§ 2.2 三角分解法

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

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

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

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

$$\boldsymbol{L}_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & \bigcirc & \\ & & 1 & & \\ \bigcirc & & l_{k+1,k} & \ddots & \\ & & \vdots & \bigcirc & \\ & & l_{n,k} & & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\ldots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & \bigcirc \\ & 1 & \\ l_{i,j} & & \ddots \\ & & & 1 \end{pmatrix} \overset{\text{记为}}{=\!=\!=} L$$

单位下三角阵

/* unitary lower-triangular matrix */

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

A 的 LU 分解 /* LU factorization */

or LR分解

$$\boldsymbol{A}\vec{\boldsymbol{x}} = \vec{\boldsymbol{b}} \Rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{L}\vec{\boldsymbol{y}} = \vec{\boldsymbol{b}} \\ U\vec{x} = \vec{y} \end{cases}$$

定理： 设A为n阶矩阵，如果A的顺序主子式 /* determinant of leading principal submatrices */ $D_i \neq 0 \ (i = 1, 2, \cdots, n-1)$，则 A 的 LU 分解唯一（其中 L 为单位下三角阵）。

证明： 显然，LU 分解存在。下面证明唯一性。

若不唯一，则可设 $A = L_1U_1 = L_2U_2$，推出

$$U_1 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2 U_2 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2 = I \ ✓$$

Upper-triangular

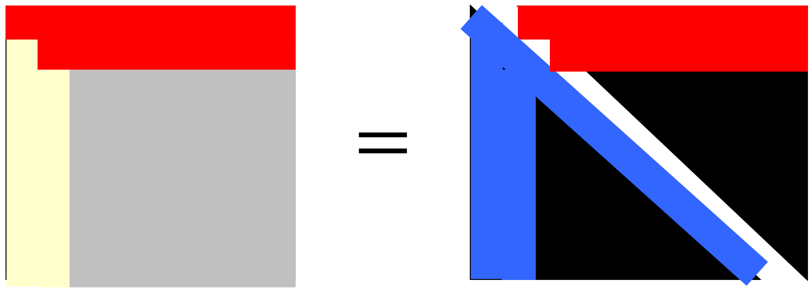
Lower-triangular With diagonal entries 1

注：L 为一般下三角阵而 U 为单位上三角阵的分解称为 Crout 分解。

实际上只要考虑 A^T 的 LU 分解，即$A^T = \tilde{L}\tilde{U}$，则 $A = \tilde{U}^T \tilde{L}^T$ 即是 A 的 Crout 分解。

- 道立特分解法 /* 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。

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

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

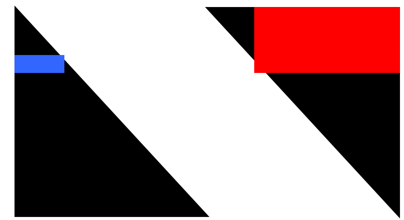
$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} u_{kj}$$

$l_{ii} = 1$

固定 i :

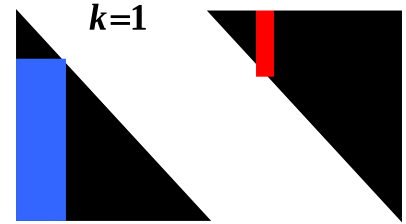
对 $j = i, i+1, \ldots, n$ 有 $a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + u_{ij}$

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



将 i , j 对换，对 $j = i, i+1, \ldots, n$ 有 $a_{ji} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki} + l_{ji} u_{ii}$

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

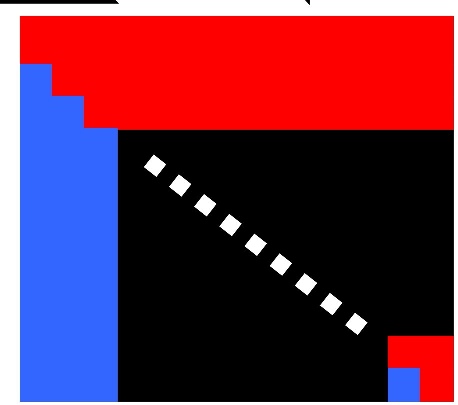


Algorithm: Doolittle Factorization

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



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

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

例:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & -2 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

再求第一列

解:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & -2 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & \\ \frac{1}{2} & -\frac{7}{5} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ & -\frac{5}{2} & \frac{7}{2} \\ & & \frac{54}{10} \end{pmatrix}$$

先求第一行

$3+\frac{1}{2}$

$\dfrac{3-\frac{1}{2}(-1)}{(-\frac{5}{2})}$

$1-\frac{1}{2}+\frac{7}{5}*\frac{7}{2}$

$-2-\frac{1}{2}$

例　用直接三角分解法求解

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14 \\ 18 \\ 20 \end{bmatrix}$$

解：用分解公式计算得

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & -24 \end{bmatrix} = LU$$

求解

$LY = (14,18,20)^T$ ，得 $Y = (14,-10,-72)^T$

$UX = (14,-10,-72)^T$ ，得 $X = (1,2,3)^T$

➢ 平方根法 /* Choleski's Method */：

——对称正定矩阵的分解法

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 $\det (A_k) > 0$

将对称正定阵 A 做 LU 分解

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

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

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

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

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

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 $1 \le i \le n$ of L.

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

Step 2 For $j = 2, \ldots, n$, set $l_{j1} = a_{j1} / l_{11}$;

Step 3 For $i = 2, \ldots, n-1$, do steps 4 and 5

Step 4 Set $l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}$;

Step 5 For $j = i+1, \ldots, n$, set $l_{ji} = \left(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} l_{ik}\right) / l_{ii}$;

Step 6 Set $l_{nn} = \sqrt{a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}^2}$;

Step 7 Output (l_{ij} for $j = 1, \ldots, i$ and $i = 1, \ldots, n$);

STOP.

§ 2.3 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

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

$\|A^{-1}\|$绝对误差放大因子

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

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

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

$\|A\|\|A^{-1}\|$绝对误差放大因子

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

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

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

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

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

$$=\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}$$

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

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

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

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

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

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

注: ☞ $cond\,(A)=\|A\|\cdot\|A^{-1}\|$ 为矩阵A的条件数。其具体大小与 $\|\cdot\|$ 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 $cond\,(A)_p\ge 1$；
- 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: $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 1 & 0.99 \\ 0.99 & 0.98 \end{pmatrix}$, $\vec{\boldsymbol{b}}=\begin{pmatrix} 1.99 \\ 1.97 \end{pmatrix}$ 精确解为 $\vec{x}=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

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

计算 $cond\,(A)_2$。

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 $\vec{\boldsymbol{b}}$ 一个扰动 $\delta\vec{\boldsymbol{b}}=\begin{pmatrix} -0.97\times 10^{-4} \\ 0.106\times 10^{-3} \end{pmatrix}$, 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 $$\boldsymbol{H}_n=\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{bmatrix}$$

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

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