矩阵变换和计算

董波
数学科学学院
大连理工大学

主要内容

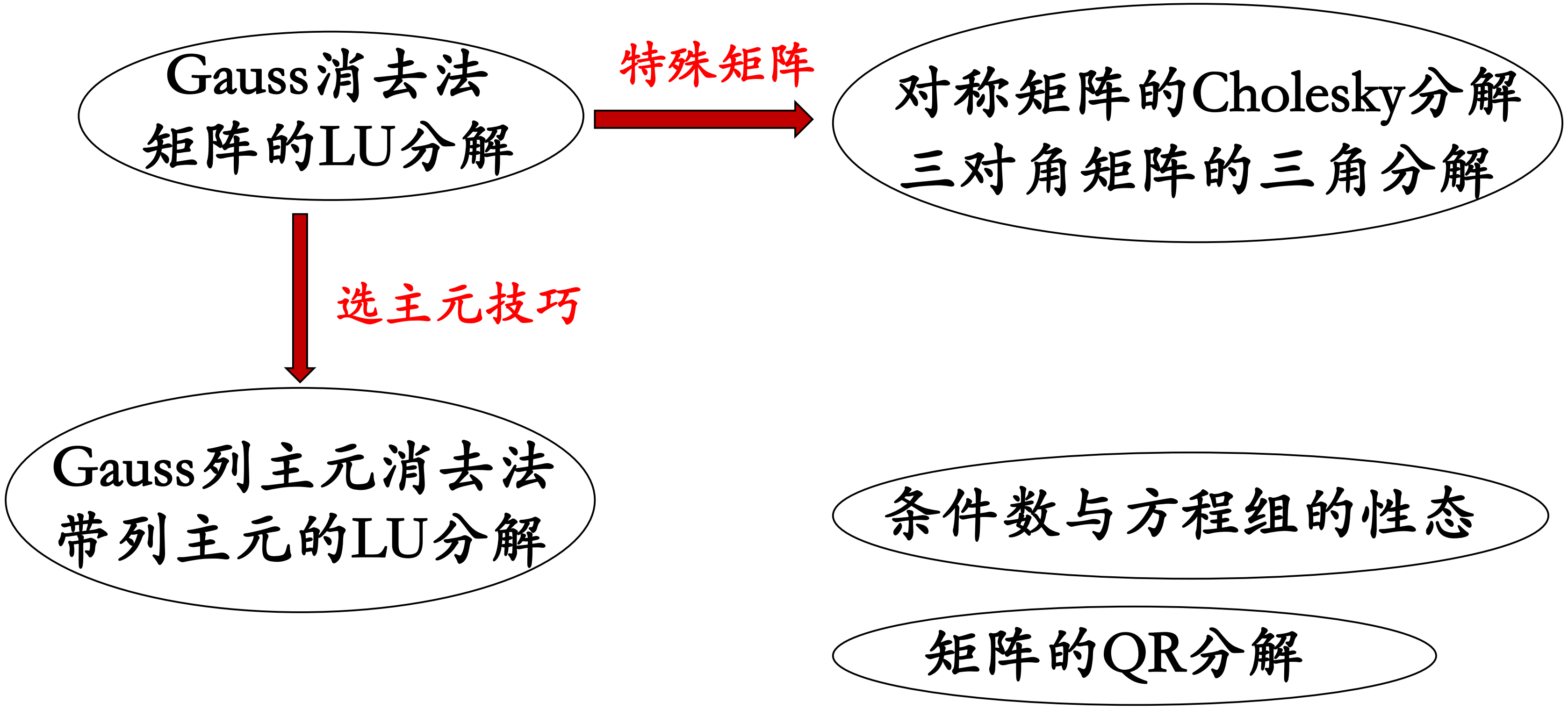
2.1 矩阵的三角分解及其应用

2.2 特殊矩阵的特征系统

2.3 矩阵的Jordan分解

2.4 矩阵的奇异值分解

矩阵的三角分解及其应用



Gauss消去法与矩阵的LU分解

以下系数矩阵对应的线性方程组哪个容易求解？或者哪个容易计算行列式和特征值?

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -2 & -9 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 6 & -2 & -9 \\ -5 & 8 & 3 \end{pmatrix}$$

对角矩阵　　上(下)三角矩阵　　满矩阵

转化

Gauss消去法：方程组角度

例　Gauss消去法求解线性方程组

$$
\begin{cases}
2x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\
4x_1 + 3x_2 + 3x_3 + x_4 = 11 \\
8x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 5x_4 = 29 \\
6x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 8x_4 = 30
\end{cases}
$$

Gauss消去法：方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\ 4x_1 + 3x_2 + 3x_3 + x_4 = 11 & r_2^{(0)} \\ 8x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 5x_4 = 29 & r_3^{(0)} \\ 6x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 8x_4 = 30 & r_4^{(0)} \end{cases}$$

$$\Big\downarrow \begin{array}{l} -2r_1^{(0)} + r_2^{(0)} \\ -4r_1^{(0)} + r_3^{(0)} \\ -3r_1^{(0)} + r_4^{(0)} \end{array}$$

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\ x_2 + x_3 + x_4 = 3 & r_2^{(1)} \\ 3x_2 + 5x_3 + 5x_4 = 13 & r_3^{(1)} \\ 4x_2 + 6x_3 + 8x_4 = 18 & r_4^{(1)} \end{cases}$$

$$\xrightarrow[-4r_2^{(1)} + r_4^{(1)}]{-3r_2^{(1)} + r_3^{(1)}}$$

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\ x_2 + x_3 + x_4 = 3 & r_2^{(1)} \\ 2x_3 + 2x_4 = 4 & r_3^{(2)} \\ 2x_3 + 4x_4 = 18 & r_4^{(2)} \end{cases}$$

$$\Big\uparrow -r_3^{(2)} + r_4^{(1)}$$

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\ x_2 + x_3 + x_4 = 3 & r_2^{(1)} \\ 2x_3 + 2x_4 = 4 & r_3^{(2)} \\ 2x_4 = 2 & r_4^{(3)} \end{cases}$$

$$
\begin{aligned}
2x_1 + x_2 + x_3 \qquad &= 4 \quad \Rightarrow \quad x_1 = 1 \\
x_2 + x_3 + x_4 &= 3 \quad \Rightarrow \quad x_2 = 1 \\
2x_3 + 2x_4 &= 4 \quad \Rightarrow \quad x_3 = 1 \\
2x_4 &= 2 \quad \Rightarrow \quad x_4 = 1
\end{aligned}
$$

上述为回代求解过程，得 $x = (1, 1, 1, 1)^T$。

Gauss消去法：增广矩阵

$$\text{增广矩阵}\ (\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}) \xrightarrow{\text{初等行变换}} \text{上三角矩阵}\ (\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

$$\xrightarrow{\text{回代}} \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{c}\ \text{的解} \Longleftrightarrow \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}\ \text{的解}$$

Gauss消去法：增广矩阵

$(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b})$

$$\xrightarrow{\text{第三次消元}} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix} (\mathrm{U} \mid \boldsymbol{c})$$

Gauss消去法：矩阵变换

三次消元过程写成矩阵的形式

$$L_1A=\begin{pmatrix}1&&&\\-2&1&&\\-4&&1&\\-3&&&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\4&3&3&1\\8&7&9&5\\6&7&9&8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&3&5&5\\0&4&6&8\end{pmatrix}$$

$$L_2(L_1A)=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&-3&1&\\&-4&&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&3&5&5\\0&4&6&8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&0&2&2\\0&0&2&4\end{pmatrix}$$

$$L_3(L_2L_1A)=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&-1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&0&2&2\\0&0&2&4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&0&2&2\\0&0&0&2\end{pmatrix}=U$$

进而

$$L_1=\begin{pmatrix}1&&&\\-2&1&&\\-4&&1&\\-3&&&1\end{pmatrix}\quad L_2=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&-3&1&\\&-4&&1\end{pmatrix}\quad L_3=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&-1&1\end{pmatrix}\quad L_1^{-1}L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\2&1&&\\4&3&1&\\3&4&&1\end{pmatrix}$$

$$\Updownarrow\qquad\qquad\Updownarrow\qquad\qquad\Updownarrow$$

$$L_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\2&1&&\\4&&1&\\3&&&1\end{pmatrix}\quad L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&3&1&\\&4&&1\end{pmatrix}\quad L_3^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&1&1\end{pmatrix}\quad L_2^{-1}L_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\2&1&&\\10&3&1&\\11&4&&1\end{pmatrix}$$

