Chapter 5 线性方程组直接法

张亚楠*

November 16, 2023

引例

假设

Ax = b, $\sharp \psi \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$

唯一可解. 如何求解? Gauss-Jordan消元法! 最容易求解的A的类型有哪些?

(1) 单位矩阵; 对角矩阵

(2) 上(下)三角形矩阵

(3) 正交矩阵

- 1) 如果系数矩阵A稠密且固定不变,需要针对1000个不同的 右端项 *b*, 反复求解上式;如何避免 重复计算? (预先分解系数矩阵)
- 2) 如果系数矩阵规模很大,例如 $n = 10^6$, 同时又是稀疏矩阵(绝大多数元素都是零),如何有效求解? (迭代法)
- 3) 不同算法的计算复杂度如何衡量?

• 直接法: Gauss消去及其变形: LU, Cholesky, LDL, QR,

• 迭代法: Jacobi, Gauss-Seidel, SOR; CG, PCG, GMRES, 其它 Krylov子空间方法

1 预备知识

向量和矩阵 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 表示全体 $m \times n$ 实矩阵向量空间; $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 即

$$A = (a_{ij}) = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

 $\vec{x} \in \mathbb{R}^n \ \mathbb{P} \ \vec{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^\top.$

^{*}ynzhang@suda.edu.cn 苏州大学数学科学学院

- 1. 矩阵的基本运算 矩阵加法和标量乘法;矩阵乘法;转置矩阵;矩阵行列式 det (A)
- 2. 矩阵的特征值和谱半径

定义 1 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 若存在数 λ 和非零向量 $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$, 使得

 $A\vec{x} = \lambda \vec{x}$

称 λ 为A的特征值, \vec{x} 为对应特征值 λ 的特征向量,A的全体特征值称为A的谱,记作 $\sigma(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n\}$,记

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

为矩阵A的谱半径.

记I是恒同矩阵,则方程

$$(\lambda I - A) * \vec{x} = 0$$

有非零解;进而

$$\det(\lambda I - A) = 0$$

上式左端是关于未知量 λ 的n次代数多项式,称为 A 的特征多项式,记为 $p(\lambda)$. 上式称为 A 的特征多项式,记为 $p(\lambda)$. 上式称为 A 的特征方程. 由代数知识, $p(\lambda)$ 在复数域有n个根 λ_i ,则

$$p(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)...(\lambda - \lambda_n)$$

直接计算 $p(\lambda)$ 的根是数值不稳定的,需要用到后文的专门计算矩阵特征对的方法。

1.1 几类特殊矩阵: "好矩阵"

1. 对角阵; d-对角阵; 例如三对角阵;

- 2. 对称阵 $A = A^T$, 对称正定阵 A; 注意对称正定矩阵也可能很坏, 例如Hilbert矩阵
- 3. 正交矩阵; $P^T \cdot P = I$, 或者 $P^T \cdot P =$ 对角矩阵, Fourier矩阵, 正弦矩阵, 余弦矩阵

2

上三角矩阵 T 、 Hessenberg矩阵H

$$T = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 3 & 5 & 3 \\ 0 & 1 & 4 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 4 & 5 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad H = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 3 & 5 & 3 \\ 2 & 1 & 4 & 4 & 4 \\ 0 & 2 & 4 & 5 & 3 \\ 0 & 0 & 5 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 4 \end{bmatrix}$$

例 1 任意给定的上三角矩阵 $T \in \mathbb{R}^n$ 、 上Hessenberg矩阵 $H \in \mathbb{R}^n$, 则

$$T \cdot H$$
, $H \cdot T$

仍然是上Hessenberg矩阵。另外,下三角乘以下三角仍然是下三角矩阵。

例 2 检验 (1)

$$L_{31} * \boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ l_{31} * a_1 + a_3 \\ a_4 \end{bmatrix}$$

(2)

$$L_{k1} * L_{m1} = L_{m1} * L_{k1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \vdots & \ddots & & & \\ l_{k1} & \cdots & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ l_{m1} & & & 1 & \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}, \quad m \neq k$$

(3)

$$L_{1} * L_{1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ l_{n1} & & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -l_{n1} & & 1 \end{bmatrix} = I$$

(4)

$$L_{1} * L_{2} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & & & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & l_{32} & 1 & & \\ 0 & \vdots & & \ddots & \\ 0 & l_{n2} & & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & & & 1 \end{bmatrix} \neq L_{2} * L_{1}$$

2 Gauss-Jordan消去和LU分解

引例: (消元方法)

$$2x + 4y - 2z = 2$$
 $2x + 4y - 2z = 2$
 $4x + 9y - 3z = 8$ \rightarrow $1y + 1z = 4$
 $-2x - 3y + 7z = 10$ $4z = 8$

