第2章　矩阵变换和计算

2.1 矩阵的三角分解及其应用

2.1.1 Gauss消去法与矩阵的LU分解

2.1.2 Gauss列主元消去法与带列主元的*LU*分解

2.1.3 对称矩阵的Cholesky分解

2.1.4 三对角矩阵的三角分解

2.1.5 条件数与方程组的性态

2.1.6 矩阵的*QR*分解

2.1.1 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

高斯（C.F.Gauss,1777.4.30～1855.2.23）

高斯是德国数学家、物理学家和天文学家，出生于德国布伦兹维克的一个贫苦家庭。父亲先后当过护堤工、泥瓦匠和园丁。

在全世界广为流传的一则故事说，高斯10岁时算出老师给学生们出的将1到100的所有整数加起来的算术题，老师刚叙述完题目，高斯就算出了正确答案。不过，据考证老师当时给孩子们出的是一道更难的加法题： 81297+81495+81693+…+10089 。当然，这也是一个等差数列的求和问题（公差为198，项数为100）。当老师刚一写完时，高斯也算完并把写有答案的小石板交了上去。

高斯有“数学王子”、“数学家之王”的美称、被认为是人类有史以来“最伟大的四位数学家之一”（阿基米德、牛顿、高斯和欧拉）。

高斯的研究领域，遍及纯粹数学和应用数学的各个领域，并且开辟了许多新的数学领域。人们评价到：若把18世纪的数学家想象为一系列的高山峻岭，那么最后一个令人肃然起敬的巅峰就是高斯；如果把19世纪的数学家想象为一条条江河，那么其源头就是高斯。

例1　Gauss消去法求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$

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

第一步，消去 $r_2^{(0)}$ 、$r_3^{(0)}$ 和 $r_4^{(0)}$ 中的 x_1，即用

$r_2^{(0)}+\left(-\frac{4}{2}\right)\times r_1^{(0)}$、$r_3^{(0)}+\left(-\frac{8}{2}\right)\times r_1^{(0)}$和 $r_4^{(0)}+\left(-\frac{6}{2}\right)\times r_1^{(0)}$得

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

第二步，消去$r_3^{(1)}$和$r_4^{(1)}$中的x_2，即用

$r_3^{(1)} + \left(-\dfrac{3}{1}\right) \times r_2^{(1)}$和 $r_4^{(1)} + \left(-\dfrac{4}{1}\right) \times r_2^{(1)}$得

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

第三步，消去 $r_4^{(2)}$ 中的 x_3，即用

$r_4^{(1)} + \left(-\frac{2}{2}\right) \times r_3^{(2)}$ 得

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

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & \Rightarrow 2x_1 + 1 + 1 = 4 - 2 \\ x_2 + x_3 + x_4 = 3 & \Rightarrow x_2 + 1 + 1 = 3 - 2 \\ 2x_3 + 2x_4 = 4 & \Rightarrow 2x_3 + 2 \times 1 = 4 - 2 \\ 2x_4 = 2 & \Rightarrow x_4 = \frac{2}{2} = 1 \end{cases}$$

上述为回代求解过程，得 $x = (1, 1, 1, 1)^T$。

Gauss消去法的实质是首先通过一系列的初等行变换将增广矩阵 $(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b})$ 化成上三角矩阵 $(\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{c})$，然后通过回代求与 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 三角方程组 $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{c}$ 的解。

我们来观察Gauss消去法求 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的解，增广矩阵 $(\boldsymbol{A}\mid\boldsymbol{b})$ 化成上三角矩阵 $(\boldsymbol{U}\mid\boldsymbol{c})$ 的过程，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\4&3&3&1\\8&7&9&5\\6&7&9&8\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}4\\11\\29\\30\end{pmatrix}$$

返回

解 $(A \mid b)$

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

三次消元过程写成矩阵的形式分别为：

$$\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&&&\\-2&1&&\\-4&&1&\\-3&&&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\4&3&3&1\\8&7&9&5\\6&7&9&8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&3&5&5\\0&4&6&8\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L}_2(\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&-3&1&\\&-4&&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&3&5&5\\0&4&6&8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&0&2&2\\0&0&2&4\end{pmatrix}$$

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

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

再注意到：

$$\boldsymbol{L}_1=\begin{pmatrix}1&&&\\-2&1&&\\-4&&1&\\-3&&&1\end{pmatrix}\quad \boldsymbol{L}_2=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&-3&1&\\&-4&&1\end{pmatrix}\quad \boldsymbol{L}_3=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&-1&1\end{pmatrix}$$

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

$$\boldsymbol{L}_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\2&1&&\\4&&1&\\3&&&1\end{pmatrix}\quad \boldsymbol{L}_2^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&3&1&\\&4&&1\end{pmatrix}\quad \boldsymbol{L}_3^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&1&1\end{pmatrix}$$

所以，刚才的计算过程可以表示为

$$L_3 L_2 L_1 A = U$$

令

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

从而有

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

$$A$$

则得到矩阵 A 的 LU 分解。

定义2.1 对于 n 阶方阵 A，如果存在 n 阶单位下三角矩阵 L 和 n 阶上三角矩阵 U，使得

$$A = LU$$

则称其为矩阵 A 的 LU 分解，也称**Doolittle分解**。

Doolittle方法求解线性方程组：

$$Ax = b_n \Leftrightarrow (LU)x = b_n \qquad n = 1, 2, \cdots$$

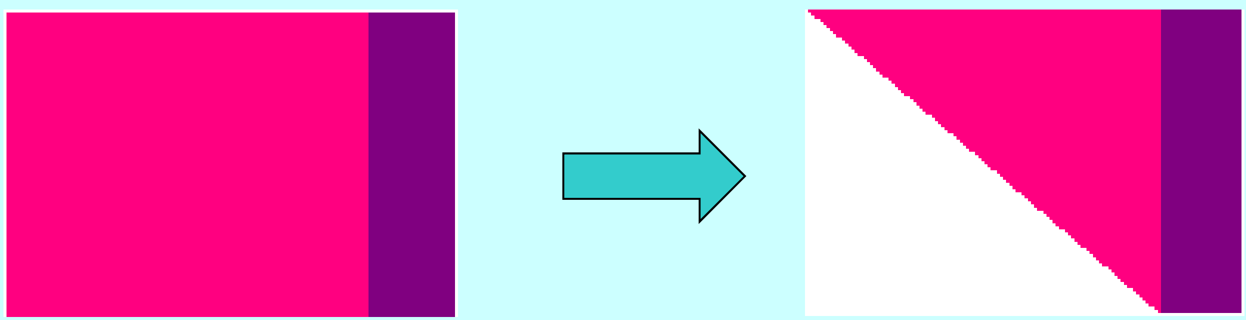
$$\Updownarrow$$

$$\begin{cases} Ly = b_n \\ Ux = y \end{cases} \qquad n = 1, 2, \cdots$$

下面对一般n阶方阵 A 进行 LU 分解。通过前例我们可以想到

思路

首先将A化为上三角阵，再回代求解。



步骤如下：

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)：$(\boldsymbol{n}-1)*(\boldsymbol{n}+\mathbf{1})$

$$\boldsymbol{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -l_{n1} & & & 1 \end{pmatrix}$$

行乘子(数)

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, i = 2, \cdots, n$$

$$\boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

第二步： 第i行 − 第2行 $\times \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}, i = 3, \cdots, n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

运算量： $(\boldsymbol{n}\text{-}\mathbf{2}) * (1 + \boldsymbol{n} - 1) = (\boldsymbol{n}\text{-}\mathbf{2})\boldsymbol{n}$

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

返回

$$\boldsymbol{L}_k\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b})=$$

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

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

运算量： $(n-k)*(1+n-k+1)=(n-k)(n-k+2)$

$n-1$步以后，我们可以得到变换后的矩阵为：

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{L}_{n-2}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b})=(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} & b_n^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{L}_{n-2}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1)^{-1}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{2,1} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & 1 & \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L}^{-1}(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

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

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow \boldsymbol{L}(\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow \begin{cases} \boldsymbol{L}\boldsymbol{c} = \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c} \end{cases}$$

第k步运算量：

$(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{k})*(\mathbf{1}+\boldsymbol{n}-\boldsymbol{k}+\mathbf{1})=(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{k})(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{k}+\mathbf{2})$

因此，$\boldsymbol{n}-\mathbf{1}$步的总运算量为：

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

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

解$Ux=c$计算量

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

Gauss消去法求解n阶线性方程组的总计算量(乘除法次数)为:

$$\left(\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5n}{6}\right)+\left(\frac{n^2}{2}+\frac{n}{2}\right)=$$

$$\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3} \qquad =3060\ (n=20)$$

当n较大时，它和　　　同阶的。

Gauss消去法可执行的条件?

回忆

A 的k 阶顺序主子式

主元 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$

$$A = \begin{pmatrix} L_1^* & O \\ * & L_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 & U_2 \\ O & U_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_1^* U_1 & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

$$D_k = \det(L_1^* U_1) = \det(L_1^*)\det(U_1) = \det(U_1)$$

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

令 $D_0 = 1$ 则 $a_{kk}^{(k-1)} = \dfrac{D_k}{D_{k-1}}, k = 1,2,\ldots,n-1$

定理2.1（矩阵LU分解的存在和唯一性）

充分条件

如果n阶矩阵A的各阶顺序主子式D_k(k=1,…,n)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。

证明唯一性，设 $L_1U_1 = L_2U_2$

$$L_2^{-1}L_1 = U_2U_1^{-1} \quad = I \qquad L_2 = L_1, U_2 = U_1$$

单位下三角阵

上三角阵

注 上面定理中条件可减弱为

$$D_k \neq 0 \ (k=1, \cdots, n-1)$$

但证明过程略有不同，此时U_1和U_2均不可逆。令

$$L_1 = \begin{pmatrix} L_{11} & \mathbf{0} \\ l_1^T & 1 \end{pmatrix} \qquad U_1 = \begin{pmatrix} U_{11} & u_1 \\ \mathbf{0}^T & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_2 = \begin{pmatrix} L_{22} & \mathbf{0} \\ l_2^T & 1 \end{pmatrix} \qquad U_2 = \begin{pmatrix} U_{22} & u_2 \\ \mathbf{0}^T & 0 \end{pmatrix}$$

由$L_1U_1 = L_2U_2$可得，

$$\left.\begin{array}{ll} L_{11}U_{11} = L_{22}U_{22} \Longrightarrow & L_{11} = L_{22}, U_{11} = U_{22} \\ L_{11}u_1 = L_{22}u_2 \Longrightarrow & u_1 = u_2 \\ l_1^T U_{11} = l_2^T U_{22} \Longrightarrow & l_1 = l_2 \end{array}\right\} \quad \begin{array}{l} L_1 = L_2 \\ U_1 = U_2 \end{array}$$

P85 习题2 下述矩阵能否LU分解，是否唯一？

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

不能做LU分解！

事实上，A的各阶顺序主子式为 1,0,-10

$$B=\begin{pmatrix}1&1&1\\2&2&1\\3&3&1\end{pmatrix}\xrightarrow{L_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&\\-2&1&\\-3&&1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}1&2&3\\0&0&-1\\0&0&-2\end{pmatrix}=U_1$$

$$\xrightarrow{L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1&&\\&1&\\&-2&1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}1&2&3\\0&0&-1\\0&0&0\end{pmatrix}=U_2$$

可以LU分解，但不唯一！ $B=L_1U_1=(L_1L_2)U_2$

事实上，B的各阶顺序主子式为 1, 0, 0

$$C=\begin{pmatrix}1&2&6\\2&5&15\\6&15&46\end{pmatrix}\xrightarrow{L_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&\\-2&1&\\-6&&1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}1&2&6\\0&1&3\\0&3&10\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1&&\\&1&\\&-3&1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}1&2&6\\0&1&3\\0&0&1\end{pmatrix}=U$$

可以LU分解，且唯一！ $C=LU=(L_1L_2)U$

事实上，C的各阶顺序主子式为 1, 1, 1

紧凑格式

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

比较等式两端得到

$$a_{1j} = u_{1j} \Longrightarrow u_{1j} = a_{1j},\ j = 1, 2, \ldots, n$$

$$a_{j1} = l_{j1}u_{11} \Longrightarrow l_{j1} = a_{j1}/u_{11},\ j = 2, \ldots, n$$

对于$i = 2$

$$a_{22} = l_{21}u_{12} + u_{22} \Longrightarrow u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}$$

$$a_{32} = l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} \Longrightarrow l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}u_{12}}{u_{22}}$$

$$a_{23} = l_{21}u_{13} + u_{23} \Longrightarrow u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}$$

$$a_{2j} = l_{21}u_{1j} + u_{2j} \Longrightarrow u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j},\ j = 2, 3, \ldots, n$$

$$a_{j2} = l_{j1}u_{12} + l_{j2}u_{22} \Longrightarrow l_{j2} = \frac{a_{j2} - l_{j1}u_{12}}{u_{22}},\ j = 3, 4, \ldots, n$$

同样的方法，对于任意的 $i = 2, 3, \ldots, n$

$$\begin{cases} u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}\,, & j = i\,,\ i+1\,,\ \cdots\,,\ n \\ l_{ji} = \dfrac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki}}{u_{ii}}\,, & j = i+1\,,\ \cdots\,,\ n\,. \end{cases}$$

计算顺序

$$u_{11} \to u_{12} \to \ldots u_{1n} \to l_{21} \to l_{31} \to \ldots \to l_{n1} \to$$

$$u_{22} \to u_{23} \to \ldots u_{2n} \to l_{32} \to l_{42} \to \ldots \to l_{n2} \to \ldots$$

以上计算公式称为Doolittle分解计算公式

观察： 固定i，当算出u_{ij}时，a_{ij}在计算中不再出现，

故将u_{ij}存储在a_{ij}的位置上；

当算出l_{ji}时，a_{ji}在计算中不再出现，

故将l_{ji}存储在a_{ji}的位置上.

