高等学校试用教材

矩阵计算和方程求根

曹志浩　张玉德　李瑞遐　编

高等教育出版社

高等学校试用教材

矩阵计算和方程求根

曹志浩 张玉德 李瑞遐 编

高等教育出版社

本书讨论矩阵计算和方程求根的方法。内容包括线性代数方程组的求解方法：直接法和迭代法；线性最小二乘法；代数特征值问题的各种有效解法：乘幂法和反乘幂法，子空间迭代法，Jacobi方法，Givens-Householder方法，*QR*方法；浮点舍入误差分析；以及单个超越方程和多项式的求根方法，对于许多方法的收敛性以及计算过程的稳定性也有较详尽的论述。

阅读本书需要具备数学分析，高等代数或线性代数方面的知识。本书可作为综合大学计算数学专业试用教材，也可供理科其他专业师生，计算数学工作者或其他利用电子计算机从事科学计算的科技人员参考。

本书原由人民教育出版社出版，1983年3月9日，上级同意恢复“高等教育出版社”。本书今后改用高等教育出版社名义继续印行。

高等学校试用教材

矩阵计算和方程求根

曹志浩　张玉德　李瑞遐　编

高等教育出版社出版
新华书店北京发行所发行
河北香河县印刷厂印装

开本787×1092　1/32　印张7　14/16　字数 189,000
1979年2月第1版　1984年2月第7次印刷
印数　72,601— 77,660
书号　13010·0327　　定价　0.58　元

目 录

第一章 线性代数方程组求解 …………………………1
§1 线代数方程组的直接解法 …………………………1
1.1 Gauss 消去法 …………………………1
1.2 矩阵的三角分解 …………………………5
1.3 选主元 …………………………9
1.4 线性代数方程组的性态,浮点运算的舍入误差分析 …………………………15
1.5 消去法的浮点舍入误差分析 …………………………22
1.6 迭代改善 …………………………30
§2 线代数方程组的迭代解法 …………………………35
2.1 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法 …………………………35
2.2 超松弛迭代法 …………………………50
2.3 相容次序,性质 A 和最佳松弛因子的决定 …………………………52
2.4 块超松弛迭代法 …………………………69
2.5 共轭斜量法 …………………………72
§3 线性最小二乘法 …………………………79
3.1 问题的引入,预备知识 …………………………79
3.2 解的存在性,唯一性 …………………………82
3.3 正交化方法 …………………………85
第二章 代数特征值问题 …………………………93
§1 特征值的敏感性 …………………………93
1.1 特征值的扰动 …………………………95
1.2 条件数 …………………………100
§2 乘幂法和反乘幂法 …………………………104
2.1 乘幂法 …………………………104
2.2 加速技术 …………………………111
2.3 收缩 …………………………113
2.4 反幂法 …………………………116
§3 对称矩阵的子空间迭代法 …………………………121
§4 对称矩阵的 Jacobi 方法 …………………………128
4.1 Jacobi 算法 …………………………128

4.2 Jacobi 算法的收敛性 …………130
4.3 实用 Jacobi 算法 …………133
§5 对称矩阵的 Givens-Householder 方法 …………135
5.1 三对角化过程 …………135
5.2 用二分法求特征值 …………139
5.3 特征向量的计算 …………149
§6 QR 方法 …………157
6.1 QR 算法及收敛性 …………157
6.2 带原点位移的 QR 算法 …………163
6.3 双重步 QR 算法 …………168
§7 矩阵广义特征值问题 …………172
7.1 化到标准特征值问题 …………172
7.2 行列式查找法 …………174
第三章 方程的求根 …………181
§1 引言 …………181
§2 单点迭代 …………186
2.1 简单迭代法 …………186
2.2 高阶迭代 …………192
2.3 单点迭代函数的构造 …………196
§3 Newton 迭代法 …………200
3.1 Newton 迭代法收敛性定理 …………201
3.2 Newton 迭代法的修改 …………206
3.3 m 重根的处理 …………208
§4 有记忆的单点迭代法——插值法 …………210
4.1 插值理论和内插迭代函数的构造 …………210
4.2 弦割法(一次插值法) …………213
4.3 单点弦割法 …………218
4.4 抛物线法 (Muller 法) …………222
§5 多点迭代函数 …………227
§6 多项式方程求根 …………230
6.1 Newton 法求多项式方程的根 …………230
6.2 Bernoulli 方法 …………232
6.3 林士谔-Bairstow 方法 …………240

第一章　线性代数方程组求解

求解线代数方程组的方法基本上可分为直接法和迭代法两大类. 在线性代数课程中, 对这两类解法已有初步介绍. 本章前两节分别对这两类方法作进一步的研究, 而第三节则介绍系数矩阵是长方阵的线代数方程组的求解问题. 本章中如无特殊说明, 矩阵和向量的元素都假定在实数域中.

