计算方法

令 丹

数学与统计学院

邮箱：danling@xjtu.edu.cn

第二章
解线性方程组的直接法

2. 矩阵的三角分解

矩阵的三角分解

对于系数矩阵相同，右端项不同的多个线性方程组

$$Ax = b^{(i)}, \ i = 1, 2, \cdots, m$$

若采用高斯消去法逐个求解，计算量大

$$N = m\left(\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n\right) \implies N \sim O(mn^3)$$

如何有效求解？

矩阵的三角分解

高斯消去法的消元过程

对 $k=1,\cdots,n-1$, 依次计算

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

目标：将增广矩阵 $(A^{(0)},b^{(0)})$ 通过初等行变换 (左乘矩阵) 最终变为上梯形矩阵 $(A^{(n-1)},b^{(n-1)})$, 其中 $A^{(n-1)}$ 为上三角矩阵.

高斯消去法的消元过程

若设 $A^{(k)} = LA^{(k-1)}$, 根据矩阵乘法有

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k-1)} = \sum_{m=1}^{n} L_{im} a_{mj}^{(k-1)} = a_{ij}^{(k-1)}, \quad i = 1, \cdots, k; \ j = 1, \cdots, n; \\ a_{ij}^{(k)} = \sum_{m=1}^{n} L_{im} a_{mj}^{(k-1)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik} a_{kj}^{(k-1)}, \quad i, j = k+1, \cdots, n, \end{cases}$$

于是得到

$$\begin{cases} L_{ii} = 1, \qquad i = 1, \cdots, n, \\ L_{jk} = -l_{jk}, \quad j = k+1, \cdots, n. \end{cases}$$

高斯消去法的矩阵形式

记

$$A^{(0)} \triangleq A$$

$$A^{(1)} \triangleq \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad L_1 \triangleq \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & 1 & & & \\ -l_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -l_{n1} & & & & 1 \end{pmatrix}$$

则有 $A^{(1)} = L_1 A^{(0)}$.

高斯消去法的矩阵形式

$$A^{(2)} \triangleq \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix},$$

$$L_2 \triangleq \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & -l_{32} & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & \\ & -l_{n2} & & & 1 \end{pmatrix}$$

则 $A^{(2)} = L_2 A^{(1)} = L_2 L_1 A^{(0)}$.

高斯消去法的矩阵形式

一般地，

$$A^{(k-1)} \triangleq \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{pmatrix}$$

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

高斯消去法的矩阵形式

$$A^{(k)} \triangleq \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & & \cdots & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & & \cdots & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ & & & & \vdots & & \vdots \\ & & & & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}$$

则 $A^{(k)} = L_k A^{(k-1)} = \cdots = L_k L_{k-1} \cdots L_2 L_1 A^{(0)}$.

高斯消去法的矩阵形式

由于消元过程进行了 $n-1$ 步，于是有

$$A^{(n-1)} = L_{n-1}A^{(n-2)} = \cdots = L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1A^{(0)},$$

其中

$$A^{(n-1)} \triangleq \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}.$$

同理，对于右端项有

$$b^{(n-1)} = L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1b^{(0)}.$$

高斯消去法的矩阵形式

注意到

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

则有

$$\boxed{A = A^{(0)} = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} A^{(n-1)} = LU, \quad b = b^{(0)} = Lb^{(n-1)},}$$

高斯消去法的矩阵形式

其中

$$L \triangleq L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix},$$

$$U \triangleq A^{(n-1)} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}.$$

$A = LU$，其中 L 是单位下三角矩阵, U 是上三角矩阵.

矩阵的三角分解

定理

设 A 为 n 阶矩阵, 如果 A 的顺序主子式 $D_k \neq 0$ $(k = 1, \cdots, n)$, 则 A 可以唯一地分解为一个单位下三角矩阵 L 与一个上三角矩阵 U 的乘积，即 $A = LU$.

证明 存在性：由高斯消去法的矩阵形式可得.
唯一性：(反证法) 设 A 有两种 LU 分解

$$A = L_1U_1 = L_2U_2,$$

其中 L_1, L_2 为单位下三角矩阵, U_1, U_2 为上三角矩阵. 由于 A 非奇异, 即 A 可逆. 于是有

$$A^{-1} = U_1^{-1}L_1^{-1} = U_2^{-1}L_2^{-1} \implies U_2U_1^{-1} = L_2^{-1}L_1.$$

上式中左端为上三角矩阵, 右端为单位下三角矩阵, 因此

$$U_2U_1^{-1} = L_2^{-1}L_1 = I \implies U_1 = U_2, L_1 = L_2.$$

矩阵的 LU 分解

- 矩阵的 LU 分解

  $A = LU$, 其中 L 是下三角矩阵, U 是上三角矩阵.

- 两种常见的 LU 分解

  Doolittle 分解　L 为单位下三角矩阵, U 为上三角矩阵

  Crout 分解　L 为下三角矩阵, U 为单位上三角矩阵

矩阵的 LU 分解 (Doolittle 分解)

对于给定的非奇异矩阵 A, 如何计算 L 和 U ?

设

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

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}.$$

$$\begin{cases} l_{ii} = 1, \ l_{ik} = 0, \ i < k \\ u_{kj} = 0, \ j < k \end{cases} \Longrightarrow \text{如何确定 } l_{ik} (k \leqslant i) \text{ 以及 } u_{kj} (k \leqslant j)?$$

由 $A = LU$ 可知,

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik}u_{kj}, \quad i,j = 1,2,\cdots,n.$$

矩阵的 LU 分解 (Doolittle 分解)

由 $A = LU$ 可知,

$$\boxed{a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik}u_{kj}, \quad i,j = 1,2,\cdots,n.}$$

若 $i \leqslant j$, 则有 $a_{ij} = \sum\limits_{k=1}^{i} l_{ik}u_{kj}$, 于是

$$\begin{cases} a_{1j} = l_{11}u_{1j}, \quad j = 1,2,\cdots,n \\ a_{ij} = \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} + u_{ij}, \quad i = 2,3,\cdots,n;\ j = i,i+1,\cdots,n \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} u_{1j} = a_{1j}, \quad j = 1,2,\cdots,n \\ u_{ij} = a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}, \quad i = 2,3,\cdots,n;\ j = i,i+1,\cdots,n \end{cases}$$

矩阵的 LU 分解 (Doolittle 分解)

若 $i > j$, 则有 $a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik}u_{kj}$, 于是

$$\begin{cases} a_{i1} = l_{i1}u_{11}, \quad i = 2, 3, \cdots, n \\ a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} + l_{ij}u_{jj}, \quad j = 2, 3, \cdots, n-1;\ i = j+1, \cdots, n \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} l_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{u_{11}}, \quad i = 2, 3, \cdots, n \\ l_{ij} = \dfrac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}}{u_{jj}}, \quad j = 2, 3, \cdots, n-1;\ i = j+1, \cdots, n \end{cases}$$

矩阵的 LU 分解

$A = LU$ 分解计算公式：

$$
\begin{cases}
u_{1j} = a_{1j}, \quad j = 1, 2, \cdots, n \\
l_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{u_{11}}, \quad i = 2, 3, \cdots, n \\
u_{ij} = a_{ij} - \displaystyle\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i = 2, 3, \cdots, n; \ j = i, i+1, \cdots, n \\
l_{ij} = \dfrac{a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}}{u_{jj}}, \quad j = 2, 3, \cdots, n-1; \ i = j+1, \cdots, n
\end{cases}
$$

先计算矩阵 U 的第 i 行，再计算矩阵 L 的第 i 列.

