

第二章 线性代数方程组的数值解法

1 引言和线性代数基础知识

例 1.1. $Ax = b \Rightarrow x = A^{-1}b$

高斯消元法复杂度太高 $O(n^3)$, 在 A 规模很大时, 时间消耗过于巨大。

1.1 线性空间

定义 1.1. 定义了加减和数乘的非空集合, 称为线性空间。

如 $R^n, C^n, R^{n \times m} (C^{n \times m}), C[a, b]$ (定义在 $[a, b]$ 上的连续函数)。

1.2 内积

定义 1.2. 对于定义于数域 K (R or C) 上的线性空间 X , 如果对于 $\forall u, v, w \in X$ 及 $\alpha \in K$, 满足:

- $(u + v, w) = (u, w) + (v, w)$
- $(\alpha u, v) = \alpha(u, v)$
- $(u, v) = \overline{(v, u)}$
- $(u, u) \geq 0 \quad (u, u) = 0 \Leftrightarrow u = 0$

则称数 (u, v) 为 u 与 v 的内积, 定义了内积的线性空间称为内积空间。

几种常见内积的定义:

- R^n 和 C^n 上的内积:
设 $x, y \in R^n$, 则 R^n 的内积可定义为:

$$(x, y) = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

若给定权系数 $w_i (i = 1, 2, \dots, n)$, 则 R^n 上带权 $\{w_i\}$ 的内积可定义为:

$$(x, y) = \sum_{i=1}^n w_i x_i y_i$$

类似的, 若 $x, y \in C^n$, 则带权的内积:

$$(x, y) = \sum_{i=1}^n w_i x_i \overline{y_i}$$

- $C[a, b]$ 上的内积:

定义 1.3. 若定义在 $[a, b]$ 上的函数 $\rho(x)$ 满足:

- $\rho(x) \geq 0, \forall x \in (a, b)$
- $\int_a^b x^k \rho(x) dx, \exists$ 且有限 ($k = 0, 1, 2, \dots$)
- 若对 $[a, b]$ 上的非负连续函数 $g(x)$ 有:
 $\int_a^b \rho(x) g(x) dx = 0$, 则 $g(x) \equiv 0$

就称 $\rho(x)$ 为 $[a, b]$ 上的一个权函数。

设 $f, g \in C[a, b]$, ρ 是 $[a, b]$ 上给定的权函数, 则称:

$(f, g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx$ 为 $C[a, b]$ 上函数 f, g 的内积。

1.3 内积空间的几个性质

- (Cauchy-Schwarz 不等式): 设 X 为一个内积空间, 则对 $\forall u, v \in X$ 有:

$$|(u, v)|^2 \leq (u, u) \cdot (v, v) \quad (1.1)$$

- 设 X 为一个内积空间, $u_1, u_2, \dots, u_n \in X$, 矩阵:

$$G = \begin{bmatrix} (u_1, u_1) & (u_2, u_1) & \dots & (u_n, u_1) \\ (u_1, u_2) & (u_2, u_2) & \dots & (u_n, u_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (u_1, u_n) & (u_2, u_n) & \dots & (u_n, u_n) \end{bmatrix}$$

则 G 非奇异的充要条件是 u_1, u_2, \dots, u_n 线性无关

- (Gram-Schmidz 正交化方法): 若 $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ 是内积空间 X 中一个线性无关的序列, 则可按下列公式:

$$\begin{cases} v_1 = u_1, \\ v_i = u_i - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{(u_i, v_k)}{(v_k, v_k)} v_k, \quad i = 2, 3, \dots, n \end{cases} \quad (1.2)$$

构造一个正交序列 $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 且满足: $(v_i, v_j) = 0, (i \neq j)$ 。

1.4 向量范数

例 1.2. 欧式范数或 2-范数:

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

定义 1.4. 设对 $\forall \mathbf{x} \in R^n$ (or C^n), 按一定的规则有一实值函数与之对应, 记为 $\|\mathbf{x}\|$, 若满足:

- 正定性: $\|\mathbf{x}\| \geq 0$ 且 $\|\mathbf{x}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = 0$
- 齐次性: $\|\alpha \mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|, \forall \alpha \in R$ (or C)
- 三角不等式

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in R^n \text{ (or } C^n) \quad (1.3)$$

则称 $\|\mathbf{x}\|$ 为向量 \mathbf{x} 的范数, 由 (1.3) 易证 $||\mathbf{x}\| - \|\mathbf{y}\|| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ (自证)

证明. 范数三角不等式减法形式:

不妨设: $\|\mathbf{x}\| \geq \|\mathbf{y}\|$, 则:

$$\begin{aligned} & ||\mathbf{x}\| - \|\mathbf{y}\|| \\ &= \|\mathbf{x}\| - \|\mathbf{y}\| \\ &= \|\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{y}\| - \|\mathbf{y}\| \\ &\leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| + \|\mathbf{y}\| - \|\mathbf{y}\| \\ &= \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \end{aligned}$$

□

几种常见范数:

- $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$, ∞ -范数
- $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$, 1-范数

- $\|\mathbf{x}\|_2 = (\sum_{i=1}^n x_i^2)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{(x, x)}$, 2-范数

证明. 二范数三角不等式:

$$\begin{aligned} & \|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|_2 \\ &= (\mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{x} + \mathbf{y})^{\frac{1}{2}} \\ &= [(\mathbf{x}, \mathbf{x}) + 2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + (\mathbf{y}, \mathbf{y})]^{\frac{1}{2}} \\ &\leq [\|\mathbf{x}\|_2^2 + 2\|\mathbf{x}\|_2 \cdot \|\mathbf{y}\|_2 + \|\mathbf{y}\|_2^2]^{\frac{1}{2}} \\ &= \|\mathbf{x}\|_2 + \|\mathbf{y}\|_2 \end{aligned}$$

□

例 1.3. 思考题: 对于任一种范数 $\|\cdot\|_\lambda$ 定义集合:

$$A = \{x | x \in R^3, \|x\| \leq 1\}$$

试问当 $\lambda = 1, 2, \infty$ 时, A 代表什么样的图形? 并画图

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}, p \in [1, \infty) \quad (1.4)$$

1.5 向量范数的性质

- 连续性:

定理 1.1. 设给定 $A \in R^{n \times n}$, 则对 R^n 上的每一种向量范数 $\|\cdot\|$, $x \in R^n$, $\|Ax\|$ 都是 x 的分量 (x_1, x_2, \dots, x_n) 的 n 元连续函数 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$

- 等价性:

定义 1.5. 线性空间 X 上定义了两种范数 $\|\cdot\|_\alpha$ 和 $\|\cdot\|_\beta$, 若 \exists 常数 $C_1, C_2 > 0$, 使得

$$C_1 \cdot \|\mathbf{u}\|_\alpha \leq \|\mathbf{u}\|_\beta \leq C_2 \cdot \|\mathbf{u}\|_\alpha, \forall \mathbf{u} \in X$$

则称 $\|\cdot\|_\alpha$ 和 $\|\cdot\|_\beta$ 是 X 上等价的范数。

- 传递性:

若 $\|\cdot\|_\alpha$ 与 $\|\cdot\|_\beta$ 等价, $\|\cdot\|_\beta$ 与 $\|\cdot\|_\lambda$ 等价, 则 $\|\cdot\|_\alpha$ 与 $\|\cdot\|_\lambda$ 等价。

定理 1.2. R^n 上所有范数是彼此等价的。

1.6 矩阵范数

定义 1.6. 如果对 $R^{n \times n}$ 上的任一矩阵 A , 对应一个实数 $\|A\|$, 满足条件:
 $\forall A, B \in R^{n \times n}$ 和 $\alpha \in R$,

- $\|A\| > 0$, 且 $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$ (正定性)
- $\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$ (齐次性)
- $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ (三角不等式)
- $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ (相容性)

则称 $\|A\|$ 为矩阵 A 的范数

易证: $|\|A\| - \|B\|| \leq \|A - B\|$ (自证)

F-范数

$$\|A\|_F = \left[\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

性质 4 利用柯西不等式证明 (和的平方 \leq 平方的和)

定义 1.7. 对于 $R^{n \times n}$ 上给定的一种矩阵范数:

$\|\cdot\|_\beta, R^n$ 上规定的一种向量范数 $\|\cdot\|_\alpha$, 若有:

$$\|A\mathbf{x}\|_\alpha \leq \|A\|_\beta \|\mathbf{x}\|_\alpha, \forall A \in R^{n \times n}, \mathbf{x} \in R^n \quad (1.5)$$