当实现A的LU分解后，矩阵A变为

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

Doolittle分解算法

$$
\begin{cases}
a_{1j} = a_{1j}, j = 1, 2, \ldots, n \\
a_{j1} = a_{j1}/u_{11}, j = 2, \ldots, n
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
a_{ij} = a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}\ , \quad j = i\ ,\ i+1\ ,\ \cdots\ ,\ n \\
d_{ji} = \dfrac{a_{ji} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki}}{u_{ii}}\ , \qquad j = i+1\ ,\ \cdots\ ,\ n\ . \\
i = 2, 3, \ldots, n
\end{cases}
$$

Crout分解算法：*L*是下三角矩阵，*U*是单位上三角矩阵

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

则可得到如下的Crout分解算法

$$\begin{cases} l_{j1} = a_{j1}, & j = 1, 2, \cdots, n \\ u_{1j} = \dfrac{a_{1j}}{l_{11}}, & j = 2, \cdots, n, \end{cases} \qquad \begin{cases} l_{ji} = a_{ji} - \displaystyle\sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki}, & j = i, i+1, \cdots, n \\ u_{ij} = \dfrac{a_{ij} - \displaystyle\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}}{l_{ii}}, & j = i+1, \cdots, n, \end{cases}$$

LDU分解

矩阵还可以做如下分解：

$$A = LDU$$

其中是L单位下三角矩阵，U是单位上三角矩阵

D是一个非奇异的对角矩阵，则称矩阵A有LDU分解

例

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

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

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

例3 试利用LU分解求矩阵A的逆矩阵，其中

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

分析：求解n阶矩阵的逆矩阵相当于求解n个线性方程组，对于同时求解多个方程组，且系数矩阵相同的问题，用矩阵分解的方法去解会减少计算量。

解：设其逆矩阵为

$$X = A^{-1} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} \end{pmatrix} = (X_1 \;\; X_2 \;\; X_3 \;\; X_4)$$

则根据逆矩阵的定义，求逆等价于求解

$$AX_i = e_i, \quad i = 1, 2, 3, 4$$

$$\Longleftrightarrow \quad LUX_i = e_i \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} LY_i = e_i, \\ UX_i = Y_i \end{cases}$$

由 $LY_1=e_1$ 得，$Y_1=(1,-2,2,3)^T$

由 $UX_1=Y_1$ 得，$X_1=(\frac{9}{4},-3,-\frac{1}{2},\frac{3}{2})^T$

同理可得，

$$\boldsymbol{X}_2=\begin{pmatrix}-\dfrac{3}{4} & \dfrac{5}{2} & -1 & -\dfrac{1}{2}\end{pmatrix}^T$$

$$\boldsymbol{X}_3=\begin{pmatrix}-\dfrac{1}{4} & -\dfrac{1}{2} & 1 & -\dfrac{1}{2}\end{pmatrix}^T$$

$$\boldsymbol{X}_4=\begin{pmatrix}\dfrac{1}{4} & 0 & -\dfrac{1}{2} & \dfrac{1}{2}\end{pmatrix}^T$$

所以

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

注意到，计算过程中$a_{kk}^{(k-1)}$处在被除的位置，因此整个计算过程要保证它不为0。所以，**Gauss消元法的可行条件**为：

$$\text{主元}\quad a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$$

而这一条件的等价条件是要求A的各阶顺序主子式均不为0，即

$$\det\left(\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{bmatrix}\right) \neq 0, \quad i = 1, \cdots, n.$$

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

于是便有了——

2.1.2

Gauss列主元消去法

与

带列主元的LU分解

1. Gauss列主元消去法

例4　在一台八位十进制的计算机上，用Gauss消去法解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 \\ -2 & 1.072 & 5.643 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

解：

$$(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b})=\begin{pmatrix}10^{-8} & 2 & 3 & 1\\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2\\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{第三次消元}}\begin{pmatrix}10^{-8} & 2 & 3 & 1\\ 0 & 0.2\times10^{9} & 0.3\times10^{9} & 0.1\times10^{9}\\ 0 & 0.4\times10^{9} & 0.6\times10^{9} & 0.2\times10^{9}\end{pmatrix}=(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

显然 $(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$有无穷多解. 但实际上， $\det(\boldsymbol{A})\neq 0$ 原线性方程组有唯一解。小主元作除数导致舍入误差使解面目全非!

Gauss列主元消去法：

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，即在第k步$(k=1,2,\cdots,n-1)$消元时，首先在第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，并通过初等行交换，使得该数位于主对角线上，然后再继续消元．称该绝对值最大的数为列主元．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4　　用Gauss列主元消去法解例2中的方程组。

解　$$(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b})=\begin{pmatrix}10^{-8} & 2 & 3 & 1\\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2\\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{选列主元,交换第一和第三行}}\begin{pmatrix}-2 & 1.072 & 5.643 & 3\\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2\\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{第一次消元}}\cdots\xrightarrow{\text{第二次消元}}\begin{pmatrix}-2 & 1.072 & 5.643 & 3\\ 0 & 0.3176\times10 & 0.1801\times10 & 0.5\\ 0 & 0 & 0.1865541\times10 & 0.6851854\end{pmatrix}$$

$$=(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

用回代法求$(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$的解得

$$\tilde{\boldsymbol{x}}=(-0.49105820,-0.05088607,0.36725739)^T$$

2． 带列主元的*LU*分解

由上述Gauss列主元消去过程可以得到矩阵的带有列选主元的*LU*分解，还是以例1中的系数矩阵*A*为例来说明。

回忆

[illegible] L_3：

[illegible] $= \boldsymbol{U}$

实际上，上述过程可以表示为

$$L_3P_3L_2P_2L_1P_1A=U$$

显然，$L_3P_3L_2P_2L_1P_1$ 似乎并不是一个单位下三角矩阵．我们将上式改写为

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

由 $\boldsymbol{P}_i$ 的定义知 $\boldsymbol{P}_i^{-1}=\boldsymbol{P}_i$, 即

$$\boldsymbol{P}_1=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}_1^{-1}\qquad \boldsymbol{P}_2=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}_2^{-1}$$

$$\boldsymbol{P}_3=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}_3^{-1}$$

从而，记

$$\widetilde{L}_2 = P_3 L_2 P_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & \frac{2}{7} & 1 & \\ & \frac{3}{7} & & 1 \end{pmatrix}$$

*L*的下标比*P*的下标小

$$\widetilde{L}_1 = P_3 P_2 L_1 P_2 P_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\frac{3}{4} & 1 & & \\ -\frac{1}{2} & & 1 & \\ -\frac{1}{4} & & & 1 \end{pmatrix}$$

显然，$\tilde{L}_2$和$\tilde{L}_1$分别与L_2和L_3结构相同，只是下三角部分的元素进行相应的对调。

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

$$\Updownarrow$$

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

进一步，得

$$P_3P_2P_1A = \tilde{L}_1^{-1}\tilde{L}_2^{-1}L_3^{-1}U$$

令

$$P = P_3P_2P_1, \tilde{L} = \tilde{L}_1^{-1}\tilde{L}_2^{-1}L_3^{-1}$$

则有

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}_3\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L} = \widetilde{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{1}}^{-1}\widetilde{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{2}}^{-1}\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{3}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{2}{7} & 1 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{7} & \frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}$$

这样，我们得到另一种形式的矩阵分解：

$$\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$$

$$\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\4&3&3&1\\8&7&9&5\\6&7&9&8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&&&\\\frac{3}{4}&1&&\\\frac{1}{2}&-\frac{2}{7}&1&\\\frac{1}{4}&-\frac{3}{7}&\frac{1}{3}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}8&7&9&5\\&\frac{7}{4}&\frac{9}{4}&\frac{17}{4}\\&&-\frac{6}{7}&-\frac{2}{7}\\&&&\frac{2}{3}\end{pmatrix}$$

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

一般地, 如果A为n阶方阵，进行**Gauss**列主元消去过程为

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}$$

类似的，可以改写成

$$(\boldsymbol{L}_{n-1}\widetilde{\boldsymbol{L}}_{n-2}\cdots\widetilde{\boldsymbol{L}}_2\widetilde{\boldsymbol{L}}_1)(\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1)\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}$$

其中，$\widetilde{L}_k = P_{n-1}\cdots P_{k+1}L_kP_{k+1}\cdots P_{n-1}$（$k=1,2,\ldots,n-2$）为与$L_k$的结构相同，只是下三角部分元素经过了对调。因此，令

$$L = (L_{n-1}\widetilde{L}_{n-2}\cdots\widetilde{L}_2\widetilde{L}_1)^{-1} \qquad P = P_{n-1}\cdots P_2P_1$$

则

$$PA = LU$$

定理 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 $PA = LU$ 。 (P可以不同，分解不唯一)

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

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

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

$\det(P) = (-1)^s, s$为换行次数

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow PAx = Pb$$

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

例 用Gauss列主元消去法解如下方程组并给出*PA=LU*分解。

解：

$$(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} 0 & -6 & -1 & -2 \\ 1 & 2 & 2 & 4 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{选列主元，交换第1和第三行}} \begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 4 \\ 0 & -6 & -1 & -2 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{第一次消元}}\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} & \frac{7}{2} \\ 0 & -6 & -1 & -2 \end{pmatrix}$$

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

$$\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & -6 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & \dfrac{5}{2} \end{pmatrix} = (\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{c})$$

用回代法求的解得：

$$x_3 = \frac{5}{2} \qquad x_2 = \frac{-2+\dfrac{5}{2}}{-6} = -\frac{1}{12} \qquad x_2 = -\frac{5}{6}$$

即 $\boldsymbol{x} = \left(-\dfrac{5}{6}, -\dfrac{1}{12}, \dfrac{5}{2}\right)^T$。

下面求相应的***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 $\boldsymbol{P}_1$

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

第一次消元，消去第一列主对角元以下的非零元，左乘 $\boldsymbol{L}_1$

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

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 $\boldsymbol{L}_2$

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

则分解应为：

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

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

即有： $PA = LU$

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

练习题 用列主元**Gauss**消去法解如下方程组，得到带列主元的LU分解，并求出 $\det(A)$

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 10 & -7 & 0 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ 6 \end{pmatrix}$$

解：

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 & 4 \\ 10 & -7 & 0 & 7 \\ 5 & -1 & 5 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow{\boldsymbol{P}_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ -3 & 2 & 6 & 4 \\ 5 & -1 & 5 & 6 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\boldsymbol{L}_1=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/10 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & -\frac{1}{10} & 6 & \frac{61}{10} \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & -\frac{1}{10} & 6 & \frac{61}{10} \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \end{pmatrix} \xrightarrow{P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \\ 0 & -\frac{1}{10} & 6 & \frac{61}{10} \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1/25 & 1 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \\ 0 & 0 & \frac{31}{5} & \frac{31}{5} \end{pmatrix} = (\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{c})$$

从而求得方程组解：$x_1 = 0 \quad x_2 = -1 \quad x_3 = 1$

$$L_2P_2L_1P_1A = U \qquad L_2(P_2L_1P_2^{-1})(P_2P_1)A = U$$

$$P = P_2P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \det(P) = 1$$

$$L = (L_2\widetilde{L}_1)^{-1} = (L_2P_2L_1P_2^{-1})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ -3/10 & -1/25 & 1 \end{pmatrix}$$

则 $PA = LU$

$$\det(PA) = \det(LU) = 10\times\frac{5}{2}\times\frac{31}{5} = 155, \quad \det(A) = 155$$

2.1.3 对称矩阵的Cholesky分解

将对称正定阵 A 做 LU 分解，得到L和U，进一步

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

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

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： $\boxed{A=\tilde{L}\tilde{L}^T}$

定理：（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。

下面研究如何进行对称正定矩阵的**Cholesky**分解．当然，上述的证明过程提供一种计算**Cholesky**分解的方法．我们还可以使用下面将要介绍的直接分解方法。

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

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

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

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

$$a_{22} = l_{21}^2 + l_{22}^2 \qquad \Rightarrow l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}$$

利用矩阵乘法规则和利用的下三角结构得到

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

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

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

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

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

$$\det(\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{L})\det(\boldsymbol{L}^T) = \prod_{j=1}^{n} l_{jj}^2$$

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

用平方根法解线性代数方程组的算法

（1）对矩阵A进行Cholesky分解，即$A=LL^T$，由矩阵乘法：对于 $j= 1, 2,\ldots, n$ 计算

$$l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

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

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

（2）求解下三角形方程组

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

（3）求解$\boldsymbol{L^T x = y}$

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

平方根法的数值稳定性

由 $a_{jj}=\sum_{k=1}^{j} l_{jk}^2$ ，推出 $\left|l_{jk}\right| \leq \sqrt{a_{jj}}$ ，k=1, 2, ⋯, j.