矩阵 LU 分解的计算量

乘法：

$$N_1 = \sum_{i=2}^{n}(i-1)(n-i+1) + \sum_{j=2}^{n-1}(j-1)(n-j)$$
$$= (n-1)\left(\frac{1}{3}n^2 - \frac{1}{6}n\right)$$

除法：

$$N_2 = n - 1 + \sum_{j=2}^{n-1}(n-j) = \frac{1}{2}n(n-1)$$

矩阵 LU 分解的计算量

乘法：

$$N_1 = \sum_{i=2}^{n}(i-1)(n-i+1) + \sum_{j=2}^{n-1}(j-1)(n-j)$$
$$= (n-1)\left(\frac{1}{3}n^2 - \frac{1}{6}n\right)$$

除法：

$$N_2 = n - 1 + \sum_{j=2}^{n-1}(n-j) = \frac{1}{2}n(n-1)$$

$$\Longrightarrow N = N_1 + N_2 = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n$$

例 1：求下列矩阵的 Doolittle 分解.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 4 \\ -2 & 2 & -3 & 1 \\ 0 & 3 & -13 & 7 \\ 4 & 1 & -1 & 23 \end{pmatrix}.$$

例 1：求下列矩阵的 Doolittle 分解.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 4 \\ -2 & 2 & -3 & 1 \\ 0 & 3 & -13 & 7 \\ 4 & 1 & -1 & 23 \end{pmatrix}.$$

解：由计算公式，我们可依次求得

$$\begin{array}{llll} u_{11} = 4, & u_{12} = -2, & u_{13} = 0, & u_{14} = 4, \\ l_{21} = -\frac{1}{2}, & u_{22} = 1, & u_{23} = -3, & u_{24} = 3, \\ l_{31} = 0, & l_{32} = 3, & u_{33} = -4, & u_{34} = -2, \\ l_{41} = 1, & l_{42} = 3, & l_{43} = -2, & u_{44} = 6. \end{array}$$

例 1：求下列矩阵的 Doolittle 分解.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 4 \\ -2 & 2 & -3 & 1 \\ 0 & 3 & -13 & 7 \\ 4 & 1 & -1 & 23 \end{pmatrix}.$$

$$\Longrightarrow \quad L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & & \\ 0 & 3 & 1 & \\ 1 & 3 & -2 & 1 \end{pmatrix}, \; U = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 4 \\ & 1 & -3 & 3 \\ & & -4 & -2 \\ & & & 6 \end{pmatrix}.$$

LU 分解法求线性方程组 $Ax = b$

基本思路:

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

主要步骤:

① 解方程组 $Ly = b$, 即有 $\sum_{j=1}^{i} l_{ij} y_j = b_i, \ \ i = 1, 2, \cdots, n$, 于是

$$\begin{cases} y_1 = b_1, \\ y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j, \quad i = 2, 3, \cdots, n \end{cases}$$

从 y 的计算公式可以看出, y 的计算可与 $A = LU$ 同时进行:
对 A 的增广矩阵 $\widetilde{A} = (A, b)$ 进行分解 $\widetilde{A} = L\widetilde{U} = L(U, y)$.

LU 分解法求线性方程组 $Ax = b$

主要步骤：

② 解方程组 $Ux = y$ (高斯消去法的回代过程), 即

$$\sum_{j=i}^{n} u_{ij}x_j = y_i,\ \ i = 1, 2, \cdots, n,$$

因此得到

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{y_n}{u_{nn}}, \\ x_i = \dfrac{y_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j}{u_{ii}}, \quad i = n-1, \cdots, 1 \end{cases}$$

LU 分解法求线性方程组的运算量

(1) $A = LU: \quad N_1 = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n$

(2) $Ly = b: \quad N_2 = \sum_{i=2}^{n}(i-1) = \frac{1}{2}n(n-1)$

(3) $Ux = y: \quad N_3 = n + \sum_{i=1}^{n-1}(n-i) = \frac{1}{2}n(n+1)$

因此应用 LU 分解求方程组 $Ax = b$ 的乘除法运算次数为

$$N = N_1 + N_2 + N_3 = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n,$$

与高斯消去法的乘除法运算量相同.

矩阵三角分解的应用

求解具有相同系数矩阵 A 和不同右端项的多个线性方程组

$$Ax = b^{(i)}, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

先求 $A = LU$, 再求解 $2m$ 个线性方程组

$$Ly^{(i)} = b^{(i)}, \quad Ux^{(i)} = y^{(i)}, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

乘除法运算量:

$$N = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n + mn^2.$$

当 $m \sim O(n)$ 时, $N \sim O(n^3)$. 对比高斯消去法

$$N = m\left(\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n\right) \sim O(n^4)$$

例 2：用 $A=LU$ 求解线性方程组 $Ax=b$, 其中

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix}, \quad b=\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

解：先求增广矩阵 $\widetilde{A}=(A,b)$ 的 $\widetilde{A}=L\widetilde{U}=L(U,y)$ 分解.

① 由 $\widetilde{u}_{1j}=\widetilde{a}_{1j}\ (j=1,2,3,4,5)$ 得

$$\widetilde{u_{11}}=1, \quad \widetilde{u}_{12}=2, \quad \widetilde{u}_{13}=1, \quad \widetilde{u}_{14}=-3, \quad \widetilde{u}_{15}=1$$

例 2：用 $A=LU$ 求解线性方程组 $Ax=b$, 其中

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix}, \quad b=\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

解：先求增广矩阵 $\widetilde{A}=(A,b)$ 的 $\widetilde{A}=L\widetilde{U}=L(U,y)$ 分解.

① 由 $\widetilde{u}_{1j}=\widetilde{a}_{1j}\ (j=1,2,3,4,5)$ 得

$$\widetilde{u_{11}}=1,\quad \widetilde{u}_{12}=2,\quad \widetilde{u}_{13}=1,\quad \widetilde{u}_{14}=-3,\quad \widetilde{u}_{15}=1$$

② 由 $l_{i1}=\widetilde{a}_{i1}/\widetilde{u}_{11}\ (i=2,3,4)$ 得

$$l_{21}=2,\quad l_{31}=1,\quad l_{41}=-3$$

③ 由 $\widetilde{u}_{2j} = \widetilde{a}_{2j} - l_{21}\widetilde{u}_{1j}\ (j = 2, 3, 4, 5)$ 得

$$\widetilde{u}_{22} = 1, \quad \widetilde{u}_{23} = -2, \quad \widetilde{u}_{24} = 1, \quad \widetilde{u}_{25} = 0$$

④ 由 $l_{i2} = (\widetilde{a}_{i2} - l_{i1}\widetilde{u}_{12})/\widetilde{u}_{22}\ (i = 3, 4)$ 得

$$l_{32} = -2, \quad l_{42} = 1$$

⑤ 由 $\widetilde{u}_{3j} = \widetilde{a}_{3j} - l_{31}\widetilde{u}_{1j} - l_{32}\widetilde{u}_{2j}\ (j = 3, 4, 5)$ 得

$$\widetilde{u}_{33} = 9, \quad \widetilde{u}_{34} = 6, \quad \widetilde{u}_{35} = 15$$

⑥ $l_{43} = (\widetilde{a}_{43} - l_{41}\widetilde{u}_{13} - l_{42}\widetilde{u}_{23})/\widetilde{u}_{33} = \frac{2}{3}$

③ 由 $\widetilde{u}_{2j} = \widetilde{a}_{2j} - l_{21}\widetilde{u}_{1j}$ $(j = 2, 3, 4, 5)$ 得

$$\widetilde{u}_{22} = 1, \quad \widetilde{u}_{23} = -2, \quad \widetilde{u}_{24} = 1, \quad \widetilde{u}_{25} = 0$$

④ 由 $l_{i2} = (\widetilde{a}_{i2} - l_{i1}\widetilde{u}_{12})/\widetilde{u}_{22}$ $(i = 3, 4)$ 得

$$l_{32} = -2, \quad l_{42} = 1$$

⑤ 由 $\widetilde{u}_{3j} = \widetilde{a}_{3j} - l_{31}\widetilde{u}_{1j} - l_{32}\widetilde{u}_{2j}$ $(j = 3, 4, 5)$ 得

$$\widetilde{u}_{33} = 9, \quad \widetilde{u}_{34} = 6, \quad \widetilde{u}_{35} = 15$$

⑥ $l_{43} = (\widetilde{a}_{43} - l_{41}\widetilde{u}_{13} - l_{42}\widetilde{u}_{23})/\widetilde{u}_{33} = \frac{2}{3}$

⑦ 由 $\widetilde{u}_{4j} = \widetilde{a}_{4j} - l_{41}\widetilde{u}_{1j} - l_{42}\widetilde{u}_{2j} - l_{43}\widetilde{u}_{3j}$ $(j = 4, 5)$ 得

$$\widetilde{u}_{44} = 1, \quad \widetilde{u}_{45} = 1$$

于是有

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ -3 & 1 & \frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & 3 \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & 9 & 6 \\ & & & 1 \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 15 \\ 1 \end{pmatrix}$$

再由 $Ux = y$ 解得

$$x = (1, 1, 1, 1)^T.$$

LUx = b,
Ux = L^-1 b = y

特殊矩阵的三角分解

若 A 对称, $A = LU$?

