解线性代数方程组的直接法

温丹苹

邮箱：dpwen@nju.edu.cn

办公室：工管院协鑫楼306

1 Gauss消去法

2 矩阵LU分解

◆ 工程计算和科学研究中的许多问题，最终归结为线性代数方程组的求解。

◆ **线性方程组的解法：**

1.直接法

经过有限步算数运算可求得方程组精确解的方法（计算过程中没有舍入误差）。如Gauss消去法、矩阵LU分解法（Gauss消去法变形）。

2.迭代法

用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解的方法。

具有存储单元较少，程序设计简单、原始系数矩阵在计算过程始终不变等优点，但存在收敛性及收敛速度方面的问题。

3.1 Gauss 消去法

- Gauss 消去法的基本思想是消元。

例 求解下面的线性方程组

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + 2x_3 = -2 \\ 2x_1 - 3x_2 - 3x_3 = 4 \\ 4x_1 + x_2 + 6x_3 = 3. \end{cases}$$

Gauss 消去法: 先写出增广矩阵, 然后通过初等变换将其转换为阶梯形

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \\ 4 & 1 & 6 & 3 \end{bmatrix} \xrightarrow[③-①\times 4]{②-①\times 2} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 9 & -2 & 11 \end{bmatrix} \xrightarrow{③-②\times 9} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 0 & 61 & -61 \end{bmatrix}$$

通过回代求解可得

$$x_3 = -1, \quad x_2 = 8 + 7x_3 = 1, \quad x_1 = -2 + 2x_2 - 2x_3 = 2.$$

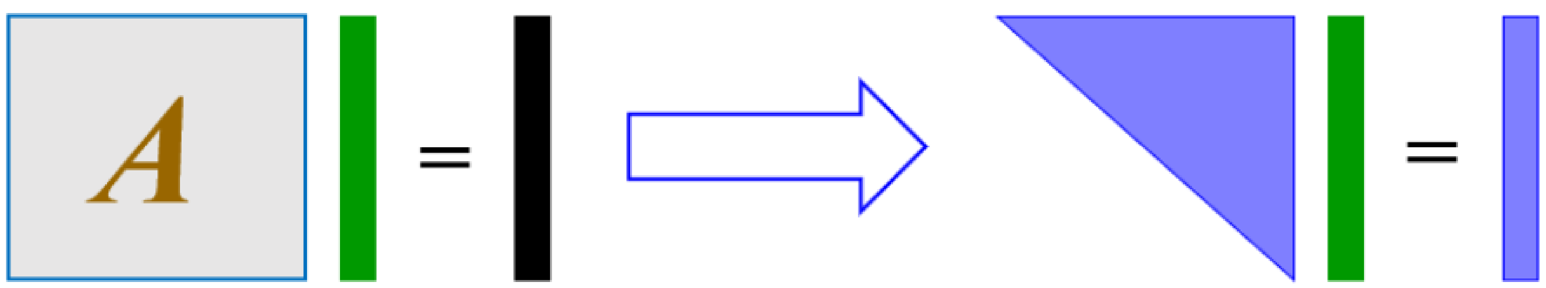
3.1 Gauss 消去法

- **推广到一般线性方程**

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

高斯消去法的主要思路:

将系数矩阵 A 化为上三角矩阵, 然后回代求解:



3.1 Gauss 消去法

◆ 高斯消去法也称为顺序消去法， 它由**消元过程**和**回代过程**组成。

► **消元过程**：逐步消去变元的系数，将原方程组化为系数矩阵为三角矩阵的等价方程组的过程。

► **回代过程**：求系数矩阵为三角矩阵的方程组的解的过程。

◆ 高斯消去法是**求解线性代数方程组**的一种最基本的直接法，由它改进后得到的**选主元消去法**是目前**计算机上常用的有效方法**。

3.1.1 Gauss 消去法详细执行过程

写出相应算法, 并编程实现. 记增广矩阵

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

其中

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}, \quad b_i^{(1)} = b_i, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n.$$

3.1.1 Gauss 消去法详细执行过程

第 1 步：消第 1 列.

