

第三章 线性方程

第(1)部分: 高斯消去法

目录

1. 问题概览
2. 高斯消元法
3. 复杂度
4. 列主元素消去法
5. 高斯消元和 LU 分解法
6. 列主元素消去法和 PLU 分解
7. 总结和附录

解线性方程组

之前介绍的，我们可以通过迭代法来求解方程 $f(x) = 0$ 。

解线性方程组 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} - \mathbf{b}$ 在大量的复杂计算问题中是一个十分基础的模块。因而，对这类问题的细致研究具有现实的必要性。

我们想要解 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

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

其中 \mathbf{A} 是非奇异矩阵，即 $\det(\mathbf{A}) \neq 0$ 。

▶ 直接法：针对低阶稠密矩阵

高斯消元法、LU 分解法等

▶ 迭代法：针对大型的稀疏矩阵

Jacobi 迭代法、Gauss-Seidel 迭代法、超松弛迭代法等

目录

1. 问题概览
2. 高斯消元法
3. 复杂度
4. 列主元素消去法
5. 高斯消元和 LU 分解法
6. 列主元素消去法和 PLU 分解
7. 总结和附录

高斯消元法的核心例子

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ 4x_2 - x_3 = 5 \\ \underbrace{2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1}_{\text{消去 } x_1} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ 4x_2 - x_3 = 5 \\ -4x_2 - x_3 = -11 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \text{再次消去 } x_2 \text{ 可得 } \begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ 4x_2 - x_3 = 5 \\ -2x_3 = -6 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 2 \\ x_3 = 3 \end{cases}$$

整个过程可以简写为：

$$(\mathbf{A} | \mathbf{b}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 0 & -4 & -1 & -11 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{array} \right)$$

高斯消元法的一般形式

对于给定的 $(\mathbf{A}^{(1)} \mid \mathbf{b}^{(1)}) \equiv (\mathbf{A} \mid \mathbf{b})$ ，第一次消元后可得

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array} \right) \quad \begin{array}{l} \text{不变} \\ \text{行 2 减去行 1} \times a_{21}^{(1)} / a_{11}^{(1)} \\ \vdots \\ \text{行 n 减去行 1} \times a_{n1}^{(1)} / a_{11}^{(1)} \end{array}$$

因而，我们需要如下符号 $m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \quad (i \geq 2)$ 。新矩阵的元素是

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)} \quad (i \geq 2, j \geq 2)$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)} \quad (i \geq 2)$$

问题：我们需要多少次加减法、乘法、除法？（包含更新 $\mathbf{b}_i^{(2)}$ ）

高斯消元法的一般形式

对于给定的 $(\mathbf{A}^{(1)} \mid \mathbf{b}^{(1)}) \equiv (\mathbf{A} \mid \mathbf{b})$, 第一次消元后可得

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array} \right) \quad \begin{array}{l} \text{不变} \\ \text{行 2 减去行 1} \times a_{21}^{(1)} / a_{11}^{(1)} \\ \vdots \\ \text{行 n 减去行 1} \times a_{n1}^{(1)} / a_{11}^{(1)} \end{array}$$

因而, 我们需要如下符号 $m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \quad (i \geq 2)$ 。新矩阵的元素是

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(2)} &= a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)} \quad (i \geq 2, j \geq 2) \\ b_i^{(2)} &= b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)} \quad (i \geq 2) \end{aligned}$$

问题: 我们需要多少次加减法、乘法、除法? (包含更新 $\mathbf{b}_i^{(2)}$)

答案: $(n-1)n = \mathcal{O}(n^2)$, $(n-1)n = \mathcal{O}(n^2)$, $n-1 = \mathcal{O}(n)$

不断重复后，在 $k - 1$ 步后，我们可得

$$(\mathbf{A}^{(k)} \mid \mathbf{b}^{(k)}) = \left(\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{array} \right)$$

最后我们可以得到 $\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$:

$$(\mathbf{A}^{(n)} \mid \mathbf{b}^{(n)}) = \left(\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{array} \right) \quad (1)$$