例1 线性代数的方法:

$$A \to \left[\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{array} \right] \to \left[\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{array} \right] \to \left[\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \to U$$

上述消元的过程保留消元因子即可得到LU分解

高斯消元相当于左乘初等矩阵; 例如

$$E_{21} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \quad l_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}}$$

将恒同矩阵写在A的旁边,同时作用Gauss消元 [A, I]. 容易知道:对A的处理,完全体现在I身上.

$$E_{n,n-1}*E_{n,n-2}E_{n-1,n-2}*...*E_{n1}...E_{31}E_{21}*A=U$$

上式横线部分的逆即是LU分解产生的下三角矩阵L. 根据矩阵求逆的规则和初等矩阵的逆可知 下三角L的元素即是Gauss消元过程中产生的乘子.

1) E_{21} 的逆矩阵(逆变换)

$$E_{21}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

2) (同列的)初等矩阵乘法可交换 $E_{31}*E_{21}=E_{21}*E_{31}$ …

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ l_{31} & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ l_{31} & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

因此,可以记 $E_1 = E_{n1}...E_{21}$.

3) 由矩阵分块规则,第二列以后,如 E_{42} , E_{32} , 有类似性质

$$E_{32} * E_{42} = E_{42} * E_{32} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & * & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & * & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & * & 1 & 0 \\ 0 & * & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

4

类似记 $E_2 = E_{n2}...E_{32}$.

4) 由1), 2), 3) 分析可知:矩阵的变换过程可以写成

$$E_{n-1}E_{n-2}...E_2E_1A = U$$

其中 E_k 以单位矩阵为基础,第k个主元以下为 $l_{k+1,k}$, $l_{k+2,k}$ ··· 的初等矩阵,其逆矩阵 E_k^{-1} 将 E_k 第k 列取负值,形式如下:

$$\begin{bmatrix} 1 & & k_{\downarrow} & & \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ k \rightarrow & & 1 & & \\ & & * & \ddots & \\ & & * & 1 \end{bmatrix}$$

5) \(\psi\)\(\frac{\psi}{L} = (E_{n-1} * E_{n-2} * \ldots * E_1)^{-1} = E_1^{-1} * \ldots * E_{n-1}^{-1}\)

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix}$$

注意 (不同列的初等矩阵乘法不可交换)

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 11 & 4 & 1 \end{bmatrix}$$

下面说明如何计算 L

利用初等矩阵(变换)的意义或者分块矩阵乘法规则, 可证明(单列初等矩阵满足):

$$\begin{bmatrix} 1 & 0_{1\times(n-1)} \\ L_1 & I_{n-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0_{1\times(n-1)} \\ 0_{(n-1)\times1} & L_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ L_1 & L_2 \end{bmatrix}$$

以及由分块矩阵乘法

$$\begin{bmatrix} I_{\ell} & 0_{\ell \times (n-\ell)} \\ 0_{(n-\ell) \times \ell} & A_{(n-\ell) \times (n-\ell)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_{\ell} & 0_{\ell \times (n-\ell)} \\ 0_{(n-\ell) \times \ell} & B_{(n-\ell) \times (n-\ell)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & A*B \end{bmatrix}$$

也即

$$\begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & L_1 & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & L_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & L_1 & L_2 \end{bmatrix}$$

上式说明消元过程中产生的乘子 l_{ij} 即是L的对应元素, 变换过程中依次放在L的相应位置(i,j) 即得

5

$$A = L * U$$

2.1 LU分解的MATLAB矩阵实现

如何尽量Matlab矩阵运算, 避免循环

- (1) 对n阶矩阵分块
- (2) 计算下三角矩阵L的第一列元素

$$L_{j1} = \frac{A_{j1}}{A_{11}} \quad j = 2 \to n$$

(3) 更新A的剩余(n-1)阶矩阵

$$A_{new} = A_{22} - L(2:n,1) * A(1,2:n)$$

(4) 矩阵更新为(n-1)阶, 重复第一步, 直到循环结束。

Matlab 测试代码如下

```
A = rand(5); A = A'*A;
   n = size(A,1); U = A; L = eye(n);
2
   % ===
4
  for j = 1:n-1
      j1 = j+1:n;
5
      L(j1,j) = U(j1,j) / U(j,j);
6
       U(j1,j) = 0;
7
      U(j1,j1) = U(j1,j1) - L(j1,j)*U(j,j1);
8
9
   % --- L, U,
10
11
   err1 = abs(L*U - A); max(err1(:)),
```

Gauss 消去何时可用? 充分条件

定理 1 If A is

- positive definite : $x^{T}Ax > 0$; $\forall x \in \mathbb{R}^{n}$
- diagonally dominate: $|a_{ii}| > \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$

then Gauss elimination is stable.