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，计算 $m_{i1} = \dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $i = 2, 3, \ldots, n$. 对增广矩阵 $A^{(1)}$ 进行 $n-1$ 次初等变换, 即依次将 $A^{(1)}$ 的第 i 行 $(i > 1)$ 减去第 1 行的 m_{i1} 倍, 将新得到的矩阵记为 $A^{(2)}$, 即

$$A^{(2)} = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array}\right],$$

其中

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)}, \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)}, \quad i, j = 2, 3, \ldots, n.$$

3.1.1 Gauss 消去法详细执行过程

第 2 步: 消第 2 列.

设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$，计算 $m_{i2} = \dfrac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$, $i = 3, 4, \ldots, n$. 依次将 $A^{(2)}$ 的第 i 行 $(i > 2)$ 减去第 2 行的 m_{i2} 倍, 将新得到的矩阵记为 $A^{(3)}$, 即

$$A^{(3)} = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & & b_2^{(2)} \\ & & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & & b_3^{(3)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & & b_n^{(3)} \end{array}\right],$$

其中

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - m_{i2} a_{2j}^{(2)}, \quad b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - m_{i2} b_2^{(2)}, \quad i, j = 3, 4, \ldots, n.$$

3.1.1 Gauss 消去法详细执行过程

依此类推, 经过 $k-1$ 步后, 可得新矩阵 $A^{(k)}$:

$$A^{(k)} = \left[\begin{array}{ccccc|c} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{array}\right], \tag{1.1}$$

第 k 步: 消第 k 列.

设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 计算 $m_{ik} = \dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$, $i = k+1, \ldots, n$. 依次将 $A^{(k)}$ 的第 i 行 $(i > k)$ 减去第 k 行的 m_{ik} 倍, 将新得到的矩阵记为 $A^{(k+1)}$, 矩阵元素的更新公式为

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, \quad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, \quad i, j = k+1, k+2, \ldots, n. \tag{1.2}$$

3.1.1 Gauss 消去法详细执行过程

这样, **经过 $n-1$ 步后**, 即可得到一个上三角矩阵 $A^{(n)}$:

$$A^{(n)} = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{array}\right].$$

最后, **回代求解**

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}, \quad x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(i)}}\left(b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j\right), \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1.$$

以上就是 Gauss 消去法的整个计算过程.

- 由上面的计算过程可知, Gauss 消去法能顺利进行下去的**充要条件是$a_{kk}^{(k)} \neq 0$, k = 1, 2, . . . , n, 这些元素被称为 主元**.

3.1.1 Gauss 消去法详细执行过程

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 则所有主元 $a_{kk}^{(k)}$ 都不为零的充要条件是 A 的所有顺序主子式都不为零, 即

$$D_1 \triangleq a_{11} \neq 0, \quad D_k \triangleq \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \neq 0, \quad k = 2, 3, \ldots, n.$$

事实上, 如果 A 的所有顺序主子式都不为零, 则主元为

$$a_{11}^{(1)} = D_1, \quad a_{kk}^{(k)} = \frac{D_k}{D_{k-1}}, \quad k = 2, 3, \ldots, n.$$

◆ **推论** Gauss 消去法能顺利完成的充要条件是 **A 的所有顺序主子式都不为零。**

3.1.2 Gauss 消去法的复杂度

在第 k 步中，我们需要计算

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, i = k+1, \ldots, n \quad \rightarrow \quad n-k \text{ 次}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, i, j = k+1, \ldots, n \quad \rightarrow \quad (n-k)^2 \text{ 次}$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, i = k+1, \ldots, n \quad \rightarrow \quad n-k \text{ 次}$$

消元过程需要：

加、减法次数：$\frac{n(n^2-1)}{3}$

乘、除法次数：$\frac{n(n^2-1)}{3} + \frac{n(n-1)}{2}$

回代过程需要：

加、减法次数：$\frac{n(n-1)}{2}$

乘法次数：$\frac{n(n-1)}{2}$

除法次数：n

◆ **总运算量**：$\frac{2n^3}{3} + \frac{3n^2}{2} - \frac{7n}{6} = \frac{2n^3}{3} + O(n^2)$

3.1.2 Gauss 消去法的复杂度

- 计算次数分析过程

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

(1) 消元过程的计算量. 第一步计算乘数 m_{i1} $(i=2,3,\cdots,n)$ 需要 $n-1$ 次除法运算, 计算 $a_{ij}^{(2)}$ $(i,j=2,3,\cdots,n)$ 需要 $(n-1)^2$ 次乘法运算及 $(n-1)^2$ 次加、减法运算. 一般可列表(见表 7.1)计算.