我们可以直接得到

$$x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \quad (2)$$

通过逐步回代的过程:

$$x_k = (b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k)} x_j) / a_{kk}^{(k)} \quad (\text{回代过程}) \quad (3)$$

注: 若 $a_{11}^{(1)} = 0$, 则通过换行将第一行和第 i_1 行交换 (假设 $a_{i_1,1} \neq 0$)。

练习

回代过程需要多少次乘除法运算：

$$x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}$$
$$x_k = (b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k)} x_j) / a_{kk}^{(k)}, \quad k = n - 1, \dots, 1.$$

- A $\mathcal{O}(n)$
- B $\mathcal{O}(n^2)$
- C $\mathcal{O}(n^3)$

练习

回代过程需要多少次乘除法运算：

$$x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}$$

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

A $\mathcal{O}(n)$

B $\mathcal{O}(n^2)$

C $\mathcal{O}(n^3)$

答案： B

总结一下

定理

若 \mathbf{A} 为 n 阶非奇异矩阵，则可通过高斯消去法（以及行交换）变成三角方程组。

引理

假设无行交换。则 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, k)$ 的充要条件是 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$), 其中

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (\text{这个数量又叫做顺序主子式}).$$

定理

若 $D_k \neq 0$, 其中 $k = 1, 2, \dots, n-1$ 。则 $\begin{cases} a_{11}^{(1)} = D_1 \\ a_{kk}^{(k)} = D_k / D_{k-1} \quad k = 2, 3, 4, \dots, n \end{cases}$

核心点就是假设没有行交换, 行列式的值在高斯消元过程中不变。

定理 (课本定理 7.2)

如果 n 阶矩阵 \mathbf{A} 的所有顺序主子式均不为零, 即 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 则可通过 Gauss 消去法 (不进行交换两行的初等变换), 将方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 约化为三角方程组 (见讲义内公式(1))。

计算公式如下:

(1) 消元计算 ($k = 1, 2, \dots, n - 1$)

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

(2) 回代计算求解公式为讲义内公式(2)和(3)。

目录

1. 问题概览
2. 高斯消元法
3. 复杂度
4. 列主元素消去法
5. 高斯消元和 LU 分解法
6. 列主元素消去法和 PLU 分解
7. 总结和附录

高斯消去法需要的运算次数

对于 $n \times n$ 的矩阵，第一层的高斯消元需要加减法 $(n-1)n$ ，乘法 $(n-1)n$ ，除法 $n-1$ 。因而

总的加减法次数是 _____

总的乘法次数是 _____

总的除法次数是 _____

总的乘除法次数是 _____

高斯消去法需要的运算次数

对于 $n \times n$ 的矩阵，第一层的高斯消元需要加减法 $(n-1)n$ ，乘法 $(n-1)n$ ，除法 $n-1$ 。因而

总的加减法次数是 $\sum_{i=2}^n (i-1)i = \mathcal{O}(n^3)$

总的乘法次数是 $\sum_{i=2}^n (i-1)i = \mathcal{O}(n^3)$

总的除法次数是 $\sum_{i=2}^n i - 1 = \mathcal{O}(n^2)$

总的乘除法次数是 $\mathcal{O}(n^3) + \mathcal{O}(n^2) = \mathcal{O}(n^3)$

由于回代过程需要的计算量是 $\mathcal{O}(n^2)$ ，因而对于高斯消去法求解线性方程组需要的乘除法/加减法的计算量主要由消元过程来主导，且该方法求解线性方程组的复杂度是 $\mathcal{O}(n^3)$ 。

目录

1. 问题概览
2. 高斯消元法
3. 复杂度
4. 列主元素消去法
5. 高斯消元和 LU 分解法
6. 列主元素消去法和 PLU 分解
7. 总结和附录

高斯顺序消去法的问题

问题 1: 若 $a_{11}^{(1)} = 0$ ，我们需要行交换才能使用高斯消元。

问题 2: 精度问题

高斯消元过程理论上没有任何的数值方法层面的近似，但是有效数字对误差精度有影响。

例子

$$\begin{pmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.000 \\ 2.000 \\ 3.000 \end{pmatrix}$$