2.2 Gauss消元的计算复杂度

对稠密矩阵执行Gauss消去所需乘除法的次数:

$$n^2 + (n-1)^2 + \dots + 1 \approx \frac{1}{3}n^3$$

如需多次求解同一个系数矩阵产生的方程组, 应当先进行三角形分解; 避免每次重复消元。

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

除了第一步LU分解需要一次 n^3 次计算量,求解三角形方程组只要 n^2 次 计算量。

Gauss 消去何时好用?

帯状矩阵: 三对角矩阵, d-diagonal (d-banded) matrix D-对角矩阵的三角形分解, 计算量 为 $\mathbb{O}(d^2\cdot N)$

3 列主元高斯消去

思考: Gauss消去是否对所有可逆矩阵可行? 例如如下系数矩阵

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} 10^{-8} & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

衍生方法:列主元高斯消去;全主元高斯消去; ...

Ax = b 本身解存在唯一,但是消元的过程中,主元 $a_{ii}^{(k)} = 0$ 消元法无法继续; 或者 $a_{ii}^{(k)} \approx 0$ 作为分母, 数值不稳定. 如何解决?

例 3 回忆线性代数课程中的解方程过程

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 6 & 8 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{row change}} \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 2/3 & -4/3 & 1/3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 2/3 & -2/3 & 1 \end{bmatrix}$$

检验PA = LU

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 6 & 8 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \hline 2/3 & -2/3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

寻找每一列的最大元然后交换两行,相对于左乘一个初等置换矩阵(permutation, 只交换两行); 此过程写成矩阵形式如下

7

$$E_{n,n-1}P_{n-1} * E_{n,n-2}E_{n-1,n-2}P_{n-2} * ... * E_{n1}...E_{31}E_{21}P_1 * A = U$$

类似于不选主元的LU分解,记每一列的初等行变换乘积为

$$E_k = E_{n,k} * E_{n-1,k} * E_{n-2,k} ... * E_{k+1,k}$$

列主元Gauss消去可写为:

$$(E_{n-1}P_{n-1})...(E_2P_2)\cdot (E_1P_1)A=U$$

以n=4为例, 上式为

$$E_3P_3 * E_2P_2 * E_1P_1 * A = U$$

改写为

$$E_3 * (P_3 E_2 P_3) * (P_3 P_2 E_1 P_2 P_3) * (P_3 P_2 P_1) * A = U$$

进而

$$F_3F_2F_1PA = L^{-1} * PA = U$$

注意到 E_k 为正常的行变换矩阵, P_k 针对第k列,交换 (k+1) 到 n之间的某两行,满足:

$$P = P^T$$
, & $P * P = I$

现分析 $L = F_3^{-1} * F_2^{-1} * F_1^{-1}$

- (1) $F_3 = E_3$, $F_{n-1}^{-1} = E_{n-1}^{-1}$ 形如普通LU, 不参与换行.
- (2) 现说明中间部分 F_k (其逆具有同样的形式)

$$F_k = P_{n-1} \cdots P_{k+1} E_k P_{k+1} \cdots P_{n-1}$$

(A)-1 $P_{k+1}E_kP_{k+1}$ 只交换 E_k 对应第k列以下的某两行

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \parallel & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \parallel & P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ P \cdot \parallel & I \end{bmatrix}$$

当k≠1时,按照矩阵分块,将上式记为A,B,C,有

$$\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & ABC \end{bmatrix}$$

(A)-2 F_k 只交换 E_k 对应第k列以下的元素,每次交换两行或者不换, 依赖于 $P_{k+1}...P_{n-1}$,即

$$F_k = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ P_{n-1} ... P_{k+2} P_{k+1} \cdot \| & I \end{bmatrix}$$

(3) 每个F与E具有同样形式,可类似将乘子存于L的对应位置。且注意对应于第k列产生的 E_k ,以后(k+1)每次换行(P_i , j>k)均作用于 E_k .

8

(4) 排列矩阵 $P = P_{n-1}...P_2P_1$ 的计算只需要存储一个数组即可。

$$p = (1,2,...j,...,k...,n), \rightarrow p_1 = (1,2,...,k,...,j,...,n) \rightarrow ... \rightarrow p_{n-1}$$

