数值分析

第5章：线性方程组直接法

张亚楠[1]

苏州大学数学科学学院

[1]Email: ynzhang@suda.edu.cn

问题提出 $\boxed{Ax = b}$

数学上

$$x = A^{-1}b$$

实际计算时，绝不要求逆！！不要求逆！！不要求逆！！

思考：

假设问题唯一可解，如何求解?

1. 如果系数矩阵A稠密且固定不变，需要针对1000个不同的 右端项 b，反复求解上式；如何避免重复计算?
2. 如果系数矩阵规模很大，例如10万阶， 但是稀疏矩阵（绝大多数元素都是零），如何有效求解?

解决办法

- 直接法：Gauss消去及其变形：LU分解, 列主元LU分解、Cholesky，ldl
- 迭代法：Jacobi, Gauss-Seidel, SOR

关于本章教学目的说明

无论是直接法(LU)还是迭代法(SOR，PCG)，Matlab都有命令，效率很高。

我们学什么?

1. 直接法和迭代法的数学理论
2. 体会编程时，Matlab对数组和矩阵运算的方便、高效性；尽量避免循环
3. 体会科学计算的核心：不要重复，多用并行！

Contents

向量和矩阵

$\mathbb{R}^{m\times n}$ 表示全体$m\times n$实矩阵向量空间；$A\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 等价于

$$A=(a_{ij})=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

$\vec{x}\in\mathbb{R}^n$ 等价于

$$\vec{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$$

本章考虑的矩阵全是方阵$m=n$

矩阵的基本运算

1. 矩阵加法

$$A + B = (a_{ij} + b_{ij})$$

2. 标量乘法

$$cA = (c * a_{ij})$$

3. 矩阵乘法

$$A * B = \left(\sum_k A(i,k) .* B(k,j) \right)_{ij}$$

4. 矩阵行列式 det (A)

矩阵的特征值和谱半径

Definition 1

设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 若存在数$\lambda$ 和非零向量$\vec{x} \in \mathbb{R}^n$, 使得

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x}$$

称λ 为A的特征值，$\vec{x}$为对应特征值λ的特征向量， A的全体特征值称为A 的谱，记作$\sigma(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n\}$ ， 记

$$\rho(A) = \max_{1\le i\le n} |\lambda_i|$$

为矩阵A的谱半径.

特征多项式

记I是恒同矩阵，则方程

$$(\lambda I - A) * \vec{x} = 0$$

有非零解；进而

$$\det(\lambda I - A) = 0$$

上式左端是关于未知量 λ的n次代数多项式，称为 A 的特征多项式，记为 $p(\lambda)$. 上式称为 A 的特征方程. 由代数知识，$p(\lambda)$ 在复数域有n个根λ_j，则

$$p(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)...(\lambda - \lambda_n)$$

Remark 1.1

上述方法求矩阵的特征值和特征向量比较复杂！！

涉及高次方程求根

几类特殊矩阵

1. 对角阵；d-对角阵(banded)；三角阵；

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \end{bmatrix},$$

2. 对称阵$A = A^T$,；对称正定阵；
3. 正交阵；$P^T \cdot P = I$, 几乎正交，$P^T * P = \alpha * I$, Fourier矩阵，正弦矩阵

Contents

思考： 从计算方便的角度考虑，你喜欢求解那种类型的矩阵?

Gauss消去和LU分解

思考： 从计算方便的角度考虑，你喜欢求解那种类型的矩阵？

1. 对角阵 （小学生水平）

$$\begin{cases} 2x = 4 \\ 3y = 3 \end{cases} \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 2 & 0 & 4 \\ 0 & 3 & 3 \end{array}\right]$$

2. 三角形矩阵 （高年级小学生水平）

Example 2

（初等方法）

$$\begin{aligned} 2x + 4y - 2z &= 2 \\ 4x + 9y - 3z &= 8 \\ -2x - 3y + 7z &= 10 \end{aligned} \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} 2x + 4y - 2z &= 2 \\ 1y + 1z &= 4 \\ 4z &= 8 \end{aligned}$$

Gauss消去的过程实际也是对矩阵进行三角形分解的过程

线性代数的方法:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \underline{1} & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & \underline{1} & 2 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = U$$

上述消元的过程保留消元因子即可得到LU分解

$$A = LU \qquad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \boxed{1} & 1 & 0 \\ 0 & \boxed{1} & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

高斯消元相当于左乘初等矩阵；例如

$$E_{21}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \quad l_{21}=a_{21}/a_{11}$$