成立, 则称上述矩阵范数和向量范数是相容的。或:

$$\|A\|_\beta \stackrel{\text{sup}}{=} \frac{\|A\mathbf{x}\|_\alpha}{\|\mathbf{x}\|_\alpha} \quad (1.6)$$

定理 1.3. 设 $A \in R^{n \times n}$, $\|\cdot\|$ 是 R^n 上的向量范数, 则:

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \quad (1.7)$$

是一种矩阵范数, 称其为由向量范数诱导出的矩阵范数 (简称为诱导范数, 或从属范数, 自然范数), 且满足相容性条件。

证明. • 由定理1.1可知, $\|Ax\|$ 是 R^n 中有界闭集 $D = \{\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, \|x\| = 1\}$ 上的连续函数, $\therefore \|Ax\|$ 在 D 上最大值存在, \therefore (1.7) 中 $\max_{\|x\|=1} \|Ax\|$ 的写法正确。

- 对于 $\forall x \neq 0$,

$$\therefore \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \|A \cdot \frac{x}{\|x\|}\|, \text{ 且 } \|\frac{x}{\|x\|}\| = 1$$

$$\therefore \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{x \neq 0} \|A \cdot \frac{x}{\|x\|}\| \xrightarrow{\text{let } y = \frac{x}{\|x\|}} \max_{\|y\|=1} \|Ay\| \xrightarrow{\text{记 } y \text{ 为 } x} \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

- – 正定性: 显然 $\|A\| \geq 0$, 另外:
若 $A = 0$, 则: $\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = 0$, 反之, 若 $\|A\| = 0$,
i.e. 对 \forall 非零向量 x 有:

$$\|Ax\| = 0 \Rightarrow Ax = 0 \Rightarrow A = 0$$

- 齐次性: 对 $\forall \alpha \in R$, 有:

$$\begin{aligned} & \| \alpha A \| \\ &= \max_{\|x\|=1} \| \alpha Ax \| \\ &= \max_{\|x\|=1} | \alpha | \| Ax \| \\ &= | \alpha | \max_{\|x\|=1} \| Ax \| \\ &= | \alpha | \cdot \| A \| \end{aligned}$$

- 三角不等式: $\forall A, B \in R^{n \times n}$, 有:

$$\begin{aligned} & \| A + B \| \\ &= \max_{\|x\|=1} \| (A + B)x \| \\ &= \max_{\|x\|=1} \| Ax + Bx \| \\ &\leq \max_{\|x\|=1} (\| Ax \| + \| Bx \|) \\ &\leq \| A \| + \| B \| \end{aligned}$$

- 相容性: 由1.7显然有 $\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|, \forall x \in R^n$,
 $\therefore A, B \in R^{n \times n}$, 有

$$\begin{aligned}
& \|AB\| \\
&= \max_{\|x\|=1} \|ABx\| \\
&= \max_{\|x\|=1} \|A(Bx)\| \\
&\leq \max_{\|x\|=1} \|A\| \cdot \|Bx\| \\
&\leq \|A\| \max_{\|x\|=1} \|Bx\| \\
&= \|A\| \cdot \|B\|
\end{aligned}$$

综上所述, $\|A\|$ 是 $R^{n \times n}$ 上的一种矩阵范数。

由定义及 $\|A\|$ 是 $R^{n \times n}$ 是一种范数, 即可知其相容性条件成立。 \square

注释:

- 对 \forall 的从属范数, $\|I\| = 1$
- 矩阵的任一从属范数一定与所给定的向量范数相容, 但相容未必具有从属关系。如: $\|Ax\|_2 \leq \|A\|_F \cdot \|x\|_2$, 但不具有从属关系。
事实上, $\|I\|_F = \sqrt{n}$, 另外, $\|I\|_F = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ix\|}{\|x\|} = 1$
 $\therefore \|A\|_F$ 与 $\|x\|_2$ 没有关系。

定理 1.4. 设 $x \in R^n, A \in R^{n \times n}$, 则:

- $\|A\|_\infty = \max_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ (∞ -范数 or 行范数)
- $\|A\|_1 = \max_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$ (1-范数 or 列范数)
- $\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$ (2-范数 or 谱范数)
其中, $\lambda_{\max}(A^T A) = \rho(A^T A)$ (ρ 表示谱半径) 表示 $A^T A$ 的最大特征值。
一般的, $\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$, λ_i 为 A 的特征值。

证明. • 若 $A = 0$ 时, 显然成立, 不妨设 $A \neq 0$

$\forall x \in R^n$, 且 $\|x\|_\infty = 1$, 则:

$$\|Ax\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \left| \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right| \leq \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}| |x_j| \leq \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \stackrel{\text{记}}{=} \mu$$

$$\therefore \max_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty \leq \mu$$

事实上, 假设第 i_0 行使 $\mu = \sum_{j=1}^n |a_{i_0 j}|$ 成立,

取 $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T$, 其中:

$$x_j^{(0)} = \begin{cases} 1, & a_{i_0 j} \geq 0 \\ -1, & a_{i_0 j} < 0 \end{cases} \quad j = 1, 2, \dots, n$$

显然 $\|x^{(0)}\|_\infty = 1$ 且

$$\begin{aligned} \max_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty &\geq \|Ax^{(0)}\|_\infty = \max_i \left| \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(0)} \right| \geq \left| \sum_{j=1}^n a_{i_0j} x_j^{(0)} \right| = \sum_{j=1}^n |a_{i_0j}| = \mu \\ \therefore \max_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty &= \mu = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \end{aligned}$$

- $\because \|Ax\|_2^2 = (Ax, Ax) = x^T A^T A x \geq 0, \forall x \in R^n$
 $\therefore A^T A$ 为非负对称实矩阵，其特征值均为非负的实数，不妨假设依次排序为： $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$
 对应于一组规范的正交特征向量组 $\{u_1, \dots, u_n\}$
 对于 $\forall x \in R^n$ ，可表示为： $x = \sum_{i=1}^n \alpha_i u_i$
 对于满足 $\|x\|_2 = 1$ 的任意 x 有：

$$\|x\|_2^2 = (x, x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 = 1$$

$$\begin{aligned} \therefore \|Ax\|_2^2 &= (Ax, Ax) = x^T A^T A x = (A^T A x, x) \\ &= (A^T A \sum_{i=1}^n \alpha_i u_i, \sum_{i=1}^n \alpha_i u_i) \\ &= (\sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i u_i, \sum_{i=1}^n \alpha_i u_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \lambda_i \alpha_i^2 \\ &\leq \lambda_1 \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \\ &= \lambda_1 \\ \therefore \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 &\leq \sqrt{\lambda_1} \end{aligned}$$

特别地，若取 $x = u_1$ ，则：

$$\begin{aligned} \|Au_1\|_2^2 &= (A^T A u_1, u_1) = \lambda_1, \therefore \|Au_1\|_2 = \sqrt{\lambda_1} \\ \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 &\geq \|Au_1\|_2 = \sqrt{\lambda_1} \\ \therefore \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 &= \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)} \end{aligned}$$

□

推论（自证）若 $A \in R^{n \times n}$ 为对称阵，则 $\|A\|_2 = \rho(A)$
 $A^T = A \Rightarrow \lambda_{A^T A} = \lambda_A^2$

定理 1.5. 设 $\|x\|_\alpha$ 为 R^n 上任一种向量范数，从属于它的矩阵范数记为： $\|A\|_\alpha$ ，并设 $P \in R^{n \times n}, \det(P) \neq 0$ ，则：

- R^n 到 R 的映射 $P: x \Rightarrow \|Px\|_\alpha$ 定义了 R^n 上另一种向量范数，记为： $\|x\|_{P,\alpha} = \|Px\|_\alpha$
- 从属向量范数 $\|x\|_{P,\alpha}$ 的矩阵范数为：

$$\|A\|_{P,\alpha} = \|PAP_\alpha^{-1}\|$$

1.7 矩阵范数的性质

定理 1.6. • 设 $\|\cdot\|$ 为 $R^{n \times n}$ 上任一种（从属或非从属）的矩阵范数，则对 $\forall A \in R^{n \times n}$ ，有：

$$\rho(A) \leq \|A\|$$

- 对 $\forall A \in R^{n \times n}$ ，及实数 $\epsilon > 0$ ，至少存在一种从属的矩阵范数 $\|\cdot\|$ ，使得：

$$\|A\| \leq \rho(A) + \epsilon$$

证明. • 设 $x \neq 0, Ax = \lambda x$ ，且 $|\lambda| = \rho(A)$ ，则必存在向量 $y \in R^n$ ，使得 $xy^T \neq 0$ ，于是有：

$$\rho(A)\|xy^T\| = \|\lambda xy^T\| = \|Axy^T\| \leq \|A\| \cdot \|xy^T\| \Rightarrow \rho(A) \leq \|A\|$$

