§ 4 三角分解法 /* Matrix Factorization */

➢ 高斯消元法的矩阵形式 /* Matrix Form of G.E. */：

Step 1: $l_{i1} = a_{i1} / a_{11} \quad (a_{11} \neq 0)$

记 $L_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -l_{21} & 1 & & \bigcirc \\ \vdots & & \ddots & \\ \vdots & \bigcirc & & \\ -l_{n1} & & & 1 \end{bmatrix}$，则 $L_1[\,A^{(1)} \;\; \vec{b}^{(1)}\,] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} \ldots a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ \bigcirc \quad A^{(2)} & \vec{b}^{(2)} \end{bmatrix}$

Step $n-1$:

$$L_{n-1}L_{n-2}\ldots L_1\left[A \;\; \vec{b}\right] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \ldots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \ldots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ldots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

其中

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \bigcirc \\ & & 1 & & \\ & \bigcirc & -l_{k+1,k} & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & -l_{n,k} & \bigcirc & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_k^{-1}=\begin{bmatrix}1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{k+1,k} & \ddots & \\ & & \vdots & & \\ & & l_{n,k} & & 1\end{bmatrix}$$

$$L_1^{-1}L_2^{-1}\ldots L_{n-1}^{-1}=\begin{bmatrix}1 & & \\ & 1 & \\ l_{i,j} & & \ddots \\ & & & 1\end{bmatrix}\overset{\text{记为}}{=\!=}L$$

ix */

记 $U=\begin{bmatrix}a_{11}^{(1)} & & \\ & \ddots & \\ & & a_{nn}\end{bmatrix}$

Factorize A first, then for every $\vec{b}$ you only have to solve two simple triangular systems $L\vec{y}=\vec{b}$ and $U\vec{x}=\vec{y}$.

A 的 LU

/* LU factori…on

由上述讨论可知，高斯消去法实质上产生了一个将系数矩阵A分解为上三角阵与下三角阵相乘的因式分解。

定理 设A为n阶矩阵，如果A的顺序主子式 /* determinant of leading principal submatrices */ $D_i \neq 0\,(i=1,2,\cdots,n-1)$，则 A 的 LU 分解唯一（其中 L 为单位下三角阵）。

证明：由§2中定理可知，LU 分解存在。下面证明唯一性。

考虑A非奇异，奇异时见教材p170的证明。

$$U_1 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2 U_2 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2 = I \ \checkmark$$

Upper-triangular

Lower-triangular With diagonal entries 1

注：L 为一般下三角阵而 U 为单位上三角阵的分解称为 Crout 分解。

实际上只要考虑 A^T 的 LU 分解，即$A^T = \tilde{L}\tilde{U}$，则 $A = \tilde{U}^T \tilde{L}^T$ 即是 A 的 Crout 分解。

设有方程组$AX=b$, 并设$A=LU$, 于是 $AX=LUX=b$

令$UX=Y$, 则 $LY=b$.

于是求解$AX=b$的问题等价于求解两个方程组$UX=Y$和$LY=b$

（1）利用顺推过程解$LY=b$, 其计算公式为:

$$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

（2）利用回代过程解$UX=Y$, 其计算公式为:

$$x_i = (y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j) / u_{ii} \quad (i = n, n-1, \cdots, 1)$$

➢利用Gauss消元法分解(顺序或列选主元)

例

计算: ***某行 = 该行 - 另一行 的 多少倍***

$$A=\begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 12 & -8 & 6 & 10 \\ 3 & -13 & 9 & 3 \\ -6 & 4 & 1 & 18 \end{pmatrix}$$

$12/6 = l_{21}$

$3/6 = l_{31}$

$-6/6 = l_{41}$

步1:

$$A^{(1)}=\begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & -12 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -14 \end{pmatrix}=\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 & 0 \\ -l_{41} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{L_1}\begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 12 & -8 & 6 & 10 \\ 3 & -13 & 9 & 3 \\ -6 & 4 & 1 & 18 \end{pmatrix}=L_1A$$