若 A 对称正定, $A = LU$?

特殊矩阵的三角分解

若 A 对称, $A = LU$?

若 A 对称正定, $A = LU$?

定理

设 A 为 n 阶对称矩阵, 若 A 的各阶顺序主子式不为零, 则 A 可以唯一分解为

$$A = LDL^T,$$

其中 L 为单位下三角矩阵, D 是对角矩阵.

对称矩阵的三角分解

证明 根据定理条件可知 $A = LU$, 其中 L 为单位下三角矩阵, U 为上三角矩阵. 设

$$D = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n) = \mathrm{diag}(u_{11}, u_{22}, \cdots, u_{nn}),$$

则 D 可逆. 于是有 $A = LU = LDD^{-1}U = LDM^T$, 其中 $M^T = D^{-1}U$, M 为单位下三角矩阵. 另一方面, 由 A 对称得

$$LU = A = A^T = (LU)^T = (LDM^T)^T = M(LD)^T,$$

注意到 $(LD)^T$ 是上三角矩阵. 注意到等式两端都是矩阵 A 的 Doolittle 分解. 根据分解的唯一性有

$$L = M \implies A = LDM^T = LDL^T.$$

$A = LDL^T$ 分解

由于 A 对称且 L 是单位下三角矩阵, 因此我们仅考虑 A 的下半部分元素, 即 $i \geqslant j$ 的情形. 根据 $A = LDL^T$, 由矩阵乘法得

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} d_k l_{jk} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik} d_k l_{jk} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik} d_k l_{jk}.$$

$A = LDL^T$ 分解

由于 A 对称且 L 是单位下三角矩阵, 因此我们仅考虑 A 的下半部分元素, 即 $i \geqslant j$ 的情形. 根据 $A = LDL^T$, 由矩阵乘法得

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} d_k l_{jk} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik} d_k l_{jk} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik} d_k l_{jk}.$$

当 $j = i$ 时,

$$\begin{cases} a_{11} = l_{11}^2 d_1 = d_1, \\ a_{ii} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik}^2 d_k = d_i + \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_k, \quad i = 2, \cdots, n, \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} d_1 = a_{11}, \\ d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_k, \quad i = 2, \cdots, n. \end{cases}$$

$A = LDL^T$ 分解

当 $j < i$ 时，

$$\begin{cases} a_{i1} = l_{i1} d_1, \quad i = 2, \cdots, n, \\ a_{ij} = l_{ij} d_j + \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk}, \quad j = 2, \cdots, n-1; \ i = j+1, \cdots, n, \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} l_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{d_1}, \quad i = 2, \cdots, n, \\ l_{ij} = \dfrac{a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk}}{d_j}, \quad j = 2, \cdots, n-1; \ i = j+1, \cdots, n. \end{cases}$$

因此得 $A = LDL^T$ 分解公式如下：

$$\begin{cases} d_1 = a_{11}, \\ l_{i1} = a_{i1}/d_1, \quad i = 2, \cdots, n, \\ d_i = a_{ii} - \displaystyle\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_k, \quad i = 2, \cdots, n. \\ l_{ij} = \left(a_{ij} - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} \right) / d_j, \quad j = 2, \cdots, n-1; \ i = j+1, \cdots, n. \end{cases}$$

因此得 $A = LDL^T$ 分解公式如下：

$$\begin{cases} d_1 = a_{11}, \\ l_{i1} = a_{i1}/d_1, \quad i = 2, \cdots, n, \\ d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_k, \quad i = 2, \cdots, n. \\ l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} \right) / d_j, \quad j = 2, \cdots, n-1; \; i = j+1, \cdots, n. \end{cases}$$

乘除法运算量：

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

$A = LDL^T$ 分解

事实上根据 $A = LU = LDL^T$ 和 $L^T = D^{-1}U$ 以及

$$D = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n) = \mathrm{diag}(u_{11}, u_{22}, \cdots, u_{nn}),$$

我们可得

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

$$l_{ji} = \frac{u_{ij}}{u_{ii}}, \quad i = 1, \cdots, n-1; \ j = i+1, \cdots, n.$$

由于 A 对称, 以及 U 是上三角矩阵, 因此我们只考虑 A 的上半部分, 即 $i \leqslant j$ 的情形. 于是有

$$\begin{cases} a_{1j} = u_{1j}, \quad j = 1, \cdots, n \\ a_{ij} = u_{ij} + \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}, \quad i = 2, \cdots, n; \ j = i, \cdots, n. \end{cases}$$

$A = LDL^T$ 分解

据此得 $A = LDL^T$ 分解公式如下：

$$\begin{cases} u_{1j} = a_{1j}, \quad j = 1, \cdots, n, \\ u_{ij} = a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i = 2, \cdots, n; \ j = i, \cdots, n, \\ l_{ji} = \dfrac{u_{ij}}{u_{ii}}, \quad i = 1, \cdots, n-1; \ j = i+1, \cdots, n, \\ d_i = u_{ii}, \quad i = 1, \cdots, n. \end{cases}$$

乘除法运算量：

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

相比前一种分解方式，运算次数减少了几乎一半

对称正定矩阵的 Cholesky 分解

定理

设 A 为 n 阶对称正定矩阵, 则存在一个可逆的下三角矩阵 G 使得

$$A = GG^T,$$

当限定 G 的对角元为正时, 这种分解是唯一的.

证明 由于 A 对称正定则各阶顺序主子式大于零, 由前面的定理可知 $A = LDL^T$, L 为单位下三角矩阵. 由 A 对称正定知

$$\forall x \neq 0,\ x^T Ax = x^T LDL^T x = (L^T x)^T DL^T x > 0$$

对称正定矩阵的 Cholesky 分解

若令 $y = L^T x$ 则

$$\forall x \neq 0 \quad \text{有} \ y \neq 0 \quad \text{且} \quad y^T D y > 0.$$

因此 D 对称正定, 即有 $d_i = u_{ii} > 0, i = 1, 2, \cdots, n$.

记 $D^{\frac{1}{2}} = \mathrm{diag}(\sqrt{u_{11}}, \sqrt{u_{22}}, \cdots, \sqrt{u_{nn}})$, 则

$$A = LDL^T = LD^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}L^T = (LD^{\frac{1}{2}})(LD^{\frac{1}{2}})^T \triangleq GG^T,$$

其中 $G = LD^{\frac{1}{2}}$ 为下三角矩阵, 且

$$|G| = |LD^{\frac{1}{2}}| = |D^{\frac{1}{2}}| = \sqrt{u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}} > 0,$$

即 G 可逆.

对称正定矩阵的 Cholesky 分解

由于 G 是下三角矩阵 $(g_{ij} = 0, i < j)$, 我们设

$$G = \begin{pmatrix} g_{11} & & & & \\ g_{21} & g_{22} & & & \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{n,n-1} & g_{nn} \end{pmatrix}.$$

根据 A 的对称性, 我们仅考虑 A 的下半部分元素, 即 $i \geqslant j$ 的情形. 由 $A = GG^T$ 可知

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} g_{ik} g_{jk} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} g_{ik} g_{jk} = \sum_{k=1}^{j} g_{ik} g_{jk}.$$

当 $i=j$ 时,

$$\begin{cases} a_{11} = g_{11}^2, \\ a_{jj} = g_{jj}^2 + \sum_{k=1}^{j-1} g_{jk}^2, \ j = 2, 3, \cdots, n \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} g_{11} = \sqrt{a_{11}}, \\ g_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} g_{jk}^2}, \ j = 2, 3, \cdots, n \end{cases}$$

对称正定矩阵的 Cholesky 分解

当 $i > j$ 时,

$$\begin{cases} a_{i1} = g_{i1}g_{11}, \\ a_{ij} = g_{ij}g_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} g_{ik}g_{jk}, \ j = 2, 3, \cdots, n \end{cases}$$

当 $i > j$ 时,

$$\begin{cases} a_{i1} = g_{i1} g_{11}, \\ a_{ij} = g_{ij} g_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk}, \ j = 2, 3, \cdots, n \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} g_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{g_{11}}, \quad i = 2, 3, \cdots, n \\ g_{ij} = \dfrac{a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk}}{g_{jj}}, \ j = 1, 2, \cdots, n-1; \ i = j+1, \cdots, n \end{cases}$$

Cholesky 分解计算公式：

$$
\begin{cases}
g_{11} = \sqrt{a_{11}}, \\
g_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{g_{11}}, \quad i = 2, 3, \cdots, n \\
g_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1} g_{jk}^2}, \quad j = 2, 3, \cdots, n \\
g_{ij} = \dfrac{a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk}}{g_{jj}}, \ j = 2, 3, \cdots, n-1; \ i = j+1, \cdots, n
\end{cases}
$$

对称正定矩阵的 Cholesky 分解

由 Cholesky 分解公式可知

$$a_{jj} = \sum_{k=1}^{j} g_{jk}^2 \implies |g_{jk}| \leqslant \sqrt{a_{jj}}, \ j = 1, 2, \cdots, n; \ k = 1, 2, \cdots, j.$$

舍入误差可控, Cholesky 分解算法数值稳定.