因此在分解过程中L的元素的数量级不会增长，故平方根法通常是数值稳定的，不必选主元。

P47 例4 用cholesky方法求解线性方程组

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{pmatrix}$$

解

(1)计算$L = \begin{pmatrix} 2 & & \\ -0.5 & 2 & \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix}$

(2) 求解$Ly=b$，得$y=\{2,3.5,1\}^T$

(3) 求解$L^Tx=y$，得$x=\{1,1,1\}^T$

2.1.4 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

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

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1 & & & & \\
l_2 & 1 & & & \\
 & l_3 & \ddots & & \\
 & & \ddots & 1 & \\
 & & & l_n & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_1 & d_1 & & & \\
 & u_2 & d_2 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & u_{n-1} & d_{n-1} \\
 & & & & u_n
\end{pmatrix}
$$

$$c_i = d_i$$

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

$$a_i = l_i \cdot u_{i-1}$$

$$d_i = c_i$$

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

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

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

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

$$y_1 = f_1$$

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

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

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

$$u_n \cdot x_n = y_n \qquad x_n = y_n / u_n$$

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

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

用追赶法解三对角形方程组的算法

（1）对矩阵A进行LU分解，公式如下：

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

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

LU分解计算量：乘除法2(n-1),加减法n-1

（2）求解下三角形方程组

$$y_1 = f_1 \quad , \quad y_i = f_i - l_i y_{i-1}, i = 2,3,\cdots,n$$

（3）求解$\boldsymbol{Ux = y}$

$$x_n = y_n / u_n \quad , x_i = (y_i - c_i x_{i+1}) / u_i, i = n-1, n-2, \cdots, 1$$

解方程计算量：乘除法3(n-1)+1,加减法2(n-1)

追赶法总计算量：乘除法5n-4,加减法3(n-1)

定理　设具有三对角形式的矩阵*A*，满足条件

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

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

对角占优

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

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

注：定理条件中 $a_i c_i \neq 0$，如果某个 $a_i = 0$ 或 $c_i = 0$ ，则可化成低阶方程组求解.

证明　已知　$u_1 = b_1, l_i = a_i / u_{i-1}, u_i = b_i - l_i \cdot c_{i-1}, i = 2,3,\ldots,n$

于是　$|b_1| > |c_1| > 0 \quad \Rightarrow u_1 = b_1 \neq 0, \quad 0 < \left|c_1 / u_1\right| < 1$

归纳法证明　$u_i \neq 0, \quad 0 < \left|c_i / u_i\right| < 1, \quad i = 2,3,\ldots,n-1$

假设　$u_{i-1} \neq 0, 0 < \left|c_{i-1} / u_{i-1}\right| < 1,$　于是

$$\left|u_i\right| = \left|b_i - l_i \cdot c_{i-1}\right| = \left|b_i - a_i \cdot c_{i-1} / u_{i-1}\right|$$

$$\geq \left|b_i\right| - \left|a_i\right| \cdot \left|c_{i-1} / u_{i-1}\right| \quad > \left|b_i\right| - \left|a_i\right| \quad \geq \left|c_i\right|$$

而且　$\left|u_n\right| = \left|b_n - l_n \cdot c_{n-1}\right| \geq \left|b_n\right| - \left|a_n\right|\left|c_{n-1} / u_{n-1}\right| > \left|b_n\right| - \left|a_n\right| > 0$

于是 $\det(A) = \det(L)\det(U) = u_1 u_2 \cdots u_n \neq 0$ 方程组的解存在唯一

追赶法的优点：

- 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）

$$
\begin{aligned}
|u_i| &= |b_i - l_i \cdot c_{i-1}| = |b_i - a_i \cdot c_{i-1} / u_{i-1}| \\
&\le |b_i| + |a_i| \cdot |c_{i-1} / u_{i-1}| < |b_i| + |a_i|
\end{aligned}
$$

$$
|b_i| - |a_i| < |u_i| < |b_i| + |a_i|, d_i = c_i, |l_i| = |a_i / u_{i-1}|
$$

2.1.5 条件数与方程组的性态

考虑线性方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.00001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 8.00001 \end{pmatrix}$$

它有准确解为: $x=(1,1)^T$ 。

如果方程组的系数矩阵以及右端项发生微小的变化，得

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 5.99999 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 8.00002 \end{pmatrix}$$

它有准确解: $x=(10,-2)^T$; 可以看出，方程组的解变化非常大。

定义　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A称为“良态”矩阵。

我们需要一种能刻画矩阵和方程组“病态”标准的量。

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

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

$$A(x+\delta x)=b+\delta b$$

绝对误差放大因子

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

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

相对误差放大因子

相对误差

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

定义 设A为非奇异矩阵，$\|\cdot\|$为矩阵的算子范数，则称 $\mathrm{cond}(A)=\|A\|\|A^{-1}\|$为矩阵$A$的条件数。

常用的条件数为：

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

$$\mathrm{cond}_1(A)=\|A\|_1\|A^{-1}\|_1$$

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

分别称为矩阵A的∞-条件数、**1**-条件数和**2**-条件数。

注意，由 $\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{-1}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H)\boldsymbol{A}$

$$\begin{aligned}\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{-1}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H)\boldsymbol{A})&=\det(\boldsymbol{A}^{-1}(\lambda\boldsymbol{I}-(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H))\boldsymbol{A})\\&=\det(\boldsymbol{A}^{-1})\cdot\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H)\cdot\det(\boldsymbol{A})\\&=\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H)\end{aligned}$$

则 $\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A})=\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H)$， $\|\boldsymbol{A}\|_2^2=\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A})$

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_2^2&=\lambda_{\max}((\boldsymbol{A}^{-1})^H\boldsymbol{A}^{-1})=\lambda_{\max}((\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{A}^{-1})\\&=\lambda_{\max}((\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1})=\lambda_{\max}((\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1})=\lambda_{\min}^{-1}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

故

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

矩阵的条件数具有如下的性质：

(1) $\mathrm{cond}(A)\geq 1$

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

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

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

(3) $\mathrm{cond}(\alpha A)=\mathrm{cond}(A)$ ， $\alpha\neq 0$ ， $\alpha\in\mathbf{R}$

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

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

(4) 如果U为酉（正交）矩阵，则

$$\mathrm{cond}_2(U)=1$$

$$\mathrm{cond}_2(UA)=\mathrm{cond}_2(AU)=\mathrm{cond}_2(A)$$

由第一章习题12酉矩阵与谱范数的性质可得

（5）A，B可逆 $\mathrm{cond}(AB)\le\mathrm{cond}(A)\cdot\mathrm{cond}(B)$

$$\mathrm{cond}(AB)=\|AB\|\left\|(AB)^{-1}\right\|$$

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

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

cond(A) 越大，解的相对误差界可能越大，A对求解线性方程组来说就越可能呈现病态。

但 cond(A) 多大A算病态，通常没有具体的定量标准；反之，cond(A) 越小，解的相对误差界越小，呈现良态。

n阶Hilbert矩阵

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

$$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{H}_4)=1.5514\times 10^4$$

$$\mathrm{cond}_2(\boldsymbol{H}_6)=1.4951\times 10^7$$

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

Hilbert矩阵常常出现在数据拟合和函数逼近的研究中。

与条件数有关的

一个数值例子、两个定理

一个数值例子：

在前面的例子中取 $\delta b = (0, 0.00001)^T, \delta A = O_{2\times 2}$。

我们观察 δb 对 x 的影响， 由

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

则 A 的条件数为：

$$\begin{aligned} \mathrm{cond}_\infty(A) &= \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty \\ &= 8.00001 \times 600000.5 \\ &\approx 4800010 \approx 4.8 \times 10^6 \end{aligned}$$

则线性方程组的相对误差界为：

$$\frac{\|\delta \boldsymbol{x}\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}\|_\infty} \le \operatorname{cond}_\infty(A)\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|_\infty}{\|\boldsymbol{b}\|_\infty} \approx 4.8\times10^6\times\frac{0.00001}{8}$$

$$\approx 4.8\times10^6\times0.125\times10^{-5}$$

$$\approx 6 \approx 600\%$$

可见，右端向量***b***其分量百分之一的变化，可能引起解向量***x***百分之六百的变化。

这说明矩阵***A***是严重病态矩阵，相应的线性方程组是病态方程组。

系数矩阵和右端项的扰动对解的影响

定理2.5 设 $Ax=b$，A为非奇异矩阵，b为非零向量且 A 和 b 均有扰动。若A的扰动 δA 非常小，使得 $\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1$，则

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

注：当 $\delta A=O$ 时，上述不等式为：$\dfrac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\operatorname{cond}(A)\dfrac{\|\delta b\|}{\|b\|}$

证明　由　$(A+\delta A)(x+\delta x)=b+\delta b \quad = Ax+\delta Ax+A\delta x+\delta A\delta x$

$$\delta x = A^{-1}\delta b - A^{-1}\delta A x - A^{-1}\delta A\,\delta x$$

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

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

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

$$\|b\| \le \|A\|\|x\|$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\|x\|} \le \frac{\|A\|}{\|b\|}$$

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

DUT 大连理工大学 DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

近似解的余量与它的相对误差间的关系

定理2.6 设$Ax=b$，A为非奇异矩阵，b为非零向量，则方程组近似解$\tilde{x}$的事后估计式为

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

其中称$\|b-A\tilde{x}\|$为近似解$\tilde{x}$的余量，简称余量。

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。

证明 由 $Ax=b$ $\quad b-A\tilde{x}=Ax-A\tilde{x}=A(x-\tilde{x})$

$$x-\tilde{x}=A^{-1}(b-A\tilde{x}) \qquad \|x-\tilde{x}\|\le\|A^{-1}\|\|b-A\tilde{x}\|$$

$$\|b\|\le\|A\|\|x\| \Rightarrow \frac{1}{\|x\|}\le\frac{\|A\|}{\|b\|}$$

$$\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|}\le\frac{\|A\|\|A^{-1}\|\|b-A\tilde{x}\|}{\|b\|}=\mathrm{cond}(A)\frac{\|b-A\tilde{x}\|}{\|b\|}$$

另一方面

$$x=A^{-1}b\Rightarrow\|x\|\le\|A^{-1}\|\|b\|\Rightarrow\frac{1}{\|x\|}\ge\frac{1}{\|A^{-1}\|\|b\|}$$

$$\|b-A\tilde{x}\|\le\|A\|\|x-\tilde{x}\|$$

$$\Rightarrow\|x-\tilde{x}\|\ge\frac{\|b-A\tilde{x}\|}{\|A\|} \qquad \Rightarrow\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|}\ge\frac{\|b-A\tilde{x}\|}{\|A\|\|A^{-1}\|\|b\|}=\frac{1}{\mathrm{cond}(A)}\frac{\|b-A\tilde{x}\|}{\|b\|}$$

条件数的几何意义

定理2.7　设$A \in \mathrm{R}^{n\times n}$非奇异，则

$$\min\left\{\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2}:\quad A+\delta A\text{奇异}\right\} = \frac{1}{\|A^{-1}\|_2 \cdot \|A\|_2} = \frac{1}{\operatorname{cond}_2(A)}$$

即在谱范数下，一个矩阵的条件数的倒数正好等于该矩阵与全体奇异矩阵所成集合的相对距离.

该定理表明，当矩阵A十分病态时，就说明A已十分接近一个奇异矩阵。

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

思考：是否可以用行列式刻划矩阵的病态？

注意到 $\operatorname{cond}(A) = \operatorname{cond}(A^{-1})$

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 300000.5 & -300000 \\ -100000 & 100000 \end{pmatrix} \qquad \det(A^{-1}) = 50000 = \det(A)^{-1}$$

病态方程的经验判断

判断一个矩阵是否病态需要计算条件数，而计算矩阵的逆非常的麻烦，因此实际计算时通常用实际经验来代替条件数的计算。

常用的判断方法有：

- 1. 在对矩阵进行三角化时出现小主元，大多数情形下是病态的；
- 2.最大特征值与最小特征值之比非常大（按绝对值）；

- 3.系数矩阵的行列式值很小，或者矩阵的某些行接近线性相关，此时矩阵接近于奇异矩阵；

  但这并不是绝对的，例如 ϵI，尽管其行列式非常小，但其条件数为1，方程组状态良好；

- 4.系数矩阵A的元素之间数量级相差很大，并且无一定的规则；

2.1.6 矩阵的*QR*分解

- 回忆：求解线性方程组与矩阵的三角分解

$$Ax = b \qquad\qquad A = LU$$

$$\begin{cases} Ax = b \\ A = LU \end{cases} \Leftrightarrow LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

- 问题：条件数与方程组的性态

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

LU分解是否能保持条件数？

例

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

$$cond_2(A)\approx 4.89894, cond_2(L)\approx 14.9224, cond_2(U)\approx 14.2208.$$

良态方程组 $Ax=b$ 变为病态方程组 $\begin{cases}Ly=b\\Ux=y\end{cases}$

矩阵的LU分解不能保证条件数！

能否构造保持条件数的矩阵三角分解？

解决方法：正交变换保持2-条件数，即若$\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵（ $\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{Q}^{T}$ ），则

$$cond_2(\boldsymbol{Q})=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q})}{\lambda_{\min}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q})}}=1,$$

$$cond_2(\boldsymbol{QA})=cond_2(\boldsymbol{AQ})=cond_2(\boldsymbol{A})$$

若$\boldsymbol{A}$=$\boldsymbol{QR}$，$\boldsymbol{Q}$为正交阵，$\boldsymbol{R}$为上三角阵

$$\begin{cases}\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}\\ \boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}\end{cases}\Leftrightarrow \boldsymbol{QRx}=\boldsymbol{b}\Leftrightarrow\begin{cases}\boldsymbol{Qy}=\boldsymbol{b}\\ \boldsymbol{Rx}=\boldsymbol{y}\end{cases}\Leftrightarrow \boldsymbol{Rx}=\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b}$$

