§2 三角分解法 /* Matrix Factorization */

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

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

记 $L_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & 1 \end{bmatrix}$，则 $L_1[A^{(1)} \ \vec{b}^{(1)}] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} \ldots a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 \quad A^{(2)} & \vec{b}^{(2)} \end{bmatrix}$

Step $n-1$:

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

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

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

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

单位下三角阵

/* unitary lower-triangular matrix */

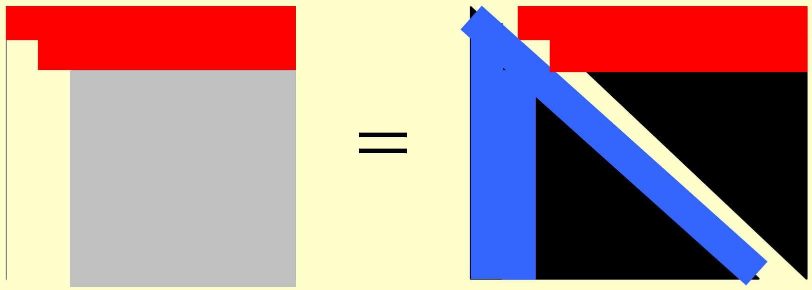
$$\text{记 } U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \dots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix} \Rightarrow \quad A = LU$$

A 的 *LU* 分解

/* *LU* factorization */

➢ 杜利特分解法 /* Doolittle Factorization */:

—— *LU* 分解的紧凑格式 /* compact form */



思路 通过比较法直接导出 *L* 和 *U* 的计算公式。

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

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

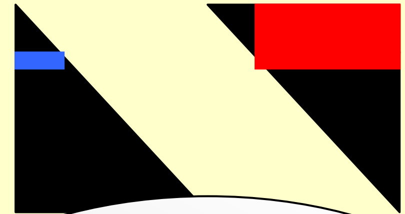
$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} u_{kj}$$

固定 i：

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

$l_{ii} = 1$

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



将 i，j 对换，对 $j = i, i+1, \ldots, n$

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

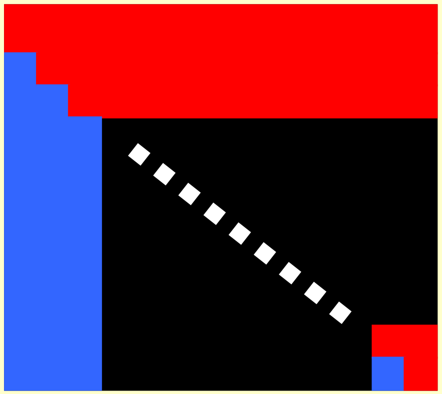
一般采用列主元法增强稳定性。但注意 $\vec{b}$ 也必须做相应的行交换。

Algorithm: Doolittle Factorization

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

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

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



求解Ly=b,Ux=y的计算公式

$$\begin{cases} y_1 = b \\ y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \end{cases} \qquad \text{i=2,3,…,n}$$

$$\begin{cases} x_n = y_n / u_{nn} \\ x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik} x_k) / u_{ii} \end{cases} \qquad \text{i=n-1,n-2,…,1}$$

■选主元的三角分解法

直接三角分解法的局限性:

当$u_{rr}=0$时计算中断

当u_{rr}绝对值很小时，引起舍入误差的累积。

设第r-1步分解已完成

$$
A \to \begin{bmatrix}
u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1,r-1} & u_{1r} & \cdots & u_{1n} \\
l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2,r-1} & u_{2r} & \cdots & u_{2n} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
l_{r-1,1} & l_{r-1,2} & \cdots & u_{r-1,r-1} & u_{r-1,r} & \cdots & u_{r-1,n} \\
l_{r1} & l_{r2} & \cdots & l_{r,r-1} & a_{rr} & \cdots & a_{rn} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,r-1} & a_{nr} & \cdots & a_{nn}
\end{bmatrix}
$$