P可通过交换单位矩阵的行来实现

$$P = I(p_{n-1},:)$$

(5) 若顺带计算A的行列式,可记录符号: sign = 1; 1 if rows exchange 2 sign = -sign 3 endif

定理 2 如果A为非奇异矩阵,则存在置换矩阵P,使得

PA = LU

Matlab Code: lutx.m & mylulect3.m

```
A = rand(5);
2 \mid n = size(A,1); p = (1:n)'; sign = 1; U = A;
3
   % ===
   for j = 1 : n
4
   % --- exchange rows
5
       [^{\prime},Ind] = max(abs(U(j:n,j)));
6
7
       Ind = Ind + j - 1;
8
       if U(j,j) / U(Ind,j) < 1</pre>
       p([j, Ind]) = p([Ind, j]); sign = - sign;
9
       U([j, Ind],:) = U([Ind,j],:);
10
       end
11
12
   % --- eliment
13
       j1 = j+1:n;
       mj = U(j1,j)./U(j,j); U(j1,j) = mj;
14
       U(j1,j1) = U(j1,j1) - mj*U(j,j1);
15
   end
16
17
   % === output perm mat % L & U
   P = eye(n); P(1:n,:) = P(p,:),
18
   L = tril(U,-1) + eye(n); U = triu(U);
20
   det(A) - sign*prod(diag(U)),
   err = abs(P*A - L*U); max(err(:))
21
```

4 对称正定矩阵的三角分解

设B是可逆矩阵(或列满秩),则 $A = B^T B$ 对称正定.

Hint: 对称性显然满足。任给 $x \in R^n$,

$$x^T A x = x^T B^T B x = (Bx)^T (Bx) \ge 0$$

且等号成立时, $Bx=0 \rightarrow x=0$. 实际上,只要B的列向量线性无关,上述结果成立。

反过来,给定对称正定矩阵A

- Q-(1) 是否存在合适的B(例如三角形矩阵)使之满足 $A = B^T * B$?
- Q-(2) 如果存在,如何找到? Cholesky分解

型考: 一般地,没有规律的稠密矩阵可以进行LU分解,现在矩阵有<u>对称性</u>,存储量可以减半; 计算量是否也应当减半?

提取上三角矩阵的对角元素组成对角阵,则 U_0 是单位上三角矩阵;由对称性可得

$$A = LU = L * D * U_0 = U_0^{\mathrm{T}} * (D * L^{\mathrm{T}}) = L_1 U_1$$

下面说明: $L 与 L_1 = U_0^{\mathrm{T}}$ 相等! 由于 L, L_1 都是单位下三角矩阵; 由分解的唯一性可知

$$LU = L_1 U_1 \Leftrightarrow \underline{L^{-1}} L U \underline{U_1^{-1}} = \underline{L^{-1}} L_1 U_1 \underline{U_1^{-1}} \Leftrightarrow U U_1^{-1} = L^{-1} L_1 = I \Rightarrow L = U_0^T$$

其中用到下三角乘以下三角仍是下三角, 下三角的逆仍是下三角。 进而

$$A = LDL^{\mathsf{T}} = (L\sqrt{D}) * (\sqrt{D}L^{\mathsf{T}}) = \tilde{L} * \tilde{L}^{\mathsf{T}}$$

例 4 证明: 若A对称正定,则对角线元素D均大于0.

提示: (反证法) 假设D某个对角元素 ≤ 0 ,可以证明存在向量x满足 $x^{T}Ax \leq 0$

4.1 Cholesky 分解

将 $A = L * L^T$ 写成分块形式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & A_{21}^{\mathsf{T}} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & L_{21}^{\mathsf{T}} \\ 0 & L_{22}^{\mathsf{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11}^2 & l_{11}L_{21}^{\mathsf{T}} \\ l_{11}L_{21} & L_{21}L_{21}^{\mathsf{T}} + L_{22}L_{22}^{\mathsf{T}} \end{pmatrix}$$

matlab code: mycholect.m

```
\% === chol A = L*L'
1
   A = [25 \ 15 \ -5; \ 15 \ 18 \ 0; \ -5 \ 0 \ 11];
   % A = rand(5); A = A'*A;
   n1 = size(A,1); L = tril(A);
5
   for j = 1:n1
        j1 = j+1:n1;
6
7
        L(j,j) = sqrt(L(j,j));
        mj = L(j1,j)./L(j,j);
8
9
        L(j1,j) = mj;
10
        L(j1,j1) = L(j1,j1) - mj*mj';
11
   end
   L = tril(L); e1 = abs(A - L*L'); max(e1(:)),
```

Algorithm 1 Cholesky 分解

Input: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Output: 下三角 L, 满足A = L * L'

1: 计算对角主元 l_{11} 和第一列 L_{21} : (一次开方、n-1次乘法)

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad L_{21} = \frac{1}{l_{11}} A_{21}$$

2: compute L_{22} from: $((n-1)^2$ 次乘法,对称矩阵减半 $(n-1)^2/2$)

$$A_{22} - L_{21} * L_{21}^{\mathrm{T}} = L_{22}L_{22}^{\mathrm{T}} = A_{new}$$

3: n阶矩阵变成了(n-1)阶矩阵

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

4: 重复1, 2, 过程. 每次作用 $\frac{n^2}{2}$ 次乘法, 共计 $n^3/6$

例 5 利用Cholesky分解, 计算对称矩阵的三角形分解.