如果计算过程使用 4 位有效数字，解离实际值相差很远。

$$(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \begin{pmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} m_{21} = -1.000/0.001 = -1000 \\ m_{31} = -2.000/0.001 = -2000 \end{matrix}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 4001 & 6006 & 2003 \end{pmatrix} \quad m_{32} = 4001/2004 = 1.997$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 0 & 5.000 & 2.000 \end{pmatrix} \rightarrow \bar{\mathbf{x}} = (-0.4000, -0.09980, 0.4000)^T.$$

其中真实值为 $\mathbf{x}^* = (-0.4904, -0.05104, 0.3675)^T$.

该问题的来源： $|m_{k,1}|$ 太大了。

所以问题的解决变成了如何使得 $a_{11}^{(1)}$ 足够大，且不改变问题本身 \Rightarrow 行交换

[方法2] 交换行,避免绝对值小的主元作除数.

$$(A, b) \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_3} \left(\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \end{array} \right) \begin{array}{l} m_{21} = 0.5000 \\ m_{31} = -0.0005 \end{array}$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 2.001 & 3.003 & 1.002 \end{array} \right) m_{32} = 0.6300$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 0 & 1.868 & 0.6870 \end{array} \right),$$

得计算解为 $\mathbf{x} = (-0.4900, -0.05113, 0.3678)^T \approx \mathbf{x}^*$.

(同步可参考代码里的实验。)

列主元素消去法

比如在第 k 步,

$$(\mathbf{A}^{(k)} \mid \mathbf{b}^{(k)}) = \left(\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & \boxed{a_{kk}^{(k)}} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ & & & \boxed{a_{nk}^{(k)}} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{array} \right)$$

找到 $a_{kk}^{(k)}, a_{(k+1)k}^{(k)}, a_{(k+2)k}^{(k)}, \dots, a_{nk}^{(k)}$ (及带框的部分) 中绝对值最大的,

$$\left| a_{i_k, k}^{(k)} \right| = \max_{k \leq i \leq n} \left| a_{ik}^{(k)} \right|.$$

然后将第 k 行和第 i_k 行交换。

练习:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 10 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 8 \\ 17 \\ 28 \end{pmatrix}.$$

目录

1. 问题概览
2. 高斯消元法
3. 复杂度
4. 列主元素消去法
5. 高斯消元和 LU 分解法
6. 列主元素消去法和 PLU 分解
7. 总结和附录

矩阵的三角分解

假设各顺序主子式不为 0

我们可以验证一下，高斯消元其实就等价于左乘某个矩阵 \mathbf{L}_1 ：

$$\mathbf{L}_1 \mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}^{(2)} \quad \mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & \\ -m_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & & 1 \end{pmatrix}$$

因而，高斯消去法的过程可以写成如下的矩阵形式：

$$\mathbf{L}_{n-1}\mathbf{L}_{n-2}\cdots\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A}^{(1)} = \underbrace{\mathbf{A}^{(n)}}_{\text{上三角矩阵}} \quad \text{标记为 } \mathbf{U}$$

$$\mathbf{L}_{n-1}\mathbf{L}_{n-2}\cdots\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}^{(n)}$$

$$\Rightarrow \mathbf{A} \equiv \mathbf{A}^{(1)} = \underbrace{\mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\cdots\mathbf{L}_{n-1}^{-1}} \mathbf{U} = \mathbf{L}\mathbf{U}$$

其中矩阵 \mathbf{L} 是一个下三角矩阵：

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

问题：不做任何的计算的前提下，请解释为什么 $\mathbf{L}_{n-1}\mathbf{L}_{n-2}\cdots\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{L} = \mathbf{I}$?

