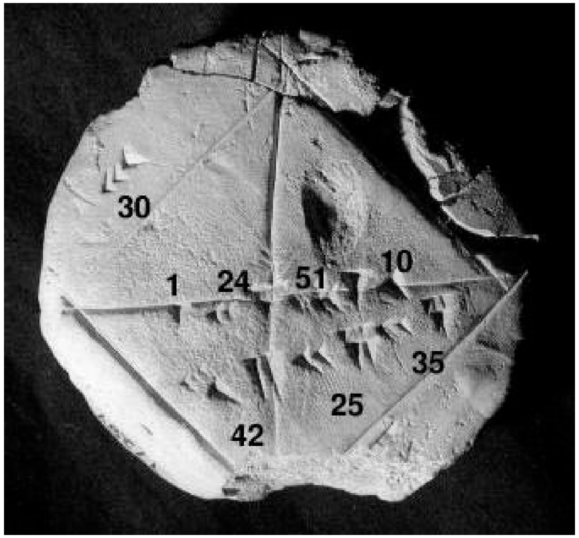
计算方法（A）



童 伟 华　管理科研楼1205室

E-mail: tongwh@ustc.edu.cn

中国科学技术大学　数学科学学院

http://math.ustc.edu.cn/

第五章　解线性方程组的直接法

线性方程组的求解

- 在科学研究和工程应用中，求解线性方程组是非常基础的问题
- 一般的线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

- （Gram公式）当且仅当 $\det(A) \neq 0$ 时，方程组有唯一解

$$x_i = \frac{D_i}{D}, \ i = 1, 2, \ldots, n$$

$$D = \det(\mathbf{A}), \ D_i = \det\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i-1} & b_1 & a_{1i+1} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{ni-1} & b_n & a_{ni+1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

线性方程组的求解

求解线性方程组的方法可分为

- 直接解法：采用消元（初等变换）、矩阵分解等技巧；从理论上来说，直接法经过有限次四则运算（假设运算无舍入误差），可以得到线性方程组的精确解
- 迭代解法：采用迭代、分块、预条件处理等技巧；将线性方程的解视为某种极限过程的向量序列，近似解

直接法与迭代法的使用建议

- 一般来说，对同等规模的线性方程组，直接法对计算机的要求高于迭代法
- 对于中等规模的线性方程组，考虑到直接法的准确性与可靠性，建议使用直接法求解
- 对于高阶稀疏线性方程组（非零元素较少），建议使用迭代法求解
- 要充分考虑线性方程的特性，譬如对称性、正定性、稀疏性等，来选用合适的算法

线性方程组的求解

- **求解线性方程组的常用软件**
  - Matlab
  - LAPACK/EISPACK/LINPACK（一般的线性方程组求解）
  - TACUS（大型稀疏线性方程组）
  - SuperLU（大型稀疏线性方程组）
  - Eigen（开源，C++，线性代数模板库）
  - MKL（商业软件）
  - …
- **推荐参考书**
  - G. H. Golub, C. F. V. Loan. Matrix Computations. 4th Ed. The Jonhs Hopkins University Press.（有影印本与中译本，人民邮电出版社）
  - L. N. Trefethen, D. B. III. Numerical Linear Algebra. SIAM Press.（有中译本，人民邮电出版社）

消元法

- 基本思想：通过初等变换，将一般的线性方程组等价变换为特殊形式的线性方程组，如上/下三角方程组、对角方程组，进行求解
- 对角形线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & & & & = b_1 \\ & a_{22}x_2 & & & = b_2 \\ & & \ddots & & = \vdots \\ & & & a_{nn}x_n & = b_n \end{cases} \Rightarrow \quad x_i = \frac{b_i}{a_{ii}}, i = 1, 2, \ldots, n$$

时间复杂度：$O(n)$

消元法

- 上三角方程组

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad\quad u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad \cdots \qquad\qquad\quad = \vdots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad u_{nn}x_n = b_n \end{cases} \Rightarrow x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j}{u_{ii}}, i = n, n-1, \ldots, 1$$

时间复杂度：$O(n^2)$

- 下三角方程组

$$\begin{cases} l_{11}x_1 \qquad\qquad\qquad\qquad\quad = b_1 \\ l_{21}x_1 + l_{22}x_2 \qquad\qquad\quad = b_2 \\ \qquad\qquad \cdots \qquad\qquad\quad = \vdots \\ l_{n1}x_1 + l_{n2}x_2 + \cdots + l_{nn}x_n = b_n \end{cases} \Rightarrow x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}x_j}{l_{ii}}, i = 1, 2, \ldots, n$$