§1　线代数方程组的直接解法

1.1　Gauss 消去法

为了方便地利用矩阵运算表示线代数方程组的求解步骤, 引进一类称为初等矩阵的特殊矩阵

$$
\begin{aligned}
L_r &= \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{r+1,r} & 1 & & \\ & & l_{r+2,r} & & \ddots & \\ & & \vdots & & & \\ & & l_{nr} & & & 1 \end{bmatrix} \\
T_r &= \begin{bmatrix} 1 & & & t_{1r} & & & \\ & \ddots & & \vdots & & & \\ & & 1 & t_{r-1,r} & & & \\ & & & 1 & & & \\ & & & t_{r+1,r} & 1 & & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & t_{nr} & & & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{1.1}
$$

矩阵 L_r 显然是矩阵 T_r 的特殊形式，它们都是非奇异矩阵，且 $\det(L_r)=\det(T_r)=1$.

用矩阵 T_r 左乘矩阵 A, 一般影响除 r 行以外的所有行，用 L_r 左乘 A, 一般影响 A 的第 $r+1$ 行到第 n 行. 用它们右乘 A, 一般只影响 A 的第 r 列.

令 $\boldsymbol{e}_k$ 是第 k 个单位坐标(列)向量:

$$\boldsymbol{e}_k=[0,\ 0,\ \cdots,\ 0,\ \overset{\text{第 }k\text{ 个}}{1},\ 0,\ \cdots,\ 0]^T$$

又令列向量 $\boldsymbol{t}_r$ 是:

$$\boldsymbol{t}_r=[t_{1r},\ \cdots,\ t_{r-1,r},\ 0,\ t_{r+1,r},\ \cdots,\ t_{nr}]^T \tag{1.2}$$

则初等矩阵 T_r 可以表为

$$T_r=I+\boldsymbol{t}_r\boldsymbol{e}_r^T \tag{1.3}$$

因为 $\boldsymbol{e}_r^T\boldsymbol{t}_r=0$, 所以

$$\begin{aligned}(I+\boldsymbol{t}_r\boldsymbol{e}_r^T)(I-\boldsymbol{t}_r\boldsymbol{e}_r^T)&=(I-\boldsymbol{t}_r\boldsymbol{e}_r^T)(I+\boldsymbol{t}_r\boldsymbol{e}_r^T)\\&=I-\boldsymbol{t}_r\boldsymbol{e}_r^T\boldsymbol{t}_r\boldsymbol{e}_r^T=I\end{aligned}$$

这就证明了 T_r 的逆阵 $(T_r)^{-1}$ 是

$$(T_r)^{-1}=I-\boldsymbol{t}_r\boldsymbol{e}_r^T \tag{1.4}$$

它是一个与 T_r 同样形状的初等矩阵. 令

$$\boldsymbol{l}_r=[0,\ \cdots,\ 0,\ l_{r+1,r},\ \cdots,\ l_{nr}]^T$$

则 L_r 可表为

$$L_r=I+\boldsymbol{l}_r\boldsymbol{e}_r^T$$

显然 $\boldsymbol{e}_i^T\boldsymbol{l}_j=0$(当 $i\leqslant j$ 时), 所以当 $i<j$ 时,

$$L_iL_j=(I+\boldsymbol{l}_i\boldsymbol{e}_i^T)(I+\boldsymbol{l}_j\boldsymbol{e}_j^T)=I+\boldsymbol{l}_i\boldsymbol{e}_i^T+\boldsymbol{l}_j\boldsymbol{e}_j^T \tag{1.5}$$

假设对 n 阶线代数方程组

$$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \tag{1.6}$$

可顺序进行消去过程，则系数矩阵 A 的消去过程可利用初等矩阵表述如下.