依次记录消元因子l_{kj}，可得

$$\underline{E_{n,n-1}*E_{n,n-2}E_{n-1,n-2}*\ldots*E_{n1}\ldots E_{31}E_{21}}*A=U$$

上式横线部分的逆即是LU分解产生的下三角矩阵L.

$$\underline{E_{n,n-1} * E_{n,n-2}E_{n-1,n-2} * \ldots * E_{n1} \ldots E_{31}E_{21}} * A = U$$

则

$$L = \left(\underline{E_{n,n-1}} * \underline{\underline{E_{n,n-2}E_{n-1,n-2}}} * \ldots * \underline{E_{n1} \ldots E_{31}E_{21}}\right)^{-1} = \underline{C_1} * \underline{\underline{C_2}} * \ldots * \underline{C_n}$$

下三角L的元素即是Gauss消元过程中产生的乘子

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

LU分解的适用范围

Gauss 消去何时可用？ 充分条件

Theorem 3

If A is

- positive definite : $x^{\mathrm{T}}Ax > 0;\ \forall x \in \mathbb{R}^n$
- diagonally dominate: $|a_{ii}| > \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$

then Gauss elimination is stable.

LU分解的Matlab实现

如何尽量Matlab矩阵运算，避免循环

$$\left[\begin{array}{c|ccc} * & * & * & * \\ \hline * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{array}\right] = \begin{bmatrix} a_{11} & \boxed{\text{———}} \\ \boxed{\,|\,} & \boxed{A_{22}} \end{bmatrix}$$

(1) 对n阶矩阵分块

(2) 计算下三角矩阵L的第一列元素

$$L_{j1} = \frac{A_{j1}}{A_{11}} \quad j = 2 \to n$$

(3) 更新A的剩余$(n-1)$阶矩阵

$$A_{new} = A_{22} - L(2:n,1) * A(1,2:n)$$

(4) 矩阵更新为$(n-1)$阶，重复第一步，直到n=1, 循环结束。

Gauss消元的计算复杂度

得到三角形矩阵所需乘除法的次数:

$$n^2 + (n-1)^2 + \dots + 1 \approx \frac{1}{3}n^3$$

这是一个比较糟糕的结果，如需多次求解同一个系数矩阵产生的方程组，应当先进行三角形分解；避免每次重复消元。

$$Ax = b \Leftrightarrow L\big(Ux\big) = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

除了第一步LU分解需要一次n^3次计算量，求解三角形方程组只要n^2次 计算量。

Remark 2.1

若系数矩阵固定，针对不同的右端项反复求解$\boxed{Ax = b}$,效率会大大提高！！

带状矩阵：三对角矩阵，d-diagonal matrix or d-banded matrix

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

对于带状矩阵，计算复杂度是$\mathbb{O}(n)$, 最优！！

列主元高斯消去

思考：

Gauss消去是否对所有非奇异的系数矩阵可行？

考虑如下系数矩阵

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} 10^{-8} & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$Ax = b$ 本身解存在唯一，但是消元的过程中，主元$a_{ii}^{(k)} = 0$ 消元法无法继续； 或者 $a_{ii}^{(k)} \approx 0$ 作为分母， 数值不稳定. 如何解决?

交换行！！！让主元别太小！！

列主元Gauss举例

Example 4

回忆线性代数课程中的解方程过程; 保留消元因子和交换行

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 6 & 8 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow[rowchange]{(1,2)} \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ \boxed{0} & 2 & 1 \\ \boxed{2/3} & -4/3 & 1/3 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ \boxed{0} & 2 & 1 \\ \boxed{2/3} & \boxed{-2/3} & 1 \end{bmatrix}$$

检验$PA = LU$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 6 & 8 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \boxed{0} & 1 & 0 \\ \boxed{2/3} & \boxed{-2/3} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

消元法的衍生方法：列主元高斯消去；全主元高斯消去；...