$$\begin{pmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ & l_{22} & l_{23} \\ & & l_{33} \end{pmatrix}$$

• k=1 时, 计算 L 的第一列; 并生成下一步待分解(n-1) 阶矩阵

$$\begin{pmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & & & \\ 3 & l_{22} & & \\ -1 & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 5 & 3 & -1 \\ & l_{22} & l_{23} \\ & & l_{33} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 18 & 0 \\ 0 & 11 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 3 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 10 \end{pmatrix}$$

• 针对(n-1)阶矩阵, 重复上一步骤, 得到L的第二列

$$\begin{pmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{22} \\ l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} l_{22} & l_{23} \\ & l_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 1 & l_{33} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 0 & l_{33} \end{pmatrix}$$

以及(n-2)矩阵 10-1=9

• $l_{33}^2 = 9 \rightarrow l_{33} = 3$; 计算完毕。

标注 1 以上代码没有充分利用矩阵的对称性,其中第十行mj*mj 计算量应该减半。但是如果利用循环改写这句代码,效率反而变慢。因为Matlab计算矩阵更高效。下节给出Cholesky分解计算效率更高的推导和代码写法。

11

4.2 Cholesky分解 II

按照矩阵乘法 $A = L * L^T$, 即

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^{n} L_{ik} * L_{jk} = \sum_{k=1}^{j} L_{ik} * L_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} * L_{jk} + L_{ij} * L_{jj}$$

按列计算可得

$$\begin{cases} A_{jj} = \sum_{k=1}^{j-1} L_{jk} * L_{jk} + L_{jj} * L_{jj} & \rightarrow L_{jj} = \sqrt{A_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{jk}^2} \\ A_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} * L_{jk} + L_{ij} * L_{jj} & \rightarrow L_{ij} = \left(A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} * L_{jk}\right) / L_{jj} \end{cases}$$

上述过程也可按照分块矩阵乘法描述,记

$$j_0 = 1: j-1, \ j_1 = j+1: n$$

为两个指标向量,则 A = L * L'形式如下

$$\begin{bmatrix} A(j_0,j_0) & * & * \\ A(j,j_0) & A(j,j) & * \\ A(j_1,j_0) & A(j_1,j) & A(j_1,j_1) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} L(j_0,j_0) & & & \\ L(j,j_0) & L(j,j) & & \\ L(j_1,j_0) & L(j_1,j) & L(j_1,j_1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} L(j_0,j_0)' & L(j,j_0)' & L(j_1,j_0)' \\ & L(j,j) & L(j_1,j)' \\ & & L(j_1,j_1)' \end{bmatrix}$$

进而

$$A(j,j) = L(j,j_0) * L(j,j_0)' + L(j,j) * L(j,j)$$

$$A(j1,j) = L(j_1,j_0) * L(j,j_0)' + L(j_1,j) * L(j,j)$$

```
\% === chol A = L*L', \% A = rand(10); A = A'*A;
   A = [25 \ 15 \ -5; \ 15 \ 18 \ 0; \ -5 \ 0 \ 11];
   | n1 = size(A,1); L = eye(n1);
4
   for j = 1:n1
5
        j0 = 1:j-1; j1 = j+1:n1;
6
        L(j,j) = sqrt(A(j,j) - L(j,j0)*L(j,j0)');
7
        L(j1,j) = (A(j1,j) - L(j1,j0)*L(j,j0)')/L(j,j);
8
9
   end
10
   e2 = abs(A - L*L'); max(e2(:))
```

matlab code: mycholect2.m 代码中计算量最大发生在第8行, L(j1,j0)*L(j,j0)' 对固定的j,需要(j-1)*(n-j+1) 次乘法,共计 $\sum_{j=1}^n j(n-j) \approx n^3/6$

4.3 改进的平方根方法

当矩阵为负定或者不定矩阵时,Cholesky分解不可直接使用。而改进的平方根法可用, 且与LU 分解比较计算量减半。

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

依据矩阵乘法规则 $A = (LD) * L^{T}$ 即

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} (LD)_{ik} (L^{\mathrm{T}})_{kj} = \sum_{k=1}^{n} \left(\sum_{l=1}^{n} l_{il} d_{lk} \right) l_{jk} \xrightarrow{\mathrm{D} \text{ is diag}} \sum_{k=1}^{n} \left(l_{ik} d_k \right) l_{jk}$$

由于 $l_{jk} = 0$, for j < k

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} (l_{ik}d_k)l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} (l_{ik}d_k)l_{jk} + l_{ij}d_j\underline{l_{jj}} = 1$$

即

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} * (d_k l_{jk}) + l_{ij} d_j$$