消去第一列对角元(主元)以下的元素相当于对 $A\equiv A^{(1)}$ 左乘初等矩阵 L_1^{-1}:

$$L_1^{-1}A^{(1)}=\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0}^T\\ -\mathbf{c}_1/a_{11} & I_{n-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{11} & \boldsymbol{r}_1^T\\ \mathbf{c}_1 & \widetilde{A}_1\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}a_{11} & \boldsymbol{r}_1^T\\ \mathbf{0} & \widetilde{A}_1-\mathbf{c}_1\boldsymbol{r}_1^T/a_{11}\end{bmatrix}\equiv A^{(2)}$$

消去第二列主元以下的元素相当于对 $A^{(2)}$ 左乘初等矩阵 L_2^{-1}:

$$L_2^{-1}A^{(2)}=\left[\begin{array}{c|cc}1 & \multicolumn{2}{c}{\mathbf{0}^T}\\ \hline \mathbf{0} & 1 & \mathbf{0}^T\\ & -\mathbf{c}_2/a_{22}^{(2)} & I_{n-2}\end{array}\right]\left[\begin{array}{c|cc}a_{11} & \multicolumn{2}{c}{\boldsymbol{r}_1^T}\\ \hline \mathbf{0} & a_{22}^{(2)} & \boldsymbol{r}_2^T\\ & \mathbf{c}_2 & \widetilde{A}_2\end{array}\right]$$

$$=\left[\begin{array}{c|cc}a_{11} & \multicolumn{2}{c}{\boldsymbol{r}_1^T}\\ \hline \mathbf{0} & a_{22}^{(2)} & \boldsymbol{r}_2^T\\ & \mathbf{0} & \widetilde{A}_2-\mathbf{c}_2\boldsymbol{r}_2^T/a_{22}^{(2)}\end{array}\right]\equiv A^{(3)} \tag{1.7}$$

如此继续,最后有

$$L_{n-1}^{-1}A^{(n-1)}=A^{(n)}\equiv R$$

这里 R 是上(右)三角阵. 由此,从矩阵 A 变为 R 的整个消去过程可表为

$$L_{n-1}^{-1}L_{n-2}^{-1}\cdots L_2^{-1}L_1^{-1}A=R \tag{1.8}$$

其中 $L_i^{-1}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_i\boldsymbol{e}_i^T$.

从过程 (1.7) 容易计算出完成消去过程所需要的计算量. 用 Q^p 表示乘除法的运算次数, Q^s 表示加减法的运算次数,则

$$Q^p=\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+1)=\sum_{k=1}^{n-1}k(k+1)$$

$$=\sum_{k=1}^{n-1}k^2+\sum_{k=1}^{n-1}k=\frac{n^3}{3}-\frac{n}{3} \tag{1.9}$$

$$Q^s=\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2=\sum_{k=1}^{n-1}k^2=\frac{n^3}{3}-\frac{n^2}{2}+\frac{n}{6} \tag{1.10}$$

由(1.8)可得

$$A=L_1L_2\cdots L_{n-1}R\equiv LR \tag{1.11}$$

应用(1.5)可知

$$L=L_1L_2\cdots L_{n-1}=\sum_{i=1}^{n-1}L_i-(n-2)I$$

很容易写出 L 的元素的明显表达式(见(1.12)式)，因此 Gauss 消去法实现了矩阵 A 的一个三角分解，简称为 A 的 LR 分解。

$$L=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \dfrac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & & & \\ \dfrac{a_{31}}{a_{11}} & \dfrac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} & 1 & \ddots & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ \dfrac{a_{n1}}{a_{11}} & \dfrac{a_{n2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} & \cdots & \dfrac{a_{n,n-1}^{(n-1)}}{a_{n-1,n-1}^{(n-1)}} & 1 \end{bmatrix} \tag{1.12}$$

有了 LR 分解，为了求方程组(1.6)的解，还需要求解两个三角方程组(分别称为前代和后代)：

$$L\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b} \quad 和 \quad R\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y} \tag{1.13}$$

它们所需的乘除法和加减法次数分别用 Q^{bp} 和 Q^{bs} 表示，则易知

$$\begin{aligned} Q^{bp}&=\sum_{k=1}^{n-1}k+\sum_{k=1}^{n}k=n^2 \\ Q^{bs}&=2\sum_{k=1}^{n-1}k=n^2-n \end{aligned} \tag{1.14}$$

最后，可得到用 Gauss 消去法求解 n 阶线代数方程组所需的乘除法和加减法次数 Q^{sp} 和 Q^{ss} 分别是

$$\begin{aligned} Q^{sp}&=Q^p+Q^{bp}=\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3} \\ Q^{ss}&=Q^s+Q^{bs}=\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5n}{6} \end{aligned} \tag{1.15}$$