一般矩阵的QR分解的定义

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

$$A = Q\begin{pmatrix} R_1 \\ O \end{pmatrix} = QR$$

其中 Q为正交阵，R_1为对角元大于零的上三角矩阵。上面的矩阵**分解式称为矩阵的QR分解.**

注：对角元大于零的条件不是必须的。如果小于零，只要再乘以初等（正交）矩阵 $P(i(-1))$即可。

以下考虑方阵的情形。

矩阵消元的几何观点

$$A=\begin{pmatrix}\times&\times&\times\\\times&\times&\times\\\times&\times&\times\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{用正交变换}\boldsymbol{Q}_1}\begin{pmatrix}\times&\times&\times\\0&\times&\times\\0&\times&\times\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{用正交变换}\boldsymbol{Q}_2}\begin{pmatrix}\times&\times&\times\\0&\times&\times\\0&0&\times\end{pmatrix}=\boldsymbol{R}$$

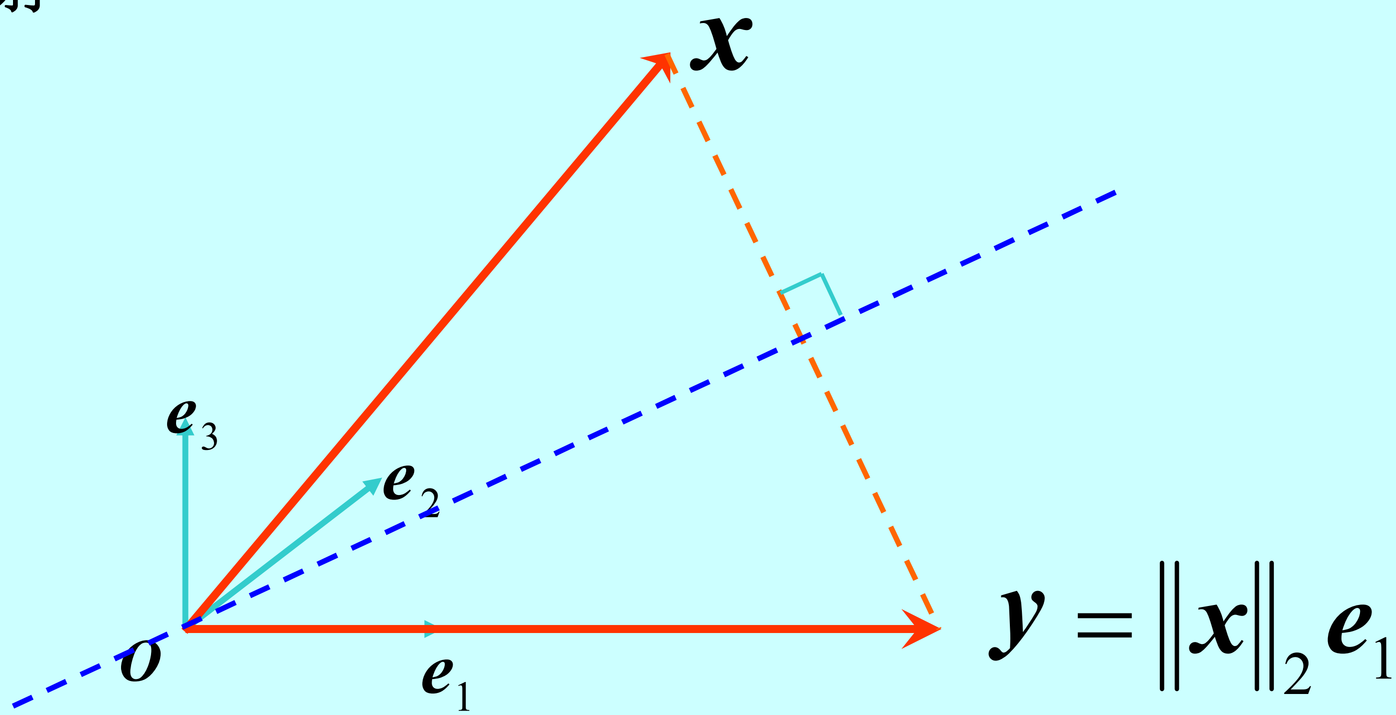
$$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n),\quad \boldsymbol{a}_1\rightarrow\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{a}_1=\begin{pmatrix}\times\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}$$

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。

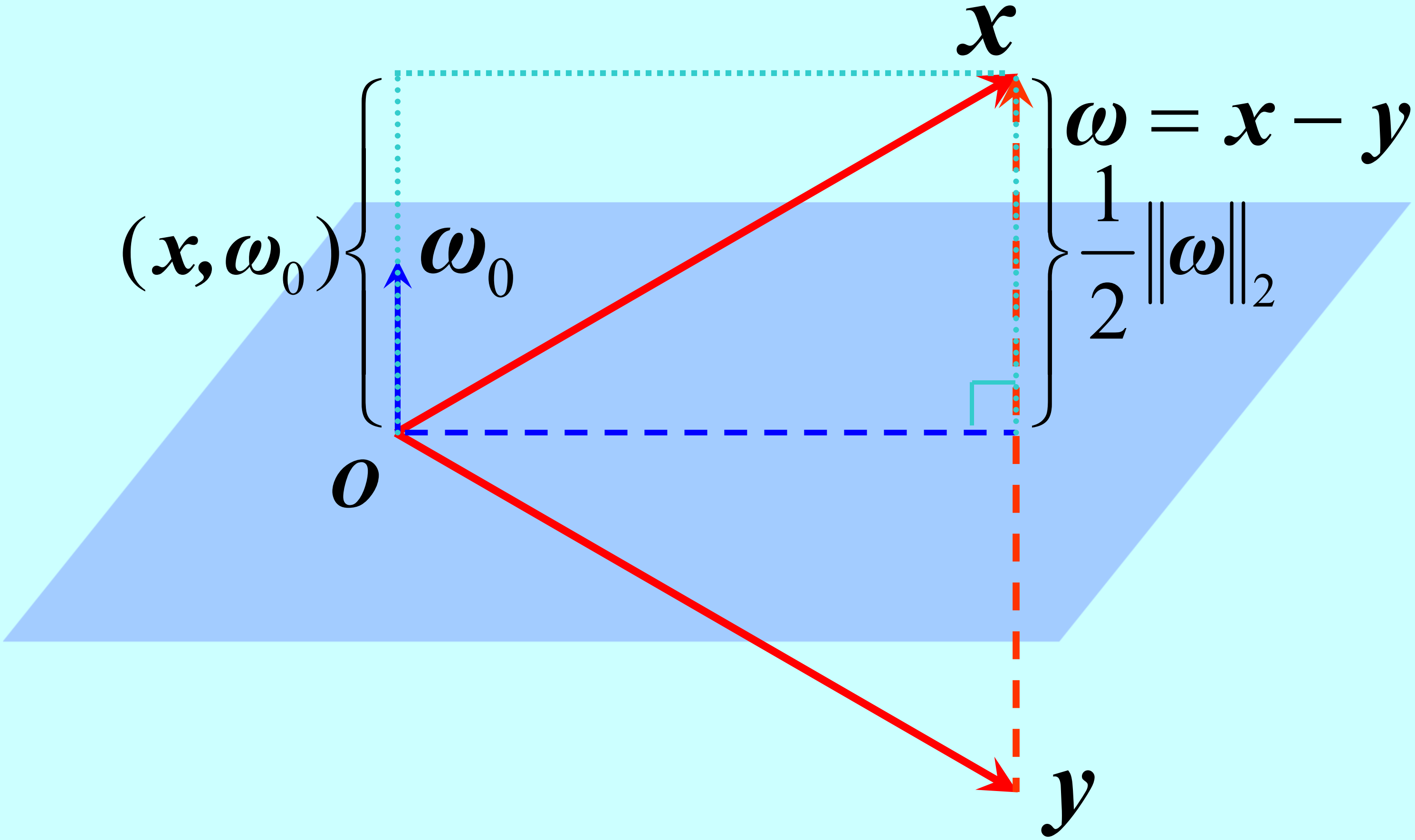
正交变换：旋转和镜面反射，特点是保持向量的内积和长度（**2**-范数）不变。

DUT 大连理工大学 DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

镜面反射



如何将任意非零向量 x变为落在第一个坐标轴 e_1上的向量 $y = \|x\|_2 e_1$ ？



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

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

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

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

定义**2.4** 设 $\omega\in\mathbf{R}^n,\omega\neq 0$, 称初等矩阵

$$H(\omega)=I-\frac{2}{\omega^T\omega}\omega\omega^T \tag{2-33}$$

为**Householder**矩阵（简称**H**阵），或称**Householder**变换矩阵.

Householder矩阵的性质

1. 对称性： $H(\omega)^T = H(\omega)$

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

2. 正交性： $H(\omega)^T H(\omega) = I$

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

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

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

$$\boldsymbol{H}(\omega)x=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}-\|\boldsymbol{x}\|_2\boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}\|\boldsymbol{x}\|_2\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}=\|\boldsymbol{x}\|_2\boldsymbol{e}_1.$$

对于n阶复矩阵A

推论2.1：设 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbf{C}^n$且$\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$,

则存在Householder矩阵

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

使得$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega})\boldsymbol{x}=\alpha\boldsymbol{e}_1$，其中$|\alpha|=\|x\|_2$且$\alpha x^H\boldsymbol{e}_1$为实数.

例10 已知向量

（1） $\boldsymbol{x}=(-3,0,4)^T$, $\boldsymbol{y}=(0,0,5)^T$,

（2） $\boldsymbol{x}=(i,-2i,0,2)^T$, $\boldsymbol{y}=(3i,0,0,0)^T$,

试求Householder矩阵H，使得 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}$.

(1) $\boldsymbol{x}=(-3,0,4)^T$, $\boldsymbol{y}=(0,0,5)^T$

解 $\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}=(-3,0,-1)^T$, $\|\boldsymbol{\omega}\|_2^2=10$ 于是

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

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

（2） $\boldsymbol{x}=(i\,,-2i\,,0\,,2)^T$ ， $\boldsymbol{y}=(3i\,,0\,,0\,,0)^T$

解　由推论2.1可知

$$|\alpha|=\|x\|_2=\sqrt{|-2i|^2+|i|^2+2^2}=3$$

且 $\alpha \boldsymbol{x}^H \boldsymbol{e}_1=-\alpha i$ 为实数，所以取 $\alpha=3i$ 。故

$$\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{x}-\alpha\boldsymbol{e}_1=(-2i\,,-2i\,,0\,,2)^T\,,\ \|\boldsymbol{\omega}\|_2^2=12$$

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega})=\boldsymbol{I}-\frac{2}{\boldsymbol{\omega}^H\boldsymbol{\omega}}\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^H=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&&1\end{pmatrix}-\frac{1}{6}\begin{pmatrix}-2i\\-2i\\0\\2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2i&2i&0&2\end{pmatrix}$$

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

即

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

利用一系列**H**阵进行矩阵的**QR**分解

例**11** 利用**Householder**变换求A的分解，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\ 2 & 3 & 1\\ 2 & 1 & -5\end{pmatrix}.$$

解：将A按列分块为$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3)$, 其中

$$\boldsymbol{a}_1=\begin{pmatrix}1\\2\\2\end{pmatrix},\ \|\boldsymbol{a}_1\|_2=3,\ \boldsymbol{\omega}_1=\boldsymbol{a}_1-\|\boldsymbol{a}_1\|_2\boldsymbol{e}_1=\begin{pmatrix}1\\2\\2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}3\\0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-2\\2\\2\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Q}_1 = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega}_1) = \boldsymbol{I} - \frac{2}{\boldsymbol{\omega}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\omega}_1}\boldsymbol{\omega}_1\boldsymbol{\omega}_1^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{-2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{-2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega}_1)\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega}_1)\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega}_1)\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega}_1)\boldsymbol{a}_3) = \begin{pmatrix} 3 & 3 & -\frac{7}{3} \\ 0 & 1 & \frac{13}{3} \\ 0 & -1 & -\frac{5}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_2 \end{pmatrix},$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} 1 & \frac{13}{3} \\ -1 & -\frac{5}{3} \end{pmatrix} = (\tilde{a}_1, \tilde{a}_2),\ \ \tilde{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},\ \ \|\tilde{a}_1\|_2 = \sqrt{2}$$

$$\omega_2 = \tilde{a}_1 - \|\tilde{a}_1\|_2 e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$H(\omega_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2-\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 3-2\sqrt{2} & -1+\sqrt{2} \\ -1+\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

$$H(\omega_2)A_2 = \left(H(\omega_2)\tilde{a}_1, H(\omega_2)\tilde{a}_2\right) = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & -\frac{4}{3}\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

$$\boldsymbol{Q}_2=\begin{pmatrix}1 & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega}_2)\end{pmatrix}_{3\times3}$$

$$\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega}_2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3 & \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3 & \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\omega}_2)\boldsymbol{A}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3 & 3 & -\frac{7}{3}\\ 0 & \sqrt{2} & 3\sqrt{2}\\ 0 & 0 & -\frac{4}{3}\sqrt{2}\end{pmatrix}=\boldsymbol{R}$$

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

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$$

$$\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix} 3 & 3 & -\frac{7}{3} \\ 0 & \sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3}\sqrt{2} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 3 & -\frac{7}{3} \\ 0 & \sqrt{2} & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & \frac{4}{3}\sqrt{2} \end{pmatrix}=\boldsymbol{Q}_3\widetilde{\boldsymbol{R}},$$

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}=(\boldsymbol{QQ}_3)\widetilde{\boldsymbol{R}}=\widetilde{\boldsymbol{Q}}\widetilde{\boldsymbol{R}}$$

小结

利用**Householder**矩阵对矩阵 A 进行**QR**分解，保持矩阵的条件数，数值稳定，但计算量比**LU**分解大。

1． $H(\omega)=I-\dfrac{2}{\omega^{\mathrm{T}}\omega}\omega\omega^{\mathrm{T}}$ 的定义，性质和几何意义。

2．**QR**分解的算法过程，

“降阶－变换－镶边－升阶－合并”。

- 思考题：

1. 能不能利用其它正交变换（如旋转）进行QR分解？
2. 除了QR分解，是否有别的分解（如带列主元的LU分解）能够保持矩阵的条件数？ 或者如何修正LU分解，使其保持矩阵条件数？

2.2 特殊矩阵的特征系统

本节将介绍理论上和特征系统计算上非常重要的矩阵分解，即**Schur**分解.

