直接LU分解

- 计算表格

$u_{11}=a_{11}$	$u_{12}=a_{12}$	$u_{13}=a_{13}$
$l_{21}=a_{21}/u_{11}$	$u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}$	$u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}$
$l_{31}=a_{31}/u_{11}$	$l_{32}=(a_{32}-l_{31}u_{12})/ u_{22}$	$u_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}- l_{32}u_{23}$

  - 也可逐行算,或逐列算,或其它可行次序算
- 应用
  - 解$Ax=b$:分解$A=LU$

    解$Ly=b$求y

    解$Ux=y$求x
  - 计算$\det(A)=\det(L)\det(U)=u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}$

其它形式的分解

- $A = LU$(L下三角矩阵, U单位上三角矩阵)

$u_{11}=a_{11}$	$u_{12}=a_{12}$	$u_{13}=a_{13}$
$l_{21}=a_{21}/u_{11}$	$u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}$	$u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}$
$l_{31}=a_{31}/u_{11}$	$l_{32}=(a_{32}-l_{31}u_{12})/\ u_{22}$	$u_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}-\ l_{32}u_{23}$

- LDR 分解

for $j=1:n$

  for $i=2:j$

    $a_{ij}=a_{ij}-a_{i1}a_{1j}-a_{i2}a_{2j}-\cdots-a_{i,i-1}a_{i-1,j}$ (计算 u_{ij})

  end

  for $i=j+1:n$

    $a_{ij}=(a_{ij}-a_{i1}a_{1j}-a_{i2}a_{2j}-\cdots-a_{i,j-1}a_{j-1,j})/a_{jj}$ (计算 l_{ij})

  end

  for $i=1:j-1$

    $a_{ij}=a_{ij}/a_{ii}$ (计算 r_{ij})

  end

end

小主元扩大误差

- 例2 顺序消去法,用精确运算:

$$\left[\begin{array}{cc|c}0.0001 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 2\end{array}\right]\to\left[\begin{array}{cc|c}0.0001 & 1 & 1\\ 0 & -9999 & -9998\end{array}\right]$$

得(10000/9999,9998/9999)≈(1.0001,0.9999)若在十进三位尾数舍入的浮点计算机系统中运算,第二行将是(0 – 10000|–10000)得到解$x_2=1, x_1=0$.与真解相去甚远.

- 把两个方程(两行)交换次序再消元,得解$x_2=1, x_1=1$,与真解很近:

$$\left[\begin{array}{cc|c}0.0001 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 2\end{array}\right]\to\left[\begin{array}{cc|c}1 & 1 & 2\\ 0.0001 & 1 & 1\end{array}\right]\to\left[\begin{array}{cc|c}1 & 1 & 2\\ 0 & 1 & 1\end{array}\right]$$

主元素法

- 列主元素法:在每次消元前先选该列中绝对值最大的做主元(交换两行,每行包括右端项!).
  - 列主元素法乘数m_{ik}绝对值不大于1,不会增加误差
  - 列主元素法用来求行列式时要注意两行交换行列式变号.

- 全主元素法:在整个右下$(n-k)\times(n-k)$矩阵找绝对值最大的做主元(交换行及列).
  - 这对误差控制有利,但搜索太费时.通常列主元素法误差控制就已可以了.

列主元素法

for $k=1:n-1$

找 p: $\left|a_{pk}\right| = \max\left(\left|a_{kk}\right|, \left|a_{k+1,k}\right|, \cdots, \left|a_{nk}\right|\right)$

ⓟ $\leftrightarrow$ ⓚ

$i_k=p$

if $a_{kk} \neq 0$

for $i=k+1:n$

$m_{ik}=a_{ik}/a_{kk}$

ⓘ$=$ⓘ$-$ⓚ$\times m_{ik}$

end

else **stop**

end

end

列主元素法算例

- 例3 列主元素法解方程组

$$\left[\begin{array}{ccc|c}2 & 2 & 0 & 6\\1 & 1 & 2 & 9\\2 & 1 & 1 & 7\end{array}\right]\to\left[\begin{array}{ccc|c}2 & 2 & 0 & 6\\(1/2) & 0 & 2 & 6\\(1) & -1 & 1 & 1\end{array}\right]\to\left[\begin{array}{ccc|c}2 & 2 & 0 & 6\\(1) & -1 & 1 & 1\\(1/2) & 0 & 2 & 6\end{array}\right]\to\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}$$

括号内是乘数,$k = 2$时2,3行交换.