时间复杂度：$O(n^2)$

消元法

- 初等变换：
  - 交换矩阵的两行
  - 某一行乘以一个非零数
  - 某一个乘以一个非零数，加到另一行
- Gauss消元法：先将矩阵化为上/下三角矩阵，再回代求解

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{初等变换}} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

消元法

- 第一步：第 1 行 $\times \dfrac{-a_{i1}}{a_{11}}$ + 第 i 行，$i = 2,3,\ldots,n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{初等变换}} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

运算量：$(n-1)*(1+n)$

消元法

- 第二步：第 2 行$\times\frac{-a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}+$第 i 行，$i=3,4,\ldots,n$

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

运算量：$(n-2)*(1+n-1)=(n-2)n$

消元法

- 类似的做下去，第 k 步：

$$第k行\times\frac{-a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}+第i行，i=k+1,\cdots,n$$

- 运算量：

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

- $n-1$步运算之后

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

- 总运算量：

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+2)+\left(n+1\right)n/2=\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}=O(n^3)$$

消元法

- Gauss消元算法

Algorithm 9 Gaussian Elimination Algorithm

Input:

n, (a_{ij}), (b_i)

```
for k = 1 to n − 1 do
    for i = k + 1 to n do
        z ← a_ik / a_kk;
        a_ik ← 0;
        for j = k + 1 to n do
            a_ij ← a_ij − z a_kj;
        end for
        b_i ← b_i − z b_k;
    end for
end for
for i = n to 1 step -1 do
    x_i ← (b_i − Σ_{j=i+1}^{n} a_ij x_j) / a_ii;
end for
```

Output:

(x_i)

消元法

- Gauss消元法的可行条件为：$a_{kk}^{(k)} \neq 0$，即要求矩阵A的所有顺序主子式均不为零
- 例：求解线性方程组

$$\begin{cases} 10^{-9}x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 10^9/(10^9-1) \\ x_2 = (10^9-2)/(10^9-1) \end{cases}$$

高斯消元法：

$$\boldsymbol{m_{21} = a_{21}/a_{11} = 10^9}$$

$$\boldsymbol{a_{22} = 1 - m_{21} \times 1 = 0.\overbrace{0\ldots0}^{8个}1 \times 10^9 - 10^9 \doteq -10^9}$$

$$\boldsymbol{b_2 = 2 - m_{21} \times 1 \doteq -10^9}$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 0 & -10^9 & -10^9 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad x_2 = 1, \quad x_1 = 0$$

消元法

- 局限性：
  - 某些有解的问题不能通过Gauss消去法求解
  - 如果消元过程中，$a_{kk}^{(k)}$ 很小会带来很大的舍入误差
- 改进方法：在消元过程中，如果在一列中选择按模最大的元素，与主干方程位置互换，再进行消元，即使用绝对值尽可能大的系数来消元
- Gauss列主元消元法
- Gauss全主元消元法：如何实现？需要记录列互换
- 延伸阅读：Gauss消元法的舍入误差分析
- 理论分析与实践说明：Gauss列主元消元法是稳定的

消元法

Gauss列主元消元法

Algorithm 10 Gaussian Elimination Algorithm with Scaled Row Pivoting

Input:

n, (a_{ij}), (b_i)

for $i = 1$ to n **do**
  $p_i \leftarrow i$;
  $s_i \leftarrow \max_{1 \leq j \leq n} |a_{ij}|$;
end for
for $k = 1$ to $n-1$ **do**
  select $j \geq k$ so that
    $|a_{p_j k}|/s_{p_j} \geq |a_{p_i k}|/s_{p_i}$ for $i = k, k+1, \ldots, n$;
  $p_k \leftrightarrow p_j$;
  for $i = k+1$ to n **do**
    $z \leftarrow a_{p_i k}/a_{p_k k}$;
    $a_{p_i k} \leftarrow z$;
    for $j = k+1$ to n **do**
      $a_{p_i j} \leftarrow a_{p_i j} - z a_{p_k j}$;
    end for
    $b_{p_i} \leftarrow b_{p_i} - z b_{p_k}$;
  end for
end for
for $i = n$ to 1 step -1 **do**
  $x_i \leftarrow (b_{p_i} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{p_i j} x_j)/a_{p_i i}$;
end for