步2:

计算: *某行 = 该行 - 另一行 的 多少倍*

$$A^{(1)}=\begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & -12 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -14 \end{pmatrix}$$

$-12/-4 = l_{32}$

$2/-4 = l_{42}$

$$A^{(2)}=\begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 4 & -13 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 & 0 \\ 0 & -l_{42} & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{L_2} \begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & -12 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -14 \end{pmatrix} = L_2 A^{(1)}$$

步3:

$$A^{(2)}=\begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & \boxed{4} & \boxed{-13} \end{pmatrix} \quad 4/2 = l_{43}$$

计算: *某行 = 该行 - 另一行 的 多少倍*

$$A^{(3)}=\underbrace{\begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}}_{\text{上三角 } U} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -l_{43} & 1 \end{pmatrix}}_{L_3} \begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 4 & -13 \end{pmatrix} = L_3 A^{(2)}$$

因此有:

$$U = A^{(3)} = L_3 A^{(2)} = L_3 L_2 A^{(1)} = L_3 L_2 L_1 A$$

$U = L_3 L_2 L_1 A \Rightarrow \boxed{A = L_1^{-1} L_2^{-1} L_3^{-1} U = LU}$，其中：

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} L_3^{-1}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 & 0 \\ -l_{41} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 & 0 \\ 0 & -l_{42} & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -l_{43} & 1 \end{pmatrix}^{-1}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & 0 & 1 & 0 \\ l_{41} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & l_{32} & 1 & 0 \\ 0 & l_{42} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & l_{43} & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix}$$

最后有:

$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & a_{14}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & a_{34}^{(3)} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44}^{(4)} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 3 & 1 & 0 \\ -1 & -0.5 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

例　应用三角分解法对前例中的方程组进行求解。

解:

$$AX = LUX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 3 & 1 & 0 \\ -1 & -0.5 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 34 \\ 27 \\ -38 \end{pmatrix} = b$$

令: $LY = b$，即

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 3 & 1 & 0 \\ -1 & -0.5 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 34 \\ 27 \\ -38 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{得}} \begin{array}{l} y_1 = 12 \\ y_2 = 10 \\ y_3 = -9 \\ y_4 = -3 \end{array}$$

前推

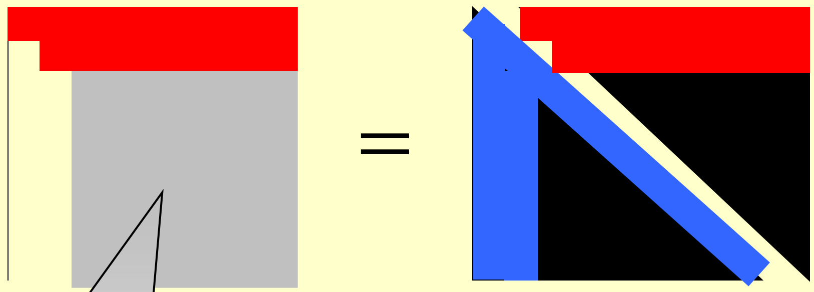
再由 $UX = Y$，即

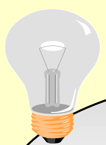
$$\begin{pmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 10 \\ -9 \\ -3 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{得}} \begin{array}{l} x_1 = 1 \\ x_2 = -3 \\ x_3 = -2 \\ x_4 = 1 \end{array}$$

回代

- 道立特分解法 /* Doolittle Factorization */：

  —— LU 分解的紧凑格式 /* compact form */





思路 通过比较法直接导出 L 和 U 的计算公式。

反复计算，很浪费哦……

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \cdots & & \\ l_{n1} & \cdots & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1n} \\ & \cdots & \vdots \\ & & \vdots \\ & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} u_{kj}$$