表 7.1

第 k 步	加、减法次数	乘法次数	除法次数
1	$(n-1)^2$	$(n-1)^2$	$n-1$
2	$(n-2)^2$	$(n-2)^2$	$n-2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$n-1$	1	1	1
合 计	$n(n-1)(2n-1)/6$	$n(n-1)(2n-1)/6$	$n(n-1)/2$

这里利用了求和公式

$$\sum_{i=1}^{n} i = n(n+1)/2, \quad \sum_{i=1}^{n} i^2 = n(n+1)(2n+1)/6 \quad (n \geqslant 1).$$

消元过程所需的乘、除法次数 MD 及加、减法次数 AS 分别为

$$MD = n(n^2-1)/3, \quad AS = n(n-1)(2n-1)/6.$$

(2) 计算 $\boldsymbol{b}^{(n)}$ 的计算量.

$$MD=(n-1)+(n-2)+\cdots+2+1=n(n-1)/2, \quad AS=n(n-1)/2.$$

(3) 解 $\boldsymbol{A}^{(n)}x=\boldsymbol{b}^{(n)}$ 所需的计算量. $MD=n(n+1)/2$, $AS=n(n-1)/2$. 解式(7.2.1)所需的总的乘除法次数及加减法次数分别为

$$MD=n^3/3+n^2-n/3 \approx n^3/3 \quad (\text{当 } n \text{ 比较大时}),$$

$$AS=n(n-1)(2n+5)/6 \approx n^3/3 \quad (\text{当 } n \text{ 比较大时}).$$

定理 7.4 如果 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶非奇异矩阵, 则用 Gauss 消去法解式(7.2.1)所需乘除法次数及加减法次数分别为

1° $MD=n^3/3+n^2-n/3$;

2° $AS=n(n-1)(2n+5)/6$.

3.1.2 Gauss 消去法的复杂度

◆ 评价算法的一个重要指标是 **执行时间**, 但这依赖于计算机硬件和编程技巧等, 因此直接给出算法执行时间是不太现实的。所以我们通常是**统计算法中算术运算 (加减乘除) 的次数**。

◆ 为了尽可能地减少运算量, 在实际计算中, 数, 向量和矩阵做乘法运算时的先后执行次序为:

先计算数与向量的乘法,
然后计算矩阵与向量的乘法,
最后才计算矩阵与矩阵的乘法。

3.1.3 Gauss 消去法的计算步骤

◆消元过程在编程中，需要**三重循环**，即：

对于$k = 1$，2，…，n-1，

$i = k+1, k+2, \dots$， n，

计算：

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}};$$

对于$j = k+1, k+2, \dots$， n+1，

计算：

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - m_{ik} a_{kj}^{(k-1)}$$

◆回代过程在编程中，需要**二重循环**，即：

计算：

$$x_n = \frac{a_{n,n+1}^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}};$$

对于$i = n-1$，$n-2$，…，1，

$S = 0;$

$j = i+1, i+2, \dots$， n，

计算：

$$S = S + a_{ij}^{(i-1)} x_j;$$

$$x_i = \frac{a_{i,n+1}^{(i-1)} - S}{a_{ii}^{(i-1)}}$$

3.1.3 Gauss 消去法的计算步骤

◆ 用Gauss顺序消去法解方程组
$$\begin{cases} 2x_1+3x_2+4x_3=6, \\ 3x_1+5x_2+2x_3=5, \\ 4x_1+3x_2+30x_3=32. \end{cases}$$

