第五章 矩阵计算问题

第 14 讲 线性方程组

黄定江

DaSE @ ECNU
djhuang@dase.ecnu.edu.cn

线性方程组的求解问题是一个古老的数学问题：

- 中国古代的《九章算术》中已详细地载述了解线性方程组的消元法。
- 19 世纪初，西方也有了 Gauss 消去法。

到了 20 世纪中叶，如何利用计算机来快速、有效地求解未知数多的大型线性方程组是数值线性代数研究的核心问题。求解线性方程组的数值方法大体上可分为：

- 直接法：是指在没有舍入误差的情况下经过有限次运算可求得方程组的精确解的方法，因此直接法又称为精确法。
- 迭代法：是采取逐次逼近的方法，亦即从一个初始向量出发，按照一定的计算格式，构造一个向量的无穷序列，其极限才是方程组的精确解，只经过有限次运算得不到精确解。

本课程主要介绍解线性方程组的直接解法。

14.1.1 线性方程组引例

在工程问题中, 线性方程组描述了变量之间最基本的关系. 线性方程在各个科学分支中无处不在, 例如弹性力学, 电阻网络, 曲线拟合等. 线性方程构成了线性代数的核心并且经常构成了优化问题的约束条件. 因为许多优化算法的迭代过程非常依赖线性方程组的解, 所以它也是许多优化算法的基础. 接下来, 我们展示一个线性方程组的例子.

例 1

*(**三点测距问题**)* 三角测量是一种确定点位置的方法, 给定距离到已知控制点 *(锚点)*. 三边测量可以应用于许多不同的领域, 如地理测绘, 地震学, 导航 (例如 *GPS* 系统) 等. 在图*1*中, 三个测距点 $a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{R}^2$ 的坐标是已知的, 并且从点 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^{\mathrm{T}}$ 到测距点的距离为 d_1, d_2, d_3. $\mathbf{x}$ 的未知坐标与距离测量有关, 可以由下面非线性方程组描述

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_1\|_2^2 = d_1^2, \quad \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_2\|_2^2 = d_2^2, \quad \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_3\|_2^2 = d_3^2$$

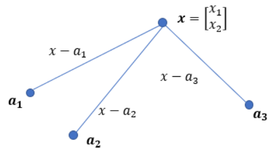


图 1: 三点测量位置图例

通过第一个方程减去另外两个方程，我们获得了两个 $\boldsymbol{x}$ 的线性方程组。

$$2\left(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = d_1^2 - d_2^2 + \|\mathbf{a}_2\|_2^2 - \|\mathbf{a}_1\|_2^2$$
$$2\left(\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = d_1^2 - d_3^2 + \|\mathbf{a}_3\|_2^2 - \|\mathbf{a}_1\|_2^2$$

也就是说，原始非线性方程组的每个解也可以看作线性方程组的解。使用方程组标准形式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 可以描述为：

$$A = \begin{bmatrix} 2\left(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1\right)^{\mathrm{T}} \\ 2\left(\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1\right)^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} d_1^2 - d_2^2 + \|\mathbf{a}_2\|_2^2 - \|\mathbf{a}_1\|_2^2 \\ d_1^2 - d_3^2 + \|\mathbf{a}_3\|_2^2 - \|\mathbf{a}_1\|_2^2 \end{bmatrix}$$

正如先前的示例，一般的线性方程被描述为如下的向量形式:

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 是未知变量，$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是系数矩阵，$\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ 是已知向量. 若解决先前示例中的问题，我们必须要解线性方程问题. 这会涉及如下几个问题：

- 这些线性方程组的解是否存在？
- 若存在，方程组的解是否唯一呢？
- 该如何获得这些线性方程组的解？

接下来我们先讨论线性方程组的基本性质，主要针对解的存在性、唯一性以及描述线性方程组所有可能的解. 根据 $\boldsymbol{A}$ 的性质，线性方程组：

- 可能有唯一解. 则我们直接求出该解.
- 或者有无穷多解. 在很多实际应用中，我们只要找到一个具体的解足以解决问题。其它情况下我们可以给出所有解的参数化描述，也即解的集合，它形成了 $\mathbb{R}^n$ 的子空间.
- 或者没有解. 此时，我们将引进近似解，这与最小二乘问题相联系。

14.1.2 线性方程组（回顾）

含有 n 个未知量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$, m 个方程的线性方程组的一般形式为

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots, \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m. \end{cases} \tag{2}$$

若记

$$\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{m\times n}, \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_m)^{\mathrm{T}},$$

则方程 (2) 可表示为如下的矩阵形式：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{3}$$

方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \tag{4}$$

称为方程组 (3) 对应的**齐次线性方程组**，当 $\boldsymbol{b} \neq 0$ 时，方程组 (3) 称为**非齐次线性方程组**。

定义 1

矩阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{m \times n}$ 称为方程组 *(3)* 的 **系数矩阵**，矩阵 $\tilde{\boldsymbol{A}} = (\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b})$ 称为它的 **增广矩阵**. 方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 称为方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的 **导出组**。

定义 2

若向量 $\mathbf{x}^0 = \left(x_1^0, x_2^0, \cdots x_n^0\right)^{\mathrm{T}}$ 满足方程组(3)，即 $\boldsymbol{A}\mathbf{x}^0 = \boldsymbol{b}$，称 $\mathbf{x}^0$ 为方程组(3)的**解向量**.

求解方程组——一般线性方程组（回顾）

定义 3

给定方程组

$$\bar{\boldsymbol{A}}\mathbf{x} = \bar{\boldsymbol{b}}. \tag{5}$$

若 $\mathbf{x}^0 = \left(x_1^0, x_2^0, \cdots x_n^0\right)^{\mathrm{T}}$ 是方程组(5) 的解向量时，则它也是方程组(3)： $\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}$ 的解向量恒成立，则方程组(3) 与方程组(5)是 **同解方程组**。

定理 1

对方程组(3)的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 及右端 $\boldsymbol{b}$ 作相同的行初等变换，得到的新方程组与原方程组是同解方程组。

定义 4

设 $\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_t$，是齐次线性方程组(4)： $\boldsymbol{Ax} = \mathbf{0}$ 的解向量组，如果 $\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_t$，线性无关，且方程组(4)的任意解向量 η 都可由 $\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_t$，线性表出，则称解向量组 $\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_t$，为方程组(4)的一个 **基础解系**.