定理 2.7 (Schur定理) **设** $\boldsymbol{A} \in \mathbf{C}^{n\times n}$，则存在酉阵$\boldsymbol{U} \in \mathbf{C}^{n\times n}$ 使得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{R}\boldsymbol{U}^{H}$$

酉相似

其中$\boldsymbol{R} \in \mathbf{C}^{n\times n}$ 为上三角矩阵。

$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{R}\boldsymbol{U}^{H}$ 也称为**矩阵的Schur分解**

证明 对矩阵阶数n用数学归纳法

$n=1$时，定理显然成立

设$n=k$时定理成立，证明$n=k+1$时定理仍成立

记λ为$k+1$阶方阵A的一个特征值，于是存在

$$u_1 \in C^{k+1}, \|u_1\| = 1 \qquad Au_1 = \lambda u_1$$

将u_1扩充为C^{k+1}的一组标准正交基，记为

$$U_1 = (u_1, u_2, \cdots, u_{k+1}) \in C^{(k+1)\times(k+1)}$$

$U_1=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_{k+1})\in \boldsymbol{C}^{(k+1)\times(k+1)}$为酉阵

$$U_1^{\ H}\boldsymbol{A}U_1=\begin{pmatrix}\boldsymbol{u}_1^H\\ \boldsymbol{u}_2^H\\ \vdots\\ \boldsymbol{u}_{k+1}^H\end{pmatrix}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_{k+1})=\begin{pmatrix}\lambda & \boldsymbol{c}^T\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}$$

其中$\boldsymbol{c}\in\boldsymbol{C}^k,\boldsymbol{A}_1\in\boldsymbol{C}^{k\times k}$

由归纳假设，存在酉阵 $\boldsymbol{U}_2\in\boldsymbol{C}^{k\times k}$，上三角阵 $\boldsymbol{R}_1\in\boldsymbol{C}^{k\times k}$

$$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{U}_2\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{U}_2^H$$

$$A = U_1 \begin{pmatrix} \lambda & c^T \\ 0 & A_1 \end{pmatrix} U_1^H = U_1 \begin{pmatrix} \lambda & c^T \\ 0 & U_2 R_1 U_2^H \end{pmatrix} U_1^H$$

$$= U_1 \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & U_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & \tilde{c}^T \\ 0 & R_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & U_2^H \end{pmatrix} U_1^H$$

其中$\tilde{c}^T U_2^H = c^T \Rightarrow \tilde{c}^T = c^T U_2 \Rightarrow \tilde{c} = U_2^T c \quad \in C^k$

记$U = U_1 \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & U_2 \end{pmatrix}, R = \begin{pmatrix} \lambda & \tilde{c}^T \\ 0 & R_1 \end{pmatrix}$

$$\boxed{A = URU^H}$$

$$U^H U = \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & U_2^H \end{pmatrix} U_1^H U_1 \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & U_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & U_2^H U_2 \end{pmatrix} = I$$

Schur定理还可以表示为：任意n阶方阵酉相似于一个以其特征值为对角元的上三角矩阵$\boldsymbol{R}$。

$\boldsymbol{R}$ 通常称为$\boldsymbol{A}$的Schur**标准型**。

定义2.5 设 $A \in \mathbf{C}^{n\times n}$; 若 $A^H A = AA^H$

则称矩阵A为**正规矩阵**。

常见正规矩阵的有：

Hermite阵：$A^H = A$　　实对称矩阵：$A^T = A$

斜Hermite阵：$A^H = -A$　实反对称矩阵：$A^T = -A$

酉阵：$A^H A = AA^H = I$

正交矩阵：$A^T A = AA^T = I$

以上矩阵均为正规矩阵。

推论 2.2 设 A为n阶方阵， 则A为正规矩阵的充分必要条件是存在n阶酉阵U，使得

$$A = UDU^{H}$$

其中$D \in \mathbf{C}^{n \times n}$ 为对角矩阵。

证明：充分性　$(\Leftarrow)$

由于$A=UDU^H$，则

$$A^H A = \left(UDU^H\right)^H \left(UDU^H\right)$$

$$= UD^H U^H UDU^H = U\left(D^H D\right)U^H$$

$$AA^H = \left(UDU^H\right)\left(UDU^H\right)^H$$

$$= UDU^H UD^H U^H = U\left(DD^H\right)U^H$$

而

$$\boldsymbol{D}^H\boldsymbol{D}=\begin{pmatrix}\bar{d}_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \bar{d}_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}|d_1|^2 & & \\ & \ddots & \\ & & |d_n|^2\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{d}_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \bar{d}_n\end{pmatrix}=\boldsymbol{D}\boldsymbol{D}^H$$

故

$$\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H$$

即$\boldsymbol{A}$为正规矩阵.

必要性 $(\Rightarrow)$ 由Schur分解定理知，$A=URU^H$

$U\in\mathbf{C}^{n\times n}$ 为酉阵, R为上三角阵。那么，由假设知A为

正规矩阵，即 $A^HA=AA^H \Rightarrow R^HR=RR^H$，即

R为正规矩阵。而上三角阵R正规矩阵 $\Leftrightarrow$ R为对角矩阵。

事实上, 设

$$R=\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix} \quad R^H=\begin{pmatrix} \bar{r}_{11} & & & \\ \bar{r}_{12} & \bar{r}_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \bar{r}_{1n} & \bar{r}_{2n} & \cdots & \bar{r}_{nn} \end{pmatrix}$$

再注意到,

$$\boldsymbol{R}^H\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix} |r_{11}|^2 & * & \cdots & * \\ * & |r_{22}|^2+|r_{12}|^2 & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & \cdots & \sum_{i=1}^{n}|r_{in}|^2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^H=\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n}|r_{1i}|^2 & * & \cdots & * \\ * & \sum_{i=2}^{n}|r_{2i}|^2 & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & \cdots & |r_{nn}|^2 \end{pmatrix}$$

从而可得:

$$|r_{11}|^2=|r_{11}|^2+|r_{12}|^2+\cdots+|r_{1n}|^2 \Rightarrow r_{1j}=\bar{r}_{1j}=0,\ \ j=2,\cdots,n$$

$$|r_{12}|^2+|r_{22}|^2=|r_{22}|^2+|r_{23}|^2+\cdots+|r_{2n}|^2 \Rightarrow r_{2j}=\bar{r}_{2j}=0,\ j=3,\cdots,n$$

总之有: $r_{ij}=\bar{r}_{ij}=0, 1\le i<j\le n$。 即$\boldsymbol{R}$为对角矩阵。

推论 2.3 设 A为n阶方阵，则A为Hermite矩阵的充分必要条件是存在n阶酉阵U，使得

$$A = UDU^H$$

其中$D \in \mathrm{R}^{n\times n}$ 为实对角矩阵。

证明：由推论2.2，存在 n 阶酉阵 U，使得

$A=UDU^H$ 其中D为n阶对角阵。 而 $A^H=A$，则可得

$D^H=D$，即D的对角元素均为实数。注意到，由

$$d_i=a+ib=a-ib=\overline{d}_i\Rightarrow b=0,$$

即

$$d_i=\overline{d}_i=a$$

从而D为n阶实对角阵。

推论 2.3’ 设 A为n阶方阵，则A为斜Hermite矩阵的充分必要条件是存在n阶酉阵U，使得

$$A = UDU^H$$

其中D是对角矩阵，且对角元素为纯虚数。

证明：由推论2.2，存在 n 阶酉阵 U，使得

$A=UDU^H$ 其中D为n阶对角阵。 而 $A^H=-A$，则可得 $D^H=-D$，即D的对角元素均为纯虚数。注意到，由

$$d_i=a+ib=-(a-ib)=-\overline{d_i}\Rightarrow a=0,$$

即

$$d_i=\overline{d_i}=ib$$

从而D为n阶纯虚对角阵。

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

推论 2.4 设 A为n阶方阵， 则A为酉阵的充分必要条件是存在n阶酉阵U，使得

$$A = UDU^H$$

其中$D \in \mathbf{C}^{n \times n}$ 为对角矩阵，其对角元的模均为1。

证明：由推论2.2，**存在*n*阶酉阵*U*使得** $A=UDU^H$

而 A为酉阵，则有 $A^H A = AA^H = I$

$$\Rightarrow U\left(DD^H\right)U^H = U\left(D^H D\right)U^H = I$$

$$\Rightarrow \quad DD^H = D^H D = I$$

即

$$D^H D = DD^H = \begin{pmatrix} |d_{11}|^2 & & \\ & \ddots & \\ & & |d_{nn}|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow |d_{ii}| = 1$$

$$i = 1, \cdots, n$$

即D为n阶对角阵，其对角元的模均为1.

矩阵的基本分类

Ⅰ 在正规矩阵的集合中，特征值均为实数的子集为Hermite矩阵的集合；矩阵的特征值的模均为1的子集为酉矩阵的集合。

Ⅱ 一般矩阵 ⊃ 可对角化矩阵

⊃ 正规矩阵

$$\supset \left\{ \begin{array}{r} \text{Hermite矩阵} \supset \text{实对称矩阵} \\ \text{酉矩阵} \supset \text{实正交矩阵} \end{array} \right\}$$

定理 设A为n阶方阵，则存在n阶酉阵U和V，使得

$$\|UA\|_F=\|AV\|_F=\|UAV\|_F=\|A\|_F$$

称之为F-范数的酉不变性。

$$\|UA\|_F^2=\mathrm{tr}\left((UA)^H(UA)\right)=\mathrm{tr}\left(A^HU^HUA\right)=\mathrm{tr}\left(A^HA\right)=\|A\|_F^2$$

$$\|AV\|_F^2=\mathrm{tr}\left((AV)^H(AV)\right)=\mathrm{tr}\left((VA)(AV)^H\right)$$

$$=\mathrm{tr}\left(AV^HVA^H\right)=\mathrm{tr}\left(AA^H\right)=\|A\|_F^2$$

最后，

$$\|UAV\|_F=\|AV\|_F=\|A\|_F$$

习题11 证明 Schur不等式:

$$\sum_{i=1}^{n}|\lambda_i|^2 \le \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2$$

其中 λ_i 为A的特征值, 并且Schur不等式等号成立的充分必要条件是A为正规矩阵。

证: 根据**Schur**定理, 存在n阶酉阵U使得 $A = URU^H$

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2 = \|A\|_F^2 = \|URU^H\|_F^2 = \|R\|_F^2 = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=i+1}^{n}|r_{ij}|^2 \ge \sum_{i=1}^{n}|r_{ii}|^2 = \sum_{i=1}^{n}|\lambda_i|^2$$

要使得等号成立, 只需 $r_{ij} = 0, 1 \le i < j \le n$ 即D为阶对角阵,

则由推论2. 2, 可知其充分必要条件是A为正规矩阵。

定理2.9 设A为n阶方阵，ε>0, 则存在 $\mathbf{C}^{n\times n}$ 上的一种算子范数 $\|\cdot\|_M$（依赖矩阵 A 和常数 ε），使得 $\|\boldsymbol{I}\|_M = 1$

$$\|\boldsymbol{A}\|_M \le \rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon$$ （证略）

证明 由Schur定理，存在n阶酉阵U，使得上三角矩阵

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix} = \boldsymbol{R} = \boldsymbol{U}^H \boldsymbol{A} \boldsymbol{U}$$

取$\delta = \min\left\{1, \dfrac{\varepsilon}{(n-1)\max\limits_{1\le i<j\le n}|r_{ij}|}\right\}$, $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(1,\delta,\delta^2,\cdots,\delta^{n-1})$

$$\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{R}\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} r_{1,1} & r_{1,2}\delta & r_{1,3}\delta^2 & \cdots & r_{1,n}\delta^{n-1} \\ & r_{2,2} & r_{2,3}\delta & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & r_{n-2,n}\delta^2 \\ & & & \ddots & r_{n-1,n}\delta \\ & & & & r_{n,n} \end{pmatrix}$$

$$\left\|\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^H\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\right\|_1 = \left\|\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{R}\boldsymbol{D}\right\|_1$$

$$\le \max_{1\le i\le n}|\lambda_i| + \max_{1\le i<j\le n}|r_{i,j}|(1+\delta+\cdots+\delta^{n-2})\delta$$

$$\le \rho(\boldsymbol{A}) + (n-1)\max_{1\le i<j\le n}|r_{i,j}|\delta \quad \le \rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon$$

记$\|\boldsymbol{A}\|_M = \left\|\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^H\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\right\|_1$ 则$\|\boldsymbol{I}\|_M = 1$, $\|\boldsymbol{A}\|_M \le \rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon$

推论2.5 若 $\rho(A)<1$，则存在范数 $\|\cdot\|$ 使得 $\|A\|<1$

证明： 特取 $\varepsilon=\frac{1}{2}\left(1-\rho\left(\boldsymbol{A}\right)\right)>0$， 则存在一种矩阵范数 $\|\cdot\|_M$ 使得

$$\|\boldsymbol{A}\|_M \le \rho\left(\boldsymbol{A}\right)+\varepsilon$$

$$=\rho\left(\boldsymbol{A}\right)+\frac{1}{2}\left(1-\rho\left(\boldsymbol{A}\right)\right)$$

$$=\rho\left(\boldsymbol{A}\right)+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rho\left(\boldsymbol{A}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\left(1+\rho\left(\boldsymbol{A}\right)\right)<\frac{1}{2}\times 2=1$$

2.3 矩阵的Jordan分解

定义 2.6 设$\boldsymbol{A}$为$\boldsymbol{n}$阶方阵, $\boldsymbol{A}$的特征多项式为

$$\det(\lambda \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A}) = (\lambda - \lambda_1)^{m_1}(\lambda - \lambda_2)^{m_2}\cdots(\lambda - \lambda_s)^{m_s} \qquad (2\text{-}42)$$

其中 $m_i(i = 1,2,\ldots,s)$ 均为正整数, $\sum_{i=1}^{s} m_i = n$, $\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_s$

为$\boldsymbol{A}$的不同特征值, 称$\boldsymbol{m_i}$为●$_i$的代数重数;

把与●$_i$对应的线性无关的特征向量的个数, 即子空间$N(\lambda_i \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A})$

(即 $(\lambda_i \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的解空间, 称为 $\lambda_i \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A}$的零空间) 的维数,

称为●$_i$的几何重数, 记为α_i, $\alpha_i = n - \operatorname{rank}(\lambda_i \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A})$.

