4.2 直接三角分解法

4.2 直接三角分解法

4.2.1 一般矩阵的直接三角分解法

本节讨论矩阵A的三角分解法的直接计算以及直接利用A的三角分解式来求解方程组。

1.不选主元的三角分解法

设$A=LU$，记 $A=(a_{ij}), L=(l_{ij}), U=(u_{ij})$, 其中$L$为单位下三角阵，U为上三角阵。我们可直接给出$L$和$U$的元素的计算公式。

由A的第1行和第1列可计算出U的第1行和L的第1列，即

$$u_{1j}=a_{1j}, j=1,2,\cdots,n, \tag{4.2.1}$$

$$l_{k1}=\frac{a_{k1}}{u_{11}}, k=2,3,\cdots,n. \tag{4.2.2}$$

如果U的第1至k-1列和L的第1至k-1列已经算出，则由

$$a_{kj}=\sum_{r=1}^{k} l_{kr}u_{rj}, j=k,k+1,\cdots,n,$$

可得**U**的第**k**行元素

$$u_{kj}=a_{kj}-\sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj} \quad ,j=k,k+1,\cdots,n。 \qquad (4.2.3)$$

同理，由

$$a_{kj}=\sum_{r=1}^{k} l_{ir}u_{rk} \quad ,i=k+1,k+2,\cdots,n,$$

可得**L**的第**k**列元素

$$l_{ik}=(a_{ik}-\sum_{r=1}^{k} l_{ir}u_{rk})/u_{kk} \quad ,i=k+1,k+2,\cdots,n。$$

交替使用（**4.2.3**）和（**4.2.4**），就能逐次计算出**U**（按行）和**L**（按列）的全部元素，而且可以把它们存放在矩阵**A**对应的位置上（**L**的对角线元素不必存放）。这就完成了**A**的**LU**分解。

由（**4.2.1**）-（**4.2.4**）求得**L**和**U**后，解方程组**Ax=b**接化接为求解**LUx=b**，若记**Ux=y**，则有**Ly=b**。于是可分两部解方程组**LUx=b**，只要琢次向前代入的方法即可求得**y**。第二步求解**Ux=y**，只要琢次

用向后回代的方法即可求得x。设x=（x1， x2， … xn) T, y=（y1, y2, … yn) T,b= （b1， b2， … bn) T, 则有计算公式

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - \sum_{r=1}^{i-1} l_{ir} y_r, i = 1, 2, \ldots, n \end{cases} \quad (4.2.5)$$

$$\begin{cases} x_n = y_n / u_{nn} \\ x_i = \left(y_i - \sum_{r=i+1}^{n} u_{ir} x_r \right) / u_{ii}, i = n-1, n-2, \ldots, 1 \end{cases} \quad (4.2.6)$$

以上解方程组的计算与顺序Gauss消去法相当。如果有一系列方程组，其系数距阵都是相同的，右端向量b不同，则只须进行一次LU分解计算。上述解方程的方法称为LU分解法，也称Doolittle方法。

例4.5　　用LU分解法求解

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 4 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -1 \\ 5 \\ -5 \end{pmatrix}$$

解　由（4.2.1）-（4.2.4）计算可得

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ \frac{1}{3} & 1 & & \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{5} & 1 & \\ -\frac{1}{6} & \frac{1}{10} & -\frac{9}{3} & 1 \end{pmatrix}, u = \begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 & 4 \\ & \frac{10}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ & & \frac{37}{10} & -\frac{9}{10} \\ & & & \frac{191}{74} \end{pmatrix}$$

由（4.2.5）计算得

$y=(6,3,23/5,-191/74)^T$

由（4.2.6）计算得

$x=(1,-1,1,-1)^T$

2.列选主元的三角分解法

设从A=A（1）开始已完成k-1步分解计算，U的元素（按行）和L的元素（按列）存放在A的位置，得到

$$\tilde{A}=\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & l_{32} & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & u_{k-1,k-1} & \cdots & \cdots & u_{k-1,n} \\ \vdots & \vdots & & l_{k,k-1} & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,k-1} & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}$$

该矩阵与顺序Gauss消去法中得到的A（k）是不同的，这种存储方式的形式称为紧凑形式。

现做第k行计算，令

$$s_i = a_{ik}^{(k)} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}, i = k, k+1, \cdots, n$$