定理 2

设齐次线性方程组(4)的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 r, 此时
(1) 方程组(4)有非零解的必要充分条件是 $r < n$.
(2) 若 $r < n$，则方程组(4)一定有基础解系. 基础解系不是唯一的，但任两个基础解系必等价，且每一个基础解系所含解向量的个数都等于 $n - r$.
(3) 若 $r < n$，设 $\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_{\mathbf{n-r}}$ 是方程组(4) 的一个基础解系，则它的一般解为

$$\eta = \lambda_1\eta_1 + \lambda_2\eta_2 + \cdots + \lambda_{n-r}\eta_{\mathbf{n-r}} \tag{6}$$

其中 $\lambda_i(i = 1, 2, \cdots, n - r)$ 是数域 $\mathbb{K}$ 中的任意常数.

定理 3

方程组(3)有解的必要充分条件是：$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{rank}(\tilde{\boldsymbol{A}})$. 矩阵 $\tilde{\boldsymbol{A}}$ 为它的 **增广矩阵**

定理 4

设 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{rank}(\tilde{\boldsymbol{A}}) = r$,$\boldsymbol{\gamma_0}$ 是非齐次方程组(3)的一个解向量（常称为**特解**），$\boldsymbol{\eta_1}, \boldsymbol{\eta_2}, \cdots, \boldsymbol{\eta_{n-r}}$ 是其导出组(4)的一个基础解系，则方程组(3)的解向量均可表为：

$$\gamma = \gamma_0 + \eta = \gamma_0 + \lambda_1 \boldsymbol{\eta}_1 + \lambda_2 \boldsymbol{\eta}_2 + \cdots + \lambda_{n-r} \boldsymbol{\eta}_{n-r},$$

其中 $\lambda_i (i = 1, 2, \cdots, n-r)$ 是数域 $\mathbb{K}$ 中的任意常数（这种形式的解向量常称为一般解）.

14.1.3 线性方程组的解集与基本子空间（回顾）

线性方程组:

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \qquad \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m \tag{7}$$

线性方程组的解集被定义为:

$$S \doteq \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}\} \tag{8}$$

用 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n \in \mathbb{R}^n$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列, i.e. $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$.$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 仅仅表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列与向量 $\boldsymbol{x}$ 中各个元素的加权和:

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{a}_1 + x_2\boldsymbol{a}_2 + \cdots + x_n\boldsymbol{a}_n \tag{9}$$

回顾定义

$\boldsymbol{A}$ 的列空间定义为:

$$\mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A}) = \mathbf{span}\,\{\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}\,,$$

其中 $\boldsymbol{a}_i$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的列向量; $\boldsymbol{A}$ 的零空间定义为:

$$\mathsf{Null}\,(\boldsymbol{A}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \boldsymbol{A}\mathbf{x} = 0\} \tag{10}$$

它的维数记为 $\mathsf{nullity}\,(\boldsymbol{A})$。

一个子空间 $\mathbb{S} \subset \mathbb{R}^n$ 的正交补定义为:

$$\mathbb{S}^{\perp} = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n : \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} = 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{S}\} \tag{11}$$

通过定义，我们能够看出，无论 $\mathbf{x}$ 的值是什么，$\boldsymbol{A}\mathbf{x}$ 生成了由矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列张成的子空间。向量 $\boldsymbol{A}\mathbf{x} \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})$。若 $\boldsymbol{b} \notin \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})$，则线性方程组没有解. 因此解集 $\mathbb{S}$ 为空. 等价地，线性方程组有解当且仅当 $\boldsymbol{b} \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})$，也即 $\boldsymbol{b}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的列的线性组合.

从矩阵的列空间的角度，给出定理3的证明：

定理 5

方程组(3)的解存在的充分必要条件是

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{rank}([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]) \tag{12}$$

证明 必要性 设存在 $\boldsymbol{x}$ 使 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，则 $\boldsymbol{b}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的列向量的线性组合，即有 $\boldsymbol{b} \in \mathrm{Col}\,(\boldsymbol{A})$. 这说明 $\mathrm{Col}\,([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]) = \mathrm{Col}\,(\boldsymbol{A})$，由此即知，必有 $\mathrm{rank}([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$.

充分性 若 $\mathrm{rank}([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$ 成立，则 $\boldsymbol{b} \in \mathrm{Col}\,(\boldsymbol{A})$，即 $\boldsymbol{b}$ 可表为

$$\boldsymbol{b} = \sum_{i=1}^{n} x_i \boldsymbol{a}_i \tag{13}$$

这里 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$. 于是，令 $\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$，即有 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，从而定理得证.

线性方程组的解集与零空间:

定理 6

假定方程组(3)的解存在, 并且假定 $\mathbf{x}$ 是其任一给定的解, 则(3)的全部解的集合是仿射集

$$\mathbf{x} + \mathit{Null}\,(\boldsymbol{A}) \tag{14}$$

证明 如果 $\mathbf{y}$ 满足(3), 则 $\boldsymbol{A}(\mathbf{y}-\mathbf{x})=0$, 即 $(\mathbf{y}-\mathbf{x})\in \mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$, 于是有 $\mathbf{y}=\mathbf{x}+(\mathbf{y}-\mathbf{x})\in \mathbf{x}+\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$. 反之, 如果 $\mathbf{y}\in x+\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$, 则存在 $\mathbf{z}\in \mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$, 使 $\mathbf{y}=\mathbf{x}+\mathbf{z}$, 从而有 $\boldsymbol{A}\mathbf{y}=\boldsymbol{A}\mathbf{x}+\boldsymbol{A}\mathbf{z}=\boldsymbol{A}\mathbf{x}=\boldsymbol{b}$.

定理6告诉我们, 只要知道了(3)的一个解, 便可以用它及 $\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$ 中的向量的和得到(3)的全部解。由此可知, (3)的解要想唯一, 只有当 $\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$ 中仅有零向量才行.

推论 1

(3)的解唯一的充分必要条件是 $\mathit{nullity}\,(\boldsymbol{A})=0$.

求解方程组—系数矩阵为可逆方阵（回顾）

当系数矩阵为可逆方阵时，我们可以利用克莱姆法则以及矩阵的逆求解线性方程组。

定理 7

(克莱姆法则) 若 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，如果 $det(\boldsymbol{A}) \neq 0$，则方程组(3)有唯一的解 $x_i = \frac{D_i}{det(\boldsymbol{A})}$，$(i = 1, 2, ..., n)$，其中 $det(\boldsymbol{A})$ 是未知量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ **的系数矩阵** $\boldsymbol{A}$ **的行列式**. 而 D_i 是将 $det(\boldsymbol{A})$ 中第 i 列的元素 $a_{1i}, a_{2i}, \cdots, a_{ni}$ 分别用 $b_1, b_2, \cdots, b_n$ 去替代所得的行列式。

定理 8

若 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，齐次线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 有非零解的必要充分条件是 $\det(\boldsymbol{A}) = 0$.