Gauss矩阵性质

$$L_i = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{i+1,i} & \ddots & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{ni} & & & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow L_i^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{i+1,i} & \ddots & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{ni} & & & 1 \end{pmatrix}$$

注意到

$$L_i L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & -l_{i+1,i} & \ddots & & & \\ & & \vdots & & 1 & & \\ & & \vdots & & -l_{k+1,k} & \ddots & \\ & & \vdots & & \vdots & & \ddots \\ & & -l_{ni} & & -l_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}$$

刚才的计算过程可以表示为

$$L_3L_2L_1A = U$$

$$A = L_1^{-1}L_2^{-1}L_3^{-1}U$$

令

$$L = L_1^{-1}L_2^{-1}L_3^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 3 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

从而有

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{pmatrix}}_{A}$$

矩阵LU分解

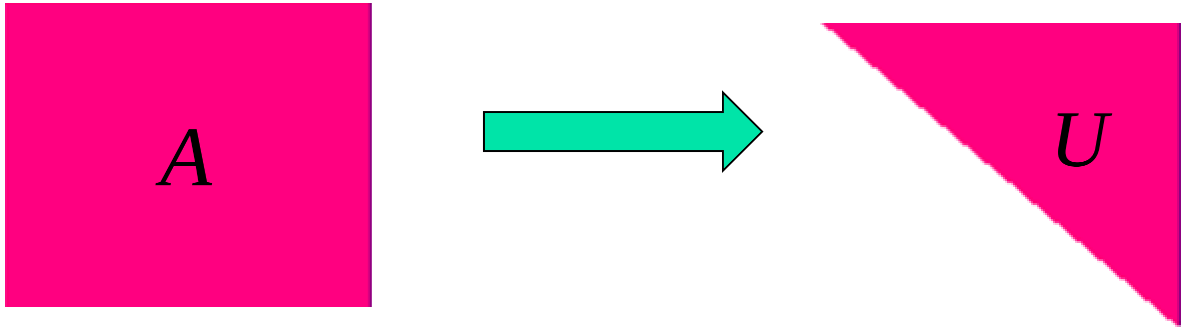
对于n阶方阵$\boldsymbol{A}$, 如果存在n阶单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和n 阶上三角矩阵$\boldsymbol{U}$，使得

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

则称其为矩阵$\boldsymbol{A}$的 $\boldsymbol{LU}$ 分解，也称Doolittle分解。

LU分解方法求解线性方程组

思路 将A化为上三角阵，再回代求解。

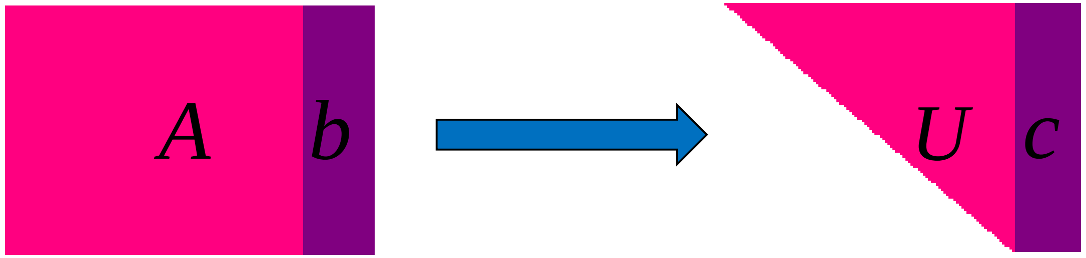


$$Ax=b \Leftrightarrow (LU)x=b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly=b \\ Ux=y \end{cases}$$

Gauss消去法求解线性方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{k1} & a_{k2}^{(1)} & \cdots & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} & b_k^{(k-1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} & b_n^{(k-1)} \end{pmatrix} \times \left(-\frac{a_{21}}{a_{11}}\right)$$

将A化为上三角阵，再回代求解$Ux=c$



Gauss消去法求解线性方程组

第一步：第i行-第1行$\times \dfrac{a_{i1}}{a_{11}}, i = 2, \cdots, n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

运算量(乘除法)：$(n\text{-}1)*(n+1)$

Gauss消去法求解线性方程组

第k步： 第i行-第k行$\times l_{i,k}\left(=\dfrac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}\right), i=k+1,\cdots,n$

$$\begin{pmatrix} a_{1,1}^{(0)} & \cdots & a_{1,k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1,n}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & a_{k,k}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k,n}^{(k-1)} & b_k^{(k-1)} \\ & & a_{k+1,k}^{(k-1)} & a_{k+1,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k-1)} & b_{k+1}^{(k-1)} \\ & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & a_{n,k}^{(k-1)} & a_{n,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{n,n}^{(k-1)} & b_n^{(k-1)} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(0)} & \cdots & a_{1,k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1,n}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k,n}^{(k-1)} & b_k^{(k-1)} \\ & & & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} & b_{k+1}^{(k)} \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{n,n}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

运算量： (n－k)*(1＋n－k＋1)=(n－k)(n－k＋2)

Gauss消去法求解线性方程组

回代法求解线性方程组Ux=c

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

$$x_k = \frac{b_k^{(k-1)} - a_{k,k+1}^{(k-1)} x_{k+1} - \cdots - a_{kn}^{(k-1)} x_n}{a_{kk}^{(k-1)}} \quad k = n, n-1, \ldots, 1$$

第k步计算量(乘除法次数)为： $n-k+1$

Gauss消去法求解线性方程组

Gauss消去法求解n阶线性方程组的总计算量(乘除法次数)为:

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)(n-k+2) = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n \\ \sum_{k=1}^{n} (n-k+1) = \frac{n(n+1)}{2} \end{cases} \qquad \frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3}$$

当n较大时，它和 $\qquad$ 同阶的。5825（n=25）

LU分解方法及其计算量

$$L_{n-1}\cdots L_2 L_1 A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n}\\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)}\\ & & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots\\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)}\\ & & & & \ddots & \cdots\\ & & & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}=U$$

$$L_1=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -a_{21}/a_{11} & 1 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ -a_{k1}/a_{11} & & & 1 & \\ \vdots & & & & \ddots & \\ -a_{n1}/a_{11} & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_2=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & -a_{32}^{(1)}/a_{22}^{(1)} & \ddots & & \\ & \vdots & & 1 & \\ & -a_{n2}^{(1)}/a_{22}^{(1)} & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_{n-1}=\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 & \\ & & & -a_{n,n-1}^{(n-2)}/a_{n-1,n-1}^{(n-2)} & 1 \end{pmatrix}$$

运算量:

第1步: (n－1)*n

第2步: (n－2)*(n－1)

第n-1步: 1*2

LU分解方法及其计算量

n−1步以后，有 $L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1A=U$

$$A=LU$$

$$L=L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ l_{21} & 1 & & & & \\ \vdots & l_{32} & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & & 1 & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix},\quad l_{ik}=\frac{a_{ik}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}}\qquad U=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

LU分解方法及其计算量

回代法求解线性方程组Ly=b

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ l_{21} & 1 & & & & \\ \vdots & l_{32} & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & & 1 & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$y_k = b_k - l_{k1}y_1 - \cdots - l_{k,k-1}y_{k-1}$$

第k步计算量(乘除法次数)为： $k-1$

LU分解方法及其计算量

回代法求解线性方程组

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

$$x_k = \frac{b_k^{(k-1)} - a_{k,k+1}^{(k-1)} x_{k+1} - \cdots - a_{kn}^{(k-1)} x_n}{a_{kk}^{(k-1)}} \quad k = n, n-1, \ldots, 1$$

第k步计算量(乘除法次数)为： $n-k+1$

LU分解方法及其计算量

LU分解法求解n阶线性方程组的总计算量(乘除法次数)为:

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+1) = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n \\ \sum_{k=1}^{n}(k-1) = \frac{n(n-1)}{2} \\ \sum_{k=1}^{n}(n-k+1) = \frac{n(n+1)}{2} \end{cases}$$

$$\frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3}$$

Gauss消去法VS LU分解方法

对于单个线性方程组$Ax=b$

$$(A,\ b) \longrightarrow (U,\ c)$$

$$Ux=c$$

$$A=LU$$

$$Ly=b$$

$$Ux=y$$

计算量相同

Gauss消去法VS LU分解方法

$$Ax = b_1 \quad (A, b_1) \Rightarrow (U, c_1) \quad Ux = c_1$$

$$\cdots \qquad \Downarrow \qquad \cdots$$

$$Ax = b_m \quad (A, b_m) \Rightarrow (U, c_m) \quad Ux = c_m$$

m次LU分解

例：对于多个线性方程组 $Ax = b_1, \ldots, b_m$

$$Ly_1 = b_1 \quad Ux = y_1$$

$$A = LU$$

$$Ly_m = b_m \quad Ux = y_m$$

1次LU分解

Gauss消去法VS LU分解方法

例：对于迭代公式 $Ax^{(k+1)} = x^{(k)}$， $x^{(0)}$ 给定，求 $x^{(m)}$

m次LU分解

$$\left(A, x^{(0)}\right) \Rightarrow \left(U, y^{(0)}\right)$$

$$Ux^{(1)} = y^{(0)}$$

$$\vdots$$

$$\left(A, x^{(m-1)}\right) \Rightarrow \left(U, y^{(m-1)}\right)$$

$$Ux^{(m)} = y^{(m-1)}$$

$$A = LU$$

1次LU分解

$$Ly^{(0)} = x^{(0)}$$

$$Ux^{(1)} = y^{(0)}$$

$$\vdots$$

$$Ly^{(m)} = x^{(m-1)}$$

$$Ux^{(m)} = y^{(m)}$$

右端项无法直接列出，LU分解方法节省计算量

Gauss消去法VS LU分解方法

例：对于线性方程组$A^2B^2x=b$

1、首先计算系数矩阵，再LU分解方法

$\frac{10}{3}n^3$

$$C=A^2B^2 \quad Cx=b$$

V

2、单个矩阵递进计算

$\frac{4}{3}n^3$

$$AABBx=b \quad Az_1=b,\ Az_2=z_1,\ Bz_3=z_2,\ Bx=z_3$$

V

3、LU分解算法

$\frac{2}{3}n^3$

$$A=L_1U_1, B=L_2U_2 \quad L_1U_1L_1U_1L_2U_2L_2U_2x=b$$

LU分解可执行条件

主元 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$

A 的k阶顺序主子式

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{L}_1^* & \boldsymbol{O} \\ * & \boldsymbol{L}_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{U}_1 & \boldsymbol{U}_2 \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{U}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{L}_1^* \boldsymbol{U}_1 & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{D}_k = \det(\boldsymbol{L}_1^* \boldsymbol{U}_1) = \det(\boldsymbol{L}_1^*) \det(\boldsymbol{U}_1) = \det(\boldsymbol{U}_1) = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(1)} \cdots a_{k-1,k-1}^{(k-2)} a_{kk}^{(k-1)}$$

$$D_{k-1} = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(1)} \cdots a_{k-1,k-1}^{(k-2)}$$

令 $\mathbf{D}_0 = 1$, 则 $a_{kk}^{(k-1)} = \dfrac{\boldsymbol{D}_k}{\boldsymbol{D}_{k-1}}, k = 1,2,\ldots,n-1$

LU分解存在唯一性定理

矩阵LU分解存在唯一性

如果n阶矩阵A的前n-1阶顺序主子式均不为零，则必有单位下三角矩阵L和上三角矩阵U，使得 $A=LU$，而且L和U是唯一存在的。

P85 习题2 下述矩阵能否LU分解，是否唯一？

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&4&1\\4&6&7\end{pmatrix}\xrightarrow{\begin{pmatrix}1&&\\-2&1&\\-4&&1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}1&2&3\\0&0&-5\\0&-2&5\end{pmatrix}$$

A的前2阶顺序主子式为 1,0　不能做LU分解!

$$\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1&1&1\\2&2&1\\3&3&1\end{pmatrix}\xrightarrow{\boldsymbol{L}_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&\\-2&1&\\-3&&1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}1&2&3\\0&0&-1\\0&0&-2\end{pmatrix}$$

B的前2阶顺序主子式为 1,0　可以LU分解，但不唯一!

$$
\boldsymbol{C}=\begin{pmatrix}1&2&6\\2&5&15\\6&15&46\end{pmatrix}\xrightarrow{\boldsymbol{L}_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&\\-2&1&\\-6&&1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}1&2&6\\0&1&3\\0&3&10\end{pmatrix}\xrightarrow{\boldsymbol{L}_2^{-1}=\begin{pmatrix}1&&\\&1&\\&-3&1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}1&2&6\\0&1&3\\0&0&1\end{pmatrix}
$$

C的前2阶顺序主子式为 1,1　　可以LU分解，且唯一!

Doolittle公式

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

$$\begin{cases} u_{1k} = a_{1k}, & k = 1, \ldots, n, \\ l_{k1} = \dfrac{a_{k1}}{u_{11}}, & k = 2, \ldots, n. \end{cases} \qquad \begin{cases} u_{ij} = a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, & j = i, \ldots, n, \\ l_{ji} = \dfrac{a_{ji} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki}}{u_{ii}}, & j = i+1, \ldots, n. \end{cases}$$

LU分解存储

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & \cdots & \cdots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & \\ l_{21} & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & & & 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \cdots & \cdots & \\ l_{n1} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & u_{nn} \end{pmatrix}$$

Crout分解

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

Crout存储

$$\begin{pmatrix} l_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & l_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & u_{n-1,n} \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & l_{nn} \end{pmatrix}$$

LDU分解

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \cdots & \cdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

LDU存储

$$\begin{pmatrix} d_1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & d_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & u_{n-1,n} \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & d_n \end{pmatrix}$$

LU分解法求矩阵逆

例：利用LU分解求矩阵A的逆

$$A=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\4&3&3&1\\8&7&9&5\\6&7&9&8\end{pmatrix}$$

$$A^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{9}{4}&-\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}&\frac{1}{4}\\-3&\frac{5}{2}&-\frac{1}{2}&0\\-\frac{1}{2}&-1&1&-\frac{1}{2}\\\frac{3}{2}&-\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$A=LU=\begin{pmatrix}1&&&\\2&1&&\\4&3&1&\\3&4&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\&1&1&1\\&&2&2\\&&&2\end{pmatrix}$$

解：设矩阵A的逆为

$$A^{-1}=\begin{pmatrix}x_1&x_2&x_3&x_4\end{pmatrix}$$

求解

$$AA^{-1}=I \Longleftrightarrow Ax_1=e_1,Ax_2=e_2,Ax_3=e_3,Ax_4=e_4$$

$$Ly_1=e_1,Ux_1=y_1,x_1=\left(\frac{9}{4},-3,-\frac{1}{2},\frac{3}{2}\right)^T$$

$$Ly_2=e_2,Ux_2=y_2,x_2=\left(-\frac{3}{4},\frac{5}{2},-1,-\frac{1}{2}\right)^T$$

$$Ly_3=e_3,Ux_3=y_3,x_3=\left(-\frac{1}{4},-\frac{1}{2},1,-\frac{1}{2}\right)^T$$

$$Ly_4=e_4,Ux_4=y_4,x_4=\left(\frac{1}{4},0,-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)^T$$

存在的问题：

- 有些有解的问题，不能用Gauss消元求解。
- 如果某个 $a_{kk}^{(k-1)}$ 很小的话，会引入大的误差。

改进：选主元策略

Gauss列主元消去法与带列主元的LU分解

例：在一台八位十进制的计算机上，用Gauss消去法解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 \\ -2 & 1.072 & 4.643 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

解：

$$(\mathbf{A}\,|\,\mathbf{b})=\begin{pmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 4.643 & 3 \end{pmatrix}\xrightarrow{\text{第二次消元}}\begin{pmatrix} \mathbf{10^{-8}} & \mathbf{2} & \mathbf{3} & \mathbf{1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0.2\times10^{9}} & \mathbf{0.3\times10^{9}} & \mathbf{0.1\times10^{9}} \\ \mathbf{0} & 0.4\times10^{9} & 0.6\times10^{9} & 0.2\times10^{9} \end{pmatrix}=(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

- $Ux=c$ 有无穷多解
- 原方程组有唯一解 $\det(\boldsymbol{A})\neq 0$

小主元作除数导致舍入误差使解面目全非!

为避免小主元作除数、或0作分母，在Gauss消去法中**增加选主元**的过程

列选主元过程

- 在第k列主对角元以下（含主对角元）元素中挑选绝对值最大的数（称为列主元）
- 通过初等行交换，使得该数位于主对角线上

Gauss列主元消去法

将在消元过程中，每一步都按列选主元的Guass消去法称之为Gauss列主元消去法.

