第二章 线性方程组的直接解法

- 快速、高效地求解线性方程组是数值线性代数研究中的核心问题，也是目前科学计算中的重要研究课题之一。
- 各种各样的科学和工程问题，往往最终都要归结为求解一个线性方程组。
- 线性方程组的数值解法有：直接法和迭代法。
  - ✓直接法：在假定没有舍入误差的情况下，经过有限次运算可以求得方程组的精确解;
  - ✓迭代法：从一个初始向量出发，按照一定的迭代格式，构造出一个趋向于真解的无穷序列。

§ 2.1 三角分解法

一 高斯消去法

□ 一个例子

求解 $\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 7 \\ 4x_1 + 5x_2 - x_3 = 11 \\ x_1 - 2x_2 + x_3 = 0 \end{cases}$

解 Step1:消元

$$\overline{A} = (A,b) = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 7 \\ 4 & 5 & -1 & 11 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow[r_3 - 0.5r_1]{r_2 - 2r_1} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 7 \\ 0 & 3 & -3 & -3 \\ 0 & -\frac{5}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{7}{2} \end{bmatrix} \xrightarrow{r_3 + \frac{5}{3\times 2}r_2} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 7 \\ 0 & 3 & -3 & -3 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{bmatrix}$$

Step2:回代 $\begin{cases} x_3 = -6/(-2) = 3 \\ x_2 = (-3 + 3\times 3)/3 = 2 \\ x_1 = (7 - 1\times 3 - 1\times 2)/2 = 1 \end{cases}$

1 计算机上所用的公式

求解方程：
$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = a_{1,n+1} \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = a_{2,n+1} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = a_{n,n+1} \end{cases}$$

下面研究它的计算规律：

1) 消元

记 $$A^{(0)}=\left(\begin{array}{ccccccc|c}
a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & a_{1,n+1}^{(0)} \\
a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & a_{2,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} & a_{2,n+1}^{(0)} \\
\cdots & \cdots & & \cdots & \cdots & & \cdots & \cdots \\
a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & \cdots & a_{kk}^{(0)} & a_{k,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} & a_{k,n+1}^{(0)} \\
a_{k+1,1}^{(0)} & a_{k+1,2}^{(0)} & \cdots & a_{k+1,k}^{(0)} & a_{k+1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(0)} & a_{k+1,n+1}^{(0)} \\
\cdots & \cdots & & \cdots & \cdots & & \cdots & \cdots \\
a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & \cdots & a_{nk}^{(0)} & a_{n,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} & a_{n,n+1}^{(0)}
\end{array}\right)$$

Step 1: 假设$a_{11}^{(0)} \neq 0$, 令$l_{i1} = a_{i1}^{(0)} / a_{11}^{(0)} \quad (i = 2, \ldots, n)$

$$A^{(0)} \xrightarrow[i=2,\ldots,n]{r_i - l_{i1} r_1} \left(\begin{array}{ccccccc|c}
a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & a_{1,n+1}^{(0)} \\
0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & a_{2,n+1}^{(1)} \\
\cdots & \cdots & & \cdots & \cdots & & \cdots & \cdots \\
0 & a_{k2}^{(1)} & \cdots & a_{kk}^{(1)} & a_{k,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} & a_{k,n+1}^{(1)} \\
0 & a_{k+1,2}^{(1)} & \cdots & a_{k+1,k}^{(1)} & a_{k+1,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(1)} & a_{k+1,n+1}^{(1)} \\
\cdots & \cdots & & \cdots & \cdots & & \cdots & \cdots \\
0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nk}^{(1)} & a_{n,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & a_{n,n+1}^{(1)}
\end{array}\right)$$

假设第$k-1$步消元后

$$A^{(k-1)}=\left(\begin{array}{cccccccc|c} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & & a_{1,n+1}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & & a_{2,n+1}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} & & a_{k,n+1}^{(k-1)} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{k+1,k}^{(k-1)} & a_{k+1,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k-1)} & & a_{k+1,n+1}^{(k-1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nk}^{(k-1)} & a_{n,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} & & a_{n,n+1}^{(k-1)} \end{array}\right)$$

Step k： 若$a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$, 计算$l_{ik}=a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)}$ $\quad (i=k+1,\ldots,n)$

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

$$A^{(k-1)}\xrightarrow[i=k+1,\ldots,n]{r_i-l_{ik}r_k}\left(\begin{array}{ccccccc|c} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & a_{1,n+1}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & a_{2,n+1}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} & a_{k,n+1}^{(k-1)} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} & a_{k+1,n+1}^{(k)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & a_{n,n+1}^{(k)} \end{array}\right)\triangleq A^{(k)}$$

Step n-1： 消元结束，A化为上三角矩阵：

$$A^{(n-1)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & a_{1,n+1}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & a_{2,n+1}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} & a_{k,n+1}^{(k-1)} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} & a_{k+1,n+1}^{(k)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} & a_{n,n+1}^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

在实际编程中，为了节省内存，不引入新变量，消元过程记为：

$k=1,2,\ldots,n-1,\quad a_{kk}\neq 0$

$i=k+1,\ldots,n$

$$l_{ik}=\frac{a_{ik}}{a_{kk}}\Rightarrow a_{ik}$$

$j=k+1,\ldots,n+1$

$$a_{ij}-a_{ik}a_{kj}\Rightarrow a_{ij}$$

消元束后，增广矩阵化为如下“形式”：

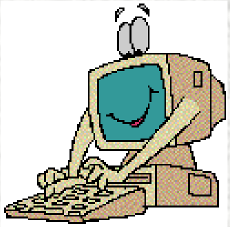
$$
\begin{bmatrix}
a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & a_{1,n+1}^{(0)} \\
l_{21} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & a_{2,n+1}^{(1)} \\
\cdots & \cdots & \cdots & & \cdots & & \cdots & \cdots \\
l_{k1} & l_{k2} & \cdots & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} & a_{k,n+1}^{(k-1)} \\
l_{k+1,1} & l_{k+1.2} & \cdots & l_{k+1,k} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} & a_{k+1,n+1}^{(k)} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nk} & l_{n,k+1} & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} & a_{n,n+1}^{(n-1)}
\end{bmatrix}
$$

2）回代

$$
\begin{cases}
x_n = a_{n,n+1}^{(n-1)} / a_{nn}^{n-1} \\
x_k = \left(a_{k,n+1}^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k-1)} x_j\right) / a_{kk}^{(k-1)} \\
\quad (k = n-1, \cdots, 1)
\end{cases}
$$

$$
\begin{bmatrix}
a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & x_1 \\
l_{21} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & x_2 \\
\cdots & \cdots & \cdots & & \cdots & & \cdots & \cdots \\
l_{k1} & l_{k2} & \cdots & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} & x_{k-1} \\
l_{k+1,1} & l_{k+1.2} & \cdots & l_{k+1,k} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} & x_k \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nk} & l_{n,k+1} & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} & x_n
\end{bmatrix}
$$

□ 一个模拟计算机求解的例子



求解
$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 5 \\ x_1 + 2x_2 - x_3 + 4x_4 = -2 \\ -2x_1 - 3x_2 + 2x_3 - 5x_4 = 3 \\ 3x_1 + x_2 + 2x_3 + x_4 = 10 \end{cases}$$

解 $\overline{A} = \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 5 \\ 1 & 2 & -1 & 4 & -2 \\ -2 & -3 & 2 & -5 & 3 \\ 3 & 1 & 2 & 1 & 10 \end{array}\right)$

$$\overline{A} \to \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 5 \\ 1/1 & 1 & -2 & 3 & -7 \\ -2/1 & -1 & 4 & -3 & 13 \\ 3/1 & -2 & -1 & -2 & -5 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 5 \\ 1 & 1 & -2 & 3 & -7 \\ -2 & -1/1 & 2 & 0 & 6 \\ 3 & -2/1 & -5 & 4 & -19 \end{array}\right)$$

$$\to \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 5 \\ 1 & 1 & -2 & 3 & -7 \\ -2 & -1 & 2 & 0 & 6 \\ 3 & -2 & -5/2 & 4 & -4 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -2 & 3 & 2 \\ -2 & -1 & 2 & 0 & 3 \\ 3 & -2 & -5/2 & 4 & -1 \end{array}\right)$$

4 消去法成立的条件：

$$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0, (k = 1, 2 \cdots, n-1)$$

动态变化!

5 计算量：$\dfrac{n^3}{3} + n^2 - \dfrac{n}{3}$ 次乘法

二　三角分解法

1 容易求解的方程组$Ax=b$

✍ A为下三角结构

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix},$$

则$\begin{cases} x_1 = b_1 \\ x_k = b_k - \sum\limits_{j=1}^{k-1} a_{kj} x_j \, (k = 2, \cdots, n) \end{cases}$

✍ A为上三角结构

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix},$$

则$\begin{cases} x_n = b_n / a_{nn} \\ x_k = (b_k - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj} x_j) / a_{kk} \, (k = n-1, \cdots, 1) \end{cases}$

2 基本思想 对$Ax=b$,如果A可进行如下分解:

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

则 $Ax=b \Leftrightarrow LUx=b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly=b \\ Ux=y \end{cases}$

从而易得

$$\begin{cases} y_1=b_1 \\ y_k=b_k-\sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}y_j\,(k=2,\cdots,n) \end{cases}$$

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

3 Gauss变换矩阵及性质

定义 记$\boldsymbol{l}_j=(0,\cdots,0,\boldsymbol{l}_{j+1,j},\boldsymbol{l}_{j+2,j},\cdots,\boldsymbol{l}_{nj})^T$，称

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{l}_j)=\begin{bmatrix}1 &&&&&& \\ &\ddots &&&&& \\ &&1 &&&& \\ &&&1 &&& \\ &&&l_{j+1,j} & 1 && \\ &&&\vdots && \ddots & \\ &&&l_{n,j} &&& 1\end{bmatrix}$$

为Gauss矩阵或Gauss变换.