- LU分解

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

即列主元素法实现了LU分解:$PA = LU, P$是行交换结果的排列阵.

列主元LU分解

- 列主元素法实现LU分解
  - 如上例,只要记住交换历史
- 直接列主元LU分解
  - 修改直接LU分解加入选主元
  - 算法如右(可就地完成:l_{ik}, u_{kj}置A中)

for $k=1:n-1$

  for $i=k:n$

    $a_{ik}=a_{ik}-l_{i1}u_{1k}-l_{i2}u_{2k}-\cdots-l_{i,k-1}u_{k-1,k}$

  end

  找 p: $|a_{pk}|=\max(|a_{kk}|,|a_{k+1,k}|,\cdots,|a_{nk}|)$

  ⓟ $\leftrightarrow$ ⓚ

  $i_k=p$

  for $j=k+1:n$

    $u_{kj}=a_{kj}-l_{k1}u_{1j}-l_{k2}u_{2j}-\cdots-l_{k,k-1}u_{k-1,j}$

  end（$u_{kk}=a_{kk}$）

  for $i=k+1:n$

    $l_{ik}=a_{ik}/u_{kk}$

  end

end

实对称阵分解

- 对称阵性质
  - 顺序主子式非零时可作LU分解$A = LU$,且有$U = DL^T$, D是U对角元构成的对角阵.因而$A = LDL^T$, L单位下三角阵, D对角阵,称LDL^T分解或改进的Cholesky分解.
  - 正定时,顺序主子式全正, D可开平方根,乃有$A = LL^T$, L下三角阵,对角元全正,称LL^T分解或Cholesky分解.
  - 对称阵可只存储下(上)三角部分.

LDL^T分解

- 计算表格
  - 表格1

$d_1=u_{11}$ $=a_{11}$	$u_{12}=a_{12}$ $l_{21}=u_{12}/d_1$	$u_{13}=a_{13}$ $l_{31}=u_{13}/d_1$
	$d_2=u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}$	$u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}$ $l_{32}=u_{23}/d_2$
		$u_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}-l_{32}u_{23}$

  - 表格2

$d_1=a_{11}$		
$t_1=a_{21}$ $l_{21}= t_1/d_1$	$d_2= a_{22}-t_1l_{21}$	
$t_1=a_{31}$ $l_{31}=t_1/d_1$	$t_2=a_{32}-t_1l_{21}$ $l_{32}=t_2/d_2$	$d_3=a_{33}-t_1l_{31}-t_2l_{32}$

  - 注意二表格关系,程序实现时,表格1宜逐列算,表格2宜逐行算.

LDL^{T}分解算例

- 例4
  - 按表格1计算，L帮助理解可不写
  - 分解后依次求$g, y, x(Lg = b, Dy = g, L^T x = y)$

1	1	2	2		
(1)	5	0	-4		
(2)	(0)	14	16	y	x
1	(1),1	(2),2	2	2	2+1-2=1
1	5-1=4	(0-2),-2/4	-4-2=-6	-6/4=-3/2	-3/2+1/2=-1
2	-1/2	14-4-1=9	16-3-4=9	9/9=1	1

