bf for} \ \ {\bf i} \ = \ {\bf j} + 1 \,, \ \ {\bf j} + 2 \,, \ \cdots \,, \ \ {\bf n} \\ \\ l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}\right) / l_{jj} \\ {\bf end} \\ {\bf end} \end{array}$$

#### 向量化

```
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
```

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

这说明,在 Cholesky 分解过程中, $|l_{ij}|$  的平方不会超过 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

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

#### 解

#### 验证 A 的对称正定性:

$$a_{11} = 1 > 0$$
,  $\begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 8 \end{vmatrix} = 8 - 4 > 0$ ,  $\begin{vmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 8 & 4 \\ 1 & 4 & 6 \end{vmatrix} = 16 > 0$ .

# 解 (续):

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

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{l_{11}} = 2$$

$$l_{32} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} = 2$$

$$l_{31} = \frac{a_{31}}{l_{11}} = 1$$

$$l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}l_{21}}{l_{22}} = 1$$

$$l_{33} = \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2} = 2$$

# 解(续):

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

#### 求解 LY = b, 得

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

#### 求解 $L^T X = Y$ . 得

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

```
% 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
```

```
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)
```



#### 适用范围: 三对角线性方程组

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

### 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

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

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ @_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ u_2 & c_2 & & & \\ & & u_3 & c_3 & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_n & \end{pmatrix}$$

$$(2)$$

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

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

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

$$(2)$$

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

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

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

$$(3)$$

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

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

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

$$\ddot{\mathbf{B}}\mathbf{\mathring{t}}\mathbf{\mathring{x}}\mathbf{\mathring{x}}\mathbf{\mathring{x}} \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} u_1 = b_1, & & \\ l_i = \frac{a_i}{u_{i-1}}, & \\ & u_i = b_i - l_i c_{i-1} \end{array} \right\} i = 2, 3, \cdots, n$$

例

# 求解微分方程

$$(-u_{xx} = f, \quad x \in (a, b),$$

$$u(a) = u(b) = 0.$$

例

求解微分方程

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

解

1 网格剖分:

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

例

### 求解微分方程

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

# 解

1 网格剖分:

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

2 差分离散:

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

# 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

$$\begin{pmatrix}
2 & -1 & & & & \\
-1 & 2 & -1 & & & & \\
& -1 & 2 & -1 & & & \\
& & -1 & 2 & -1 & & \\
& & & -1 & 2 & -1 \\
& & & & -1 & 2
\end{pmatrix}$$

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

### 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
```

```
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 \text{ 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);
```

### 平方根法 ii

```
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'
```