若 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，当 $\det(\boldsymbol{A}) = |a_{ij}| \neq 0$ 时，方程组(3)的解向量为 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$. 这种方法通常称**为逆矩阵法**

求解方程组—系数矩阵为一般矩阵

当线性方程组的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不为可逆方阵时，矩阵的广义逆是表示一般线性方程组通解的强有力工具。

定理 9

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$，则线性方程组(3)有解的充要条件是

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}$$

并且在有解时，其通解为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$$

其中 $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^{n}$

注：上述结论对于复矩阵和复向量也成立。

证明.

若 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}$，则方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 显然有解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}$。反之若 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 则

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$$

下面证明通解为

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$$

事实上，考虑矩阵 $\mathsf{Null}\,(\boldsymbol{A})$ 上的投影矩阵

$$\boldsymbol{P}_{\mathsf{Null}(\boldsymbol{A})}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}$$

故

$$\mathsf{Null}\,(\boldsymbol{A})=\{(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}|\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^n\}$$

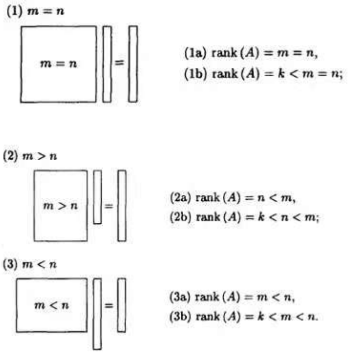
综上，线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 通解为

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$$

其中 $\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^n$ □

14.1.4 线性方程组的分类

按照矩阵 A 的秩与行列数的关系，可以划分为三种不同类型的方程：



我们先简略的考虑这三种情形下的解集，并在之后的章节中详细介绍如何求解。

线性方程组的分类：方阵系统

线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 中方程的个数等于未知变量的个数时，也即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是方阵，则我们称 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 是方阵系统.

- 如果系数矩阵是满秩的即 $\boldsymbol{A}$ 可逆，$\boldsymbol{A}^{-1}$ 唯一且有 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$. 在这种情况下，线性方程组的解是唯一的:
$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} \tag{15}$$
- 注意，实际中我们几乎不会通过先求 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 再乘以向量 $\boldsymbol{b}$ 的方式求解 $\boldsymbol{x}$. 而是通过数值方法和矩阵分解 (比如之前学过的 LU 分解，Cholesky 分解) 来计算非奇异线性方程组的解.

线性方程组的分类：超定系统

线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 中线性方程的个数大于未知变量的个数时，也即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行数大于列数：$m>n$，则我们称 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 是超定系统或超定方程组.

- 假设 $\boldsymbol{A}$ 是一个列满秩矩阵，也就是说 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=n$，则我们可以得出 $\mathsf{Null}\,(\boldsymbol{A})=0$，因此线性方程组的解要么没有解，要么有唯一解.
- 在超定系统中，$\boldsymbol{b}\notin\mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})$ 是很常见的，此时方程组无解。因此可引入近似解的概念，它是使得 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 在合适的度量下距离最小的解，这与最小二乘相联系。

线性方程组的分类：欠定系统

线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 中未知变量的个数大于方程组的个数时，或者说 $\boldsymbol{A}$ 的列数大于行数:$m<n$，则我们称 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 是欠定系统或欠定方程组.

- 假设 $\boldsymbol{A}$ 是一个行满秩矩阵，也就是说 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=m$, $\mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})=\mathbb{R}^m$. 则根据定理6:
$$\operatorname{rank}(\boldsymbol{A})+\dim(\mathsf{Null}\,(\boldsymbol{A}))=n \tag{16}$$
因此 $\dim(\mathsf{Null}\,(\boldsymbol{A}))=n-m>0$. 此时线性方程组有解且有无限多个解，并且解集的维度是 $n-m$。
- 在所有可能的解中，我们总是对具有最小范数的解很感兴趣.

14.2.1 基于浮点运算次数的复杂性分析

数值线性代数算法的成本经常表示为完成算法所需的浮点运算次数关于各种问题维度的函数。

定义 5

两个浮点数做一次相加、相减、相乘或相除称为一次浮点运算。

为了顾及一个算法的复杂性，我们计算总的浮点运算次数，将其表示为所涉及的矩阵或向量的维数的函数（通常是多项式），并通过只保留主导（即最高次数或占优势）项的方式来简化所得到的表达式。

例 2

假设一个具体的算法需要总数为

$$m^3 + 3m^2n + mn + 4mn^2 + 5m + 22$$

次浮点运算，其中 m, n 是问题的维数。正常情况下，我们将其简化为

$$m^3 + 3m^2n + 4mn^2$$

次浮点运算，因为这些是问题维数 m, n 的主导项。如果此外又假设 m 远小于 n，我们将进一步将浮点运算次数简化为 $4mn^2$。

例 3

为了完成两个向量 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ 的内积运算 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$，我们先要计算乘积 $x_i y_i$，然后将它们相加，这需要 n 次乘法和 $n-1$ 次加法，或者为 $2n-1$ 次浮点运算。只保留主导项，称内积运算需要 $2n$ 次浮点运算，甚至更近似地说，需要次数为 n 的浮点运算。

例 4

矩阵与向量相乘 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，其中 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$，成本为 $2mn$ 次浮点运算：我们必须计算 $\boldsymbol{y}$ 的 m 个分量，每一个分量是 $\boldsymbol{A}$ 的行向量和 $\boldsymbol{x}$ 的内积。

例 5

矩阵与矩阵相乘 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}$，其中 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n \times p}$，需要 $2mnp$ 次浮点运算，因为我们需要计算 $\boldsymbol{C}$ 的 mp 个元素，而每一个元素都是两个长度为 n 的向量的内积。

14.2.2 对角形方程组

我们首先考虑一个最简单的线性方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

其中 $a_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$。那么就有

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} b_1/a_{11} \\ b_2/a_{22} \\ \vdots \\ b_n/a_{nn} \end{pmatrix}$$

我们只需要经过 n 次浮点运算就可以求得。

14.2.3 下三角形线性方程组

我们利用**前代法**求解下三角形线性方程组。
注意，我们要求系数矩阵主对角线上元素均非 0。从而保证方程组有且仅有一个解。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & & & & \\ a_{21} & a_{22} & & & \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

其中 $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$ 非 0.

