线性方程组的直接法

李小舟

xiaozhouli@uestc.edu.cn
http://xiaozhouli.com

问题

- 如何求解线性方程组？

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

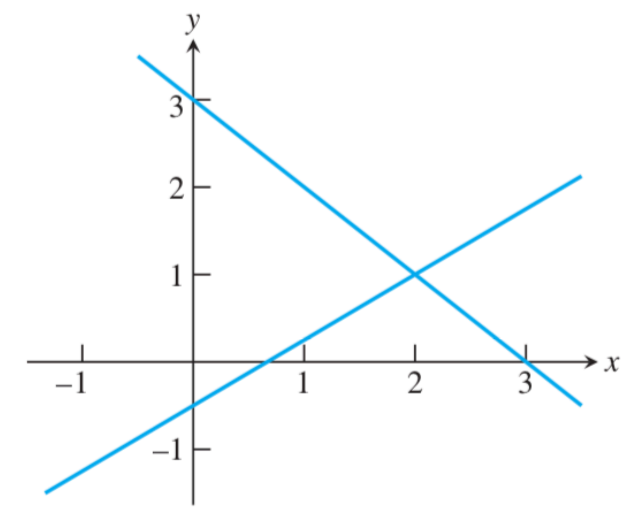
- 求解方法的效率（计算复杂度）？

线性方程组的矩阵形式$Ax = b$

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

例 求解线性方程组

$$x + y = 3$$
$$3x - 4y = 2$$



Geometric solution of a system of equations. Each equation corresponds to a line in the plane. The intersection point is the solution.

例　矩阵H_n，其元素$H_n(i,j)=1/(i+j-1)$

$$H_n=\begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/n \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & \cdots & 1/(n+2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1/n & 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n-1) \end{pmatrix}$$

难度在哪里？

- 线性方程组的规模 $n = ?$
  - 二维微分方程求解 $n \approx 10^4, 10^5$
  - 飞机设计模拟 $n \approx 10^6, 10^7$
  - 心脏数值模拟 $n \approx 10^8, 10^9$
- 大规模代数系统的求解是科学与工程计算的基础和关键，其计算量也占有非常大的比重，有的甚至占整个计算的80%上！

理论上的方法

（Cramer法则）设n阶A矩阵可逆，则

$$x_j = \frac{\det A_j}{\det A} \quad (j = 1,2,\cdots,n)$$

- 计算n阶矩阵行列式的乘法次数$(n-1)n!$
- 若$n=20$，则$(n-1)n! \approx 4.6 \times 10^{19}$
- 单核处理器每秒计算能力约10^9次

线性方程组的直接法

- 高斯消元法
- 列主元消元法
- 直接三角分解法
- 误差估计 — 向量和矩阵范数

高斯消元法

高斯消元法

- 高斯消元法
- 计算复杂度
- LU分解

例 求解

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

思路

- 化为上三角线性方程组

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
\cdots \\
a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

- 当然假设$a_{11}a_{22}\cdots a_{nn} \neq 0$

高斯消元法

第一轮消元

假设$a_{11} \neq 0$, 取$m_{i1} = a_{i1}/a_{11}$, $i = 2,3,\ldots,n$.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

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

高斯消元法

第k轮消元

假设$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, 取

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

更新

其中
$$\begin{aligned} a_{ij}^{(k)} &= a_{ij}^{(k-1)} - m_{ik} a_{kj}^{(k-1)}, \quad i,j = k+1,\ldots,n \\ b_i^{(k)} &= b_i^{(k-1)} - m_{ik} b_k^{(k-1)}, \quad i = k+1,\ldots,n \end{aligned}$$

高斯消元法

第k轮消元后

$$\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\
 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\
 & & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} & b_k^{(k-1)} \\
 & & & & \vdots & \vdots & \\
 & & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} & b_n^{(k-1)}
\end{pmatrix}$$

高斯消元法

第$n-1$轮消元后

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} & b_n^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