解： 用箭头表示消元过程。

$$(A\vdots\vec{b})=\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 6 \\ 3 & 5 & 2 & 5 \\ 4 & 3 & 30 & 32 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 6 \\ \frac{3}{2} & \frac{1}{2} & -4 & -4 \\ 2 & -3 & 22 & 20 \end{array}\right)$$

$$\to \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 6 \\ \frac{3}{2} & \frac{1}{2} & -4 & -4 \\ 2 & -6 & -2 & -4 \end{array}\right)$$

从而得上三角形方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ & \frac{1}{2} & -4 \\ & & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -4 \\ -4 \end{pmatrix}$$

再由回代过程得其解：

$$x_3=2,\quad x_2=8,\quad x_1=-13$$

Demo_4_1_Gauss_S.m

3.1.3 Gauss顺序消去法劣势

- 由顺序消去法的消元过程可以看到，其不足之处是在消元时一定要假设主元素$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$，否则消元过程将无法进行下去。

- 如果主元素$a_{kk}^{(k-1)}$很小，由于计算机字长有限，必然有舍入误差等因素的影响，将使解极不 准确，甚至可能造成**溢出停机**。

3.1.4 Gauss完全主元素消去法

◆完全主元素消去法步骤：

1. 在执行 Gauss 消去过程的第 k 步之前，插入选主元过程。
2. 选取全主元：$\left|a_{i_k,j_k}^{(k)}\right| = \max\limits_{k\le i,j\le n}\{\left|a_{i,j}^{(k)}\right|\}$
3. 行交换：如果$i_k \neq k$，则交换第k行于第i_k行
4. 列交换：如果$j_k \neq k$，则交换第k列于第j_k列

* 如果有列交换，则会改变x_i的顺序，因此需要记录每次的列交换次序。

◆列主元素消去法步骤：

1. 在执行 Gauss 消去过程的第 k 步之前，插入选主元过程。
2. 选取**列主元**：$\left|a_{i_k,j_k}^{(k)}\right| = \max\limits_{k \le i \le n}\{\left|a_{i,k}^{(k)}\right|\}$
3. 行交换：如果$i_k \neq k$，则交换第k行于第i_k行

* 即第 k 步时，**先在$A^{(k)}$中第 k列的第 k至n的元素中选取绝对值最大的元素**：

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

* 然后根据需要判断是否需要**更换两行**。

每次都是做矩阵初等变换, 因此也可理解为不断地左乘初等矩阵. 将所有这些初等矩阵的乘积记为 $\tilde{L}$, 则可得 $\tilde{L}A = U$, 其中 U 是一个上三角矩阵. 记 $L \triangleq \tilde{L}^{-1}$, 则

$$A = LU,$$

这就是著名的矩阵 **LU 分解**.

* **矩阵分解：**将一个较复杂的矩阵分解成若干具有简单结构的矩阵的乘积，是矩阵计算中的一个很重要的技术。

- 假定Gauss消去过程能顺利进行，那么U一定是一个非奇异上三角矩阵。
- 下面主要研究 L 具有什么样的特殊结构或者特殊性质。

3.1.5 Gauss列主元素消去法

$$A^{(2)} = L_1 A^{(1)}$$

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & \\ -m_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & & 1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}$$

3.2 Gauss 消去法与矩阵三角(LU)分解

考察第 k 步的情形, 即 $A^{(k+1)}$ 与 $A^{(k)}$ 之间的关系式. 由 Gauss 消去过程 (1.2) 可得

$$A^{(k+1)} = L_k A^{(k)},$$

其中

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \; i = k+1, \ldots, n. \qquad (1.3)$$

令 $k = 1, 2, \ldots, n-1$, 并将所有 Gauss 消去过程结合在一起即可得

$$A^{(n)} = L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_1 A^{(1)},$$

即

$$A = A^{(1)} = (L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_1)^{-1} A^{(n)}.$$

引理 1.1

$$L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad L_1^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ m_{21} & 1 & & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & & \\ m_{41} & m_{42} & m_{4,3} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix},$$

记 $L \triangleq L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}$, $U \triangleq A^{(n)}$, 则

$$A = LU. \tag{1.4}$$

由引理 1.1 可知 L 是单位下三角矩阵, U 是非奇异上三角矩阵.