通过第一个方程

$$a_{11}x_1 = b_1$$

我们可以很容易的求解 $x_1 = \frac{b_1}{a_{11}}$。
得到 x_1 后，我们将 x_1 代入第二个方程

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

我们可以很容易的求解 $x_2 = (b_2 - a_{21}x_1)/a_{22}$。
$\cdots\cdots$
像这样，通过求解前 $k-1$ 个方程得到前 $k-1$ 个未知量，并将其代入第 k 个方程，从而求得第 k 个未知量的解方程的方法称为**前代法**。前代法总的浮点计算次数为 n^2。

从矩阵变换的角度，在前代法的第 (k) 个循环中，我们将会遇到下面这样一个形式，此时，我们很容易的通过 $a_{kk}x_k = b_k^{(k-1)}$ 来求得 x_k。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & & & & & & & \\ 0 & a_{22} & & & & & & \\ 0 & 0 & a_{33} & & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{kk} & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{k+1k} & a_{k+1k+1} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nk} & a_{nk+1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ b_{k+1}^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{pmatrix}$$

此时我们将第 k 列从第 $k+1$ 行到第 n 行化为 0，同时更新 b。那么我们就能通过 $a_{k+1,k+1}x_{k+1}=b_{k+1}^{(k)}$ 求得 x_{k+1}

$$
\begin{pmatrix}
a_{11} & & & & & & & \\
0 & a_{22} & & & & & & \\
0 & 0 & a_{33} & & & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\
0 & 0 & 0 & \dots & a_{kk} & & & \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{k+1k+1} & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nk+1} & \dots & a_{nn}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ b_{k+1}^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{pmatrix}
$$

算法 1 前代法

$x_1 = b_1/a_{11}$
for $i = 2$ **to** n **do**
  $s = b_i$
  for $j = 1, \dots, i-1$ **do**
    $s = s - a_{ij}x_j$
  end for
  $x_i = s/a_{ii}$
end for

14.2.4 上三角形线性方程组

对于上三角形的线性方程组，我们用**回代法**求解。
前代法，就是从前往后 (从 x_1 往 x_n) 依次求解。
回代法与前代法则恰好相反，他是从后往前依次求解。
同样我们要求其系数矩阵对角线上元素非 0.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

通过最后一个方程

$$a_{nn}x_n = b_n$$

我们可以很容易的求解 $x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$。
得到 x_n 后，我们将 x_n 代入第 $n-1$ 个方程

$$a_{n-1,n}x_n + a_{n-1,n-1}x_{n-1} = b_2$$

我们可以很容易的求解 $x_{n-1} = (b_{n-1} - a_{n-1,n}x_n)/a_{n-1,n-1}$。
……
像这样，通过求解后 $k-1$ 个方程得到后 $k-1$ 个未知量，并将其代入第后 k 个方程，从而求得第后 k 个未知量的解方程的方法称为**回代法**。回代法总的浮点计算次数为 n^2。

与前代法类似，在回代法第 $(n-k+1)$ 个循环内，有

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k-1} & a_{1k} & 0 & \cdots & 0 \\ & a_{22} & \cdots & a_{2k-1} & a_{2k} & 0 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{k-1k-1} & a_{k-1k} & 0 & \cdots & 0 \\ & & & & a_{kk} & 0 & \cdots & 0 \\ & & & & & a_{k+1k+1} & \cdots & 0 \\ & & & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & & & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(n-k)} \\ b_2^{(n-k)} \\ \vdots \\ b_{k-1}^{(n-k)} \\ b_k^{(n-k)} \\ b_{k+1}^{(n-k-1)} \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

此时我们将第 k 列从第 1 行到第 $k-1$ 行化为 0，同时更新 b，

$$
\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 & a_{22} & \dots & a_{2k-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 & & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & a_{k-1k-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 & & & & a_{kk} & 0 & \dots & 0 \\
 & & & & & a_{k+1k+1} & \dots & 0 \\
 & & & & & & \ddots & \vdots \\
 & & & & & & & a_{nn}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} b_1^{(n-k+1)} \\ b_2^{(n-k+1)} \\ \vdots \\ b_{k-1}^{(n-k+1)} \\ b_k^{(n-k)} \\ b_{k+1}^{(n-k-1)} \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}
$$

算法 2 回代法

$x_n = b_n / a_{nn}$
for $i = n-1$ **to** 1 **do**
  $s = b_i$
  for $j = i+1, \ldots, n$ **do**
    $s = s - a_{ij}x_j$
  end for
  $x_i = s / a_{ii}$
end for

14.2.5 正交形线性方程组

正交矩阵

- 矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 被称为正交矩阵的条件是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$ 即 $\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$。这种情况下可以通过简单的矩阵-向量乘积 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 计算 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$，一般情况其计算成本为 $2n^2$ 次浮点运算。
- 如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有其他结构，计算 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ 的效率可以超过 $2n^2$。例如，如果 $\boldsymbol{A}$ 具有 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T$ 的形式，其中 $\|\boldsymbol{u}\|_2 = 1$，此时

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} = (\boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b} - 2(\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})\boldsymbol{u}$$

  我们可以先计算 $\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{b}$，然后计算 $\boldsymbol{b} - 2(\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})\boldsymbol{u}$，其计算成本为 $4n$ 次浮点运算。

14.2.6 置换形线性方程组

排列矩阵或置换矩阵

- 令 $\pi = (\pi_1, \ldots, \pi_n)$ 为 $(1, 2, \ldots, n)$ 的一个排列或置换。相应的排列矩阵或置换矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 定义为

$$\boldsymbol{A}_{ij} = \begin{cases} 1 & j = \pi_i \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

排列矩阵的每行（或每列）仅有一个元素等于 1，所有其他元素都等于 0。用排列矩阵乘一个向量就是对其分量进行如下排列：

$$\boldsymbol{A}\mathbf{x} = (x_{\pi_1}, \ldots, x_{\pi_n})$$

排列矩阵的逆矩阵就是逆排列 π^{-1} 对应的排列矩阵，实际上就是 $\boldsymbol{A}^T$。由此可知排列矩阵是正交矩阵。

14.2.6 置换形线性方程组

排列矩阵或置换矩阵

- 如果 $\boldsymbol{A}$ 是排列矩阵，求解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 将非常容易，用 π^{-1} 对 $\boldsymbol{b}$ 元素进行排列就可以得到 $\boldsymbol{x}$。这样做并不需要我们定义浮点运算（但是，取决于具体实现，可能要复制浮点数）。从方程 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 可以达到同样的结论。矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$（像 $\boldsymbol{A}$ 一样）的每行仅有一个等于 1 的非零元素。因此不需要加法运算，而唯一需要的乘法是和 1 相乘。

