线性方程组的直接法

李小舟

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

高斯消元法的缺陷

- 如果不能LU分解，怎么求解$Ax = b$?

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

高斯消元法的缺陷

- 考虑方程组

$$10^{-20}x_1 + x_2 = 1$$
$$x_1 + 2x_2 = 4$$

  - 精确解？
  - 双精度进行高斯消元求解？

高斯消元法的缺陷

- 0主元
- 淹没问题（乘子过大）
- 对于一个非奇异矩阵，二者均可通过改进算法进行避免，改进策略的重点是交换系数矩阵的行。

列主元消元法

列主元消元法

列主元包含在每一步消元步骤之前的比较。在第k轮消元时，

- 找到第p行，$k \le p \le n$，定位最大$|a_{pk}|$
- 必要时交换第p行和第k列，然后继续进行消元

XIAOZHOU

例 使用列主元消元法求解方程组。

$$
\begin{aligned}
x_1 - x_2 + 3x_3 &= -3 \\
-x_1 - 2x_3 &= 1 \\
2x_1 + 2x_2 + 4x_3 &= 0
\end{aligned}
$$

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

$$
\Longrightarrow \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 & | & 0 \\ 0 & -2 & 1 & | & -3 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & | & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}
$$

列主元消元法

- 列主元消元法保证所有乘子，或者L的元素的绝对值不大于1。可以避免淹没问题。
- 列主元消元法也可以解决0主元问题
- 列主元消元法与LU分解？

置换矩阵

定义　置换矩阵是一个$n \times n$的矩阵，其在每一行、每一列仅有一个1，其他全部为0。

定理　令P是通过对单位矩阵实施一组特定的行交换后得到的置换矩阵，则对于任意的$n \times n$矩阵A，PA对应于矩阵A实施同样的行交换得到的结果。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ g & h & i \\ d & e & f \end{pmatrix}$$

$PA=LU$分解

- 将高斯消元法的一切组合起来，进行$PA=LU$分解，即为列主元消元的矩阵形式。
- $PA=LU$分解是求解线性方程组的主要方法。
- $PA=LU$是对于矩阵A包含行交换的LU分解。如何记录行置换的信息？

$PA = LU$分解

例　给出矩阵A的$PA = LU$分解

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

直接三角分解法

Doolittle分解法

- $A = LU, L$是一个单位下三角矩阵，U是一个上三角矩阵
- 是否能够不通过高斯消元得到L和U?

Doolittle分解法

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

$$a_{11} = u_{11}, \cdots, a_{1n} = u_{1n}$$
$$a_{21} = m_{21}u_{11}, \ldots, a_{n1} = m_{n1}u_{11}$$

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

$$m_{21}u_{12} + u_{22} = a_{22}, \ \ldots, m_{21}u_{1n} + u_{2n} = a_{2n}$$
$$u_{22} = a_{22} - m_{21}u_{12}, \ \ldots, u_{2n} = a_{2n} - m_{21}u_{1n}$$
$$m_{31}u_{12} + m_{32}u_{22} = a_{32}, \ \ldots, m_{n1}u_{12} + m_{n2}u_{22} = a_{n2}$$
$$m_{32} = \left(a_{32} - m_{31}u_{12}\right)/u_{22}, \ \ldots, m_{n2} = \left(a_{n2} - m_{n1}u_{12}\right)/u_{22}$$

- 如此一行一列的进行计算
- 对A的元素a_{ij}，当$j \geq k$和$i \geq k$时

$$a_{kj} = \sum_{r=1}^{k-1} m_{kr}u_{rj} + \left(u_{kj}\right) \qquad a_{ik} = \sum_{r=1}^{k-1} m_{ir}u_{rk} + m_{ik}u_{kk}$$

矩阵L和矩阵U的计算公式

$$u_{kj} = a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} m_{kr}u_{rj} \quad m_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} m_{ir}u_{rk}\right)/u_{kk}$$

计算次序

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

例 求矩阵的Doolittle分解

$$A=\begin{pmatrix}2&4&4&2\\3&3&12&6\\2&4&-1&2\\4&2&1&1\end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3 & 3 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & -1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & 3 & 12 & 6 \\ 1 & 4 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3/2 & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -5 & 0 \\ 2 & 2 & 19/5 & -9 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 3/2 & 1 & & \\ 1 & 0 & 1 & \\ 2 & 2 & 19/5 & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ & -3 & 6 & 3 \\ & & -5 & 0 \\ & & & -9 \end{pmatrix}$$

Crout分解法

- $A=\bar{L}\bar{U}, \bar{L}$是一个下三角矩阵，$\bar{U}$是一个单位上三角矩阵
- 是否也能够得到$\bar{L}$和$\bar{U}$?