代数重数¤几何重数 $m_i \ge \alpha_i$

取特征子空间 $N(\lambda_i \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A})$ 的一组基 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{\alpha_i}$

扩充为$\mathbf{R}^n$ 的基 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{\alpha_i}, \boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_{n-\alpha_i}$

令$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{\alpha_i}, \boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_{n-\alpha_i})$

$$\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^{-1}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{\alpha_i}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_{n-\alpha_i})$$

$$= (\lambda_i \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{x}_1, \ldots, \lambda_i \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{x}_{\alpha_i}, \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_{n-\alpha_i}) = \begin{pmatrix} \lambda_i \boldsymbol{I}_{\alpha_i} & \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{C} \end{pmatrix}$$

$$\det(\lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}) = \det(\lambda \boldsymbol{I}_{\alpha_i} - \lambda_i \boldsymbol{I}_{\alpha_i}) \cdot \det(\lambda \boldsymbol{I}_{\alpha_i} - \boldsymbol{C})$$

$$= (\lambda - \lambda_i)^{\alpha_i} \cdot \det(\lambda \boldsymbol{I}_{\alpha_i} - \boldsymbol{C})$$

定义2.7 设A为n阶方阵, λ_i为其特征值, m_i和α_i分别为其代数重数和几何重数. 如果$m_i=\alpha_i$, 则称特征值λ_i为半单的; 如果$m_i>\alpha_i$, 则称特征值λ_i为亏损的.

- 代数重数为1的特征值一定是半单的.
- 不同特征值对应的特征向量是线性无关的.
- 每个特征值都是半单的矩阵称为单纯矩阵(有完备的特征向量系) ⇔ 可对角化.
- 存在亏损的特征值的矩阵称为亏损矩阵 ⇔ 不可对角化.

定理2.10 n 阶方阵 A 可对角化的充分必要条件是每一个特征值 λ_i 均为半单的，即 $m_i = \alpha_i, \quad i = 1, 2, \ldots, s.$

A 是不可对角化的矩阵的充分必要条件是它有亏损的特征值，即存在 i_0，使得 $m_{i_0} > \alpha_{i_0}$.

例1 下列矩阵是否可以对角化?

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}-5 & 6 & -3\\ -1 & 0 & 1\\ 1 & 2 & -1\end{pmatrix}\qquad \boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1 & -1 & 2\\ 3 & -3 & 6\\ 2 & -2 & 4\end{pmatrix}\qquad \boldsymbol{C}=\begin{pmatrix}17 & 0 & -25\\ 0 & 3 & 0\\ 9 & 0 & -13\end{pmatrix}$$

(1) $\det(\lambda \boldsymbol{I}_3-\boldsymbol{A})=(\lambda-2)(\lambda^2-2\lambda-2)$

$\lambda_1=2,\lambda_2=1+\sqrt{3},\lambda=1-\sqrt{3}$

$\boldsymbol{A}$为单纯矩阵,可对角化

(2) $\det(\lambda \boldsymbol{I}_3 - \boldsymbol{B}) = \lambda^2(\lambda - 2)$

$\lambda_1 = 0, m_1 = 2, \lambda_2 = 2, m_2 = 1 \qquad rank(\lambda_1 \boldsymbol{I}_3 - \boldsymbol{B}) = rank(\boldsymbol{B}) = 1,$

几何重数$\alpha_1 = 3 - 1 = 2 \Rightarrow \lambda_1$是半单的

$\boldsymbol{B}$为单纯矩阵,可对角化

(3) $\det(\lambda \boldsymbol{I}_3 - \boldsymbol{C}) = (\lambda - 2)^2(\lambda - 3)$

$\lambda_1 = 2, m_1 = 2, \lambda_2 = 3, m_2 = 1 \qquad rank(\lambda_1 \boldsymbol{I}_3 - \boldsymbol{C}) = 2,$

几何重数$\alpha_1 = 3 - 2 = 1 \Rightarrow \lambda_1$是亏损的

$\boldsymbol{C}$为亏损矩阵,不可对角化

定义**2.8** 称下面的$\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}$阶方阵为**Jordan**块

$$\boldsymbol{J}_k(\lambda)=\begin{pmatrix}\lambda & 1 & & & \\ & \lambda & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda & 1 \\ & & & & \lambda\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{J}_4(0)=\begin{pmatrix}0 & 1 & & \\ & 0 & 1 & \\ & & 0 & 1 \\ & & & 0\end{pmatrix}\qquad \boldsymbol{J}_3(2)=\begin{pmatrix}2 & 1 & \\ & 2 & 1 \\ & & 2\end{pmatrix}\qquad \boldsymbol{J}_2(1)=\begin{pmatrix}1 & 1 \\ & 1\end{pmatrix}$$

定义2.9 由若干个Jordan块排成的块对角矩阵为Jordan阵.

$$\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{J}_3(2) & & \\ & \boldsymbol{J}_4(0) & \\ & & \boldsymbol{J}_2(1) \end{pmatrix}=\operatorname{diag}(\boldsymbol{J}_3(2),\boldsymbol{J}_4(0),\boldsymbol{J}_2(1))$$

定理2.12 设A为n阶方阵, 则存在n阶可逆矩阵T使得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{J}\boldsymbol{T}^{-1} \qquad \textbf{(2-43)}$$

其中$\boldsymbol{J}=\operatorname{diag}(\boldsymbol{J}_{n_1}(\lambda_1),\boldsymbol{J}_{n_2}(\lambda_2),\ldots,\boldsymbol{J}_{n_k}(\lambda_{\mathrm{k}})), n_1+n_2+\cdots n_k=n.$

称(2-43)为A的Jordan分解, J称为A的Jordan标准型, T称为变换矩阵. 若不计Jordan块的次序, 则Jordan标准型唯一.

(一) 关于Jordan标准型J

Jordan标准型是一个块对角矩阵, 对角元是矩阵J的特征值.

对于特征值 $\bullet_i$, 它的代数重数是**Jordan**标准型中以$\bullet_i$ 为特征值的**Jordan**块的阶数之和. 不同**Jordan**块的特征值可能相同.

对于特征值 $\bullet_i$, 它的几何重数, 即与$\bullet_i$ 对应的线性无关的特征向量的个数, 恰为以$\bullet_i$为特征值的**Jordan**块的个数.

例2 求矩阵A的Jordan标准型J, 其中 $$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}3 & 0 & 8\\ 3 & -1 & 6\\ -2 & 0 & -5\end{pmatrix}$$

解 $\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=(\lambda+1)^3$

$$\lambda_1=\lambda_2=\lambda_3=-1 \quad 3-\operatorname{rank}(\lambda_1\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=3-\operatorname{rank}\begin{pmatrix}-4 & 0 & -8\\ -3 & 0 & -6\\ 2 & 0 & 4\end{pmatrix}=2$$

代数重数为3, 以-1为特征值的Jordan块的阶数之和为3.

几何重数为2, 以-1为特征值的Jordan块的个数为2.

$$\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}-1 & & \\ & -1 & 1\\ & & -1\end{pmatrix} \quad \text{或} \boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}-1 & 1 & \\ & -1 & \\ & & -1\end{pmatrix}$$

定理2.13 设A为n阶方阵, $\bullet_i$为其特征值, 则A的Jordan标准型J中以$\bullet_i$为特征值, 阶数为l 的Jordan块的个数为

$$r_{l+1} + r_{l-1} - 2r_l ,$$

其中$r_l = \operatorname{rank}(\lambda_i \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})^l .$

$$r_0 = \operatorname{rank}(\lambda_i \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})^0 = \operatorname{rank}(\boldsymbol{I}) = n$$

例4 求矩阵A的**Jordan**标准型J，其中

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

解 $\det(\lambda I - A) = (\lambda - 2)^4$

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = 2, \qquad 4 - \mathrm{rank}(\lambda_1 I - A) = 2$$

代数重数为4，以2为特征值的Jordan块的阶数之和为4.

几何重数为2，以2为特征值的Jordan块的个数为2.

$$J=\begin{pmatrix} 2 & & & \\ & 2 & 1 & \\ & & 2 & 1 \\ & & & 2 \end{pmatrix} \qquad 或 J=\begin{pmatrix} 2 & 1 & & \\ & 2 & & \\ & & 2 & 1 \\ & & & 2 \end{pmatrix}$$

(1) $l=1$ $\quad r_1=\text{rank}(\lambda_1\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=\text{rank}(2\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=2$

$$r_2=\text{rank}(\lambda_1\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^2=\text{rank}(2\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^2=0$$

以2为特征值, 阶数为1 的Jordan块的个数为

$$r_2+r_0-2r_1=0+4-2\times2=0$$

(2) $l=2$

$$r_3=\text{rank}(\lambda_1\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^3=\text{rank}(2\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^3=0$$

以2为特征值, 阶数为2 的Jordan块的个数为

$$r_3+r_1-2r_2=0+2-2\times0=2$$

故$\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}2&1&&\\&2&&\\&&2&1\\&&&2\end{pmatrix}$

例5 求矩阵A的**Jordan**标准型J，其中

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

解　将A写成分块的形式 $A=\begin{bmatrix}A_1 & \\ & A_2\end{bmatrix}$ 其中

$$A_1=\begin{bmatrix}3 & 1\\ -4 & -1\end{bmatrix}\quad A_2=\begin{bmatrix}2 & 1\\ -1 & 0\end{bmatrix}$$

下面只需分别求出两个子矩阵的Jordan标准型即可

根据上面的求解方法可得标准型

$$A_1 \longrightarrow J_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_2 \longrightarrow J_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

于是得到矩阵A的Jordan标准型为

$$J = \begin{bmatrix} J_1 & \\ & J_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

(二) 关于变换矩阵T

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{TJT}^{-1}\Rightarrow \boldsymbol{AT}=\boldsymbol{TJ} \qquad \boldsymbol{T}=(\boldsymbol{T}_1,\boldsymbol{T}_2,\ldots,\boldsymbol{T}_k),\ \boldsymbol{T}_i\text{为}n\times n_i\text{阶矩阵.}$$

$$\boldsymbol{AT}_i=\boldsymbol{T}_i\boldsymbol{J}_{n_i}(\lambda_i),\quad \boldsymbol{T}_i=(\boldsymbol{t}_1^i,\boldsymbol{t}_2^i,\ldots,\boldsymbol{t}_{n_i}^i),$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{t}_1^i,\boldsymbol{t}_2^i,\ldots,\boldsymbol{t}_{n_i}^i)=(\boldsymbol{t}_1^i,\boldsymbol{t}_2^i,\ldots,\boldsymbol{t}_{n_i}^i)\begin{pmatrix}\lambda_i & 1 & & & \\ & \lambda_i & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_i & 1 \\ & & & & \lambda_i\end{pmatrix} \qquad \left\{\begin{array}{c}\boldsymbol{At}_1^i=\lambda_i\boldsymbol{t}_1^i,\\ \boldsymbol{At}_2^i=\lambda_i\boldsymbol{t}_2^i+\boldsymbol{t}_1^i,\\ \vdots\\ \boldsymbol{At}_{n_i}^i=\lambda_i\boldsymbol{t}_{n_i}^i+\boldsymbol{t}_{n_i-1}^i.\end{array}\right.$$

$\boldsymbol{t}_1^i,\boldsymbol{t}_2^i,\ldots,\boldsymbol{t}_{n_i}^i$ **构成一条关于特征值●$_i$的长度为n_i的Jordan链.**

$$(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I}_n)\boldsymbol{t}_1^i=0,\quad (\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I}_n)\boldsymbol{t}_j^i=\boldsymbol{t}_{j-1}^i,\ j=2,3,\ldots,n_i$$

$$(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I}_n)\boldsymbol{t}_1^i=0,\quad (\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I}_n)\boldsymbol{t}_j^i=\boldsymbol{t}_{j-1}^i,\ j=2,3,\ldots,n_i \qquad \textbf{(2-45)}$$

$\boldsymbol{t}_1^i$ 是矩阵$\boldsymbol{A}$的关于特征值●$_i$的一个特征向量, 称为链首.

