目　　录

第一章 解线性方程组的直接方法

本章研究的对象是 n 阶线性代数方程组,写成矩阵的形式为

$$AX=b \tag{1.1}$$

式中 $A=[a_{ij}]_{n\times n},b=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_n\end{bmatrix},X=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}$

A 是由方程组的系数 $a_{ij}(i,j=1,2,\cdots,n)$所构成的 $n\times n$ 的矩阵,叫做系数矩阵。b 和 X 都是 n 维列向量,b 叫做方程组(1.1)的右端项,X 为所求的解。

许多问题,例如电学中的网络问题,三次样条函数插值,最小二乘拟合,求解非线性方程组,常微分方程和偏微分方程边值问题的差分解法都归结为求解线性方程组。随着电子计算机的应用而发展起来的有限单元方法的最后一步就是求解一个大型的线性方程组。有限单元方法的应用日益广泛,讨论线性方程组的解法就显得愈来愈重要。

本章将讨论系数矩阵 A 为非奇异的线性方程组(即有唯一解的方程组)的直接求解的方法。所谓直接方法是指经过有限步运算后能求得方程组精确解的方法。微型计算机内存容量的增大,运算速度的加快,这就更加突出了直接方法的优点。下面介绍几种常用的直接方法。

§1 Gauss 消去法

Gauss 消去法是一个古老的方法,但实践证明它仍是目前计算机上一个常用和有效的方法。由于在科技和工程界广泛使用的有限单元方法需要求解的线性方程组的系数矩阵具有对称正定性

质,使得 Gauss 消去法在直接方法中占据重要的位置。

1. Gauss 消去法的计算过程

线性方程组(1.1)可以写成

$$\begin{cases} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=b_1 \\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=b_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n=b_n \end{cases} \tag{1.2}$$

设 $a_{11}\neq 0$,令 $l_{i1}=\dfrac{a_{i1}}{a_{11}} \quad (i=2,3,\cdots,n)$

从第 i 个方程减去第一个方程乘以 l_{i1},于是得到一个等价的方程组

$$\left.\begin{aligned} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n&=b_1 \\ a_{22}^{(1)}x_2+\cdots+a_{2n}^{(1)}x_n&=b_2^{(1)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots& \\ a_{n2}^{(1)}x_2+\cdots+a_{nn}^{(1)}x_n&=b_n^{(1)} \end{aligned}\right\} \tag{1.3}$$

式中 $a_{ij}^{(1)}=a_{ij}-l_{i1}a_{1j} \quad (i,j=2,3,\cdots,n)$

$b_i^{(1)}=b_i-l_{i1}b_1 \quad (i=2,3,\cdots,n)$

设 $a_{22}^{(1)}\neq 0$,重复以上步骤,最后化为以下三角形方程组

$$\begin{aligned} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n&=b_1 \\ a_{22}^{(1)}x_2+\cdots+a_{2n}^{(1)}x_n&=b_2^{(1)} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots& \\ a_{nn}^{(n-1)}x_n&=b_n^{(n-1)} \end{aligned} \tag{1.4}$$

以上这种将系数矩阵对角线以下元素消为零的过程叫做消元过程。消元过程的计算公式为

$$\begin{cases} w=\dfrac{a_{ki}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}} \\ a_{kj}^{(i)}=a_{kj}^{(i-1)}-wa_{ij}^{(i-1)} \\ b_k^{(i)}=b_k^{(i-1)}-wb_i^{(i-1)} \end{cases} \tag{1.5}$$

$(i=1,2,\cdots n-1;k=i+1,\cdots,n;j=i+1,\cdots,n)$

三角形方程组(1.4)的 n 个方程可以表示为

$$a_{kk}^{(k-1)}x_k+a_{k,k+1}^{(k-1)}x_{k+1}+\cdots+a_{kn}^{(k-1)}x_n=b_k^{(k-1)} (k=1,2,\cdots,n) \tag{1.6}$$

