第二章　线性代数方程组数值解法

哈尔滨工业大学数学学院
http://homepage.hit.edu.cn/LiuWenjie

§2.1 引言

对于线性方程组

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\
\qquad\qquad\vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n
\end{cases}
\tag{1}
$$

可以写成矩阵的形式 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, 其中

$$
\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}
$$

若系数阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异 $|\boldsymbol{A}| \neq 0$, 则线性方程组有唯一解。只讨论系数矩阵为非奇异的线性方程组.

§2.1 引言

直接解法: 是解线性方程组的重要方法. 它是指通过有限步的算术运算求出精确解的方法（若计算过程没有舍入误差)。其基本思想是通过等价变换将线性方程组化为结构简单、易于求解的形式，从而求解。

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b} \quad \text{初等变换或者矩阵分解方法等} \quad \boldsymbol{Gx}=\boldsymbol{d}$$

迭代法: 的基本思想是用某种极限过程逐次逼近方程组的解的方法，是解线性方程组的重要方法。它具有占有储存单元少、程序设计简单、原始系数矩阵在计算过程中不变的优点，但需考虑收敛性和收敛速度问题.

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{M}+\boldsymbol{N}, (\boldsymbol{M}+\boldsymbol{N})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}=-\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{b}$$

给定 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 构造迭代过程

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{f}, \quad k=0,1,2,\ldots$$

其中 $\boldsymbol{B}=-\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N}, \boldsymbol{f}=\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{b}$

例 用消去法解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{4}x_3 = \frac{13}{12} \\ \frac{1}{3}x_1 + \frac{1}{4}x_2 + \frac{1}{5}x_3 = \frac{47}{60} \end{cases}$$

解

$$\begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ \qquad \frac{1}{12}x_2 + \frac{1}{12}x_3 = \frac{1}{6} \\ \qquad \frac{1}{12}x_2 + \frac{4}{45}x_3 = \frac{31}{180} \end{cases}$$

§2.2 Gauss 消去法

$$\begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ \qquad \frac{1}{12}x_2 + \frac{1}{12}x_3 = \frac{1}{6} \\ \qquad\qquad \frac{1}{180}x_3 = \frac{1}{180} \end{cases}$$

高斯消去法的主要思路：将系数矩阵 A 化为上三角矩阵，然后回代求解。

高斯消去法是求解线性方程组的经典算法，它在当代数学中有着非常重要的地位和价值，是线性代数的重要组成部分。高斯消去法除了用于线性方程组求解外，还用于计算矩阵行列式、求矩阵的秩、计算矩阵的逆等。

§2.2 Gauss 消去法: 一般形式

Gauss 消去法包括消元过程和回代过程两个环节
(一) 消元过程:
将方程组 (1) 记为 $\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}$, 其中

$$\boldsymbol{A}^{(1)} = \left(a_{ij}^{(1)}\right)_{n\times n} = \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}$$

第 1 步 消第 1 列 $(k=1)$: 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 首先计算乘数

$$m_{i1} = a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}, \quad i = 2, 3, \cdots, n$$

用 $-m_{i1}$ 乘方程组(1)的第 1 个方程，加到第 i 个 $(i = 2, 3, \ldots, n)$ 方程上，消去方程组(1) 的从第 2 个方程到第 n 个方程中的未知数 x_1, 得到与方程组(1)等价的线性方程组

原方程

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n1}^{(1)}x_1 + a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)} \end{cases}$$

第一次消元过程后

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \vdots \\ \qquad\qquad a_{n2}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n = b_n^{(2)} \end{cases}$$

§2.2 Gauss 消去法: 一般形式

简记为

$$\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)}$$

其中 $\boldsymbol{A}^{(2)}, \boldsymbol{b}^{(2)}$ 的元素计算公式为

$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)}, & i, j = 2, 3, \cdots, n \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)}, & i = 2, 3, \cdots, n \end{cases}$$

第 k 步 第 k 次消元 $(k = 1, 2, \cdots, n-1)$, 消第 k 列
设上述第 1 步,. . ., 第 $k-1$ 步消元过程讨一算已经完成，即已计算好与原方程组等价的线性方程组，记为

$$\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(k)}, 1 \le k \le n-1$$

其中，$k \ge 2$ 矩阵 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 有下面形式

§2.2 Gauss 消去法: 一般形式

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

假设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 计算乘数

$$
m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, i = k+1, \ldots, n
$$

令

$$
a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, i, j = k+1, \ldots, n
$$
$$
b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, i = k+1, \ldots, n
$$

得到等价方程组

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(k+1)}, 1\le k\le n-1$$

$\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 中从第 1 行到第 k 行与 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 相同.
一直进行到 $k=n-1$ 得到等价方程组 $\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(n)}$,

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

（二）回代求解

$$\begin{cases} x_n=b^{(n)}/a_{nn}^{(n)} \\ x_k=\left(b_k^{(k)}-\sum\limits_{j=k+1}^{n}a_{kj}^{(k)}x_j\right)/a_{kk}^{(k)}, \quad k=n-1,n-2,\cdots,1 \end{cases}$$

§2.2 Gauss 消去法: 一般形式

由上面的计算过程可知, Gauss 消去法能顺利进行下去的充要条件是 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, $k = 1, 2, \ldots, n$, 这些元素被称为**主元**.

定理

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 则所有主元 $a_{kk}^{(k)}$ 都不为零的充要条件是 $\boldsymbol{A}$ 的所有顺序主子式都不为零, 即

$$D_1 \triangleq a_{11} \neq 0, \quad D_k \triangleq \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \neq 0, \ k = 2, 3, \ldots, n.$$

事实上, 如果 $\boldsymbol{A}$ 的所有顺序主子式都不为零, 则主元为

$$a_{11}^{(1)} = D_1, \quad a_{kk}^{(k)} = \frac{D_k}{D_{k-1}}, \quad k = 2, 3, \ldots, n.$$

§2.2 Gauss 消去法: 消元过程的计算量

第 k 步乘法/除法运算

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k+1, \ldots, n$$

需要 $n-k$ 步除法

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, i, j = k+1, \ldots, n \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, i = k+1, \ldots, n \end{aligned}$$

需要 $(n-k)(n-k+1)$ 步乘法，总的乘法/除法运算步数

$$(n-k) + (n-k)(n-k+1) = (n-k)(n-k+2)$$

第 k 步加法/减法运算

$$(n-k)(n-k+1)$$

§2.2 Gauss 消去法: 消元过程的计算量

$$\sum_{j=1}^{m} 1 = m, \quad \sum_{j=1}^{m} j = \frac{m(m+1)}{2}, \quad \sum_{j=1}^{m} j^2 = \frac{m(m+1)(2m+1)}{6}.$$

乘法/除法运算

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+2) &= \sum_{k=1}^{n-1}\left(n^2 - 2nk + k^2 + 2n - 2k\right) \\
&= \sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2 + 2\sum_{k=1}^{n-1}(n-k) = \sum_{k=1}^{n-1} k^2 + 2\sum_{k=1}^{n-1} k \\
&= \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} + 2\frac{(n-1)n}{2} \\
&= \frac{2n^3 + 3n^2 - 5n}{6}
\end{aligned}$$

加法/减法运算

$$
\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+1) &= \sum_{k=1}^{n-1}\left(n^2-2nk+k^2+n-k\right) \\
&= \sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2+\sum_{k=1}^{n-1}(n-k) = \sum_{k=1}^{n-1}k^2+\sum_{k=1}^{n-1}k \\
&= \frac{(n-1)n(2n-1)}{6}+\frac{(n-1)n}{2} = \frac{n^3-n}{3}
\end{aligned}
$$

§2.2 Gauss 消去法: 回代过程的计算量

$$\begin{cases} x_n = b^{(n)}/a_{nn}^{(n)} \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j\right)/a_{kk}^{(k)}, \quad k = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

乘除法

$$\begin{aligned} 1 + \sum_{k=1}^{n-1}((n-k)+1) &= 1 + \left(\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)\right) + n - 1 \\ &= n + \sum_{k=1}^{n-1}(n-k) = n + \sum_{k=1}^{n-1} k = \frac{n^2+n}{2} \end{aligned}$$

加减法

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

§2.2 Gauss 消去法: 总的计算量

乘法/除法

$$\frac{2n^3+3n^2-5n}{6}+\frac{n^2+n}{2}=\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}$$

加法/减法

$$\frac{n^3-n}{3}+\frac{n^2-n}{2}=\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5n}{6}$$

§2.2 Gauss 消去法: 列主元消去法

Gauss 消去法能够进行到底的条件是各步的主元素 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$. 另外既使主元素 $a_{kk}^{(k)}$ 不为零，但如果主元素的绝对值很小，用它作除数，势必造成舍入误差的严重扩散, 以致于方程组的解的精度受到严重影响。

§2.2 Gauss 消去法: 列主元消去法

例如，设计算机可保证 10 位有效数字，用消元法解方程

$$\begin{cases} 0.3 \times 10^{-11} x_1 + x_2 = 0.7 \\ x_1 + x_2 = 0.9 \end{cases} \tag{2}$$

经过第一次消元：第 2 个方程减去第 1 个方程乘以 $m_{21} = a_{21}/a_{11}$ 得

$$\begin{cases} 0.3 \times 10^{-11} x_1 + x_2 = 0.7 \\ a_{22}^{(2)} x_2 = b_2^{(2)} \end{cases} \tag{3}$$

其中

$$a_{22}^{(2)} = a_{22} - a_{21}/a_{11} \times a_{12} = -0.3333333333 \times 10^{12}$$

$$b_2^{(2)} = b_2^{(1)} - a_{21}/a_{11} \times b_1^{(1)} = -0.2333333333 \times 10^{12}$$

于是，由(3)解得

$$\begin{cases} x_2 = b_2^{(2)}/a_{22}^{(2)} = 0.7000000000 \\ x_1 = 0.0000000000 \end{cases}$$

而真解为

$$x_1 = 0.2, \quad x_2 = 0.7$$

造成结果失真的主要因素是主元素 a_{11} 太小，而且在消元过程中作了分母，为避免这个情况发生，应在消元之前，作行交换.

定义

若 $\left|a_{r_k k}^{(k)}\right| = \max\limits_{k\le i\le n}\left|a_{ik}^{(k)}\right|$, 则称 $\left|a_{r_k k}^{(k)}\right|$ 为列主元素. r_k 行为主元素行，这时可将第 r_k 行与第 k 行进行交换，使 $\left|a_{r_k k}^{(k)}\right|$ 位于交换后的等价方程组的 $a_{kk}^{(k)}$ 位置，然后再施实消去法，这种方法称为列主元消去法.

应用列主元消去法解 (2). 因为 $a_{21} > a_{11}$, 所以先交换第 1 行与第 2 行，得

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0.9 \\ 0.3 \times 10^{-11} x_1 + x_2 = 0.7 \end{cases}$$

然后再应用 Gauss 消去法，得到消元后的方程组为

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0.9 \\ x_2 = 0.7 \end{cases} \tag{4}$$

利用 (4)回代求解，可以得到正确的结果. 即 $x_1 = 0.2, x_2 = 0.7$

$$\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(k)}, 1 \le k \le n-1$$

其中，$k \ge 2$ 矩阵 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 有下面形式

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

1、在 $a_{kk}^{(k)}, \ldots, a_{nk}^{(k)}$ 中选出绝对值最大者，即

$$\left|a_{r_k,k}^{(k)}\right| = \max_{k \le i \le n} \left|a_{ik}^{(k)}\right|$$

确定 r_k（行数）.

§2.2 Gauss 消去法: 列主元消去法

2、若 $a_{r_k,k}^{(k)} \neq 0$ ，则交换 r_k 行和 k 行元素，即

$$a_{kj}^{(k)} \leftrightarrow a_{r_k,j}^{(k)} \; (k \leq j \leq n)$$
$$b_k^{(k)} \leftrightarrow b_{r_k}^{(k)}$$

然后用 Gauss 消元法进行消元.