- 如果 A 的所有顺序主子式都不为零, 则 Gauss 消去过程能顺利进行, 因此， LU 分解 (1.4) 也存在.

定义 $m\times n$ 矩阵 A 的前 $p\left(1\le p\le \min\{m,n\}\right)$ 行和前 p 列相交处的 p^2 个元素组成的矩阵称为 A 的 p **阶顺序主子矩阵**，A 的 p 阶顺序主子矩阵的行列式称为 A 的 p **阶主子行列式**，简称 p **阶主子式**，记为 $\det\left(A_p\right)$

引理 设用 m 阶单位下三角方阵 L 左乘 $m\times n$ 阶矩阵 A 得矩阵 B，则矩阵 A 和矩阵 B 的 p 阶主子式相等。

证： 将单位下三角阵 L 和矩阵 A,B 写成分块的形式：

$$L=\begin{pmatrix} L_{11} & O \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix},\quad B=\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix},$$

其中，L_{11},A_{11},B_{11} 分别为 L,A,B 的 p 阶主子矩阵。由假设 $LA=B$，有

3.2.1 矩阵的杜立特尔分解

证（续）：$$\begin{pmatrix} L_{11} & O \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix},$$

按照分块矩阵的乘法规则可得

$L_{11}A_{11} = B_{11}$，于是有

$$\det(B_{11}) = \det(L_{11}A_{11}) = \det(L_{11})\det(A_{11}) = \det(A_{11}).$$

3.2.1 LU 分解的存在性和唯一性

定理 (LU 分解的存在性和唯一性) 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. 则存在唯一的单位下三角矩阵 L 和非奇异上三角矩阵 U, 使得 $A = LU$ 的充要条件是 A 的所有顺序主子矩阵 $A_k = A(1:k, 1:k)$ 都非奇异, $k = 1, 2, \ldots, n$.

等价于

矩阵 A 的各阶顺序主子式 $\det(A_k) \neq 0$

- 上述**定理**是矩阵三角分解的基本定理，分解式$\boldsymbol{A = LU}$称为矩阵的杜立特尔（Doolittle）分解，也称为A的LU分解。

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ m_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & 1 & \\ m_{n1} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

3.2.1 LU 分解的存在性和唯一性

定理 (LU 分解的存在性和唯一性) 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. 则存在唯一的单位下三角矩阵 L 和非奇异上三角矩阵 U, 使得 $A = LU$ 的充要条件是 A 的所有顺序主子矩阵 $A_k = A(1:k, 1:k)$ 都非奇异, $k = 1, 2, \ldots, n$.

◆ LU分解定理在解线性代数方程组的直接法中起着重要的作用，它是直接法的理论基础。

◆ 利用矩阵$A = LU$,容易计算A的行列式$\det(A)$。

$\det(A) = \det(\mathrm{LU}) = \det(\mathrm{L})\det(\mathrm{U}) = \det(\mathrm{U}) = u_{11}u_{12}\cdots u_{nn}$,

其中$u_{ii}(i = 1,2,\cdots n)$为上三角矩阵U对角线上的元素。

3.2.2 Gauss 消去法与矩阵三角(LU)分解

◆对于方程组$A\vec{x}=\vec{b}$，若A满足**定理**的条件，即$A=LU$。

则方程组$A\vec{x}=\vec{b}$等价为$LU\vec{x}=\vec{b}$。

◆**令$U\vec{x}=\vec{y}$，则$L\vec{y}=\vec{b}$。**则方程组**$A\vec{x}=\vec{b}$的解归结为求两个三角形方程组$\begin{cases} L\vec{y}=\vec{b} \\ U\vec{x}=\vec{y} \end{cases}$的解。**

***LU*分解在本质上是高斯消去法的一种表达形式。**

◆再因$L^{-1}\left(A\middle|\vec{b}\right)=L^{-1}(LU|\vec{y})=(U|\vec{y})$，故求$\vec{y}$和求$U$同时进行。