直接LU分解的第r步分解

$$u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{ki} \qquad \text{i=r,r+1,…,n, 且 } r \neq n$$

$$l_{ir} = (a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr}) / u_{rr} \qquad \text{i=r+1,…,n, 且 } r \neq n$$

为避免$\mathbf{u_{rr}}$过小

$$s_i = a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr} \qquad \text{(i=r,r+1,…,n)}$$

$$u_{rr} = s_r \qquad l_{ir} = s_i / s_r \qquad \text{(i=r+1,…,n)}$$

取 $\max_{r \le i \le n} |s_i| = |s_{i_r}|$ **A的r行⇔A的$\mathbf{i_r}$行**

$$s_{i_r} \to (r, r)$$

算法4（选主元的三角分解法）

$$PA = I_{n-1,i_{n-1}} \cdots I_{1,i_1} A = LU$$

Ip(n)记录主行

1.对于r=1,2,…,n

1) 计算s_i $a_{ir} \leftarrow s_i = a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} u_{kr}$ (i=r,r+1,…,n)

2)选主元 $|s_{i_r}| = \max_{r \le i \le n} |s_i|$ Ip(r)←i_r

3)交换A的r行元素与i_r行元素$a_{ri} \leftrightarrow a_{i_r,i}$

4)计算U的第r行元素，L的第r列元素

$a_{rr}=u_{rr}=s_r$

$a_{ir} \leftarrow l_{ir} = s_i / u_{rr} = a_{ir} / a_{rr}$ i=r+1,…,n,且r≠n

$a_{ri} \leftarrow u_{ir} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki}$ i=r+1,…,n,且r≠n

求解Ly=Pb及Ux=y

2.对于i=1,…,n-1

1)t←Ip(i)

2)若i=t则转3),否则 $b_i \leftrightarrow b_t$

3. $b_i \leftarrow b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} b_k$ (i=2,3,..,n)

解x存放在b中

4. $b_n \leftarrow b_n / u_{nn}, b_i \leftarrow (b_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik} b_k) / u_{ii}$ i=n-1,…,1

PA=LU ⟹ $A^{-1} = U^{-1} L^{-1} P$

1)计算上三角矩阵的逆阵U^{-1}

2)计算$U^{-1}L^{-1}$

3)交换$U^{-1}L^{-1}$的列

➢ 平方根法 /* Choleski's Method */:

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

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

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

回顾：对称正定阵的几个重要性质

- A^{-1} 亦对称正定，且 $a_{ii} > 0$
- A 的顺序主子阵 /* leading principal submatrices */ A_k 亦对称正定
- A 的特征值 /* eigen value */ $\lambda_i > 0$
- A 的全部顺序主子式 $\det(A_k) > 0$

对任意 $\vec{x}\neq\vec{0}$

$a_{ii} = \vec{x}^T A\vec{x} > 0$ 其中 $(0\ldots1\ldots0)^T$

即 对任意 $\vec{x}_k \neq \vec{0}\in R^k$ 有

设对应特征值 的非零特征向量

$\lambda\|\vec{x}\|^2$。

因为 $\det(A)=\prod_{i=1}^{n}\lambda_i$

将对称 正定阵 A 做 LU 分解

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

定理10(对称阵的三角分解定理)

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

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

$$A = \tilde{L}\tilde{L}^T$$

$\det(A_k) > 0$ ➡ $u_{ii} > 0$

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

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

$$A=\begin{bmatrix} \boxed{l_{11}} & & & \\ l_{21} & \boxed{l_{22}} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & \boxed{l_{nn}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{nn} \end{bmatrix}$$

$l_{ii}>0$

按列计算

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{n} l_{ik}l_{jk}=\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}+l_{jj}l_{ij}$$

Algorithm: Choleski's Method

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

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

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

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

Step 2 For $j = 2, \ldots, n$, set …

Step 3 Fo…

Step 5 … l_{ii};

Step 6 Set …

Step 7 O…

STOP.