1.2 矩阵的三角分解

从消去过程(1.7)可知，Gauss 消去法能顺序进行的条件是主元 a_{11}, $a_{22}^{(2)}$, $a_{33}^{(3)}$, $\cdots$, $a_{n-1,n-1}^{(n-1)}$ 全不为零. 显然 $a_{ii}^{(i)}=r_{ii}(i=1,2,\cdots,n)$，这里 $a_{11}^{(1)}\equiv a_{11}$，而 r_{ii} 为上三角阵 R 的对角元. $a_{ii}^{(i)}\neq 0\ (i=1, 2, \cdots, n-1)$ 的条件怎样在原矩阵 A 上反映出来呢？这可由下面的定理得到.

定理 1.1 主元 $a_{ii}^{(i)}(i=1, 2, \cdots, k)$ 不为零的充要条件是 A 的主子矩阵 $A_i(i=1, 2, \cdots, k)$ 非奇异，这里正整数 $k\leqslant n$.

证 对 k 应用归纳法，当 $k=1$ 时，$A=A_1=a_{11}^{(1)}$，定理显然成立. 假设定理直至 $k-1$ 成立. 我们只要证明当 A_1, A_2, $\cdots$, A_{k-1} 非奇异时，A_k 非奇异的充要条件是 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$.

由归纳法假设，$a_{ii}^{(i)}\neq 0(i=1, 2, \cdots, k-1)$，因此，Gauss 消去过程至少可进行前 $k-1$ 步，即

$$A^{(k)}=L_{k-1}^{-1}L_{k-2}^{-1}\cdots L_1^{-1}A=\begin{bmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{bmatrix} \tag{1.16}$$

这里 $A_{11}^{(k)}$ 是对角元为 $a_{11}^{(1)}$, $a_{22}^{(2)}$, $\cdots$, $a_{k-1,k-1}^{(k-1)}$ 的上三角阵，因此 $A^{(k)}$ 的 k 阶主子矩阵 $A_k^{(k)}$ 是上三角的，对角元是 $a_{11}^{(1)}$, $a_{22}^{(2)}$, $\cdots$, $a_{k-1,k-1}^{(k-1)}$, $a_{kk}^{(k)}$. 因为 $a_{ii}^{(i)}(i=1, 2, \cdots, k-1)$ 不为零，所以 $A_k^{(k)}$ 非奇异的充要条件是 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$，若以 $(L_i^{-1})_k$ 表示 L_i^{-1} 的 k 阶主子矩阵，则由(1.16)以及 $L_i^{-1}(i=1, 2, \cdots, k-1)$ 的性质易知

$$A_k^{(k)}=(L_{k-1}^{-1})_k(L_{k-2}^{-1})_k\cdots(L_1^{-1})_kA_k \tag{1.17}$$

因为 $(L_i^{-1})_k(i=1, \cdots, k-1)$ 是单位下(左)三角阵(即对角元全为 1 的三角阵)，$\det((L_i^{-1})_k)=1$，所以 $A_k^{(k)}$ 非奇异的充要条件是 A_k 非奇异. **证毕**

系 1.1 设 $a_{ii}^{(i)}\neq 0(i=1, 2, \cdots, k-1)$，则 $\det(A_k)=\prod\limits_{i=1}^{k}a_{ii}^{(i)}$.

证 由(1.17)立即得到 $\det(A_k)=\det(A_k^{(k)})=\prod\limits_{i=1}^{k}a_{ii}^{(i)}$ **证毕**

从定理 1.1 和 (1.11) 式可知，若 $\det(A_k)\neq 0$ $(k=1, 2, \cdots, n-1)$，则用 Gauss 消去法可作出矩阵 A 的 LR 分解，这里 L 是单位下三角阵，而 R 是上三角阵，这种分解称为 Doolittle 分解．若 $A=LR$ 是 A 的一个 Doolittle 分解，D 为任意非奇异对角阵，则