若系数阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异 $|\boldsymbol{A}| \neq 0$, 则线性方程组有唯一解。
Gauss 消去法不一定能进行到下去，列主元消去法一定能执行下去。

列主元 Gauss 消去法要多做一些比较运算, 但
(1) 对系数矩阵要求低, 只需非奇异即可;
(2) 比普通 Gauss 消去法更稳定.
列主元 Gauss 消去法是当前求解线性方程组的直接法中的首选算法。

§2.2 Gauss 消去法: 例

利用 Gauss 消去法求解方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, 其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & -2 \\ 2 & 5 & 3 & -2 \\ -2 & -2 & 3 & 5 \\ 1 & 2 & 2 & 4 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 4 \\ 7 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解 1、消元过程用矩阵表示为

$$[\boldsymbol{A}^{(1)} \quad \boldsymbol{b}^{(1)}] = \left[\begin{array}{cccc:c} 1 & 2 & 1 & -2 & 4 \\ 2 & 5 & 3 & -2 & 7 \\ -2 & -2 & 3 & 5 & -1 \\ 1 & 2 & 2 & 4 & 0 \end{array}\right]$$

$$\xrightarrow[r_4-r_1]{r_2-2r_1, r_3+2r_1} \left[\begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 1 & -2 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & -1 \\ 0 & 2 & 5 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & 1 & 6 & -4 \end{array}\right] \xrightarrow{r_3-2r_2} \left[\begin{array}{cccc:c} 1 & 2 & 1 & -2 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 3 & -3 & 9 \\ 0 & 0 & 1 & 6 & -4 \end{array}\right]$$

$$\xrightarrow{r_4-\frac{1}{3}r_3} \left[\begin{array}{cccc:c} 1 & 2 & 1 & -2 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 3 & -3 & 9 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & -7 \end{array}\right]$$

经三步消元后；原方程组化为同解的上三角形方程组 $\boldsymbol{A}^{(4)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(4)}$.
2、回代过程对方程组 $\boldsymbol{A}^{(4)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(4)}$. 自下而上按未知元 x_i 的下标逆序逐步回代得原方程组的解为

$$x_4 = -1, x_3 = 2, x_2 = -1, x_1 = 2$$

即

$$\boldsymbol{x} = (2, -1, 2, -1)^T$$

例 用选列主元素的 Gauss 法解下列方程组

$$\begin{bmatrix} 12 & -3 & 3 & 4 \\ -18 & 3 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 \\ -15 \\ 6 \\ 2 \end{bmatrix}$$

解 消元过程用矩阵表示为

§2.2 Gauss 消去法: 例

$$\left[\begin{array}{cccc:c} 12 & -3 & 3 & 4 & 15 \\ \boxed{\text{-18}} & 3 & -1 & -1 & -15 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 6 \\ 3 & 1 & -1 & 1 & 2 \end{array}\right] \xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_1} \left[\begin{array}{cccc:c} -18 & 3 & -1 & -1 & -15 \\ 12 & -3 & 3 & 4 & 15 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 6 \\ 3 & 1 & -1 & 1 & 2 \end{array}\right]$$

$$\xrightarrow[r_4+\frac{1}{6}r_1]{r_2+\frac{2}{3}r_1, r_3+\frac{1}{18}r_1} \left[\begin{array}{cccc:c} -18 & 3 & -1 & -1 & -15 \\ 0 & -1 & \frac{7}{3} & \frac{10}{3} & 5 \\ 0 & \frac{7}{6} & \frac{17}{18} & \frac{17}{18} & \frac{31}{6} \\ 0 & \boxed{\frac{3}{2}} & -\frac{7}{6} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{2} \end{array}\right]$$

§2.2 Gauss 消去法: 例

$$\xrightarrow{r_4 \leftrightarrow r_2} \left[\begin{array}{cccc:c} -18 & 3 & -1 & -1 & -15 \\ 0 & \frac{3}{2} & -\frac{7}{6} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{7}{6} & \frac{17}{6} & \frac{17}{18} & \frac{31}{6} \\ 0 & -1 & \frac{7}{3} & \frac{10}{3} & 5 \end{array}\right]$$

$$\xrightarrow[r_4+\frac{2}{3}r_2]{r_3+\left(-\frac{7}{9}\right)r_2} \left[\begin{array}{cccc:c} -18 & 3 & -1 & -1 & -15 \\ 0 & \frac{3}{2} & -\frac{7}{6} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \boxed{\dfrac{50}{27}} & \frac{8}{27} & \frac{50}{9} \\ 0 & 0 & \frac{14}{9} & \frac{35}{9} & \frac{14}{3} \end{array}\right]$$

$$\xrightarrow{r_4+\left(-\frac{21}{25}\right)r_3} \left[\begin{array}{cccc:c} -18 & 3 & -1 & -1 & -15 \\ 0 & \frac{3}{2} & -\frac{7}{6} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{50}{27} & \frac{8}{27} & \frac{50}{9} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{91}{25} & 0 \end{array}\right]$$

§2.2 Gauss 消去法: 例

得同解上三角方程组

$$\begin{cases} -18x_1 + 3x_2 - x_3 - x_4 = -15 \\ \frac{3}{2}x_2 - \frac{7}{6}x_3 + \frac{5}{6}x_4 = -\frac{1}{2} \\ \frac{50}{27}x_3 + \frac{8}{27}x_4 = \frac{50}{9} \\ \frac{91}{25}x_4 = 0 \end{cases}$$

回代求解得 $x_4 = 0, x_3 = 3, x_2 = 2, x_1 = 1$, 即 $\boldsymbol{x} = (1, 2, 3, 0)^T$.

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

在 Gauss 消元法中，令 $\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}$. 第一次消元时，相当于用矩阵

$$\boldsymbol{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & 1 & & & \\ -l_{31} & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ -l_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

左乘 $\boldsymbol{A}^{(1)}$，其中

$$l_{i1} = m_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}} \quad (i = 2, 3, \cdots, n)$$

即

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{A}^{(1)}, \quad \boldsymbol{b}^{(2)} = \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{b}^{(1)}$$

同样在第 k 次消元时有

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)} = \boldsymbol{L}_k \boldsymbol{A}^{(k)}, \quad \boldsymbol{b}^{(k+1)} = \boldsymbol{L}_k \boldsymbol{b}^{(k)}$$

$$\boldsymbol{L}_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

其中

$$l_{ik} = m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k+1, \ldots, n$$

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

以上过程重复进行 $n-1$ 次后，得到 $\boldsymbol{A}^{(n)}$. 记 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{A}^{(n)}$，显然 $\boldsymbol{U}$ 的下三角部分元素均已化为零，$\boldsymbol{U}$ 即是一个上三角阵.

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{L}_{n-2}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\\
&\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{L}_{n-2}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}^{(n)}\\
&\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-2}^{-1}\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}\boldsymbol{U}\\
&\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-2}^{-1}\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}\\
&\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}
\end{aligned}
$$

引理

$$
\boldsymbol{L}_k^{-1}=\begin{bmatrix}
1 & & & & \\
& \ddots & & & \\
& & 1 & & \\
& & m_{k+1,k} & & \\
& & \vdots & \ddots & \\
& & m_{nk} & \cdots & 1
\end{bmatrix}
$$

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

引理

$$L_1^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ m_{41} & m_{42} & m_{4,3} & 1 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n,n-1} \end{bmatrix}$$

定理 如果 $\boldsymbol{A}$ 的所有顺序主子式均不为零，则 $\boldsymbol{A}$ 可分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$ 其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角阵，且这种分解是**唯一的**.

求解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \Leftrightarrow$ 求解 $\begin{cases} \boldsymbol{L}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y} \end{cases}$

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

i）分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$, 其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角阵. 即

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

$$=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}=\boldsymbol{LU}$$

利用矩阵运算比较两边得其分解公式:

$$u_{1i}=a_{1i}, \quad i=1,2,\ldots,n$$

$$l_{i1}=a_{i1}/u_{11}, \quad i=2,\ldots,n$$

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

假设 $\boldsymbol{L}$ 的前 $k-1$ 列和 $\boldsymbol{U}$ 的前 $k-1$ 行都已经得到, 下面计算 $\boldsymbol{L}$ 的第 k 列和 $\boldsymbol{U}$ 的第 k 行

$$a_{ij} = \sum_{r=1}^{n} l_{ir}u_{rj} = \sum_{r=1}^{\min(i,j)} l_{ir}u_{rj},$$

这里使用了下面条件

$$l_{ir} = 0 \quad i < r; \qquad u_{rj} = 0 \quad j < r.$$

由于 $l_{kk} = 1$, 得

$$a_{kj} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj} + \color{red}{u_{kj}}, \qquad j = k, \ldots, n,$$

$$a_{ik} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk} + \color{red}{l_{ik}}\color{blue}{u_{kk}}, \qquad i = k+1, \ldots, n.$$

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

对 $k = 2, 3, \ldots n$,

$$\begin{cases} u_{kj} = a_{kj} - \sum\limits_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}, & j = k, k+1, \ldots, n, \\ l_{ik} = (a_{ik} - \sum\limits_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}) / u_{kk}, & i = k+1, k+2, \ldots, n, \quad k \neq n, \end{cases}$$

ii) 求解方程组 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$, 即

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

其计算公式为

$$y_1 = b_1,$$

$$y_k = b_k - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} y_r, \quad k = 2, 3, \ldots, n.$$

iii）求解方程组 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$，即

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

其计算公式为

$$x_n = y_n/u_{nn},$$
$$x_k = \left(y_k - \sum_{r=k+1}^{n} u_{kr}x_r \right) /u_{kk} \quad k=n-1,n-2,\cdots,1.$$

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

观察发现

- 当 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 列被用于计算 L 的第 i 列后, 后面的计算中不再被使用
- 同样, $\boldsymbol{A}$ 的第 i 行被用于计算 $\boldsymbol{U}$ 的第 i 行后, 后面的计算中也不再使用

因此, 可以将 $\boldsymbol{L}$ 的第 i 列存放在 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 列, 将 $\boldsymbol{U}$ 的第 i 行存放在 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 行.

Doolittle 分解法的存储可利用原系数矩阵的存储单元，存储形式

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

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

例

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 2x_3 + 6x_4 = 9 \\ 4x_1 + 9x_2 + 6x_3 + 15x_4 = 23 \\ 2x_1 + 6x_2 + 9x_3 + 18x_4 = 22 \\ 6x_1 + 15x_2 + 18x_3 + 40x_4 = 47 \end{cases}$$

解 方程组的系数矩阵和右端项分别为

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 & 6 \\ 4 & 9 & 6 & 15 \\ 2 & 6 & 9 & 18 \\ 6 & 15 & 18 & 40 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 9 \\ 23 \\ 22 \\ 47 \end{bmatrix}$$

§2.3.1 矩阵三角分解法:Doolittle 分解法

1、分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$，即

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&&&\\2&1&&\\1&2&1&\\3&3&2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&4&2&6\\&1&2&3\\&&3&6\\&&&1\end{bmatrix}$$

2、求解 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}$，即

$$\begin{bmatrix}1&&&\\2&1&&\\1&2&1&\\3&3&2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\y_2\\y_3\\y_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}9\\23\\22\\47\end{bmatrix}$$

解得 $\boldsymbol{y}=(9,5,3,-1)^T$

求解 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$，即

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 & 6 \\ & 1 & 2 & 3 \\ & & 3 & 6 \\ & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 5 \\ 3 \\ -1 \end{bmatrix}$$

解得 $\boldsymbol{x} = (0.5, 2, 3, -1)^T$.