- 对 $\forall A \in R^{n \times n}, \exists T$ s.t. $TAT^{-1} = J$ 为 Jordan 标准形，其中 $J = \text{diag}(J_1, J_2, \dots, J_s)$ ， J_i 为 Jordan 块：

$$J_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & \ddots \\ & \lambda_i & 1 \\ \ddots & \ddots & \lambda_i \end{bmatrix}, i = 1, 2, \dots, s$$

任取 $\epsilon > 0$ ，并定义 $D_\epsilon \in R^{n \times n}$ 为：

$$D_\epsilon = \text{diag}(1, \epsilon, \dots, \epsilon^{n-1})$$

易证， $D_\epsilon^{-1}JD_\epsilon$ 仍为块对角阵，且分块与 J 相同，即： $\tilde{J} = D_\epsilon^{-1}JD_\epsilon = \text{diag}(\tilde{J}_1, \tilde{J}_2, \dots, \tilde{J}_s)$ 其中：

$$\tilde{J}_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & \epsilon & \ddots \\ & \lambda_i & \epsilon \\ \ddots & \ddots & \lambda_i \end{bmatrix}, i = 1, 2, \dots, s$$

$$\therefore \|\tilde{J}\|_\infty = \|D_\epsilon^{-1}JD_\epsilon\|_\infty \leq \max_i |\lambda_i| + \epsilon = \rho(A) + \epsilon$$

而 $D_\epsilon^{-1}T = P$ 为非异阵，由定理1.5可知： $\|D_\epsilon^{-1}Tx\|_\infty$ 定义了 R^n 上的一种向量范数 $\|x\|_{P,\infty}$ 且从属于该向量范数的矩阵范数为：

$$\|A\| = \|D_\epsilon^{-1}TAT^{-1}D_\epsilon\|_\infty = \|D_\epsilon^{-1}JD_\epsilon\|_\infty \leq \rho(A) + \epsilon$$

□

定理 1.7. 对于 $R^{n \times n}$ 的任意两种范数 $\|\cdot\|_\alpha$ 和 $\|\cdot\|_\beta$, 存在常数 M 和 $m (M \geq m > 0)$ 使得:

$$m\|A\|_\alpha \leq \|A\|_\beta \leq M\|A\|_\alpha, \forall A \in R^{n \times n}$$

即 $R^{n \times n}$ 上所有矩阵范数是等价的。

定理 1.8. 设 $\|\cdot\|$ 是 $R^{n \times n}$ 上的算子范数, 若 $\|B\| \leq 1$, 则 $I \pm B$ 为非异阵, 且 $\|(I+B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1-\|B\|}$

证明. (反证法)

若 $\det(A) = 0$ 则 $(I-B)x = 0$ 有非零解, i.e. $\exists x_0 \neq 0$ 使 $Bx_0 = x_0 \Rightarrow \frac{\|Bx_0\|}{\|x_0\|} = 1$, 而 $\|B\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Bx\|}{\|x\|} \geq \frac{\|Bx_0\|}{\|x_0\|} = 1$, 与已知矛盾。

$\therefore (I-B)$ 是非异阵, 同理可证 $I+B$ 也为非异阵。

记 $D = (I-B)^{-1}$, 则:

$$\begin{aligned} 1 = \|I\| &= \|D(I-B)\| = \|D - DB\| \geq \|D\| - \|DB\| \geq \\ &\|D\| - \|D\| \cdot \|B\| = \|D\| \cdot (1 - \|B\|) \Rightarrow \|(I-B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1-\|B\|} \end{aligned}$$

□

2 Gauss 消去法和矩阵的 LU 分解

$$\text{设 } Ax = b \tag{1}$$

其中:

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

且 $\det(A) \neq 0$, 记 $[A|b] = [A^{(1)}|b^{(1)}]$ 其中 $A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)})$, $b^{(1)} = (b_i^{(1)})$

2.1 Gauss 消去法

2.1.1 消元过程

- 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 并且选取 $a_{11}^{(1)}$ 作为主元, 计算乘数 $l_{i1} = a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)} (i = 2, \dots, n)$; 用 $-l_{i1}$ 乘以第 1 行并加到第 i 行 ($i = 2, 3, \dots, n$), 则 $[A^{(1)}|b^{(1)}] \Rightarrow [A^{(2)}|b^{(2)}]$

$$[A^{(2)}|b^{(2)}] = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array} \right]$$

其中,

$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - l_{i1}a_{1j}^{(1)}, & i, j = 2, 3, \dots, n \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - l_{i1}b_1^{(1)}, & i = 2, 3, \dots, n \end{cases}$$

对应的方程 $A^{(2)}x = b^{(2)} \Leftrightarrow Ax = b$

- 假设消元过程已进行了 $k-1$ 步, 得到方程组 $A^{(k)}x = b^{(k)}$, 其对应的增广矩阵为:

$$[A^{(k)}|b^{(k)}] = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \ddots & & & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{array} \right] \quad (2.1)$$

设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 并选 $a_{kk}^{(k)}$ 为主元素, 计算 $l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, i = k+1, \dots, n$, 分别用 $-l_{ik}$ 乘以第 k 行并加到第 $k+1$ 至第 n 行, 则2.1式可变为:

$$[A^{(k+1)}|b^{(k+1)}] = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & \ddots & & & & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k+1)} & & b_{k+1}^{(k+1)} \\ & & \vdots & & & & \vdots \\ & & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{nn}^{(k+1)} & & b_n^{(k+1)} \end{array} \right]$$

其中,

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik}a_{kj}^{(k)}, & i, j = k+1, \dots, n \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik}b_k^{(k)}, & i = k+1, \dots, n \end{cases}$$

对应的方程组为 $A^{(k+1)}x = b^{(k+1)}$

- 继续这一过程且 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, \dots, n-1$ (称为主元), 直至所有主对角线以下的元素消为 0, 即可得上三角方程组 $A^{(n)}x = b^{(n)}$

$$[A^{(n)}|b^{(n)}] = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \dots & \dots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & & \vdots & \vdots \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{array} \right]$$

2.1.2 回代过程

$A^{(n)}x = b^{(n)}$ 的解即为 $Ax = b$ 的解为:

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\ x_k = (b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k)} x_j) / a_{kk}^{(k)}, \quad k = n-1, n-2, \dots, 1 \end{cases}$$

定理 2.1. $a_{ii}^{(i)} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, k)$ 的充要条件是 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0, i = 1, \dots, k, k \leq n$

归纳法. :

- 充分性: 当 $k = 1$ 时, 显然成立,
假设定理对 $k-1$ 成立. i.e. 由 $D_i \neq 0, (i = 1, 2, \dots, k-1) \Rightarrow a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, \dots, k-1$
证对 k 亦成立, i.e. 证 $D_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, k \Rightarrow a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, \dots, k$
由归纳假设 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, \dots, k-1$ 于是 Gauss 消去法将 $A^{(1)} = A$ 化为 $A^{(k)}$, 即

$$A^{(1)} \rightarrow A^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \ddots & & & \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & \dots & \dots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

由线性代数知识, 消去过程中的行变换不影响 A 的顺序主子式的值。

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \dots a_{kk}^{(k)} \neq 0 \quad (2.2)$$

由假设 $D_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, k, \therefore$ 由上式得,

$$a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, \dots, k$$

- 必要条件: 由2.2式可证。

□

推论: 若 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n-1$, 则 $a_{11}^{(1)} = D_1, a_{ii}^{(i)} = D_i / D_{i-1}, i = 2, 3, \dots, n$ (由2.2易知)

定理 2.2. 对于 $Ax = b$, 其中 A 非异阵, 若 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n-1$, 则可用 Gauss 消去法求出方程组的解。

定理 2.3. A 对称正定 $\Rightarrow a_{kk}^{(k)} > 0, k = 1, 2, \dots, n$

定理 2.4. A 为严格对角占优阵 $\Rightarrow a_{kk}^{(k)} \neq 0, k = 1, 2, \dots, n$

定义 2.1 (严格对角占优阵).