Cholesky 分解的乘除法运算量：

乘法： $N_1 = \sum_{j=2}^{n}(j-1) + \sum_{j=2}^{n-1}(j-1)(n-j) = \frac{1}{6}(n^3 - n),$

除法： $N_2 = n - 1 + \sum_{j=2}^{n-1}(n-j) = \frac{1}{2}n(n-1),$

$$\implies N = \frac{1}{6}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{2}{3}n$$

Cholesky 分解求线性方程组—平方根法

假设 A 对称正定

$$Ax = b \implies GG^Tx = b \implies \begin{cases} Gy = b \implies \text{解出 } y, \\ G^Tx = y \implies \text{解出 } x. \end{cases}$$

由 $Gy = b$ 知

$$\begin{cases} g_{11}y_1 = b_1, \\ \sum_{j=1}^{i-1} g_{ij}y_j + g_{ii}y_i = b_i, \quad i = 2, \cdots, n. \end{cases}$$

$$\implies \begin{cases} y_1 = b_1/g_{11}, \\ y_i = \dfrac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} g_{ij}y_j}{g_{ii}}, \quad i = 2, \cdots, n. \end{cases}$$

然后从 $G^Tx = y$ 解出 x.

平方根法的乘除法运算量

① $A = GG^T$: $N_1 = \frac{1}{6}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{2}{3}n$

② $Gy = b$: $N_2 = n + \sum_{i=2}^{n}(i-1) = \frac{1}{2}n(n+1)$

③ $G^T x = y$: $N_3 = N_2 = \frac{1}{2}n(n+1)$

$$N = N_1 + N_2 + N_3 = \frac{1}{6}n^3 + \frac{3}{2}n^2 + \frac{1}{3}n$$

对比高斯消去法和 Doolittle 分解法,

$$N = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$$

运算量几乎减少了一半. 但是平方根法包含 n 次开方运算，需要消耗较多的时间.

平方根法

例 3：用平方根法求解线性方程组 $Ax = b$, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

例 3：用平方根法求解线性方程组 $Ax = b$, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

解：先求增广矩阵 $\widetilde{A} = (A, b)$ 的 $\widetilde{A} = G\widetilde{G^T} = G(G^T, y)$ 分解.

平方根法

例 3：用平方根法求解线性方程组 $Ax = b$, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

解：先求增广矩阵 $\widetilde{A} = (A, b)$ 的 $\widetilde{A} = G\widetilde{G^T} = G(G^T, y)$ 分解.

① 由 $g_{11} = \sqrt{a_{11}}$ 得 $g_{11} = 1$

例 3：用平方根法求解线性方程组 $Ax=b$, 其中

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & -3 \\ 2 & 5 & 0 & -5 \\ 1 & 0 & 14 & 1 \\ -3 & -5 & 1 & 15 \end{pmatrix}, \quad b=\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

解：先求增广矩阵 $\widetilde{A}=(A,b)$ 的 $\widetilde{A}=G\widetilde{G^T}=G(G^T,y)$ 分解.

① 由 $g_{11}=\sqrt{a_{11}}$ 得 $\quad g_{11}=1$

② 由 $\widetilde{g}_{i1}=\widetilde{a}_{i1}/g_{11}\ (i=2,3,4,5)$ 得

$$g_{21}=2,\quad g_{31}=1,\quad g_{41}=-3,\quad y_1=1$$

平方根法

③ 由 $g_{22}=\sqrt{a_{22}-g_{21}^2}$ 得 $g_{22}=1$

平方根法

③ 由 $g_{22}=\sqrt{a_{22}-g_{21}^2}$ 得 $g_{22}=1$

④ 由 $\widetilde{g}_{i2}=\left(\widetilde{a}_{i2}-g_{21}\widetilde{g}_{i1}\right)/g_{22}\ (i=3,4,5)$ 得

$$g_{32}=-2,\quad g_{42}=1,\quad y_2=0$$

平方根法

③ 由 $g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{21}^2}$ 得 $g_{22} = 1$

④ 由 $\widetilde{g}_{i2} = \left(\widetilde{a}_{i2} - g_{21}\widetilde{g}_{i1}\right)/g_{22}\ (i = 3, 4, 5)$ 得

$$g_{32} = -2, \quad g_{42} = 1, \quad y_2 = 0$$

⑤ 由 $g_{33} = \sqrt{a_{33} - g_{31}^2 - g_{32}^2}$ 得 $g_{33} = 3$

平方根法

③ 由 $g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{21}^2}$ 得 $g_{22} = 1$

④ 由 $\widetilde{g}_{i2} = \left(\widetilde{a}_{i2} - g_{21}\widetilde{g}_{i1}\right)/g_{22}\ (i = 3, 4, 5)$ 得

$$g_{32} = -2, \quad g_{42} = 1, \quad y_2 = 0$$

⑤ 由 $g_{33} = \sqrt{a_{33} - g_{31}^2 - g_{32}^2}$ 得 $g_{33} = 3$

⑥ 由 $\widetilde{g}_{i3} = \left(\widetilde{a}_{i3} - g_{31}\widetilde{g}_{i1} - g_{32}\widetilde{g}_{i2}\right)/g_{33}\ (i = 4, 5)$ 得

$$g_{43} = 2, \quad y_3 = 5$$

平方根法

③ 由 $g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{21}^2}$ 得 $g_{22} = 1$

④ 由 $\widetilde{g}_{i2} = (\widetilde{a}_{i2} - g_{21}\widetilde{g}_{i1})/g_{22}\ (i = 3, 4, 5)$ 得

$$g_{32} = -2, \quad g_{42} = 1, \quad y_2 = 0$$

⑤ 由 $g_{33} = \sqrt{a_{33} - g_{31}^2 - g_{32}^2}$ 得 $g_{33} = 3$

⑥ 由 $\widetilde{g}_{i3} = (\widetilde{a}_{i3} - g_{31}\widetilde{g}_{i1} - g_{32}\widetilde{g}_{i2})/g_{33}\ (i = 4, 5)$ 得

$$g_{43} = 2, \quad y_3 = 5$$

⑦ 由 $g_{44} = \sqrt{a_{44} - g_{41}^2 - g_{42}^2 - g_{43}^2}$ 得 $g_{44} = 1$

平方根法

③ 由 $g_{22}=\sqrt{a_{22}-g_{21}^2}$ 得 $g_{22}=1$

④ 由 $\widetilde{g}_{i2}=\left(\widetilde{a}_{i2}-g_{21}\widetilde{g}_{i1}\right)/g_{22}\ (i=3,4,5)$ 得

$$g_{32}=-2,\quad g_{42}=1,\quad y_2=0$$

⑤ 由 $g_{33}=\sqrt{a_{33}-g_{31}^2-g_{32}^2}$ 得 $g_{33}=3$

⑥ 由 $\widetilde{g}_{i3}=\left(\widetilde{a}_{i3}-g_{31}\widetilde{g}_{i1}-g_{32}\widetilde{g}_{i2}\right)/g_{33}\ (i=4,5)$ 得

$$g_{43}=2,\quad y_3=5$$

⑦ 由 $g_{44}=\sqrt{a_{44}-g_{41}^2-g_{42}^2-g_{43}^2}$ 得 $g_{44}=1$

⑧ 由 $y_4=\left(b_4-\sum\limits_{k=1}^{3}g_{4k}y_k\right)/g_{44}$ 得 $y_4=1$

于是有

$$G = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 3 & \\ -3 & 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