对 i=1,2,...,n; 注意 L为单位下三角,对角线元素为1, $l_{ij}=0,\,i< j$

$$a_{jj} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} * (d_k l_{jk}) + d_j \rightarrow d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} * (d_k l_{jk})$$

$$l_{ij} = \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} * (d_k l_{jk}) \right] / d_j, \quad i > j$$

编程时可采用下三角矩阵存储, 针对 $j=1 \rightarrow n-1$ 按列计算。记 $j_0=1: j-1, j_1=j+1: n$

A-(1) 计算(j-1)维向量 $DL = D(j_0).*L(j,j_0)$ 待用

A-(2) 令
$$i = j$$
, 计算 $d_i = a_{ij} - L(j, j_0) * DL'$

A-(3) 计算
$$L(j_1, j) = [l_{i+1, j}, ..., l_{n, j}]^T = A(j_1, j) - L(j_1, j_0) * DL'$$

• i = j = 1 时, $d_1 = a_{11}, i \ge 2$ 时,

$$l_{i1} = a_{i1}/d_1, \quad i \ge 2$$

• $j \ge 2$ 时,当 k < j, d_k , l_{ik} , l_{jk} 已知,则

$$d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} * (d_k l_{jk})$$

当 i>j时, $l_{i,1},...l_{i,j-1}$ 已知,则

$$l_{ij} = \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} * \left(d_k l_{jk}\right)\right] / d_j, \quad i > j$$

```
1    A = [25, 15, -5; 15, 18, 0; -5, 0 , 11];
2    n1 = size(A,1); L = eye(n1); Dd = zeros(n1,1);
3    % ---
4    for j = 1:n1
5         j0 = 1:j-1; j1 = j+1:n1;
6         DL = L(j,j0)'.*Dd(j0); % j,size(DL,1), % col vec
```

<u>Tips:</u> 圆括号部分作为一个整体可避免重复计算,运算量为 $\frac{1}{6}$ n^3 . Cholesky 分解同样适用于稀疏矩阵,且一般情况下 工作量大大降低。 matlab code: mycholect3.m 对有些问题 通过行交换改变矩阵的pattern可以进一步的降低工作量。 矩阵分解内涵相当丰富,可自行阅读《数值代数》相关资料.

5 追赶法(Thomas Algorithm)

矩阵的三角分解工作量是 $\mathbb{O}(n^3)$ 量级的乘除法,对称矩阵工作量可以减半;即使如此,对大型的稀疏矩阵,人们更倾向于后文的迭代法。但是有一类特殊的、且在实际问题中经常出现的线性方程组非常适合于直接法(Gauss消去或者三角分解)

三对角或者d对角线性方程组

$$\begin{pmatrix} b_{1} & c_{1} & & & & \\ a_{2} & b_{2} & c_{2} & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_{n} & b_{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1} \\ x_{2} \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_{n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{1} \\ f_{2} \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_{n} \end{pmatrix}$$

此时对上述方程Ax = f进行LU分解,得到如下形式

$$A = \left(\begin{array}{cccc} 1 & & & & \\ \alpha_1 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \alpha_{n-2} & 1 & \\ & & & \alpha_{n-1} & 1 \end{array} \right) * \left(\begin{array}{ccccc} \beta_1 & c_1 & & & \\ & \beta_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & \beta_n \end{array} \right)$$

Algorithm 2 追赶法Thomas algorithm solve [0 a b c 0]*x = d;

Input: input 矩阵A的三条对角线向量 a, b, c 以及右端项 d

Output: 向量 x

- 1: 初始数据 N = length(d); alp = a; bet = b; gam = c; x = d;
- 2: for k = 1:N-1 do
- 3: $\mu = a(k)/bet(k); alp(k) = \mu;$
- 4: $bet(k+1) = bet(k+1) \mu^*c(k);$
- 5: return alp, bet

可以验算上述三角分解过程需要约2n次乘除法, 一旦分解完成, 可按照如下方式计算三对角

方程组

$$Ax = f \Leftrightarrow LUx = f \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = f \\ Ux = y \end{cases}$$

求解上述方程只要约 3n次乘除法. 若要反复求解上述方程,也应当先进行分解. matlab code: tridisolve.m& tridilu.m 三对角或者D-对角线性方程组不可执行行交换(row exchage); 如果破坏这种紧凑性,运算量会从最低的 $\mathbf{O}(n)$ 急剧上升到 $\mathbf{O}(n^3)$.

```
n1 = 21;
1
2 \mid a = ones(n1-1,1); b = -2*ones(n1,1); c = a;
3 \mid A = diag(b) + diag(a,-1) + diag(c,1); figure; spy(A)
   r = 0*b+1; % -- test problem
   % [a/b/c] --> L = [alp // 1], U = [bet // c]
6
   for j = 1:n1-1
7
       a(j) = a(j) / b(j);
8
       b(j+1) = b(j+1) - a(j)*c(j);
9
   end
   % --- solve eqn, Ax = r by L*Ux = r
10
   y = r;
11
12
   for j = 2:n1 \% --- Ly = r
13
       y(j) = y(j) - a(j-1)*y(j-1);
14
   end
   % ---- Ux = y
15
   x1 = y; x1(n1) = y(n1) / b(n1);
   for j = n1-1:-1:1
17
18
       x1(j) = (y(j) - x1(j+1)*c(j))/b(j);
19
   end
20
   e1 = norm(A*x1 - r, inf)
   figure; plot(x1,'ro-','linewidth', 1);
```