$$|a_{kk}| > \sum_{j=1, j \neq k}^n |a_{kj}|, k = 1, 2, \dots, n$$

2.2 矩阵的 LU 分解

定义 2.2 (LU 分解). $A = LU$, L 为单位下三角矩阵, U 为上三角矩阵

$$Ax = b \Leftrightarrow LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

第 k 步消元等价于用下列矩阵:

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

左乘 $[A^{(k)}|b^{(k)}]$, i.e.

$$L_k[A^{(k)}|b^{(k)}] = [A^{(k+1)}|b^{(k+1)}]$$

第 $n-1$ 步消元等价于用 L_{n-1} 左乘 $[A^{(n-1)}|b^{(n-1)}]$, i.e.

$$L_{n-1}[A^{(n-1)}|b^{(n-1)}] = [A^{(n)}|b^{(n)}]$$

因此经过 $n-1$ 次消元后, 即矩阵 $[A^{(n)}|b^{(n)}]$ 左乘 L_1, L_2, \dots, L_{n-1} 有:

$$[A^{(n)}|b^{(n)}] = L_{n-1}[A^{(n-1)}|b^{(n-1)}] = \dots = L_{n-1}L_{n-2} \dots L_1[A^{(1)}|b^{(1)}]$$

$$\therefore U \triangleq A^{(n)} = L_{n-1}L_{n-2} \dots L_1 A^{(1)}, b^{(n)} = L_{n-1}L_{n-2} \dots L_1 b^{(1)}$$

$$\Rightarrow L_1^{-1}L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1}U \triangleq LU (\text{Doolittle 分解})$$

易证:

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

$$\therefore L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & \ddots & & & \\ l_{31} & l_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & 1 & & 1 \end{bmatrix}, |A| \neq 0$$

定理 2.5 (LU 分解定理). 非奇异阵 $A \in R^{n \times n}$, 若其顺序主子式 $D_i \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n-1)$, 则存在唯一的单位下三角阵 L 和上三角阵 U , 使得 $A = LU$

反证法. 假设 A 的 LU 分解不唯一, i.e. $\exists A = L_1 U_1 = L_2 U_2 \Rightarrow U_1 = L_1^{-1} L_2 U_2 \Rightarrow U_1 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2 = I \Rightarrow L_1 = L_2, U_1 = U_2$ \square

注释:

- 当 A 为奇异阵, 且 $D_i \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n-1)$ 时, 定理2.5仍成立。
- A 的 k 阶 ($k = 1, \dots, n$) 顺序主子式

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \dots a_{kk}^{(k)} = u_{11} u_{22} \dots u_{kk}$$

- 若 A 的顺序主子式 $D_k \neq 0 (k = 1, 2, \dots, n)$, 则存在唯一的下三角阵 \tilde{L} 和单位上三角阵 \tilde{U} 使得:

$$A = \tilde{L} \tilde{U}$$

称为 Crout 分解。

•

定理 2.6 (LDU 分解定理). 设 $A \in R^{n \times n}$, 则存在唯一的单位下、上三角阵 L 、 U 及对角阵 D 使得 $A = LDU$ 的充要条件是 A 的顺序主子式 $D_k \neq 0, k = 1, 2, \dots, n-1$, $A = L\tilde{U}$, 而 $\tilde{U} = DU$

3 主元素消去法

3.1 列主元 Gauss 消去法

Gauss 消去过程:

$$A^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \ddots & & & \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & \dots & \dots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

需要列主元的两种情况:

- $a_{kk}^{(kk)} = 0$
- $|a_{kk}^{(kk)}|$ 很小, $l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} > 1$ 会放大误差

3.1.1 消去过程

对 $k = 1, 2, \dots, n-1$ 做:

- 选列主元:

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

- 若 $a_{i_k k}^{(k)} = 0$, 则停止计算 ($\because \det(A) = 0$), 否则:
- 若 $i_k \neq k$, 则换行: $a_{kj}^{(k)} \leftrightarrow a_{i_k j}^{(k)}, b_k^{(k)} \leftrightarrow b_{i_k}^{(k)}$
- 消元: 对 $i = k+1, \dots, n$ 做 (a) - (c)

$$(a)l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$$

对 $j = k+1, \dots, n$ 做 (b)

$$(b)a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik}a_{kj}^{(k)}, b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik}b_k^{(k)}$$

3.1.2 回代过程

- 若 $a_{nn}^{(n)} = 0$, 则停止计算 ($\because \det(A) = 0$), 否则
- $x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}$
- 对 $i = n-1, n-2, \dots, 1$ 做:

$$x_i = (b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j) / a_{ii}^{(i)}$$

3.2 完全选主元消去法

$$|a_{i_k j_k}^{(k)}| = \max_{\substack{k \leq i \leq n \\ k \leq j \leq n}} |a_{ij}^{(k)}|$$

4 直接分解法

定理 4.1. 若 A 为非奇异阵, 则 \exists 排列阵 P (初等置换阵乘积), 使得 $PA = LU$ 其中 L 为单位下三角阵, U 为上三角阵 $A = LU$

$$Ax = b \Leftrightarrow LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

4.1 Doolittle 分解法

假设 A 非异阵, 且 $A = LU$, i.e.

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

对于 L 和 U , 由于 $i < j$ 时, $l_{ij} = 0$, 当 $i > j$, $u_{ij} = 0$, \therefore 由 $A = LU$ 可得:

$$a_{kj} = \sum_{r=1}^n l_{kr} u_{rj} = \sum_{r=1}^{\min(k,j)} l_{kr} u_{rj}, k, j = 1, 2, \dots, n \quad (4.1)$$

显然:

$$u_{1j} = a_{1j}, j = 1, 2, \dots, n \quad (4.2)$$

当 $j = 1$ 时, 由4.1可得,

$$a_{k1} = l_{k1} u_{11} \Rightarrow l_{k1} = a_{k1} / u_{11}, k = 2, 3, \dots, n \quad (4.3)$$

假设 U 的第 1 行至第 $k-1$ 行和 L 的第 1 列至第 $k-1$ 列都已求出, 则可计算 U 的第 k 行元素

$$\begin{aligned} \because a_{kj} &= l_{kk} u_{kj} + \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj} \\ \therefore u_{kj} &= a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}, j = k, k+1, \dots, n \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \because a_{ik} &= l_{ik} u_{kk} + \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk} \\ \therefore l_{ik} &= (a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}) / u_{kk}, i = k+1, \dots, n \end{aligned} \quad (4.5)$$

利用 (4.2) (4.3) (4.4) (4.5) 将 A 分解为 LU, 这种分解方法称为 Doolittle 三角分解。

$$Ax = b \Leftrightarrow LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases} \Rightarrow y_i = b_i - \sum_{r=1}^{i-1} l_{ir}y_r, i = 1, 2, \dots, n \quad (4.6)$$

$i = 1$ 时, $\sum_{r=1}^0 l_{ir}y_r = 0$

$$x_i = (y_i - \sum_{r=i+1}^n u_{ir}x_r)/u_{ii}, i = n, n-1, \dots, 1 \quad (4.7)$$

首先用 (4.2) (4.3) (4.4) (4.5) 将 A 分解为 LU, 再用 (4.6) (4.7) 求出方程组的解, 称为 Doolittle 三角分析方法。

4.2 三对角方程组的追赶法

设有方程 $Ax = d$, 且 $D_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$ 其中:

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}$$

设 $A = LU$, 易证:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{bmatrix}$$

\therefore 由 $A = LU$ 即可确定:

$$\begin{cases} u_1 = b_1 \\ l_i = a_i/u_{i-1}, i = 2, 3, \dots, n \\ u_i = b_i - l_i c_{i-1}, i = 2, 3, \dots, n \end{cases} \quad (4.8)$$

$$LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = d_1 \\ y_i = d_i - l_i y_{i-1}, i = 2, 3, \dots, n \end{cases} \quad (4.9)$$

$$\begin{cases} x_n = y_n/u_n \\ x_i = (y_i - c_i x_{i+1})/u_i, i = n-1, n-2, \dots, 1 \end{cases} \quad (4.10)$$

定理 4.2. 设三对角阵 A 满足对角占优条件, $|b_1| > |c_1| > 0, |b_n| > |a_n| > 0, |b_i| \geq |a_i| + |c_i|$ 则 A 非奇异, 且 $y_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$ $0 < |\frac{c_i}{u_i}| < 1, i = 1, 2, \dots, n-1, |b_i| - |a_i| < |u_i| < |b_i| + |a_i|, i = 2, 3, \dots, n$