§2.3.2 矩阵三角分解法:Crout 分解法

i）记 $\boldsymbol{D}=\operatorname{diag}(u_{11},u_{22},\ldots,u_{nn})$,

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D})\left(\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}\right)=\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{U}},\hat{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D},\hat{\boldsymbol{U}}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 是下三角阵，$\hat{\boldsymbol{U}}$ 是单位上三角阵. 此分解是惟一的.

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

$$=\begin{pmatrix} \hat{l}_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \hat{l}_{21} & \hat{l}_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{l}_{n1} & \hat{l}_{n2} & \cdots & \hat{l}_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \hat{u}_{12} & \cdots & \hat{u}_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & \hat{u}_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}=\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{U}}$$

§2.3.2 矩阵三角分解法:Crout 分解法

利用矩阵运算比较两边得其分解公式:

$$\hat{l}_{i1} = a_{i1}, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

$$\hat{u}_{1j} = a_{1j}/\hat{l}_{11}, \quad j = 2, 3, \ldots, n,$$

对 $k = 2, 3, \ldots n$,

$$\begin{cases} \hat{l}_{ik} = a_{ik} - \sum\limits_{r=1}^{k-1} \hat{l}_{ir}\hat{u}_{rk}, & i = k, k+1, k+2, \ldots, n \\ \hat{u}_{kj} = \left(a_{kj} - \sum\limits_{r=1}^{k-1} \hat{l}_{kr}\hat{u}_{rj}\right)/\hat{l}_{kk}, & j = k+1, k+2, \ldots, n \end{cases}$$

求解 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 等价求解

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \\ \hat{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \end{cases}$$

§2.3.2 矩阵三角分解法:Crout 分解法

ii）求解方程组 $\hat{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$，即

$$\begin{pmatrix} \hat{l}_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \hat{l}_{21} & \hat{l}_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{l}_{n1} & \hat{l}_{n2} & \cdots & \hat{l}_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

其计算公式为

$$y_1 = b_1/\hat{l}_{11},$$
$$y_k = \left(b_k - \sum_{r=1}^{k-1} \hat{l}_{kr} y_r\right)/\hat{l}_{kk}, \quad k = 2, 3, \ldots, n.$$

iii）求解方程组 $\hat{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$，即

$$\begin{pmatrix} 1 & \hat{u}_{12} & \cdots & \hat{u}_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & \hat{u}_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

其计算公式为

$$\begin{aligned} x_n &= y_n, \\ x_k &= y_k - \sum_{r=k+1}^{n} \hat{u}_{kr} x_r, \quad k = n-1, \cdots, 2, 1. \end{aligned}$$

§2.3.2 矩阵三角分解法:Crout 分解法

Crout 分解法的存储可利用原系数矩阵的存储单元，存储形式

$$\begin{pmatrix} \hat{l}_{11} & \hat{u}_{12} & \cdots & \hat{u}_{1n} \\ \hat{l}_{21} & \hat{l}_{22} & \cdots & \hat{u}_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{l}_{n1} & \hat{l}_{n2} & \cdots & \hat{l}_{nn} \end{pmatrix} \rightarrow \boldsymbol{A}$$

§2.3.2 矩阵三角分解法:Crout 分解法

例用系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Crout 分解求解线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$. 其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 4 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ -1 \\ 5 \\ -5 \end{bmatrix}$$

§2.3.2 矩阵三角分解法:Crout 分解法

分解 $\boldsymbol{A} = \hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{U}}$，即

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 6 & & & \\ 2 & \frac{10}{3} & & \\ 1 & \frac{2}{3} & \frac{37}{10} & \\ -1 & \frac{1}{3} & -\frac{9}{10} & \frac{191}{74} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{6} \\ 0 & 1 & \frac{1}{5} & \frac{1}{10} \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{9}{37} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

求解方程组 $\hat{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$，得 $\boldsymbol{y} = \left(1, -\frac{9}{10}, \frac{46}{37}, -1\right)^T$

求解方程组 $\hat{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$，得 $\boldsymbol{x} = (1, -1, 1, -1)^T$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 平方根法 (Cholesky 分解法)

记 $\boldsymbol{D}=\operatorname{diag}\left(u_{11}, u_{22}, \ldots, u_{nn}\right), \hat{\boldsymbol{U}}=\boldsymbol{D}^{-1} \boldsymbol{U}$ $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D})(\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U})=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\hat{\boldsymbol{U}}$
(分解惟一)
其中 $\boldsymbol{L}$ 是单位下三角阵，$\hat{\boldsymbol{U}}$ 是单位上三角阵.
如果 $\boldsymbol{A}$ 是对称的，则 $\hat{\boldsymbol{U}}=\boldsymbol{L}^{T}, \boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{T}$
如果 $\boldsymbol{A}$ 是对称正定的

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{T}=\left(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\right)\left(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\right)^{T}=\bar{\boldsymbol{L}}\bar{\boldsymbol{L}}^{T}$$

其中 $\bar{\boldsymbol{L}}$ 是下三角阵

§2.3.3 矩阵三角分解法: 平方根法 (Cholesky 分解)

i)

$$
\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} \tilde{l}_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \tilde{l}_{21} & \tilde{l}_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{l}_{n1} & \tilde{l}_{n2} & \cdots & \tilde{l}_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{l}_{11} & \tilde{l}_{21} & \cdots & \tilde{l}_{n1} \\ 0 & \tilde{l}_{21} & \cdots & \tilde{l}_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \tilde{l}_{nn} \end{pmatrix} = \tilde{L}\tilde{L}^T
$$

称为矩阵的 Cholesky 分解.
利用矩阵运算比较两边得其分解公式:

$$
\begin{cases} \tilde{l}_{11} = (a_{11})^{1/2}, \\ \tilde{l}_{i1} = a_{i1}/\tilde{l}_{11}, \quad i = 2, 3, \ldots, n. \end{cases}
$$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 平方根法 (Cholesky 分解法)

对 $k = 2, 3, \dots n$,

$$\begin{cases} \tilde{l}_{kk} = \left(a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} \tilde{l}_{kr}^2 \right)^{1/2}, \\ \tilde{l}_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} \tilde{l}_{ir} \tilde{l}_{kr} \right) / \tilde{l}_{kk}, \quad i = k+1, k+2, \dots, n. \end{cases}$$

ii）求解方程组 $\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$，即

$$\begin{pmatrix} \tilde{l}_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \tilde{l}_{21} & \tilde{l}_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{l}_{n1} & \tilde{l}_{n2} & \cdots & \tilde{l}_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

其计算公式为

$$y_1 = b_1 / \tilde{l}_{11}$$

$$y_k = \left(b_k - \sum_{r=1}^{k-1} \tilde{l}_{kr} y_r \right) / \tilde{l}_{kk}, \quad k = 2, 3, \dots, n.$$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 平方根法 (Cholesky 分解法)

iii) 求解方程组 $\tilde{\boldsymbol{L}}^T \boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$，即

$$\begin{pmatrix} \tilde{l}_{11} & \tilde{l}_{21} & \cdots & \tilde{l}_{n1} \\ 0 & \tilde{l}_{22} & \cdots & \tilde{l}_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \tilde{l}_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

其计算公式为

$$x_n = y_n/\tilde{l}_{nn},$$

$$x_k = \left(y_k - \sum_{j=k}^{n} \tilde{l}_{irk} x_r \right) /\tilde{l}_{kk}, \quad k = n-1, \ldots, 2, 1.$$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 平方根法 (Cholesky 分解法)

Cholesky 分解法的存储可利用原系数矩阵 (对称) 的存储单元，它没有增加储存单元，存储形式.

$$\begin{pmatrix} \tilde{l}_{11} & & \cdots & \\ \tilde{l}_{21} & \tilde{l}_{22} & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{l}_{n1} & \tilde{l}_{n2} & \cdots & \tilde{l}_{nn} \end{pmatrix} \to \boldsymbol{A}$$

平方根法是用于解系数矩阵为正定矩阵的线性方程组.

例 用平方根法（Cholesky 分解）解方程组

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \\ 7 \end{bmatrix}$$

解 由于系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对称正定，故一定有分解形式 $\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{L}}^T$ 其中 $\tilde{\boldsymbol{L}}$ 为下三角阵.
对系数矩阵进行 Cholesky 分解 $\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{L}}^T$，即

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & 12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{l}_{11} & & \\ \tilde{l}_{21} & \tilde{l}_{22} & \\ \tilde{l}_{31} & \tilde{l}_{32} & \tilde{l}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{l}_{11} & \tilde{l}_{21} & \tilde{l}_{31} \\ & \tilde{l}_{22} & \tilde{l}_{32} \\ & & \tilde{l}_{33} \end{bmatrix}$$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 平方根法 (Cholesky 分解法)

由公式得 $\tilde{l}_{11}=\sqrt{3},\quad \tilde{l}_{21}=\frac{2}{\sqrt{3}},\quad \tilde{l}_{31}=\sqrt{3}\ \tilde{l}_{22}=\sqrt{\frac{2}{3}},\quad \tilde{l}_{32}=-\sqrt{6},\quad \tilde{l}_{33}=\sqrt{3}$

解方程组 $\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}$，即 $\begin{bmatrix}\sqrt{3} & & \\ \frac{2}{\sqrt{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} & \\ \sqrt{3} & -\sqrt{6} & \sqrt{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\ y_2\\ y_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5\\ 3\\ 7\end{bmatrix}$

得 $\boldsymbol{y}=\left(\frac{5}{\sqrt{3}},-\frac{1}{\sqrt{6}},\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^T$

解方程组 $\tilde{\boldsymbol{L}}^T\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$，即 $\begin{bmatrix}\sqrt{3} & \frac{2}{\sqrt{3}} & \sqrt{3}\\ & \sqrt{\frac{2}{3}} & -\sqrt{6}\\ & & \sqrt{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{5}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}}\end{bmatrix}$ 得 $\boldsymbol{x}=\left(1,\frac{1}{2},\frac{1}{3}\right)^T$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 改进的 Cholesky 分解法

Cholesky 分解的缺点是需要作开方运算．改为使用分解

i) 设 $\boldsymbol{A}$ 对称

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & 1 & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \\
&= \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^T
\end{aligned}
$$

利用矩阵运算比较两边得其分解公式:

$$\begin{cases} d_1 = a_{11}, \\ l_{i1} = a_{i1}/d_k, \quad i = 2, 3, \ldots, n. \end{cases}$$

对 $k = 2, 3, \ldots n,$

$$\begin{cases} d_k = a_{kk} - \sum\limits_{r=1}^{k-1} l_{kr}^2 d_r, \\ l_{ik} = \left(a_{ik} - \sum\limits_{r=1}^{k-1} l_{ir} d_r l_{kr} \right) /d_k, \quad i = k+1, k+2, \ldots, n. \end{cases}$$

分解唯一

ii）求解方程组 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$

$$
\begin{aligned}
y_1 &= b_1, \\
y_k &= b_k - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} y_r, \quad k = 2, 3, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

iii）求解方程组 $\boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{y}$

$$
\begin{aligned}
x_n &= y_n / d_n, \\
x_k &= y_k / d_k - \sum_{r=k+1}^{n} l_{rk} x_r, \quad k = n-1, \ldots, 2, 1.
\end{aligned}
$$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 改进的 Cholesky 分解法

改进的 Cholesky 分解法的存储可利用原系数矩阵 (对称) 的存储单元，它没有增加储存单元，存储形式.

$$\begin{pmatrix} d_1 & & \cdots & \\ l_{21} & d_2 & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & d_n \end{pmatrix} \to \boldsymbol{A}$$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 改进的 Cholesky 分解法

例 用改进的平方根法解方程组

$$\begin{bmatrix} 3 & 3 & 5 \\ 3 & 5 & 9 \\ 5 & 9 & 17 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 16 \\ 30 \end{bmatrix}$$