有了等价的三角形方程组(1.4),求解就非常容易了。从(1.4)的最后一个方程可以求出

$$x_n=b^{(n-1)}/a_{nn}^{(n-1)}$$

将求得的 x_n 代入方程组(1.4)的倒数第二个方程,便可以求出 x_{n-1},再将求出的 x_n,x_{n-1} 代入方程组(1.4)中的倒数第三个方程,就可以求出 x_{n-2}。照此办理,就可以依次求出全部 $x_k(k=n,n-1,\cdots,1)$。这一过程叫做回代过程。它的计算公式可以归纳为

$$\begin{cases}x_n=b_n^{(n-1)}/a_{nn}^{(n-1)}\\ x_k=\left(b_k^{(k-1)}-\sum\limits_{j=k+1}^{n}a_{kj}^{(k-1)}x_j\right)/a_{kk}^{(k-1)}\quad(k=n-1,\cdots,1)\end{cases}\tag{1.7}$$

顺便指出,用一个对 i,k,j 的三重循环,仅需三个计算语句,便可以写出消元过程的计算机程序。至于回代过程,所用循环和计算语句就更简短了。总之,计算程序简单是 Gauss 消去法的一大特点。

2. Gauss 消去法的计算次数

一个算法的好坏一般地用以下指标来衡量:①所求出的解的计算精度;②所占计算机内存单元的多少;③运算工作量的大小。现在讨论 Gauss 消去法的运算工作量,即计算次数,实际上只需讨论乘除运算次数,因为加减运算次数是与乘除次数相关的。

(1)消元过程的乘除运算次数

消去第 1 列中 $n-1$ 个系数所需乘法次数为 $(n-1)n$,消去第 2 列中 $n-2$ 个系数所需乘法次数为 $(n-2)(n-1)$,直到消去第 $n-1$ 列中的 1 个系数所用的乘法次数为 1×2。所以消元过程所需乘法次数为

$$\begin{aligned}\sum_{k=2}^{n}(k-1)k&=\sum_{k=1}^{n}(k-1)k=\sum_{k=1}^{n}k^2-\sum_{k=1}^{n}k\\&=\frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)-\frac{1}{2}n(n+1)\\&=\frac{1}{3}n^3-\frac{1}{3}n\end{aligned}$$

生成 $w=\dfrac{a_{ii}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}}$ 的除法次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1} k=\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n$$

(2)回代过程的乘除运算次数

容易看出,乘法次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1} k=\frac{1}{2}(n-1)n=\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n$$

显然除法次数为 n。将(1)和(2)的乘除运算次数相加,便得到用 Gauss 消去法解 n 阶线性方程组所需乘除运算次数为

$$\frac{1}{3}n^3+n^2-\frac{1}{3}n \tag{1.8}$$

3. 选取主元的必要性

Gauss 消去法的每一步运算,分别以对角元素 $a_{11}, a_{22}^{(1)}, \cdots, a_{nn}^{(n-1)}$做除数进行消元。如果出现对角元素 $a_{kk}^{(k-1)}=0$,则消元过程无法进行;如果 $a_{kk}^{(k-1)}\approx 0$,以一个绝对值很小的数作除数,就会导致其他元素量级的巨大增长和舍入误差的扩散,最后使得计算机溢出而停机或出现不可接受的结果。选取主元的主元素消去法是为控制舍入误差而提出来的一种算法。

例 1 方程组

$$\begin{cases} 0.0003x_1+3.0000x_2=2.0001 \\ 1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000 \end{cases}$$

的精确解为 $x_1=\frac{1}{3}, x_2=\frac{2}{3}$。现在用 Gauss 消去法求解。取五位有效数字,将第二个方程中的 x_1 消去,得到

$$\begin{cases} 0.0003x_1 + 3.0000x_2 = 2.0001 \\ \qquad\qquad\quad 9999.0x_2 = 6666.0 \end{cases}$$