性质 1. $L(l_j)^{-1}=L(-l_j)$

2. 当 $i < j$ 时，

$$L(l_i)L(l_j)=\begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & \ddots & & & \\ & & l_{i+1,i} & 1 & & & \\ & & l_{i+2,i} & l_{j+1,j} & \ddots & & \\ & & \vdots & \vdots & & & \\ & & l_{ni} & l_{nj} & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$L(l_1)L(l_2)\cdots L(l_{n-1})=\begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ l_{21} & 1 & & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & & 1 & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

4 Gauss消去法的矩阵形式

求解 $\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 5 \\ x_1 + 2x_2 - x_3 + 4x_4 = -2 \\ -2x_1 - 3x_2 + 2x_3 - 5x_4 = 3 \\ 3x_1 + x_2 + 2x_3 + x_4 = 10 \end{cases}$

解 $\overline{A} = \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 5 \\ 1 & 2 & -1 & 4 & -2 \\ -2 & -3 & 2 & -5 & 3 \\ 3 & 1 & 2 & 1 & 10 \end{array}\right)$

$$\overline{A} \xrightarrow[r_4-(3/1)r_1]{\substack{r_2-(1/1)\cdot r_1 \\ r_3-(-2/1)r_1}} \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 5 \\ 0 & 1 & -2 & 3 & -7 \\ 0 & -1 & 4 & -3 & 13 \\ 0 & -2 & -1 & -2 & -5 \end{array}\right) \triangleq P_1\overline{A}$$

其中 $P_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -(1/1) & 1 & & \\ -(-2/1) & & 1 & \\ -(3/1) & & & 1 \end{pmatrix}$

$$\xrightarrow[r_4-(-2/1)r_1]{r_3-(-1/1)r_2} \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 5 \\ 0 & 1 & -2 & 3 & -7 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & -5 & 4 & -19 \end{array}\right) \triangleq P_2(P_1\overline{A})$$

其中 $P_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & -(-1/1) & 1 & \\ & -(-2/1) & & 1 \end{pmatrix}$

$$\overline{A}\xrightarrow[r_4-(3/1)r_1]{\substack{r_2-(1/1)\cdot r_1\\ r_3-(-2/1)r_1}}\left(\begin{array}{cccc:c}1&1&1&1&5\\0&1&-2&3&-7\\0&-1&4&-3&13\\0&-2&-1&-2&-5\end{array}\right)\triangleq P_1\overline{A}$$

$$\text{其中}P_1=\begin{pmatrix}1&&&\\-(1/1)&1&&\\-(-2/1)&&1&\\-(3/1)&&&1\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[r_4-(-2/1)r_2]{r_3-(-1/1)r_2}\left(\begin{array}{cccc:c}1&1&1&1&5\\0&1&-2&3&-7\\0&0&2&0&6\\0&0&-5&4&-19\end{array}\right)\triangleq P_2(P_1\overline{A})$$

$$\text{其中}P_2=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&-(-1/1)&1&\\&-(-2/1)&&1\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_4-(-5/2)r_3}\left(\begin{array}{cccc:c}1&1&1&1&5\\0&1&-2&3&-7\\0&0&2&0&6\\0&0&0&4&-4\end{array}\right)\equiv[U\mid y]\triangleq P_3(P_2P_1\overline{A})$$

$$\text{其中}P_3=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&-(-5/2)&1\end{pmatrix}$$

综上亦即：$(P_3P_2P_1)[A\mid b]=[U\mid y]$,其中$U$为上三角矩阵.

即：$A=(P_3P_2P_1)^{-1}U$

$=(P_1^{-1}P_2^{-1}P_3^{-1})U\triangleq LU$

$$\text{其中}L=P_1^{-1}P_2^{-1}P_3^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\1/1&1&&\\-2/1&-1/1&1&\\3/1&-2/1&-5/2&1\end{pmatrix}$$

所以，消元过程 $\Leftrightarrow L^{-1}[A\,|\,b]=[U\,|\,y] \Leftrightarrow \begin{cases} L^{-1}A=U \\ L^{-1}b=y \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A=LU \\ Ly=b \end{cases}$

即：消元过程即对A进行了LU分解的同时也求解了$Ly=b$.

例 对矩阵A进行LU分解.

$$A=\begin{bmatrix} [2] & 3 & 6 & 1 \\ 2 & 4 & 7 & 2 \\ 6 & 3 & 15 & 3 \\ 4 & 8 & 20 & 7 \end{bmatrix} \xrightarrow[i=2,3,4]{r_i-\frac{a_{i1}}{a_{11}}r_1} \begin{bmatrix} 2 & 3 & 6 & 1 \\ \left(\frac{2}{2}\right) & [1] & 1 & 1 \\ \left(\frac{6}{2}\right) & -6 & -3 & 0 \\ \left(\frac{4}{2}\right) & 2 & 8 & 5 \end{bmatrix} \xrightarrow[i=3,4]{r_i-\frac{a_{i1}}{a_{22}}r_2} \begin{bmatrix} 2 & 3 & 6 & 1 \\ \left(\frac{2}{2}\right) & 1 & 1 & 1 \\ \left(\frac{6}{2}\right) & \left(\frac{-6}{1}\right) & [3] & 6 \\ \left(\frac{4}{2}\right) & \left(\frac{2}{1}\right) & 6 & 3 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[i=4]{r_i-\frac{a_{i1}}{a_{33}}r_3} \begin{bmatrix} 2 & 3 & 6 & 1 \\ \left(\frac{2}{2}\right) & 1 & 1 & 1 \\ \left(\frac{6}{2}\right) & \left(\frac{-6}{1}\right) & 3 & 6 \\ \left(\frac{4}{2}\right) & \left(\frac{2}{1}\right) & \left(\frac{6}{3}\right) & -9 \end{bmatrix} \quad \therefore L=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ 1 & 1 & & \\ 3 & -6 & 1 & \\ 2 & 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}, U=\begin{bmatrix} 2 & 3 & 6 & 1 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 3 & 6 \\ & & & -9 \end{bmatrix}$$

算法1.3 (直接LU分解)

例　已知　$A=\begin{pmatrix}1&1&1&1\\1&2&-1&4\\-2&-3&2&-5\\3&1&2&1\end{pmatrix}$，$b=\begin{pmatrix}5\\-2\\3\\10\end{pmatrix}$。

用LU分解法分别求解：(1)$Ax=b$；(2)$A^2z=b$

解　先求A的LU分解：

$$A=LU=\begin{pmatrix}1&&&\\1&1&&\\-2&-1&1&\\3&-2&-5/2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&1&1\\&1&-2&3\\&&2&0\\&&&4\end{pmatrix}$$

$$(1)\ Ax=b\Leftrightarrow LUx=b\Leftrightarrow\begin{cases}Ly=b\Rightarrow y=(5,\ -7,\ 6,\ -4)^T\\Ux=y\Rightarrow x=(1,\ 2,\ 3,\ -1)^T\end{cases}$$

$$A=\begin{pmatrix}1&&&\\1&1&&\\-2&-1&1&\\3&-2&-5/2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&1&1\\&1&-2&3\\&&2&0\\&&&4\end{pmatrix}$$

(2) $A^2z=b \Leftrightarrow A(Az)=b$

$$\Leftrightarrow \begin{cases}Ax=b\\Az=x\end{cases}$$

$\Rightarrow x=(1,\ 2,\ 3,\ -1)^T$

$$\Leftrightarrow \begin{cases}Ax=b\\LUz=x\end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases}Ax=b\\Lw=x\\Uz=w\end{cases}$$

$\Rightarrow w=(1,\ 1,\ 6,\ 13)^T$

$\Rightarrow z=(-2.5,\ -2.75,\ 3,\ 3.25)^T$

几点备注

（1）**LU分解法实际上是高斯消去法，是其矩阵形式。**

（2）**LU分解法在解系数矩阵相同的多个方程时，具有节省计算量的明显优势。**

（3）**非奇异矩阵*A*能分解为LU的充要条件是*A*的顺序主子式不为0.**

（4）**若非奇异矩阵A有分解, 分解是唯一的.**

例 单精度求解 $\begin{cases} 10^{-9}x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$

精确解: $\begin{cases} x_1 = \dfrac{1}{1-10^{-9}} = 1.00000000100\ldots \\ x_2 = 2 - x_1 \quad = 0.99999999899\ldots \end{cases}$

☞高斯消去法

$$A^{(0)} = \left(\begin{array}{cc|c} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{array}\right) \xrightarrow{r_2 - 10^9 r_1} \left(\begin{array}{cc|c} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 0 & 1 - 1\times 10^9 & 2 - 1\times 10^9 \end{array}\right) = A^{(1)}$$ (手算的结果)

大数吃小数！

$$\approx \left(\begin{array}{cc|c} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 0 & -10^9 & -10^9 \end{array}\right) = \tilde{A}^{(1)}$$ (计算机算的结果)

$$\Rightarrow \begin{cases} 10^{-9}x_1 + x_2 = 1 \\ 10^9 x_2 = 10^9 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

✘: 结果不可靠!

原因：主元(a_{11})太小，方法不稳定！

☞解决办法: 先换行, 再消元求解

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 10^{-9} & 1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{消元}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow x_2 = 1,\ x_1 = 1$

✓: 结果可靠!