解 系数矩阵是对称的，故可分解为 $\boldsymbol{LDL}^T$，设有分解

$$\begin{bmatrix} 3 & 3 & 5 \\ 3 & 5 & 9 \\ 5 & 9 & 17 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ l_{21} & 1 & \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & \\ & d_2 & \\ & & d_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & l_{31} \\ & 1 & l_{32} \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

由公式得

$$d_1 = 3, \quad l_{21} = 1, \quad l_{31} = \frac{5}{3}$$
$$d_2 = 2, \quad l_{32} = 2, \quad d_3 = \frac{2}{3}$$

§2.3.3 矩阵三角分解法: 改进的 Cholesky 分解法

解方程组 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$，即

$$\begin{bmatrix} 1 & & \\ 1 & 1 & \\ \frac{5}{3} & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 16 \\ 30 \end{bmatrix}$$

得 $\boldsymbol{y} = \left(10, 6, \frac{4}{3}\right)^T$

解方程组 $\boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{y}$，即

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \frac{5}{3} \\ & 1 & 2 \\ & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & & \\ & \frac{1}{2} & \\ & & \frac{3}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10 \\ 6 \\ \frac{4}{3} \end{bmatrix}$$

得 $\boldsymbol{x} = (1, -1, 2)^T$

§2.3.4 解三对角方程组的追赶法

设方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{d}$

它的系数方阵 $\boldsymbol{A}$ 是一个三对角方阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

其中 $|i-j|>1$ 时 $a_{ij}=0$ ，且满足如下的对角占优条件

(i) $|b_1| > |c_1| > 0,$

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

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

§2.3.4 解三对角方程组的追赶法

i) 对 $\boldsymbol{A}$ 进行分解

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\alpha_1 & & & & \\
\gamma_2 & \alpha_2 & & & \\
 & \ddots & \ddots & & \\
 & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\
 & & & \gamma_n & \alpha_n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
1 & \beta_1 & & & \\
 & 1 & \beta_2 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & 1 & \beta_{n-1} \\
 & & & & 1
\end{pmatrix}
$$

§2.3.4 解三对角方程组的追赶法

利用矩阵运算比较两边推得其分解公式:

$$
\begin{cases}
\alpha_1 = b_1,\ \beta_1 = c_1/b_1, \\
\gamma_i = a_i, \quad i = 2, \ldots, n, \\
\alpha_i = b_i - a_i\beta_{i-1}, \quad i = 2, \ldots, n, \\
\beta_i = c_i/(b_i - a_i\beta_{i-1}), \quad i = 2, \ldots, n-1,
\end{cases}
$$

α_i, 可由 a_i, b_i, β_{i-1}, 产生，真正需计算的是 β_i. β_i 的递推公式为

$$
\begin{cases}
\beta_1 = c_1/b_1, \\
\beta_i = c_i/\left(b_i - a_i\beta_{i-1}\right), \quad i = 2, \ldots, n-1
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
\alpha_1 = b_1, \\
\gamma_i = a_i, \quad i = 2, \ldots, n, \\
\alpha_i = b_i - a_i\beta_{i-1}, \quad i = 2, \ldots, n,
\end{cases}
$$

§2.3.4 解三对角方程组的追赶法

ii）求解方程组 $\hat{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{d}$，即

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix}$$

其计算公式为

$$\begin{cases} y_1 = d_1/b_1 \\ y_k = (d_k - a_k y_{k-1}) \,/\, (b_k - a_k \beta_{k-1}), \quad (k = 2, 3, \ldots, n) \end{cases}$$

§2.3.4 解三对角方程组的追赶法

iii）求解方程组 $\hat{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$，即

$$\begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

其计算公式为

$$\begin{cases} x_n = y_n, \\ x_k = y_k - \beta_k x_{k+1}, \quad k = n-1, n-2, \ldots, 2, 1. \end{cases}$$

§2.3.4 解三对角方程组的追赶法

将求系数

$$\beta_1 \to \beta_2 \to \cdots \to \beta_{n-1}$$

及

$$y_1 \to y_2 \to \cdots \to y_n$$

的过程称之为追的过程;
求

$$x_n \to x_{n-1} \to \cdots \to x_2 \to x_1$$

的过程称之为赶的过程。

§2.4.1 向量范数

设 $\mathbb{R}^n$ 为实 n 维向量空间。

定义 若向量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 的某个实值函数 $N(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{x}\|$ 满足如下条件

(I) 非负性：$\|\boldsymbol{x}\| \geq 0$ 且 $\|\boldsymbol{x}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{x} = \mathbf{0}$

(II) 齐次性：$\|\lambda \boldsymbol{x}\| = |\lambda| \cdot \|\boldsymbol{x}\|, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}$

(III) 三角不等式

$$\|\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}\| \leq \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|, \quad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n.$$

则称 $\|\cdot\|$ 为 $\mathbb{R}^n$ 上的一种向量范数.

§2.4.1 向量范数：常用的向量范数

在 $\mathbb{R}^n$ 上的向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \quad (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}).$$

常用向量范数：在 $\mathbb{R}^n$ 上的向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$

1. $\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n} |x_i|$, 称为 ∞-范数
2. $\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|$, 称为 1-范数
3. $\|\boldsymbol{x}\|_2 = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})^{1/2} = \left(\sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|^2\right)^{1/2}$, 称为 2-范数
4. $\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(\sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p}$, $1 \le p < \infty$, 称为 p-范数

§2.4.1 向量范数: 有关定理

定理 1 (范数连续性定理) 设 $N(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{x}\|$ 为 $\mathbb{R}^n$ 上任一向量范数, 则 $N(\boldsymbol{x})$ 是 x 的连续函数.

定理 2 (范数等价性定理) 设 $\|\boldsymbol{x}\|_s$, $\|\boldsymbol{x}\|_t$ 为 $\mathbb{R}^n$ 上任意两种向量范数, 则存在常数 $c_1, c_2 > 0$，使得

$$c_1\|\boldsymbol{x}\|_s \leq \|\boldsymbol{x}\|_t \leq c_2\|\boldsymbol{x}\|_s, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n.$$

如果

$$\lim_{k\to\infty} x_i^{(k)} = x_i, \quad i = 1, \ldots, n.$$

写为

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}.$$

定理 3 $\|\cdot\|$ 为有限维空间 $\mathbb{R}^n$ 上的范数,

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x} \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)}\| = 0,$$

其中 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$，向量序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 的元素属于 $\mathbb{R}^n$.

§2.4.2 矩阵范数

定义 若矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的某个实值函数 $N(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|$ 满足如下条件:

(I) 非负性: $\|\boldsymbol{A}\| \geq 0$ 且 $\|\boldsymbol{A}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{A} = \mathbf{0}$

(II) 齐次性: $\|\lambda \boldsymbol{A}\| = |\lambda| \cdot \|\boldsymbol{A}\|, \forall \lambda \in \mathbb{R}$

(III) 三角不等式: $\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\| \leq \|\boldsymbol{A}\| + \|\boldsymbol{B}\|, \forall \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$

(IV) $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\| \leq \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{B}\|, \forall \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$

则称 $\|\cdot\|$ 为 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 上的一种矩阵范数.

例对于实矩阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

是一种矩阵范数, 称为矩阵的 Frobenius 范数，简称矩阵的 F 范数.

§2.4.2 矩阵范数

考虑到矩阵范数总是与向量范数联系在一起的. 对于给定向量范数 $\|\cdot\|$ 和矩阵范数, 如果对任一个 n 维向量 $\boldsymbol{x}$ 和任一 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$, 都有不等式 $\|\boldsymbol{Ax}\| \le \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{x}\|$ 成立, 则称所给的矩阵范数与向量范数是相容的.

下面给出一种定义矩阵范数的方法, 它是由向量范数诱导出来的相容范数.

定义 设 n 维向量 $\boldsymbol{x}$ 和 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$, 且给定一种向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_v$, 则称

$$\|\boldsymbol{A}\|_v = \sup_{\boldsymbol{x}\neq 0} \frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_v}{\|\boldsymbol{x}\|_v}$$

或

$$\|\boldsymbol{A}\|_v = \sup_{\|\boldsymbol{x}\|_v=1} \|\boldsymbol{Ax}\|_v$$

为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的由向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_v$ 产生的**从属范数**或**算子范数**. 单位矩阵的任一种从属范数都为 1.

矩阵的从属范数 $\|\boldsymbol{A}\|_v$ 依赖于向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_v$ 的具体含义.

§2.4.2 矩阵范数

定义 设 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$，则称

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

为 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径（$|\lambda_i|$ 为 λ_i 的模）.

方阵 $\boldsymbol{A}$ 的由向量 1-范数, 2-范数, ∞-范数产生的算子范数分别为

定理 设 n 阶方阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$, 则

1. $\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$, 称为 ∞-范数（行范数）
2. $\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max\limits_{1\le j\le n} \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ij}|$, 称为 1-范数（列范数）
3. $\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sqrt{\rho\left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)}$, 称为 2-范数

§2.4.2 矩阵范数

证明 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$

证明 设 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \neq 0$, 不妨设 $\boldsymbol{A} \neq \mathbf{0}$. 记

$$t = \|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i|\,, \quad \mu = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

则

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j \right| \leqslant \max_{i} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\,|x_j| \leqslant t \max_{i} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

这说明对任何非零 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, 有

$$\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}\|_\infty} \leqslant \mu \Rightarrow \|\boldsymbol{A}\|_\infty \le \mu$$

下面来说明有一向量 $\boldsymbol{x}_0 \neq \mathbf{0}$, 使 $\dfrac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}_0\|_\infty} = \mu$.

设

$$\mu = \sum_{j=1}^{n} \left|a_{i_0 j}\right|,$$

取向量

$$\boldsymbol{x}_0 = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T,$$

其中

$$\boldsymbol{x}_j = \operatorname{sgn}\left(a_{i_0 j}\right) (j = 1, 2, \cdots, n).$$

显然

$$\|\boldsymbol{x}_0\|_\infty = 1,$$

且 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$ 的第 i_0 个分量为

$$\sum_{i=1}^{n} a_{i_0 j}\, x_j = \sum_{j=1}^{n} |a_{i_0 j}|\,,$$

这 i 说明

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n}\left|\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\right| = \sum_{j=1}^{n} |a_{i_0 j}| = \mu$$

这里用到

$$\left|\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\right| \le \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \le \sum_{j=1}^{n} |a_{i_0 j}| = \sum_{i=1}^{n} a_{i_0 j}\, x_j\,.$$

证明 $\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max\limits_{1 \le j \le n} \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ij}|$

证明:

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_1 &= \sum_{i=1}^{n} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| \leqslant \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \, |x_j| \\
&= \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \right) |x_j| \leqslant \sum_{j=1}^{n} \left(\max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \right) |x_j| \\
&= \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \cdot \sum_{j=1}^{n} |x_j| = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \cdot \|\boldsymbol{x}\|_1
\end{aligned}$$

于是

$$\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_1}{\|\boldsymbol{x}\|_1} \leqslant \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

§2.4.2 矩阵范数

下面只需证明有一向量 $x_0 \neq 0$, 使得

$$\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_1}{\|\boldsymbol{x}_0\|_1} = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \, .$$

设

$$\sum_{i=1}^{n} |a_{ij_0}| = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

取 $x_0 = (0, 0, \cdots, 0, x_{j_0}, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}$, 其中, $x_{j_0} = 1$, 则

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_1 &= \sum_{i=1}^{n} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| = \sum_{i=1}^{n} |a_{ij_0} x_{j_0}| \\ &= \sum_{i=1}^{n} |a_{ii_0}| = \mathop{\overset{n}{\max}}_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \end{aligned}$$

而

$$\|x_0\|_1 = |x_{j_0}| = 1,$$

所以

$$\max_{\|x\|\neq 0} \frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_1}{\|\boldsymbol{x}\|_1} = \frac{\|\boldsymbol{Ax}_0\|_1}{\|\boldsymbol{x}_0\|_1} = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