再由 $G^T x = y$ 解得

$$x = (1, 1, 1, 1)^T.$$

改进平方根法

改进平方根法：用 $A = LDL^T$ 分解方法求解线性方程组 $Ax = b$

$$Ax = b \implies LDL^T x = b \implies \begin{cases} Lz = b \implies \text{解出 } z, \\ Dy = z \implies \text{解出 } y, \\ L^T x = y \implies \text{解出 } x. \end{cases}$$

由 $Lz = b$ 得 $\begin{cases} z_1 = b_1, \\ z_i = b_i - \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} z_j, \quad i = 2, \cdots, n. \end{cases}$

由 $Dy = z$ 得 $y_i = z_i / d_i, \quad i = 1, \cdots n$

由 $L^T x = y$ 得 $\begin{cases} x_n = y_n, \\ x_i = y_i - \displaystyle\sum_{j=i+1}^{n} l_{ji} x_j, \quad i = n-1, \cdots, 1. \end{cases}$

改进平方根法的乘除法运算量

① $A = LDL^T: \quad N_1 = \frac{1}{6}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{2}{3}n$

② $Lz = b: \quad N_2 = \sum_{i=2}^{n}(i-1) = \frac{1}{2}n(n-1)$

③ $Dy = z: \quad N_3 = n$

④ $L^T x = y: \quad N_4 = N_2 = \frac{1}{2}n(n-1)$

$$N = N_1 + N_2 + N_3 + N_4 = \frac{1}{6}n^3 + \frac{3}{2}n^2 - \frac{2}{3}n$$

改进平方根法的乘除法运算量

① $A = LDL^T$: $\quad N_1 = \frac{1}{6}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{2}{3}n$

② $Lz = b$: $\quad N_2 = \sum_{i=2}^{n}(i-1) = \frac{1}{2}n(n-1)$

③ $Dy = z$: $\quad N_3 = n$

④ $L^T x = y$: $\quad N_4 = N_2 = \frac{1}{2}n(n-1)$

$$N = N_1 + N_2 + N_3 + N_4 = \frac{1}{6}n^3 + \frac{3}{2}n^2 - \frac{2}{3}n$$

- 对比平方根法减少了 n 次乘除法和 n 次开方运算.
- 对比高斯消去法和 Doolittle 分解法,

$$N = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$$

运算量几乎减少了一半.

三对角线性方程组

在很多应用问题中，经常会遇到求解三对角线性方程组 $Ax = d$，即

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}.$$

通常情况下，A 是严格对角占优矩阵，因此存在唯一的 Doolittle 分解.

三对角矩阵的 Doolittle 分解

对于三对角矩阵 A, 其 Doolittle 分解为 $A = LU$, 其中

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & l_{n-1} & 1 & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix}.$$

由矩阵乘法可得:

$$\begin{cases} A_{11} = b_1 = U_{11} = u_1, \\ A_{ii} = b_i = L_{i,i-1}U_{i-1,i} + U_{ii} = l_i c_{i-1} + u_i, \quad i = 2, \cdots, n, \\ A_{i,i-1} = a_i = L_{i,i-1}U_{i-1,i-1} = l_i u_{i-1}, \quad i = 2, \cdots, n, \\ A_{i,i+1} = c_i = L_{ii}U_{i,i+1} = c_i, \quad i = 1, \cdots, n-1. \end{cases}$$

追赶法

于是得到

$$\begin{cases} u_1 = b_1, \\ u_i = b_i - l_i c_{i-1}, \quad i = 2, \cdots, n, \\ l_i = \dfrac{a_i}{u_{i-1}}, \quad i = 2, \cdots, n. \end{cases}$$

追赶法：用 $A = LU$ 分解求解三对角线性方程组 $Ax = d$, 具体为

$$Ax = d \Longrightarrow LUx = d \Longrightarrow \begin{cases} Ly = d, \\ Ux = y. \end{cases}$$

由 $Ly=d$ 得 $$\begin{cases} y_1 = d_1, \\ y_i = d_i - l_i y_{i-1}, \quad i = 2, \cdots, n. \end{cases}$$

由 $Ux=y$ 得 $$\begin{cases} x_n = \dfrac{y_n}{u_n}, \\ x_i = \dfrac{y_i - c_i x_{i+1}}{u_i}, \quad i = n-1, \cdots, 1. \end{cases}$$

“追”：计算 l_i, u_i, y_i.

“赶”：计算 x_i.

追赶法运算量:

$$N = \underbrace{2(n-1)}_{LU\ \text{分解}} + \underbrace{n-1}_{\text{求解}\ Ly=d} + \underbrace{2n-1}_{\text{求解}\ Ux=y} = 5n-4 \implies N \sim O(n)$$

追赶法

例 4：用追赶法求解线性方程组 $Ax = d$, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 4 & 7 \end{pmatrix}, \quad d = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \\ -12 \\ -1 \end{pmatrix}$$

例 4：用追赶法求解线性方程组 $Ax = d$, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 4 & 7 \end{pmatrix}, \quad d = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \\ -12 \\ -1 \end{pmatrix}$$

解 ① 根据分解公式依次求得

$$u_1 = 1, \quad l_2 = 2, \quad u_2 = -1, \quad l_3 = 3, \quad u_3 = 1, \; l_4 = 4, \quad u_4 = -1.$$

于是有

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ & 3 & 1 & \\ & & 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 1 & 2 & & \\ & -1 & 1 & \\ & & 1 & 2 \\ & & & -1 \end{pmatrix}.$$

追赶法

② 求解 $Ly = d$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ & 3 & 1 & \\ & & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \\ -12 \\ -1 \end{pmatrix} \Longrightarrow y = \begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

追赶法

② 求解 $Ly = d$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ & 3 & 1 & \\ & & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \\ -12 \\ -1 \end{pmatrix} \Longrightarrow y = \begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

③ 求解 $Ux = y$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 2 & & \\ & -1 & 1 & \\ & & 1 & 2 \\ & & & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \Longrightarrow x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3. 向量、矩阵范数与误差分析

“误差”

- 若 $x \in \mathbf{R}$, x^* 为近似值, 则 x^* 的准确程度 (或近似 x 的程度)

$$\Delta x = |x - x^*| \quad \Longrightarrow \text{数的误差}$$

- 若 $x \in \mathbf{R}^n$ $(\mathbf{R}^{n\times n})$, x^* 为近似值, 则 x^* 的准确程度 (或近似 x 的程度)?

向量 (矩阵) 的误差?

向量范数

定义

向量范数 $f(x): \mathbf{R}^n \longrightarrow \mathbf{R}^+ \cup \{0\}$, $x \longmapsto \|x\|$, 且 $\|x\|$ 满足

(1) 正定性 $\|x\| \geqslant 0$, $\|x\| = 0 \iff x = 0$;

(2) 齐次性 $\forall \alpha \in \mathbf{R}$, $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$;

(3) 三角不等式 $\|x + y\| \leqslant \|x\| + \|y\|$.

由三角不等式有

$$\|x\| = \|x - y + y\| \leqslant \|x - y\| + \|y\| \implies \|x\| - \|y\| \leqslant \|x - y\|,$$
$$\|y\| = \|y - x + x\| \leqslant \|y - x\| + \|x\| \implies \|x\| - \|y\| \geqslant -\|x - y\|,$$

于是得到

$$-\|x - y\| \leqslant \|x\| - \|y\| \leqslant \|x - y\| \implies \big|\|x\| - \|y\|\big| \leqslant \|x - y\|.$$

三种常用的向量范数

设 $x \in \mathbf{R}^n$, 则

- 1-范数： $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$
- 2-范数： $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$
- ∞-范数： $\|x\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i|$

绝对误差:

$$\|\Delta x\| = \|x - \tilde{x}\|$$

相对误差：

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} = \frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|}$$

例 1：已知 $x = (1, -3, 6)^T$, 求 $\|x\|_p$ $(p = 1, 2, \infty)$.

解 根据向量范数定义有

$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + |x_3| = 10,$$

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} = \sqrt{46},$$

$$\|x\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, |x_3|\} = 6.$$

向量范数的连续性

定理

设 $\|x\|$ 是 $\mathbf{R}^n$ 上的任一种向量范数, 则 $\|x\|$ 是 x 的连续函数.