* **消元过程是将方程组的增广矩阵$\left(A\middle|\vec{b}\right)$进行$LU$分解的过程，即：$\left(A\middle|\vec{b}\right)=L(U|\vec{y})$.**

* **回代过程是求上三角形方程组$U\vec{x}=\vec{y}$的解。**

例 用直接三角分解(Doolittle)法解方程组

$$\begin{cases} 2x_1+3x_2+4x_3=6, \\ 3x_1+5x_2+2x_3=5, \\ 4x_1+3x_2+30x_3=32. \end{cases}$$

解：

$$(A|\vec{b})=\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 4 & 6 \\ 3 & 5 & 2 & 5 \\ 4 & 3 & 30 & 32 \end{array}\right)$$

给出：$L=\begin{pmatrix} 1 & & \\ \frac{3}{2} & 1 & \\ 2 & -6 & 1 \end{pmatrix}, U=\begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 \\ & \frac{1}{2} & -4 \\ & & -2 \end{pmatrix}, \vec{y}=\begin{pmatrix} 6 \\ -4 \\ -4 \end{pmatrix}$

由$\left(A|\vec{b}\right)=L(U|\vec{y})$，再由$U\vec{x}=\vec{y}$得方程组的解，

$x_3=2, x_2=8, x_1=-13.$

注：求解L和U的过程后面给出。

◆ 设方程组 $A\vec{x}=\vec{b}$ 的系数矩阵 A 的各阶主子式 $\det(A_k)\neq 0$，$(k=1,2,\cdots,n)$。则由定理得，存在唯一Doolittle分解 $A=LU$，其中

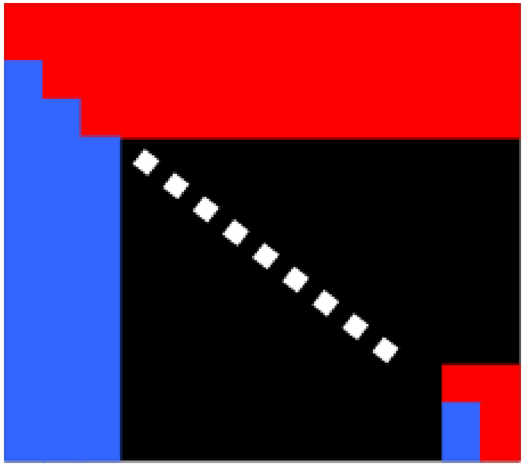
$$L=\begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & 1 & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}, U=\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

◆ 杜立特尔分解法是根据系数矩阵A的元素直接计算L和U的元素来进行分解的方法。

◆ **计算顺序：**

1. 求U的第1行和L的第1列元素；
2. 求U的第2行和L的第2列元素；
3. ……
4. 以此类推，直到求出U的第n行元素。



3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

由矩阵的乘法规则可知，矩阵 A 的第 i 行和第 j 列元素 a_{ij} 等于矩阵 L 的第 i 行 $(l_{i1},\cdots,l_{ii},0,\cdots,0)$ 乘以矩阵 U 的第 j 列 $(u_{1j},\cdots,u_{jj},0,\cdots,0)^T$，

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2j} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & \boxed{a_{ij}} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ l_{21} & 1 & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ l_{i1} & l_{i2} & \cdots & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nj} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1j} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2j} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots \\ & & & u_{jj} & \cdots & u_{in} \\ & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$a_{ij} = \sum_{p=1}^{\min(i,j)} l_{ip}u_{pj},\quad i=1,2,\cdots,n,\quad j=1,2,\cdots,n$$

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

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

- 计算 U 第1行：

$$a_{1j} = u_{1j}, \ j = 1,2,\cdots,n \Rightarrow \boxed{u_{1j} = a_{1j}, \ j = 1,2,\cdots,n}$$

- 计算 L 第1列：

$$a_{i1} = l_{i1}u_{11}, \ i = 1,2,\cdots,n \Rightarrow \boxed{l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}, \ i = 1,2,\cdots,n}$$