例：用Gauss列主元消去法解上述方程组

解：

$$(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 4.643 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{选列主元 交换第一和第三行}} \begin{pmatrix} -2 & 1.072 & 4.643 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{第一次消元}} \begin{pmatrix} -2 & 1.072 & 4.643 & 3 \\ 0 & 0.3176\times 10 & 0.18015\times 10 & 2.5 \\ 0 & 0.2\times 10 & 0.3\times 10 & 0.1\times 10 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{选列主元，第二次消元}} \begin{pmatrix} -2 & 1.072 & 4.643 & 3 \\ 0 & 0.3176\times 10 & 0.18015\times 10 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0.18655541\times 10 & 0.6851854 \end{pmatrix} = (\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

用回代法求 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{c}$ 的解得 $\tilde{x} = (-0.49105820, -0.05088607, 0.36725739)^T$

带列主元的LU分解

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{pmatrix}$$

$$= \boldsymbol{U}$$

上述过程可以表示为 $L_3P_3L_2P_2L_1P_1A=U$

$L_3P_3L_2P_2L_1P_1$ 并不是一个单位下三角矩阵. 改写为

$$L_3(P_3L_2P_3^{-1})(P_3P_2L_1P_2^{-1}P_3^{-1})(P_3P_2P_1)A=U$$

由 P_i 的定义知 $P_i^{-1}=P_i$, 进而，有

L的下标比P的下标小

$$\tilde{L}_2=P_3L_2P_3=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&\frac{2}{7}&1&\\&\frac{3}{7}&&1\end{pmatrix}\qquad \tilde{L}_1=P_3P_2L_1P_2P_3=\begin{pmatrix}1&&&\\-\frac{3}{4}&1&&\\-\frac{1}{2}&&1&\\-\frac{1}{4}&&&1\end{pmatrix}$$

$\tilde{L}_i$ 与 L_i 结构相同,只是下三角部分的元素进行相应的对调

$$L_3\tilde{L}_2\tilde{L}_1(P_3P_2P_1)A = U$$

进一步，得 $PA = LU$ 其中

$$P = P_3P_2P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L = \tilde{L}_1^{-1}\tilde{L}_2^{-1}L_3^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{2}{7} & 1 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{7} & \frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}$$

$$=$$

P A L U

一般情形

如果A为n阶方阵，进行列主元LU分解过程为

$$L_{n-1}P_{n-1}\cdots L_2P_2L_1P_1A=U \longrightarrow (L_{n-1}\tilde{L}_{n-2}\cdots\tilde{L}_2\tilde{L}_1)(P_{n-1}\cdots P_2P_1)A=U$$

其中 $\tilde{L}_k=P_{n-1}\cdots P_{k+1}L_kP_{k+1}\cdots P_{n-1}$ 令

$$L=(L_{n-1}\tilde{L}_{n-2}\cdots\tilde{L}_2\tilde{L}_1)^{-1} \quad P=P_{n-1}\cdots P_2P_1 \quad \text{则} \quad PA=LU$$

矩阵列主元LU分解

对任意n阶矩阵A，均存在置换矩阵P、单位下三角矩阵L和上三角矩阵U，使得

$$PA=LU \quad \text{(P，L可以不同，分解不唯一)}$$

LU分解不一定存在。

列主元LU分解一定存在，但不一定唯一（P、L不唯一）。

列主元LU分解法求线性方程组

$$A = LU \qquad \det(A) = \det(L)\det(U) = \det(U)$$

$$Ax = b \Leftrightarrow L(Ux) = b \Leftrightarrow \begin{cases} Lc = b \\ Ux = c \end{cases}$$

$$PA = LU \qquad \det(P)\det(A) = \det(PA) = \det(L)\det(U) = \det(U)$$

$$\det(P) = (-1)^s, s\text{为换行次数}$$

$$Ax = b \Leftrightarrow PAx = Pb \Leftrightarrow L(Ux) = Pb \Leftrightarrow \begin{cases} Lc = Pb \\ Ux = c \end{cases}$$

例　用Gauss列主元消去法解如下方程组并给出$PA=LU$分解。

解：

$$(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b})=\begin{pmatrix}0&-6&-1&-2\\1&2&2&4\\2&-2&1&1\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{选列主元，交换第1和第3行}}\begin{pmatrix}2&-2&1&1\\1&2&2&4\\0&-6&-1&-2\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{第一次消元}}\begin{pmatrix}2&-2&1&1\\0&3&\frac{3}{2}&\frac{7}{2}\\0&-6&-1&-2\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{选列主元}}\begin{pmatrix}2&-2&1&1\\0&-6&-1&-2\\0&3&\frac{3}{2}&\frac{7}{2}\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{第二次消元}}\begin{pmatrix}2&-2&1&1\\0&-6&-1&-2\\0&3&1&\frac{5}{2}\end{pmatrix}$$

用回代法求的解得：$\boldsymbol{x}=\left(-\frac{5}{6},-\frac{1}{12},\frac{5}{2}\right)^T$。

求相应的$PA=LU$分解

第一次选列主元，交换第1行和第3行，左乘置换矩阵 P_1

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -6 & -1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & -6 & -1 \end{pmatrix}$$

第一次消元，消去第一列主对角元以下的非零元，左乘 L_1

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & -6 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} \\ 0 & -6 & -1 \end{pmatrix}$$

第二次选列主元，交换第2行和第3行，左乘置换矩阵$\boldsymbol{P}_2$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} \\ 0 & -6 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & -6 & -1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

第二次消元，消去第二列主对角元以下的非零元，左乘$\boldsymbol{L}_2$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & -6 & -1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & -6 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}=U$$

则分解应为：

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-6&-1\\1&2&2\\2&-2&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\\frac{1}{2}&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&-\frac{1}{2}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&-2&1\\0&-6&-1\\0&0&1\end{pmatrix}$$

即有：$\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$

$$\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-6&-1\\1&2&2\\2&-2&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&-2&1\\0&-6&-1\\0&0&1\end{pmatrix}$$

对称正定矩阵Cholesky分解

将对称正定阵 A 做 LU 分解，得到L和U，进一步

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

即 $A=L(D\tilde{U})$，由 A 对称，得 $L(D\tilde{U})=\tilde{U}^T(DL^T)$

由 A 的LU分解的唯一性 $\longrightarrow L=\tilde{U}^T$ 即 $A=LDL^T$

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

对称正定阵的分解为：$\boxed{A=\tilde{L}\tilde{L}^T}$

对称正定矩阵Cholesky分解

对任意n阶对称正定矩阵 A，均存在下三角矩阵L使 $A=LL^{\mathrm{T}}$ 成立，称其为对称正定矩阵A的Cholesky分解. 进一步地, 如果规定 L 的对角元为正数，则 L 是唯一确定的。

计算对称正定矩阵的Cholesky分解：

- 证明过程
- 直接分解方法

Cholesky分解法

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

$$a_{11} = l_{11}^2 \quad \Rightarrow l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

$$a_{21} = l_{21} l_{11} \Rightarrow l_{21} = a_{21} / l_{11}$$

$$a_{n1} = l_{n1} l_{11} \Rightarrow l_{n1} = a_{n1} / l_{11}$$

$$a_{jj} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 + l_{jj}^2, \; j = 1, \ldots n$$

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

$$l_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \; j = 1, \ldots, n \qquad l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}}, i = j+1, \ldots, n$$

平方根法求解线性方程组

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

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Leftrightarrow \boldsymbol{L}(\boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} \Leftrightarrow \begin{cases} \boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \end{cases}$$

$$\det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{L})\det(\mathbf{L}^T) = \prod_{k=1}^{n} l_{kk}^2$$

平方根法求解线性方程组

Step1. 对矩阵A进行Cholesky分解，即$A=LL^T$

$$l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2\right)^{\frac{1}{2}}\quad j=1,2,\cdots,n\qquad l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}\right)/l_{jj}\ ,\ i=j+1,j+2,\ldots,n$$

计算次序为$l_{11},l_{21},\cdots,l_{n1},l_{22},l_{32},\cdots,l_{n2},\cdots,l_{nn}$　计算量（乘除法次数）

$$\sum_{j=1}^{n}j(n-j+1)=\frac{n^3}{6}+\frac{n^2}{2}-\frac{n}{3}$$

Step2. 求解下三角形方程组 $Ly=b$

$$y_1=b_1/l_{11},y_i=\left(b_i-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}y_k\right)/l_{ii}\quad ,\quad i=2,3,\cdots,n$$