证明 只需证当 $x \to y$ 时, $\|x\| \to \|y\|$ 即可. 设

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i, \qquad y = \sum_{i=1}^{n} y_i e_i,$$

其中

$$e_i = (\underbrace{0, 0, \cdots, 0}_{i-1\text{ 个}}, 1, 0, \cdots, 0)^T \in \mathbf{R}^n$$

向量范数的连续性

则有

$$\big|\|x\| - \|y\|\big| \leqslant \|x - y\| = \left\|\sum_{i=1}^{n}(x_i - y_i)e_i\right\| \leqslant \sum_{i=1}^{n}|x_i - y_i|\|e_i\|$$

$$\leqslant \max_{1\leqslant i\leqslant n}|x_i - y_i|\sum_{i=1}^{n}\|e_i\| = \|x - y\|_\infty \sum_{i=1}^{n}\|e_i\|.$$

记 $c \triangleq \sum_{i=1}^{n}\|e_i\|$, 当 $x \to y$ 时, 有 $\|x - y\| \to 0$, 因此可得

$$\big|\|x\| - \|y\|\big| \leqslant c\|x - y\|_\infty \to 0, \quad x \to y.$$

向量范数的等价性

定理

设 $\|x\|_p$ 和 $\|x\|_q$ 是 $\mathbf{R}^n$ 上的任意两种向量范数, 则存在常数 $c_1 > 0$, $c_2 > 0$, 使得对任意的 $x \in \mathbf{R}^n$ 有

$$c_1\|x\|_q \leqslant \|x\|_p \leqslant c_2\|x\|_q.$$

证明 设 $S = \{y \in \mathbf{R}^n | \|y\|_2 = 1\}$, 则 S 为有界闭集. 根据向量范数的连续性可知 $\|y\|$ 在 S 上连续且存在最大值 $M > 0$ 以及最小值 $m > 0$.

记 $\|y\|_p$ 在 S 上的最大值和最小值分别为 M_p 和 m_p, $\|y\|_q$ 在 S 上的最大值和最小值分别为 M_q 和 m_q.

向量范数的等价性

于是对任意的 $x \in \mathbf{R}^n$, 令 $y = \frac{x}{\|x\|_2}$, 则有 $y \in S$. 因此

$$\frac{m_p}{M_q} \leqslant \frac{\|x\|_p}{\|x\|_q} = \frac{\|y\|_p}{\|y\|_q} \leqslant \frac{M_p}{m_q},$$

从而有

$$\frac{m_p}{M_q}\|x\|_q \leqslant \|x\|_p \leqslant \frac{M_p}{m_q}\|x\|_q.$$

取

$$c_1 = \frac{m_p}{M_q} > 0, \quad c_2 = \frac{M_p}{m_q} > 0,$$

则定理得证.

向量范数

常用的几个等价关系式：

$$
\begin{aligned}
&\|x\|_\infty \leqslant \|x\|_1 \leqslant n\|x\|_\infty, \\
&\frac{1}{\sqrt{n}}\|x\|_1 \leqslant \|x\|_2 \leqslant \|x\|_1, \\
&\frac{1}{\sqrt{n}}\|x\|_2 \leqslant \|x\|_\infty \leqslant \|x\|_2.
\end{aligned}
$$

矩阵范数

定义

矩阵范数 $f(A): \mathbf{R}^{n\times n} \longrightarrow \mathbf{R}^+ \cup \{0\}$, $A \longmapsto \|A\|$, 且 $\|A\|$ 满足

(1) 正定性 $\|A\| \geqslant 0$, $\|A\| = 0 \Longleftrightarrow A = O$;

(2) 齐次性 $\forall \alpha \in \mathbf{R}$, $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$;

(3) 三角不等式 $\|A+B\| \leqslant \|A\| + \|B\|$;

(4) $\|AB\| \leqslant \|A\| \|B\|$.

类似地, 由三角不等式有

$$\|A\| = \|A - B + B\| \leqslant \|A - B\| + \|B\|,$$
$$\|B\| = \|B - A + A\| \leqslant \|B - A\| + \|A\|,$$

即有

$$\big| \|A\| - \|B\| \big| \leqslant \|A - B\|.$$

矩阵范数的相容性

定义

若矩阵范数 $\|A\|$ 与向量范数 $\|x\|$ 满足

$$\|Ax\| \leqslant \|A\|\|x\|, \quad \forall x \in \mathbf{R}^n,\ A \in \mathbf{R}^{n\times n}$$

则称矩阵范数 $\|A\|$ 与向量范数 $\|x\|$ 是相容的.

注意：上式并不是对任意的矩阵范数和向量范数都满足.

矩阵的算子范数

定理

设 $x \in \mathbf{R}^n$, $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, $\|x\|_p$ $(p=1,2,\infty)$ 是给定的一种向量范数，相应地定义一个矩阵的非负函数

$$\|A\|_p = \max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} = \max_{\|x\|_p=1} \|Ax\|_p,$$

则 $\|A\|_p$ 是一种矩阵范数，称为矩阵 A 的算子范数，并且满足相容性条件

$$\|Ax\|_p \leqslant \|A\|_p \|x\|_p.$$

证明 ① 正定性：由定义知

$$\|A\|_p = \max_{\|x\|_p=1} \|Ax\|_p \geqslant 0$$

矩阵的算子范数

且有

$$\|A\|_p = \max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} = 0$$
$$\iff \quad \forall x \neq 0,\ \ \|Ax\|_p = 0$$
$$\iff \quad \forall x \neq 0,\ \ Ax = 0 \quad \iff \quad A = O.$$

② 齐次性：对任意的 $\alpha \in \mathbf{R}$,

$$\|\alpha A\|_p = \max_{x\neq 0} \frac{\|\alpha Ax\|_p}{\|x\|_p} = \max_{x\neq 0} \frac{|\alpha|\|Ax\|_p}{\|x\|_p}$$
$$= |\alpha| \max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} = |\alpha|\|A\|_p.$$

③ 三角不等式：

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

④ 相容性：$x=0$ 的情形显然成立. 而对任意的 $x \neq 0$, 有

$$\|A\|_p = \max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} \geqslant \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p},$$

$$\Longrightarrow \quad \|Ax\|_p \leqslant \|A\|_p \|x\|_p.$$

⑤ 根据相容性有

$$\|ABx\|_p \leqslant \|A\|_p \|Bx\|_p \leqslant \|A\|_p \|B\|_p \|x\|_p,$$

于是对任意的 $x \neq 0$, 可以得到

$$\frac{\|ABx\|_p}{\|x\|_p} \leqslant \|A\|_p \|B\|_p,$$

$$\Longrightarrow \quad \|AB\|_p = \max_{x \neq 0} \frac{\|ABx\|_p}{\|x\|_p} \leqslant \|A\|_p \|B\|_p.$$

矩阵的算子范数

定理

设 $x \in \mathbf{R}^n$, $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, 则对应于向量的三种范数 $\|x\|_p$ $(p = 1, 2, \infty)$ 的矩阵范数分别为

$$(1)\ \|A\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n}\left(\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|\right) \qquad 1-\text{范数或列范数;}$$

$$(2)\ \|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)} \qquad 2-\text{范数或谱范数;}$$

$$(3)\ \|A\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\left(\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\right) \qquad \infty-\text{范数或行范数,}$$

其中 $\lambda_{\max}(A^TA)$ 表示矩阵 A^TA 的最大特征值.