注意: 并不是任何一个特征向量都可以做链首, 还要求可以利用(2-45)求出Jordan链中的其余向量, 因此需要从●$_i$的特征子空间中选取适当的向量作为链首, 使得方程组(2-45)可解.

例4 计算例2中矩阵A化**Jordan**标准型的变换矩阵T.

回忆

解

由A的Jordan标准型 $$J=\begin{pmatrix}-1 & & \\ & -1 & 1 \\ & & -1\end{pmatrix}$$

●$_1$对应两个Jordan块, 即有两条Jordan链, 长度为1和2.

求出●$_1$所对应的线性无关的特征向量

$$\boldsymbol{x}_1=(2,0,-1)^T,\boldsymbol{x}_2=(0,1,0)^T.$$

但以x_1 或 x_2为链首时都无法求出下一个**Jordan**链向量.

需要$\boldsymbol{y}\in span\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\}$, 使得$(\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I})\boldsymbol{z}=\boldsymbol{y}$可解

令$\boldsymbol{y} = k_1\boldsymbol{x}_1 + k_2\boldsymbol{x}_2$

$$(\boldsymbol{A} - \lambda_1\boldsymbol{I} \mid \boldsymbol{y}) = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 8 & 2k_1 \\ 3 & 0 & 6 & k_2 \\ -2 & 0 & -4 & -k_1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 4 & 0 & 8 & 2k_1 \\ 0 & 0 & 0 & k_2 - 3k_1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

需$2k_2 - 3k_1 = 0$　　取$k_1 = 2, k_2 = 3, \boldsymbol{y} = (4,3,-2)^T$

由$(\boldsymbol{A} - \lambda_1\boldsymbol{I})\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}$解出$\boldsymbol{z} = (1,0,0)^T$

由$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & 1 \\ & & -1 \end{pmatrix}$　$\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ -1 & -2 & 0 \end{pmatrix}$ 或$\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} 0 & 4 & 1 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \end{pmatrix}$

定理2.12 (Hamilton-Caylay)

设$\boldsymbol{A}\in\boldsymbol{C}^{n\times n},\psi(\lambda)=\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})$,则 $\psi(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{O}$ （证略）

证明　　存在$\boldsymbol{P}\in\boldsymbol{C}^{n\times n}$,使得$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{J}$

$$\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & \delta & & \\ & \lambda_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \delta \\ & & & \lambda_n\end{pmatrix},\delta=0\text{或者}1.$$

$$\psi(\lambda)=\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=(\lambda-\lambda_1)(\lambda-\lambda_2)\cdots(\lambda-\lambda_n)$$

$$\psi(\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I})(\boldsymbol{A}-\lambda_2\boldsymbol{I})\cdots(\boldsymbol{A}-\lambda_n\boldsymbol{I})$$

$$=(\boldsymbol{PJP}^{-1}-\lambda_1\boldsymbol{I})(\boldsymbol{PJP}^{-1}-\lambda_2\boldsymbol{I})\cdots(\boldsymbol{PJP}^{-1}-\lambda_n\boldsymbol{I})$$

$$=\boldsymbol{P}(\boldsymbol{J}-\lambda_1\boldsymbol{I})\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{J}-\lambda_2\boldsymbol{I})\boldsymbol{P}^{-1}\cdots\boldsymbol{P}(\boldsymbol{J}-\lambda_n\boldsymbol{I})\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$=\boldsymbol{P}(\boldsymbol{J}-\lambda_1\boldsymbol{I})(\boldsymbol{J}-\lambda_2\boldsymbol{I})\cdots(\boldsymbol{J}-\lambda_n\boldsymbol{I})\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}0 & \delta & & \\ & \lambda_2-\lambda_1 & \ddots & \\ & & \ddots & \delta \\ & & & \lambda_n-\lambda_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_1 & \delta & & \\ & 0 & \ddots & \\ & & \ddots & \delta \\ & & & \lambda_n-\lambda_2\end{pmatrix}\cdots\begin{pmatrix}\lambda_1-\lambda_n & \delta & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_{n-1}-\lambda_n & \delta \\ & & & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}0 & 0 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & & & *\end{pmatrix}\cdots\begin{pmatrix}\lambda_1-\lambda_n & \delta & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_{n-1}-\lambda_n & \delta \\ & & & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$=\cdots=\boldsymbol{O}_{n\times n}$$

例5 已知矩阵 $A=\begin{pmatrix}-1 & 1 & 0\\ -4 & 3 & 0\\ 1 & 0 & 2\end{pmatrix}$, 计算

(1) $A^7-A^5-19A^4+28A^3+6A-4I$;

(2) A^{-1}; (3) A^{100}.

解

$$\psi(\lambda)=\det(\lambda I-A)=\begin{vmatrix}\lambda+1 & -1 & 0\\ 4 & \lambda-3 & 0\\ -1 & 0 & \lambda-2\end{vmatrix}=\lambda^3-4\lambda^2+5\lambda-2$$

(1)令$f(\lambda)=\lambda^7-\lambda^5-19\lambda^4+28\lambda^3+6\lambda-4$

$$=(\lambda^4+4\lambda^3+10\lambda^2+3\lambda-2)\psi(\lambda)-3\lambda^2+22\lambda-8$$

$$f(A)=-3A^2+22A-8I=\begin{pmatrix}-19 & 6 & 0\\ -64 & 43 & 0\\ 19 & -3 & 24\end{pmatrix}$$

(2)由 $\psi(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^3-4\boldsymbol{A}^2+5\boldsymbol{A}-2\boldsymbol{I}=\boldsymbol{O}$得

$$\boldsymbol{A}\left(\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}^2-4\boldsymbol{A}+5\boldsymbol{I})\right)=\boldsymbol{I}$$

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}^2-4\boldsymbol{A}+5\boldsymbol{I})=\begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 \\ 4 & -1 & 0 \\ -\frac{3}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

(3)设$\lambda^{100}=g(\lambda)\psi(\lambda)+a\lambda^2+b\lambda+c$

由$\psi(\lambda)=(\lambda-2)(\lambda-1)^2$，有$\psi(2)=\psi(1)=\psi'(1)=0$

$$\begin{cases}2^{100}=4a+2b+c\\ 1=a+b+c\\ 100=2a+b\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}a=2^{100}-101\\ b=-2^{101}+302\\ c=2^{100}-200\end{cases}$$

$$\boldsymbol{A}^{100}=g(\boldsymbol{A})\psi(\boldsymbol{A})+a\boldsymbol{A}^2+b\boldsymbol{A}+c\boldsymbol{I}=a\boldsymbol{A}^2+b\boldsymbol{A}+c\boldsymbol{I}$$

$$=\begin{pmatrix}-199 & 100 & 0\\ -400 & 201 & 0\\ 201-2^{100} & 2^{100}-101 & 2^{100}\end{pmatrix}.$$

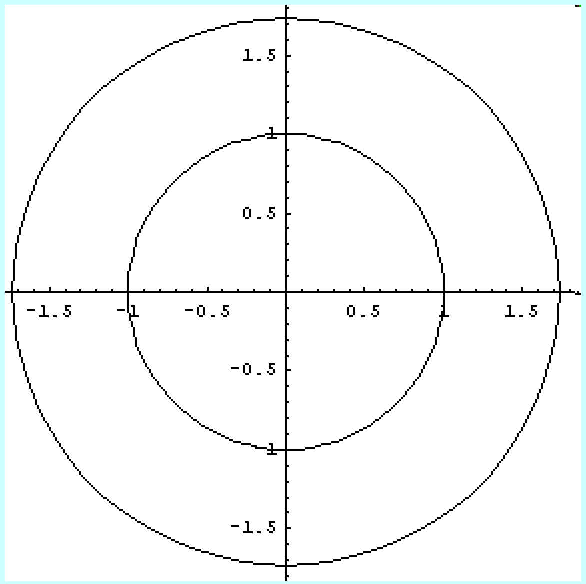
2.4 矩阵的奇异值分解

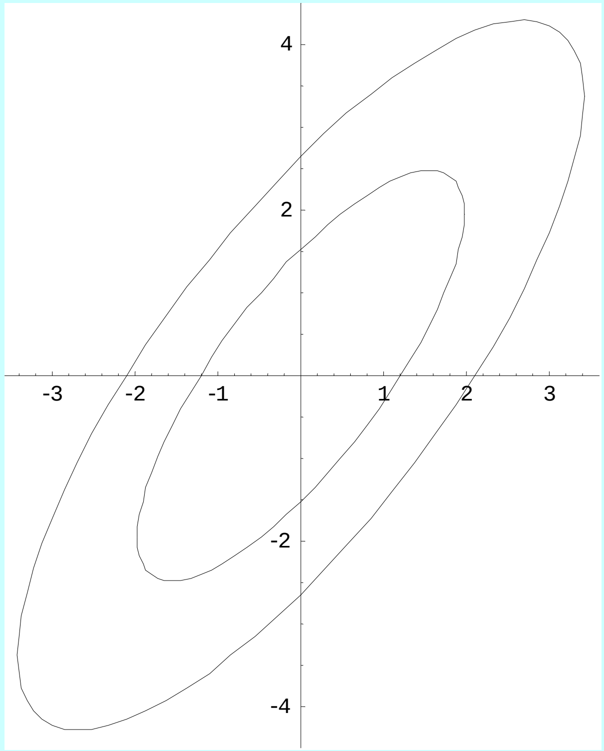
对于方阵, 利用其特征值和特征向量可以刻画矩阵的结构。对长方阵情形, 这些方法已经不适用. 而推广的特征值--矩阵的奇异值分解理论能改善这种情况。利用奇异值和奇异向量不仅可以刻画矩阵的本身结构, 而且还可以进一步刻画线代数方程组的解的结构, 是构造性的研究线代数问题的有利的工具。

2.4.1 矩阵奇异值分解的几何意义

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{A} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.96 & 1.72 \\ 2.28 & 0.96 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}^{-1} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1^2 + x_2^2 = 1, x_1^2 + x_2^2 = 3$$





$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0.96 & 1.72\\ 2.28 & 0.96\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0.6 & -0.8\\ 0.8 & 0.6\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0.8 & 0.6\\ 0.6 & -0.8\end{pmatrix}^T=\boldsymbol{UDV}^T$$

$$\boldsymbol{AV}=\boldsymbol{UD}$$

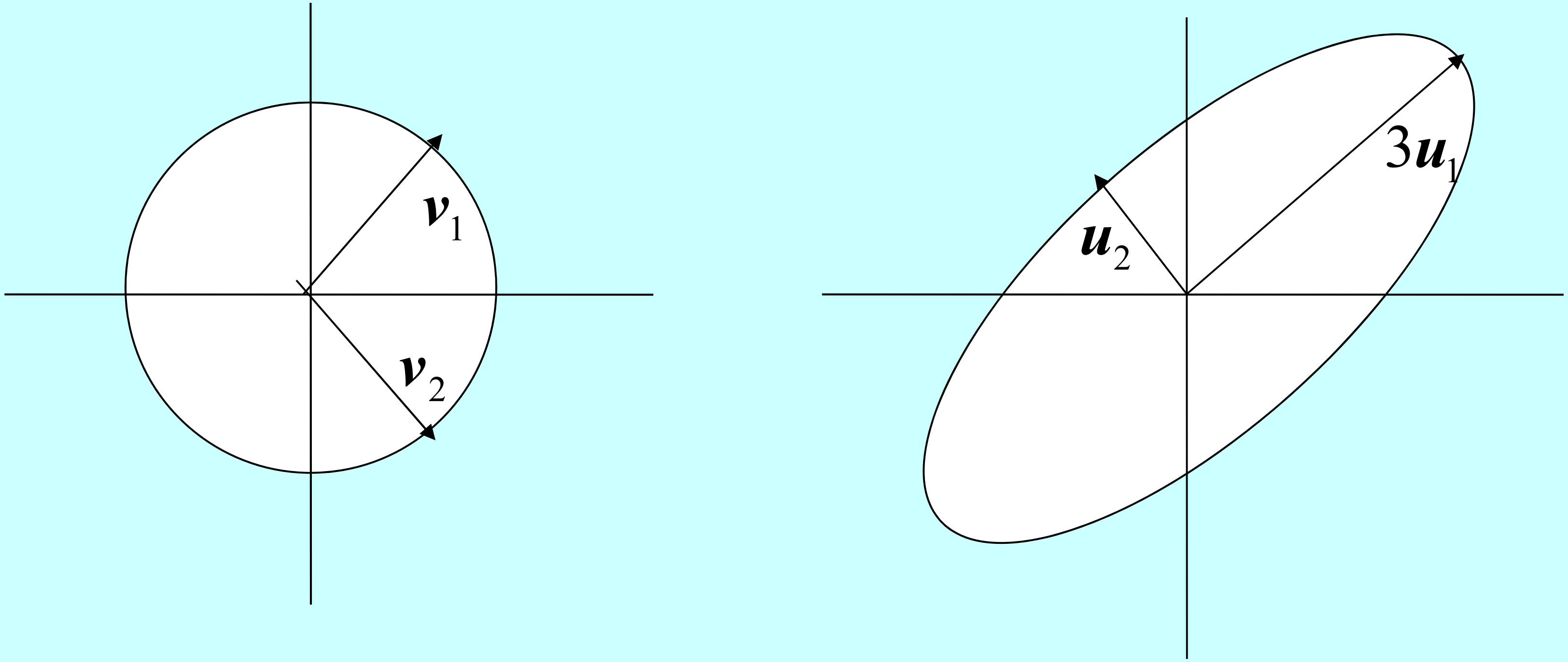
$$\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2),\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2),\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(\sigma_1,\sigma_2),$$

$$\boldsymbol{v}_1=(0.8,0.6)^T,\boldsymbol{v}_2=(0.6,-0.8)^T,\boldsymbol{u}_1=(0.6,0.8)^T,\boldsymbol{u}_2=(-0.8,0.6)^T,$$
$$\sigma_1=3,\sigma_2=1$$

$$\boldsymbol{v}_1^T\boldsymbol{v}_2=0,\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_2=0,$$

$$(\boldsymbol{Av}_1,\boldsymbol{Av}_2)=(3\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2)$$

$$(A\boldsymbol{v}_1, A\boldsymbol{v}_2) = (3\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2)$$