4.3 Cholesky 分解 (平方根) 法

对称: $A^T = A$; 正定: $\lambda_i > 0, D_i > 0$

假设 $\det(A) \neq 0$, 且 $D_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n-1$ 则 $A = LU$ 进一步:

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & & & \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12}/u_{11} & \dots & u_{1n}/u_{11} \\ & 1 & \dots & u_{2n}/u_{22} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix} = D\tilde{U}$$

i.e. $A = LD\tilde{U}$ 这就是 A 的 LDU 分解。

定理 4.3. (对称阵的三角分解定理) 设 $A \in R^{n \times n}$, 且 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$ 则 \exists 唯一单位下三角阵 L 和对角阵 D 使得 $A = LDL^T$

证明. $\because A = A^T = LD\tilde{U} = \tilde{U}^T D L^T \xrightarrow{\text{分解唯一性}} L = \tilde{U}^T \Rightarrow \tilde{U} = L^T$

$\therefore A = LD\tilde{U} = LDL^T$ □

定理 4.4. 设 $A \in R^{n \times n}$, 且 A 对称正定, 则 \exists 唯一的对角元素为正的下三角阵 L , 使得 $A = LL^T$, 由

$$A = LL^T, L = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & l_{33} & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & \dots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

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

\Rightarrow

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}, j = 1, 2, \dots, n \quad (4.11)$$

$$l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk})/l_{jj}, i = j+1, \dots, n, j = 1, 2, \dots, n-1 \quad (4.12)$$

方程组的解:

$$y_i = (b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k)/l_{ii}, i = 1, 2, \dots, n \quad (4.13)$$

$$x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^n l_{ki}x_k)/l_{ii}, i = n, n-1, \dots, 1 \quad (4.14)$$

证明. A 对称正定 $\therefore D_i = u_{11}u_{22} \dots u_{ii} > 0 \therefore u_{ii} > 0, i = 1, 2, \dots, n$

$\therefore D = D^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}$, 其中 $D^{\frac{1}{2}} = \text{diag}(\sqrt{u_{11}}, \sqrt{u_{22}}, \dots, \sqrt{u_{nn}})$

$\therefore A = LD^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}L^T = (LD^{\frac{1}{2}})(LD^{\frac{1}{2}})^T = \tilde{L}\tilde{L}^T$

由 $A = LDL^T$ 的分解唯一性 $\Rightarrow A = \tilde{L}\tilde{L}^T$ 也是唯一的。 \square

5 条件数和摄动理论初步

例 5.1.

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 1.00001x_2 = 2 \end{cases} \Rightarrow x_1 = 2, x_2 = 0$$

若上式变为:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 1.00001x_2 = 2.00001 \end{cases} \Rightarrow x_1 = 1 = x_2$$

这就是病态方程组。

定义 5.1. 设 $Ax = b$, 当 A 和 b 有微小变化 ΔA 和 Δb 就引起解向量 x 的很大变化, 称 A 为关于解方程组和矩阵求逆的病态矩阵。称相应的方程组为病态方程组, 反之, 若 ΔA 和 Δb 很小, Δx 也很小, 就称 A 为良态矩阵和称 $Ax = b$ 为良态方程组。

5.1 右端项 b 的摄动对解的影响

假设 $\det(A) \neq 0$, b 有扰动 Δb , 则 $Ax = b$ 的解也要产生摄动 Δx , i.e. 方程组 $Ax = b$ 变成了 $A(x + \Delta x) = b + \Delta b \Rightarrow \Delta x = A^{-1}\Delta b \Rightarrow \|\Delta x\| \leq$

$$\begin{aligned}
& \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta b\| \\
& \because \|x\| \geq \frac{\|Ax\|}{\|A\|} = \frac{\|b\|}{\|A\|} \Rightarrow \frac{1}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|} \\
& \therefore \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}
\end{aligned}$$

5.2 A 的摄动对解的影响

设 $\det(A) \neq 0$, A 有摄动 ΔA , 相应地由 $x \rightarrow x + \Delta x$, i.e. $Ax = b, (A + \Delta A)(x + \Delta x) = b \Rightarrow (A + \Delta A)\Delta x = -\Delta Ax \Rightarrow A(I + A^{-1}\Delta A)\Delta x = -\Delta Ax$

当 $\|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| < 1$ 时, 由矩阵范数定理1.8($\|(I \pm B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|}$ ($\|B\| < 1$)), 可知, $(I + A^{-1}\Delta A)^{-1}$ 存在

$$\therefore \Delta x = -(I + A^{-1}\Delta A)^{-1}A^{-1}\Delta Ax$$

$$\begin{aligned}
\therefore \|\Delta x\| & \leq \|(I + A^{-1}\Delta A)^{-1}\| \|A^{-1}\| \|\Delta A\| \|x\| \leq \frac{\|A^{-1}\| \|\Delta A\|}{1 - \|A^{-1}\Delta A\|} \|x\| \\
& \Rightarrow \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A\| \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}{1 - \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} = \frac{\text{cond}(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}{1 - \text{cond}(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}
\end{aligned}$$

定义 5.2. 对于非异阵 A , $\|\cdot\|$ 为一种矩阵的从属范数, 称数 $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ 为 A 的条件数, 记为 $\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$

常用条件数:

$$\begin{aligned}
\text{cond}(A)_{\infty} &= \|A\|_{\infty} \cdot \|A^{-1}\|_{\infty} \\
\text{cond}(A)_2 &= \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}}
\end{aligned}$$

特别地当: $A^T = A$ 时, $\text{cond}(A)_2 = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$, 其中 λ_1 和 λ_n 分别为 A 的绝对值最大和最小的特征值。

条件数性质: (运用线性代数知识证明)

1. $\text{cond}(A) \geq 1, \text{cond}(A) = \text{cond}(A^{-1})$
2. $\text{cond}(cA) = \text{cond}(A), \forall c \in R, c \neq 0$
3. 若矩阵 A 正交阵, 则 $\text{cond}(A)_2 = 1$
4. 若 U 为正交阵, 则 $\text{cond}(A)_2 = \text{cond}(AU)_2 = \text{cond}(UA)_2$
5. $\text{cond}(A) \geq \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$, 其中 λ_1, λ_n 分别为绝对值最大, 最小的特征值。(证明: 定理1.6)

定理 5.1. 设 $Ax = b, \det(A) \neq 0$, b 为非零向量且 Δb 和 ΔA 分别为 b 和 A 的扰动量, 若 $\|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| < 1$ 则有事前误差估计式:

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left[\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right] \quad (5.1)$$

例 5.2. 已知方程组 $\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 1.000001x_2 = 2 \end{cases}$, 右端项 b 有扰动 $\Delta b = (0, 10^{-5})^T$, 求其系数矩阵 A 的条件数 $\text{cond}(A)_\infty$, 说明 Δb 对解的影响, 并分析其性态。

解: $\because A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 + 10^{-6} \end{bmatrix}, A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 + 10^6 & -10^6 \\ -10^6 & 10^6 \end{bmatrix}$
 $\therefore \text{cond}(A)_\infty = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty = (2 + 10^{-6})(1 + 2 \times 10^6) > 4 \times 10^6$ 由于条件数很大, 方程组病态, A 为病态矩阵。

右端项对解的影响: $\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} = 2000\%$

定理 5.2. 设 $\det(A) \neq 0$, x 和 \bar{x} 分别为 $Ax = b$ 的准确解和近似解, $r = b - A\bar{x}$ 为残差。则:

$$\frac{1}{\text{cond}(A)} \frac{\|r\|}{\|b\|} \leq \frac{\|x - \bar{x}\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|b\|} \quad (5.2)$$

称为事后误差估计式。

证明. $\because x = A^{-1}b, \bar{x} = A^{-1}(b - r) \therefore x - \bar{x} = A^{-1}r$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\text{cond}(A)} \frac{\|r\|}{\|b\|} &= \frac{\|AA^{-1}r\|}{\|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \|b\|} \\ &\leq \frac{\|A\| \|A^{-1}r\|}{\|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \|b\|} = \frac{\|A^{-1}r\|}{\|A^{-1}\| \cdot \|b\|} \\ &\leq \frac{\|x - \bar{x}\|}{\|x\|} \\ &\leq \frac{\|A^{-1}\| \|r\| \|A\|}{\|A^{-1}b\| \|A\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|AA^{-1}b\|} \\ &= \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|b\|} \end{aligned}$$