高斯消元法

程序片段

```
for j = 1 : n-1
  if abs(a(j,j))<eps; error('zero pivot encountered'); end
  for i = j+1 : n
    mult = a(i,j)/a(j,j);
    for k = j+1:n
      a(i,k) = a(i,k) - mult*a(j,k);
    end
    b(i) = b(i) - mult*b(j);
  end
end
```

高斯消元法

求解上三角线性方程组

- 回代\向后求解法

$$x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{n-1}^{(n-1)}}$$

$$x_k = \frac{b_k^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k-1)} x_j}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad k = n-1, \ldots, 1$$

高斯消元法

高斯消元法的复杂度

- 消元部分$\mathcal{O}(n^3)$
- 向后求解法部分$\mathcal{O}(n^2)$
- 直接使用高斯消元法求解关于n个未知数的n个方程的计算复杂度为$\mathcal{O}(n^3)$

高斯消元法的矩阵形式

设 $A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{pmatrix}$

- 如何表示消元过程$A^{(k-1)} \rightarrow A^{(k)}$

高斯消元法的矩阵形式

- $A^{(k)} = F_k A^{(k-1)}$，其中

$$F_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}$$

- F_k称为Frobenius矩阵

高斯消元法的矩阵形式

- F_k为一系列初等变换矩阵乘积，且

$$F_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & m_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}$$

高斯消元法的矩阵形式

- $A^{(n-1)} = F_{n-1} \cdots F_2 F_1 A$,
- $A = F_1^{-1} F_2^{-1} \cdots F_{n-1}^{-1} A^{(n-1)}$
- 令$L = F_1^{-1} F_2^{-1} \cdots F_{n-1}^{-1}$，$U = A^{(n-1)}$，则有

$$A = LU$$

矩阵的LU分解

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

- 即矩阵A可以写成单位下三角形矩阵L与上三角形矩阵U的乘积
- 这就是矩阵的LU分解

矩阵的LU分解

- 高斯消元法本质是矩阵的LU分解，其紧凑形式可写为

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

例　求矩阵A的LU分解。

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

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 4 \\ 2 & 0 & 4 & 3 \\ 4 & 2 & 2 & 1 \\ -3 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 4 \\ 2 & -4 & 2 & -5 \\ 4 & -6 & -2 & -15 \\ -3 & 7 & 6 & 14 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 4 \\ 2 & -4 & 2 & -5 \\ 4 & 3/2 & -5 & -7.5 \\ -3 & -7/4 & 19/2 & 21/4 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 4 \\ 2 & -4 & 2 & -5 \\ 4 & 3/2 & -5 & -7.5 \\ -3 & -7/4 & -19/10 & -9 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 4 & 3/2 & 1 & \\ -3 & -7/4 & -19/10 & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 4 \\ & -4 & 2 & -5 \\ & & -5 & -7.5 \\ & & & -9 \end{pmatrix}$$

矩阵的LU分解

- LU分解的复杂度？
- 如何求解$LUx = b$?
  - 分解为如下两步

$$LUx = b \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

- 为什么进行LU分解？

为什么进行LU分解？

- 现假设需要求解一组不同的问题，其中A相同，但是b不同，即

$$
\begin{gathered}
Ax = b_1 \\
Ax = b_2 \\
\vdots \\
Ax = b_k
\end{gathered}
$$

- LU分解使得有效进行高斯消元问题前进了一大步。

所有的矩阵都能进行LU分解？

- 一个简单的例子

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

- 什么样的矩阵能进行LU分解？
  - 约化主元$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0, \; k = 1, \ldots, n$

LU分解的充要条件

定理3.1 约化主元$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0,\ k=1,\ldots,n$的充分必要条件是矩阵$A$各阶顺序主子式不等于零。即

$$D_k = \det\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{pmatrix} \neq 0 \quad k=1,\ldots,n$$

LU分解的唯一性

定理 如果矩阵A的顺序主子式均不为零，则A可以分解为一个单位下三角矩阵L和一个上三角矩阵U的乘积且分解是唯一的。

谢谢！