三、列主元三角分解法

1、列主元素消去法

- **消元**

对$k=1,2,\cdots,n$，进行：

步1：选主元（第k列中第k个至第n个元素中绝对值较大者）

步2：将主元所在行与第k行互换

步3：消元

- **回代求解**（同顺序消去法）

例 用列主元素法求解
$$\begin{cases} 3x_1 + 5x_2 + 6x_3 - x_4 = 13 \\ 2x_1 + 2x_2 + 7x_3 + 6x_4 = 17 \\ 6x_1 + 6x_2 + 12x_3 + 6x_4 = 30 \\ 4x_1 + 5x_2 + 13x_3 + 7x_4 = 29 \end{cases}$$

解

$$\overline{A} = \left[\begin{array}{cccc|c} 3 & 5 & 6 & -1 & 13 \\ 2 & 2 & 7 & 6 & 17 \\ \boxed{6} & 6 & 12 & 6 & 30 \\ 4 & 5 & 13 & 7 & 29 \end{array}\right] \xrightarrow[r_1 \leftrightarrow r_3]{\text{选列主元}} \left[\begin{array}{cccc|c} \boxed{6} & 6 & 12 & 6 & 30 \\ 2 & 2 & 7 & 6 & 17 \\ 3 & 5 & 6 & -1 & 13 \\ 4 & 5 & 13 & 7 & 29 \end{array}\right] \xrightarrow[r_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}} r_1,\, i=2,3,4]{\text{消元}} \left[\begin{array}{cccc|c} 6 & 6 & 12 & 6 & 30 \\ 0 & 0 & 3 & 4 & 7 \\ 0 & \boxed{2} & 0 & -4 & -2 \\ 0 & 1 & 5 & 3 & 9 \end{array}\right]$$

列主元素法

$$\xrightarrow[r_2 \leftrightarrow r_3]{\text{选列主元}} \left[\begin{array}{cccc|c} 6 & 6 & 12 & 6 & 30 \\ 0 & \boxed{2} & 0 & -4 & -2 \\ 0 & 0 & 3 & 4 & 7 \\ 0 & 1 & 5 & 3 & 9 \end{array}\right] \xrightarrow[r_i - \frac{a_{i1}}{a_{22}} r_2,\ i=3,4]{\text{消元}} \left[\begin{array}{cccc|c} 6 & 6 & 12 & 6 & 30 \\ 0 & 2 & 0 & -4 & -2 \\ 0 & 0 & 3 & 4 & 7 \\ 0 & 0 & \boxed{5} & 5 & 10 \end{array}\right]$$

$$\xrightarrow[r_3 \leftrightarrow r_4]{\text{选列主元}} \left[\begin{array}{cccc|c} 6 & 6 & 12 & 6 & 30 \\ 0 & 2 & 0 & -4 & -2 \\ 0 & 0 & \boxed{5} & 5 & 10 \\ 0 & 0 & 3 & 4 & 7 \end{array}\right] \xrightarrow[r_i - \frac{a_{i1}}{a_{33}} r_3,\ i=4]{\text{消元}} \left[\begin{array}{cccc|c} 6 & 6 & 12 & 6 & 30 \\ 0 & 2 & 0 & -4 & -2 \\ 0 & 0 & 5 & 5 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}\right]$$

$$\equiv [U \mid y]$$

由回代过程，得解： $x = (1,1,1,1)^T$

用Guass变换描述列主元素法求解过程：

$$[A\mid b]=\left[\begin{array}{cccc|c}3&5&6&-1&13\\2&2&7&6&17\\6&6&12&6&30\\4&5&13&7&29\end{array}\right]\xrightarrow[r_1\leftrightarrow r_3]{\text{选列主元}}\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\2&2&7&6&17\\3&5&6&-1&13\\4&5&13&7&29\end{array}\right]\xrightarrow[r_i-\frac{a_{i1}}{a_{11}}r_1,i=2,3,4]{\text{消元}}\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&0&3&4&7\\0&2&0&-4&-2\\0&1&5&3&9\end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\2&2&7&6&17\\3&5&6&-1&13\\4&5&13&7&29\end{array}\right]=I_{13}[A\mid b]$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&0&3&4&7\\0&2&0&-4&-2\\0&1&5&3&9\end{array}\right]=L_1^{-1}I_{13}[A\mid b]$$

$$\xrightarrow[r_2\leftrightarrow r_3]{\text{选列主元}}\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&2&0&-4&-2\\0&0&3&4&7\\0&1&5&3&9\end{array}\right]\xrightarrow[r_i-\frac{a_{i1}}{a_{22}}r_2,\ i=3,4]{\text{消元}}\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&2&0&-4&-2\\0&0&3&4&7\\0&0&5&5&10\end{array}\right]\xrightarrow[r_3\leftrightarrow r_4]{\text{选列主元}}\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&2&0&-4&-2\\0&0&5&5&10\\0&0&3&4&7\end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&2&0&-4&-2\\0&0&3&4&7\\0&1&5&3&9\end{array}\right]=I_{23}L_1^{-1}I_{13}[A\mid b]$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&2&0&-4&-2\\0&0&3&4&7\\0&0&5&5&10\end{array}\right]=L_2^{-1}I_{23}L_1^{-1}I_{13}[A\mid b]$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&2&0&-4&-2\\0&0&5&5&10\\0&0&3&4&7\end{array}\right]=I_{34}L_2^{-1}I_{23}L_1^{-1}I_{13}[A\mid b]$$

$$\xrightarrow[r_i-\frac{a_{i1}}{a_{33}}r_3,\ i=4]{\text{消元}}\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&2&0&-4&-2\\0&0&5&5&10\\0&0&0&1&1\end{array}\right]\equiv[U\mid y]$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c}6&6&12&6&30\\0&2&0&-4&-2\\0&0&5&5&10\\0&0&0&1&1\end{array}\right]=L_3^{-1}I_{34}L_2^{-1}I_{23}L_1^{-1}I_{13}[A\mid b]$$

$$L_3^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&-\frac{3}{5}&1\end{pmatrix}$$

即：$U=L_3^{-1}I_{34}L_2^{-1}I_{23}L_1^{-1}I_{13}A$

$$U = L_3^{-1} I_{34} L_2^{-1} I_{23} L_1^{-1} I_{13} A = L_3^{-1}\left(I_{34} L_2^{-1} I_{34}\right)\left(I_{34} I_{23} L_1^{-1} I_{23} I_{34}\right)\left(I_{34} I_{23} I_{13}\right) A = \left(L_3^{-1} L_2^{-1} L_1^{-1}\right) PA$$

$$L_3^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -\frac{3}{5} & 1 \end{pmatrix} \quad L_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\frac{2}{6} & 1 & & \\ -\frac{3}{6} & & 1 & \\ -\frac{4}{6} & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & -\frac{0}{2} & 1 & \\ & -\frac{1}{2} & & 1 \end{pmatrix} \quad I_{23} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & 1 & \\ & 1 & 0 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$I_{34} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 0 & 1 \\ & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad I_{13} = \begin{pmatrix} 0 & & 1 & \\ & 1 & & \\ 1 & & 0 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

记 $\tilde{L}_3^{-1} = L_3^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -\frac{3}{5} & 1 \end{bmatrix}$

$$\tilde{L}_2^{-1} = I_{34} L_2^{-1} I_{34} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & -\frac{1}{2} & 1 & \\ & -\frac{0}{2} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{L}_1^{-1} = I_{34} I_{23} L_1^{-1} I_{23} I_{34} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -\frac{3}{6} & 1 & & \\ -\frac{4}{6} & & 1 & \\ -\frac{2}{6} & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$P = I_{34} I_{23} I_{13} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad L = \tilde{L}_1 \tilde{L}_2 \tilde{L}_3 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \frac{3}{6} & 1 & & \\ \frac{4}{6} & \frac{1}{2} & 1 & \\ \frac{2}{6} & \frac{0}{2} & \frac{3}{5} & 1 \end{bmatrix}$$

则 $PA = LU$

具体算法模拟：

$$\begin{bmatrix} 3 & 5 & 6 & -1 \\ 2 & 2 & 7 & 6 \\ [6] & 6 & 12 & 6 \\ 4 & 5 & 13 & 7 \end{bmatrix} \xrightarrow[r_1 \leftrightarrow r_3]{\text{选列主元}} \begin{bmatrix} [6] & 6 & 12 & 6 \\ 2 & 2 & 7 & 6 \\ 3 & 5 & 6 & -1 \\ 4 & 5 & 13 & 7 \end{bmatrix} \xrightarrow[i=2,3,4]{r_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}} r_1} \begin{bmatrix} 6 & 6 & 12 & 6 \\ \left(\frac{2}{6}\right) & 0 & 3 & 4 \\ \left(\frac{3}{6}\right) & [2] & 0 & -4 \\ \left(\frac{4}{6}\right) & 1 & 5 & 3 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[r_2 \leftrightarrow r_3]{\text{选列主元}} \begin{bmatrix} 6 & 6 & 12 & 6 \\ \left(\frac{3}{6}\right) & [2] & 0 & -4 \\ \left(\frac{2}{6}\right) & 0 & 3 & 4 \\ \left(\frac{4}{6}\right) & 1 & 5 & 3 \end{bmatrix} \xrightarrow[i=3,4]{r_i - \frac{a_{i1}}{a_{22}} r_2} \begin{bmatrix} 6 & 6 & 12 & 6 \\ \left(\frac{3}{6}\right) & 2 & 0 & -4 \\ \left(\frac{2}{6}\right) & \left(\frac{0}{2}\right) & 3 & 4 \\ \left(\frac{4}{6}\right) & \left(\frac{1}{2}\right) & [5] & 5 \end{bmatrix} \xrightarrow[r_3 \leftrightarrow r_4]{\text{选列主元}} \begin{bmatrix} 6 & 6 & 12 & 6 \\ \left(\frac{3}{6}\right) & 2 & 0 & -4 \\ \left(\frac{4}{6}\right) & \left(\frac{1}{2}\right) & [5] & 5 \\ \left(\frac{2}{6}\right) & \left(\frac{0}{2}\right) & 3 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[i=4]{r_i - \frac{a_{i1}}{a_{33}} r_3} \begin{bmatrix} 6 & 6 & 12 & 6 \\ \left(\frac{3}{6}\right) & 2 & 0 & -4 \\ \left(\frac{4}{6}\right) & \left(\frac{1}{2}\right) & [5] & 5 \\ \left(\frac{2}{6}\right) & \left(\frac{0}{2}\right) & \left(\frac{3}{5}\right) & 1 \end{bmatrix}$$