例如：$A = \begin{bmatrix} \boxed{2} & \boxed{5} & \boxed{4} \\ \boxed{4} & 13 & 9 \\ \boxed{6} & 21 & 20 \end{bmatrix} \overset{?}{=} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} = LU$

思想： 矩阵乘法。

$\boxed{2} = 1 \cdot u_{11} \Rightarrow u_{11} = 2$

$\boxed{5} = 1 \cdot u_{12} \Rightarrow u_{12} = 5$

$\boxed{4} = 1 \cdot u_{13} \Rightarrow u_{13} = 4$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 5 & 4 \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}$$

“你一行”

“我一列”

$\boxed{4} = l_{21} \cdot 2 \Rightarrow l_{21} = 2$

$\boxed{6} = l_{31} \cdot 2 \Rightarrow l_{31} = 3$

$$\begin{bmatrix} \boxed{2} & \boxed{5} & \boxed{4} \\ \boxed{4} & \boxed{13} & \boxed{9} \\ \boxed{6} & \boxed{21} & \boxed{20} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 5 & 4 \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 5 & 4 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 6 \end{bmatrix}$$

“你再一行”

$\boxed{13} = 2 \cdot 5 + u_{22} \Rightarrow u_{22} = 3$

$\boxed{9} = 2 \cdot 4 + u_{23} \Rightarrow u_{23} = 1$

$\boxed{21} = 3 \cdot 5 + 3 \cdot l_{32} \Rightarrow l_{32} = 2$

“你又一列”

$\boxed{20} = 3 \cdot 4 + 2 \cdot 1 + u_{33} \Rightarrow u_{33} = 6$

“我又一行”

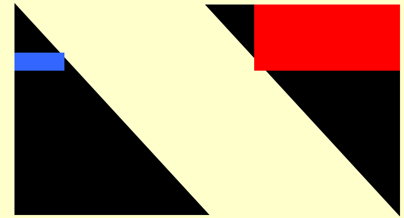
$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} u_{kj}$$

固定 i :

对 $j = i, i+1, \ldots, n$ 有 $a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + u_{ij}$

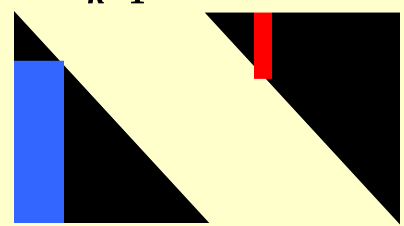
$l_{ii} = 1$

$$\Rightarrow \quad \boxed{u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}} \quad a$$



将 i，j 对换，对 $j = i+1, \ldots, n$ 有 $a_{ji} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki} + l_{ji} u_{ii}$

$$\Rightarrow \quad \boxed{l_{ji} = \left(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki}\right) / u_{ii}} \quad b$$

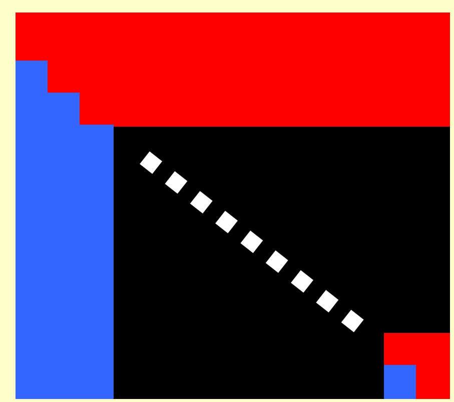


Algorithm: Doolittle Factorization

Step 1: $u_{1j} = a_{1j}$; $l_{j1} = a_{j1} / u_{11}$; ($j = 1, \ldots, n$)

Step 2: compute a and b for $i = 2, \ldots, n-1$;

Step 3: $u_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk} u_{kn}$



例：

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

再求第一列

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

$$l_{ji}=(a_{ji}-\sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}u_{ki})/u_{ii}$$

解：

$$A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & -2 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & \\ \frac{1}{2} & -\frac{7}{5} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ & -\frac{5}{2} & \frac{7}{2} \\ & & \frac{54}{10} \end{pmatrix}$$