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

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

- 计算U第2行：

$$a_{2j} = l_{21}u_{1j} + u_{2j}, \quad j = 2, \cdots, n \Rightarrow$$

$$\boxed{u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}, \quad j = 1, 2, \cdots, n}$$

- 计算L第2列：

$$a_{i2} = l_{i1}u_{12} + l_{i2}u_{22}, \quad i = 3, \cdots, n \Rightarrow$$

$$\boxed{l_{i2} = \frac{a_{i2} - l_{i1}u_{12}}{u_{22}}, \quad i = 3, \cdots, n}$$

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

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

- 计算 U 第 k 行：

$$a_{kj} = (l_{k1}, \quad l_{k2}, \quad \cdots, \quad l_{kk-1}, \quad 1, \quad 0, \quad \cdots \quad 0) \begin{pmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{jj} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{p=1}^{k-1} l_{kp} u_{pj} + u_{kj}, \quad j = k, k+1, \cdots, n$$

$$\Longrightarrow \boxed{u_{kj} = a_{kj} - \sum_{p=1}^{k-1} l_{kp} u_{pj}, \quad j = k, k+1, \cdots, n}$$

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

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

- 计算 L 第 k 列：

$$a_{ik} = (l_{i1}, \quad l_{i2}, \quad \cdots, \quad l_{ik-1}, \quad 1, \quad 0, \quad \cdots \quad 0) \begin{pmatrix} u_{1k} \\ u_{2k} \\ \vdots \\ u_{jk} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{p=1}^{k-1} l_{ip} u_{pk} + l_{ik} u_{kk}, \quad i = k+1, k+2, \cdots, n$$

$$\Rightarrow \boxed{l_{ik} = \frac{a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} l_{ip} u_{pk}}{u_{kk}}, \quad i = k+1, k+2, \cdots, n}$$

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

- 由上述式子，可得计算矩阵 U 的第 k 行$(k=2,3,\cdots,n)$ 和 L 的第 k 列$(k=2,3,\cdots,n-1)$的计算公式如下：

$$\begin{cases} u_{kj}=a_{kj}-\sum_{p=1}^{k-1} l_{kp}u_{pj}, & j=k,k+1,\cdots,n, \\ l_{ik}=\dfrac{a_{ik}-\sum_{p=1}^{k-1} l_{ip}u_{pk}}{u_{kk}}, & i=k+1,k+2,\cdots,n \end{cases}$$

- 综上所述，**利用杜立特尔分解法求解方程组** $A\vec{x}=\vec{b}$ ，只需在 $A=LU$ 分解的基础上，依次求解三角形方程组 $L\vec{y}=\vec{b}$, $U\vec{x}=\vec{y}$ 即可。

◆计算步骤：

- 杜立特尔分解法的计算步骤如下：

1. 利用公式求出 U 和 L 的元素 u_{ki} 和 l_{ik}
2. 求解单位下三角形方程组 $L\vec{y}=\vec{b}$，即按公式

$$\begin{cases} y_1 = b_1, \\ y_k = b_k - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj} y_j, \quad k = 2,3,\cdots,n \end{cases}$$

求出 $y_1, y_2, \cdots, y_n$。

◆计算步骤：

3. 求解上三角形方程组 $U\vec{x}=\vec{y}$，即按公式

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{y_n}{u_{nn}}, \\ x_k = \dfrac{y_k - \sum\limits_{j=k+1}^{n} u_{kj}x_j}{u_{kk}}, \quad k = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

可求得方程组的解 $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$。

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

- **例** 用杜立特尔分解法解 $A\vec{x}=\vec{b}$，并求 $\det(A)$，

其中 $A=\begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 4 & 1 & 12 \\ -2 & -4 & 5 \end{pmatrix}$, $\vec{b}_1=\begin{pmatrix} 11 \\ 27 \\ 12 \end{pmatrix}$, $\vec{b}_2=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -3 \end{pmatrix}$