Output:

(x_i)

直接分解法

- Gauss消元法的第k步：

$$\text{第}k\text{行}\times\frac{-a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}+\text{第}i\text{行}，\ i=k+1,\cdots,n$$

- 从矩阵理论来看，相当于左乘矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{k+1k}^{(k)} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{nk}^{(k)} & & & 1 \end{pmatrix},\ l_{ik}^{(k)}=\frac{-a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}},\ i=k+1,\cdots,n$$

直接分解法

- 整个Gauss消元法相当于左乘了一个单位下三角阵：

$$\tilde{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ l_{21} & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ \vdots & & l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{nk} & \cdots & l_{nn-1} & 1 \end{pmatrix}$$

- 若Gauss消元法可行，则

$$\exists \mathbf{L}^{-1} \quad s.t. \quad \mathbf{L}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{U} \Rightarrow \quad \exists \mathbf{L} \quad s.t. \quad \mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$$

- 直接分解法

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

直接分解法

- Dolittle分解：L为单位下三角阵，U为上三角阵

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

- 计算步骤：
- 第一行：$a_{1j} = u_{1j},\ j = 1, \cdots, n \Rightarrow u_{1j} = a_{1j}$
- 第一列：$a_{i1} = l_{i1} u_{11},\ i = 2, \cdots, n \ \Rightarrow l_{i1} = a_{i1} / u_{11}$
- 第二行：$a_{2j} = l_{21} u_{1j} + u_{2j},\ j = 2, \cdots, n \ \Rightarrow u_{2j} = a_{2j} - l_{21} u_{1j}$
- 第二列：$a_{i2} = l_{i1} u_{12} + l_{i2} u_{22},\ i = 3, \cdots, n \Rightarrow l_{i2} = (a_{i2} - l_{i1} u_{12}) / u_{22}$

直接分解法

- 第 k 行：

$$a_{kj}=\sum_{r=1}^{k-1}l_{kr}u_{rj}+u_{kj},\ \ j=k,\cdots,n\Rightarrow u_{kj}=a_{kj}-\sum_{r=1}^{k-1}l_{kr}u_{rj}$$

- 第 k 列：

$$a_{ik}=\sum_{r=1}^{k-1}l_{ir}u_{rk}+l_{ik}u_{kk}\quad i=k+1,\cdots,n\quad\Rightarrow l_{ik}=(a_{ik}-\sum_{r=1}^{k-1}l_{ir}u_{rk})/u_{kk}$$

- 二次回代过程：

$$\begin{cases} y_i=b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}y_j,\ \ i=1,\cdots,n \\ x_i=(y_i-\sum_{j=i+1}^{n}u_{ij}x_j)/u_{ii},\ \ i=n,\cdots,1 \end{cases}$$

- 总计算量：

$$\sum_{k=1}^{n}\left((n-k+1)(k-1)+(n-k)k\right)+\frac{n(n-1)}{2}+\frac{n(n+1)}{2}=\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}=O(n^3)$$

直接分解法

- 内存分配与管理：空间复杂度 $O(n^2)$

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

- 可行性条件：同Gauss消元法
- 优点：若需要求解一系列具有相同系数的线性方程组时，即系数矩阵相同，右端向量不同，则直接分解方法可以达到事半功倍的效果
- 思考：如何加入选主元技巧？

直接分解法

- Doolittle分解算法

Algorithm 11 Doolittle's Factorization Algorithm

Input:

n, (a_{ij})

```
for k = 1 to n do
    l_kk = 1;
    for j = k to n do
        u_kj ← a_kj − Σ_{s=1}^{k−1} l_ks u_sj;
    end for
    for i = k + 1 to n do
        l_ik ← (a_ik − Σ_{s=1}^{k−1} l_is u_sk)/u_kk;
    end for
end for
```

Output:

$(l_{ij}), (u_{ij})$

直接分解法

- Courant分解：L为下三角阵，U为单位上三角阵

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

- 计算步骤：
- 第 k 列：

$$a_{ik} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk} + l_{ik}, \quad i = k, \cdots, n \Rightarrow l_{ik} = a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}$$