先求第一行

$3+\frac{1}{2}$

$\dfrac{3-\frac{1}{2}(-1)}{(-\frac{5}{2})}$

$1-\frac{1}{2}+\frac{7}{5}*\frac{7}{2}$

$-2-\frac{1}{2}$

例 用直接三角分解法求解

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

解：用分解公式计算得

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & -24 \end{bmatrix}=LU$$

求解

$LY=(14,18,20)^T$ ，得 $Y=(14,-10,-72)^T$

$UX=(14,-10,-72)^T$, 得 $X=(1,2,3)^T$

➢ 平方根法 /* Choleski's Method */：

——对称 /* symmetric */ 正定 /* positive definite */ 矩阵的分解法

定义 一个矩阵 $A = (a_{ij})_{n\times n}$ 称为对称阵，如果 $a_{ij} = a_{ji}$。

定义 一个矩阵 A 称为正定阵，如果 $\vec{x}^T A\vec{x} > 0$ 对任意非零向量 $\vec{x}$ 都成立。

回顾：对称正定阵的几个重要性质

- A 的特征值 /* eigen value */ $\lambda_i > 0$
- A 的顺序主子阵 /* leading principal submatrices */ A_k 亦对称正定
- ? A^{-1}
- A 的全

设对应特征值 λ 的非零特征向量为 $\vec{x}$，则 $0 < \vec{x}^T A\vec{x} = \vec{x}^T \lambda\vec{x} = \lambda\|$

对称性显然。对任意 $\vec{x}_k \neq \vec{0} \in R^k$ 有 $\vec{x}_k^T A_k \vec{x}_k = \vec{x}^T A\vec{x} > 0$，其中 $\vec{x} = \begin{pmatrix} \vec{x}_k \\ \vec{0} \end{pmatrix} \neq \vec{0} \in R^n$。

因为 $\det(A) = \prod_{i=1}$

将对称 正定阵 A 做 LU 分解

$$U = \begin{pmatrix} \ddots & u_{ij} \\ & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & & \\ & u_{22} & \\ & & \ddots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & u_{ij}/u_{ii} \\ & 1 & \\ & & \ddots \\ & & & 1 \end{pmatrix} \overset{\text{记为}}{=\!=} D\tilde{U}$$

HW: p.203
#9, #11

A 对称 $\longrightarrow$ $L = \tilde{U}^T$ 即 $A = LDL^T$

$$LD\tilde{U} = LU = A = A^T = (LD\tilde{U})^T = \tilde{U}^T DL^T$$

记 $D^{1/2} = \begin{pmatrix} \sqrt{u_{11}} & & \\ & \sqrt{u_{22}} & \\ & & \ddots \\ & & & \sqrt{u_{nn}} \end{pmatrix}$ 则 $\tilde{L} = LD^{1/2}$ 仍是下三角阵

定理 设矩阵A对称正定，则存在非奇异下三角阵 $L \in R^{n\times n}$ 使得 $A = LL^T$。若限定 L 对角元为正，则分解唯一。

Since $\det(A_k) > 0$

注： 对于对称正定阵 A，从 $a_{ii} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik}^2$ 可知对任意$k \le i$ 有 $|l_{ik}| \le \sqrt{a_{ii}}$。即 L 的元素不会增大，误差可控，不需选主元。

Algorithm: Choleski's Method

To factor the symmetric positive definite $n \times n$ matrix A into LL^T, where L is lower triangular.

Input: the dimension n; entries a_{ij} for $1 \le i, j \le n$ of A.

Output: the entries l_{ij} for $1 \le j \le i$ and $1 \le$ … n of L.