即

$$\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum^{n} |a_{ij}|\,.$$

证明

$$\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sqrt{\rho\left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)}$$

证明: 由于 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 为实对称半正定矩阵，存在正交矩阵 $\boldsymbol{U}$, 满足

$$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \operatorname{diag}(\mu_1, \ldots, \mu_n)$$

其中 μ_i 为 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的特征值. 令 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{x}$, 则

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{A}\|_2 &= \sup_{\boldsymbol{x}\neq 0}\sqrt{\frac{\left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}\right)}{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})}} = \sup_{\boldsymbol{y}\neq 0}\sqrt{\frac{\left(\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}\right)}{(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})}} \\
&= \sup_{\boldsymbol{y}\neq 0}\sqrt{\sum_{i=1}^n \mu_i\,|y_i|^2 \Big/ \sum_{i=1}^n |y_i|^2} = \sqrt{\max_{i=1,\ldots,n}|\mu_i|}
\end{aligned}$$

§2.4.2 矩阵范数

定理 (Jordan 标准形) 设 $n \times n$ 的方阵 $\boldsymbol{A}$, 则 $\boldsymbol{A}$ 可通过相似变换化为 Jordan 标准形矩阵 $\boldsymbol{J}$, 它是含有 s 个对角块的块对角矩阵. 即存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$, 使

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{J}_{n_1}(\lambda_1) & & & \\ & \boldsymbol{J}_{n_2}(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \boldsymbol{J}_{n_s}(\lambda_s) \end{bmatrix}$$

其中每个对角块 $\boldsymbol{J}_m(\lambda)$

$$\boldsymbol{J}_m(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & & & \\ & \lambda & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda & 1 \\ & & & & \lambda \end{bmatrix}_{m \times m}$$

$$n_1 + n_2 + \cdots + n_s = n$$

$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_s$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，不要求它们都不相同，

$$\boldsymbol{J}_1(\lambda) = [\lambda], \boldsymbol{J}_2(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix}$$

§2.4.2 矩阵范数

定理 $\boldsymbol{A}$ 为方阵，对于任意算子范数 $\|\cdot\|$,

$$\rho(\boldsymbol{A}) \leq \|\boldsymbol{A}\|.$$

定理 $\boldsymbol{A}$ 为方阵，对任意实数 $\varepsilon > 0$. 至少存在一种算子范数 $\|\cdot\|_\varepsilon$，满足

$$\|\boldsymbol{A}\|_\varepsilon \leqslant \rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon.$$

$$\rho(\boldsymbol{A}) = \inf_{\|\cdot\|} \|\boldsymbol{A}\|.$$

若 $\boldsymbol{A}$ 实对称矩阵，则 $\rho(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|_2$

定理 $\boldsymbol{A}$ 为方阵，对于任意算子范数 $\|\cdot\|$, 则

$$\lim_{m\to\infty} \|\boldsymbol{A}^m\|^{1/m} = \rho(\boldsymbol{A}).$$

§2.4.2 矩阵范数

定理 已知 $\|\boldsymbol{x}\|_\alpha$ 为 $\mathbb{R}^n$ 上一种向量范数, 从属于它的矩阵范数为 $\|\boldsymbol{A}\|_\alpha$. 设 $\boldsymbol{P}\in\mathbb{R}^{n\times n}, \det\boldsymbol{P}\neq 0$, 则

(1) $\mathbb{R}^n$ 到 $\mathbb{R}$ 的映射 $\boldsymbol{x}\mapsto\|\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|_\alpha$ 定义了 $\mathbb{R}^n$ 上另一种向量范数, 它与 $\boldsymbol{P}$ 有关, 记为 $\|\boldsymbol{x}\|_{\boldsymbol{P},\alpha}=\|\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|_\alpha$

(2) 从属于向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_{\boldsymbol{P},\alpha}$ 的矩阵范数为

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\boldsymbol{P},\alpha}=\left\|\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}^{-1}\right\|_{\boldsymbol{\alpha}}$$

§2.4.2 矩阵范数

由关于 Jordan 标准形的定理, 对任意的 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 总存在非奇异的方阵 $\boldsymbol{P}$, 使 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \mathrm{diag}\left[\boldsymbol{J}_1, \boldsymbol{J}_2, \cdots, \boldsymbol{J}_s\right]$, 其中 Jordan 子阵 $\boldsymbol{J}_i (i = 1, 2, \cdots, s)$ 又有块对角的形式. 总的来说可以写成

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \delta_1 & & & \\ & \lambda_2 & \delta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_{n-1} & \delta_{n-1} \\ & & & & \lambda_n \end{bmatrix}$$

其中 n 个特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ 可以有相重的, 而 $\delta_i (i = 1, 2, \cdots, n-1)$ 等于 0 或 1. 对于 $\varepsilon > 0$, 定义对角矩阵

$$\boldsymbol{D}_\varepsilon = \mathrm{diag}\left(1, \varepsilon, \varepsilon^2, \cdots, \varepsilon^{n-1}\right)$$

易证 $\boldsymbol{D}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{J}\boldsymbol{D}_\varepsilon$ 与 $\boldsymbol{J}$ 有相同的分块形式, 可写成

$$\boldsymbol{J}_\varepsilon = \boldsymbol{D}_\varepsilon^{-1} J \boldsymbol{D}_\varepsilon = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \varepsilon\delta_1 & & & \\ & \lambda_2 & \varepsilon\delta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_{n-1} & \varepsilon\delta_{n-1} \\ & & & & \lambda_n \end{bmatrix}$$

由 (4. 14) 式,

$$\|\boldsymbol{J}_\varepsilon\|_\infty = \left\|\boldsymbol{D}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{D}_\varepsilon\right\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n}(|\lambda_i| + \varepsilon\delta_i) \leqslant \rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon$$

其中设 $\delta_n = 0$. 而 $\boldsymbol{D}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{P}^{-1}$ 非奇异, $\|\boldsymbol{J}_\varepsilon\|_\infty$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 从属于向量范数 $\left\|\boldsymbol{D}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}\right\|_\infty$ 的矩阵范数, 结论

$$\|\boldsymbol{A}\|_\varepsilon \leqslant \rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon$$

成立.

§2.4.2 矩阵范数

设矩阵序列 $\left\{\boldsymbol{A}^{(k)}\right\} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 如果

$$\lim_{k\to\infty} \left\|\boldsymbol{A}^{(k)} - \boldsymbol{A}\right\| = 0,$$

称 $\left\{\boldsymbol{A}^{(k)}\right\}$ 收敛到 $\boldsymbol{A}$.

定理 设 $\boldsymbol{A}$ 为方阵，则

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{A}^k = \mathbf{0} \Leftrightarrow \rho(\boldsymbol{A}) < 1.$$

更多的，几何序列 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{A}^k$ 收敛的充分必要条件为

$$\rho(\boldsymbol{A}) < 1.$$

收敛时

$$\sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{A}^k = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})^{-1}$$

§2.4.2 矩阵范数

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{A}^k = \mathbf{0} \Leftarrow \rho(\boldsymbol{A}) < 1.$$

存在一种矩阵的算子范数

$$\|\boldsymbol{A}\| \le \rho(\boldsymbol{A}) + (1 - \rho(\boldsymbol{A}))/2 < 1, \quad \|\boldsymbol{A}^k\| \le \|\boldsymbol{A}\|^k$$

$$\lim_{k\to\infty} \|\boldsymbol{A}^k\| = 0 \Rightarrow \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{A}^k = \mathbf{0}$$

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{A}^k = \mathbf{0} \Rightarrow \rho(\boldsymbol{A}) < 1.$$

设 λ 为 A 的特征值,$\boldsymbol{x}$ 为相应的特征向量

$$\boldsymbol{A}^k \boldsymbol{x} = \lambda^k \boldsymbol{x}$$

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{A}^k \boldsymbol{x}\mathbf{0} = \lim_{k\to\infty} \lambda^k \boldsymbol{x} \Rightarrow \lim_{k\to\infty} \lambda^k = 0 \Rightarrow |\lambda| < 1$$

所以 $\rho(\boldsymbol{A}) < 1.$

定理 如果 A 为方阵, 算子范数 $\|\boldsymbol{A}\|<1$，则 $\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，且

$$\frac{1}{1+\|\boldsymbol{A}\|}\leq\left\|(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})^{-1}\right\|\leq\frac{1}{1-\|\boldsymbol{A}\|}$$

证: 令 $B=(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})^{-1}$, 则

$$\|(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})\boldsymbol{B}\|=\|\boldsymbol{I}\|=1$$

由于

$$1=\|(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})\boldsymbol{B}\|\leq\|\boldsymbol{B}\|\,\|(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})\|\leq\|\boldsymbol{B}\|\,(1+\|\boldsymbol{A}\|)$$

得

$$\frac{1}{1+\|\boldsymbol{A}\|}\leq\|\boldsymbol{B}\|=\left\|(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})^{-1}\right\|$$

由于

$$1=\|(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})\boldsymbol{B}\|=\|\boldsymbol{B}\pm\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\|$$

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{B}\pm\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\|+\|\boldsymbol{B}\|\|\boldsymbol{A}\| &\geq \|\boldsymbol{B}\pm\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\|+\|\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\| \geq \|\boldsymbol{B}\pm\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\mp\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\| \\ &= \|\boldsymbol{B}\|\end{aligned}$$

所以

$$1=\|\boldsymbol{B}\pm\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\|\geq\|\boldsymbol{B}\|-\|\boldsymbol{B}\|\|\boldsymbol{A}\|$$

得

$$\left\|(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})^{-1}\right\|=\|\boldsymbol{B}\|\leq\frac{1}{1-\|\boldsymbol{A}\|}$$

§2.5.1 矩阵的条件数

定义 设 A 为非奇异矩阵，称数 $\operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\|$ 为矩阵 A 的条件数.

$$\operatorname{cond}(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \geq \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}\| = 1$$

条件数与所取范数有关, 因此有时详细记为

$$\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})_v = \|\boldsymbol{A}\|_v \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\|_v$$

通常使用的条件数有

1.

$$\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})_\infty = \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_\infty \left\|\boldsymbol{A}\right\|_\infty$$

2. A 的谱条件数

$$\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})_2 = \left\|\boldsymbol{A}\right\|_2 \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}\left(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)}{\lambda_{\min}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T\right)}}$$

当 $\boldsymbol{A}$ 为实对称矩阵时

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})_2 = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$$

其中 λ_1, λ_n 为 $\boldsymbol{A}$ 的绝对值最大和绝对值最小的特征值.