- 第 k 行：

$$a_{kj} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj} + l_{kk} u_{kj}, \quad j = k+1, \cdots, n \Rightarrow u_{kj} = (a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}) / l_{kk}$$

直接分解法

- **二次回代过程：**

$$\begin{cases} y_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j) / l_{ii}, \quad i = 1, \cdots, n \\ x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j, \quad i = n, \cdots, 1 \end{cases}$$

- **总计算量：**

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

直接分解法

- Courant分解算法

Algorithm 12 Courant's Factorization Algorithm

Input:

n, (a_{ij})

```
for k = 1 to n do
    u_kk = 1;
    for i = k to n do
        l_ik ← a_ik − Σ_{s=1}^{k−1} l_is u_sk;
    end for
    for j = k + 1 to n do
        u_kj ← (a_kj − Σ_{s=1}^{k−1} l_ks u_sj) / l_kk;
    end for
end for
```

$$
\begin{aligned}
&\textbf{for } k = 1 \text{ to } n \textbf{ do}\\
&\quad u_{kk} = 1;\\
&\quad \textbf{for } i = k \text{ to } n \textbf{ do}\\
&\quad\quad l_{ik} \leftarrow a_{ik} - \textstyle\sum_{s=1}^{k-1} l_{is}u_{sk};\\
&\quad \textbf{end for}\\
&\quad \textbf{for } j = k+1 \text{ to } n \textbf{ do}\\
&\quad\quad u_{kj} \leftarrow (a_{kj} - \textstyle\sum_{s=1}^{k-1} l_{ks}u_{sj})/l_{kk};\\
&\quad \textbf{end for}\\
&\textbf{end for}
\end{aligned}
$$

Output:

$(l_{ij}), (u_{ij})$

直接分解法

- **三对角阵的追赶法：**

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ c_2 & a_2 & b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & c_n & a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 & & & & \\ w_2 & u_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & w_{n-1} & u_{n-1} & \\ & & & w_n & u_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & v_1 & & & \\ & 1 & v_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & v_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

- **分解步骤：**

$$\begin{cases} u_i = a_i - c_i v_{i-1}, & i = 1, \cdots, n \\ v_i = b_i / u_i, & i = 1, \cdots, n \end{cases}$$

- **回代步骤：**

$$y_i = (f_i - c_i y_{i-1}) / u_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

$$x_i = y_i - v_i x_{i+1}, \quad i = n, n-1, \ldots, 1$$

- **总计算量：**

$$6 * n + 2 * n = 8n = O(n)$$

直接分解法

■ 追赶法求解三对角线性方程组算法

Algorithm 13 Tridigonal System Algorithm

Input:

n, (a_i), (b_i), (c_i), (f_i)

$u_1 \leftarrow a_1$;
$v_1 \leftarrow b_1/u_1$;
$y_1 \leftarrow f_1/u_1$;
for $i = 2$ to n **do**
  $u_i \leftarrow a_i - c_i v_{i-1}$;
  $v_i \leftarrow b_i/u_i$;
  $y_i \leftarrow (f_i - c_i y_{i-1})/u_i$;
end for
$x_n \leftarrow y_n$;
for $i = n - 1$ to 1 step -1 **do**
  $x_i = y_i - v_i x_{i+1}$;
end for

Output:

(x_i)

直接分解法

- **对称正定阵的LDL^T分解：若 A 对称正定，则**

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

- **分解步骤：**

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

时间复杂度、空间复杂度较Dolittle分解或Courant分解减半，与之类似的分解 PP^T 称为Cholesky分解

- **回代步骤：**

$$z_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} z_j, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

$$y_i = z_i / d_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

$$x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^{n} l_{ji} x_j, \quad i = n, n-1, \ldots, 1$$

直接分解法

- LDL^T 分解算法

Algorithm 14 LDL^T Factorization Algorithm

Input:

n, (a_ij)

1: **for** $k = 1$ to n **do**

2: $\quad d_k \leftarrow a_{kk} - \sum_{s=1}^{k-1} d_s l_{ks}^2$;

3: $\quad$ **for** $i = k+1$ to n **do**

4: $\quad\quad l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{s=1}^{k-1} d_s l_{is} l_{ks})/d_k$;

5: $\quad$ **end for**

6: **end for**

Output:

(d_i), (l_{ij})