从第二个方程解出 $x_2=0.6667$,再代入第一个方程得

$$0.0003x_1+3.0000\times 0.6667=2.0001$$

这时求得的 $x_1=0$。这说明在计算过程中,若规定取小数点后四位数字计算,所得结果与精确解相差很大,以致于不能接受。这是因为以 0.0003 作除数,使舍入误差扩散所造成的。为了控制舍入误差,我们采取另一种消元过程。即每一次消元时,先从对角元素(含

对角元素)以下的元素中,选取绝对值最大的一个,然后进行行交换,将它交换到对角线的位置再进行消元。这样就避免了以绝对值很小的数作除数而引起的误差扩散,从而也就保证了计算精度。这种消去法叫做列主元素消去法。以下用列主元素消去法求解例1的方程组。为此,在第一次消元时,列主元是元素 $a_{21}=1.0000$,故先将方程组中的两个方程交换而变为

$$\begin{cases}1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000\\0.0003x_1+3.0000x_2=2.0001\end{cases}$$

消去第二个方程中的 x_1,得

$$\begin{cases}1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000\\\qquad\qquad\quad 2.9997x_2=1.9998\end{cases}$$

从而求得 $x_2=0.6667$,$x_1=0.3333$。这个结果和精确解非常接近。例1告诉我们,抑制舍入误差的增长是十分重要的。抑制舍入误差的增长通常有两种途径,一是增加参与计算的数字位数,从而使最后结果中累积起来的误差随之减小。例如采用双倍字长计算,但这样做会使计算时间增长。另一途径就是采用主元素消去法,这可以保证在做除法运算时,除数的绝对值比较大,以使舍入误差较小。

主元素消去法,除列主元消去法外,还有一种叫做全主元消去法。这种消去法的第一步是在整个系数矩阵中选取绝对值最大的一个元素作为主元素,然后进行行列交换,将它换到第一个对角元素的位置,继而进行消元运算。第二步是从右下 $n-1$ 阶矩阵中选取绝对值最大的元素作为主元,其余类推。显然,全主元消去法比列主元消去法更能保证计算精度。然而,这一方法,在每次选定主元后,除进行行交换外,还要进行相应的列交换。但是进行列交换时,未知量的次序也随之交换。因此在消元和回代过程全部结束后,尚需对未知量的次序作相应的调整。自然,全主元消去法的计算机程序要比列主元的复杂一些。鉴于列主元消去法已有较高的计算精度,所以求解线性方程组大多采用列主元消去法。而对于有限单元方法,由于欲求解的线性方程组的系数矩阵是正定的。因此普通的 Gauss 消去法就足可以保证计算精度。

§2　矩阵分解方法

Gauss 消去法的消元和回代过程，形式上是对线性方程组的各个方程进行运算，而实质上是对系数矩阵及右端项进行运算，因为消元和回代过程全部反映在系数矩阵和右端项的变化上。而这些变化均可以借助于矩阵的运算来完成。

1. Gauss 消去法剖析——消元过程和矩阵的初等交换

设线性方程组 $AX=b$ 的系数矩阵为

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

第一步消元后的系数矩阵可以表示为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -l_{n1} & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \triangleq T_1 A$$

式中，$l_{i1}=\dfrac{a_{i1}}{a_{11}}\quad(i=2,\cdots,n)$，矩阵 T_1 是在单位矩阵第 1 列对角元素以下填补 $-l_{i1}\quad(i=2,\cdots,n)$ 而得到的。第二步消元后的系数矩阵为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}$$

$$
=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ 0 & 1 & & \\ 0 & -l_{32} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & -l_{n2} & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}\triangleq T_2T_1A
$$

式中，$l_{i2}=a_{i2}^{(1)}/a_{22}^{(1)}\quad(i=3,\cdots,n)$。矩阵 T_2 是在单位矩阵第 2 列对角元素以下填补 $-l_{i2}\quad(i=3,\cdots,n)$ 而得到的。