李庆扬教材 p149 例4

列主元Gauss消去

置换矩阵

$$P=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{bmatrix},\qquad P*P=I$$

交换矩阵的两行相当于左乘置换阵！！

列主元高斯消去

1. 寻找当前列绝对值最大数，判断是否交换行
2. 换行后，进行正常的消元

此过程写成矩阵形式如下

$$\underline{E_{n,n-1}{\color{red}P_{n-1}}*E_{n,n-2}E_{n-1,n-2}{\color{red}P_{n-2}}*\ldots*E_{n1}\ldots E_{31}E_{21}}{\color{red}P_1}*A=U$$

列主元Gauss消去举例

在消元法之前，先挑出来$\boxed{\text{主元}}$

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 6 & 8 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{bmatrix}$$

如何用矩阵表示上述过程？

左乘一个置换矩阵

列主元Gauss消去

$$\underline{E_{n,n-1}P_{n-1} * E_{n,n-2}E_{n-1,n-2}P_{n-2} * \ldots * E_{n1}\ldots E_{31}E_{21}}P_1 * A = U$$

记每一列的初等变换乘积为

$$E_k = E_{n,k} * E_{n-1,k} * E_{n-2,k}\ldots * E_{k+1,k}$$

当n = 4时 上式为

$$E_3P_3 * E_2P_2 * E_1P_1 * A = U$$

改写为(矩阵乘法满足结合律)

$$E_3 * (P_3E_2P_3) * (P_3P_2E_1P_2P_3) * (P_3P_2P_1) * A = U$$

进而

$$F_3F_2F_1PA = L^{-1} * PA = U$$

列主元LU分解的可行性

Theorem 5

若A为非奇异矩阵，则存在置换矩阵P, 使得

$$PA = LU$$

Matlab 演示

思考：

带状矩阵能否用列主元消去法?

不可。WHY?

Contents

特殊矩阵1: 对称正定矩阵

对称正定矩阵必可以进行三角形分解，且不需要换行。

$$\begin{bmatrix} 36 & 48 & 6 \\ 48 & 68 & 10 \\ 6 & 10 & 3 \end{bmatrix}$$

思考:

一般地，没有规律的稠密矩阵可以进行LU分解，现在矩阵有对称性, 存储量可以减半; LU分解工作量是否也应当减半?

引例

Example 6

设B是可逆矩阵（或列满秩），则$A = B^T B$对称正定.

Hint: 对称性显然满足。任给$x \in \mathbb{R}^n$,

$$x^T A x = x^T B^T B x = (Bx)^T (Bx) \geq 0$$

且等号成立时，$Bx = 0 \ \rightarrow x = 0$.实际上，只要B列向量线性无关，即可。

给定对称正定矩阵A:

Q-(1) 是否存在简单的B(例如三角形矩阵)使之满足$A = B^{\mathrm{T}} * B$?

Q-(2) 如果存在，如何找到？ Cholesky分解

$A = B^{\mathrm{T}} * B = L * L^{\mathrm{T}}$的可行性

设

$$A = LU$$

其中L是单位下三角，U是普通上三角。 提取上三角矩阵U的对角元素组成对角阵，U_0是单位上三角矩阵；如

$$U = D * U_0 \quad \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 4/3 & 1/6 \\ 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$A = B^{\mathrm{T}} * B = L * L^{\mathrm{T}}$的可行性

Theorem 7

若A对称

$$A = LU = L * D * U_0$$

则

$$L = U_0^{\mathrm{T}} \rightarrow A = L * D * L^{\mathrm{T}}$$

Hint: 由对称性可得

$$A = LU = A^{\mathrm{T}} = U_0^{\mathrm{T}} * (D * L^{\mathrm{T}}) = L_1 U_1$$

其中L，L_1都是单位下三角矩阵；由分解的唯一性可知

$$LU = L_1 U_1 \Leftrightarrow L^{-1} L U U_1^{-1} = L^{-1} L_1 U_1 U_1^{-1} \Leftrightarrow U U_1^{-1} = L^{-1} L_1$$

则

$$U U_1^{-1} = L^{-1} L_1 = I \Rightarrow L = U_0^{\mathrm{T}}$$

$A = B^{\mathrm{T}} * B = L * L^{\mathrm{T}}$的可行性

Theorem 8

若A对称

$$A = LU = L * D * U_0$$

则

$$L = U_0^{\mathrm{T}} \rightarrow A = L * D * L^{\mathrm{T}}$$

Remark 3.1

若A对称正定, 则D的对角元素大于零！！WHY?

Hint: 反证法；假设 $D_{kk} < 0$, 则检验

$$x^T A x < 0$$

其中x 满足$Lx = [0, 0, ..., 1, ...0]^T$, 右端向量只有第$k$个元素为1.