□

6 迭代法的基本概念

6.1 迭代法的一般形式

对于方程:

$$Ax = b, \det(A) \neq 0, b \in R^n \quad (6.1)$$

将6.1转化为等价的方程组：

$$x = Bx + f, B \in R^{n \times n}, f \in R^n \quad (6.2)$$

由6.2可构造如下迭代公式：

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f, k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.3)$$

其中：B 称为迭代矩阵，f 为右端项，给定 $x^{(0)}$ 则可利用6.3得向量序列： $\{x^{(k)}\}$, $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$ ，若 $x^{(k)}$ 收敛，i.e. $x^{(k)} \rightarrow x^*, k \rightarrow \infty$ ，则有：

$$x^* = Bx^* + f$$

6.2 向量序列和矩阵序列的收敛性

定义 6.1. 设 $\{x^{(k)}\}$ 为 R^n 中的向量序列， $x^* \in R^n$ ，若 $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\| = 0$ ，其中 $\|\cdot\|$ 为向量范数，则称 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* ，记为 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*$ 。

定理 6.1. R^n 中的 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 $x^* \in R^n$ ，当且仅当 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^*, i = 1, 2, \dots, n$ 。其中 $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T, x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)^T$

证明. 若 $\{x^{(k)}\}$ 收敛，则 $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\| = 0$ ，又因为： $0 \leq |x_i^{(k)} - x_i^*| \leq \max_{n \geq i \geq 1} |x_i^{(k)} - x_i^*| = \|x^{(k)} - x^*\|_\infty \rightarrow 0$
 $\therefore \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*$

反之，若 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^*, i = 1, 2, \dots, n$ ，则可证： $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\|_\infty = 0$ 又因为向量范数的等价性1.5，有 $\|x^{(k)} - x^*\| \leq C \|x^{(k)} - x^*\|_\infty \rightarrow 0$ □

定义 6.2. 定义了范数 $\|\cdot\|$ 的空间 $R^{n \times n}$ 中，若 $\exists A \in R^{n \times n}$ ，使 $\lim_{k \rightarrow \infty} \|A^{(k)} - A\| = 0$ ，则称 $\{A^{(k)}\}$ 收敛于 A ，记为： $\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = A$

定理 6.2. 【自证】 设 $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})_n, (k = 1, 2, \dots, \infty), A = (a_{ij})_n$ 为 $R^{n \times n}$ 中的矩阵，则 $\{A^{(k)}\}$ 收敛于 A 的充要条件为：

$$\lim_{k \rightarrow \infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}$$

定理 6.3.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = 0 \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)}x = 0, \forall x \in R^n$$

证明. • 必要性：对任一从属范数： $\|A^{(k)}x\| \leq \|A^{(k)}\| \|x\| \rightarrow 0$

- 充分性: 取 $x = e_j$, 则由 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)}e_j = 0$, 可知 $A^{(k)}$ 的第 j 列为 0, 当 $j = 1, 2, \dots, n$ 时, 即可证明 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = 0$

□

定理 6.4. 设 $B \in R^{n \times n}$ 则有下列三个命题等价:

- $\lim_{k \rightarrow \infty} B^k = 0$
- $\rho(B) < 1$
- 至少存在一种从属矩阵范数 $\|\cdot\|$, 使得 $\|B\| < 1$

证明. 逐个证明:

(1)->(2) 反证法: 假设 B 有一个特征值 λ 满足 $|\lambda| \geq 1$, 则有 $\lambda \neq 0$ 使得 $Bx = \lambda x \Rightarrow B^k x = \lambda B^{k-1} x = \lambda^k x, \therefore k \rightarrow \infty, B^k x \neq 0$ 根据 $(\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = 0 \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)}x = 0, \forall x \in R^n)$ 得, $\lim_{k \rightarrow \infty} B^k \neq 0$ 与已知矛盾, $\therefore \rho(B) < 1$

(2)->(3) 由定理1.6知, 对 $\forall \varepsilon > 0, \exists \|\cdot\|$ s.t. $\|B\| \leq \rho(B) + \varepsilon \Rightarrow \|B\| < \rho(B) + 2\varepsilon, \because \rho(B) < 1, \text{choose } \varepsilon = \frac{1-\rho(B)}{2} > 0 \therefore \|B\| < \rho(B) + 2\varepsilon = \rho(B) + 2 \frac{1-\rho(B)}{2} = 1$

(3)->(1) 由相容性条件可得: $\|B^k - 0\| \leq \|B\|^k \because \|B\| < 1 \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \|B\|^k = 0 \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} B^k = 0$

□

6.3 迭代方法的收敛性

$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$, 若收敛, 则有 $x^* = Bx^* + f$, 则 $e^{(k)} = x^{(k)} - x^* = Bx^{(k-1)} - Bx^* = \dots = B^k e^{(0)}, e^{(0)} = x^{(0)} - x^*$

定理 6.5. (重要) 对于任意初值 $x^{(0)}$ 和右端项 f , 迭代方法 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 收敛的充要条件是: $\rho(B) < 1$

证明. 由以上分析有: $e^{(k)} = x^{(k)} - x^* = B^k e^{(0)}$, 其中 $e^{(0)}$ 为与 k 无关的任意初始误差

\therefore 迭代法的收敛性等价于 $\{e^{(k)}\}$ 的收敛性。

而由 $e^{(0)}$ 的任意性, 及定理6.3知: $\{e^{(k)}\}$ 的收敛性等价于 $\{B^k\}$ 的收敛性, 而 $\{B^k\}$ 的收敛性与 $\rho(B) < 1$ 等价

\therefore 迭代法收敛 $\Leftrightarrow \rho(B) < 1$

$$x^{(k)} \rightarrow x^* \Leftrightarrow B^k e^{(0)} \rightarrow 0 \Leftrightarrow B^k \rightarrow 0 \Leftrightarrow \rho(B) < 1$$

□

定理 6.6. (充分条件) 对于 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$, 若 $\exists \|\cdot\|_\lambda, s.t. \|B\|_\lambda < 1$ 则:

1. 迭代法收敛; i.e. $x^{(k)} \rightarrow x^*, k \rightarrow \infty$

2.

$$\|x^{(k)} - x^*\|_\lambda \leq \frac{\|B\|_\lambda}{1 - \|B\|_\lambda} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_\lambda$$

3.

$$\|x^{(k)} - x^*\|_\lambda \leq \frac{\|B\|_\lambda^k}{1 - \|B\|_\lambda} \|x^{(0)} - x^*\|_\lambda$$

证明. 1. $\rho(B) < \|B\| < 1$

$$\begin{aligned} 2. \because x^{(k)} - x^* &= B(x^{(k-1)} - x^*) = B(x^{(k)} - x^*) + B(x^{(k-1)} - x^{(k)}) \Rightarrow \\ &(I - B)(x^{(k)} - x^*) = B(x^{(k-1)} - x^{(k)}) \\ \because \|B\| < 1, \therefore \exists (I - B)^{-1} \therefore x^{(k)} - x^* &= -(I - B)^{-1} B(x^{(k)} - x^{(k-1)}) \\ \therefore \|x^{(k)} - x^*\|_\lambda &\leq \|(I - B)^{-1}\|_\lambda \|B\|_\lambda \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_\lambda \leq \frac{\|B\|_\lambda}{1 - \|B\|_\lambda} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_\lambda \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 3. \because \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_\lambda &= \|B(x^{(k-1)} - x^{(k-2)})\|_\lambda \leq \|B\|_\lambda \|x^{(k-1)} - x^{(k-2)}\|_\lambda \leq \\ &\dots \leq \|B\|_\lambda^{k-1} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|_\lambda \end{aligned}$$

将上式代入 2 中, 即可得到 3.