当i=k时， s_i对应于（4.2.3）中的u_{kk}，它可能不宜在（4.2.4）作除法。
当i=k+1,k=2,….n， s_i对应于（4.2.4）中的分子。记

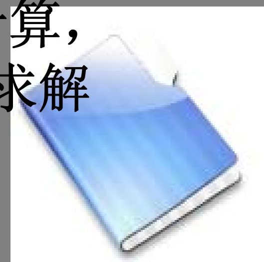
$$|s_{ik}| = \max_{k \le i \le n} |s_i|,$$

交换$(\tilde{A}^{(k)}, b^{(k)})$的第i行与第$i_k$行的位置，但每个位置上仍用原记号。然后仍按（4.2.3）计算$u_{kj}, j = k+1, k+2, \cdots, n$，算出U的第k行。的计算可用

$$l_{ik} = \frac{s_i}{s_{ik}}, i = k+1, k+2, ..., n$$

这就算出了L的第k行。

以上分解过程经过n-1步，可得PA=LU，因为b也参加换行计算，所以在其位置上得到Pb。最后再分两步求解方程组LUx=Pb，即求解Ly=Pb和Ux=y。



例4.6　用列选主元的三角分解法解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 5 \\ 2 & 5 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 20 \\ 18 \end{pmatrix}$$

解　第一步用列选主元后的分解计算结果

$$(\tilde{A}^{(2)}, b^{(2)}) = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 5 & 20 \\ 1/3 & 2 & 3 & 14 \\ 2/3 & 5 & 2 & 18 \end{pmatrix},$$

由于$s_2=5/3<s_3=13/3$,，所以第二步分解计算前要进行交换，分解计算结果为

$$(\tilde{A}^{(3)}, b^{(3)}) \begin{pmatrix} 3 & 1 & 5 & 20 \\ 2/3 & 13/3 & -4/3 & 14/3 \\ 1/3 & 5/13 & 72/39 & 216/39 \end{pmatrix}$$

由此知

$$L=\begin{pmatrix}1 & & \\ 2/3 & 1 & \\ 1/3 & 5/13 & 1\end{pmatrix},U=\begin{pmatrix}3 & 1 & 5\\ & 13/3 & -4/3\\ & & 72/39\end{pmatrix},$$

$$p=I_{23}I_{12}=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

由于方车程组的右端参与了消元计算，所以Ly=Pb的解为$y=b^{(3)}=$（20，14/3，216/39）^{T}。解Ux=y得x=（1，2，3）^{T}

4.2.2　三对角方程组的追赶法

设有方程组Ax=d,其中d=(d1 d2,… dn)T,系数矩阵A是三对角形矩阵

$$A=\begin{pmatrix}b & c_1 & & & \\ a_1 & b & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1}\\ & & & a_n & b_n\end{pmatrix} \qquad (4.2.7)$$

如果**A**满足**Gauss**消去发的条件,可用**LU**分解发求解.并且,**L**和**U**有如下形式

$$L=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix}, U=\begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix} \quad (4.2.8)$$

利用**(4.2.7)**和**(4.2.7)**可得

$$\begin{cases} u_1=b_1 \\ l_i=a_i/u_{i-1}, i=2,3,\ldots n \\ u_i=b_i-l_ic_{i-1}, i=2,3,\ldots n \end{cases} \quad (4.2.9)$$

由此可求得**L**和**U**的所有元素.。解原方程组**Ax=b**可分为两步**Ly=d**和**Ux=y**,计算公式为

$$\begin{cases} y_1 = d_1 \\ y_i = d_i - l_i y_{i-1}, i = 2,3,\ldots n \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_n = y_n / u_n \\ x_i = (y_i - c_i x_{i+1}) / u_i, i = n-1, n-2, \ldots 1 \end{cases} \qquad (4.2.10)$$