因为A对称，所以只需存半个A，即

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

其中 $A[i \times (i-1)/2 + j]$

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

利用定理10，A=LDL^T,避免开方运算

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

按行计算

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{n}(LD)_{ik}(L^T)_{kj}=\sum_{k=1}^{n}l_{ik}d_k l_{jk}=\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}d_k l_{jk}+l_{ij}d_j l_{jj}$$

t_{ij}

对于i=1,2,…,n

$$l_{ij}=(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}d_k l_{jk})/d_j \quad j=1,2,\ldots,i-1$$

$$d_i=a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}^2 d_k$$

➢改进的平方根法

对于i=2,3,…,n

$$1 \quad t_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} t_{ik} l_{jk} \qquad \textbf{j=1,2,…,i-1}$$

$$2 \quad l_{ij} = t_{ij} / d_j$$

$$3 \quad d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ik} l_{ik}$$

求解Ly=b,DL^{T}x=y

$$4 \quad \begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \quad (i = 2,\dots,n) \end{cases}$$

$$5 \quad \begin{cases} x_n = y_n / d_n \\ x_i = y_i / d_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k \quad (i = n-1,\dots,2,1) \end{cases}$$

➢ 追赶法解三对角方程组

/* Crout Reduction for Tridiagonal Linear System */

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & a_{n-1} & b_{n-1} & c \\ & & \cdots & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ \end{bmatrix}$$

$|b_1| > |c_1| > 0$

$|b_i| \ge |a_i| + |c_i|, a_i, c_i \ne 0$

$|b_n| > |a_n| > 0$

与G.E.类似，一旦
$\alpha_i = 0$ 则算法中断，故并非任何
三对角阵都可以用此方法分解。

Step 1: 对 **A** 作C

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & \\ \gamma_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

直接比较等式两边的元素，可得到计算公式。

$$\begin{cases} b_1 = a_1, c_1 = \alpha_1 \beta_1 \\ a_i = r_i, b_i = r_i \beta_{i-1} + \alpha_i \quad (i=2,3,\ldots,n) \\ c_i = \alpha_i \beta_i \quad (i=2,3,\ldots,n-1) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha_i = b_i - a_i \beta_{i-1} \\ \beta_i = c_i / \alpha_i \end{cases}$$

Step 2: 追——即解 $L\vec{y} = \vec{f}$: $y_1 = \dfrac{f_1}{\alpha_1},\ y_i = \dfrac{(f_i - r_i y_{i-1})}{\alpha_i}\quad (i = 2, \dots, n)$

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

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

证明：由

$$\left.\begin{array}{l} \alpha_1 = b_1 \neq 0 \\ |b_1|>|c_1|>0 \\ \beta_1 = c_1/b_1 \end{array}\right\} \Rightarrow 0<|\beta_1|<1$$

用归纳法证明 $|\alpha_i|>|c_i|\neq 0$ i=1,2,…,n-1 $0<|\beta_i|<1$ 从而可求出ß

i=1时，显然成立。假设对i成立。

由归纳法假设，$0<|\beta_{i-1}|<1$

$$|\alpha_i|=|b_i-a_i\beta_{i-1}|\ge|b_i|-|a_i\beta_{i-1}|>|b_i|-|a_i|\ge|c_i|\ne 0$$

$$\beta_i=c_i/\alpha_i \longrightarrow 0<|\beta_i|<1$$

命题得证 ▮

注：

☞ 如果 *A* 是严格对角占优阵，则不要求三对角线上的所有元素非零。

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

☞ 运算量为 $O(6n)$。

§5.5 向量和矩阵范数 /* Norms of Vectors and Matrices */

—— 为了误差的度量

定义1: **x,y** ∈ R_n, 将 $(x,y)=y^T x=\sum_{i=1}^{n} x_i y_i$

称为向量x,y的**数量积**。

将 $\|x\|_2=(x,x)^{\frac{1}{2}}=(\sum_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}}$ 称为向量x的**欧氏范数**