结论：LU 分解

定理 (矩阵 LU 分解)

假设 \mathbf{A} 为 n 阶可逆矩阵，若 $D_i \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n - 1$)，则 \mathbf{A} 可分解为一个单位下三角矩阵 \mathbf{L} 和一个上三角矩阵 \mathbf{U} 的乘积，且分解唯一。

该分解的存在性其实通过高斯消去法已经得到了。

引理 (证明可见附录)

- ▶ 若 U 为上三角矩阵, 且 U 可逆, 则 U^{-1} 为上三角矩阵。
- ▶ 若 U 为单位上三角矩阵, 且 U 可逆, 则 U^{-1} 为单位上三角矩阵。

引理

- ▶ 若 L 为下三角矩阵, 且 L 可逆, 则 L^{-1} 为下三角矩阵。
- ▶ 若 L 为单位下三角矩阵, 且 L 可逆, 则 L^{-1} 为单位下三角矩阵。

引理

- ▶ 若 U_1, U_2 为 (单位) 上三角, 则 $U_1 U_2$ 为 (单位) 上三角。
- ▶ 若 L_1, L_2 为 (单位) 下三角, 则 $L_1 L_2$ 为 (单位) 下三角。

证明：矩阵 LU 分解的唯一性.

若不唯一，则存在 $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} = \mathbf{L}_1\mathbf{U}_1$ ，进而我们可知

$$\underbrace{\mathbf{L}^{-1}\mathbf{L}_1}_{\text{单位下三角}} = \underbrace{\mathbf{U}\mathbf{U}_1^{-1}}_{\text{上三角}}$$

因而， $\mathbf{L}^{-1}\mathbf{L}_1 = \mathbf{U}\mathbf{U}_1^{-1} = \mathbf{I} \rightarrow \mathbf{L} = \mathbf{L}_1, \mathbf{U} = \mathbf{U}_1$ ，故而假设不成立。通过反证法可知唯一性。 □

例子

对于讲义一开始的 3×3 矩阵,

$$(\mathbf{A} \mid \mathbf{b}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{array} \right)$$

$m_{21} = 0$, $m_{31} = 2$, $m_{32} = -1$, 因此

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

目录

1. 问题概览
2. 高斯消元法
3. 复杂度
4. 列主元素消去法
5. 高斯消元和 LU 分解法
6. 列主元素消去法和 PLU 分解
7. 总结和附录

对于列主元素消去法，我们也可以类似写成矩阵的形式

新的概念是排列矩阵

定义

排列矩阵是单位矩阵通过行交换得到的； $I_{j,k}$ 是指将单位矩阵的第 j 行和第 k 行交换。

例子：我们考虑 4×4 的矩阵

$$I_{2,3} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \quad I_{2,4} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

消元的过程可以写成

$$\begin{array}{l} \mathbf{L}_1 \mathbf{l}_{1,i_1} \mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}^{(2)} \quad \mathbf{L}_1 \mathbf{l}_{1,i_1} \mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}^{(2)} \\ \mathbf{L}_2 \mathbf{l}_{2,i_2} \mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{A}^{(3)} \quad \mathbf{L}_2 \mathbf{l}_{2,i_2} \mathbf{b}^{(2)} = \mathbf{b}^{(3)} \\ \vdots \\ \mathbf{L}_k \mathbf{l}_{k,i_k} \mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{A}^{(k+1)} \quad \mathbf{L}_k \mathbf{l}_{k,i_k} \mathbf{b}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k+1)} \\ \vdots \end{array}$$

其中 \mathbf{L}_k 中的元素满足 $|m_{i,k}| \leq 1$ ($i = k + 1, \dots, n$)。

问题：为什么能满足小于等于 1？

合并

$$\underbrace{L_{n-1} I_{n-1, i_{n-1}} \cdots L_2 I_{2, i_2} L_1 I_{1, i_1}}_{=:\tilde{P}} \mathbf{A} = \mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{U}$$

所以

$$\tilde{P}\mathbf{A} = \mathbf{U} \quad \tilde{P}\mathbf{b} = \mathbf{b}^{(n)}$$