平方根法通常是数值稳定的，不必选主元

Step3. 求解上三角线性方程组$L^Tx=y$

$$x_n=y_n/l_{nn},x_i=\left(y_i-\sum_{k=i+1}^{n}l_{ki}x_k\right)/l_{ii}\quad ,\quad i=n-1,n-2,\cdots,1$$

三对角矩阵的三角分解

设三对角矩阵

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

如果矩阵A可以进行LU分解$A=LU$,其中

$$L=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix},\quad U=\begin{pmatrix} u_1 & d_1 & & & \\ & u_2 & d_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & d_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

$$d_i = c_i$$

$$u_1 = b_1, \quad u_i = b_i - l_i \cdot c_{i-1}$$

$$l_i = a_i / u_{i-1}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & d_1 & & & \\ & u_2 & d_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & d_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix}$$

计算次序 $u_1 \to l_2 \to u_2 \to l_3 \to u_3 \to \cdots \to l_n \to u_n$

追赶法求解三角形线性方程组

Step1. 对矩阵A进行LU分解，公式如下：

$$\begin{cases} d_i = c_i, & i = 1, 2, \cdots, n-1; \\ u_1 = b_1, & \\ l_i = a_i / u_{i-1}, & i = 2, 3, \cdots, n; \\ u_i = b_i - l_i c_{i-1}, & i = 2, 3, \cdots, n. \end{cases}$$

LU分解计算量：乘除法2(n-1),加减法n-1

Step2. 求解下三角形方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}$$

$$y_1 = f_1$$

$$l_i \cdot y_{i-1} + y_i = f_i$$

$$y_i = f_i - l_i \cdot y_{i-1}$$

计算量：乘除法n-1,加减法n-1

Step3. 求解上三角形方程组

$$\begin{pmatrix} u_1 & d_1 & & & \\ & u_2 & d_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & d_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$x_n = y_n / u_n$$

$$u_i \cdot x_i + d_i x_{i+1} = y_i$$

$$x_i = (y_i - d_i x_{i+1}) / u_i$$

解方程计算量：乘除法2(n-1)+1,加减法n-1

追赶法适用条件

设具有三对角形式的矩阵A，满足条件

(1) $|b_1| > |c_1| > 0$

(2) $|b_n| > |a_n| > 0$

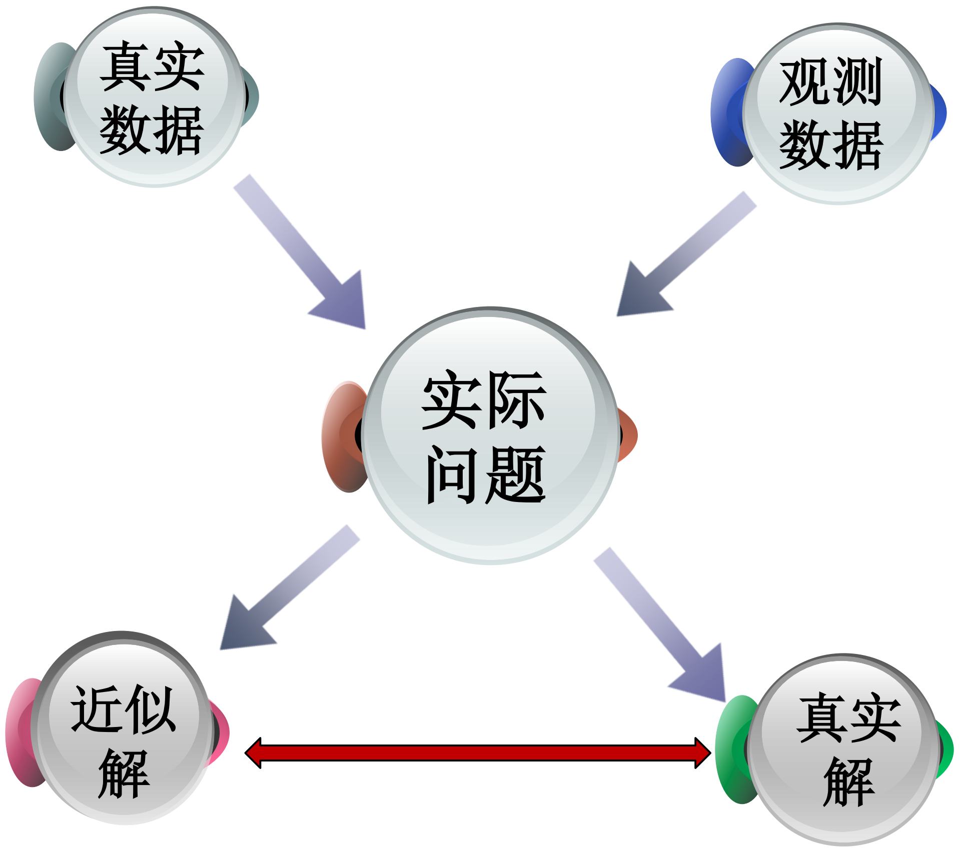
(3) $|b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \quad a_i c_i \neq 0, i = 2,3,\cdots n-1$

对角占优

则方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{f}$ 可用追赶法求解,且解存在唯一.

- 计算量小，共8n-7次四则运算
- 存储量小，仅需要4个一维数组a,b,c,f,其中d,l,u,x分别存在c,a,b,f中。
- 当A为对角占优时，数值稳定（中间数有界）

条件数与方程组的性态

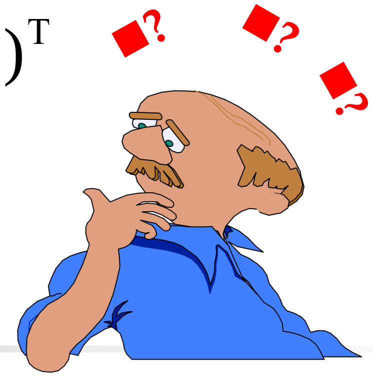

真实
数据
观测
数据
实际
问题
近似
解
真实
解

例题：线性方程组解变化

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.00001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 8.00001 \end{pmatrix} \longrightarrow x = (1, 1)^T$$

问题的小的改变导致解的大的改变

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.00001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 8.00002 \end{pmatrix} \longrightarrow x = (-2, 2)^{\mathrm{T}}$$



病态、良态矩阵

病态、良态

- 如果线性方程组$Ax=b$中，A或b的元素的微小变化就会引起方程组解的巨大变化，则称方程组为**病态方程组**，矩阵A称为**病态矩阵**.
- 否则称方程组为**良态方程组**，矩阵称为**良态矩阵**

敏度定义及目的

敏度分析

研究计算问题的原始数据有微小的改变将会引起解的多大变化。

敏度分析目的：

寻找刻画问题“病态”标准的量。

例:线性方程组敏度分析

求解 $Ax=b$ 时，A 和 b 的误差对解 x 有何影响?

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \ ?????? \ \left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}, \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}\right)$$

简单情形：

系数矩阵A 精确

常向量b有误差δb

得到的解有误差δx

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \ ?????? \ \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

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

$$A(x+\delta x)=b+\delta b \qquad \delta x = A^{-1}\delta b$$

$$Ax=b$$

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

$$\|b\| = \|Ax\| \le \|A\|\|x\|$$

矩阵条件数

矩阵条件数

设A为非奇异矩阵，$\|\cdot\|$为矩阵的算子范数，则称

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})=\|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|$$

为矩阵A的条件数。

常用的条件数为：

$$\mathrm{cond}_\infty(\boldsymbol{A})=\|\boldsymbol{A}\|_\infty\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_\infty \qquad \mathrm{cond}_1(\boldsymbol{A})=\|\boldsymbol{A}\|_1\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_1$$

$$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{A})=\|\boldsymbol{A}\|_2\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_2=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A})}{\lambda_{\min}(\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A})}}$$

分别称为矩阵A的∞-条件数、1-条件数和2-条件数。

矩阵条件数性质

(1)非负性？？ $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) \geq 1$

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) = \left\|A^{-1}\right\|\left\|A\right\| \geq \left\|A^{-1}A\right\| = \left\|I\right\| = 1$$

(2)齐次性？？ $\mathrm{cond}(\alpha\boldsymbol{A}) = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$, $\alpha \neq 0$, $\alpha \in \mathbf{R}$

$$\mathrm{cond}(\alpha\boldsymbol{A}) = \left\|\alpha\boldsymbol{A}\right\| \cdot \left\|(\alpha\boldsymbol{A})^{-1}\right\| = |\alpha| \cdot \left\|\boldsymbol{A}\right\| \cdot \frac{1}{|\alpha|} \cdot \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\| = \left\|\boldsymbol{A}\right\| \cdot \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\| = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$$