矩阵的算子范数

证明　设 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = (a_1, a_2, \cdots, a_n),$$

其中

$$a_j = (a_{1j}, a_{2j}, \cdots, a_{nj})^T \ (j = 1, 2, \cdots, n).$$

矩阵的算子范数

(1) 对于 1-范数，由算子范数定义有 $\|A\|_1 = \max\limits_{\|x\|=1} \|Ax\|_1$，且

$$\boxed{\|Ax\|_1 = \Big\|\sum_{j=1}^{n} x_j a_j\Big\|_1} \leqslant \sum_{j=1}^{n} |x_j| \|a_j\|_1$$

$$\leqslant \sum_{j=1}^{n} |x_j| \cdot \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|a_j\|_1 = \|x\|_1 \cdot \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|a_j\|_1,$$

则
$$\|A\|_1 = \max_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1 \leqslant \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|a_j\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \Big(\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|\Big).$$

取 $x = e_k$，其中 k 满足 $\max\limits_{1\leqslant j\leqslant n} \|a_j\|_1 = \|a_k\|_1$，则有

$$\|Ax\|_1 = \|Ae_k\|_1 = \|a_k\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|a_j\|_1,$$

即有
$$\|A\|_1 = \max_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|a_j\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \Big(\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|\Big).$$

矩阵的算子范数

(2) 对于 2-范数，我们注意到

$$\|Ax\|_2^2 = (Ax)^T Ax = x^T A^T Ax \geqslant 0, \quad \forall x \in \mathbf{R}^n,$$

因此 $A^T A$ 是对称正定或对称半正定矩阵. 奇异值分解，谱分解

由线性代数知识知，$A^T A$ 有 n 个非负特征值 $\lambda_i \ (i = 1, \cdots, n)$，记为

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0,$$

其对应的标准正交特征向量为 $u_1, u_2, \cdots, u_n$.

对任意的 $x \in \mathbf{R}^n$，由于 $\{u_i\}_{i=1}^n$ 是 $\mathbf{R}^n$ 的一组基向量，因此存在 $k_1, k_2, \cdots, k_n$ 使得

$$x = \sum_{i=1}^n k_i u_i \quad \text{且} \quad \|x\|_2^2 = x^T x = \sum_{i=1}^n k_i^2.$$

于是

$$
\begin{aligned}
\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 &= \max_{\|x\|_2=1} \sqrt{x^T A^T A x} \\
&= \max_{\|x\|_2=1} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} k_i u_i^T \cdot \sum_{j=1}^{n} A^T A k_j u_j} \\
&= \max_{\|x\|_2=1} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} k_i u_i^T \cdot \sum_{j=1}^{n} \lambda_j k_j u_j} \\
&= \max_{\|x\|_2=1} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i k_i^2} \leqslant \max_{\|x\|_2=1} \sqrt{\lambda_1 \sum_{i=1}^{n} k_i^2} = \sqrt{\lambda_1}.
\end{aligned}
$$

矩阵的算子范数

特别地, 取 $x = u_1$, 则有 $\|x\|_2 = 1$ 以及

$$\|Ax\|_2^2 = u_1^T A^T A u_1 = u_1^T \lambda_1 u_1 = \lambda_1,$$

因此有

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}.$$

(3) 对于 ∞-范数, 对任意的 $x \in \mathbf{R}^n$, 设 k 满足

$$\max_{1\leqslant i\leqslant n} \left(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \right) = \sum_{j=1}^{n} |a_{kj}|,$$

则有

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

$$\leqslant \max_{1\leqslant j\leqslant n} |x_j| \cdot \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \|x\|_\infty \sum_{j=1}^{n} |a_{kj}|.$$

矩阵的算子范数

取 $x = \left(\mathrm{sgn}(a_{k1}), \mathrm{sgn}(a_{k2}), \cdots, \mathrm{sgn}(a_{kn})\right)^T$, 则有 $\|x\|_\infty = 1$. 于是有

$$\|Ax\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \left|\sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot \mathrm{sgn}(a_{kj})\right| = \sum_{j=1}^{n} |a_{kj}|,$$

因此有

$$\|A\|_\infty = \max_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty = \sum_{j=1}^{n} |a_{kj}| = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \left(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\right).$$

例 2：求矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}$ 的 3 种算子范数.

解

$$\|A\|_1 = \max\{5, 5\} = 5, \quad \|A\|_\infty = \max\{4, 6\} = 6.$$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 17 & 11 \\ 11 & 13 \end{pmatrix},$$

$$|\lambda I - A^T A| = \begin{vmatrix} \lambda - 17 & -11 \\ -11 & \lambda - 13 \end{vmatrix} = \lambda^2 - 30\lambda + 100 = 0,$$

$$\Longrightarrow \lambda_1 = 15 + 5\sqrt{5}, \quad \lambda_2 = 15 - 5\sqrt{5}.$$

于是有

$$\|A\|_2 = \lambda_{\max}(A^T A) = 15 + 5\sqrt{5}.$$

矩阵范数

F-范数

$$\boxed{\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2}}$$

F-范数与向量2-范数的相容性

$$\begin{aligned}
\|Ax\|_2^2 &= \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\right)^2 = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{ij}x_j \cdot a_{ik}x_k \\
&\leqslant \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}(a_{ij}^2x_k^2 + a_{ik}^2x_j^2) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{ij}^2x_k^2 \\
&= \left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2\right)\cdot\left(\sum_{k=1}^{n} x_k^2\right) = \|A\|_F^2 \cdot \|x\|_2^2
\end{aligned}$$

两边开方即得

$$\|Ax\|_2 \leqslant \|A\|_F\|x\|_2.$$

矩阵范数

定理

设 $\|A\|_p$ 和 $\|A\|_q$ 是$\mathbf{R}^{n\times n}$ 中任意两种矩阵范数, 则存在常数 $c_1 > 0$, $c_2 > 0$ 使得

$$c_1\|A\|_q \leqslant \|A\|_p \leqslant c_2\|A\|_q, \qquad \forall A \in \mathbf{R}^{n\times n}.$$

定义

设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, λ_i $(i = 1, 2, \cdots, n)$ 是 A 的特征值, 则

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

称为矩阵 A 的谱半径.

矩阵范数

定理

设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, 则有 $\rho(A) \leqslant \|A\|$, 即谱半径不超过 A 的任意一种范数.

矩阵范数

定理

设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, 则有 $\rho(A) \leqslant \|A\|$, 即谱半径不超过 A 的任意一种范数. 谱半径是矩阵范数的下确界

证明 设 λ 是 A 的任一特征值, x 是对应的特征向量, 则

$$Ax = \lambda x,$$

于是有

$$|\lambda|\|x\| = \|\lambda x\| = \|Ax\| \leqslant \|A\|\|x\|.$$

注意到 $x \neq 0$, 即 $\|x\| > 0$. 因此

$$|\lambda| \leqslant \|A\| \quad \Longrightarrow \rho(A) = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\{|\lambda_i|\} \leqslant \|A\|.$$

矩阵的算子范数

定理

设 $\|A\| < 1$, 则 $I - A$ 是可逆矩阵, 且

$$\left\|(I-A)^{-1}\right\| \leqslant \frac{1}{1-\|A\|}.$$

矩阵的算子范数

定理

设 $\|A\| < 1$, 则 $I - A$ 是可逆矩阵, 且

$$\left\|(I-A)^{-1}\right\| \leqslant \frac{1}{1-\|A\|}.$$

证明 (反证法) 假定 $I - A$ 不可逆, 则线性方程组

$$(I-A)x = 0$$

有非零解, 即存在 $\tilde{x} \neq 0$ 使得 $\tilde{x} = A\tilde{x}$.

两边取与矩阵范数相容的向量范数, 得

$$\|\tilde{x}\| = \|A\tilde{x}\| \leqslant \|A\|\|\tilde{x}\| \implies (1-\|A\|)\|\tilde{x}\| \leqslant 0.$$

矩阵的算子范数

由于 $\|\tilde{x}\| > 0$, 于是有

$$1 - \|A\| \leqslant 0 \quad \Longrightarrow \quad \|A\| \geqslant 1$$

与已知条件 $\|A\| < 1$ 矛盾. 因此 $I - A$ 可逆.