$$A=(LD)(D^{-1}R)\equiv L'R'$$

也是 A 的一个三角分解．为讨论 A 的三角分解的唯一性问题，将 A 分解为

$$A=LDR \tag{1.18}$$

其中 L 和 R 分别为单位下三角和单位上三角阵，D 为对角阵，(1.18) 式称为 A 的一个 LDR 分解．

定理 1.2 n 阶矩阵 A 有唯一的 LDR 分解的充要条件是 $A_1, A_2, \cdots, A_{n-1}$ 非奇异．

证 若 $A_1, A_2, \cdots, A_{n-1}$ 非奇异，则 Gauss 消去法得以完成，即实现了一个 Doolittle 分解 $A=L\tilde{R}$，由定理 1.1，$\tilde{R}$ 的对角元 $r_{ii}\equiv a_{ii}^{(i)}\neq 0$ $(i=1, 2, \cdots, n-1)$．若 A 非奇异，则 $a_{nn}^{(n)}\equiv r_{nn}\neq 0$，这时令 $D=\mathrm{diag}(a_{11}^{(1)}, \cdots, a_{nn}^{(n)})$，则

$$A=LD(D^{-1}\tilde{R})\equiv LDR \tag{1.19}$$

是 A 的一个 LDR 分解．若 A 奇异，则 $a_{nn}^{(n)}\equiv r_{nn}=0$，此时令 $D=\mathrm{diag}(a_{11}^{(1)}, \cdots, a_{n-1,n-1}^{(n-1)}, 0)$，$D'=\mathrm{diag}(a_{11}^{(1)}, \cdots, a_{n-1,n-1}^{(n-1)})$，则

$$\tilde{R}\equiv\left[\begin{array}{c|c}\tilde{R}' & \mathbf{c}\\ \hline \mathbf{0}^T & 0\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c|c}D' & \mathbf{0}\\ \hline \mathbf{0}^T & 0\end{array}\right]\left[\begin{array}{c|c}D'^{-1}\tilde{R}' & D'^{-1}\mathbf{c}\\ \hline \mathbf{0}^T & 1\end{array}\right]=DR$$

因此，当 $\det(A_i)\neq 0$ $(i=1, 2, \cdots, n-1)$ 时，总存在一个 LDR 分解 (1.19)．

这个分解是唯一的．当 A 非奇异时，L, D, R 皆非奇异，若还存在另一个 LDR 分解：$A=L_1D_1R_1$，这里 L_1, D_1, R_1 也非奇异，从

$$LDR=L_1D_1R_1 \tag{1.20}$$

得到

$$L_1^{-1}L=D_1R_1R^{-1}D^{-1} \tag{1.21}$$

但(1.21)左端是单位下三角阵，右端是单位上三角阵，所以都应该是单位阵．因此

$$L_1^{-1}L=I,\ D_1R_1R^{-1}D^{-1}=I$$

即
$$L_1=L,\ R_1R^{-1}=D_1^{-1}D$$

由后一等式类似地可得

$$R_1R^{-1}=I,\ D_1^{-1}D=I$$

若 A 奇异，则(1.20)可写成分块形式

$$\left[\begin{array}{c|c}\widetilde{L}_1 & \mathbf{0}\\ \hline \boldsymbol{r}_1^T & 1\end{array}\right]\left[\begin{array}{c|c}\widetilde{D}_1 & \mathbf{0}\\ \hline \mathbf{0}^T & 0\end{array}\right]\left[\begin{array}{c|c}\widetilde{R}_1 & \boldsymbol{c}_1\\ \hline \mathbf{0}^T & 1\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c|c}\widetilde{L} & \mathbf{0}\\ \hline \boldsymbol{r}^T & 1\end{array}\right]\left[\begin{array}{c|c}\widetilde{D} & \mathbf{0}\\ \hline \mathbf{0}^T & 0\end{array}\right]\left[\begin{array}{c|c}\widetilde{R} & \boldsymbol{c}\\ \hline \mathbf{0}^T & 1\end{array}\right]$$

由此得出

$$\left[\begin{array}{c|c}\widetilde{L}_1\widetilde{D}_1\widetilde{R}_1 & \widetilde{L}_1\widetilde{D}_1\boldsymbol{c}_1\\ \hline \boldsymbol{r}_1^T\widetilde{D}_1\widetilde{R}_1 & \boldsymbol{r}_1^T\widetilde{D}_1\boldsymbol{c}_1\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c|c}\widetilde{L}\widetilde{D}\widetilde{R} & \widetilde{L}\widetilde{D}\boldsymbol{c}\\ \hline \boldsymbol{r}^T\widetilde{D}\widetilde{R} & \boldsymbol{r}^T\widetilde{D}\boldsymbol{c}\end{array}\right]$$