14.3.1 基于矩阵分解的方阵系统的一般求解方法

我们首先讨论的一类特殊的方阵线性方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

的求解，其中 $\boldsymbol{A}$ 可逆。基本思路：

- 我们可以将矩阵分解成一系列特殊结构矩阵的乘积，包括：对角矩阵、上下三角矩阵、正交矩阵和排列矩阵等。
- 然后我们通过对具有特殊结构更简单的方程组的求解来获得原方程组的解。

这种方法的一个优势是，一旦我们对系数矩阵进行了分解，那么对于不同的右侧项就无需重新计算。而且从计算复杂性的角度看，计算成本主要集中在矩阵的因式分解上。

基于矩阵分解的线性方程组求解步骤

求解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的基本途径是将 $\boldsymbol{A}$ 表示为一系列非奇异矩阵的乘积

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{A}_2\ldots,\boldsymbol{A}_k$$

因此

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{A}_k^{-1}\boldsymbol{A}_{k-1}^{-1}\ldots\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}$$

我们可以从右到左利用这个公式计算 $\boldsymbol{x}$:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{z}_1 &:= \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b} \\
\boldsymbol{z}_2 &:= \boldsymbol{A}_2^{-1}\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{A}_2^{-1}\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b} \\
&\vdots \\
\boldsymbol{z}_{k-1} &:= \boldsymbol{A}_{k-1}^{-1}\boldsymbol{z}_{k-2} = \boldsymbol{A}_{k-1}^{-1}\ldots\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b} \\
\boldsymbol{x} &:= \boldsymbol{A}_k^{-1}\boldsymbol{z}_{k-1} = \boldsymbol{A}_k^{-1}\ldots\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}
\end{aligned}$$

基于矩阵分解的线性方程组求解步骤

- 这个过程的第 i 步需要计算 $\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{A}_i^{-1}\boldsymbol{z}_{i-1}$ 即求解线性方程组 $\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{z}_{i-1}$ 如果这些方程组都容易求解（即如果 $\boldsymbol{A}_i$ 是对角矩阵，下三角矩阵或上三角矩阵，排列矩阵等等），这就形成了计算 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ 的一种方法。
- 将 $\boldsymbol{A}$ 表示为因式分解形式（即计算 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{A}_2\ldots\boldsymbol{A}_k$）的步骤被称为**矩阵分解步骤**，而通过递推求解一系列 $\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{z}_{i-1}$ 来计算 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ 的过程经常被称为**求解步骤**。
- 采用这种矩阵因式分解求解方法求解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的总的浮点运算次数是 $f + s$，其中 f 是进行因式分解的浮点运算次数，s 是求解步骤的总的浮点运算次数。很多情况下，因式分解的成本 f，相对总的求解成本 s 占主导地位。因此求解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的成本，即计算 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ 就是 f。

基于 LU 分解求解线性方程组

设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 LU 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PLU}$，其中 $\boldsymbol{P}$ 是排列矩阵，$\boldsymbol{L}$ 是下三角矩阵，$\boldsymbol{U}$ 是上三角矩阵。这种形式被称为 $\boldsymbol{A}$ 的 LU 因式分解。我们也可以把因式分解写成 $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$，其中矩阵 $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{A}$ 通过重排列 $\boldsymbol{A}$ 的行向量得到。那么我们在求解方程组

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

时，等价求解一系列如下方程组

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{z}_1=\boldsymbol{b},\boldsymbol{L}\boldsymbol{z}_2=\boldsymbol{z}_1,\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z}_2$$

对于第一个方程，我们只需要根据其排列规则来将 $\boldsymbol{b}$ 重新排列。对于第二个下三角方程，我们使用前代法来求解。对于第三个上三角方程，我们使用回代法来求解。

算法 3 利用 LU 因式分解求解线性方程组

1: **LU 因式分解**。将 $\boldsymbol{A}$ 因式分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{PLU}((2/3)n^3$ 次浮点运算)。
2: **排列**。求解 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{b}$(0 次浮点运算)。
3: **前向代入**。求解 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{z}_2 = \boldsymbol{z}_1(n^2$ 次浮点运算)。
4: **后向代入**。求解 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}_2(n^2$ 次浮点运算)。

基于 Cholesky 分解求解对称正定线性方程组

设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 Cholesky 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$，其中 $\boldsymbol{L}$ 是下三角矩阵。那么我们在求解方程组

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

时，等价求解一系列如下方程组

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{z}_1=\boldsymbol{b}, \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z}_1$$

对于第一个下三角方程，我们使用前代法来求解。对于第二个上三角方程，我们使用回代法来求解。

算法 4 基于 Cholesky 分解求解对称正定线性方程组

1: **Cholesky 因式分解**。将 $\boldsymbol{A}$ 因式分解为$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T((1/3)n^3$ 次浮点运算)。
2: **前向代入**。求解 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{z}_1=\boldsymbol{b}(n^2$ 次浮点运算)。
3: **后向代入**。求解 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z}_1(n^2$ 次浮点运算)。

基于 QR 分解求解线性方程组

设可逆矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 有 QR 分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$ 其中 $\boldsymbol{Q}$ 是正交矩阵 $\boldsymbol{R}$ 是主对角线均为正的上三角矩阵。那么我们在求解方程组

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

时，等价求解方程组

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$

而对于上三角矩阵的方程组，我们可以使用回代法来求解。

算法 5 基于 QR 分解求解线性方程组

1: **QR 因式分解**。将 $\boldsymbol{A}$ 因式分解为$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}(4n^3$ 次浮点运算)。
2: **矩阵-向量乘法**。求解 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}(2n^2$ 次浮点运算)。
3: **后向代入**。求解 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}(n^2$ 次浮点运算)。

基于 SVD 求解线性方程组

设矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的奇异值分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$，其中 $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{V}$ 是正交矩阵，$\boldsymbol{\Sigma}$ 是对角矩阵且可逆。那么我们在求解方程组