交换矩阵：$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} \overset{r_1 \leftrightarrow r_3}{\rightarrow} \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \\ 4 \end{bmatrix} \overset{r_2 \leftrightarrow r_3}{\rightarrow} \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix} \overset{r_3 \leftrightarrow r_4}{\rightarrow} \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 4 \\ 2 \end{bmatrix} \equiv I_p$

即：

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 5 & 6 & -1 \\ 2 & 2 & 7 & 6 \\ 6 & 6 & 12 & 6 \\ 4 & 5 & 13 & 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 6 & 12 & 6 \\ 3 & 5 & 6 & -1 \\ 4 & 5 & 13 & 7 \\ 2 & 2 & 7 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \frac{3}{6} & 1 & & \\ \frac{4}{6} & \frac{1}{2} & 1 & \\ \frac{2}{6} & \frac{0}{2} & \frac{3}{5} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6 & 6 & 12 & 6 \\ & 2 & 0 & -4 \\ & & 5 & 5 \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

几点备注

（1）列主元消去法的消去过程(化上三角形的过程)实质是对A进行了分解：**PA=LU**, 同时求解了下三角方程组**Ly=Pb**。

（2）$Ax=b \Leftrightarrow PAx=Pb \Leftrightarrow LUx=Pb \Leftrightarrow \begin{cases} Ly=Pb \\ Ux=y \end{cases}$

（3）**定理1.3**：列主元LU分解定理

若A非奇异，则必存在交换矩阵P，使PA有Doolittle分解：$PA=LU$

其中L是单位下三角矩阵且对角线以下的元素满足$|l_{ij}|\le 1$，U是上三角矩阵。

（4）列主元消去法数值稳定较好，是求解中小型稠密方程组常用的方法 。

（5）**Matlab命令： [L, U, P] = lu (A) .**

（6）全主元素法 .

例 用全主元素法求解 $\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ 12x_1 - 3x_2 + 3x_3 = 15 \\ -18x_1 + x_2 - x_3 = -15 \end{cases}$ （计算过程中保留3位有效数字）

$$\overline{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 12 & -3 & 3 & 15 \\ -18 & 3 & -1 & -15 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_3} \begin{pmatrix} -18 & 3 & -1 & -15 \\ 12 & -3 & 3 & 15 \\ 1 & 1 & 1 & 6 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{第1次消元}} \begin{pmatrix} -18 & 3 & -1 & -15 \\ 0 & -1 & 2.333 & 5 \\ 0 & 1.167 & 0.944 & 5.167 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{c_2 \leftrightarrow c_3} \begin{pmatrix} -18 & -1 & 3 & -15 \\ 0 & 2.333 & -1 & 5 \\ 0 & 0.944 & 1.167 & 5.167 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{第2次消元}} \begin{pmatrix} -18 & -1 & 3 & -15 \\ 0 & 2.333 & -1 & 5 \\ 0 & 0 & 1.572 & 3.144 \end{pmatrix}$$

全主元素法

由回代过程，得解：$x_2 = 2.000$，$x_3 = 3.000$，$x_1 = 1.000$

四 乔累斯基 (Cholesky) 分解

假设$A=(a_{ij})\in R^{n\times n}$为对称正定矩阵，则存在唯一的三角分解

$$A=LL^{\mathrm{T}}\quad \text{(Cholesky分解)}$$

其中$L=(l_{ij})$为下三角矩阵，且$l_{ii}>0$（$i=1,2,\cdots,n$）.

即:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & & a_{n2} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & & a_{n3} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & l_{32} & & l_{n2} \\ & & l_{33} & & l_{n3} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ & & & & l_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & & a_{n2} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & & a_{n3} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & l_{32} & & l_{n2} \\ & & l_{33} & & l_{n3} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ & & & & l_{nn} \end{pmatrix}$$

由矩阵乘法，得：

$$a_{11} = l_{11} \cdot l_{11} \quad \Rightarrow l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

$$a_{21} = l_{21} l_{11} \quad \Rightarrow l_{21} = a_{21} / l_{11}$$

$$a_{22} = l_{21} l_{21} + l_{22} l_{22} \quad \Rightarrow l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21} l_{21}}$$

$$Ax = b \Leftrightarrow LL^T x = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ L^T x = y \end{cases}$$

……

$$a_{ij} = l_{i1} l_{j1} + l_{i2} l_{j2} + \cdots + l_{ij} l_{jj} \, (i \geq j) \Rightarrow \begin{cases} l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}) / l_{jj} \, (j = 1, 2, \cdots, i-1) \\ l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2} \end{cases}$$

注 Matlab命令： R =chol (A) .

四、三对角方程组的追赶法

1　定义：三对角方程组

$$
\begin{cases}
b_1x_1 + c_1x_2 & = d_1 \\
a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 & = d_2 \\
\quad + a_3x_2 + b_3x_3 + c_3x_4 & = d_3 \\
\qquad \ddots \quad \ddots \quad \ddots & \\
\quad a_{n-1}x_{n-2} + b_{n-1}x_{n-1} + c_{n-1}x_n & = d_{n-1} \\
\quad a_nx_{n-1} + b_nx_n & = d_n
\end{cases}
$$

2　三对角方程的应用

样条函数的求解、微分方程的差分方程等！

3　求解方法：追赶法

$$\begin{cases} b_1x_1 + c_1x_2 = d_1 \\ a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 = d_2 \\ a_3x_2 + b_3x_3 + c_3x_4 = d_3 \\ \quad\ddots \quad \ddots \quad \ddots \\ a_{n-1}x_{n-2} + b_{n-1}x_{n-1} + c_{n-1}x_n = d_{n-1} \\ a_nx_{n-1} + b_nx_n = d_n \end{cases}$$

$$x_1 + \frac{c_1}{b_1}x_2 = \frac{d_1}{b_1}$$

记： $q_1 = \frac{c_1}{b_1},\ p_1 = \frac{d_1}{b_1}$

将$x_1 = p_1 - q_1x_2$代入，得：

$$(b_2 - q_1a_2)x_2 + c_2x_3 = d_2 - a_2p_1$$

$$\Leftrightarrow x_2 + \frac{c_2}{b_2 - q_1a_2}x_3 = \frac{d_2 - a_2p_1}{b_2 - q_1a_2}$$

记$\begin{cases} t_2 = b_2 - q_1a_2 \\ q_2 = \frac{c_2}{t_2},\quad p_2 = \frac{d_2 - a_2p_1}{t_2} \end{cases}$

$$\begin{cases} x_1 + q_1x_2 = p_1 \\ x_2 + q_2x_3 = p_2 \\ x_3 + q_3x_4 = p_3 \\ \quad\cdots \quad \cdots \\ x_{n-1} + q_{n-1}x_n = p_{n-1} \\ x_n = p_n \end{cases}$$

依此规律，进行到底！！

➢ 计算规律：
$$\begin{cases} q_1 = \dfrac{c_1}{b_1}, \; p_1 = \dfrac{d_1}{b_1} \\ \begin{cases} t_k = b_k - q_{k-1} a_k \\ q_k = \dfrac{c_k}{t_k}, \quad p_k = \dfrac{d_k - a_k p_{k-1}}{t_k} \end{cases} (k = 2, \dots, n) \end{cases}$$

➢ 消元结束后：
$$\begin{cases} x_1 + q_1 x_2 = p_1 \\ x_2 + q_2 x_3 = p_2 \\ x_3 + q_3 x_4 = p_3 \\ \cdots \quad \cdots \\ x_{n-1} + q_{n-1} x_n = p_{n-1} \\ x_n = p_n \end{cases}$$

➢ 回代求解：
$$\begin{cases} x_n = p_n \\ x_k = p_k - q_k x_{k+1} \; (k = n-1, \cdots, 1) \end{cases}$$

4　追赶法成立条件

若三对角方程组系数矩阵满足：

1) 所有a_k, b_k, c_k均不为零；

2) $|b_k| \ge |a_k| + |c_k|$ $(k=1,2,\cdots,n)$，且其中至少有一个取不等号。

则追赶法计算过程中每步的分母$t_k = b_k - q_{k-1}a_k$满足

$$|t_k| = |b_k - q_{k-1}a_k| \ge |b_k| - |a_k| > 0 \quad (k = 2,3,\cdots,n)$$

因此追赶法能进行到底。

第二章 线性方程组的直接解法

§1 三角分解法

§2 正交三角分解法

§3 灵敏度分析

§ 2.2 正交三角分解法

本节中约定向量x的范数取2－范数，即$\|x\|=\|x\|_2=\sqrt{x_1^2+\cdots+x_n^2}$.