范数

- 定义：对任一向量$\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n$，按照一个规则确定一个实数与它对应，记该实数为$\|\mathbf{x}\|$，即映射：$\|\cdot\|: R^n \to R^+ \cup \{0\}$。若$\|\mathbf{x}\|$满足下面三个性质：

  （1）非负性 $\forall \mathbf{x}\in\mathbb{R}^n,\ \|\mathbf{x}\|\ge 0,$ 且 $\|\mathbf{x}\|=0 \Leftrightarrow \mathbf{x}=0$

  （2）齐次性 $\forall a\in\mathbb{R},\ \|a\mathbf{x}\|=|a|\cdot\|\mathbf{x}\|$

  （3）三角不等式 $\forall \mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^n,\ \|\mathbf{x}+\mathbf{y}\|\le\|\mathbf{x}\|+\|\mathbf{y}\|$

  则称$\|\mathbf{x}\|$为向量范数。

- 作用：
  - 向量之间的距离、误差
  - 向量序列的收敛性
  - 向量的邻域、开集、连续性等
  - ……

范数

- **定义：设 $\mathbf{x}^{(1)},\mathbf{x}^{(2)},\ldots,\mathbf{x}^{(m)},\ldots$ 为 $\mathbb{R}^n$ 空间内的向量序列，若存在向量 $\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{R}^n$ 使得 $\lim\limits_{m\to\infty}\|\mathbf{x}^{(m)}-\boldsymbol{\alpha}\|=0$，则称向量序列 $\mathbf{x}^{(m)}$ 是收敛的，向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 称为向量序列 $\mathbf{x}^{(m)}$ 的极限**
- **性质：**
  - 范数 $\|\mathbf{x}\|=\|(x_1,x_2,\ldots,x_n)\|$ 是关于坐标 $x_1,x_2,\ldots,x_n$ 的连续函数
  - 向量序列 $\mathbf{x}^{(m)}=(x_1^{(m)},x_2^{(m)},\ldots,x_n^{(m)})^T$ 收敛的充分必要条件为序列的每个分量收敛，即 $\alpha_i=\lim\limits_{m\to\infty}x_i^{(m)},\ i=1,2,\ldots,n$

范数

- 常见的范数有：

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|,\ \|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2}},\ \|\mathbf{x}\|_\infty = \max\{|x_i|\}$$

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p},\ \mathbf{x} = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$$

- （范数等价性）设 $\|\mathbf{x}\|_p$ 和 $\|\mathbf{x}\|_q$ 为任意两向量范数，则存在与 $\mathbf{x}$ 无关的正常数 c_1 与 c_2 使得

$$c_1\|\mathbf{x}\|_q \le \|\mathbf{x}\|_p \le c_2\|\mathbf{x}\|_q,\ \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

- 一些常用范数的等价关系：

$$\|\mathbf{x}\|_2 \le \|\mathbf{x}\|_1 \le \sqrt{n}\,\|\mathbf{x}\|_2$$

$$\|\mathbf{x}\|_\infty \le \|\mathbf{x}\|_2 \le \sqrt{n}\,\|\mathbf{x}\|_\infty$$

$$\|\mathbf{x}\|_\infty \le \|\mathbf{x}\|_1 \le n\|\mathbf{x}\|_\infty$$

范数

- 定义：诱导矩阵范数（或导出范数，或从属范数）

$$\|\mathbf{A}\| = \sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n,\mathbf{x}\neq 0} \frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|} = \sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n,\|\mathbf{x}\|=1} \|\mathbf{Ax}\|$$

- 不难验证：诱导矩阵范数满足非负性、齐次性、三角不等式
- 性质：

（相容性） $\forall \mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}, \mathbf{x}\in\mathbb{R}^n,\ \|\mathbf{Ax}\| \le \|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{x}\|$

（可乘性） $\forall \mathbf{A},\mathbf{B}\in\mathbb{R}^{n\times n},\ \|\mathbf{AB}\| \le \|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{B}\|$

范数

- **常用矩阵范数**

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$ 列和的最大值

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$ 行和的最大值

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\rho(\mathbf{A}^T\mathbf{A})}$$ 谱半径：$\rho(\mathbf{A}) = \max_{1\le r\le n}|\lambda_r|$

$$\|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{i,j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{1/2}$$ 非诱导矩阵范数，但与 $\|\mathbf{x}\|_2$ 相容