定理13 设x,y ∈ R^n，则

$(x,x)=0 \Longleftrightarrow x=0$

$(ax,y)=a(x,y)$

$(x,y)=(y,x)$

$(x_1+x_2,y)=(x_1,y)+(x_2,y)$

Cauchy-Schwarz
不等式

$|(x,y)|\le\|x\|_2\|y\|_2$

$\|x+y\|_2\le\|x\|_2+\|y\|_2$

三角不等式

➢ 向量范数 /* vector norms */

定义 R^n空间的向量范数 $\|\cdot\|$ 对任意 $\vec{x}, \vec{y} \in R^n$满足下列条件:

(1) $\|\vec{x}\| \ge 0$; $\|\vec{x}\| = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0}$ （正定性 /* positive definite */)

(2) $\|\alpha\vec{x}\| = |\alpha| \cdot \|\vec{x}\|$ 对任意$\alpha \in C$ (齐次性 /* homogeneous */)

(3) $\|\vec{x}+\vec{y}\| \le \|\vec{x}\| + \|\vec{y}\|$ （三角不等式 /* triangle inequality */)

$$\big|\,\|x\| - \|y\|\,\big| \le \|x - y\|$$

常用向量范数:

$$\|\vec{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

$$\|\vec{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}$$

$$\|\vec{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p}$$

$$\|\vec{x}\|_\infty = \max_{1 \le i \le n} |x_i|$$

注: $\lim\limits_{p\to\infty} \|\vec{x}\|_p = \|\vec{x}\|_\infty$

定义 向量序列 $\{\vec{x}^{(k)}\}$收敛于向量 $\vec{x}^*$是指对每一个 $1 \le i \le n$ 都有 $\lim_{k\to\infty} x_i^{(k)} = x_i^*$。 可以理解为 $\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^*\|_\infty \to 0$

定理14 (N(x)的连续性) 设非负函数N(x)=||x||为R^n上任一向量范数，则N(x)是x的分量$x_1, x_2, \ldots, x_n$的连续函数。 证明见P199

定理15 R^n 上一切范数都等价。

可以理解为对任何
向量范数都成立。

证明：只要证明

$$c_1\|x\|_\infty \le \|x\|_t \le c_2\|x\|_\infty$$

若能证明向量序列在一种范数意义下向量序列收敛，则在任何一种范数意义下该向量序列均收敛。

考虑函 有界闭集 $x \in R^n$

记 $S=\{x \mid \|x\|_\infty = 1, x \in R^n\}$

由于f(x)是S上的连续函数，所以f(x)在S上有最大最小值，即

$$f(x')=\min_{x\in S} f(x)=c_1 \qquad f(x'')=\max_{x\in S} f(x)=c_2$$

设x ∈ Rⁿ且x ≠ 0，则 $\dfrac{x}{\|x\|_\infty} \in S$

定理15不能推广到无穷维空间

$$c_1 \le f\left(\frac{x}{\|x\|_\infty}\right) \le c_2 \quad \Longrightarrow \quad c_1 \le \left\|\frac{x}{\|x\|_\infty}\right\|_t \le c_2$$

$$\Longrightarrow \quad c_1\|x\|_\infty \le \|x\|_t \le c_2\|x\|_\infty$$

定理16 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^* \Longleftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty}\left\|x^{(k)} - x^*\right\| = 0$

证明:显然 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^* \Longrightarrow \lim\limits_{k\to\infty}\left\|x^{(k)} - x^*\right\| = 0$

对于R^n上的任何一种范数|| ||,由定理15，存在常数$c_1,c_2>0$

$$c_1\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_\infty \le \left\|x^{(k)} - x^*\right\| \le c_2\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_\infty$$

$$\lim_{k\to\infty}\left\|x^{(k)} - x^*\right\|_\infty = 0 \Longrightarrow \lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*$$

➢ 矩阵范数 /* matrix norms */

定义 $R^{m\times n}$空间的矩阵范数 $\|\cdot\|$ 对任意 $A, B \in R^{m\times n}$ 满足:

(1) $\|A\| \geq 0$; $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$ （正定性 /* positive definite */)