若不在乎2n次的重复计算,或者只需要计算一次三对角线性方程组,以下代码也是高效的.

```
1
    function U = Thomas1(a,b,c,r)
2
       A SIMPLE CODE for Tridiag sysm : A*U = r;
3
       a = diag(A); b = diag(A,-1); c = diag(A,1); r = rhs
      Tips: sparse + "\" is more efficient than "this code" and "sine trans"
4
       % Elimination
5
6
       n = length(r);
7
       for ii = 2 : n
       a(ii) = a(ii) - b(ii-1)/a(ii-1)*c(ii-1);
8
9
       r(ii) = r(ii) - b(ii-1)/a(ii-1)*r(ii-1);
10
       end
```

6 Gram-Schmidt正交化和QR分解

第三章针对最小二乘问题的计算,我们给出了超定方程系数矩阵的 QR分解,也称为不完全QR分解。本节对于可逆矩阵,同样的方法可得到其完全QR分解。后文特征值计算也会涉及QR分解,而QR分解本身也可以用来求解线性方程组。

例 6 给定非奇异矩阵

$$A = \begin{bmatrix} | & | & \cdots & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & \cdots & | \end{bmatrix}$$

如何根据A的列向量得到空间

$$span(A) = \mathbb{R}^n = span\{a_1, a_2, ..., a_n\}$$

的一组标准正交基?

Gram-Schmidt正交化方法本质上是将A分解为

$$A = QR$$
, & $Q^{T}Q = I$, $R(i, j) = 0$, for $i > j$

```
A = rand(8); % A = hilb(8)
   n1 = size(A,1); R = zeros(n1); Q = A;
2
   for j = 1:n1
3
       v = A(:,j);
4
       for k = 1:j-1
5
6
           R(k,j) = Q(:,k)'*v;
           v = v - R(k,j)*Q(:,k);
7
8
       end
9
       R(j,j) = norm(v);
       Q(:,j) = v / R(j,j);
10
11
   end
   A - Q*R, Q'*Q - eye(n1) % check error
12
13
   % this code is not correct to illconditoin matrix like: hilbert
```

一旦矩阵A的QR分解完成, 求解Ax = b可按照以下两步进行

$$\begin{cases} y = Q^T b \\ Rx = y \end{cases}$$

读者可检验计算复杂度并与LU分解比较;实际利用Matlab计算时,矩阵乘以向量可能比解三角形方程组更快。

7 Krylov子空间 0

直接法对于三对角矩阵和三角形矩阵表现良好, Hessenberg矩阵是这两者结合而成,LU分解效果如何? 分析H矩阵进行LU分解需要的乘除法次数以及分解后的矩阵形式

$$H = \begin{bmatrix} + & + & + & + & + \\ + & + & + & + & + \\ 0 & + & + & + & + \\ 0 & 0 & + & + & + \\ 0 & 0 & 0 & + & + \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ + & 1 \\ 0 & + & 1 \\ 0 & 0 & + & 1 \\ 0 & 0 & 0 & + & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} + & + & + & + & + \\ 0 & + & + & + & + \\ 0 & 0 & + & + & + \\ 0 & 0 & 0 & + & + \\ 0 & 0 & 0 & 0 & + \end{bmatrix}$$

假定计算 Ax = b 时, (计算机) 有以下限制

- 不可执行矩阵分解(lu, QR都不行)
- 可以算乘法: $\forall v \in \mathbb{R}^n$, 可以得到 Av
- 可以求解系数矩阵为Hessenberg矩阵的线性方程组

在以上限制条件下求解Ax = b?