Crout分解法

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

$$=\begin{pmatrix} \bar{l}_{11} & & & \\ \bar{l}_{21} & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ \bar{l}_{n1} & \cdots & \bar{l}_{n,n-1} & \bar{l}_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \bar{u}_{12} & \cdots & \bar{u}_{1n} \\ & 1 & \cdots & \bar{u}_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Crout分解法

- 一列一行的进行计算

$$\bar{l}_{ik} = a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} \bar{l}_{ir}\bar{u}_{rk}$$

$$\bar{u}_{kj} = \left(a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} \bar{l}_{kr}\bar{u}_{kj} \right) / \bar{l}_{kk}$$

三对角矩阵分解

- 三对角方程组

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}$$

Poisson方程

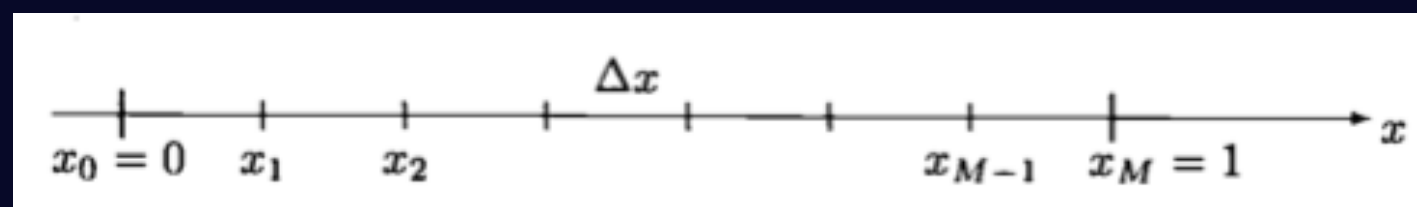
- Poisson方程

$$\begin{cases} -u_{xx} = f(x), \quad 0 < x < 1 \\ u(0) = 0,\ u(1) = 1 \end{cases}$$

- 静电学、波动问题等等
- 如何进行数值求解？

Poisson方程的有限差分法

- 构造一个均匀网格$x_j = j\Delta x, \Delta x = 1/M$



- 在网格点x_j上对函数$u(x_j)$进行逼近

$$u(x_j) \approx u_j, \quad j = 0, \ldots, M$$

- 边界条件$u_0 = 0,\ u_1 = 1$。

- 用差分替代微分

$$f(x_j) = -u_{xx}(x_j) \approx \frac{-u_{j-1} + 2u_j - u_{j+1}}{\Delta x^2}$$

- 在网格点x_j上对函数$u(x_j)$进行逼近

$$\frac{1}{\Delta x^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{M-2} \\ u_{M-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 + u_0 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{M-2} \\ f_{M-1} + u_M \end{pmatrix}$$

- 三对角方程组求解

例 求矩阵$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{pmatrix}$的$LU$分解

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 3 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1/2 & 5/2 & -2 & \\ & -2 & 4 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1/2 & 5/2 & -2 & \\ & -4/5 & 12/5 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1/2 & 5/2 & -2 & \\ & -4/5 & 12/5 & -2 \\ & & -3 & 5 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -1/2 & 1 & & \\ & -4/5 & 1 & \\ & & -5/4 & 1 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ & 5/2 & -2 & \\ & & 12/5 & -2 \\ & & & 5/2 \end{pmatrix}$$

三对角矩阵的LU分解

$$
\begin{pmatrix}
\blacksquare & \blacksquare & & & \\
\blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\
 & & & \blacksquare & \blacksquare
\end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix}
1 & & & & \\
\blacksquare & 1 & & & \\
 & \ddots & \ddots & & \\
 & & \blacksquare & 1 & \\
 & & & \blacksquare & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\blacksquare & \blacksquare & & & \\
 & \blacksquare & \blacksquare & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & \blacksquare & \blacksquare \\
 & & & & \blacksquare
\end{pmatrix}
$$

三对角矩阵的LU分解

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \beta_1 & c_1 & & & \\ \alpha_2 & \beta_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & \alpha_n & \beta_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} \beta_1 = b_1 \\ \alpha_k = \dfrac{a_k}{\beta_{k-1}}, \ \beta_k = b_k - \alpha_k c_{k-1}, \ k = 2, \ldots, n \end{cases}$$

三对角矩阵的LU分解

- 求解$Ly = f$

$$\begin{cases} y_1 = f_1 \\ y_k = f_k - \alpha_k y_{k-1},\ k = 2,\ldots,n \end{cases}$$

- 求解$Ux = y$

$$\begin{cases} x_n = y_n\beta_n \\ x_k = (y_k - c_k x_{k+1})/\beta_k,\ k = n-1,\ldots,1 \end{cases}$$

- 计算复杂度？

三对角矩阵的LU分解

- 计算复杂度为$\mathcal{O}(n)$
- LU分解是求解三对角方程组的最优方法
- 这个结论可以推广到d对角矩阵
- $PA = LU$分解？

谢谢！