LL^T分解

- 计算表格
  - 表格1

$l_{11}=a_{11}^{1/2}$	$l_{21}= a_{12}/l_{11}$	$l_{31}=a_{13}/l_{11}$
	$l_{22}=(a_{22}-l_{21}^{2})^{1/2}$	$l_{32}=(a_{23}-l_{21}l_{31})/l_{22}$
		$l_{33}=(a_{33}-l_{31}^{2}-l_{32}^{2})^{1/2}$

  - 表格2

$l_{11}=a_{11}^{1/2}$		
$l_{21}= a_{21}/l_{11}$	$l_{22}=(a_{22}-l_{21}^{2})^{1/2}$	
$l_{31}= a_{31}/l_{11}$	$l_{32}=(a_{32}-l_{31}l_{21})/l_{22}$	$l_{33}=(a_{33}-l_{31}^{2}-l_{32}^{2})^{1/2}$

  - 二表格逐行逐列计算皆宜.

LL^T分解算例

- 例5
  - 按表格2计算, L^T帮助理解可不写
  - 分解后依次求$g, x(Lg = b, L^T x = g)$

1	(1)	(2)	2	
1	5	(0)	-4	
2	0	14	16	
1	1	2	2	2+1-2=1
1	$(5-1=4)^{1/2}=2$	-1	(-4-2)/2=-3	(-3+1)/2=-1
2	(0-2)/2=-1	$(14-4-1=9)^{1/2}=3$	(16-3-4)/3=3	3/3=1

病态现象

- 例6:病态方程组

$$\left[\begin{array}{cc|c}1 & 1 & 2\\ 1 & 1.0001 & 2\end{array}\right]\to\begin{bmatrix}2\\0\end{bmatrix},\quad \left[\begin{array}{cc|c}1 & 1 & 2\\ 1 & 1.0001 & 2.0001\end{array}\right]\to\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$$

- 例7:病态矩阵

$$H_4=\begin{bmatrix}1 & 1/2 & 1/3 & 1/4\\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5\\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6\\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7\end{bmatrix},\quad H_4^{-1}=\begin{bmatrix}16 & -120 & 240 & -140\\ -120 & 1200 & -2700 & 1680\\ 240 & -2700 & 6480 & -4200\\ -140 & 1680 & -4200 & 2800\end{bmatrix}$$

H_4取五位有效数字,其逆误差在前面第二、三位上:

$$\begin{matrix}16.248 & -122.72 & 246.49 & 144.20\\ -122.72 & 1229.9 & -2771.3 & 1726.1\\ 246.49 & -2771.3 & 6650.1 & -4310.0\\ -144.20 & 1726.1 & -4310.0 & 2871.1\end{matrix}$$

向量和矩阵的范数

- 向量范数

  设 $\|\cdot\|: x \in C^n \to \|x\| \in R$,满足
  - 正定性: $\|x\| \geq 0, \|x\| = 0 \ iff \ x = 0$
  - 齐次性: $\|cx\| = |c|\|x\|$
  - 三角不等式: $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

  则称C^n中定义了向量范数, $\|x\|$为向量x的范数.
- 矩阵范数

  设$\|\cdot\|: X \in C^{n\times n} \to \|X\| \in R$, 满足
  - 正定性: $\|X\| \geq 0, \|X\| = 0 \ iff \ X = 0$
  - 齐次性: $\|cX\| = |c|\|X\|$,
  - 三角不等式: $\|X + Y\| \leq \|X\| + \|Y\|$
  - 相容性: $\|XY\| \leq \|X\|\|Y\|$

  则称$C^{n\times n}$中定义了矩阵范数, $\|X\|$为矩阵X的范数.