称为(4.2.9)、(4.2.10)和(4.2.11)为求解三对角形方程组的追赶法,又称为**Thomas算法**。

追赶发能实现的条件是ui≠0，i=1,2,…,n.。下面给出追赶发一个的充分条件。

定理4.6 设三对角矩阵A有(4.2.7)的表达式,且满足

$$|b_1| > |c_1| > 0, |b_n| > |a_n| > 0,$$

$$|b_i| \ge |a_i| + |c_i|, a_i c_i \neq 0, i = 2, 3, \ldots n$$

则A非奇异,且有

$$0 < \left|\frac{c_i}{u_i}\right| < 1, i = 1, 2, \cdots n$$

$$|b_i| - |a_i| < |u_i| < |b_i| + |a_i|, i = 1,2,\ldots n$$

证　用归纳法。对i=1,有 $|u_1|=|b_1|>|c_1|$, 所以

现设 $u_1\neq 0, |c_{i-1}|/|u_{i-1}|<1$,我们有

$$|u_i|=|b_i-l_ic_{i-1}|\geq|b_i|-\frac{|a_ic_{i-1}|}{|u_{i-1}|}>|b_i|-|a_i|$$

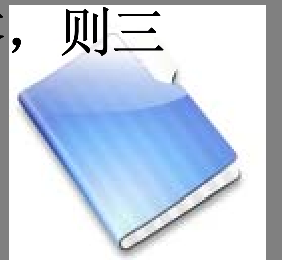
利用条件可得到 $|u_i|>|c_i|$,故 $u_i\neq 0, |c_i|/|u_i|<1$.另一方面,有

$$|u_i|\leq|b_i|+|l_ic_{i-1}|=|b_i|+\frac{|a_ic_{i-1}|}{|u_{i-1}|}\leq|b_i|+|a_i|$$

因为 $\det A=u_1u_2\ldots u_n$，所以 $\det A\neq 0$。定理得证。

在定理4.6的条件下，追赶法可以进行计算，并且计算过程的中间变量有界，不会产生大的变化，可以有效计算出结果。

在定理4.6的条件下，要求 a_i 和 c_i 非零。若有某个 a_i（或 c_i ）为零，则三对角方程组可以化为两个低阶的非耦和的方程组。



追赶法公式简单，计算量和存储量都很小。整过求解过程仅须**5n-4**次乘除和**3**（**n-1**）次加减法运算，仅需**4**个一为数组存储系数矩阵的元素和右端向量 l_i，u_i，x_i 可分别存放在表示系数矩阵元素的数组和右段向量的位置。

例**4.7** 用追赶发求解三对角方程组**Ax=d**，其中

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

解 由**(4.2.9)**得

$$L=\begin{pmatrix} 1 & & \\ -0.25 & 1 & \\ & -0.2667 & 1 \end{pmatrix}, U=\begin{pmatrix} 4 & -1 & \\ & 3.75 & -1 \\ & & 3.733 \end{pmatrix}$$

由**(4.2.10)**和**(4.2.11)**得

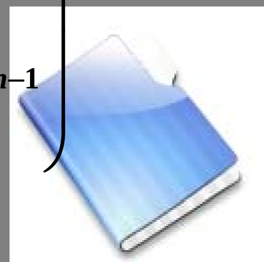
$$y=(1,3.25,2.8668)^T, X=(0.5179,1.0714,0.7679)^T$$

对另一类方程组，在周期样条插值等为题遇到的循环三对角方程组Ax=d，其中

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & a_1 \\ a_1 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ c_n & & & a_n & b_n \end{pmatrix},$$

我们也可用三对角分解的方法。从矩阵零元素的位置不难验证L和U可写成下面的形式：

$$L=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ \sigma_1 & \sigma_2 & \cdots & \sigma_{n-1}+l_n & 1 \end{pmatrix}, \quad U=\begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \rho_1 \\ & u_2 & c_2 & & \rho_2 \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & u_{n-1} & c_{n-1}+\rho_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix}$$



由此不难得到L和U的元素的计算公式，这里不在介绍。

4.2.3 平方根法

当A为对称正定矩阵时，对A可直接作LU分解。由（4.1.8）式可得下面的定理。

定理4.7 设$A\in R^{n\times n}$，$A = A^T$且A的顺序主子式$D_i\neq 0$（I=1,2,…,n），则存在唯一的单位下三角阵和三角阵，使

$$A= LD L^T$$

定理4.8 设$A\in R^{n\times n}$，当A 为对称正定矩阵，则存在唯一的对角元素为正的下三角阵L，使

$$A= L L^T$$

证 由（4. 7）定理可知$A= L_1D L^T_1$，其中L_1为单位下三角阵，$D=diag(d_1,d_2,\ldots d_n)$。若令$U=D L^T_1$，则$A= L_1U$为A的Dolittle分解 U的对角元即为D的对角元。因此A 的顺序主子式$D_m= d_1d_2\ldots d_m$，m=1，2，…n 。因为A正定，所以$D_i >0$,i=1，2，…n 。由此推出$d_{vi} >0$，i=1，2，…n 。记

$$D^{\frac{1}{2}} = diag(\sqrt{d_1},\sqrt{d_2},\cdots \sqrt{d_n}),$$

令 $L=L_1L^{\frac{1}{2}}$，则有 $A=L_1D^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}L_1^T=(L_1D^{\frac{1}{2}})(L_1D^{\frac{1}{2}})^T=LL^T$