例 计算 3 阶 Hilbert 矩阵

$$\boldsymbol{H}_3 = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

的条件数 $\operatorname{cond}(\boldsymbol{H}_3)_\infty$

解

$$\boldsymbol{H}_3^{-1} = \begin{pmatrix} 9 & -36 & 30 \\ -36 & 192 & -180 \\ 30 & -180 & 180 \end{pmatrix}$$

$$\left\|\boldsymbol{H}_3\right\|_\infty = 11/6, \left\|\boldsymbol{H}_3^{-1}\right\|_\infty = 408$$

$$\operatorname{cond}(\boldsymbol{H}_3)_\infty = \left\|\boldsymbol{H}_3\right\|_\infty \left\|\boldsymbol{H}_3^{-1}\right\|_\infty = 748$$

方程组

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

记为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，其精确解为 $\boldsymbol{x} = (2, 0)^T$ 当常数项有微小变化时，即考虑方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix}$$

记为 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} + \delta\boldsymbol{b}, \quad \delta\boldsymbol{b} = (0, 0.0001)^T$
其精确解为 $\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x} = (1, 1)^T$

§2.5.2 误差分析

考虑的问题:

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{5}$$

$$(\boldsymbol{A} + \delta\boldsymbol{A})(\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} + \delta\boldsymbol{b} \tag{6}$$

(6)是(5)的近似方程组，研究二者解的近似程度．研究两个方程的精确解 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}$ 的差 $\delta\boldsymbol{x}$ 与扰动 $\delta\boldsymbol{A}$ 和 $\delta\boldsymbol{b}$ 的关系。

§2.5.2 误差分析: A 为精确，b 有小扰动 δb

设 $\delta \boldsymbol{b}$ 为 $\boldsymbol{b}$ 的扰动，引起解 $\boldsymbol{x}$ 的扰动为 $\delta \boldsymbol{x}$，

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

则

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

$$\|\delta \boldsymbol{x}\| \leq \|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\delta \boldsymbol{b}\|$$

$$\|\boldsymbol{x}\| \geq \frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}=\frac{\|\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}$$

所以

$$\frac{\|\delta \boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leq \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}=\operatorname{cond}(\boldsymbol{A})\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$$

§2.5.2 误差分析:A 为精确，b 有小扰动 δb

设 $\delta \boldsymbol{b}$ 为 $\boldsymbol{b}$ 的扰动，引起解 $\boldsymbol{x}$ 的扰动为 $\delta \boldsymbol{x}$，

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

则

$$\boldsymbol{A}\delta \boldsymbol{x}=\delta \boldsymbol{b}$$

$$\|\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}\|\leq\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\boldsymbol{b}\|$$

$$\|\delta \boldsymbol{x}\|\geq\frac{\|\boldsymbol{A}\delta \boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}=\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}$$

所以

$$\frac{\|\delta \boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\geq\frac{1}{\|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|}\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}=\frac{1}{\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})}\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$$

§2.5.2 误差分析:A 有小扰动 δA, b 为精确

方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的系数阵 $\boldsymbol{A}$ 的扰动对解的影响

设 $\delta\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的扰动，引起解 $\boldsymbol{x}$ 的扰动为 $\delta\boldsymbol{x}$，则

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

$$\boldsymbol{A}\delta\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x})=0$$

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

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

假设 $\delta\boldsymbol{A}$ 足够小，使 $\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\delta\boldsymbol{A}\|<1$

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

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

§2.5.2 误差分析: A 有小扰动 δA, b 有小扰动 δb

方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的系数阵 $\boldsymbol{A}$ 的扰动对解的影响
设 $\delta\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的扰动，引起解 $\boldsymbol{x}$ 的扰动为 $\delta\boldsymbol{x}$，则

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

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

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

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

假设 $\delta\boldsymbol{A}$ 足够小，使 $\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{A}$ 可逆

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

$$\|(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{A})^{-1}\|\le\frac{1}{1-\|\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{A}\|}\le\frac{1}{1-\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\delta\boldsymbol{A}\|}$$

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

§2.5.2 误差分析: A 有小扰动 δA, b 有小扰动 δb

$$\|\boldsymbol{x}\| \geq \|\boldsymbol{b}\| / \|\boldsymbol{A}\|$$

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

- $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 愈小，由 $\boldsymbol{A}$(或 $\boldsymbol{b}$) 的相对误差引起解的相对误差就愈小；
- $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 愈大，由 $\boldsymbol{A}$(或 $\boldsymbol{b}$) 的相对误差引起解的相对误差就有可能愈大. 所以，量 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 实际刻画了解对原始数据变化的敏感程度，即刻画了方程组的病态程度.

§2.5.2 误差分析

- 对于一个确定的线性方程组，系数矩阵的条件数较小（接近 1）时，方程组是良态的；反之，条件数较大（$\gg 1$）时，则称方程组是病态的；
- 条件数越大，则病态越严重；
- 条件数的值刻划了方程组病态的程度；
- 用一个稳定的方法去解一个良态方程组，必然得到精度很高的解. 同样，用一个稳定的方法去解一个病态方程组，结果就可能很差。

§2.6 迭代法

为什么迭代法

- 直接法运算量 $\mathcal{O}(n^3)$，随着矩阵规模的增大，运算量也随之**快速增长**
- 对于大规模线性方程组，特别是稀疏方程组，当前的首选方法是**迭代方法**

迭代法基本思想

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 非奇异。
给定一个初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，通过一定的迭代格式生成一个迭代序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$，使得

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{x}^*\triangleq\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$$

§2.6 迭代法

目前常用的两类迭代法

- **定常迭代法**: 如 Jacobi, Gauss-Seidel, SOR 等.
- **子空间迭代法**: 如 CG, MINRES, GMRES, BiCGStab 等.

我们主要学习**定常迭代法** (每一步的迭代格式不变)。将方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 改写成等价方程组

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{g}$$

建立迭代格式

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{g},\quad k=0,1,2,\ldots.$$

向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 为初始预估解向量, $\boldsymbol{B}$ 称为迭代矩阵.

如果产生的序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 对于任意初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 均收敛于 $\boldsymbol{x}^{*}$, 则迭代法是**收敛的**, 否则称为**发散**.

引理

设迭代序列 $\left\{\boldsymbol{x}^{(k)}\right\}$ 收敛, 且 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{x}^*$, 则 $\boldsymbol{x}^*$ 一定是原方程组的解.

记

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}=\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*,\quad k=0,1,2,\ldots,$$

称为第 k 步迭代的误差向量.

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\right)=\boldsymbol{B}\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}$$
$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}^{k+1}\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}(k=0,1,2,\ldots)$$

其中 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}=\boldsymbol{x}^{(0)}-\boldsymbol{x}^*$ 为初始误差向量。
考察收敛性，就要研究 $\boldsymbol{B}$ 在什么条件下 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}\to\mathbf{0}(k\to\infty)$，即就要研究 $\boldsymbol{B}$ 满足什么条件时有

$$\boldsymbol{B}^k\to\mathbf{0}\quad(k\to\infty)$$

§2.6 迭代法: 收敛性

定理(迭代法基本定理) 下面三个命题是等价的.

(I) 迭代法 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{g}$ 收敛;

(II) $\rho(\boldsymbol{B}) < 1$;

(III) 至少存在一种矩阵的**从属范数**$\|\cdot\|$, 使得

$$\|\boldsymbol{B}\| < 1$$

注: 迭代法的收敛性与收敛速度与迭代矩阵 $\boldsymbol{B}$ 有关, 而与右端向量 $\boldsymbol{g}$ 和初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 无关.

> 一般来说, $\rho(\boldsymbol{B})$ 越小, 迭代方法的收敛速度越快

- 由于计算 $\rho(\boldsymbol{B})$ 通常比较复杂, 而 $\|\boldsymbol{B}\|_1, \|\boldsymbol{B}\|_\infty$ 相对比较容易计算, 因此在判别迭代方法收敛性时, 可以先验算一下迭代矩阵的 1-范数或 ∞-范数是否小于 1 .
- 上述定理中 (III) 的结论是充分条件, 但不是必要条件, 因此判断一个迭代方法不收敛仍然需要使用基本收敛定理.

§2.6 迭代法: 误差估计

定理 设 $\boldsymbol{x}^*$ 为方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的精确解. 若迭代法

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{g}$$

的迭代矩阵 B 满足 $\|B\|<1$, 其中 $\|\cdot\|$ 是某种算子范数，则对于任意的初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 与右端向量 $\boldsymbol{g}$ 迭代法收敛，且有如下两个误差估计式:

(i) $\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\right\|\leq\frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\|$

(ii) $\left\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}\right\|\leq\|\boldsymbol{B}\|^k\cdot\left\|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(0)}\right\|$

(iii) $\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\right\|\leq\frac{\|\boldsymbol{B}\|^k}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\left\|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(0)}\right\|$

§2.6 迭代法: 误差估计

类似第一章的证明

证 $\rho(\boldsymbol{B}) \le \|\boldsymbol{B}\| < 1$，故对于任意的 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 与 $\boldsymbol{g}$ 迭代收敛.

$$\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{x}^{(k-1)} - \boldsymbol{x}^*\right)$$

$$\begin{aligned}\left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\right\| &= \left\|\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k-1)} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^*\right\| \\ &= \left\|\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k-1)} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^*\right\| \\ &\le \|\boldsymbol{B}\| \cdot \left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\| + \|\boldsymbol{B}\| \cdot \left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\right\|\end{aligned}$$

得

$$\left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\right\| \le \frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1 - \|\boldsymbol{B}\|}\left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\|$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\right)$$

$$\left\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right\| \leq \|\boldsymbol{B}\| \cdot \left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\|$$

反复利用 $\left\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right\| \leq \|\boldsymbol{B}\| \cdot \left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\|$ 得 (ii)、(iii) 成立.

§2.6 迭代法: 常用停止条件

1. $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{b}\| < \varepsilon$;
2. $\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_k\| < \varepsilon$;
3. 最大迭代步数，满足此条件停止，一般是迭代序列发散。

§2.6 迭代法: 基于矩阵分裂的迭代法

目前一类比较常用的定常迭代法是基于矩阵分裂的迭代法, 如 Jacobi 方法, Gauss-Seidel 方法, SOR (Successive Over-Relaxation, 超松弛) 方法等.

定义

矩阵分裂 Matrix Splitting: 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 非奇异, 我们称

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M} + \boldsymbol{N}$$

为 $\boldsymbol{A}$ 的一个矩阵分裂, 其中 $\boldsymbol{M}$ 非奇异.

§2.6 迭代法: 基于矩阵分裂的迭代法

给定一个矩阵分裂, 则原方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 就等价于

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}$$

于是我们就可以构造出以下的迭代格式

$$\boldsymbol{M}x^{(k+1)}=-\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{b} \quad , \quad k=0,1,\ldots,$$

或

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=-\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{b}\triangleq\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{f}, \quad k=0,1,\ldots,$$

其中 $\boldsymbol{B}\triangleq-M^{-1}\boldsymbol{N}$ 为迭代矩阵.

选取不同的 $\boldsymbol{M}$, 就得到不同的迭代方法.

§2.7.1 Jacobi 迭代法

将方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的系数 $\boldsymbol{A}$ 分解成

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

其中 $\boldsymbol{D}=\operatorname{diag}(a_{11},a_{22},\ldots,a_{nn})$，$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 分别是 $\boldsymbol{A}$ 的对角线下方元素和上方元素组成的严格下三角阵与严格上三角阵. 即

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$
$$+\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

§2.7.1 Jacobi 迭代法

Jacobi 迭代法矩阵形式

若 $a_{ii} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$, 即 $\boldsymbol{D}$ 非奇异，将方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

取 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{D}, \boldsymbol{N} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}$ 得

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{D}\boldsymbol{x} = -(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b} \\ &\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \end{aligned}$$

建立迭代格式

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = -\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

称为解方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的 Jacobi 迭代法.

迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_J = -\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{B}_J = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

§2.7.1 Jacobi 迭代法

若 $a_{ii} \neq 0(i=1,2,\ldots,n)$, 将方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

转化为等价形式

$$\begin{cases} x_1 = -\frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 - \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 - \cdots - \frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n + \frac{b_1}{a_{11}} \\ x_2 = -\frac{a_{21}}{a_{22}}x_1 - \frac{a_{23}}{a_{22}}x_3 - \cdots - \frac{a_{2n}}{a_{22}}x_n + \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ x_n = -\frac{a_{n1}}{a_{nn}}x_1 - \frac{a_{n2}}{a_{nn}}x_2 - \cdots - \frac{a_{n\,n-1}}{a_{nn}}x_{n-1} + \frac{b_n}{a_{nn}} \end{cases}$$

§2.7.1 Jacobi 迭代法

建立迭代格式 $k = 0, 1, \ldots$

$$\left\{\begin{array}{l} x_1^{(k+1)} = -\frac{a_{12}}{a_{11}} x_2^{(k)} - \frac{a_{13}}{a_{11}} x_3^{(k)} - \cdots - \frac{a_{1n}}{a_{11}} x_n^{(k)} + \frac{b_1}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} = -\frac{a_{21}}{a_{22}} x_1^{(k)} - \frac{a_{23}}{a_{22}} x_3^{(k)} - \cdots - \frac{a_{2n}}{a_{22}} x_n^{(k)} + \frac{b_2}{a_{22}} \\ \qquad \vdots \\ x_n^{(k+1)} = -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} x_1^{(k)} - \frac{a_{n2}}{a_{nn}} x_2^{(k)} - \cdots - \frac{a_{nn-1}}{a_{nn}} x_{n-1}^{(k)} + \frac{b_n}{a_{nn}} \end{array}\right.$$

称为解方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的 Jacobi 迭代法.