Step 1 Set $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$;

Step 2 For $j = 2, \ldots, n$, set …

Step 3 Fo…

因为A对称，所以只需存半个 A，即

$$A[n(n+1)/2] = \{a_{11}, a_{21}, a_{22}, \ldots, a_{n1}, \ldots, a_{nn}\}$$

其中 … $= A[i \times (i-1)/2 + j]$

Step 5 … $l_{jk} l_{ik} \big) / l_{ii}$;

Step 6 Set …

运算量为 $O(n^3/6)$，比普通LU分解少一半，但有 n 次开方。用$A = LDL^T$分解，可省开方时间(p.173)。

Step 7 O…

STOP.

➢ 追赶法解三对角方程组

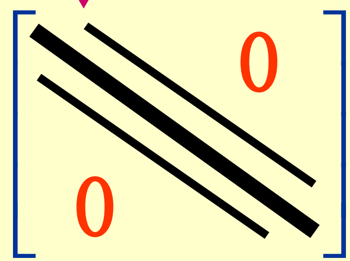
/* Crout Reduction for Tridiagonal Linear System */

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

即：

$$
\begin{cases}
b_1 x_1 + c_1 x_2 = f_1 \\
a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = f_i \\
\quad i = 2, \cdots ; n-1 \\
a_n x_{n-1} + b_n x_n = f_n
\end{cases}
$$

$AX = F$ ⟵ 消元法



追赶法

我们要熟练掌握公式推导！

推导过程其实就是程序设计过程！
（这个能力是相通的）

注意 a, b, c, f 的下标与行号相同!!!

应用：很多问题最后归结到对角占优的三对角方程组求解。

步1:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & f_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & f_2 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & f_{n-1} \\ & & & a_n & b_n & f_n \end{bmatrix}$$

n阶

重复这个过程 $\begin{cases} 1. \ \text{主元变1} \\ 2. \ \text{消元} \end{cases}$

$n \Rightarrow n-1 \Rightarrow \cdots \Rightarrow 2 \Rightarrow 1$

$$\boxed{\begin{aligned} \beta_1 &= c_1 / b_1 \\ y_1 &= f_1 / b_1 \end{aligned}}$$

主元

$$\begin{bmatrix} \boxed{1} & \beta_1 & & & & y_1 \\ \boxed{a_2} & b_2 & c_2 & & & f_2 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & f_{n-1} \\ & & & a_n & b_n & f_n \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{消元}} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & & y_1 \\ & \boxed{b_2 - a_2\beta_1} & c_2 & & & \boxed{f_2 - a_2 y_1} \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & f_{n-1} \\ & & & a_n & b_n & f_n \end{bmatrix}$$

n-1阶

第1步做完了， 下面做第2步。

步2:

$$\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & y_1 \\ & \boxed{b_2-a_2\beta_1} & c_2 & & f_2-a_2y_1 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & f_{n-1} \\ & & & a_n & b_n & f_n \end{bmatrix}$$

n-1阶

$$\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & y_1 \\ & \boxed{b_2-a_2\beta_1} & c_2 & & \boxed{f_2-a_2y_1} \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & f_{n-1} \\ & & & a_n & b_n & f_n \end{bmatrix}$$

n-1阶

$$\beta_2 = c_2 / (b_2 - a_2\beta_1)$$
$$y_2 = (f_2 - a_2y_1)/(b_2 - a_2\beta_1)$$

主元变1

对照步1

$$\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & & y_1 \\ & \boxed{1} & \beta_2 & & & y_2 \\ & \boxed{a_3} & b_3 & c_3 & & f_3 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & f_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n & f_n \end{bmatrix}$$

消元

$$\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & & y_1 \\ & 1 & \beta_2 & & & y_2 \\ & & \boxed{b_3-a_3\beta_2} & c_3 & & \boxed{f_3-a_3y_2} \\ & & 0 & 0 & 0 & \vdots \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & f_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n & f_n \end{bmatrix}$$

n-2阶

对照步1,可写出步k的式子了

即然看出来了, 那从步k到步$k+1$就不写了!!!

但提醒大家的是: 一头一尾2个方程的主元化为1的式子特殊!