(3)三角不等式？？

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \left\|A+B\right\|\left\|(A+B)^{-1}\right\| \quad \left\|\mathbf{A}\right\|\left\|\mathbf{A}^{-1}\right\| + \left\|\mathbf{B}\right\|\left\|\mathbf{B}^{-1}\right\| = \mathrm{cond}(\mathbf{A}) + \mathrm{cond}(\mathbf{B})$$

(4)相容性？？ $\mathrm{cond}(\boldsymbol{AB}) \leq \mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) \cdot \mathrm{cond}(\boldsymbol{B})$

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{AB}) = \left\|\boldsymbol{AB}\right\|\left\|(\boldsymbol{AB})^{-1}\right\| \quad \leq \left\|\boldsymbol{A}\right\| \cdot \left\|\boldsymbol{B}\right\| \cdot \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\| \cdot \left\|\boldsymbol{B}^{-1}\right\| = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) \cdot \mathrm{cond}(\boldsymbol{B})$$

矩阵条件数性质

(5) $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A}^{-1})$

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}^{-1}) = \left\|A^{-1}\right\| \cdot \left\|(A^{-1})^{-1}\right\| = \left\|A^{-1}\right\| \cdot \left\|A\right\| = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$$

(6) 如果U为酉（正交）矩阵，则

$$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{U}) = 1 \qquad \mathrm{cond}_2(\boldsymbol{UA}) = \mathrm{cond}_2(\boldsymbol{AU}) = \mathrm{cond}_2(\boldsymbol{A})$$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \mathrm{cond}(A)\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

- cond($\boldsymbol{A}$) 越大，解的相对误差界可能越大，对求解线性方程组来说就越可能呈现病态。
- cond($\boldsymbol{A}$) 多大A算病态，通常没有具体的定量标准；
- cond($\boldsymbol{A}$) 越小，解的相对误差界越小，呈现良态。

病态矩阵

例：对称正定矩阵H的条件数$\mathrm{cond}_\infty(H)$

解：

$$H=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\frac{1}{4}\\\frac{1}{3}&\frac{1}{4}&\frac{1}{5}\\\frac{1}{4}&\frac{1}{5}&\frac{1}{6}\end{pmatrix}\qquad H^{-1}=\begin{pmatrix}72&-240&180\\-240&900&-720\\180&-720&600\end{pmatrix}$$

$$\|H\|_\infty=\frac{13}{12}$$

$$\|H^{-1}\|_\infty=1860$$

$$\mathrm{cond}_\infty(H)=2.015\times10^3$$

例：数据拟合和函数逼近中的Hilbert矩阵

$$H_n=(h_{ij})_{n\times n}=\left(\frac{1}{i+j-1}\right)_{n\times n}=\begin{pmatrix}1&\frac{1}{2}&\cdots&\frac{1}{n}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\cdots&\frac{1}{n+1}\\\vdots&\vdots&\cdots&\vdots\\\frac{1}{n}&\frac{1}{n+1}&\cdots&\frac{1}{2n-1}\end{pmatrix}$$

$$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{H}_4)=1.5514\times10^4$$

$$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{H}_6)=1.4951\times10^7$$

$$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{H}_8)=1.525\times10^{10}$$

例题分析

在前面的例子中 $\delta b=(0,0.00001)^T$，

$$A=\begin{pmatrix}2 & 6\\ 2 & 6.00001\end{pmatrix},\quad \text{易求}\quad A^{-1}=\begin{pmatrix}300000.5 & -300000\\ -100000 & 100000\end{pmatrix}$$

则A的条件数为：

$$\begin{aligned}\text{cond}_\infty(\boldsymbol{A})&=\|A\|_\infty\|A^{-1}\|_\infty\\&=8.00001\times 600000.5\\&\approx 4.8\times 10^6\end{aligned}$$

解的相对误差界为：

$$\begin{aligned}\frac{\|\boldsymbol{\delta x}\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}\|_\infty}&\le \text{cond}_\infty(\boldsymbol{A})\frac{\|\boldsymbol{\delta b}\|_\infty}{\|\boldsymbol{b}\|_\infty}\\&\approx 4.8\times 10^6\times\frac{0.00001}{8.00001}\\&\approx 6\approx 600\%\end{aligned}$$

系数矩阵和右端项均扰动

原方组 $Ax=b$ ⟹ 扰动后的方程组 $(A+\delta A)(x+\delta x)=b+\delta b$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}=\frac{\|(A+\delta A)^{-1}(\delta b-\delta Ax)\|}{\|x\|}$$

$$\le\|(A+\delta A)^{-1}\|\left(\frac{\|\delta b\|}{\|x\|}+\|\delta A\|\right)$$

$$\le\|A^{-1}\|\|(I+\delta A\,A^{-1})^{-1}\|\left(\frac{\|\delta b\|}{\|x\|}+\|\delta A\|\right)$$

$$\le\frac{\|A^{-1}\|}{1-\|\delta A\|\|A^{-1}\|}\left(\frac{\|A\|\|\delta b\|}{\|b\|}+\|\delta A\|\right)$$

$$\le\frac{\|A^{-1}\|\|A\|}{1-\|\delta A\|\|A^{-1}\|}\left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}+\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}\right).$$

定理：对于线性方程组$Ax=b$，A为非奇异矩阵，δA和δb分别为 A 和 b 的扰动。若扰动δA非常小，使得

$$\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1,$$

则

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

解的余量与相对误差间的关系

称$\|b - A\tilde{x}\|$为近似解$\tilde{x}$的余量。　　称$\|x - \tilde{x}\|$为近似解$\tilde{x}$的误差。

余量与误差

设$Ax = b$，A为非奇异矩阵，b为非零向量，则方程组近似解$\tilde{x}$的事后误差估计式为

$$\frac{1}{\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})}\frac{\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}\|}{\|\boldsymbol{b}\|} \le \frac{\|\tilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \le \operatorname{cond}(\boldsymbol{A})\frac{\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$$

- 若cond(A)≈1时，余量的相对误差可作为解的相对误差的一个好的度量
- 对于病态方程组，虽然余量的相对误差已经很小，但解的相对误差仍然很大。

条件数与矩阵奇异性

条件数几何意义

设方阵A非奇异，则

$$\min\left\{\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2}: A+\delta A\text{奇异}\right\}=\frac{1}{\mathrm{cond}_2(A)}$$

当矩阵A十分病态时，就说明A已十分接近一个奇异矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & 6\\ 2 & 6.00001\end{pmatrix}\qquad \det(\boldsymbol{A})=0.00002$$

矩阵的QR分解

问题

- 回忆：求解线性方程组与矩阵的三角分解

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b} \xrightarrow{\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}} \begin{cases} Ly=b \\ Ux=y \end{cases}$$

- 问题：条件数与方程组的性态

$$cond(\boldsymbol{A})=cond(\boldsymbol{LU})\le cond(\boldsymbol{L})\cdot cond(\boldsymbol{U})$$

LU分解是否能保持条件数?

例题：条件数变化

$$A=\begin{pmatrix}1&1&3\\2&4&1\\2&0&2\end{pmatrix}=LU=\begin{pmatrix}1&0&0\\2&1&0\\2&-1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&3\\0&2&-5\\0&0&-9\end{pmatrix}$$

$$cond_2(\mathbf{A})\approx 4.89894 \qquad cond_2(\mathbf{L})\approx 14.9224, cond_2(\mathbf{U})\approx 14.2208.$$

矩阵的LU分解不一定保证条件数!