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

时，等价求解一系列如下方程组

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}, \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$$

而这些方程对应的解为

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}, \boldsymbol{z} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{z}$$

算法 6 基于 SVD 求解线性方程组

1: **SVD 因式分解**。将 $\boldsymbol{A}$ 因式分解为$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$($n^3$ 次浮点运算)。
2: **矩阵-向量乘法**。求解 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$($2n^2$ 次浮点运算)。
3: **求解对角方程组**。求解 $\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}$($n$ 次浮点运算)。
4: **矩阵-向量乘法**。求解 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$($2n^2$ 次浮点运算)。

14.3.2 非方阵系统求解方法：欠定系统的求解

上面考虑了方阵系统，我们接下来考虑非方阵系统

$$\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$$

- 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, m < n$，此时方程组为欠定系统，如果 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = m$，则对任意的 $\boldsymbol{b}$ 至少存在一个解。很多实际应用中找到一个具体的解 $\hat{\mathbf{x}}$ 就足以解决问题。其他一些情况下我们可能需要给出所有解的参数化描述

$$\{\mathbf{x}|\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}\} = \{\boldsymbol{F}\boldsymbol{z} + \hat{\mathbf{x}}|\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^{n-m}\}$$

  其中 $\boldsymbol{F}$ 的列向量构成 $\boldsymbol{A}$ 的零空间的基。

对 A 的非奇异子矩阵求逆

如果已知 A 的一个 $m \times m$ 的非奇异子矩阵，可以直接求解非方阵系统。假设 A 的前 m 个列向量线性无关。于是可以将方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 写成

$$\boldsymbol{Ax} = (\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2) \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 \\ \boldsymbol{x}_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{b}$$

其中 $\boldsymbol{A}_1 \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 是非奇异矩阵。我们可以将 $\boldsymbol{x}_1$ 表示成

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

该表达式让我们能很容易地计算一个解：简单取 $\hat{\boldsymbol{x}}_2 = 0, \hat{\boldsymbol{x}}_1 = \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}$。其计算成本等于求解 m 个线性方程组 $\boldsymbol{A}_1\hat{\boldsymbol{x}}_1 = \boldsymbol{b}$ 的成本。我们也可以用 $\boldsymbol{x}_2 \in \mathbb{R}^{n-m}$ 做自由参数表示 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的所有解。方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的一般性解可以表示成

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 \\ \boldsymbol{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_2 \\ \boldsymbol{I} \end{pmatrix} \boldsymbol{x}_2 + \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b} \\ 0 \end{pmatrix}$$

综上所述，假设 $\boldsymbol{A}_1$ 的因式分解成本是 f，而求解形如 $\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x} = \boldsymbol{d}$ 的系统成本为 s 那么找出 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的一个解的成本为 $f + s$。参数化描述所有解的成本是 $f + s(n - p + 1)$。

现在我们考虑一般情况，此时 $\boldsymbol{A}$ 的前 m 个列向量不一定线性独立。因为 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=m$，我们可以选出 $\boldsymbol{A}$ 的 m 个线性独立的列向量，将他们排列到前面，然后应用上面描述的方法。换句话说，我们要找到一个排列矩阵 $\boldsymbol{P}$ 使 $\tilde{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 的前 m 个列向量线性无关，即

$$\tilde{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2)$$

其中 $\boldsymbol{A}_1$ 可逆。方程 $\tilde{\boldsymbol{A}}\tilde{\mathbf{x}}=\boldsymbol{b}$ 其中 $\tilde{\mathbf{x}}=\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$，其一般解

$$\tilde{\mathbf{x}}=\begin{pmatrix}-\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_2\\ \boldsymbol{I}\end{pmatrix}\tilde{\mathbf{x}}_2+\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}\\ 0\end{pmatrix}$$

于是 $\boldsymbol{A}\mathbf{x}=\boldsymbol{b}$ 的一般解为

$$\mathbf{x}=\boldsymbol{P}\tilde{\mathbf{x}}=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}-\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_2\\ \boldsymbol{I}\end{pmatrix}\boldsymbol{z}+\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}\\ 0\end{pmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^{n-m}$ 是自由参数。该想法可用于容易发现 $\boldsymbol{A}$ 的一个非奇异或便于求逆的子矩阵的情况。例如，具有非零对角元素的对角矩阵的情况。

QR 因式分解

如果 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ 满足 $m \le n$ 和 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{A}) = m$，那么它可以因式分解为

$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{Q}_1, \boldsymbol{Q}_2)\begin{pmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$$

其中 $(\boldsymbol{Q}_1, \boldsymbol{Q}_2)$ 是正交矩阵，$\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 是具有非零对角元素的上三角矩阵。这称为 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 因式分解。QR 因式分解的浮点运算次数是 $2m^2(n - m/3)$（以因式分解的方式存储 $\boldsymbol{Q}$ 能够有效计算乘积 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$）

QR 因式分解可以用来解方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, m < n$。假设

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = (\boldsymbol{Q}_1, \boldsymbol{Q}_2)\begin{pmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$$

是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的 QR 因式分解。将其代入上述方程组可以看出 $\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}^{-T}\boldsymbol{b}$ 是明显满足该方程组的：

$$\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}^{-T}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}$$

此外，$\boldsymbol{Q}_2$ 的列向量构成 $\boldsymbol{A}$ 的零空间的基，于是所有的解可以参数化为

$$\{x = \tilde{\mathbf{x}} + \boldsymbol{Q}_2 \boldsymbol{z} | \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^{n-m}\}$$

QR 因式分解方法是求解非方阵方程组最常用方法。一个缺点是难以利用稀疏性。因式 $\boldsymbol{Q}$ 通常是稠密的，甚至 $\boldsymbol{A}$ 很稀疏时也这样。

矩形矩阵的 LU 因式分解

如果 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ 满足 $m \leq n$ 和 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = m$ 那么它可以因式分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{PLU}$$

其中 $\boldsymbol{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是排列矩阵，$\boldsymbol{L} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ 是单位下三角矩阵，$\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 是非奇异上三角矩阵。如果没有 $\boldsymbol{A}$ 的结构可以利用，计算成本是 $(2/3)m^3 + m^2(n-m)$ 次浮点运算。

如果 $\boldsymbol{A}$ 是稀疏矩阵，LU 因式分解通常包括行列排列，即我们将 $\boldsymbol{A}$ 因式分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}_1 \boldsymbol{L} \boldsymbol{U} \boldsymbol{P}_2$$