1. 消元过程算法:

$$\beta_1 = c_1 / b_1,\ y_1 = f_1 / b_1$$

$$\beta_i = c_i /(b_i - a_i\beta_{i-1}), i = 2,3,\cdots,n-1$$

$$y_i = (f_i - a_i y_{i-1})/(b_i - a_i\beta_{i-1}), i = 2,3,\cdots,n$$

追

则方程变为:

$$\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & & & y_1 \\ & 1 & \beta_2 & & & & y_2 \\ & & 1 & \beta_3 & & & y_3 \\ & & & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & & & 1 & \beta_{n-1} & y_{n-1} \\ & & & & & 1 & y_n \end{bmatrix}$$

二对角

2. 回代

赶

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - \beta_i x_{i+1}, \quad i = n-1,\cdots,1 \end{cases}$$

这就完了?! 发现公式其实是2个 递推式了没有?

注：上述消元过程相当于对 A 作Crout 分解，即：

Step 1: 对 A 作Crout 分解

$$A=\begin{bmatrix} u_1 & & & \\ \gamma_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & u_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

直接比较等式两边的元素，可得到计算公式。

则：

$$\beta_1=c_1/b_1\,,\qquad u_1=a_1$$

$$\begin{cases} u_i=b_i-a_i\beta_{i-1}, \quad u_n=b_n-a_n\beta_{n-1} \\ \beta_i=c_i/(b_i-a_i\beta_{i-1})=c_i/u_i \qquad i=2,3,\cdots,n-1 \\ \gamma_i=a_i, \quad \gamma_n=a_n \end{cases}$$

Step 2: 追——即解 $L\vec{y}=\vec{f}$：$y_1=\dfrac{f_1}{u_1}, y_i=\dfrac{(f_i-\gamma_i y_{i-1})}{u_i}\quad (i=2,\dots,n)$

Step 3: 赶——即解 $U\vec{x}=\vec{y}$：$x_n=y_n,\ x_i=y_i-\beta_i x_{i+1}\quad (i=n-1,\dots,1)$

定理 若 A 为对角占优 /* diagonally dominant */ 的三对角阵，且满足 $|b_1|>|c_1|>0$, $|b_n|>|a_n|>0$, $a_i\neq 0$, $c_i\neq 0$，则追赶法可解以 A 为系数矩阵的方程组。

定义 设 $A=(a_{ij})_{n\times n}\in R^{n\times n}$，满足 $|a_{ii}|\geq \sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|,\quad i=1,2,\cdots,n$

且至少有一个i值，使得 $|a_{ii}|>\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|$ 成立，

则称A为对角占优矩阵；若 $|a_{ii}|>\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|,\quad i=1,2,\cdots,n$

则称A为严格对角占优矩阵 。

注：

- 如果 A 是严格对角占优阵，则不要求三对角线上的所有元素非零。

$u_i=b_i-a_i\beta_{i-1}$

- 根据不等式 $|\beta_i|<1$, $|b_i|-|a_i|<|b_i-\gamma_i\beta_{i-1}|<|b_i|+|a_i|$ 可知：分解过程中，矩阵元素不会过分增大，算法保证稳定。
- 运算量为 $O(6n)$。

§5 线性方程组的误差分析

/* Error Analysis for Linear system of Equations */

求解 $A\vec{x}=\vec{b}$ 时，A 和 $\vec{b}$ 的误差对解 $\vec{x}$ 有何影响？

- 设 A 精确，$\vec{b}$ 有误差 $\delta\vec{b}$，得到的解为 $\vec{x}+\delta\vec{x}$，即

$$A(\vec{x}+\delta\vec{x})=\vec{b}+\delta\vec{b}$$

绝对误差放大因子

$$\Rightarrow \quad \delta\vec{x}=A^{-1}\delta\vec{b} \qquad \Rightarrow \quad \|\delta\vec{x}\|\le\|A^{-1}\|\cdot\|\delta\vec{b}\|$$