一 最小二乘问题

最小二乘问题多来源于数据拟合．比如我们要测量数据$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，又不便于对x直接测量，但可以间接地测量x的函数$y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^T$．假设y是x的线性函数关系，即求$y=Ax$．由于误差的原因，一般$y=Ax$不可能精确成立，就考虑$\|y-Ax\|_2$的极小化解．这就是线性最小二乘问题.

如$\begin{cases} 3x_1+2x_2=2 \\ 4x_1-5x_2=3 \\ 2x_1+x_2=1 \\ -x_1+3x_2=8 \end{cases}$(无精确解，超定线性方程)

1 定义 设$A \in R^{m\times n}$(通常$m \geq n$)，$b \in R^m$，称极小化问题

$$\|b - Ax\| = \min$$

为线性方程组$Ax = b$的**最小二乘问题**(简称**LS问题**).LS的解称为线性方程组$Ax = b$的**最小二乘解**(**LS解**).

2 LS解的存在性

$Ax = b$有解 $\Leftrightarrow R(A) = R(A,b)$

$\Leftrightarrow x_1\alpha_1 + x_2\alpha_2 + \cdots + x_n\alpha_n = b$有解，其中$A = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n)$

$\Leftrightarrow$向量b可表示为A的列向量$\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$的线性组合

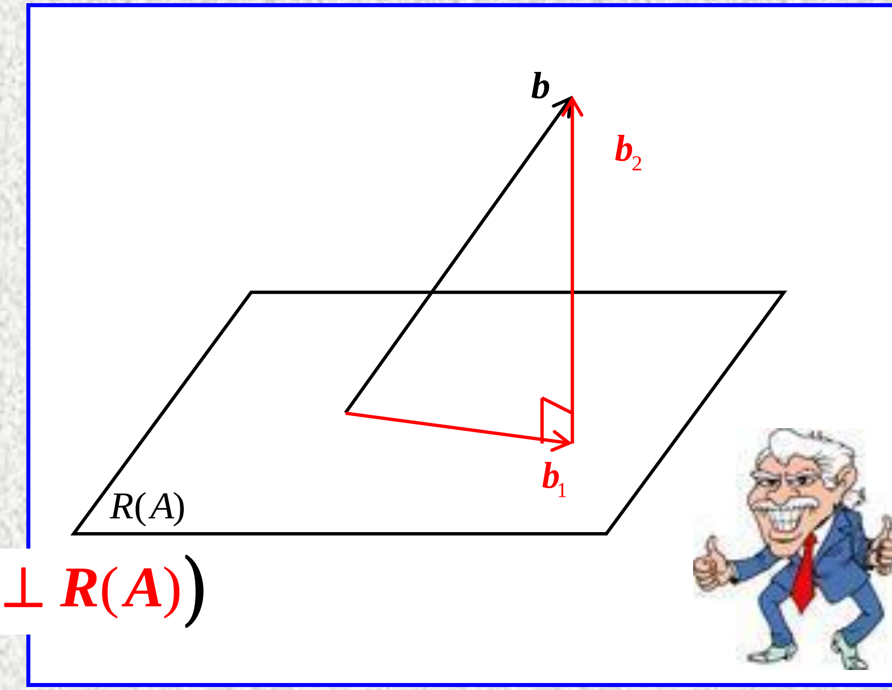
若定义A的列空间为

$$\mathrm{R}(A) = \{y = Ax = x_1\alpha_1 + \cdots + x_n\alpha_n \mid x \in R^n\} = \mathrm{span}\{\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n\} \subset R^m$$

则$Ax = b$有解 $\Leftrightarrow b \in \mathrm{R}(A) = \mathrm{span}\{\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n\}$

$\because Ax=b$不一定有解

$\therefore b$不一定$\notin \mathrm{R}(A)=\mathrm{span}\left\{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n\right\}$



下面要寻求一向量$b_1\in R(A)$，使得

$$\|b_1-b\|=\min$$

显然：b_1应为b在$R(A)$上的正交投影$\left(b_2\perp R(A)\right)$

且$Ax=b_1$一定有解，记为x^*

若记：$\mathrm{R}(A)^{\perp}=\left\{z\in R^m \mid y^Tz=0, y\in \mathrm{R}(A)\right\}=\left\{z\in R^m \mid A^Tz=0\right\}$

为$R(A)$的正交补空间

下面证明x^*就是LS问题的解：

对于$\forall x\in R^n$，因为$b_1-Ax\in \mathrm{R}(A)$且$\left(b_1-Ax\right)\perp b_2$

$$\therefore \|b-Ax\|^2=\|(b_1-Ax)+b_2\|^2=\|b_1-Ax\|^2+\|b_2\|^2$$

$$\therefore \|b-Ax\|^2=\min \Leftrightarrow \|b_1-Ax\|=\min \Leftrightarrow Ax=b_1 \Leftrightarrow x=x^*$$

下面分析LS解x^*应满足什么条件？

$\because b_2 \in R(A)^{\perp}$，且$b_1 + b_2 = b$，由$Ax^* = b_1 = b - b_2$，两边左乘$A^T$：

$$A^T A x^* = A^T b_1 = A^T (b - b_2) = A^T b - A^T b_2 = A^T b$$

另一方面，若：

$$A^T A x = A^T b$$

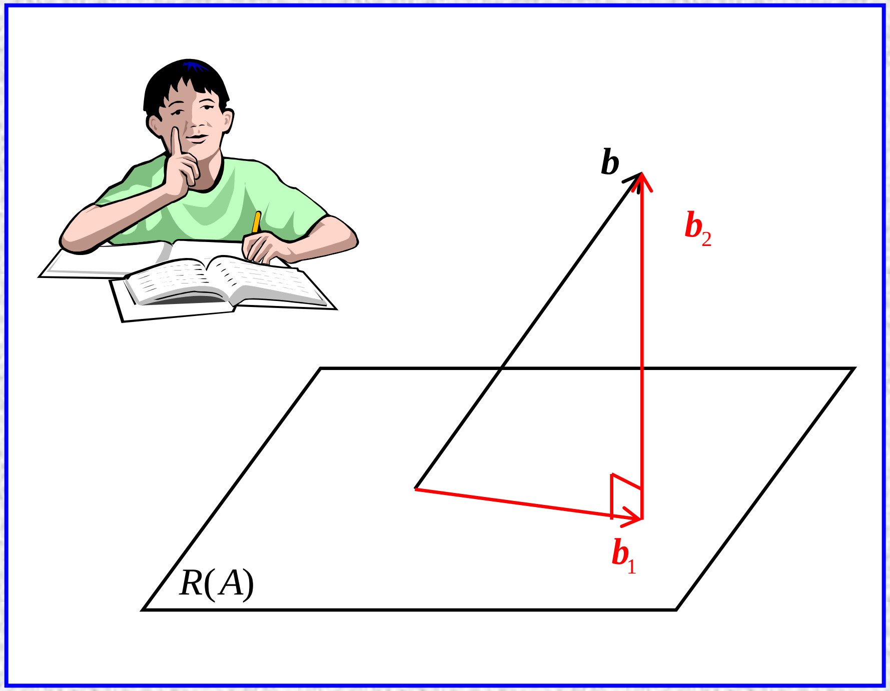
即 $$A^T (b - Ax) = 0$$

由 $$b = b_1 + b_2 \text{和} A^T b_2 = 0$$

可得 $$A^T (b_1 - Ax) = 0$$

即 $$b_1 - Ax \perp \mathrm{R}(A)^{\perp}$$

又 $$b_1 - Ax \in \mathrm{R}(A)$$



$\therefore b_1 - Ax = 0$，即$Ax = b_1$

由此可见： $$\|b - Ax\| = \min \Leftrightarrow Ax = b_1 \Leftrightarrow A^T A x = A^T b$$

----LS问题的法方程

几点备注

1　法方程组$A^TAx=A^Tb$一定有解！

证明：　往证 $R(A^TA)=R(A^TA,A^Tb)$

$$\because R(A)=R(A^T)=R(A^TA)$$

$$\therefore R(A^TA)\le R(A^TA,A^Tb)=R\left(A^T(A,b)\right)\le R(A^T)=R(A^TA)$$

$\therefore R(A^TA)=R(A^TA,A^Tb)$，一定有解

2　解的唯一性

矩阵A列满秩时，A^TA可逆，法方程$A^TAx=A^Tb$有唯一解：

$$x^*=\left(A^TA\right)^{-1}A^Tb$$

最小二乘问题解唯一.

3 法方程$A^T Ax = A^T b$数值解法

- **Cholesky分解法：对$A^T A$进行Cholesky分解**

方法简单易行，计算量约为$\frac{1}{2}n^2(m+\frac{1}{3}n)$，现在经常使用；

但$\because cond(A^T A)=\left(cond(A)\right)^2$（当$R(A)=n$时）

$\therefore$ 有时数值稳定性差，甚至实际计算中$A^T A$会失去正定性

➤ 正交三角分解法(QR分解法)

设$A \in R^{m\times n}$为列满秩矩阵 (rank$(A)=n$) ,且有如下分解

$$A_{m\times n} = Q_{m\times n} R_{n\times n}$$

其中Q具有单位正交列 ($Q^T Q = I_n$), R是非奇异上三角矩阵.

则

$$A^T A = (QR)^T QR = R^T Q^T QR = R^T R$$

此时

$$A^T Ax = A^T b \Leftrightarrow (R^T R)x = (QR)^T b = R^T Q^T x$$

$$\Leftrightarrow Rx = Q^T b$$

矩阵A的2–范数具有正交不变性，方法的数值稳定性好 .