令
$$
T_K=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -l_{k+1,k} & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & 1 \end{bmatrix}(k=1,2,\cdots,n-1) \quad (1.9)
$$

式中，$l_{ik}=a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)}(i=k+1,\cdots,n)$。矩阵 T_k 是在单位矩阵第 k 列对角元素以下填补 $-l_{ik}(i=k+1,\cdots,n)$ 而得到的。第 k 步消元后，系数矩阵变为 $T_kT_{k-1}\cdots T_1A$。当 $k=n-1$ 时，即完成第 $n-1$ 步消元后，有

$$
T_{n-1}T_{n-2}\cdots T_1A=U \quad (1.10)
$$

式中，U 为上三角矩阵，即

$$
U=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}
$$

而 T_k 的逆矩阵为

$$
T_k^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{k+1,k} & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & l_{nk} & & 1 \end{bmatrix} \quad (1.11)
$$

即 T_k^{-1} 是由 T_k 去掉第 k 列元素的负号而得到的。又

$$T_1^{-1}T_2^{-1}=\begin{bmatrix}1&&&\\l_{21}&1&&\\\vdots&&\ddots&\\l_{n1}&&&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&&&&\\0&1&&&\\0&l_{32}&\ddots&&\\\vdots&\vdots&&\ddots&\\0&l_{n2}&&&1\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}1&&&\\l_{21}&1&&\\l_{31}&l_{32}&\ddots&\\\vdots&\vdots&&\ddots\\l_{n1}&l_{n2}&&&1\end{bmatrix}$$

将 $n-1$ 个 $T_k^{-1}(k=1,2,\cdots,n-1)$连乘得到

$$T_1^{-1}T_2^{-1}\cdots T_{n-1}^{-1}=\begin{bmatrix}1&&&&\\l_{21}&1&&&\\l_{31}&l_{32}&\ddots&&\\\vdots&\vdots&&1&\\l_{n1}&l_{n2}&\cdots&l_{n,n-1}&1\end{bmatrix}=L \qquad (1.12)$$

这里 L 为单位下三角矩阵。

由(1.10)式得到

$$A=T_1^{-1}T_2^{-1}\cdots T_{n-1}^{-1}U=LU \qquad (1.13)$$

(1.13)式叫做矩阵 A 的 Doolittle 分解。

2. Doolittle 分解的计算方法

现在讨论如何将矩阵 A 分解成单位下三角矩阵 L 和上三角矩阵 U 的乘积。为方便起见，将 U 的元素记作 u_{ij}。也就是讨论如何根据矩阵 A 的元素 a_{ij} 计算出矩阵 L 和 U 的元素 l_{ij} 和 u_{ij}。为此，令

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

$$
= \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & 1 & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}
$$

由矩阵乘法运算规则不难看出以下关系式成立：

$$a_{1j} = u_{1j} \quad (j=1,2,\cdots,n)$$

$$a_{i1} = l_{i1}u_{11} \quad (i=2,3,\cdots,n)$$

从而得到

$$
\begin{cases} u_{1j} = a_{1j} & (j=1,2,\cdots,n) \\ l_{i1} = a_{i1}/u_{11} & (i=2,3,\cdots,n) \end{cases} \tag{1.14}
$$

设 u 的第 1 到 $i-1$ 行，L 的第 1 到 $i-1$ 列已经算出，以下计算 u 的第 i 行和 L 的第 i 列。又矩阵 A 的第 i 行第 j 列的元素等于矩阵 L 的第 i 行与矩阵 U 的第 j 列的乘积，即

$$
a_{ij} = (l_{i1}, l_{i2}, \cdots, l_{i,i-1}, 1, 0, \cdots, 0) \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{jj} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
$$