其中 $\boldsymbol{P}_1, \boldsymbol{P}_2 \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 是排列矩阵。一个稀疏的矩形矩阵的 LU 因式分解可以非常有效地完成，其计算成本比稠密矩阵低得多。LU 因式分解可以用于求解非方阵方程组。
假设 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$ 是方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, m < n$ 中矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的 LU 因式分解，我们将 $\boldsymbol{L}$ 划分为

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{L}_1 \\ \boldsymbol{L}_2 \end{pmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{L}_1 \in \mathbb{R}^{m \times m}, \boldsymbol{L}_2 \in \mathbb{R}^{(n-m) \times m}$，容易验证参数化解为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} -\boldsymbol{L}_1^{-T} \boldsymbol{L}_2^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{I} \end{pmatrix} \boldsymbol{z} + \boldsymbol{P} \left(\boldsymbol{L}_1^{-T} \boldsymbol{U}^{-T} \boldsymbol{b} \right)$$

其中 $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^{n-m}$

基于奇异值分解的非方阵系统求解方法

考虑非方阵系统

$$\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$$

我们可以计算 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解。设 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$，记 $\tilde{\mathbf{x}} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$，那么我们就得到了一个关于对角矩阵的方程组

$$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\boldsymbol{b}}$$

其中 $\tilde{b}$ 是将右侧项进行旋转后的结果，因为 $\tilde{\Sigma}$ 只有对角线有元素，所以得到方程组

$$\begin{cases} \sigma_i \tilde{x}_i = \tilde{b}_i & i = 1, 2, \ldots, r \\ 0 = \tilde{b}_i & i = r+1, \ldots, m \end{cases}$$

上述这个方程组是很容易计算的。但是同样可能会出现两种情况：

- 如果 $\tilde{b}$ 最后 $m-r$ 个分量不为零。因为这 $m-r$ 个方程左边为 0，所以方程组将无解。这种情况表明 $\boldsymbol{b}$ 不在 $\boldsymbol{A}$ 的列空间中。

- 而当 $\boldsymbol{b}$ 在 $\boldsymbol{A}$ 的列空间中，那么最后 $m-r$ 个方程成立，我们可以用前面 r 个方程进行求解，即

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_i = \frac{\tilde{\boldsymbol{b}}_i}{\sigma_i}, i = 1, \ldots, r$$

$\tilde{\mathbf{x}}$ 中后 $n-r$ 个分量可以取任意值。如果 $\boldsymbol{A}$ 是一个列满秩矩阵（即他的零空间为 $\{\mathbf{0}\}$），那么我们就会有唯一解。

我们一旦计算得到了 $\tilde{\mathbf{x}}$ 那么就可以通过 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\tilde{\mathbf{x}}$ 来得到方程的解。

敏度分析问题引入

考虑如下两组线性方程组：

$$\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\ 2.0001\end{bmatrix},\qquad \begin{bmatrix}2 & 0\\ 1 & 1.0001\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\ 2.0001\end{bmatrix} \tag{17}$$

的解都是 $\boldsymbol{x}=(1,1)^{\mathrm{T}}$。

但是如果我们对方程的常数项做一点微小的变动，求解方程组

$$\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\ 2\end{bmatrix},\qquad \begin{bmatrix}2 & 0\\ 1 & 1.0001\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\ 2\end{bmatrix} \tag{18}$$

前者的解为 $\boldsymbol{x}=(2,0)^{\mathrm{T}}$，而后者的解为 $\boldsymbol{x}=(1,\frac{10000}{10001})^{\mathrm{T}}\approx(1,0.9999)^{\mathrm{T}}$。

可以看到左边方程的解变化的非常大，而右边方程的解几乎没有变化。

在本节中，我们将分析数据中小扰动对非奇异方阵线性方程解的影响。
我们将分别讨论输入的扰动对解的影响，系数矩阵的扰动对解的影响，以及输入和系数矩阵联合扰动对解的影响。
本节我们用 2 范数度量矩阵和向量的扰动程度，由于矩阵的 2-范数是和向量的 2-范数相容的，有以下性质：

(1) $\|\boldsymbol{A}\|_2 \geq 0(\|\boldsymbol{A}\|_2 = 0 \iff \boldsymbol{A} = \boldsymbol{O})$ （正定性）；
(2) $\|c\boldsymbol{A}\|_2 = |c|\|\boldsymbol{A}\|_2$，$c$ 为实数 （齐次性）；
(3) $\|\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}\|_2 \leq \|\boldsymbol{A}\|_2 + \|\boldsymbol{B}\|_2$ （三角不等式）；
(4) $\|\boldsymbol{AB}\|_2 \leq \|\boldsymbol{A}\|_2\|\boldsymbol{B}\|_2$ （相容性）.

14.4.1 输入的扰动敏感性

令 $\boldsymbol{x}$ 为线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的解，其中 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异方阵，且 $\boldsymbol{b}\neq 0$。假设我们通过施加一个小的扰动项 $\Delta\boldsymbol{b}$ 来略微改变 $\boldsymbol{b}$，并将 $\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}$ 称为扰动方程组的解：

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$$

我们的关键问题是：如果 $\Delta\boldsymbol{b}$ 比较小的时候，$\Delta\boldsymbol{x}$ 会不会同样比较小？
从上面的公式以及 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 来看，扰动 $\Delta\boldsymbol{x}$ 本身就是线性方程组的解。

$$\boldsymbol{A}\Delta\boldsymbol{x}=\Delta\boldsymbol{b}$$

并且，由于认为 $\boldsymbol{A}$ 是可逆的，我们可以写成

$$\Delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{b}$$

$$\Delta \boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1} \Delta \boldsymbol{b}$$

利用该方程两边的 2-范数得出

$$\|\Delta \boldsymbol{x}\|_2 = \left\|\boldsymbol{A}^{-1} \Delta \boldsymbol{b}\right\|_2 \leq \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2 \|\Delta \boldsymbol{b}\|_2$$

其中 $\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2$ 是 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的谱范数。
类似地，从 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 得出 $\|\boldsymbol{b}\|_2 = \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2 \leq \|\boldsymbol{A}\|_2 \|\boldsymbol{x}\|_2$，因此

$$\|\boldsymbol{x}\|_2^{-1} \leq \frac{\|\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}$$

将上面两个公式相乘，我们得到

$$\frac{\|\Delta \boldsymbol{x}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2} \leq \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2 \|\boldsymbol{A}\|_2 \frac{\|\Delta \boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}$$