Cholesky分解

$$A = LDL^{\mathrm{T}} = (L\sqrt{D}) * (\sqrt{D}L^{\mathrm{T}}) = \tilde{L} * \tilde{L}^{\mathrm{T}}$$

将$A = L * L^{\mathrm{T}}$ 写成分块形式

$$\left[\begin{array}{c|c} a_{11} & A_{21}^{\mathrm{T}} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array}\right] = \begin{bmatrix} l_{11} & \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & L_{21}^{\mathrm{T}} \\ & L_{22}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11}^2 & l_{11} L_{21}^{\mathrm{T}} \\ l_{11} L_{21} & L_{21} L_{21}^{\mathrm{T}} + L_{22} L_{22}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$

1. determine l_{11} and L_{21}: (一次开方，n-1次乘法)

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad L_{21} = \frac{1}{l_{11}} A_{21}$$

2. compute L_{22} from: ($(n-1)^2$ 次乘法,对称矩阵减半 $(n-1)^2/2$)

$$A_{22} - L_{21} * L_{21}^{\mathrm{T}} = L_{22} L_{22}^{\mathrm{T}} = A_{new}$$

3. n阶矩阵变成了(n-1)阶矩阵 $\tilde{A} = \tilde{L} * \tilde{L}^{\mathrm{T}}$ 重复1，2，过程.

n次上述点过程，每次作用$\frac{n^2}{2}$ 次乘法，共计 $n^3/6$

举例

Example 9

$$\begin{bmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & & \\ l_{21} & l_{22} & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ & l_{22} & l_{23} \\ & & l_{33} \end{bmatrix}$$

逐次按列计算下三角L的元素！！！

1. 先计算L的第一列
2. 生成新的（n-1）阶矩阵

$$A_{new} = \begin{bmatrix} l_{22} & \\ l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{22} & l_{32} \\ & l_{33} \end{bmatrix}$$

举例

- first column of L

$$\begin{bmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & & \\ 3 & l_{22} & \\ -1 & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 5 & 3 & -1 \\ & l_{22} & l_{23} \\ & & l_{33} \end{bmatrix}$$

- 生成下一步待分解(n-1)阶矩阵

$$\begin{bmatrix} 18 & 0 \\ 0 & 11 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 3 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 10 \end{bmatrix}$$

- second column of L

$$\begin{bmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{22} & \\ l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} l_{22} & l_{23} \\ & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 1 & l_{33} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 0 & l_{33} \end{bmatrix}$$

- third column of L

$$10 - 1 = l_{33}^2 \rightarrow l_{33} = 3$$

举例

结果

$$\begin{bmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ -1 & 1 & 3 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 5 & 3 & -1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

remark

Cholesky 分解同样适用于稀疏矩阵，且一般情况下 工作量大大降低。 对有些问题 通过行交换改变矩阵的pattern可以进一步的降低工作量。 矩阵分解内涵相当丰富，可自行阅读相关资料.

Contents

只对称不正定

当矩阵为负定或者不定矩阵时，Cholesky分解不可直接使用。而改进的平方根法可用，且与LU分解比较计算量同样减半。

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

改进的平方根法

分块

$$\left[\begin{array}{c|c} a_{11} & A_{21}^{\mathrm{T}} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array}\right] = \begin{bmatrix} 1 & \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & \\ & D_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & L_{21}^{\mathrm{T}} \\ & L_{22}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$

1. 算出d_1, 进而$L_{21} = A_{21}/d_1$
2. 更新得到$(n-1)$阶矩阵

$$A_{new} = L_{22} * D_2 * L_{22}^{\mathrm{T}} = A_{22} - d_1 * L_{21} * L_{21}^{\mathrm{T}}$$

举例

Example 10

$$\begin{bmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{bmatrix} = L * D * L^{\mathrm{T}}$$

计算过程

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 25 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 25 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/5 & 1 & 0 \\ -1/5 & 0 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/5 & 1 & 0 \\ -1/5 & 1/3 & 1 \end{bmatrix}$$

$$A_{new} = \begin{bmatrix} 18 & 0 \\ 0 & 11 \end{bmatrix} - 25 * \begin{bmatrix} 3/5 \\ -1/5 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 3/5 & -1/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 10 \end{bmatrix} \rightarrow 10 - 9 * 1/3 * 1/3$$

Contents

1. 对一般的稀疏矩阵，人们更倾向于后文的迭代法
2. 对于三对角矩阵(特殊的稀疏矩阵), Gauss消去（LU分解）最常用！

三对角或者d对角线性方程组

$$\begin{bmatrix} a_1 & c_1 & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & b_n & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix}$$