当 $j \geqslant i$ 时，有

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} + u_{ij}$$

当 $j < i$ 时，有

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} + l_{ij}u_{jj}$$

所以得到

$$
\begin{cases} u_{ij} = a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} & (j = i, i+1, \cdots, n) \\ l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}\right) / u_{jj} & (i = j+1, \cdots, n) \end{cases} \tag{1.15}
$$

3. Doolittle 分解的计算次数

先计算 u_{ij} 的乘法次数。计算 U 的第 2 行的元素用 $1(n-1)$ 次乘法，第 3 行用 $2(n-2)$ 次，…，第 n 行用 $(n-1)1=(n-1)[n-(n-1)]$。所以计算 u_{ij} 的乘法次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1} k(n-k)=n\sum_{k=1}^{n-1} k-\sum_{k=1}^{n-1} k^2$$

再计算 l_{ij} 的乘法次数，计算 L 的第 2 列的元素用 $1(n-2)$ 次乘法，第 3 列用 $2(n-3)$ 次，…，第 $n-1$ 列用 $(n-2)1=(n-2)[n-(n-2)-1]$。所以 l_{ij} 的乘法次数为

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n-2} k(n-k-1) &= \sum_{k=1}^{n-1} k(n-k-1)\\ &=n\sum_{k=1}^{n-1} k-\sum_{k=1}^{n-1} k^2-\sum_{k=1}^{n-1} k\end{aligned}$$

显然计算 L 的元素所需的除法次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1} k$$

从而得到 Doolittle 分解的计算次数为

$$\begin{aligned}2\left(n\sum_{k=1}^{n-1}k-\sum_{k=1}^{n-1}k^2\right) &= 2\left(n\frac{1}{2}(n-1)n-\frac{1}{6}(n-1)n(2n-1)\right)\\ &=\frac{1}{3}n^3-\frac{1}{3}n\end{aligned}$$

4. 利用 Doolittle 分解计算方程组的解

Doolittle 分解方法是把一个线性方程组分解成两个简单的方程组来求解。设线性方程组为

$$AX=b$$

令　$A=LU$ 则原方程组可以写为

$$LUX=b$$

再令 $Y=UX$，于是将求解 $AX=b$ 变为求解两个线性方程组

$$LY=b \tag{1}$$

和

$$UX=Y \tag{2}$$

先求解方程组(1)，即求解

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

显然，有 $y_1=b_1$，求解该方程组的递推公式为

$$y_i=b_i-\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k \qquad (i=1,2,\cdots,n) \tag{1.16}$$

容易看出，计算 $y_i(i=1,2,\cdots,n)$ 的乘法次数为 $\sum\limits_{k=1}^{n-1} k$。

现在求解方程组(2)，即求解

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \cdots\cdots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

显然有 $x_n=y_n/u_{nn}$。求解的递推公式为

$$x_i=(y_i-\sum_{k=i+1}^{n} u_{ik}x_k)/u_{ii} \qquad (i=n,n-1,\cdots,1) \tag{1.17}$$

容易看出，计算 $x_i(i=n,n-1,\cdots,1)$ 的乘法次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1}k$$

除法次数为 n。故得求解线性方程组(1)和(2)的乘除运算次数为

$$2\sum_{k=1}^{n-1}k+n=(n-1)n+n=n^2$$

因此，对一个 n 阶线性方程组 $AX=b$，从对系数矩阵进行分解到求得方程组的解，所需乘除运算次数为 $\frac{1}{3}n^3+n^2-\frac{1}{3}n$。这和用 Gauss 消去法求解 $AX=b$ 所需乘除运算次数完全相同。

用 Doolittle 分解方法求解线性方程组 $AX=b$ 所占计算机内存单元与 Gauss 消去法所需的内存单元数是一样的。三角矩阵 L、U 的元素按以下形式存放

$$
\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}
$$

实际上,Doolittle 分解方法和 Gauss 消去法是一回事。更确切地讲,Doolittle 分解法是 Gauss 消去法矩阵形式的表达。事实上,求解方程组(1)就是消元过程,方程组(1)的解就是 $AX=b$ 消元以后的右端项,即 Y

$$
Y=L^{-1}b=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(n-1)} \end{bmatrix}
$$