Jacobi 迭代中 $x_i^{(k+1)}$ 的更新顺序与 i 无关, 因此非常适合并行计算.

§2.7.1 Jacobi 迭代法

Jacobi 迭代法的分量形式 (便于理解与编程实现)

若 $a_{ii} \neq 0$，将方程组

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

改写为

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} x_j \right) \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

建立迭代格式

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) (i = 1, 2, \ldots, n; k = 0, 1, 2, \ldots)$$

§2.7.2 Gauss-Seidel(G-S) 迭代法

Gauss-Seidel 迭代法分量形式: $k = 0, 1, 2, \cdots$

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \qquad i = 1, 2, \ldots, n$$

Gauss-Seidel 迭代法矩阵形式: 取 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{D}, \boldsymbol{N} = \boldsymbol{U}$，将方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，改写成

$$(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{x} = -(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} + (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

建立迭代格式: $k = 0, 1, 2, \ldots$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = -(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)} + (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

称为解方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的 Gauss-Seidel 迭代法.

迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_G = -(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}$

G-S 迭代充分利用了已经获得的最新数据, 有望获得更快的收敛速度

§2.7.3 超松弛迭代法 (SOR 方法)

基本思想

将 G-S 迭代法中的第 $k+1$ 步近似解与第 k 步近似解做一个加权平均, 从而给出一个更好的近似解.

由 Gauss-Seidel 迭代法得

$$\bar{x}_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)$$

由此建立公式 $x_i^{(k+1)} = \omega\bar{x}_i^{(k+1)} + (1-\omega)x_i^{(k)}$

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)$$

称为松弛法, 其中 ω 为松弛因子. 为加速收敛, 取 $\omega > 1$, 这时 ω 称为超松弛因子. 当 $\omega = 1$ 时, 就是 Gauss-Seidel 迭代法.

§2.7.3 超松弛迭代法 (SOR 方法)

超松弛法的矩阵表示为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\boldsymbol{D}+\omega\boldsymbol{L})^{-1}[(1-\omega)\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{U}]\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega(\boldsymbol{D}+\omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_\omega = (\boldsymbol{D}+\omega\boldsymbol{L})^{-1}[(1-\omega)\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{U}]$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}+\boldsymbol{D}+\boldsymbol{U}+\frac{1}{\omega}\boldsymbol{D}-\frac{1}{\omega}\boldsymbol{D}$$

取 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{L}+\frac{1}{\omega}\boldsymbol{D}, \boldsymbol{N} = \boldsymbol{D}+\boldsymbol{U}-\frac{1}{\omega}\boldsymbol{D}$

$$(\boldsymbol{L}+\frac{1}{\omega}\boldsymbol{D})\boldsymbol{x} = -(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{U}-\frac{1}{\omega}\boldsymbol{D})\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\boldsymbol{D}+\omega\boldsymbol{L})^{-1}[(1-\omega)\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{U}]\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega(\boldsymbol{D}+\omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_\omega = (\boldsymbol{D}+\omega\boldsymbol{L})^{-1}[(1-\omega)\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{U}]$

SOR 方法最大的优点是引入了松弛参数 ω, 增加了算法的自由度, 同时通过选取适当的 ω 可以大大提高方法的收敛速度. 如何确定 SOR 的最优松弛因子是一件非常困难的事!

§2.8 迭代法收敛性判定

- Jacobi 迭代收敛的**充要**条件: $\rho(\boldsymbol{B}_J) < 1$
- G-S 迭代收敛的**充要**条件: $\rho(\boldsymbol{B}_G) < 1$
- SOR 迭代收敛的**充要**条件: $\rho(\boldsymbol{B}_\omega) < 1$

- Jacobi 迭代收敛的**充分**条件: $\|\boldsymbol{B}_J\| < 1$
- G-S 迭代收敛的**充分**条件: $\|\boldsymbol{B}_G\| < 1$
- SOR 迭代收敛的**充分**条件: $\|\boldsymbol{B}_\omega\| < 1$

§2.8 迭代法收敛性判定

定义 称方阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{nn}$ 为严格对角占优矩阵，如果

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| < |a_{ii}| \qquad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

定义 称方阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{nn}$ 为弱对角占优的矩阵，如果

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| \le |a_{ii}| \qquad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

上式至少有一个不等式严格成立

定理

若线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的系数方阵 $\boldsymbol{A}$ 是严格**对角占优矩阵**，则 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法都是收敛的.

Jacobi 迭代矩阵

$$\boldsymbol{G}_J = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

由于 $\boldsymbol{A}$ 是严格对角占优矩阵, 即

$$\sum_{\substack{j=1\\ j\neq j}}^{n} |a_{ij}| < |a_{ii}| \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

故

$$\|\boldsymbol{G}_J\|_\infty = \max_{1\le i\le n} \sum_{\substack{j=1\\ j\neq j}}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| < 1$$

从而 Jacobi 迭代收敛

定理

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称且 $\boldsymbol{D}$ 正定 (或称对角元 $a_{ii} > 0$), 则 Jacobi 收敛的**充要条件**是 $2\boldsymbol{D} - \boldsymbol{A}$ 正定.

定理

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称且 $\boldsymbol{D}$ 正定 (或称对角元 $a_{ii} > 0$), 则 G-S 收敛的**充要条件**是 $\boldsymbol{A}$ 正定.

§2.8 迭代法收敛性判定:SOR

定理

SOR 方法收敛的必要条件是 $0 < \omega < 2$.

定理

若线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优矩阵，则当 $0 < \omega \leq 1$ 时,SOR 方法收敛.

定理

若线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对称正定阵，则 SOR 迭代方法收敛的充要条件是 $0 < \omega < 2$.

§2.9 特定迭代法的例子

例 对方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 2 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 3 \end{cases}$$

分别讨论用 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法求解的收敛性.

解 系数矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & & \\ 1 & 0 & \\ 2 & 2 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 2 & -2 \\ & 0 & 1 \\ & & 0 \end{bmatrix}$$

$$= \boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}$$

§2.9 迭代法收敛性判定的例子

Jacobi 迭代法的迭代矩阵为

$$B_{\mathrm{J}} = I - D^{-1}A = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

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

B_J 的特征方程为

$$|\lambda I - B_J| = \begin{vmatrix} \lambda & 2 & -2 \\ 1 & \lambda & 1 \\ 2 & 2 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^3 = 0$$

因此有 $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0$, 即 $\rho(B_J) = 0 < 1$, 所以 Jacobi 迭代法收敛.

§2.9 迭代法收敛性判定的例子

Gauss-Seidel 迭代法的迭代矩阵为

$$\boldsymbol{B}_G = -(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U} = -\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{B}_G$ 的特征方程为

$$|\lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}_G| = \begin{vmatrix} \lambda & 2 & -2 \\ 0 & \lambda-2 & 3 \\ 0 & 0 & \lambda-2 \end{vmatrix} = \lambda(\lambda-2)^2 = 0$$

因此有 $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = \lambda_3 = 2$, 即 $\rho\left(\boldsymbol{B}_G\right) = 2 > 1$, 所以 Gauss-Seidel 迭代法发散.

§2.10 梯度法

假设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称正定矩阵.
把线性方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

的惟一解 $\boldsymbol{x}^*$ 看作是使自变量为 $\boldsymbol{x}$(向量) 的某一个二次函数 $f(\boldsymbol{x})$ 取最小值的点.
建立求使 $f(\boldsymbol{x})$ 取最小值的点 $\boldsymbol{x}^*$ 的迭代法，从而求出的 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的解 $\boldsymbol{x}^*$.

§2.10 梯度法

定义 对于实向量的 $\boldsymbol{x}$ 的二次函数

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i x_j - \sum_{j=1}^{n} b_j x_j$$

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{im}x_m + \cdots + a_{in}x_n)\, x_i - \sum_{j=1}^{n} b_j x_j$$

对 $m = 1, 2, \ldots, n$

$$\frac{\partial f}{\partial x_m} = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{im}x_i + \sum_{j=1}^{n} a_{mj}x_j\right) - b_m = -\left(b_m - \sum_{j=1}^{n} a_{mj}x_j\right)$$

$f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}$ 的梯度向量为

$$\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right]^T = -(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{r}$$

§2.10 梯度法: 等价性问题及几何意义

设 $\boldsymbol{x}^*$ 是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的解，由于

$$\begin{aligned} f\left(\boldsymbol{x}^*\right) &= \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*\right) - \left(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}^*\right) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*\right) - \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*\right) \\ &= -\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) - f\left(\boldsymbol{x}^*\right) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*\right) \\ &= \frac{1}{2}\left[(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - 2\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}\right) + \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right), \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right) \geq 0 \end{aligned}$$

所以 $f(\boldsymbol{x}) \geq f\left(\boldsymbol{x}^*\right)$ $\boldsymbol{x}^*$ 是使 $f(\boldsymbol{x})$ 取最小值的点.
反之，若 $\boldsymbol{x}^*$ 是使 $f(\boldsymbol{x})$ 取最小值的点，则

$$\left[\frac{\partial f}{\partial x_m}\right]_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^*} = 0, \quad m = 1, 2, \cdots, n$$

则得 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}$.（$f(\boldsymbol{x})$ 有唯一极小值—最小值，它是 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的解 $\boldsymbol{x}^*$ 处的值)

§2.10 梯度法: 等价性问题及几何意义

定理 (等价性定理) $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^n$ 为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的解的充分且必要条件是 $\boldsymbol{x}^*$ 使定义的二次函数 $f(\boldsymbol{x})$ 取最小值，即

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x}) = f\left(\boldsymbol{x}^*\right)$$

几何意义

$$f(\boldsymbol{x}) - f\left(\boldsymbol{x}^*\right) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right), \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right)^T \boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right)$$

方程 $f(\boldsymbol{x})=C$，即为方程 $\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right)^T \boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\right) = C - f\left(\boldsymbol{x}^*\right)$ 表示 n 维椭球面，以 $\boldsymbol{x}^*$ 为中心 $(C > f\left(\boldsymbol{x}^*\right))$.
线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的求解问题等价于求一簇 n 维椭球面的公共中心问题.

§2.10 梯度法: 迭代法的建立

思想：构造向量序列 $\{x^{(k)}\}$，使

(i)$f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) < f(\boldsymbol{x}^{(k)}) < \cdots < f(\boldsymbol{x}^{(1)}) < f(\boldsymbol{x}^{(0)})$

(ii) 当 $k \to \infty$ 时, $f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \to f(\boldsymbol{x}^{*})$

这与要求 $\boldsymbol{x}^{(k)} \to \boldsymbol{x}^{*} (k \to \infty)$ 是一致的.

具体方法：由第 k 个近似 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 构造下一个近似 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$，首先选定一个向量 $\boldsymbol{p}_k$ 作为方向，要在直线 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{(k)} + t\boldsymbol{p}_k$($t$ 为参数) 上找一个使 $f(\boldsymbol{x})$ 为极小的点 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ ，即确定参数 t 使 $f\left(\boldsymbol{x}^{(k)} + t\boldsymbol{p}_k\right)$ 为极小.