LU分解保持带状矩阵的紧凑性！！！

D-对角线性方程组不可进行行交换；如果破坏这种紧凑性， 运算量会从最低的 $\mathbb{O}(n)$ 急剧上升到 $\mathbb{O}(n^3)$；

$$\begin{bmatrix} a_1 & c_1 & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & b_n & a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \alpha_1 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \alpha_{n-2} & 1 & \\ & & & \alpha_{n-1} & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \beta_1 & c_1 & & & \\ & \beta_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & \beta_n \end{bmatrix}$$

可以验算上述过程需要约2n次乘除法， 一旦分解完成计算

$$Ax = f \Leftrightarrow L(Ux) = f \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = f \\ Ux = y \end{cases}$$

求解上述方程只要约 3n次乘除法. 因此要是改变右端项，反复求解上述方程，也应当先进行分解。

Matlab 演示！！！

Contents

QR分解

后文特征值计算会涉及QR分解，而QR分解本身也可以用来求解线性方程组。

Example 11

给定非奇异矩阵

$$A = \begin{bmatrix} | & | & \cdots & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & \cdots & | \end{bmatrix}$$

如何根据A 的列向量得到空间

$$C(A) = \mathbb{R}^n = span\{a_1, a_2, ..., a_n\}$$

的一组标准正交基?

Gram-Schmidt正交化

$$A = \begin{bmatrix} | & | & \cdots & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & \cdots & | \end{bmatrix} \rightarrow Q = \begin{bmatrix} | & | & \cdots & | \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ | & | & \cdots & | \end{bmatrix}$$

方法:

$$q_k = a_k - P_{proj}\left(span\{a_1, a_2, ..., a_{k-1}\} = span\{q_1, q_2, ..., q_{k-1}\}\right)$$

Gram-Schmidt正交化

$A \rightarrow Q$ 的过程中，做了哪些事？能否用矩阵形式表示？

对列做投影(某种列变换)

$$AB = Q \rightarrow A = QR$$

QR分解

$$A = \begin{bmatrix} | & | & \cdots & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & \cdots & | \end{bmatrix} \rightarrow Q = \begin{bmatrix} | & | & \cdots & | \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ | & | & \cdots & | \end{bmatrix}$$

Gram-Schmidt正交化方法本质上是将A分解为

$$A = QR, \quad \& \quad Q^{\mathrm{T}}Q = I$$

思考：

正交化过程可以得到Q，如何得到R？ R有无特殊结构？

$$R = Q^{\mathrm{T}}A$$

是上三角矩阵

QR分解

Remark 6.1

直接按照投影方法计算QR，数值方法极其不稳定。后文介绍特征值计算时将引入正交变换法（Householder）完成QR分解，此处从略。

一旦完成QR分解，求解可按照如下步骤进行

$$Ax = QRx = b \quad \rightarrow \begin{cases} y = Q^T b \\ Rx = y \end{cases}$$

思考：

上述的两步走 与LU分解的两步走比较，计算复杂度如何？进一步思考：实际Matlab计算的效率。

此处计算量理论值大 $n^2 + \frac{n^2}{2}$；但是实际计算可能更快。

思考：

LU分解对于三对角矩阵和三角形矩阵表现良好， 如果有一种系数矩阵是这两者结合而成，LU分解效果如何?

考查Hessenberg矩阵

$$H=\begin{bmatrix} + & + & + & + & + \\ + & + & + & + & + \\ 0 & + & + & + & + \\ 0 & 0 & + & + & + \\ 0 & 0 & 0 & + & + \end{bmatrix}$$

分析LU分解需要的乘除法次数以及分解后的L和U的形式。

1. 对如下5对角10阶方阵进行LU分解，并计算该过程需要乘除法的次数.

$$A = \begin{bmatrix} 35 & -16 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -16 & 35 & -16 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -16 & 35 & -16 & 1 & \dots & 0 \\ & & \ddots & & \ddots & & \\ 0 & \dots & 1 & -16 & 35 & -16 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -16 & 35 & -16 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -16 & 35 \end{bmatrix}_{10\times 10}$$

进一步考虑，由于矩阵具有对称性，上述分解过程的工作量能否减半?

上机练习

2. 利用追赶法计算三对角Ax = b,　n = 15；并画出向量x的图像

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}_{n\times n} * \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}_{n\times 1}$$

3. 对矩阵A进行LU分解；并对$A^{\mathrm{T}}A$进行Cholesky分解

$$\begin{bmatrix} 8 & -3 & 2 \\ 4 & 11 & -1 \\ 6 & 3 & 12 \end{bmatrix}$$