由 $(I - A)^{-1}(I - A) = I$ 可得

$$(I - A)^{-1} = I + A(I - A)^{-1}.$$

两边同取算子范数, 得到

$$\|(I - A)^{-1}\| \leqslant \|I\| + \|A\|\|(I - A)^{-1}\|,$$

因此有

$$(1 - \|A\|)\|(I - A)^{-1}\| \leqslant \|I\| = 1.$$

由已知条件 $\|A\| < 1$ 即可得到

$$\|(I - A)^{-1}\| \leqslant \frac{1}{1 - \|A\|}.$$

舍入误差对解的影响

假设准确解 x 满足线性方程组

$$Ax = b.$$

受原始数据精度以及计算机字长的限制影响, A 和 b 产生微小扰动 (误差) $\Delta A, \Delta b$, 于是近似解 $\tilde{x}$ 满足扰动后的方程组, 即

$$(A - \Delta A)\tilde{x} = b - \Delta b$$

$$\Downarrow$$

$$(A - \Delta A)(x - \Delta x) = b - \Delta b$$

解的相对误差估计

定理

设线性方程组 $Ax=b$ ($|A|\neq 0, b\neq 0$) 的系数矩阵 A 和右端项 b 有微小的扰动 $\Delta A, \Delta b$, 扰动后的方程组为

$$(A-\Delta A)(x-\Delta x)=b-\Delta b.$$

当 $\|A^{-1}\|\|\Delta A\|<1$ 时, 则 $Ax=b$ 的近似解 $\tilde{x}$ 的相对误差估计式为

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}\leqslant\frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1-\|A\|\|A^{-1}\|\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}\left(\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}+\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}\right).$$

证明 由 $(A-\Delta A)(x-\Delta x)=b-\Delta b$ 及 $Ax=b$ 可知

$$A\Delta x=\Delta b-\Delta Ax+\Delta A\Delta x,$$

即

$$\Delta x=A^{-1}\Delta b-A^{-1}\Delta Ax+A^{-1}\Delta A\Delta x,$$

于是得到

$$\|\Delta x\|\leqslant\|A^{-1}\|\|\Delta b\|+\|A^{-1}\|\|\Delta A\|\|x\|+\|A^{-1}\|\|\Delta A\|\|\Delta x\|,$$

即

$$\boxed{\begin{aligned}&\|\Delta x\|\left(1-\|A^{-1}\|\|\Delta A\|\right)\leqslant\|A^{-1}\|\|\Delta b\|+\|A^{-1}\|\|\Delta A\|\|x\|,\\ \Longrightarrow\quad&\|\Delta x\|\leqslant\frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\|\|\Delta A\|}\left(\|\Delta b\|+\|\Delta A\|\|x\|\right).\end{aligned}}$$

解的相对误差估计

两边同除 $\|x\|$ 得到

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leqslant \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\|\|\Delta A\|}\left(\frac{\|\Delta b\|}{\|x\|} + \|\Delta A\|\right).$$

注意到

$$\|b\| = \|Ax\| \leqslant \|A\|\|x\| \quad \Longrightarrow \quad \frac{1}{\|x\|} \leqslant \frac{\|A\|}{\|b\|}.$$

于是有

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

解的相对误差估计

可以看出, 当 $\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}$ 较小时, 近似解的相对误差约为 A 的相对误差与 b 的相对误差的和的 $\|A\|\|A^{-1}\|$ 倍.

由于
$$1 = \|I\| = \|AA^{-1}\| \leqslant \|A\|\|A^{-1}\|,$$
因此误差被放大.

当 $\|A\|\|A^{-1}\|$ 较小时, 解的相对误差就小; 反之就大.

$\|A\|\|A^{-1}\|$ 反映了原始数据对解的影响. 如何衡量它的大小?

矩阵的条件数

定义

设 A 是非奇异矩阵, $\mathrm{Cond}(A) \triangleq \|A\|\|A^{-1}\|$ 称为矩阵的条件数.

常用的矩阵条件数

(1) $\mathrm{Cond}_\infty(A) = \|A\|_\infty\|A^{-1}\|_\infty$;

(2) $\mathrm{Cond}_2(A) = \|A\|_2\|A^{-1}\|_2 = \sqrt{\dfrac{\lambda_{\max}(A^TA)}{\lambda_{\min}(A^TA)}}$.

当 A 对称时,

$$\mathrm{Cond}_2(A) = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|},$$

其中 λ_1 是 A 的绝对值最大的特征值, λ_n 是 A 的绝对值最小的特征值.

矩阵的条件数

关于矩阵的条件数, 有如下性质

(1) $\mathrm{Cond}(A) \geqslant 1$.

(2) $\forall k \neq 0$, $\mathrm{Cond}(kA) = \mathrm{Cond}(A)$.

(3) A 是正交矩阵时, $\mathrm{Cond}_2(A) = 1$.

(4) A 是对称矩阵时, $\mathrm{Cond}_2(A) = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$.

矩阵的条件数刻画了线性方程组 $Ax = b$ 的性态.

A 条件数大 $\Longrightarrow$ A 病态矩阵; $Ax = b$ 病态方程组.
A 条件数小 $\Longrightarrow$ A 良态矩阵; $Ax = b$ 良态方程组.

Ill–posed,
Well–posed

矩阵的条件数

例 3：已知 $Ax=b$ 有如下形式：

$$\begin{pmatrix} 1 & 1.0001 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

(1) 求 $\mathrm{Cond}_\infty(A)$ 和 $Ax=b$ 的解 x.

(2) 设 $b-\Delta b=(2.0001,2)^T$, 求 $\widetilde{x}$.

(3) 在 (2) 的条件下求 $\frac{\|\Delta b\|_\infty}{\|b\|_\infty}$ 和 $\frac{\|\Delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty}$.

解 (1) 易知 $x=(2,0)^T$ 以及

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} -10^4 & 1.0001\times 10^4 \\ 10^4 & -10^4 \end{pmatrix},$$

于是有

$$\|A\|_\infty = 2.0001, \quad \|A^{-1}\|_\infty = 2.0001\times 10^4,$$

$$\mathrm{Cond}_\infty(A) = \|A\|_\infty\|A^{-1}\|_\infty = 2.0001\times 2.0001\times 10^4 \approx 4\times 10^4.$$

(2)

$$\begin{pmatrix} 1 & 1.0001 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widetilde{x}_1 \\ \widetilde{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.0001 \\ 2 \end{pmatrix} \implies \widetilde{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

(3) 由 (1) 和 (2) 可知

$$\begin{aligned} \|\Delta b\|_\infty &= 0.0001, & \|b\|_\infty &= 2, \\ \|\Delta x\|_\infty &= 1, & \|x\|_\infty &= 2, \end{aligned}$$

于是有

$$\begin{aligned} \frac{\|\Delta b\|_\infty}{\|b\|_\infty} &= \frac{0.0001}{2} = 0.005\%, \\ \frac{\|\Delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty} &= \frac{1}{2} = 50\%. \end{aligned}$$

病态方程组的判别

(1) $|\det(A)|$ 很小, 或者 A 的某些行或列近似线性相关

(2) A 的元素数量级相差悬殊

(3) 用列主元高斯消去法求解时, 出现量级很小的列主元

(4) 解对原始数据的变化比较敏感

(5) 求出的解与预期相差较大

病态方程组的求解

(1) 采用高精度算法, 如双精度, 减少舍入误差

(2) 采用数值稳定性好的算法

(3) 平衡法：当 A 的元素数量级相差很大时, 采用行平衡或列平衡方法, 降低条件数

行平衡：$s_i = \max\limits_{1\leqslant j\leqslant n} |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \cdots, n$

令 $D = \text{diag}\left(\frac{1}{s_1}, \frac{1}{s_2}, \cdots, \frac{1}{s_n}\right)$, 然后求解方程

$$DAx = Db.$$

病态方程组的求解

例 4：原 $Ax=b$：

$$\begin{pmatrix} 0.1 & 0.1 \\ 0.1 & 10^{10} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.2 \\ 10^{10} \end{pmatrix},$$

$$\mathrm{Cond}_\infty(A) \approx 10^{11} \quad \Longrightarrow \quad \text{病态方程组}$$

采用行平衡方法，有

$$D = \mathrm{diag}(10, 10^{-10}),$$

于是得到新的方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-11} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathrm{Cond}_\infty(DA) = 4 \quad \Longrightarrow \quad \text{良态方程组}$$

病态方程组的求解

(4) 迭代改善技术 (残差修正法)

设 $\widetilde{x}$ 为 $Ax = b$ 的一个近似解, 求修正量 $\Delta\widetilde{x}$ 使得

$$A(\widetilde{x} + \Delta\widetilde{x}) = b \implies A\Delta\widetilde{x} = b - A\widetilde{x}.$$

定义残向量

$$r \triangleq b - A\widetilde{x},$$

于是有

$$A\Delta\widetilde{x} = r,$$

求解得到 $\Delta\widetilde{x}$, 则 $\widetilde{x} + \Delta\widetilde{x}$ 为 $Ax = b$ 更为准确的近似解.

令 $\widetilde{\widetilde{x}} = \widetilde{x} + \Delta\widetilde{x}$, 用上述过程再进行修正, 直到满足精度要求.