二 正交化方法

1 Gram-Schmidt正交化方法 (CGS方法)

设$A\in R^{m\times n}$为列满秩矩阵 (rank(A)=n) ,且有如下QR分解

$$A_{m\times n}=Q_{m\times n}R_{n\times n}$$

其中Q具有单位正交列, R是非奇异上三角矩阵. 即:

$$[\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n]=[q_1,q_2,\cdots,q_n]\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

亦即

$$\begin{cases} \alpha_1=r_{11}q_1 \\ \alpha_2=r_{12}q_1+r_{22}q_2 \\ \quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \alpha_k=r_{1k}q_1+r_{2k}q_2+\cdots+r_{kk}q_k \\ \quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \alpha_n=r_{1n}q_1+r_{2n}q_2+\cdots+r_{n-1,n}q_{n-1}+r_{nn}q_n \end{cases}$$

由此可得：

$\alpha_1 = r_{11}q_1$ $\Rightarrow r_{11} = \|\alpha_1\|, q_1 = \alpha_1 / r_{11}$

$\alpha_2 = r_{12}q_1 + r_{22}q_2$ $\Rightarrow r_{12} = (\alpha_2, q_1), \tilde{\alpha}_2 \equiv \alpha_2 - r_{12}q_1, r_{22} = \|\tilde{\alpha}_2\|, q_2 = \tilde{\alpha}_2 / r_{22}$

………………………………

$\alpha_k = r_{1k}q_1 + r_{2k}q_2 + \cdots + r_{k-1,k}q_{k-1} + r_{kk}q_k$

$$\Rightarrow r_{1k} = (\alpha_k, q_1), r_{2k} = (\alpha_k, q_2), \cdots, r_{k-1,k} = (\alpha_k, q_{k-1})$$
$$\tilde{\alpha}_k \equiv \alpha_k - r_{1k}q_1 - r_{2k}q_2 - \cdots - r_{k-1,k}q_{k-1}, r_{kk} = \|\tilde{\alpha}_k\|, q_k = \tilde{\alpha}_k / r_{kk}$$

……………………………………………

$\alpha_n = r_{1n}q_1 + r_{2n}q_2 + \cdots + r_{n-1,n}q_{n-1} + r_{nn}q_n$

$\Rightarrow$ ………………

特点：1) Q的列是由A的列线性组合得到,一般舍入误差比较大,以至Q可能与正交列矩阵有较大偏差,以此求解LS问题往往不稳定；

2) R的元素是逐列计算得到的；

修正的Gram-Schmidt正交化方法 (MGS方法)

$$\alpha_1 = r_{11}q_1 \quad \Rightarrow \boxed{r_{11} = \|\alpha_1\|,\ q_1 = \alpha_1 / r_{11}}$$

$$\alpha_2 = r_{12}q_1 + r_{22}q_2 \quad \Rightarrow \boxed{r_{12} = (\alpha_2, q_1)}$$

记 $\alpha_2^{(2)} \equiv \alpha_2 - r_{12}q_1 = r_{22}q_2$

$$\boxed{r_{22} = \|\alpha_2^{(2)}\|,\ q_2 = \alpha_2^{(2)} / r_{22}}$$

…………………………

$$\alpha_k = r_{1k}q_1 + r_{2k}q_2 + \cdots + r_{k-1,k}q_{k-1} + r_{kk}q_k$$

记 $\alpha_k^{(2)} \equiv \alpha_k - r_{1k}q_1$

$$= -r_{2k}q_2 - \cdots - r_{k-1,k}q_{k-1} - r_{kk}q_k$$

$$\Rightarrow \boxed{r_{1k} = (\alpha_k, q_1)}$$

$$\boxed{r_{2k} = (\alpha_k^{(2)}, q_2)}$$

……………………………………

$$\alpha_n = r_{1n}q_1 + r_{2n}q_2 + \cdots + r_{n-1,n}q_{n-1} + r_{nn}q_n$$

记 $\alpha_n^{(2)} \equiv \alpha_n - r_{1n}q_1$

$$= -r_{2n}q_2 - \cdots - r_{n-1,n}q_{n-1} - r_{nn}q_n$$

$$\Rightarrow \boxed{r_{1n} = (\alpha_n, q_1)}$$

$$\boxed{r_{2n} = (\alpha_n^{(2)}, q_2)}$$

特点：1) R的元素是逐行计算得到的；

2) Q也可能是较差的列正交列矩阵，但已证明以此求解LS问题稳定；

2 Householder正交化方法

1) 定义　设$\omega \in \mathbf{R}^n$是一单位向量($\|\omega\|=1$)，则称矩阵

$$H(\omega) = I - 2\omega\omega^T$$

为**Householder矩阵**或**Householder变换**.

2) 性质

(1) $H(\omega)$是对称正交矩阵,即:$H(\omega) = [H(\omega)]^T = [H(\omega)]^{-1}$

(2) 保模变换,即:$\| H(\omega)x \| = \| x \|$

(3) $\det H(\omega) = -1$

3) 几何意义 设$x \in R^n$,则$x = \mu + a\omega$,其中$\mu \in span\{\omega\}^{\perp}, a \in R$, 则由

$$\mu^T \omega = 0 \text{和} \omega^T \omega = 1$$

可得

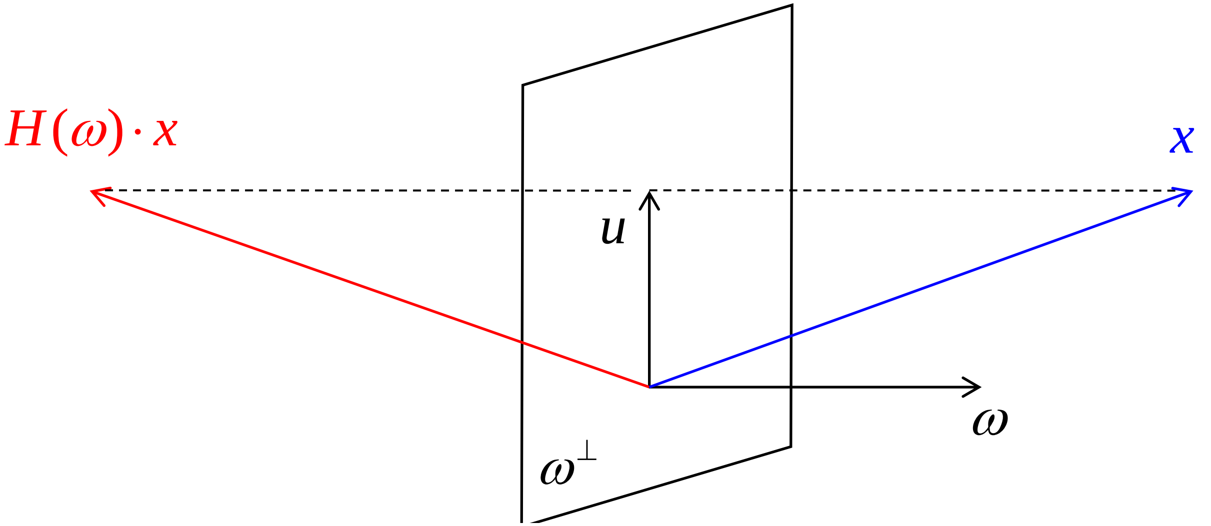
$$H(\omega) \cdot x = \left(I - 2\omega\omega^T\right) \cdot x$$

$$= \left(I - 2\omega\omega^T\right)(u + a\omega)$$

$$= u + a\omega - 2\omega\omega^T u - 2\omega\omega^T a\omega$$

$$= u - a\omega$$

即：$H(\omega) \cdot (u + a\omega) = u - a\omega$



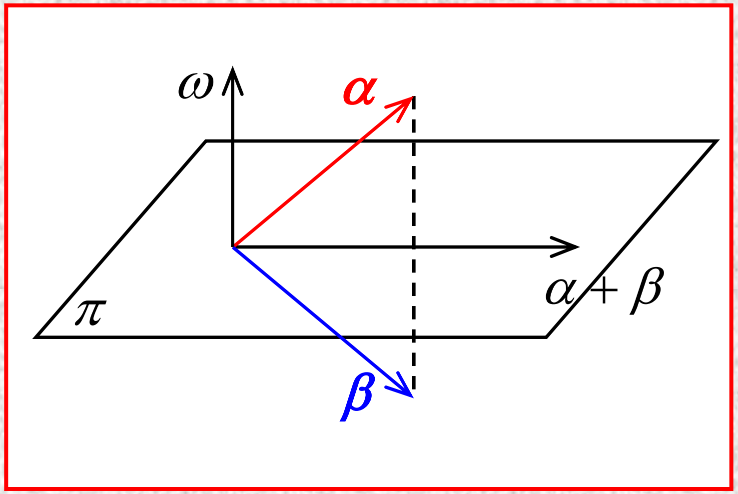
$H(\omega)$为x关于$span\{\omega\}^{\perp}$的镜像反射.