与特征值和特征向量对比：设A有两个线性无关(未必正交)的特征向量x_1, x_2对应的特征值为 $\bullet_1, \bullet_2$

$$(A\boldsymbol{x}_1, A\boldsymbol{x}_2) = (\lambda_1\boldsymbol{x}_1, \lambda_2\boldsymbol{x}_2)$$

对一般的 $\boldsymbol{A}\in \boldsymbol{R}^{m\times n}$，不妨设 $m\ge n, \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=r$，将其分解为

$$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m)\begin{pmatrix}\mathrm{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n)\\ \boldsymbol{O}_{(m-n)\times n}\end{pmatrix}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n)^T$$

$$=\boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$$

其中$\boldsymbol{U}$ 和$\boldsymbol{V}$ 分别是$\boldsymbol{m}$ 阶和 $\boldsymbol{n}$ 阶正交阵.

$$\sigma_1\ge\sigma_2\ge\cdots\ge\sigma_r>0,\ \sigma_{r+1}=\sigma_{r+2}=\cdots=\sigma_n=0$$

$$AV = U\Sigma$$

则y=Ax 是将$\mathbf{R}^n$ 中的单位球 $S^n = \{x \in \mathbf{R}^n \mid \|x\|_2 = 1\}$ 变成了$\mathbf{R}^m$

中的”超椭球”$\mathbf{E}^m = \{y \in \mathbf{R}^m \mid y = Ax, x \in \mathbf{R}^n, \|x\|_2 = 1\}$. $\mathbf{R}^m$

中的”超椭球”就是将 $\mathbf{R}^m$ 中的单位球沿某些正交方向$u_1, u_2, \cdots, u_m$

分别以拉伸因子 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n, \underbrace{0, \cdots, 0}_{m-n}$ 拉伸而成的曲面, $\{\sigma_i u_i\}$

为 $\mathbf{E}^m$ 的主半轴, $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r$ 为主半轴的长度, 它恰好是

矩阵A的奇异值.

定义2.10 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbf{C}^{m\times n}$, $k = \min(m, n)$

Hermite半正定矩阵 $\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A}$ 的特征值为

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_k \geq 0$$

称非负实数

$$\sigma_i(\boldsymbol{A}) = \sqrt{\lambda_i} \quad i = 1, 2, \cdots k$$

为矩阵$\boldsymbol{A}$的奇异值。

矩阵A的奇异值满足如下性质：

定理2.13 设 A、$B \in \mathbf{C}^{m\times n}$, 如果存在$m$阶、$n$阶酉阵$U$、$V$, 使得 $A = UBV^H$, 则矩阵A、B的奇异值相同。

证：由 $U^H AV = B$，则有

$$B^H B = \left(U^H AV\right)^H \left(U^H AV\right) = V^H A^H \left(UU^H\right) AV$$

$$= V^H \left(A^H A\right) V$$

即 $B^H B$ 与 $A^H A$相似, 故它们具有相同的特征值, 进而命题得证。

定理 2.14 设 $A \in \mathbf{C}^{m\times n}$, 且其秩rank($A$)=$r$, 则存在$m$阶、$n$阶酉阵$U$、$V$使得

$$A = U\begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} V^H \qquad \text{(2-47)}$$

其中

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_r \end{pmatrix}$$

(证略)

$\sigma_i (i = 1,2,\cdots,r)$ 为矩阵A的非零奇异值。

证明 $rank(A^H A) = rank(AA^H) = rank(A^H) = rank(A)$

$$\boldsymbol{Ax} = 0 \Rightarrow \boldsymbol{A}^H \boldsymbol{Ax} = 0$$

$$\boldsymbol{A}^H \boldsymbol{Ax} = 0 \Rightarrow \boldsymbol{x}^H \boldsymbol{A}^H \boldsymbol{Ax} = 0 \Rightarrow (\boldsymbol{Ax})^H \boldsymbol{Ax} = 0 \Rightarrow \boldsymbol{Ax} = 0$$

方程组同解，则系数矩阵的秩相等.

$$\boldsymbol{A}^H \boldsymbol{Ax} = \lambda \boldsymbol{x} \Rightarrow \boldsymbol{AA}^H \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{A}\lambda \boldsymbol{x} \Rightarrow \boldsymbol{AA}^H (\boldsymbol{Ax}) = \lambda(\boldsymbol{Ax})$$

说明$\boldsymbol{A^H A}$ 和 $\boldsymbol{AA^H}$的非零特征值相等, 也即秩相等.

$\boldsymbol{A^H A}$ 是秩为$\boldsymbol{r}$ 的$\boldsymbol{n}$ 阶**Hermite**半正定矩阵, 由**Schur**定理的推论**2.2**, 比存在$\boldsymbol{n}$ 阶酉阵, 使得

$$\boldsymbol{V}^H (\boldsymbol{A}^H \boldsymbol{A}) \boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A^H A V = V\begin{pmatrix} \Sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$V = (V_1 \mid V_2), \quad V_1 \in \mathbf{C}^{n\times r}, \qquad V_2 \in \mathbf{C}^{n\times(n-r)}$$

$$A^H A V_1 = V_1 \Sigma^2, A^H A V_2 = 0.$$

(1) $V_1^H A^H A V_1 = \Sigma^2 \Rightarrow (A V_1 \Sigma^{-1})^H (A V_1 \Sigma^{-1}) = I_r$

(2) $V_2^H A^H A V_2 = O \Rightarrow A V_2 = O$

令$U_1 = A V_1 \Sigma^{-1} \in C^{m\times r}$ $\qquad \Rightarrow U_1 \Sigma = A V_1 \qquad U_1^H U_1 = I_r$

因此矩阵 $\boldsymbol{U}_1=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r)$ 的列是$\mathbf{C}^m$ 中的一个标准正交向量组, 将其扩充为$\mathbf{C}^m$ 的一组标准正交基

$$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r,\boldsymbol{u}_{r+1},\boldsymbol{u}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{u}_m$$

令$\boldsymbol{U}_2=(\boldsymbol{u}_{r+1},\boldsymbol{u}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{u}_m)$　则$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2)$是一个$m$阶酉阵

且$\boldsymbol{U}_1^H\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{I}_r,\quad \boldsymbol{U}_2^H\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{O}$

于是$\boldsymbol{U}^H\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{U}^H(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2)$

$$\boldsymbol{U}^H\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_1^H\\ \boldsymbol{U}_2^H\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_1^H\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{U}_2^H\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$$

（2-47）称为矩阵*A* 的奇异值分解，亦称为矩阵*A*的满的奇异值分解。定理2.14简称SVD定理。

关系式亦可写为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_1 \Sigma \boldsymbol{V}_1^H$$

其中 $\boldsymbol{U}_1 \in \mathbf{C}^{m \times r}, \boldsymbol{V}_1 \in \mathbf{C}^{n \times r}$。

并称它为矩阵*A* **约化的奇异值分解**。

$$A = U_1 \Sigma V_1^H \quad \Rightarrow AV_1 = U_1 \Sigma, \quad U_1^H A = \Sigma V_1^H$$

$$Av_i = \sigma_i u_i, \quad u_i^H A = \sigma_i v_i^H, \quad i = 1,2,\cdots,r$$

U与V的列向量 $u_1, u_2, \cdots, u_m$和 $v_1, v_2, \cdots, v_n$ 分别称为矩阵A的与奇异值σ_i对应的左奇异向量和右奇异向量.

$$AA^H U = UU^H AV(U^H AV)^H = U\begin{pmatrix} \Sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A^H AV = V(U^H AV)^H U^H AV = V\begin{pmatrix} \Sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

左奇异向量 $u_1, u_2, \cdots, u_m$ 为AA^H的单位正交特征向量,

右奇异向量 $v_1, v_2, \cdots, v_n$ 为$A^H A$的单位正交特征向量.

例1 求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$ 的奇异值分解。

解 求解次序为: Σ, $\boldsymbol{V}$, $\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}$。 计算矩阵

$$\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 2\end{pmatrix}$$

令

$$\det(\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A})=\begin{vmatrix}\lambda-1 & 0 & -1\\ 0 & \lambda-1 & -1\\ -1 & -1 & \lambda-2\end{vmatrix}=(\lambda-1)^2(\lambda-2)-2(\lambda-1)$$

$$=(\lambda-1)\left[\lambda^2-3\lambda+2-2\right]=\lambda(\lambda-1)(\lambda-3)=0$$

则 $\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A}$ 的特征值和$\boldsymbol{A}$的奇异值分别为

$$\lambda_1=3,\ \ \lambda_2=1,\ \lambda_3=0;\ \ \sigma_1=\sqrt{3},\ \sigma_2=1,\ \ \sigma_3=0$$

所以

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix}\sqrt{3} & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

再求出$\boldsymbol{V}$，由

$$\begin{pmatrix}2 & 0 & -1\\ 0 & 2 & -1\\ -1 & -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 0\end{pmatrix}\Leftrightarrow\begin{matrix}2x_1 \quad\quad -x_3=0\\ 2x_2-x_3=0\\ x_1+x_2-x_3=0\end{matrix}\Rightarrow p_1=\begin{pmatrix}1\\ 1\\ 2\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{array}{r} x_3 = 0 \\ x_3 = 0 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 0 \end{array} \Rightarrow p_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{array}{r} x_1 \qquad + \; x_3 = 0 \\ x_2 + \; x_3 = 0 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 0 \end{array} \Rightarrow p_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

对应的标准正交的特征向量为:

$$v_1 = \frac{p_1}{\|p_1\|_2} = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad v_2 = \frac{p_2}{\|p_2\|_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v_3 = \frac{p_3}{\|p_3\|_2} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

即得 $V=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$，因**rank($A$)=2**，故有$\left(V_1\right)_{3\times 2}=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \end{pmatrix}$

进一步计算得出，

$$\left(\boldsymbol{U}_1\right)_{3\times 2}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

得约化的奇异值分解

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_1 \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{V}_1^H = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

计算U_2, 使其与U_1构成$\mathbf{R}^3$的一组标准正交基，可取 $U_2=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$

则

$$U=\begin{pmatrix}U_1 & U_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

是酉阵, 故矩阵A的奇异值分解（满的奇异值分解）为

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

2.4.3 利用矩阵的奇异值分解讨论矩阵的性质

定理2.15 矩阵A的非零奇异值的个数恰为矩阵A的秩.

$$rank(A^H A) = rank(AA^H) = rank(A^H) = rank(A)$$

定理2.16 $\mathrm{R}(A) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r\},\ N(A) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n\}$

其中 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_i$ 分别为矩阵U和V的正交向量; R(A)为由A的列向量生成的子空间, 称为A的值域或像空间. 即

$$R(A) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_r\}$$

N(A)称为A的零空间或核空间, 即 $\mathrm{N}(A) = \{\boldsymbol{x} \mid A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}\}$

$$\boldsymbol{AV}_1 = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma} \qquad \boldsymbol{AV}_2 = \boldsymbol{O}$$

定理2.17 设 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$ 则

$$\|A\|_2 = \sigma_1 \qquad \|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_r^2}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^H A)} \qquad \|A\|_F = \sqrt{\mathrm{trace}(A^H A)}$$

定理2.18 如果A为**Hermite**矩阵, 则A的奇异值即为A的特征值的绝对值.

$$A^H A = A^2$$

$$\sigma(A) = \sqrt{\lambda(A^H A)} = \sqrt{\lambda(A^2)} = \sqrt{\lambda(A)^2} = |\lambda(A)|$$

定理2.19 如果A为 n 阶方阵, 则 $\left|\det(\boldsymbol{A})\right| = \prod_{i=1}^{n} \sigma_i$

$$\sqrt{\det(\boldsymbol{A}^H \boldsymbol{A})} = \sqrt{\prod_{i=1}^{n} \sigma_i^2} = \prod_{i=1}^{n} \sigma_i$$

$$= \sqrt{\det(\boldsymbol{A}^H)\det(\boldsymbol{A})} = \sqrt{\overline{\det(\boldsymbol{A})}\det(\boldsymbol{A})} = \sqrt{|\det(\boldsymbol{A})|^2}$$

定理2.20 秩为r的$m\times n$阶矩阵A可以表示为r个秩为1的矩阵的和

$$A=\sigma_1 u_1 v_1^H+\sigma_2 u_2 v_2^H+\cdots+\sigma_r u_r v_r^H$$

$$A=U_1 \Sigma V_1^H=(u_1,\ldots,u_r)\begin{pmatrix}\sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v_1^H\\ \vdots \\ v_r^H\end{pmatrix}$$

$$=(\sigma_1 u_1,\ldots,\sigma_r u_r)\begin{pmatrix}v_1^H\\ \vdots \\ v_r^H\end{pmatrix}=\sigma_1 u_1 v_1^H+\cdots+\sigma_r u_r v_r^H$$

$$rank(u_i v_i^H)=rank(v_i^H u_i)=1$$

第2章结束

作者姓名：张宏伟、金光日、李崇君

工作单位：大连理工大学应用数学系

联系方式：E-mail：hwzhwdl@sohu.com