由分解式$L_1DL_1^T$ 的唯一性可得（4.2.3）分解式的唯一性。定理得证。

称（4.2.13）式为矩阵A的Cholesky分解。利用A的Cholesky分解式来求解方程组Ax=b的方法称为Cholesky方法或平方根法，这是因为计算过程含开方运算。

设A=（a_{ij}），

$$L=\begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

由式（4.2.13）可得

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}+l_{ij}l_{jj},\ i=j+1,j+2\cdots,n$$

按逐列计算L的元素的计算步骤,设第1列至第j-1列已经计算得到,则有

$$l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^{2}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad (4.2.14)$$

$$l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}\right)/l_{jj},i=j+1,j+2,\cdots,n \qquad (4.2.15)$$

这样，可以从j=1直到j=n逐列算出L的元素,再求解下三角方程组Ly=b和上三角方程组 $L^{T}x=y$ 。计算公式为

$$y_1=b_1/l_{11},y_i=(b_i-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_k)/l_{ii},i=2,3,\cdots,n$$

$$x_n=y_n/l_{nn},x_i=(y_i-\sum_{k+1}^{n}l_{ki}l_k)/l_{ii},i=n-1,n-2,\cdots,1$$

平方根法的原理基于矩阵的LU分解,所以它也是Gauss消去法的变形.但由于利用了矩阵正定的性质,减少了计算量。平方根法的乘除法运算次数为$(n^3+9n^2+2)/6$,加减法次数为$(n^3+6n^2-7n)/6$ 。另外还有n次开方运算，其所含乘除法和加减法次数可分别看成n的常数倍。平方根需$n^3/6$次乘除法，与Gauss消去法相比减少了一半。

由（4.2.14）可得 $a_{jj}=\sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2$,由此推出 $|l_{jk}|\le\sqrt{a_{jj}},k=1,2,\cdots,j$

所以平方根法的中间量 l_{jk} 得以控制。不必选主元。

例4.8 用平方根法求解

$$\begin{cases} 4x_1-x_2+x_3=6, \\ -x_1+4.25x_2+2.75x_3=-0.5, \\ x_1+2.75x_2+3.5x_2=1.25. \end{cases}$$

解 不难验证系数矩阵是对称正定的，按（4.2.14）和（4.2.15）依次计算得

$$L=\begin{pmatrix} 2 & & \\ -0.5 & 2 & \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix}$$

解　　Ly=（6，-0.5，1.25）^{T}，得y=（3，0.5，-1）^{T}，再解L^{T}x=y可以得到x=（2，1，-1）^{T}。

如果对矩阵采（4.2.12）用分解式，即

$$A=\begin{pmatrix}1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}d_2 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & \vdots \\ & & \ddots & l_{n2} \\ & & & 1\end{pmatrix},$$

则可避免开方根运算，称为改进的平方根法。它即适合于求接对称正定方程组，也适合于A求解对称且其顺序主子式全不为零的方程组。分解式的计算公式为(j=1,2,…n)

$$\begin{cases} d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 d_k \\ l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} d_k l_{ik} l_{jk}) / d_j, i = j+1, j+2, \cdots, n \end{cases}$$

其中j=1时，求和部分为零。这样求解方程组Ax=b化为求解Ly=b和$L^Tx=D^{-1}y$.对于例4.8给定的方程组，用改进的平方根法有

$$A=\begin{pmatrix} 1 & & \\ -0.25 & 1 & \\ 0.25 & 0.75 & 1 \end{pmatrix}, D=\begin{pmatrix} 4 & & \\ & 4 & \\ & & 1 \end{pmatrix},$$

解Ly=b得$y=(6,1,-1)^T$。解$L^Tx=D^{-1}y$得$x=(2,1,-1)^T$。