- **解：** 按公式计算 U 的第1行和 L 的第1列元素，有

$$u_{11}=2,\ \ u_{12}=1,\ \ u_{13}=5;$$

$$l_{21}=\frac{a_{21}}{u_{11}}=2,\ \ l_{31}=\frac{a_{31}}{u_{11}}=-1.$$

再计算 U 的第2行元素：

$$u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}=-1,\ \ u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}=2$$

Demo_4_2_Doolittle.m

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

解（续）： 再计算 L 的第2列元素：$l_{32}=\dfrac{a_{32}-l_{31}u_{12}}{u_{22}}=3$

最后计算 U 的第3列元素：

$$u_{33}=a_{33}-\left(l_{31}u_{13}+l_{32}u_{23}\right)=4$$

从而完成了 $A=LU$ 分解，

$$L=\begin{pmatrix}1 & & \\ 2 & 1 & \\ -1 & 3 & 1\end{pmatrix},\ U=\begin{pmatrix}2 & 1 & 5\\ & -1 & 2\\ & & 4\end{pmatrix}.$$

$$\det(A)=\det(U)=u_{11}u_{22}u_{33}=-8$$

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

解（续）： 求解方程组 $L\vec{y}_1=\vec{b}_1$，得解：

$$y_{11}=11,\quad y_{12}=5,\quad y_{13}=8;$$

求解方程组 $U\vec{x}_1=\vec{y}_1$，得解：

$$x_{13}=2,\quad x_{12}=-1,\quad x_{11}=1.$$

求解方程组 $L\vec{y}_2=\vec{b}_2$，得解：

$$y_{21}=1,\quad y_{22}=-2,\quad y_{23}=4;$$

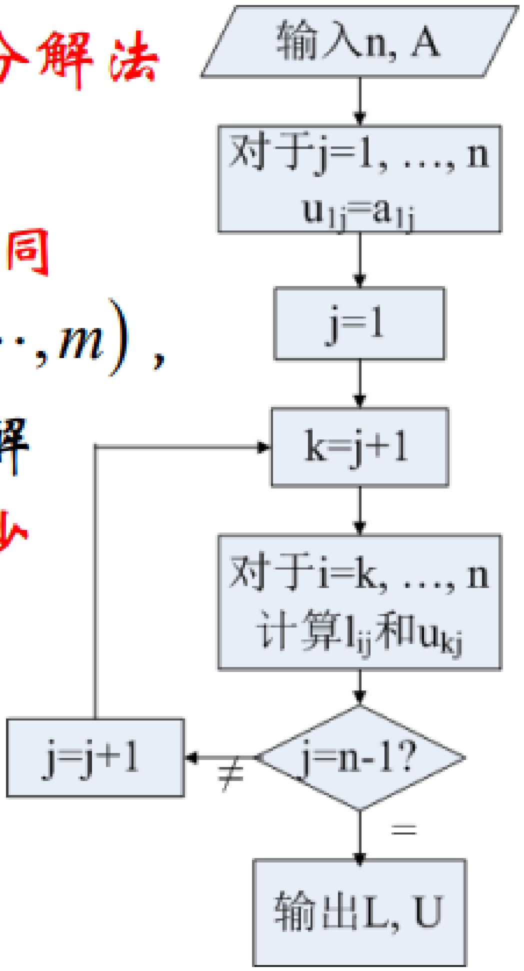
求解方程组 $U\vec{x}_2=\vec{y}_2$，得解：

$$x_{23}=1,\quad x_{22}=4,\quad x_{21}=-4.$$

3.2.3 杜立特尔(Doolittle)分解法

- 杜立特尔分解法也称为直接三角分解法
- 主要优点：

1. 在实现 $A=LU$ 分解后，解具有相同系数矩阵的方程组 $A\vec{x}=\vec{b}_i(i=1,2,\cdots,m)$，非常方便，每解一个方程组只需解两个三角形方程即可，大大地减少了运算工作量。
2. 矩阵 L 和 U 的元素可采用紧凑格式存放在系数矩阵 A 的相应元素的位置上，节省了存储单元。



- Q & A
- 谢谢