其中 $\widetilde{L}_1$, $\widetilde{D}_1$, $\widetilde{R}_1$ 和 $\widetilde{L}$, $\widetilde{D}$, $\widetilde{R}$ 皆非奇异．类似于前面的推理，可得

$$\widetilde{L}_1=\widetilde{L},\ \widetilde{D}_1=D_1,\ \widetilde{R}_1=\widetilde{R},$$

$$\boldsymbol{r}_1^T=\boldsymbol{r}^T,\ \boldsymbol{c}_1=\boldsymbol{c}$$

反之，假定 A 有一个唯一的 LDR 分解．当 A 非奇异时，L, D, R 皆非奇异，当 A 奇异时，必有 $d_{nn}=0$, $d_{ii}\neq 0(i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)$，因为否则 A 的 LDR 分解不可能唯一．因此，不论哪种情况，L, D, R 的 i 阶主子矩阵 L_i, D_i, $R_i(i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)$ 皆非奇异．但

$$A_i=L_iD_iR_i\quad(i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)$$

因此，$A_i(i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)$ 非奇异． 证毕

现设矩阵 A 是满秩的，我们继续讨论线代数方程组 (1.6) 的求解问题．由消去过程(1.7)可知，Gauss 消去法是逐步由 $A\equiv A^{(1)}$ 经 $A^{(2)}$, …, $A^{(n-1)}$, $A^{(n)}\equiv R$ 而将 A 变换到上三角阵 R 的，其各步的变换矩阵 $L_1^{-1},\cdots,L_{n-1}^{-1}$ 最终形成一个下三角阵 $L=L_1L_2\cdots L_{n-1}$. 对求解方程组 (1.6) 而言，我们不一定要计算和存贮中间矩阵 $A^{(2)}$, …, $A^{(n-1)}$, 而只需要最终的两个三角(矩阵)因子 L 和 R, 因为由它们以及(1.6)的右端 $\boldsymbol{b}$ 经前代和后代就可求得解 $\boldsymbol{x}$(参见(1.13)式)．由矩阵 A 的三角分解就可以实现"紧凑" Gauss 消去过程的目的.

由 A 的 Doolittle 分解可导出如下的紧凑计算过程(也称 Doolittle 方法)：由 $A=LR$, 可知

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik}r_{kj}\quad (i,\ j=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$$

因为 $l_{11}=1$, 故 $r_{1j}=a_{1j}(j=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$, 再由

$$a_{i1}=l_{i1}r_{11}$$

得到

$$l_{i1}=a_{i1}/r_{11}\quad (i=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$$

若 R 的开始 $i-1$ 行和 L 的开始 $i-1$ 列元素已被计算，则由

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{i} l_{ik}r_{kj}=\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}r_{kj}+r_{ij}\quad (j=i,\ i+1,\ \cdots,\ n)$$

得到

$$r_{ij}=a_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}r_{kj}\quad (j=i,\ i+1,\ \cdots,\ n)\tag{1.22}$$

类似地，由

$$a_{ji}=\sum_{k=1}^{i} l_{jk}r_{ki}=\sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}r_{ki}+l_{ji}r_{ii}\quad (j=i+1,\ \cdots,\ n)$$

得到

$$l_{ji}=\frac{1}{r_{ii}}\left(a_{ji}-\sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}r_{ki}\right)\quad (j=i+1,\ \cdots,\ n)\tag{1.23}$$

由(1.22)和(1.23)可知，L 与 R 的存区可与 A 的存区迭置．因此

Doolittle 算法最终可表述如下:

对 $i=1, 2, \cdots, n$

$$\begin{cases} a_{ij} \leftarrow r_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} r_{kj} & (j=i, i+1, \cdots, n) \\ a_{ji} \leftarrow l_{ji} = r_{ii}^{-1}\left(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} r_{ki}\right) & (j=i+1, \cdots, n) \end{cases} \tag{1.24}$$

若在矩阵 A 的唯一的 LDR 分解中, 将 LD 合并成一个下三角阵, 而 R 为单位上三角阵, 则实现了 A 的另一个三角分解, 它称为 Crout 分解, 类似地, 可由 Crout 分解导出一个相应的紧凑格式, 也称为 Crout 方法, 它可表述为:

对 $i=1, 2, \cdots, n$

$$\begin{cases} a_{ji} \leftarrow l_{ji} = a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} r_{ki} & (j=i, i+1, \cdots, n) \\ a_{ij} \leftarrow r_{ij} = l_{ii}^{-1}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} r_{kj}\right) & (j=i+1, \cdots, n) \end{cases}$$

1.3 选主元

前面讨论的 Gauss 消去过程或三角分解, 只有在假设条件 $\det(A_k) \neq 0 (k=1, 2, \cdots, n-1)$ 之下才能完成. 然而, 我们知道, 对方程组(1.6), 只要 $\det(A) \neq 0$, 即 A 非奇异, 就存在唯一解, 显然, $\det(A) \neq 0$ 不能保证 $\det(A_k) \neq 0 (k=1, 2, \cdots, n-1)$. 为了实际求解方程组(1.6), 我们现在只在 $\det(A) \neq 0$ 的条件之下讨论消去过程.

为了便于用矩阵运算表述, 引进初等排列矩阵 I_{rs}: 对 $r \neq s$, 定义

$$(I_{rs})_{rs} = (I_{rs})_{sr} = 1, \ (I_{rs})_{ii} = 1 \quad (i \neq r, s)$$

其它元素全为零. 由上面的定义可知, I_{rs} 就是单位矩阵 I 的第 r 行(列)与第 s 行(列)交换得到的矩阵, 显然, $I_{rs} = I_{sr}$, 用 I_{rs} 左乘矩阵 A, 就是交换 A 的第 r 行与第 s 行, 用 I_{rs} 右乘 A 就是交换

A 的第 r 列与第 s 列. 特别

$$I_{rs}I_{sr}=I \tag{1.25}$$

所以

$$(I_{rs})^{-1}=I_{rs}, \quad 且 \quad \det(I_{rs})=-1$$

也就是说, 初等排列阵的逆阵就是它自身.

现在来进行消去过程. 消去的第一步, 首先在 A 的第一列中选绝对值最大的一个元素 $a_{i_11}(i_1\geqslant 1)$, 因为 $\det(A)\neq 0$, 所以 $a_{i_11}\neq 0$, 以此作为第一个主元, 若 $i_1\neq 1$, 将 A 的第 i_1 行同第一行交换, 类似于(1.7)的第一步, 有

$$L_1^{-1}I_{i_11}A=A^{(2)} \quad 或 \quad A=I_{i_11}L_1A^{(2)}$$

因为 $\det(L_1^{-1})=1$, $\det(I_{i_11})=-1$, 所以 $\det(A^{(2)})=-\det(A)\neq 0$.

消去的第二步, 在 $A^{(2)}$ 的第二列, 从第二个元素开始选绝对值最大的一个元素 $a_{i_22}^{(2)}(i_2\geqslant 2)$, 由 $A^{(2)}$ 的形状及 $\det(A^{(2)})\neq 0$, 可知 $a_{i_22}^{(2)}\neq 0$, 故可取为第二个主元, 若 $i_2\neq 2$, 将第 i_2 行与第二行交换, 类似于(1.7)的第二步, 有

$$L_2^{-1}I_{i_22}A^{(2)}=A^{(3)} \quad 或 \quad A^{(2)}=I_{i_22}L_2A^{(3)}$$

类似的过程进行直至第 $n-1$ 步, 得到

$$L_{n-1}^{-1}I_{i_{n-1},n-1}A^{(n-1)}=R \quad 或 \quad A^{(n-1)}=I_{i_{n-1},n-1}L_{n-1}R$$

总起来就得到

$$L_{n-1}^{-1}I_{i_{n-1},n-1}\cdots L_2^{-1}I_{i_22}L_1^{-1}I_{i_11}A=R \tag{1.26}$$

或

$$A=I_{i_11}L_1I_{i_22}L_2\cdots I_{i_{n-1},n-1}L_{n-1}R$$

如果在第 j 步未进行交换, 则 $I_{i_jj}=I$. 由(1.12)及上述过程可知, $L_i(i=1, 2, \cdots, n-1)$的元素的绝对值不超过 1.