- **定理：若 λ 为矩阵A的特征值，则 $|\lambda| \le \|\mathbf{A}\|$**
- **推论：矩阵A的任一（相容）矩阵范数均不小于A的谱半径，即 $\rho(\mathbf{A}) \le \|\mathbf{A}\|$**
- **定理：对任意 $\varepsilon > 0$，则存在一个矩阵相容范数 $\|\cdot\|$，使得 $\|\mathbf{A}\| \le \rho(\mathbf{A}) + \varepsilon$，且 $\|\mathbf{I}\| = 1$**

范数

- 定义：设 $\{A^{(k)}, k=1,2,\ldots\}$ 为 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 上的矩阵序列，若存在 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 使得

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

则称序列序列 $\{A^{(k)}, k=1,2,\ldots\}$ 是收敛的，并称 A 为该序列的极限

- 定理：$\lim\limits_{k\to\infty} A^k=0$ 的充分必要条件是 $\rho(A)<1$
- 推论：若存在相容的矩阵范数使得 $\|A\|<1$，则 $\lim\limits_{k\to\infty} A^k=0$

矩阵的条件数

- 定义：若矩阵A非奇异，称

$$\mathrm{Cond}_p(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_p \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|_p$$

为A的条件数，其中$\|\cdot\|_p$表示矩阵的某种范数

- 条件数反应了矩阵对误差的放大率
- 矩阵系数扰动分析：

$$(\mathbf{A}+\delta\mathbf{A})(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} \Rightarrow \delta\mathbf{A}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}) = \mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{A}\delta\mathbf{x} = -\mathbf{A}\delta\mathbf{x}$$

$$\Rightarrow \delta\mathbf{x} = (\mathbf{A}+\delta\mathbf{A})^{-1}(-\delta\mathbf{A}\mathbf{x}) = [\mathbf{A}(\mathbf{I}+\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{A})]^{-1}(-\delta\mathbf{A}\mathbf{x})$$

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

$$\Rightarrow \|\delta\mathbf{x}\| \le \|(\mathbf{I}+\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{A})^{-1}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\delta\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}\|$$

$$\Rightarrow \frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \le \frac{\mathrm{Cond}(\mathbf{A})\dfrac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}{1-\mathrm{Cond}(\mathbf{A})\dfrac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}$$

矩阵的条件数

- **右端项系数扰动分析：**

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

$$\Rightarrow \mathbf{A}\delta\mathbf{x}=\delta\mathbf{b}$$

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

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

- **整体系数扰动分析：**

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

$$\Rightarrow \frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\le\frac{\mathrm{Cond}(\mathbf{A})}{1-\mathrm{Cond}(\mathbf{A})\dfrac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}\left(\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}+\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}\right)$$

矩阵的条件数

- 一般判断矩阵是否病态，并不计算 A^{-1}，而由经验得出，譬如：
  - 行列式很大或很小（如某些行、列近似相关）；
  - 元素间相差大数量级，且无规则；
  - 主元消去过程中出现小主元；
  - 特征值相差大数量级。
- 定理：设矩阵 A 非奇异，则

$$\min\left\{\frac{\|\delta\mathbf{A}\|_2}{\|\mathbf{A}\|_2} : \mathbf{A}+\delta\mathbf{A} \text{ is singular}\right\} = \frac{1}{\|\mathbf{A}^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{A}\|_2} = \frac{1}{\mathrm{Cond}_2(\mathbf{A})}$$

- 病态问题：增加计算精度会改善解的精度，但是不能消除（除非进行符号计算）。目前，即使最出色的数值线代数软件对病态问题也束手无策！

矩阵的条件数

- 例：Hilbert矩阵

$$\mathbf{H}=(h_{ij})_{n\times n},\ h_{ij}=\frac{1}{i+j-1}=\int_0^1 x^{i+j-2}dx$$

$$\mathbf{H}^{-1}=(g_{ij})_{n\times n}, g_{ij}=(-1)^{i+j}(i+j-1)\binom{n+i-1}{n-j}\binom{n+j-1}{n-i}\binom{i+j-2}{i-1}^2$$

$$\mathrm{Cond}(\mathbf{H})=O\left((1+\sqrt{2})^{4n}/\sqrt{n}\right)$$

$$\mathbf{H}=\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} & \frac{1}{8} & \frac{1}{9} \end{bmatrix}$$