□

注释:

- 若仅仅是为了判断迭代算法的收敛性, 则定理中的条件还可放宽为: \exists 某一种范数使得 $\|B\|_\lambda < 1$
- 方法的收敛性与右端项 f 无关
- 从定理可看出, $\|B\|_\lambda$ 不是很靠近 1, 如果要求 $\|x^{(k)} - x^*\|_\lambda < \varepsilon$, 只需要使相邻两次的 $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_\lambda < \varepsilon$ 即可
- 判断一种方法的迭代次数, 用定理6.3.3 可以解析求出。

定义 6.3. (重要概念) 称 $R(B) = -\ln(\rho(B))$ 为迭代法 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 的渐进收敛率或渐进收敛速度。

7 Jacobi 方法和 GS 迭代法

7.1 J 法

假设 $\det(A) \neq 0, A = D - L - U$, 其中: $D = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn})$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \dots & 0 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \dots & -a_{1n} \\ & \ddots & \dots & -a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

将 $A = D - L - U$ 代入 $Ax = b$ 则 $Dx = (L + U)x + b \Rightarrow x = D^{-1}[(L + U)x + b] = D^{-1}(L + U)x + D^{-1}b \Rightarrow B = D^{-1}(L + U), f = D^{-1}b$
由此可得 J 法:

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= Bx + f \\ B &= D^{-1}(L + U) = I - D^{-1}A \\ f &= D^{-1}b \end{aligned} \quad (7.1)$$

其分量形式:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}], j = 1, 2, \dots, n \quad (7.2)$$

7.2 GS 方法

分量形式:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}], j = 1, 2, \dots, n \quad (7.3)$$

写成向量形式有:

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= D^{-1}(b + Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)}) \\ \Leftrightarrow (D - L)x^{(k+1)} &= b + Ux^{(k)} \\ \Leftrightarrow x^{(k+1)} &= (D - L)^{-1}Ux^{(k)} + (D - L)^{-1}b \\ &= (I - (D - L)^{-1}A)x^{(k)} + (D - L)^{-1}b \end{aligned} \quad (7.4)$$

例 7.1.

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 - 2x_3 = 72 \\ -x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 83 \\ -x_1 - x_2 + 5x_3 = 42 \end{cases}$$

易知解 $x^* = (11, 12, 13)$

解: J 法:

$$\begin{aligned}x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{10}(72 + x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)}) \\x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{10}(83 + x_1^{(k)} + 2x_3^{(k)}) \\x_3^{(k+1)} &= \frac{1}{5}(42 + x_1^{(k)} + x_2^{(k)})\end{aligned}$$

取 $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$ 则: $x^{(9)} = (10.9994, 11.9994, 12.9992)^T$, 误差 $\|x^{(9)} - x^*\|_\infty = 0.0008$

GS 法:

$$\begin{aligned}x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{10}(72 + x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)}) \\x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{10}(83 + x_1^{(k+1)} + 2x_3^{(k)}) \\x_3^{(k+1)} &= \frac{1}{5}(42 + x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)})\end{aligned}$$

取 $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$ 则: $\|x^{(6)} - x^*\|_\infty = 0.0001$, 显然 GS 法收敛好于 J 法。

7.3 J 法 GS 法的收敛性

收敛的充要条件: $\rho(B) < 1$, 充分条件: $\|B\| < 1$

定义 7.1.

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, i = 1, 2, \dots, n$$

称 A 为严格对角占优阵。

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, i = 1, 2, \dots, n$$

且其中至少有一个不等式严格成立, 则称 A 为弱对角占优阵。

定义 7.2. 设 $A \in R^{n \times n}$, 若不能找到排列阵 P 使得 $P^T A P = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$

(其中 A_{11}, A_{22} 均为方阵) 成立, 则称 A 为不可约的。

例 7.2.

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \rightarrow 1-3 \text{ 行交换} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow 1,3 \text{ 列交换} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

定理 7.1. 若 $A = (a_{ij})_n \in R^{n \times n}$ 为严格对角占优阵或不可约弱对角占优阵, 则 $a_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$, 且 A 为非奇异阵。

定理 7.2. 若 A 为严格对角占优阵或不可约弱对角占优阵, 则 $\forall x^{(0)}$, 方程 $Ax = b$ 的 J 法和 GS 法均收敛。

反证法. (目标 $\rho(G) < 1$)

设 G 有一个特征值 λ 满足 $|\lambda| \geq 1$, 则 $|\lambda I - (D - L)^{-1}U| = 0 \Rightarrow |I - \lambda^{-1}(D - L)^{-1}U| = 0 \Rightarrow |(D - L)^{-1}||D - L - \lambda^{-1}U| = 0$

$\because a_{ii} \neq 0 \therefore |(D - L)^{-1}| \neq 0$, 而 $A = D - L - U$ 与 $D - L - \lambda^{-1}U$ 的零元素与非零元素位置完全一样, 所以 $D - L - \lambda^{-1}U$ 也是不可约的。

又 $\because |\lambda| \geq 1, D - L - \lambda^{-1}U$ 也是弱对角占优矩阵。根据定理7.1有 $|D - L - \lambda^{-1}U| \neq 0$, 矛盾, 证明 $\rho(B) < 1$ 。 \square

定理 7.3. 设 A 对称, 且 $a_{ii} > 0, i = 1, 2, \dots, n$ 则 J 法收敛 $\Leftrightarrow A$ 及 $2D - A$ 均正定。

证明. $\because a_{ii} > 0, i = 1, 2, \dots, n$

$$\therefore D = D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}}$$

而 $B = I - D^{-1}A = D^{-\frac{1}{2}}(I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{\frac{1}{2}}$, 说明 B 与 $I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 相似。

• 必要性:

若 J 法收敛, 则 $\rho(B) < 1$ 。设 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值 μ (实数) 则:

$$\lambda(B) = 1 - \mu, \therefore |1 - \mu| < 1 \Rightarrow 0 < \mu < 2$$

$\because D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 正定 $\therefore \forall x \in R^n, (D^{-\frac{1}{2}}x)^T AD^{-\frac{1}{2}}x = x^T D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}x > 0$ A 正定。

$$\text{又 } \because \lambda(2I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}) = 2 - \mu \in (0, 2)$$

$\therefore 2D - A$ 正定。

• 充分性:

$\because A$ 正定

$\therefore D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 正定

$$\therefore \lambda(D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}) > 0$$

$$\therefore \lambda(B) < 1 \quad (B = I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})$$

$$\text{又 } \because -B = -D^{-\frac{1}{2}}(I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{-\frac{1}{2}} = D^{-\frac{1}{2}}(I - D^{-\frac{1}{2}}(2D - A)D^{-\frac{1}{2}})D^{-\frac{1}{2}} \therefore -\lambda(B) < 1 \Rightarrow \lambda(B) > -1$$

\square

定理 7.4. 设 A 对称正定, 则方程 $Ax = b$ 的 GS 法收敛。

例 7.3. •

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}$$

J 法收敛, GS 法发散

•

$$\begin{cases} x_1 + 0.8x_2 + 0.8x_3 = 2.6 \\ 0.8x_1 + x_2 + 0.8x_3 = 2.6 \\ 0.8x_1 + 0.8x_2 + x_3 = 2.6 \end{cases}$$

GS 法收敛, J 法发散

例 7.4. 当 $a_{ii} > 0$, 且 $a_{ij} \leq 0, i \neq j$ 时, 可证下列四种情况只有一种成立。

1. $\rho(G) = \rho(B) = 0$
2. $0 < \rho(G) < \rho(B) < 1$
3. $\rho(G) = \rho(B) = 1$
4. $1 < \rho(B) < \rho(G)$

通常情况下, GS 方法好于 J 法, 但不是所有情况。

8 超松弛迭代法

8.1 SOR 法构造

记 $\Delta x = (\Delta x_1, \Delta x_2, \dots, \Delta x_n)^T = x^{(k+1)} - x^{(k)}$

则 GS 法可写成: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x$ 其中 $\Delta x_i = \frac{1}{a_{ii}}[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}] - x_i^{(k)}$

引入参数 w , 即可得 SOR 法:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + w\Delta x$$

i.e.

$$x_i^{(k+1)} = (1-w)x_i^{(k)} + \frac{w}{a_{ii}}[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}] \quad (8.1)$$

将 a_{ii} 乘到等号左边, 写成向量形式:

$$\begin{aligned} Dx^{(k+1)} &= (1-w)Dx^{(k)} + w[b + Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)}] \\ \Rightarrow x^{(k+1)} &= (D - wL)^{-1}[(1-w)D + wU]x^{(k)} + (D - wL)^{-1}wb \end{aligned}$$

令 $L_w = (D - wL)^{-1}[(1-w)D + wU]$, $f = (D - wL)^{-1}wb$, 则有

$$x^{(k+1)} = L_w x^{(k)} + f \quad (8.2)$$

例 8.1.

$$\begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 \\ 30 \\ -24 \end{bmatrix}$$

精确解: $x^* = (3, 4, -5)^T$

用 $w = 1(GS), x^{(7)} = (3.013411, 3.988824, -5.002794)^T$

$w = 1.2(SOR), x^{(7)} = (3.00049, 4.000258, -5.000348)^T$

定理 8.1. (SOR 法收敛的必要条件)