记Krylov矩阵

$$\mathbb{K}_n = \left[b, Ab, A^2b, ..., A^{n-1}b\right]_{n \times n}$$

为推导过程简单,我们假设≤,是满秩的。

现考虑对K进行QR分解,得到

$$\mathbb{K}_{n} = Q \cdot R = Q \cdot \begin{bmatrix} r_{11} & + & + & + & + \\ 0 & + & + & + & + \\ 0 & 0 & + & + & + \\ 0 & 0 & 0 & + & + \\ 0 & 0 & 0 & 0 & + \end{bmatrix} = Q * \begin{bmatrix} r_{11} * e_{1}, & R_{(:,2:n)} \end{bmatrix}$$

进而

$$A * \mathbb{K}_n = \left[\mathbb{K}_{(:,2:n)}, \mid A^n b \right] = \left[Q * R_{(:,2:n)}, \mid A^n b \right] = Q * \left[R_{(:,2:n)}, \mid Q^T A^n b \right]$$

也即

$$A*Q*R = Q*[Hessenberg] \Longrightarrow A*Q = Q*[Hessenberg]*R^{-1} = Q*H$$

上式中H是Hessenberg矩阵。 由 $H = Q^{T}AQ$, 即

$$\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} \\ 0 & h_{32} & h_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1^T \\ q_2^T \\ q_3^T \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} Aq_1, Aq_2, Aq_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1^T Aq_1 & q_1^T Aq_2 & q_1^T Aq_3 \\ q_2^T Aq_1 & q_2^T Aq_2 & q_2^T Aq_3 \\ q_3^T Aq_1 & q_3^T Aq_2 & q_3^T Aq_3 \end{bmatrix}$$

由正交性 $q_3^{\rm T}(Aq_1)$ 为零。Arnoldi算法代码如下。

```
function [Q,H] = myArnoldiO(A,v)
1
   % % basic Arnoldi by Gram-Schmidt method generate A,Q,H
2
3
   % Full Orthogonalization Method: A*Q = Q*H
   % for example: n = 7; A = hilb(n); v = ones(n,1);
4
         [Q,H] = myArnoldiO(A,v); norm(A*Q - Q*H), norm(Q'*Q-eye(n))
5
   m = size(A,1);
6
7
   Q = zeros(m,m); H = zeros(m,m);
   v = v./norm(v); Q(:,1) = v;
8
   for k = 1:m
9
       w = A*Q(:,k);
10
       H(1:k,k) = Q(:,1:k)'*w; % projection coefs
11
12
       W = W - Q(:,1:k)*H(1:k,k); % w orth to Q(:,1:k)
13
       H(k+1,k) = norm(w,2);
       Q(:,k+1) = w / H(k+1,k);
14
15
   end
   Q = Q(:,1:m); H = H(1:m,1:m);
16
```

两个事实

- 1. 给定A, v, 依次给出Aⁱv并执行Gram-Schmidt正交化得到正交矩阵Q 是容易的, 但不实用
- 2. Arnoldi算法可在给出Q的同时给出Hessenberg矩阵.

借助于 Arnoldi 算法得到

$$A * Q = Q * H \rightarrow A = QHQ^{T}$$

计算Ax = b 转化为

$$QH(Q^{\mathsf{T}}x) = b \to \begin{cases} Hy = Q^{\mathsf{T}}b \\ x = Qy \end{cases}$$

标注 2 上述过程更厉害的用处在于: A真的可以被封装甚至A根本不是矩阵,同样可以产生H, Q. 这对非线性方程组的Inexact Newton 法是非常重要的。 另外,我们推导过程选择了 \mathbb{K} 是列满秩

的,实际上,对大型稀疏矩阵且 $m \gg n$ 时, $\mathbb{K}_n(m \gg n)$ 即是广泛应用的Krylov子空间。进一步讨论放在下一章。

标注 3 上述 测试代码采用的是基本的Gram-Schmidt 正交化方法,这对于条件数小的矩阵没有问题;但是当矩阵是病态时 该代码极度不稳定,因此实用的代码是modified Gram-Schmidt正交化方法,以及两个更优的方法:重复正交化(reOrthogonal) 和 Householder变换. 下一章将给出 modified Gram-Schmidt正交化的算法代码. 另外,当时A是对称矩阵时, $H=Q^TAQ$ 是Hessenberg 矩阵同时也是对称矩阵,则H是三对角矩阵。此时,Arnoldi算法只要在前两个向量上投影即可,计算量大大降低,称为Lanczos算法。

上机练习

1. 对如下5对角n阶方阵进行LU分解,并计算该过程需要乘除法的次数.

$$A = \begin{bmatrix} 35 & -16 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -16 & 35 & -16 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -16 & 35 & -16 & 1 & \dots & 0 \\ & & \ddots & & \ddots & \\ 0 & \dots & 1 & -16 & 35 & -16 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -16 & 35 & -16 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -16 & 35 \end{bmatrix}_{n}$$

进一步考虑,由于矩阵具有对称性,上述分解过程的工作量能否减半?

2. 利用追赶法计算三对角Ax = b, n = 15; 并画出向量x的图像

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}_{n \times n} * \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}_{n \times 1}$$

3. 对矩阵A进行LU分解 以及QR分解; 并对A^TA进行Cholesky分解

$$\begin{bmatrix} 8 & -3 & 2 \\ 4 & 11 & -1 \\ 6 & 3 & 12 \end{bmatrix}$$