相对误差放大因子

又 $\|\vec{b}\|=\|A\vec{x}\|\le\|A\|\cdot\|\vec{x}\|$ $\quad\Rightarrow\quad \dfrac{1}{\|\vec{x}\|}\le\dfrac{\|A\|}{\|\vec{b}\|}$

$$\frac{\|\delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|}\le\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\frac{\|\delta\vec{b}\|}{\|\vec{b}\|}$$

➢ 设 $\vec{b}$ 精确. …为 $\vec{x}+\delta\vec{x}$，即

$\|A\|\cdot\|A^{-1}\|$是关键的误差放大因子，称为A的条件数，记为$cond\,(A)$，越大则A越病态，难得准确解。

$$A(\vec{x}+\delta\vec{x})+\delta A(\vec{x}+\dots \qquad (A+\delta A)\vec{x}+(A+\delta A)\delta\vec{x}=\vec{b}$$

$$\Rightarrow\quad (A+\delta A)\delta\vec{x}=-\delta A\vec{x}$$

$$\Rightarrow\quad A(I+A^{-1}\delta A)\delta\vec{x}=-\delta A\vec{x}$$

$$\Rightarrow\quad \delta\vec{x}=-(I+A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}\delta A\vec{x}$$

(只要$\|\delta A\|$充分小，使得 $\|A^{-1}\delta A\|\le\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\|<1$)

Wait a minute …

Who said that $(I+A^{-1}\delta A)$ is invertible?

$$\Rightarrow\quad \delta\vec{x}=-A^{-1}\delta A(\vec{x}+\delta\vec{x})$$

$$\Rightarrow\quad \frac{\|\delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}+\delta\vec{x}\|}\le\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\| =\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}$$

$$\Rightarrow\quad \frac{\|\delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|}\le\frac{\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\|}{1-\|A^{-1}\|\cdot\|\delta A\|}=\frac{\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$$

注：☞ $cond\,(A)$ 的具体大小与 $\|\cdot\|$ 的取法有关，但相对大小一致。

☞ $cond\,(A)$ 取决于A，与解题方法无关。

☞ $$\frac{\|\delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|}\le\frac{cond(A)}{1-cond(A)\|\delta A\|/\|A\|}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\delta\vec{b}\|}{\|\vec{b}\|}\right)$$

常用条件数有：

$cond\,(A)_1$ $cond\,(A)_\infty$ $cond\,(A)_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)/\lambda_{\min}(A^TA)}$

特别地，若 A 对称，则 $cond\,(A)_2=\dfrac{\max|\lambda|}{\min|\lambda|}$

条件数的性质：

- A可逆，则 $cond\,(A)_p\ge 1$；
- A可逆，$\alpha\in R$ 则 $cond\,(\alpha A)=cond\,(A)$ ；
- A正交，则 $cond\,(A)_2=1$；
- A可逆，R正交，则 $cond\,(RA)_2=cond\,(AR)_2=cond\,(A)_2$ 。

例：$A=\begin{pmatrix} 1 & 0.99 \\ 0.99 & 0.98 \end{pmatrix}$ ，$\vec{b}=\begin{pmatrix} 1.99 \\ 1.97 \end{pmatrix}$ 精确解为 $\vec{x}=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

$A^{-1}=\begin{pmatrix} -9800 & 9900 \\ 9900 & -10000 \end{pmatrix}$

计算 $cond\,(A)_2$ 。

解：考察 A 的特征根

$$\det(\lambda I-A)=0 \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{l} \lambda_1=1.980050504 \\ \lambda_2=-0.000050504 \end{array}$$

$$cond\,(A)_2=\left|\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right| \approx 39206 >> 1$$