(2) $\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$ 对任意$\alpha \in C$ (齐次性 /* homogeneous */)

(3) $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$ (三角不等式 /* triangle inequality */)

(4)* $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ （相容 /* consistent */ 当 $m = n$ 时)

常用矩阵范数:

Frobenius 范数 $\| A \|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} | a_{ij} |^2}$ — 向量$\|\cdot\|_2$的直接推广

对方阵$A \in R^{n\times n}$ 以及 $\vec{x} \in R^n$有 $\| A\vec{x} \|_2 \le \| A \|_F \cdot \| \vec{x} \|_2$

利用 Cauchy 不等式 $|\vec{x}\cdot\vec{y}| \le \|\vec{x}\|_2 \cdot \|\vec{y}\|_2$ 可证。

算子范数 /* operator norm */

由向量范数 $\|\cdot\|_p$ 导出关于矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 的 p 范数:

$$\| A \|_p = \max_{\vec{x}\ne\vec{0}} \frac{\| A\vec{x} \|_p}{\| \vec{x} \|_p} = \max \dots$$

则 $\|AB\|_p \le \|A\|_p \, \|B\|_p$

$\| A\vec{x} \|_p \le \|A\|_p \, \|\vec{x}\|_p$

特别有: $\| A \|_\infty = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} \dots$ (… 范数)

$\| A \|_1 = \max_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{n} | a_{ij} |$ (列和范数)

$\| A \|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$ (谱范数 /* spectral norm */)

矩阵 A^TA 的最大特征根 /* eigenvalue */

定理17 设$\|x\|_v$是R^n上一个向量范数，则$\|A\|_v$是$R^{n\times n}$上的矩阵范数，且满足相容条件

$$\|Ax\|_v \le \|A\|_v \|x\|_v$$

证明：

$$\|A\|_v = \max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \Longrightarrow \|A\|_v = \max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \ge \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}$$

$$\Downarrow$$

$$\|Ax\|_v \le \|A\|_v \|x\|_v$$

容易证明，由向量范数诱导的矩阵范数符合定义1),2),3),下面证明4)

$$\|ABx\|_v \le \|A\|_v \|Bx\|_v \le \|A\|_v \|B\|_v \|x\|_v$$

当$x\neq 0$时，有

$$\frac{\|ABx\|_v}{\|x\|_v} \le \|A\|_v \|B\|_v$$

$$\|AB\|_v = \max_{x\neq 0}\frac{\|ABx\|_v}{\|x\|_v} \le \|A\|_v \|B\|_v$$

证明 1) $\|A\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$

设$\mathbf{x}=(x_1,x_2,\ldots,x_n)^T \neq 0, A \neq 0.$

$$t = \|x\|_\infty = \max_{1\le i\le n} |x_i| \qquad \mu = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

$$\|Ax\|_\infty = \max_{1\le i\le n} \left|\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j\right| \le \max_i \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\,|x_j| \le t \max_i \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

$$\frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} \le \mu$$

下面说明存在向量$\mathbf{x}_0 \neq 0$,使 $\dfrac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \mu$

设 $\mu = \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{i_0 j}|$ 取向量$\mathbf{x}_0=(x_1,x_2,\ldots,x_n)^T$,其中

$$x_j = \operatorname{sgn}(a_{i_0 j}), (j = 1, 2, \ldots, n)$$

显然 $\|x_0\|_\infty = 1$ **Ax_0的第i_0个分量为**

$$\sum_{i=1}^{n} a_{i_0 j} x_j = \sum_{j=1}^{n} |a_{i_0 j}|$$

$$\|Ax_0\|_\infty = \max_{1\le i\le n} \left|\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j\right| = \sum_{j=1}^{n} |a_{i_0 j}| = \mu$$

2) $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$

对称阵

$$\|Ax\|_2^2 = (Ax, Ax) = (A^T Ax, x) \ge 0 \qquad \lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_n$$