这个结果将“输入项” $\boldsymbol{b}$ 的相对变化与“输出” $\boldsymbol{x}$ 的相对变化联系起来。

定义 6

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是可逆矩阵，称数

$$\kappa(\boldsymbol{A}) = \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2 \|\boldsymbol{A}\|_2,$$

是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数。

设 σ_1, σ_n 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最大奇异值和最小奇异值，那么

$$\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sigma_1, \qquad \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2 = 1/\sigma_n$$

因此矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数也可以定义为：

$$\kappa(\boldsymbol{A}) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}, 1 \leq \kappa(\boldsymbol{A}) \leq \infty.$$

大的 $\kappa(\boldsymbol{A})$ 意味着 $\boldsymbol{b}$ 上的扰动可能导致 $\boldsymbol{x}$ 上有很大的扰动，即方程对输入数据的变化非常敏感。如果 $\boldsymbol{A}$ 是奇异的，那么 $\kappa = \infty$。非常大的 $\kappa(\boldsymbol{A})$ 表明 $\boldsymbol{A}$ 接近奇异；我们说在这种情况下 $\boldsymbol{A}$ 是病态的。

我们将以上讨论总结为如下引理：

引理 1

(对于输入的敏感性) 令 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异方阵，$\boldsymbol{x}, \Delta\boldsymbol{x}$ 满足

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$
$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}$$

有下式成立

$$\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2} \leq \kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}$$

其中 $\kappa(\boldsymbol{A}) = \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2 \|\boldsymbol{A}\|_2$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数。

14.4.2 系数矩阵中的扰动敏感性

接下来我们考虑 $\boldsymbol{A}$ 矩阵的扰动对解 $\mathbf{x}$ 的影响。令 $\boldsymbol{A}\mathbf{x}=\boldsymbol{b}$ 并且令 $\Delta\boldsymbol{A}$ 为一个扰动，满足下面等式

$$(\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A})(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x})=\boldsymbol{b}, \quad \text{对于一些}\Delta\mathbf{x}$$

那么有

$$\boldsymbol{A}\Delta\mathbf{x}=-\Delta\boldsymbol{A}(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x})$$

因此 $\Delta\mathbf{x}=-\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{A}(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x})$。则

$$\|\Delta\mathbf{x}\|_2=\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{A}(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x})\right\|_2\leq\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2\|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2$$

并且

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2}\leq\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2\|\boldsymbol{A}\|_2\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}$$

我们再次看到条件数出现在不等式中。只有在条件数不是太大时，相对较小的扰动，即 $\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}\ll 1$ 对 $\mathbf{x}$ 的相对影响才较小。也就是说，$\kappa(\boldsymbol{A})\simeq 1$。这个会在下一个引理中总结。

引理 2

(系数矩阵中的扰动敏感性) 令 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异方阵，$\boldsymbol{x}, \Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{x}$ 满足

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

$$(\boldsymbol{A} + \Delta\boldsymbol{A})(\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}$$

有下式成立

$$\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|_2}{\|\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}\|_2} \leq \kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}$$

14.4.3 对 A,b 联合扰动的敏感性

我们最后考虑 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的同时扰动对 $\boldsymbol{x}$ 的影响。令 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，并且令 $\Delta\boldsymbol{A},\Delta\boldsymbol{b}$ 为扰动，满足下面等式

$$(\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A})(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}, \text{对于一些}\Delta\boldsymbol{x}$$

然后，$\boldsymbol{A}\Delta\boldsymbol{x}=\Delta\boldsymbol{b}-\Delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})$，因此 $\Delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})$。则

$$\begin{aligned}
\|\Delta\boldsymbol{x}\|_2 &= \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})\right\|_2 \\
&\le \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{b}\right\|_2+\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})\right\|_2 \\
&\le \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2+\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2\left\|\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}\right\|_2.
\end{aligned}$$

接着，上式除以 $\|\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}\|_2$，

$$\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|_2}{\|\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}\|_2}\le\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}\frac{\|\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}\|_2}+\kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}$$

但是 $\|\boldsymbol{b}\|_2 = \|\boldsymbol{A}\mathbf{x}\|_2 \le \|\boldsymbol{A}\|_2\|\mathbf{x}\|_2$，因此

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2} \le \kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}\frac{\|\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2} + \kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}$$

下一步，我们用 $\|\mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}-\Delta\mathbf{x}\|_2 \le \|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2 + \|\Delta\mathbf{x}\|_2$ 去写

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2} \le \kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}\left(1+\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2}\right) + \kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}$$

从中我们得到

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2}\left(1-\kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}\right) \le \kappa(\boldsymbol{A})\left(\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}+\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}\right)$$

因此

$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}\|_2} \le \frac{\kappa(\boldsymbol{A})}{1-\kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}}\left(\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}+\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}\right)$$

扰动的“放大因子”受 $\frac{\kappa(\boldsymbol{A})}{1-\kappa(\boldsymbol{A})\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}}$ 的制约，该值小于某个给定的 γ，如果

$$\kappa(\boldsymbol{A}) \le \frac{\gamma}{1+\gamma\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}}$$

因此，我们看到联合扰动的影响仍然由 $\boldsymbol{A}$ 的条件数控制，如下所述

引理 3

(对 A,b 扰动的敏感性) 令 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异方阵，令 $\gamma > 1$ 已知，并且令 $\boldsymbol{x}, \Delta\boldsymbol{b}, \Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{x}$ 满足下面等式

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

$$(\boldsymbol{A} + \Delta\boldsymbol{A})(\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}$$

如果

$$\kappa(\boldsymbol{A}) \leq \frac{\gamma}{1 + \gamma\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}}$$

那么

$$\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|_2}{\|\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}\|_2} \leq \gamma\left(\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2} + \frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}\right)$$

本讲小结

本讲的主要内容有：
(1) 回顾了线性方程组的基本概念，并对线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 进行分类。
当 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{A})=\min\{m,n\}$ 时，可以把方程组分为以下三类：

- 满秩方阵方程组
- 列满秩超定方程组
- 行满秩欠定方程组

对 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{A})<\min\{m,n\}$ 的情况，我们不进行讨论。
(2) 对于满秩的方程组，我们采用矩阵分解进行直接求解。
(3) 我们对满秩方阵方程组的输入和系数矩阵变化对解的影响进行了敏度分析。
在下一讲，我们将学习如何获得列满秩超定方程组和行满秩欠定方程组的最小二乘解（近似解）和最小范数解。