§2.10 梯度法

单变量 t 的二次函数

$$\varphi(t)=f\left(\boldsymbol{x}^{(k)}+t\boldsymbol{p}_k\right)=\frac{1}{2}t^2\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_k\right)-t(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)},\boldsymbol{p}_k)+f\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right)$$

令 $\varphi'(t)=t\left(A\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_k\right)-\left(\boldsymbol{r}^{(k)},\boldsymbol{p}_k\right)=0$ 得 $t=\frac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)},\boldsymbol{p}_k\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_k\right)}$ 且这时有 $\varphi''(t)=\left(A\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_k\right)\neq 0$, 从而得极小 $f\left(\boldsymbol{x}^{(k+1)}\right)$. 其中

$$\begin{cases}\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{p}_k\\ \alpha_k=\frac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)},\boldsymbol{p}_k\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_k\right)}\end{cases}$$

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{p}_k\right)=\boldsymbol{r}^{(k)}-\alpha\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k$$

$$\left(\boldsymbol{r}^{(k+1)},\boldsymbol{p}_k\right)=\left(\boldsymbol{r}^{(k)},\boldsymbol{p}_k\right)-\alpha_k\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_k\right)=0$$

$\boldsymbol{r}^{(k+1)}$ 与 $\boldsymbol{p}_k$ 正交.

(方向向量 $\boldsymbol{p}_k$ 的选取决定着寻找这簇 n 维椭球面的公共中心的速度，其取法不同，效率不同)

§2.10 梯度法: 最速下降法

在 n 维空间定义的二次函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 的改变率最大的方向是 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 的梯度

$$\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x})\big|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{(k)}} = -\boldsymbol{r}^{(k)}$$

因此沿方向 $\boldsymbol{r}^{(k)}$ 函数 $f(\boldsymbol{x})$ 瞬时下降的最快，所以取这个方向为 $\boldsymbol{p}_k$ 而得到新的近似 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ 的方法就叫最速下降法.

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}^{(k+1)} & = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{r}^{(k)} \\ \alpha_k & = \dfrac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)}\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)}\right)} \end{cases} \qquad k = 0, 1, 2, \cdots$$

只要 $\boldsymbol{r}^{(k)} \neq \mathbf{0}$, 最速下降法就继续下去, 这里有 $\left(\boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{r}^{(k)}\right) = 0$.

§2.10 梯度法: 最速下降法

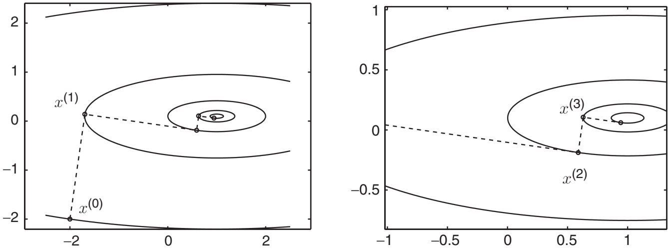
(i) 给定 $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, 设 $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)}$,

(ii) 对 $k = 0, 1, \ldots$ 计算

$$
\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)})}{(\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)})} \\
\boldsymbol{x}^{(k+1)} &= \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{r}^{(k)} \\
\boldsymbol{r}^{(k+1)} &= \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}
\end{aligned}
$$

直到收敛

注 常用的 $\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\| < \varepsilon$ 或者 $\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\| \leq \varepsilon$



§2.10 梯度法：共轭梯度法

求解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最速下降法的最速下降方向, 即

$$\boldsymbol{r}^{(k)} = -\operatorname{grad} f\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right)$$

具有局部性质, 在 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 附近 $f(\boldsymbol{x})$ 沿 $\boldsymbol{r}^{(k)}$ 下降最快. 但总体看, 这个方向未必是函数下降最理想的方向. 下面介绍更合理地选择方向 $\boldsymbol{p}_k$ 的方法, 这种方法只要经过有限步 $(\leq n)$ 就能找到 n 维椭球面簇的公共中心 $\boldsymbol{x}^*$ 的一种迭代法，即共轭梯度法，它是具有迭代形式的精确解法.

定义 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称正定矩阵, $\boldsymbol{p},\boldsymbol{l}\in\mathbb{R}^n$，如果 $(\boldsymbol{p},\boldsymbol{A}\boldsymbol{l})=0$, 则称 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{l}$ 为 $\boldsymbol{A}$-正交或 $\boldsymbol{A}$-共轭.

§2.10 梯度法: 共轭梯度法

第 k 步选择的方向 $\boldsymbol{p}^{(k)}$，$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{p}^{(k)})$ 取最小值时

$$\alpha_k = \frac{\boldsymbol{p}^{(k)T}\boldsymbol{r}^{(k)}}{\boldsymbol{p}^{(k)T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}}, \quad \boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}, \tag{7}$$

和

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}. \tag{8}$$

则

$$\left(\boldsymbol{p}^{(k)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(k+1)} = \left(\boldsymbol{p}^{(k)}\right)^T \left(\boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}\right) = 0. \tag{9}$$

梯度法的选择: $\boldsymbol{p}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)}$ 满足

$$\left(\boldsymbol{p}^{(k)}\right)^T \boldsymbol{p}^{(k+1)} = 0$$

新的策略：选择新的方向 $\boldsymbol{p}^{(k+1)}$ 满足

$$\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{p}^{(k+1)} = 0, \quad j = 0, \ldots, k \tag{10}$$

假设 $k \geq 1$

$$\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)}\right)^T \boldsymbol{p}^{(j)} = 0, \quad \forall i, j = 0, \ldots, k, i \neq j \tag{11}$$

称(11) 为 $\boldsymbol{A}$-正交
同样假设

$$\left(\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(k)} = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, k-1, \quad k \geq 1; \tag{12}$$

称

$$\left(\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(k+1)} = 0, \quad j = 0, \ldots, k, \quad k \geq 0. \tag{13}$$

用归纳法证明 (13). 对于 $k = 0, \boldsymbol{r}^{(1)} = \boldsymbol{r}^{(0)} - \alpha_0 \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(0)}$, 则 $\left(\boldsymbol{p}^{(0)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(1)} = 0$,

$$\alpha_0 = \frac{\left(\boldsymbol{p}^{(0)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(0)}}{\left(\boldsymbol{p}^{(0)}\right)^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}},$$

建设前面 k 步成立,$k+1$ 时

$$\left(\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(k+1)} = \left(\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{p}^{(k)} = 0.$$

下来使用有效的方法确定方向 $\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{p}^{(k)}$ 满足 $\boldsymbol{A}$-正交。
初始化 $\boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)}$, 对 $k \geq 0$, 选择方向

$$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} - \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)}, \quad k = 0, 1, \ldots$$

在(10)中取 $j = k$ 得

$$\beta_k = \frac{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(k+1)}}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}\right)^T \boldsymbol{p}^{(k)}}, \quad k = 0, 1, \ldots.$$

此时(10)中 $j = k$ 是成立的.

$$\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{p}^{(k+1)} = \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(k+1)} - \beta_k \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{p}^{(k)}$$

下面来验证

$$\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}\right)^T \boldsymbol{r}^{(k+1)} = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, k-1. \tag{14}$$

设

$$V_k = \operatorname{span}\{\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{p}^{(k)}\},$$

选择 $\boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)}$ 则

$$V_k = \operatorname{span}\{\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{r}^{(k)}\},$$

$$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} - \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)} \in \operatorname{span}\{\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{r}^{(k+1)}\}$$

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{p}^{(k+1)} + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)} \in \operatorname{span}\{\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{p}^{(k+1)}\}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)} = \left(\boldsymbol{r}^{(k)} - \boldsymbol{r}^{(k+1)}\right)/\alpha_k \in V_{k+1}.$$

由于 $\boldsymbol{r}^{(k+1)} \perp V_k$, 则(14)成立。

共轭梯度法 (算法)

(i) 任取初值 $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

(ii)$\boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)}$

(iii) 对于 $k = 0, 1, 2, \ldots,$

$$
\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)}\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)}\right)} \\
\boldsymbol{x}^{(k+1)} &= \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{p}^{(k)} \\
\boldsymbol{r}^{(k+1)} &= \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)} \\
\beta_k &= -\frac{\left(\boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}\right)}{\left(\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}\right)} \\
\boldsymbol{p}^{(k+1)} &= \boldsymbol{r}^{(k+1)} + \boldsymbol{\beta}_k \boldsymbol{p}^{(k)}
\end{aligned}
$$

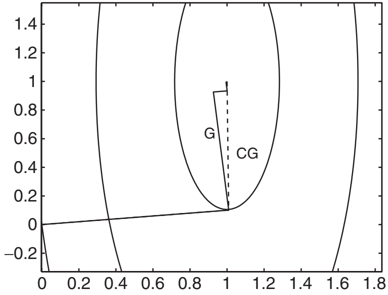
直到收敛

§2.10 梯度法: 共轭梯度法

定理 设 $\{\boldsymbol{r}^{(k)}\}$,$\{\boldsymbol{p}_k\}$ 分别为由共轭梯度法产生的剩余向量序列和共轭方向序列，则 $\{r^{(k)}\}$ 构成一个正交系,$\{\boldsymbol{p}_k\}$ 构成一个 $\boldsymbol{A}$-正交系，即

$$\left(\boldsymbol{r}^{(i)}, \boldsymbol{r}^{(j)}\right) = 0, \quad i \neq j$$

$$\left(\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_j\right) = 0, \quad i \neq j$$



(b) **虚线为共轭梯度法，实线为梯度法**

定理 共轭梯度法 CG**最多迭代** n **次**就能得到方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的精确解 x^*.

证 方向 $\boldsymbol{p}^{(0)},\boldsymbol{p}^{(1)},\ldots,\boldsymbol{p}^{(n-1)}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 的 $\boldsymbol{A}$-正交基。

$\boldsymbol{r}^{(k)}$ 与空间

$$V_{k-1}=\operatorname{span}\{\boldsymbol{p}^{(0)},\boldsymbol{p}^{(1)},\ldots,\boldsymbol{p}^{(k-1)}\}$$

正交。

$\boldsymbol{r}^{(n)}\perp V_{n-1}=\mathbb{R}^n$ 则 $\boldsymbol{r}^{(n)}=\boldsymbol{0}$ 隐含 $\boldsymbol{x}^{(n)}=\boldsymbol{x}$.

§2.10 梯度法: 例

例 用共轭梯度法（CG 方法）解方程组

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \end{pmatrix}$$

解 系数矩阵为对称正定阵，取初值 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (0,0)^T$；

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{p}^{(0)} &= \boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)} = (5,5)^T \\
\alpha_0 &= \frac{\left(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(0)}\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(0)}\right)} = \frac{2}{7} \\
\boldsymbol{x}^{(1)} &= \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha_0 \boldsymbol{p}^{(0)} = (10/7, 10/7)^T \\
\boldsymbol{r}^{(1)} &= \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{r}^{(0)} - \alpha_0 \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)} = (-5/7, 5/7)^T
\end{aligned}$$

$$\beta_0 = -\frac{\left(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(0)}\right)} = \frac{\left(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(1)}\right)}{\left(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(0)}\right)} = \frac{1}{49}$$

§2.10 梯度法: 例

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{p}^{(1)} &= \boldsymbol{r}^{(1)} + \beta_0 \boldsymbol{p}^{(0)} = (-30/49, 40/49)^T \\
\alpha_1 &= \frac{\left(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(1)}\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(1)}\right)} = \frac{7}{10} \\
\boldsymbol{x}^{(2)} &= \boldsymbol{x}^{(1)} + \alpha_1 \boldsymbol{p}^{(1)} = (1, 2)^T
\end{aligned}
$$

两步得精确解.