$\therefore SOR$ 法收敛, $\therefore \rho(L_w) < 1$

设 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 为 L_w 的特征值, 则 $|L_w| = |\prod_{i=1}^n \lambda_i| \leq |\lambda_1| |\lambda_2| \dots |\lambda_n| \leq [\rho(L_w)]^n < 1 \Rightarrow |L_w|^{\frac{1}{n}} \leq \rho(L_w) < 1$ 而 $\det(L_w) = \det(D - wL)^{-1} \det[(1 - w)D + wU] = \det D^{-1} \det[(1 - w)D] = (1 - w)^n, \therefore |1 - w| < 1 \Rightarrow 0 < w < 2$

定理 8.2. 若 A 为对称正定阵, 则 SOR 法收敛的充要条件为 $0 < w < 2$

定义 8.1. 若存在排列阵 P 使 $PAP^T = \begin{bmatrix} D_1 & M_1 \\ M_2 & D_2 \end{bmatrix}$, 其中 D_1, D_2 为对角阵, 称 A 是 2-循环的。若矩阵 $\alpha D^{-1}L + \alpha^{-1}D^{-1}U$ 的特征值都与 α 无关, 则 A 是相容次序矩阵。

定理 8.3. 设 $A \in R^{n \times n}$ 是 2-循环和相容次序的, $B = I - D^{-1}A$ 的特征值全为实数, 且 $\mu = \rho(B) < 1$, 则:

$$\rho(L_w) = \begin{cases} \frac{[w\mu + \sqrt{w^2\mu^2 - 4(w-1)}]^2}{4}, & 0 < w < w_{opt} \\ w - 1, & w_{opt} \leq w < 2 \end{cases}$$

其中, $\rho(w_{opt}) = \min \rho(L_w) = w_{opt} - 1, w_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}}$, 称为最佳松弛因子, 且当 $0 < 2 < w_{opt}$ 时, $\rho(L_w)$ 是 w 的单减函数, 当 $w_{opt} \leq w \leq 2$ 时, $\rho(L_w)$ 是 w 的单增函数。

1. 当 $w=1$ 时, $\rho(L_1) = \mu^2 = \rho(B)^2, R(L_w) = -\ln \mu^2 = 2R(B)$, GS 法收敛速度为 J 法的 2 倍。
2. 显然 $\rho(L_w) \geq \rho(L_{w_{opt}}) = w_{opt} - 1, w_{opt} \geq 1$
- 3.

定理 8.4. 设 A 是对称正定的三对角阵, 则: $\rho(G) = \rho(B)^2 < 1$, 且

$$w_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(B)^2}}$$

例 8.2.

$$Ax = b, A = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

显然 A 为对称正定三对角阵 (利用顺序主子式均大于 0 可以判断正定)

$$\therefore B = I - D^{-1}A = \begin{bmatrix} & -\frac{3}{4} & \\ -\frac{3}{4} & & \frac{1}{4} \\ & \frac{1}{4} & \end{bmatrix}, \therefore \rho(B) = \sqrt{5/8} \approx 0.790 < 1, \rho(G) = \rho(B)^2 = 0.625$$

$$w_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - 0.625}} \approx 1.24$$

8.2 块松弛迭代法

$$\text{设 } A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2N} \\ \dots & & & \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN} \end{bmatrix} \text{ 其中 } A_{ii} \text{ 为 } n_i \times n_i \text{ 的非奇异方阵,}$$

且 $n_1 + n_2 + \dots + n_N = n$, 有:

$$A_{ii}x_i^{(k+1)} = (1-w)A_{ii}x_i^{(k)} + w[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n A_{ij}x_j^{(k)}] \quad (8.3)$$

其中 $x_i^{(k)}, b_i$ 均为 n_i 个分量的向量。

由 (8.3) 可得:

$$x^{(k+1)} = (D - wL)^{-1}[(1-w)D + wU]x^{(k)} + w(D - wL)^{-1}b$$

其中 $X = (x_1^T, x_2^T, \dots, x_N^T)^T, b = (b_1^T, b_2^T, \dots, b_N^T)^T$

9 共轭梯度法

系数矩阵对称正定

若 $Ax = b$ 其中 $A > 0$, 则求解可转化为求下列二次函数:

$$\phi(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x) \quad (9.1)$$

的最小值点问题。

定理 9.1. 设 A 对称正定, 则 x^* 为方程组的解的充要条件是 $\phi(x^*) = \min_{x \in R^n} \phi(x)$

证明. 定义如下函数:

$$F(x) = \frac{1}{2}(A^{-1}r, r) \geq 0$$

其中 $r = b - Ax$, 将 r 代入上式有:

$$F(x) = \phi(x) + \frac{1}{2}(A^{-1}b, b)$$

其中 $\phi(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$ $F(x)$ 最小值点 $\Leftrightarrow \phi(x)$ 最小值点 $\Rightarrow r = 0, i.e. Ax^* = b$ \square

9.1 最速下降法

选取初值 $x^{(0)}$, 则有: $-\nabla\phi(x) = -(\frac{\partial\phi}{\partial x_1}, \frac{\partial\phi}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial\phi}{\partial x_n})^T|_{x=x^{(0)}} = b - Ax^{(0)} = r^{(0)}$. 可令 $\frac{d\phi(x^{(0)} + \alpha r^{(0)})}{d\alpha} = 0$, 则可得 $\alpha = \frac{(r^{(0)}, r^{(0)})}{(Ar^{(0)}, r^{(0)})} = \alpha_0$, 则 $x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 r^{(0)}$ 是使得 $\phi(x)$ 下降最快, 并且使之达到最小值点的极值点, 然后再从 $x^{(1)}$ 出发, 寻找一个使得 $\phi(x)$ 下降最快的方向 $r^{(1)}$ 和步长 α_1 , 同理可知: $r^{(1)} = b - Ax^{(1)}, \alpha_1 = \frac{(r^{(1)}, r^{(1)})}{(Ar^{(1)}, r^{(1)})}$, 则可得: $x^{(2)} = x^{(1)} + \alpha_1 r^{(1)}$, 依次类推可得: $x^{(3)}, x^{(4)}, \dots, x^{(k)}$, 综上可得如下最速下降算法:

$$\begin{aligned} r^{(k)} &= b - Ax^{(k)} \\ \alpha_k &= \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ar^{(k)}, r^{(k)})} \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)} \end{aligned} \quad (9.2)$$

易证: $\phi(x^{(k+1)}) < \phi(x^{(k)}), |x^{(k+1)} - x^{(k)}| < \varepsilon$

9.2 共轭梯度法

对于 $A > 0$ 称满足 $(AP^{(i)}, P^{(j)}) = 0, i \neq j$ 的向量组 $\{P^{(i)}\}$ 为 A 共轭向量组, 如果按方向 $P^{(0)}, P^{(1)}, \dots, P^{(k-1)}$ 已进行了 k 次一维搜索, 求得了 $x^{(k)}$, 下一步求 $x^{(k+1)}$, 则需要进行搜索使 $\phi(x^{(k)} + \alpha P^{(k)})$ 极小, 则可令 $\frac{d\phi(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})}{d\alpha} = 0 \Rightarrow \alpha_k = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$

由此可得: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k AP^{(k)}$, 其中 $(AP^{(i)}, P^{(j)}) = 0, i \neq j, p^{(0)} = r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$

按此方法有如下性质:

$$\begin{aligned} \phi(x^{(k+1)}) &= \min_{\alpha} \phi(x^{(k)} + \alpha p^{(k)}) \\ \phi(x^{(k+1)}) &= \min_{x \in \text{span}\{p^{(0)}, p^{(1)}, \dots, p^{(k)}\}} \phi(x) \end{aligned}$$

开始时选取 $p^{(0)} = r^{(0)}$, 然后选取 $p^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)}$, 其中 β_{k-1} 由 A -共轭性确定, i.e., 由 $(Ap^{(k)}, p^{(k-1)}) = 0$ 确定为: $\beta_{k-1} = -\frac{(r^{(k)}, Ap^{(k-1)})}{(p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)})}$

综上可得如下 CG 算法：给定： $x^{(0)}, p^{(0)} = r^{(0)}, r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})} \quad (9.3)$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)} \quad (9.4)$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)} \quad (9.5)$$

$$\beta_k = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})} \quad (9.6)$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)} \quad (9.7)$$