解决方法

利用正交变换实现矩阵分解

$$A=QR$$

Q为正交阵，R为上三角阵

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b} \xrightarrow{A=QR} \begin{cases} Qy=b \\ Rx=y \end{cases} \Longleftrightarrow \mathbf{Rx}=\mathbf{Q}^T\mathbf{b}$$

QR分解

QR分解

如果 $\boldsymbol{A} \in \mathrm{R}^{m \times n}(m \geq n), r(\boldsymbol{A}) = n,$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{R}_1 \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix} = \boldsymbol{QR}$$

其中 $\boldsymbol{Q}$ 为正交阵，$\boldsymbol{R}_1$ 为对角元非零的上三角矩阵。

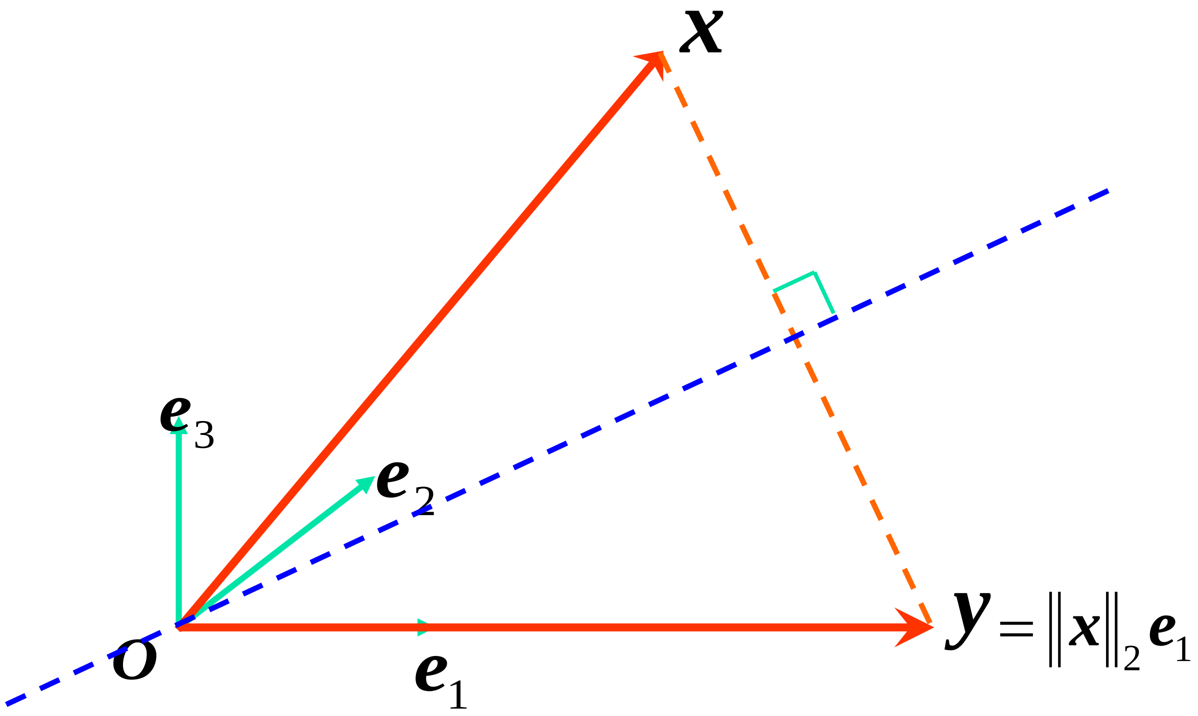
矩阵消元的几何观点

$$A=\begin{pmatrix}\times&\times&\times\\\times&\times&\times\\\times&\times&\times\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{用正交变换}Q_1}\begin{pmatrix}\times&\times&\times\\0&\times&\times\\0&\times&\times\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{用正交变换}Q_2}\begin{pmatrix}\times&\times&\times\\0&\times&\times\\0&0&\times\end{pmatrix}=R$$

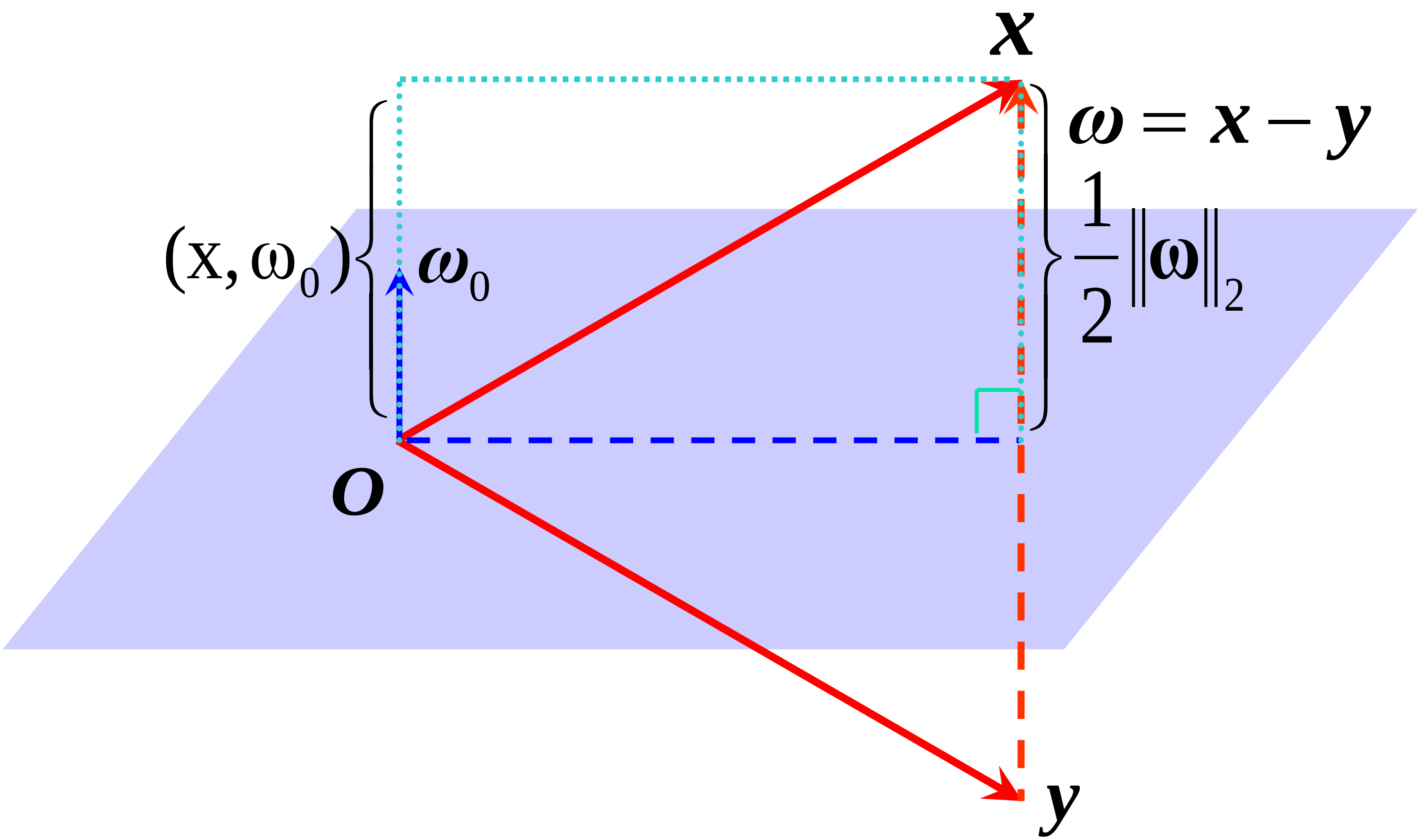
$$A=(a_1,a_2,\cdots,a_n),\quad a_1\to Q_1a_1=\begin{pmatrix}\times\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}$$

几何上看，就是把空间中的一个向量通过**正交变换**，变为落在第一个坐标轴上的向量。

镜面反射



如何将任意非零向量$\boldsymbol{x}$变为落在第一个坐标轴$\boldsymbol{e}_1$上的向量$\boldsymbol{y}=\|\boldsymbol{x}\|_2\boldsymbol{e}_1$？



$$\omega_0 = \frac{\omega}{\|\omega\|_2}, \quad \omega = x - y = \|\omega\|_2 \omega_0, \quad (x, \omega_0) = \frac{1}{2}\|\omega\|_2$$

Householder矩阵

$$\omega_0 = \frac{\omega}{\|\omega\|_2}, \quad \omega = x - y = \|\omega\|_2 \omega_0, \quad \|\omega\|_2 = 2(x, \omega_0) = 2\omega_0^T x$$

$$x - y = 2(\omega_0^T x)\omega_0 = 2\omega_0(\omega_0^T x) = 2\frac{\omega(\omega^T x)}{\|\omega\|_2^2} = 2\frac{(\omega\omega^T)x}{\omega^T \omega}$$

$$y = x - 2\frac{\omega\omega^T}{\omega^T\omega}x = (I - \frac{2}{\omega^T\omega}\omega\omega^T)x := H(\omega)x$$