4) 定理2.1

设$\alpha,\beta\in R^n(\alpha\neq\beta)$且$\|\alpha\|=\|\beta\|$，令Householder变换$H$为

$$H=I-2\omega\omega^T\quad(\omega=(\alpha-\beta)/\|\alpha-\beta\|)$$

则$H\alpha=\beta.$



证明 $$\because\ \omega=\frac{(\alpha-\beta)}{\|\alpha-\beta\|}$$

$$\therefore\ H\alpha=\left(I-\frac{2(\alpha-\beta)(\alpha-\beta)^T}{\|\alpha-\beta\|^2}\right)\alpha$$

$$=\alpha-\frac{2(\alpha-\beta)(\alpha^T\alpha-\beta^T\alpha)}{\|\alpha-\beta\|^2}$$

又$\because\|\alpha\|=\|\beta\|$

$$\therefore\|\alpha-\beta\|^2=(\alpha-\beta)^T(\alpha-\beta)=2(\alpha^T\alpha-\beta^T\alpha)$$

$$\therefore\ H\alpha=\alpha-(\alpha-\beta)=\beta$$

5) 下面讨论$Hx=\rho e_1(\rho=\pm\|x\|)$的算法

- 设$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T\neq 0, y=\rho e_1=(\pm\|x\|,0,\cdots,0)$，则

$$H(\omega)=I-2\omega\omega^T,\quad \text{其中}\ \omega=\frac{(x-y)}{\|x-y\|}$$

而 $\|x-y\|^2=(x_1-\rho)^2+x_2^2+\cdots+x_n^2=x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2+\rho^2-2\rho x_1$

$$=2\rho^2-2\rho x_1=2\rho(\rho-x_1)$$

取 $\rho=-\operatorname{sgn}(x_1)\|x\|$, 其中$\operatorname{sgn}(x_1)=\begin{cases}1 & x_1\geq 0\\ -1 & x_1<0\end{cases}$

则 $$\|x-y\|^2=2\rho(\rho-x_1)=2\|x\|(\|x\|+|x_1|)$$

记 $$u=x-y=(x_1-\rho,x_2,\cdots,x_n)^T$$

则 $$H=I-2\omega\omega^T=I-\frac{2}{\|u\|^2}uu^T\equiv I-\beta\cdot uu^T$$

$$\text{其中}\ \beta=\frac{2}{\|u\|^2}=\frac{1}{\|x\|(\|x\|+|x_1|)}$$

算法2.1 (Householder变换)

给$x \in R^n$，求$u \in R^n$和$\beta, \rho \in R$使得$H = I - \beta u u^T$满足$Hx = \rho e_1$.

```
function [u, β, ρ] = house(x)
u = x; β = 1; ρ = sgn(u_1)‖u‖;
if ρ ≠ 0
    u_1 = u_1 + ρ;
    β = 1/(ρ u_1);
    ρ = −ρ;
end
```

$$H = I - \beta \cdot uu^T$$

其中$\beta = \dfrac{1}{\|u\|^2} = \dfrac{1}{\|x\|(\|x\| + |x_1|)}$

$$u = x - y = (x_1 - \rho, x_2, \cdots, x_n)^T$$

$$\rho = -\operatorname{sgn}(x_1)\|x\|,$$

例1 $x = (1, -2, -2)^T$，调用算法得

$$u = (4, -2, -2)^T，\ \beta = 1/12，\ \rho = -3$$

此时 $H = I - \beta \cdot uu^T = \dfrac{1}{3}\begin{bmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \\ 2 & -1 & 2 \end{bmatrix}$, $Hx = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

➢ 定理2.2 (QR分解定理)

设$A \in R^{m\times n}(m \geq n)$,则存在正交矩阵$Q \in R^{m\times m}$和上三角矩阵$R \in R^{n\times n}$,使

$$A_{m\times n} = Q_{m\times m}\begin{bmatrix} R_{n\times n} \\ O \end{bmatrix}_{m\times n}$$

称上式为矩阵A的正交三角分解，简称为QR分解.

例2 求$A=\begin{pmatrix}63 & 41 & -88\\ 42 & 60 & 51\\ 0 & -28 & 56\\ 126 & 82 & -71\end{pmatrix}\triangleq(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$的QR分解.

```
function [u,β,ρ] = house(x)
u = x; β = 1; ρ = sgn(u_1)‖u‖;
if  ρ ≠ 0
    u_1 = u_1 + ρ;
    β = 1/(ρ u_1);
    ρ = −ρ;
end
```

解 第1步

$$u_1=\alpha_1=(63,42,0,126)^T$$

$$\rho_1=\mathrm{sgn}(u_1(1))\|u_1\|=147$$

$$u_1(1)=u_1(1)+\rho_1=63+147=210$$

$$u_1=(210,42,0,126)^T$$

$$\beta_1=\frac{1}{\rho_1\cdot u_1(1)}=\frac{1}{147\times 210}=\frac{1}{30870}$$

$$\rho_1=-\rho_1=-147$$

$$H_1=I-\beta_1\cdot u_1u_1^T$$

$$=\frac{1}{35}\begin{pmatrix}-15 & -10 & 0 & -30\\ -10 & 33 & 0 & -6\\ 0 & 0 & 35 & 0\\ -30 & -6 & 0 & 17\end{pmatrix}$$

$$H_1A=\frac{1}{35}\begin{pmatrix}-5145 & -3675 & 2940\\ 0 & 1078 & 2989\\ 0 & -980 & 1960\\ 0 & -196 & 1127\end{pmatrix}$$

$$H_1A=\frac{1}{35}\begin{pmatrix}-5145 & -3675 & 2940\\ 0 & 1078 & 2989\\ 0 & -980 & 1960\\ 0 & -196 & 1127\end{pmatrix}$$

```
function [u, β, ρ] = house(x)
u = x; β = 1; ρ = sgn(u_1)‖u‖;
if  ρ ≠ 0
    u_1 = u_1 + ρ;
    β = 1/(ρ u_1);
    ρ = −ρ;
end
```

第2步

$$u_2=\frac{1}{35}(1078,-980,-196)^T$$

$$\rho_2=\operatorname{sgn}(u_2(1))\|u_2\|=42$$

$$u_2(1)=u_1(1)+\rho_2=72.8$$

$$u_2=(72.8,-28,-5.6)^T$$

$$\beta_2=\frac{1}{\rho_2\cdot u_2(1)}=\frac{1}{42\times 72.8}=\frac{1}{3057.6}$$

$$\rho_2=-\rho_2=-42$$

$$H=I-\beta_2\cdot u_2u_2^T$$

$$=\begin{pmatrix}-0.733 & 0.667 & 0.133\\ 0.667 & 0.744 & -0.051\\ 0.133 & -0.051 & 0.990\end{pmatrix}$$

取 $H_2=\begin{pmatrix}I_1 & O\\ O & H_1\end{pmatrix}$

$$=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -0.733 & 0.667 & 0.133\\ 0 & 0.667 & 0.744 & -0.051\\ 0 & 0.133 & -0.051 & 0.990\end{pmatrix}$$

$$H_2H_1A=\begin{pmatrix}-147 & -10 & 84\\ 0 & -42 & -21\\ 0 & 0 & 96.923\\ 0 & 0 & 40.385\end{pmatrix}$$

第3步 $u_3=(96.923,\ 40.385)^T$ $\quad H=\begin{pmatrix}-0.923 & -0.385\\ -0.385 & -0.923\end{pmatrix}$

取

$$H_3=\begin{pmatrix}I_2 & O\\ O & H\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -0.923 & -0.385\\ 0 & 0 & -0.385 & -0.923\end{pmatrix}$$

则

$$H_3H_2H_1A=\begin{pmatrix}-147 & -10 & 84\\ 0 & -42 & -21\\ 0 & 0 & -105\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\triangleq R$$

$$\therefore A=(H_3H_2H_1)^{-1}R=(H_1^{-1}H_2^{-1}H_3^{-1})R=(H_1H_2H_3)R$$

$$\therefore A=\left(H_3H_2H_1\right)^{-1}R$$

$$=\left(H_1^{-1}H_2^{-1}H_3^{-1}\right)R$$

$$=\left(H_1H_2H_3\right)R$$

$$\triangleq QR$$

其中 $:Q=H_1H_2H_3$

$$=\frac{1}{21}\begin{pmatrix}-9 & 2 & 10 & -16\\ -6 & -15 & -12 & -6\\ 0 & 14 & -14 & -7\\ 18 & 4 & -1 & 10\end{pmatrix}$$

$$R=\begin{pmatrix}-147 & -10 & 84\\ 0 & -42 & -21\\ 0 & 0 & -105\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

$$H_1=\frac{1}{35}\begin{pmatrix}-15 & -10 & 0 & -30\\ -10 & 33 & 0 & -6\\ 0 & 0 & 35 & 0\\ -30 & -6 & 0 & 17\end{pmatrix}$$

$$H_2=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -0.733 & 0.667 & 0.133\\ 0 & 0.667 & 0.744 & -0.051\\ 0 & 0.133 & -0.051 & 0.990\end{pmatrix}$$

$$H_3=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -0.923 & -0.385\\ 0 & 0 & -0.385 & -0.923\end{pmatrix}$$

即：$A=\begin{pmatrix}63&41&-88\\42&60&51\\0&-28&56\\126&82&-71\end{pmatrix}=\frac{1}{21}\left(\begin{array}{ccc:c}-9&2&10&-16\\-6&-15&-12&-6\\0&14&-14&-7\\18&4&-1&10\end{array}\right)\begin{pmatrix}-147&-10&84\\0&-42&-21\\0&0&-105\\\hdashline 0&0&0\end{pmatrix}$

亦即：$A_{4\times3}=Q_{4\times4}R_{4\times3}\triangleq(Q'_{4\times3},Q''_{4\times1})\begin{pmatrix}R'_{3\times3}\\O\end{pmatrix}=Q'_{4\times3}R'_{3\times3}$

$$=\frac{1}{21}\begin{pmatrix}-9&2&10\\-6&-15&-12\\0&14&-14\\18&4&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-147&-10&84\\&-42&-21\\&&-105\end{pmatrix}$$

一般地，设矩阵A的QR分解为

$$A_{m\times n}=Q_{m\times m}\begin{bmatrix}R_{n\times n}\\O\end{bmatrix}_{m\times n}=\left[Q_{m\times n},Q_{m\times(m-n)}\right]\begin{bmatrix}R_{n\times n}\\0\end{bmatrix}=Q_{m\times n}R_{n\times n}$$

由此可得简约型的QR分解定理：

- 定理2.3 (简约型QR分解定理)

设$A \in R^{m\times n}(m \geq n)$，则存在具有单位正交列$Q \in R^{m\times m}$和上三角矩阵$R \in R^{n\times n}$，使 $A_{m\times n} = Q_{m\times n} R_{n\times n}$

- 算法2.3 (Householder-QR分解)

- Matlab命令

[Q,R] = qr(A)　给A的QR分解

[Q,R] = qr(A,0) 给A的简约型QR分解

- 算法2.4 (QR分解$Ax = b, A$可逆)

1) 求Householder 矩阵H满足：$Hb = \rho e_n$;

2) 对 $(HA)^T$做QR分解：$(HA)^T = QR$;

3) 解为：$x = \dfrac{\rho}{r_{nn}} \text{Q}(1{:}n, n)$;

3 Givens正交化方法

1) 定义 称方阵

$$G(i,j,\theta)=\begin{bmatrix} I & & & & \\ & \cos\theta & & \sin\theta & \\ & & I & & \\ & -\sin\theta & & \cos\theta & \\ & & & & I \end{bmatrix}\begin{matrix} \\ \leftarrow i \\ \\ \leftarrow j \\ \\ \end{matrix}$$

为**Givens矩阵**或**Givens变换**.通常记$c=\cos\theta, s=\sin\theta$且$c^2+s^2=1$.