当x=u_1时，
等号成立

设$u_1,u_2,\ldots,u_n$为A^TA的相应于特征值的特征向量 $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$

$$\forall x \in R^n \quad x = \sum_{i=1}^{n} c_i u_i \qquad \frac{\|Ax\|_2^2}{\|x\|_2^2} = \frac{(A^T Ax, x)}{(x, x)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} c_i^2 \lambda_i}{\sum_{i=1}^{n} c_i^2} \le \lambda_1$$

$$\|A\|_2 = \max_{x\ne 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$$

3) $\|A\|_1 = \max\limits_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$

记 $A=[a_1,a_2,\cdots,a_n]$ $\quad a_j=[a_{1j},a_{2j},\cdots,a_{nj}]^T$

$$\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}| = \max_{1\le j\le n}\|a_j\|_1$$

$$\forall x=[x_1,x_2,\cdots x_n]^T\in R^n$$

$$\|Ax\|_1=\|x_1a_1+x_2a_2+\cdots+x_na_n\|_1\le|x_1|\,\|a_1\|_1+\cdots+|x_n|\,\|a_n\|_1$$

$$\le(|x_1|+|x_2|+\cdots+|x_n|)\max_{1\le j\le n}\|a_j\|_1=\|x\|_1\max_{1\le j\le n}\|a_j\|_1$$

$$\frac{\|Ax\|_1}{\|x\|_1}\le\max_{1\le j\le n}\|a_j\|_1$$

若 $\max\limits_{1\le j\le n}\|a_j\|_1=\|a_k\|_1$ 取$x=e_k$,能使等号成立, $\|e_k\|_1=1$,

$$\|Ae_k\|_1=\|a_k\|_1=\max_{1\le j\le n}\|a_j\|_1=\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$

注： ☞ Frobenius 范数不是算子范数。

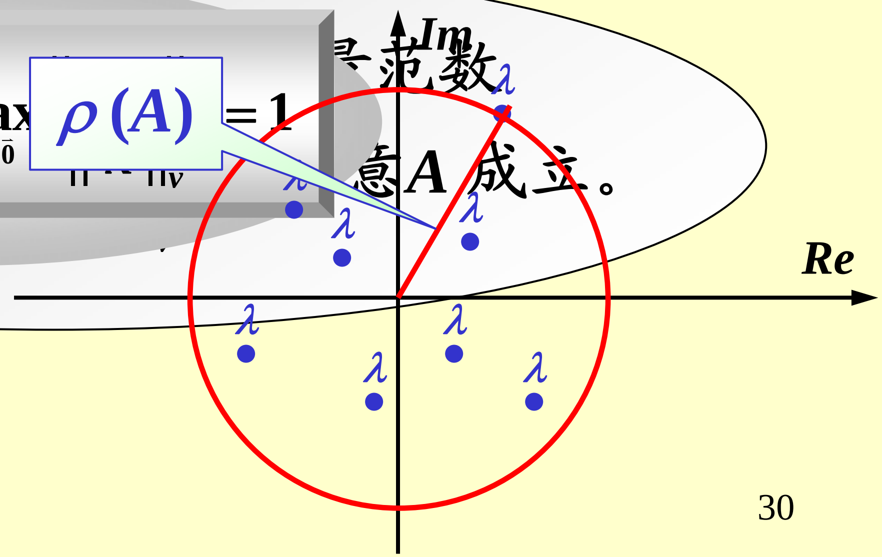
☞ 我们只关心有相容性的范数，算子范数总是相容的。

☞ 即使 *A* 中元素全为实数，其特征根和相应特征向量 /* eigenvector */ 仍可能是复数。将上述定义中绝对值换成复数模均成立。

$$\sqrt{n} = \| I \|_F \neq \max_{\vec{x}\neq\vec{0}} \frac{\| I\vec{x} \|_v}{\| \vec{x} \|_v} = 1$$