Householder矩阵

设$\omega \in \mathbf{R}^n, \omega \neq 0$, 称初等矩阵

$$H(\omega) = I - \frac{2}{\omega^T\omega}\omega\omega^T$$

为Householder矩阵

Householder矩阵的性质

1. 对称性： $\boldsymbol{H}(\omega)^T=\boldsymbol{H}(\omega)$

$$\boldsymbol{H}(\omega)^T=\left(\boldsymbol{I}-\frac{2}{\omega^T\omega}\omega\omega^T\right)^T=\boldsymbol{I}-\frac{2}{\omega^T\omega}\left(\omega\omega^T\right)^T=\boldsymbol{I}-\frac{2}{\omega^T\omega}\omega\omega^T=\boldsymbol{H}(\omega)$$

2. 正交性： $\boldsymbol{H}(\omega)^T\boldsymbol{H}(\omega)=\boldsymbol{I}$

$$\boldsymbol{H}(\omega)^T\boldsymbol{H}(\omega)=\left(\boldsymbol{I}-\frac{2}{\omega^T\omega}\omega\omega^T\right)^2=\boldsymbol{I}-\frac{2}{\omega^T\omega}\omega\omega^T-\frac{2}{\omega^T\omega}\omega\omega^T+\left(\frac{2}{\omega^T\omega}\right)^2\left(\omega\omega^T\right)\left(\omega\omega^T\right)$$

$$=\boldsymbol{I}-\frac{4}{\omega^T\omega}\omega\omega^T+\frac{4}{\left(\omega^T\omega\right)^2}\omega\left(\omega^T\omega\right)\omega^T=\boldsymbol{I}$$

3. 如果 $\boldsymbol{H}(\omega)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$, 则 $\|\boldsymbol{y}\|_2=\|\boldsymbol{x}\|_2$ (长度不变)

$$\|\boldsymbol{y}\|_2^2=\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y}=\left(\boldsymbol{H}(\omega)\boldsymbol{x}\right)^T\left(\boldsymbol{H}(\omega)\boldsymbol{x}\right)=\boldsymbol{x}^T\left(\boldsymbol{H}(\omega)^T\boldsymbol{H}(\omega)\right)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}=\|\boldsymbol{x}\|_2^2$$

4. $\boldsymbol{H}(\omega)$ 的特征值为 $n-1$ 个1和一个 -1。 $\left|\boldsymbol{H}(\omega)\right|=-1$

Householder矩阵的性质

设 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbf{R}^n$, $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{y}$, $\|\boldsymbol{x}\|_2 = \|\boldsymbol{y}\|_2$, 取$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{x} - y$ 则

$$\boldsymbol{H}(\omega)x = y$$

设 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T \in \mathbf{R}^n$ 且 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$, 取 $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{x} \pm \|\boldsymbol{x}\|_2 \boldsymbol{e}_1$ 则

$$\boldsymbol{H}(\omega)x = \mp\|\boldsymbol{x}\|_2 \boldsymbol{e}_1.$$

设 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T \in \mathbf{C}^n$ 且 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$, 取 $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{x} - \alpha\boldsymbol{e}_1$,其中 $|\alpha| = \|\boldsymbol{x}\|_2$,

且 $\alpha x^H \boldsymbol{e}_1$ 为实数, 则

$$\boldsymbol{H}(\omega)x = \alpha\boldsymbol{e}_1.$$

事实上，变换后的向量可以为 $\pm\|x\|_2 e_1$

1、**正负号的选取**

2、正负号强制选取

3、向量x的数量级较大

例： 求Householder矩阵H，使得Hx=y.

（1） $x=(-3,0,4)^T, y=(0,0,5)^T$

$$\omega = x - y = (-3,0,-1)^T \quad \omega^T\omega = 10$$

$$H(\omega) = I - 2\frac{\omega\omega^T}{\omega^T\omega} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} - \frac{2}{10}\begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}(-3,0,-1) = \begin{pmatrix} -\frac{4}{5} & 0 & -\frac{3}{5} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{3}{5} & 0 & \frac{4}{5} \end{pmatrix}$$

例：求Householder矩阵H，使得Hx=y.

（2） $x=(\mathrm{i},-2\mathrm{i},0,2)^T, y=(\alpha,0,0,0)^T$

确定 α，需满足 $|\alpha|=\|x\|_2=\sqrt{1+4+0+4}=3$， $\alpha x^H \boldsymbol{e}_1=-\alpha\mathrm{i}$ 故 $\alpha=\pm 3\mathrm{i}$

以 $\alpha=3\mathrm{i}$ 为例． $\omega=x-y=(-2\mathrm{i},-2\mathrm{i},0,2)^T$ $\omega^H\omega=12$

$$H(\omega)=I-2\frac{\omega\omega^H}{\omega^H\omega}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&&1\end{pmatrix}-\frac{2}{12}\begin{pmatrix}-2\mathrm{i}\\-2\mathrm{i}\\0\\2\end{pmatrix}(2\mathrm{i},2\mathrm{i},0,2)=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}1&-2&0&2\mathrm{i}\\-2&1&0&2\mathrm{i}\\0&0&3&0\\-2\mathrm{i}&-2\mathrm{i}&0&1\end{pmatrix}$$

利用Householder变换求A的分解，其中 $A=\begin{pmatrix}1&1&1\\2&3&1\\2&1&-5\end{pmatrix}$.

$$a_1=\begin{pmatrix}1\\2\\2\end{pmatrix},\quad \|a_1\|_2=3,$$

$$\omega_1=a_1-\|a_1\|_2 e_1=\begin{pmatrix}1\\2\\2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}3\\0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-2\\2\\2\end{pmatrix}$$

$$Q_1=H(\omega_1)=I-\frac{2}{\omega_1^{\mathrm T}\omega_1}\omega_1\omega_1^{\mathrm T}=\begin{pmatrix}\frac{1}{3}&\frac{2}{3}&\frac{2}{3}\\\frac{2}{3}&\frac{1}{3}&\frac{-2}{3}\\\frac{2}{3}&\frac{-2}{3}&\frac{1}{3}\end{pmatrix},$$

$$Q_1A=\begin{pmatrix}3&3&-\frac{7}{3}\\0&1&\frac{13}{3}\\0&-1&-\frac{5}{3}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3&b^{\mathrm T}\\0&A_2\end{pmatrix}$$

$$\tilde{a}_1=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},\quad \|\tilde{a}_1\|_2=\sqrt{2},$$

$$\tilde{\omega}_2=\tilde{a}_1-\|\tilde{a}_1\|_2 e_1=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\sqrt{2}\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1-\sqrt{2}\\-1\end{pmatrix}$$

$$\tilde{Q}_2=H(\tilde{\omega}_2)=I-\frac{2}{\tilde{\omega}_2^{\mathrm T}\tilde{\omega}_2}\tilde{\omega}_2\tilde{\omega}_2^{\mathrm T}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2}&-\sqrt{2}\\-\sqrt{2}&-\sqrt{2}\end{pmatrix},$$

$$\tilde{Q}_2A_2=\left(H(\tilde{\omega}_2)\tilde{a}_1,H(\tilde{\omega}_2)\tilde{a}_2\right)=\begin{pmatrix}\sqrt{2}&3\sqrt{2}\\0&-\frac{4}{3}\sqrt{2}\end{pmatrix}.$$

$$Q_2=\begin{pmatrix}1&0^{\mathrm T}\\0&\tilde{Q}_2\end{pmatrix}$$

计算矩阵QR分解（续）

$$\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{A} = Q_2\begin{pmatrix} 3 & \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \\ 0 & \boldsymbol{A}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \\ 0 & \tilde{\boldsymbol{Q}}_2\boldsymbol{A}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 3 & -\frac{7}{3} \\ 0 & \sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3}\sqrt{2} \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}$$

$$\boldsymbol{Q} = (\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{Q}_1)^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{-2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{-2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & -\frac{2\sqrt{2}}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{6} \\ \frac{2}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{6} \end{pmatrix}$$

$$A = QR = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & -\frac{2\sqrt{2}}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{6} \\ \frac{2}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{6} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 3 & -\frac{7}{3} \\ 0 & \sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3}\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

计算矩阵QR分解（续）

$$A = QR = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & -\frac{2\sqrt{2}}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{6} \\ \frac{2}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 3 & -\frac{7}{3} \\ 0 & \sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3}\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & -\frac{2\sqrt{2}}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{6} \\ \frac{2}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 3 & -\frac{7}{3} \\ 0 & \sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3}\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & \frac{2\sqrt{2}}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{6} \\ \frac{2}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 3 & -\frac{7}{3} \\ 0 & \sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & \frac{4}{3}\sqrt{2} \end{pmatrix} = \tilde{\boldsymbol{Q}}\tilde{\boldsymbol{R}}$$