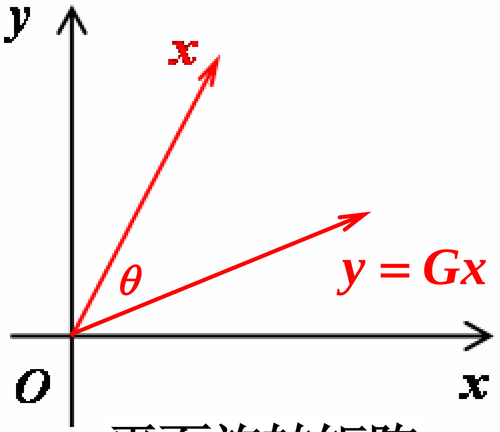
2) 性质

(1) $G(i,j,\theta)$是一正交矩阵,且:$G(i,j,\theta)^{-1}=G(i,j,-\theta)$

(2) $\det G(i,j,\theta)=1$

3) 几何意义

在$\mathbf{R}^2$中，设$x=(x_1,x_2)^T\neq 0$，$G=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}$，则$y=Gx$是把$x$按顺时针旋转$\theta$角而得到的向量。



平面旋转矩阵

4) 主要应用：把一个向量指定的某一分量消为0.

设$x=(x_1,\cdots,x_i,\cdots,x_j,\cdots,x_n)^T\in R^n$， $y=G(i,j;\theta)x$， 易知 $y=G(i,j;\theta)x$只改变x的第i个分量和第j个分量,且

$$\begin{cases} y_i = x_i\cos\theta + x_j\sin\theta \\ y_j = -x_i\sin\theta + x_j\cos\theta \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1\cos\theta + x_2\sin\theta \\ -x_1\sin\theta + x_2\cos\theta \end{bmatrix}$$

令$y_j=0$， 得 $$\tan\theta = \frac{x_j}{x_i}$$

所以，取 $$c=\cos\theta=\pm\frac{x_i}{\sqrt{x_i^2+x_j^2}},\quad s=\sin\theta=\pm\frac{x_j}{\sqrt{x_i^2+x_j^2}}$$

则 $$y_i = cx_i + sx_j = \pm\sqrt{x_i^2+x_j^2},\quad y_j=0$$

$$G(i,j,\theta)x=\left(x_1,\ldots,x_{i-1},\pm\sqrt{x_i^2+x_j^2},x_{i+1},\ldots,x_{j-1},0,x_{j+1},\ldots,x_n\right)^T.$$

5) 算法2.2(Givens变换)

给$a,b \in R$,求$c,s \in R$满足$c^2+s^2=1$,使

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sigma \\ 0 \end{bmatrix}(\sigma=\pm\sqrt{a^2+b^2}) .$$

Function $[c,s,\sigma]=\text{givens}(a,b)$

if $b=0$

  $c=1; s=0;$

elseif $|b|>|a|$

  $d=a/b; s=\sqrt{1+d^2}; c=sd;$

else

  $d=b/a; s=\sqrt{1+d^2}; c=sd;$

end

  $\sigma=ca+sb;$

return

例3 已知向量$x=(2,1,4)^{\mathrm{T}}$，试用Givens变换将x约化为$(r,0,0)^{\mathrm{T}}$.

解 记$x=x^{(1)}=(2,1,4)^{\mathrm{T}}$，对$x^{(1)}$计算$c$和$s$。

$$c=\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}=\frac{2}{\sqrt{5}},\qquad s=\frac{x_2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}=\frac{1}{\sqrt{5}}$$

$$G_1=\begin{bmatrix} 2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} & 0 \\ -1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\quad G_1x^{(1)}=\left(\sqrt{5},0,4\right)^T=x^{(2)}$$

记$x^{(2)}=\left(\sqrt{5},0,4\right)^T$,对$x^{(2)}$计算$c$和$s$:$c=\sqrt{\dfrac{5}{21}},s=\dfrac{4}{\sqrt{21}}$

$$G_2=\begin{bmatrix} \sqrt{5/21} & 0 & 4/\sqrt{21} \\ 0 & 1 & 0 \\ -4/\sqrt{21} & 0 & \sqrt{5/21} \end{bmatrix},\quad G_2x^{(2)}=\left(\sqrt{21},0,0\right)^T$$

第二章 线性方程组的直接解法

§1 三角分解法

§2 正交三角分解法

§3 灵敏度分析

引例

I) $\begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2.000125 \\ -0.000005 \end{pmatrix}$$

$$\delta b=(0,0.0001)^T \Rightarrow \delta x=(-0.000125,0.000005)^T$$

抗干扰能力强
良态的方程组

II) $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\delta b=(0,0.0001)^T \Rightarrow \delta x=(1,1)^T$$

抗干扰能力弱
病态的方程组

问题： ①如何估计误差向量的大小？
②如何对方程组的性态进行判断？衡量其病态程度？

问题

对$Ax=b$,设b有误差δb,相应解的误差为δx,问$\dfrac{\|\delta x\|}{\|x\|}=?$

$\because A(x+\delta x)=b+\delta b$ $\therefore A\delta x=\delta b$

$\therefore \delta x=A^{-1}\delta b$

$$\therefore \quad \|\delta x\|=\|A^{-1}\delta b\|\le\|A^{-1}\|\cdot\|\delta b\|$$

又$\because \|b\|=\|Ax\|\le\|A\|\cdot\|x\|$

$$\therefore \quad \|x\|\ge\frac{\|b\|}{\|A\|}$$

$$\therefore \quad \frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

推广 对$Ax=b$,设A可逆,若A有误差δA,b有误差δb,则

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right)\approx\le\|A\|\|A^{-1}\|\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right)$$ (P51-Th3.1)

1　定义　称$cond(A)=\|A\|\cdot\|A^{-1}\|$为矩阵$A$的条件数。

2　性质

(Ⅰ)　条件数反映了矩阵(方程组)的性态：
小，良态；大，病态；越大，病态越严重。

(Ⅱ) $cond(A)\geq 1$

(Ⅲ) $cond(cA)=cond(A)\quad c\neq 0$

3　常用的条件数

(1)　$Cond(A)_1=\left\|A^{-1}\right\|_1\left\|A\right\|_1$

(2)　$Cond(A)_\infty=\left\|A^{-1}\right\|_\infty\left\|A\right\|_\infty$

(3)　$Cond(A)_2=\left\|A^{-1}\right\|_2\left\|A\right\|_2=\sqrt{\dfrac{\lambda_{\max(A^TA)}}{\lambda_{\min(A^TA)}}}$

4　Matlab命令：　cond(A, p)，其中$p=1,2,\mathrm{inf},\text{'fro'}$

例1　求引例中各方程组的条件数。

解　(1) $\because A=\begin{pmatrix}1 & 5\\ 1 & 1.0001\end{pmatrix}$, $A^{-1}=\begin{pmatrix}-0.25 & 1.25\\ 0.25 & -0.25\end{pmatrix}$

$$\therefore Cond(A)_{\infty}=6\times 1.5=9$$

(2) $A=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{pmatrix}$, $A^{-1}=\begin{pmatrix}10001 & -10000\\ -10000 & 10000\end{pmatrix}$

$$\therefore Cond(A)_{\infty}=20001\times 2.0001\approx 40004$$

精度分析

定理3.2 (P53)

设： 1）A非奇异（可逆），x是$Ax=b$的精确解，$b\neq 0$;

2）$\tilde{x}$是$Ax=b$的近似解，且$r=A\tilde{x}-b$(称之为残向量)

则有

$$\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|}\leq Cond(A)\frac{\|r\|}{\|b\|}$$

r 小，解的精度一定高吗？

定理表明：

1）当$cond(A)$较小，即为良态方程组时，残向量r小则解的精度高；

2）当$cond(A)$较大，即为病态方程组时，残向量r小则解的精度不一定高。

例2 $A=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{bmatrix}$ $b=\begin{bmatrix}2.0001\\ 2\end{bmatrix}$

准确解 $x=(1,1)^T$

若 $\tilde{x}_1=(2,0)^T, r_1=A\tilde{x}_1-b=(0.0001,0)^T$

若 $\tilde{x}_2=(0.9,0.9)^T, r_2=A\tilde{x}_2-b=(0.2001,0.2)^T$

显然$\tilde{x}_1$的残向量小，但却精度低.