可以将(1.26)写为

$$I_{i_{n-1},n-1}I_{i_{n-2},n-2}\cdots I_{i_22}I_{i_11}A=(I_{i_{n-1},n-1}\cdots I_{i_22}L_1I_{i_22}\cdots I_{i_{n-1},n-1})$$
$$\cdot(I_{i_{n-1},n-1}\cdots I_{i_33}L_2I_{i_33}\cdots I_{i_{n-1},n-1})\cdots(I_{i_{n-1},n-1}L_{n-2}I_{i_{n-1},n-1})L_{n-1}R$$

或记为

$$PA=\widetilde{L}_1\widetilde{L}_2\cdots\widetilde{L}_{n-2}\widetilde{L}_{n-1}R\equiv\widetilde{L}R \tag{1.27}$$

其中

$$P=I_{i_{n-1},\,n-1}\cdots I_{i_2 2}I_{i_1 1}$$

$$\widetilde{L}_r=I_{i_{n-1},\,n-1}I_{i_{n-2},\,n-2}\cdots I_{i_{r+1},\,r+1}L_r I_{i_{r+1},\,r+1}\cdots I_{i_{n-2},\,n-2}I_{i_{n-1},\,n-1}$$

$$(r=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)$$

根据 I_{rs} 的性质，容易证明 $\widetilde{L}_r(r=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)$ 也是(1.1)第一式那样的初等矩阵，它的第 r 列对角线以下的元素可由 L_r 的对角线以下的元素作相应的排列得到，因此 $\widetilde{L}_r$ 也是单位下三角阵，其元素绝对值不大于1.

上述消去过程称为(按列)部分选主元的Gauss消去法，(1.27)式所表示的分解也称为(按列)部分选主元技巧的三角分解. 由于

$$P=I_{i_{n-1},\,n-1}\cdots I_{i_1 1}$$

所以 PA 就是对矩阵 A 按（部分选主元技巧所得的）主元次序作行交换所得的矩阵. 从(1.27)可知，对矩阵 A 的(按列)部分选主元的三角分解就等于先将 A 的行按主元次序排列好，再对(PA)进行(不选主元的)三角分解. 我们将上述结果表述为如下定理.

定理1.3(部分选主元的三角分解定理) 对非奇矩阵 A，存在排列矩阵 P，以及元素绝对值不大于1的单位下三角阵 L，和上三角阵 R，使

$$PA=LR \tag{1.28}$$

对非奇矩阵 A 也可以进行所谓完全选主元的三角分解，我们将它表述为如下定理.

定理1.4(完全选主元的三角分解定理) 对非奇矩阵 A，存在排列矩阵 P 和 Q 以及元素绝对值不大于1的单位下三角阵 L，和上三角阵 R，使

$$PAQ=LR \tag{1.29}$$

完全选主元技巧与部分选主元技巧相比，计算工作量要大得

多，以后我们将证明部分选主元的 Gauss 消去法的舍入误差一般是小的，因此，到目前为止，它是求解线代数方程组最实用的方法之一.

在消去法或三角分解中，选主元的目的是使计算过程不致中断和不引进大的舍入误差. 从上面的三角分解定理可以看到，利用选主元技巧使三角分解过程中的一些中间计算量的大小得以控制，例如，矩阵 L 的元素的绝对值不大于1，这样就有利于控制舍入误差的增长. 凡是在计算过程中舍入误差的增长得以控制的，就称该计算过程（或计算方法）是稳定的，我们将在下面(1.5节)详细分析部分选主元的消去法的误差，并证明它一般说来是稳定的.

有些特殊类型的矩阵，即使不选主元而进行三角分解，它也是稳定的. 对称正定矩阵就是这样的例子之一. 设 A 是对称正定矩阵，则 $\det(A_i)>0(i=1, 2, \cdots, n)$，由 LDR 分解定理

$$A=LDR \tag{1.30}$$

且 $D=\mathrm{diag}(d_{11}, d_{22}, \cdots, d_{nn})$ 中 $d_{ii}>0$，故可令

$$\tilde{D}=\mathrm{diag}(\sqrt{d_{11}}, \sqrt{d_{22}}, \cdots, \sqrt{d_{nn}})$$

(1.30)可表为

$$A=L\tilde{D}^2R$$

由 A 的对称性 $A^T=A$，得到

$$L\tilde{D}^2R=R^T\tilde{D}^2L^T$$

由分解的唯一性可知

$$L=R^T, R=L^T$$

因此

$$A=L\tilde{D}^2L^T=(L\tilde{D})(L\tilde{D})^T\equiv GG^T \tag{1.31}$$

这里 G 是下三角阵，这种分解称为对称正定阵的平方根分解，也称为 Cholesky 分解. 显然，当限定 G 的对角元为正时，分解是唯