➢ 谱半径 /* spectral radius */ 是范数 $\|\cdot\|_v$ 意 *A* 成立。

定义 矩阵 *A* 的谱半径记为 $\rho(A) = \max_{1\le i\le n} |\lambda_i|$，其中 λ_i 为 *A* 的特征根。



定理 对任意算子范数 $\|\cdot\|$ 有 $\rho(A)\le\|A\|$

证明： 由算子范数的相容性，得到 $\|A\vec{x}\|\le\|A\|\cdot\|\vec{x}\|$

将任意一个特征根 λ 所对应的特征向量 $\vec{u}$ 代入

$$\underline{|\lambda|}\cdot\|\vec{u}\|=\|\lambda\vec{u}\|=\|A\vec{u}\|\le\underline{\|A\|}\cdot\|\vec{u}\| \qquad \blacksquare$$

定理 若A对称，则有 $\|A\|_2=\rho(A)$

A对称

证明： $\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}=\sqrt{\lambda_{\max}(A^2)}$

若λ是 A 的一个特征根 则λ^2必是 A^2 的特征根。

$\Rightarrow \quad \lambda_{\max}(A^2)=\lambda^2(A)$ 某个 A 的特征根λ成立

又：对称矩阵的特 实数，即 $\lambda^2(A)$ 为非负实数，

所以2-范数亦称为**谱范数**。

故得证。 $\blacksquare$

定理 若矩阵 B 对某个算子范数满足 $\|B\|<1$，则必有

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

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

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

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

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

$\blacksquare$

§ 5.6 线性方程组的误差分析

/* Error Analysis for Linear system of Equations */

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

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

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

绝对误差放大因子

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

相对误差放大因子

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

定理22

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

定理23

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

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

☞ *cond* (*A*) 取决于*A*，与解题方法无关。

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

常用条件数有：

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

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

条件数的性质：

- *A*可逆，则 $cond\ (A)_p\ge1$;
- *A*可逆，$\alpha\in R$ 则 $cond\ (\alpha A)=cond\ (A)$;
- *A*正交，则 $cond\ (A)_2=1$;
- *A*可逆，*R*正交，则 $cond\ (RA)_2=cond\ (AR)_2=cond\ (A)_2$ 。

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

计算 $cond\,(A)_2$。

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

解: 考察 A 的特征根

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

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

测试病态程度:

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

$$\frac{\|\delta\vec{b}\|_2}{\|\vec{b}\|_2} \approx 0.513\times 10^{-4} < 0.01\,\%$$

此时精确解为 $\vec{x}^*=\begin{pmatrix} 3 \\ -1.0203 \end{pmatrix}$

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

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

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

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

注：一般判断矩阵是否病态，并不计算A^{-1}，而由经验得出。

- ☞ 行列式很大或很小（如某些行、列近似相关）；
- ☞ 元素间相差大数量级，且无规则；
- ☞ 主元消去过程中出现小主元;
- ☞ 特征值相差大数量级。

对于病态方程组可采用高精度的算术运算或采用预处理方法，即

$$\begin{cases} PAQy = Pb \\ y = Q^{-1}x \end{cases}$$

选择非奇异阵P,Q使 **cond(PAQ)<cond(**

不能保证A的条件数得到改善

当矩阵A的元素大小不均时，对A的行（或列）引进适当的比例因子，对A的条件

作为第一行的比例因子

例10 $\begin{bmatrix} 1 & 10^4 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10^4 \\ 2 \end{bmatrix}$ 计算cond(A)$_\infty$ $\begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$

A

A'

$$A^{-1} = \frac{1}{10^4 - 1}\begin{bmatrix} -1 & 10^4 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \qquad A'^{-1} = \frac{1}{1 - 10^{-4}}\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -10^{-4} \end{bmatrix}$$

$$cond(A)_\infty = \frac{(1+10^4)^2}{10^4 - 1} \approx 10^4 \qquad cond(A')_\infty = \frac{1}{1-10^{-4}} \approx 4$$

x=(0,1) x=(1,1)

➤ 近似解的误差

定理24（事后误差估计）

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

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

误差上限

改善方法:

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

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

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

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

若 $\vec{d}_1$ 可被精确解出，则有

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

$\vec{x}_2$ 就是精确解了。

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