而求解方程(2)也就是求解方程组

$$
\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \cdots\cdots\cdots & \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(n-1)} \end{bmatrix}
$$

也就是 Gauss 消去法的回代过程。

然而,Gauss 消去法消元过程完成后,方程组的系数矩阵已不复存在,可是 Doolittle 方法求解方程组(1)和(2)时,并不破坏三角矩阵 L 和 U 的元素 l_{ij} 和 u_{ij}。因此,对于求解同一系数矩阵而若干不同右端项的线性方程组时,Doolittle 方法就比 Gauss 消去法有其所长。

设线性方程组的系数矩阵 A 是一个 $n\times n$ 的矩阵,右端项有 m 个 n 维列向量 $b_1,b_2,\cdots,b_m$,由上述可知,用 Doolittle 分解方法将矩阵 A 分解成 $A=LU$ 后,分别对 m 个右端项求解,所需计算机内存单元数为 $n\times n+n$,所用乘除运算次数为 $\frac{1}{3}n^3-\frac{1}{3}n+mn^2$。如果用 Gauss 消去法求解这类方程,可按两种方式进行。一种方式是将系数矩阵 A 和 m 个右端项一并存入计算机内存单元,即存放一个 n

$\times(n+m)$矩阵$[A \vdots b_1b_2\cdots b_m]$，然后对 m 个右端项 $b_1,b_2,\cdots,b_m$ 同时消元和回代，这样求解时所用乘除运算次数亦为$\frac{1}{3}n^3-\frac{1}{3}n+mn^2$，即与 Doolittle 分解方法求解的计算工作量一样，但需多占$(m-1)n$个内存单元。另一方式是对 m 个右端项逐个消元和回代。这样所需计算机内存单元数为 $n\times n+n$，即与 Doolittle 方法的一样。但是所需乘除运算次数为 $m\left(\frac{1}{3}n^3+n^2-\frac{1}{3}n\right)$，要比 Doolittle 的运算次数大得多，尤以方程组的阶数 n 大时为甚。

上面提到的这种线性方程组是经常遇到的。例如用有限单元法计算一个结构(如桁架、刚架及铁路轨道等)在若干组不同荷载分别作用下的强度时，就归结为求解同一系数矩阵而若干不同右端项的线性方程组。这时方程组的系数矩阵就是结构刚度矩阵，右端项是若干荷载列向量。对于节点数 n 很大的大型刚架，由于结构刚度矩阵是一个 $3n\times 3n$ 的矩阵，m 个荷载列向量都是 $3n$ 维的，受计算机内存容量的限制，往往不能将这样的一个大矩阵和 m 个列向列一并存入计算机内存。这时采用 Doolittle 分解方法求解就比采用 Gauss 消去法求解能够节省机时。

例 1 用 Doolittle 分解方法求解线性方程组

$$AX=B=[b_1b_2]$$

式中 $$A=\begin{bmatrix}2&2&3\\4&7&7\\-2&4&5\end{bmatrix},b_1=\begin{bmatrix}3\\1\\-7\end{bmatrix},b_2=\begin{bmatrix}7\\18\\1\end{bmatrix}$$

解 这是同一系数矩阵，两个右端项的线性方程组。先将系矩阵 A 分解成 L 和 U 的乘积，即 $A=LU$。由(1.14)式，得

$$u_{11}=2,u_{12}=2,u_{13}=3$$

$$l_{21}=a_{21}/u_{11}=4/2=2,l_{31}=a_{31}/u_{11}=-2/2=-1$$

再由(1.15)式可以计算出

$$u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}=3,u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}=1$$

$$l_{32}=(a_{32}-l_{31}u_{12})/u_{22}=6/3=2$$

$$u_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}-l_{32}u_{23}=5+3-2=6$$