问题： \tilde{P} 怎么能分离出下三角矩阵的结构呢？

例子: $n = 4$

$$\begin{aligned} U = A^{(4)} &= L_3 I_{3,i_3} L_2 I_{2,i_2} L_1 I_{1,i_1} A \\ &= \underbrace{L_3}_{\tilde{L}_3} \underbrace{I_{3,i_3} L_2 I_{3,i_3}}_{\tilde{L}_2} \underbrace{I_{3,i_3} I_{2,i_2} L_1 I_{2,i_2} I_{3,i_3}}_{\tilde{L}_1} \underbrace{I_{3,i_3} I_{2,i_2} I_{1,i_1}}_P A = L^{-1} P A. \end{aligned}$$

我们验证为什么 $I_{3,i_3} L_2 I_{3,i_3}$ 是一个单位下三角矩阵：通过分块矩阵的形式

$$L_2 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ C & I \end{pmatrix}, \quad I_{3,i_3} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix}$$

其中 Q 是一个维数小一点的排列矩阵。

$$I_{3,i_3} L_2 I_{3,i_3} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ QC & Q^2 \end{pmatrix} \stackrel{\text{为什么}}{=} \begin{pmatrix} I & 0 \\ QC & I \end{pmatrix} = \text{单位下三角矩阵}$$

并且该下三角矩阵的元素的绝对值不超过 1。

定理 (列主元素的三角分解定理)

如果 \mathbf{A} 为非奇异矩阵, 则存在排列矩阵 \mathbf{P} , 使

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LU},$$

其中 \mathbf{L} 为单位下三角阵, \mathbf{U} 为上三角阵。

目录

1. 问题概览
2. 高斯消元法
3. 复杂度
4. 列主元素消去法
5. 高斯消元和 LU 分解法
6. 列主元素消去法和 PLU 分解
7. 总结和附录

总结

- ▶ 需要掌握高斯消去法和列主元素消去法，以及能进行计算
- ▶ 通过高斯消去法来计算线性方程组需要 $\mathcal{O}(n^3)$ 的计算量
- ▶ 通过列主元素消去法来计算线性方程组需要 $\mathcal{O}(n^3)$ 的计算量（附加 $\mathcal{O}(n^2)$ 次元素交换和比大小）
- ▶ 了解高斯消去法可以帮我们计算 LU 分解，且能应用到一个具体的矩阵，如 3 维或 4 维矩阵。
- ▶ 了解列主元素消去法和 PLU 分解的关系，且能应用到一个具体的矩阵，如 3 维或 4 维矩阵。

附录：对于上三角矩阵性质的证明

对于 \mathbf{U} 和其逆，我们可以标记各个部分为 $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} v & \mathbf{u}^T \\ 0 & \mathbf{D} \end{bmatrix}$ 和 $\mathbf{U}^{-1} = \begin{bmatrix} a & \mathbf{c}^T \\ \mathbf{b} & \mathbf{d} \end{bmatrix}$ (分块矩阵内的符号随便起的)。由于 $\mathbf{U}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{I}$ ，我们可得

$$\begin{bmatrix} va + \mathbf{u}^T \mathbf{b} & v\mathbf{c}^T + \mathbf{u}^T \mathbf{d} \\ \mathbf{D}\mathbf{b} & \mathbf{D}\mathbf{d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ 0 & \mathbf{I} \end{bmatrix}$$

由于 \mathbf{D} 可逆， $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ ，且 $\mathbf{d} = \mathbf{D}^{-1}$ ， $a = v^{-1}$ 。进而

$$\mathbf{U}^{-1} = \begin{bmatrix} v^{-1} & -v^{-1}\mathbf{u}^T \mathbf{d} \\ 0 & \mathbf{D}^{-1} \end{bmatrix}$$

若 \mathbf{D} 是矩阵，则重复使用上述的方法；最终 \mathbf{U}^{-1} 是一个上三角矩阵。

对于单位上三角的例子，由于 $v = 1$ ，我们可知 \mathbf{U}^{-1} 最左上角的值也是 1。通过不断继续使用上述方法，最终可知 \mathbf{U}^{-1} 是一个单位上三角矩阵。