测试病态程度：

给 $\vec{b}$ 一个扰动 $\delta\vec{b}=\begin{pmatrix} -0.97\times 10^{-4} \\ 0.106\times 10^{-3} \end{pmatrix}$，其相对误差为

$$\frac{\|\delta\vec{b}\|_2}{\|\vec{b}\|_2} \approx 0.513\times 10^{-4} < 0.01\%$$ 此时精确解为 $\vec{x}^*=\begin{pmatrix} 3 \\ -1.0203 \end{pmatrix}$

$$\delta\vec{x}=\vec{x}^*-\vec{x}=\begin{pmatrix} 2 \\ -2.0203 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \frac{\|\delta\vec{x}\|_2}{\|\vec{x}\|_2} \approx 2.0102 > 200\%$$

例：Hilbert 阵 $H_n = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{bmatrix}$

$cond\,(H_2)_\infty = 27$　　　$cond\,(H_3)_\infty \approx 748$

$cond\,(H_6)_\infty = 2.9 \times 10^6$　　　$cond\,(H_n)_\infty \to \infty$ as $n \to \infty$

注：一般判断矩阵是否病态，并不计算A^{-1}，而由经验得出。

☞ 行列式很大或很小（如某些行、列近似相关）；

☞ 元素间相差大数量级，且无规则；

☞ 主元消去过程中出现小主元；

☞ 特征值相差大数量级。

- 近似解的误差估计及改善：

设 $A\vec{x}=\vec{b}$ 的近似解为 $\bar{x}$，则一般有 $\vec{r}=\vec{b}-A\bar{x}\neq\vec{0}$

$$\Rightarrow \quad \frac{\|\bar{x}-\vec{x}^*\|}{\|\vec{x}^*\|}\leq cond\,(A)\,\frac{\|\vec{r}\,\|}{\vec{b}}$$

误差上限

HW: p.203
#14, #15, #16

改善方法：

Step 1: $A\vec{x}=\vec{b}\Rightarrow$ 近似解 $\vec{x}_1$；

Step 2: $\vec{r}_1=\vec{b}-A\vec{x}_1$；

Step 3: $A\vec{d}_1=\vec{r}_1\Rightarrow\ \vec{d}_1$；

Step 4: $\vec{x}_2=\vec{x}_1+\vec{d}_1$；

若 $\vec{d}_1$ 可被精确解出，则有

$$\vec{x}_2=\vec{x}_1+A^{-1}(\vec{b}-A\vec{x}_1)=A^{-1}\vec{b}$$

$\vec{x}_2$ 就是精确解了。

经验表明：若 A 不是非常病态（例如：$\varepsilon\cdot cond\,(A)_\infty<1$），则如此迭代可达到机器精度；但若 A 病态，则此算法也不能改进。

例.设 $A=\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.00001 \end{pmatrix}$，$b=\begin{pmatrix} 8 \\ 8.00001 \end{pmatrix}$

已知方程组AX=b精确解为 $x^*=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

（1）计算$cond\,(A)_\infty$。

（2）若 $\bar{x}=\begin{pmatrix} 10 \\ -2 \end{pmatrix}$，计算剩余$r=b-A\bar{x}$ 。

定理 若矩阵 B 对某个算子范数满足 $\|B\| < 1$，则必有

① $I \pm B$ 可逆； ② $\left\|(I \pm B)^{-1}\right\| \le \dfrac{1}{1-\|B\|}$

$\|B\vec{x}_0\| \le \|B\|\|\vec{x}_0\|$

证明：① 若不然，则 $(I \pm B)\vec{x} = \vec{0}$ 有非零解，即存在非零向量 $\vec{x}_0$ 使得 $\pm B\vec{x}_0 = -\vec{x}_0 \Rightarrow \dfrac{\|B\vec{x}_0\|}{\|\vec{x}_0\|} = 1 \Rightarrow \|B\| \ge 1$

② $(I \pm B)^{-1} \pm B(I \pm B)^{-1} = (I \pm B)(I \pm B)^{-1} = I$

$$\Rightarrow (I \pm B)^{-1} = I \mp B(I \pm B)^{-1}$$

$$\Rightarrow \|(I \pm B)^{-1}\| \le 1 + \|B\| \cdot \|(I \pm B)^{-1}\| \quad \blacksquare$$