先求解第一个方程组，由 $LY=b_1$，即

$$\begin{bmatrix}1 & & \\ 2 & 1 & \\ -1 & 2 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\ y_2\\ y_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\\ 1\\ -7\end{bmatrix}$$

利用(1.16)式可以求出 $y_1=3, y_2=-5, y_3=6$，再由 $UX=Y$，即

$$\begin{bmatrix}2 & 2 & 3\\ & 3 & 1\\ & & 6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\\ -5\\ 6\end{bmatrix}$$

利用(1.17)式可以求出

$$x_1=2, x_2=-2, x_3=1$$

对第二个方程组，由 $LY=b_2$ 利用(1.15)式可以求出

$$y_1=7, y_2=4, y_3=6$$

再由 $UX=Y$ 利用(1.16)式可以计算出

$$x_1=1, x_2=1, x_3=1$$

5. 矩阵的 LDU 分解及其存在唯一性

为了进一步探讨 Gauss 消去法，Doolittle 分解以及其他矩阵分解方法，现在介绍矩阵的 LDU 分解。

定义 称

$$A=LDU$$

为矩阵 A 的 LDU 分解，其中 U 为单位上三角矩阵，D 为非奇异对角矩阵，L 为单位下三角矩阵。

由 LDU 的定义知道，L,D,U 均为非奇异矩阵。矩阵 A 若有 Doolittle 分解，则有 LDU 分解，实际上，上三角矩阵 U 可以分解成非奇异对角矩阵和单位上三角矩阵的乘积，即

$$U=\begin{bmatrix}u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n}\\ & u_{22} & \cdots & u_{2n}\\ & & \cdots\cdots & \\ & & & u_{nn}\end{bmatrix}$$

$$
=\begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & u_{12}/u_{11} & \cdots & u_{1n}/u_{11} \\ & 1 & \cdots & u_{2n}/u_{22} \\ & & \cdots\cdots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}
$$

记 $d_i=u_{ii}(i=1,2,\cdots,n),u_{ij}=u_{ij}/u_{ii}(i=1,2,\cdots,n-1;j=i+1,\cdots,n)$则 Doolittle 分解变为 LDU 分解。

定理 1 设 $A=[a_{ij}]$是一个 $n\times n$ 矩阵,令

$$
A_K=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{bmatrix} \quad (k=1,2,\cdots,n)
$$

则矩阵 A 有唯一的 LDU 分解的充分必要条件是 A_K 均为非奇异矩阵。

证 第一,唯一性。设 A 有两种 LDU 分解,即

$$A=L_1D_1U_1=L_2D_2U_2$$

由于 L_1、D_1、U_1、L_2、D_2、U_2 均为非奇异矩阵,故均可逆。从而有

$$L_2^{-1}L_1=D_2U_2U_1^{-1}D_1^{-1}$$

上式左端是一个单位下三角矩阵,右端是一个上三角矩阵,欲左右矩阵相等,则必为一单位矩阵。故有

$$L_2^{-1}L_1=I$$

即

$$L_1=L_2$$

同样可证 $U_1=U_2$。又由 $L_1D_1U_1=L_2D_2U_2$ 可得

$$D_1=L_1^{-1}L_2D_2U_2U_1^{-1}=D_2$$

所以唯一性得证。

第二,必要性。设 A 有 LDU 分解,即

$$A=LDU$$

由矩阵乘法规则可得 $A_k=L_kD_kU_k$,而 $|L_k|\neq0$,$|D_k|\neq0$,$|U_k|\neq0$,故有 $|A_k|\neq0$。

第三,充分性。设 $|A_k|\neq0(k=1,2,\cdots,n)$显然 $k=1$ 时 A_1 有 LDU 分解,实际上 $A_L=a_{11}=1\cdot a_{11}\cdot 1$。假设 A_k 有这种形式的分解,