向量和矩阵的范数

- 几点注记
  - 范数是特殊性质的实值函数
  - 数域$\mathbb{C}$可改成R
  - 易得$\big|\|x\| - \|y\|\big| \leq \|x - y\|$
  - 范数是分量的连续函数
  - 矩阵X可视为n^2维向量,故其范数有前三条性质,从而向量范数推出的事实矩阵范数也有
  - 矩阵范数第四条,是考虑到矩阵乘法关系而设

常用向量范数

- 常用向量范数:$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$
  - 1−范数$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$
  - 2−范数$\|x\|_2 = \left(|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_n|^2\right)^{\frac{1}{2}}$
  - ∞−范数$\|x\|_\infty = \max(|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_n|)$
- 性质

$$\|x\|_\infty \le \|x\|_2 \le \|x\|_1 \le n^{\frac{1}{2}}\|x\|_2 \le n\|x\|_\infty$$

向量序列收敛性

- 向量范数等价性
  - C^n中任意两种向量范数$\|x\|_\alpha, \|x\|_\beta$是等价的,即有$m, M > 0$使 $\quad m\|x\|_\alpha \leq \|x\|_\beta \leq M\|x\|_\alpha$
- 向量序列收敛性等价表达
  - $\{x^{(k)}\}$收敛于$x(k \to \infty)$
  - $x^{(k)} \to x(k \to \infty)$
  - $x_j^{(k)} - x_j \to 0, j = 1,2,\cdots,n(k \to \infty)$
  - $\|x^{(k)} - x\| \to 0(k \to \infty)$

其中$x_j^{(k)}$是$x^{(k)}$的第j个分量, x_j是x的第j个分量

算子范数

- 范数相容性定义
  - 矩阵范数向量范数相容，若$\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$
- 定理
  - 设A是$n \times n$矩阵,$\|\cdot\|$是n维向量范数,则
$$\|A\| = \max\{\|Ax\|: \|x\| = 1\}$$
$$= \max\left\{\frac{\|Ax\|}{\|x\|}: x \neq 0\right\}$$
    是一种矩阵范数,称为由该向量范数诱导出的矩阵范数或算子范数
  - 它们具有相容性或者说是相容的

常用矩阵范数

- 注
  - 任一矩阵范数都有与之相容的向量范数
  - 单位矩阵算子范数为1
- 常用矩阵范数
  - 1−范数:$\|A\|_1 = \max\{\|Ax\|_1 : \|x\|_1 = 1\} = \max\limits_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$
  - 2−范数: $\|A\|_2 = \max\{\|Ax\|_2 : \|x\|_2 = 1\} = \sqrt{\lambda_1}$
    λ_1是$A^H A$的最大特征值
  - ∞−范数: $\|A\|_\infty = \max\{\|Ax\|_\infty : \|x\|_\infty = 1\} = \max\limits_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$
  - Frobenius范数:$\|A\|_F = \left(\sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}}$
    它与向量2−范数相容.但非算子范数

矩阵谱半径

- 谱半径
  - 称$\rho(A) = max|\lambda_i|$
    为A的谱半径，λ_i是其特征值,$i = 1,2,\cdots n$.
  - 谱半径非矩阵范数(例如,无正定性)
  - $\rho(A) \le \|A\|$
  - $\|A\|_2 = \left(\rho(A^H A)\right)^{\frac{1}{2}}$
  - 若$A^H = A$,则$\|A\|_2 = \rho(A)$
  - 矩阵序列$I, A, A^2, \cdots, A^k, \cdots$收敛于零的充分必要条件是$\rho(A) < 1$

扰动分析

- 方程$Ax = b(b \neq 0)$ 一般扰动方程

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

- 解的扰动(当$\|A^{-1}\|\|\Delta A\| < 1$)
  - 一般情况

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\|\|\Delta A\|}\left(\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}\right)$$

  - 特例:只右端项有扰动

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|\mathrm{x}\|} \leq (\|A^{-1}\|\|A\|)\,\frac{\|\Delta b\|}{\|\mathrm{b}\|}$$

  - 特例:只系数有扰动

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\|\|\Delta A\|}\left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}\right)$$

敏感性与条件数

- 条件数

$$Cond(A) = \|A^{-1}\|\|A\|$$

  - $Cond(A) \geq 1$
  - $Cond(cA) = Cond(A), c \neq 0$
  - $Cond(A)_2 = \|A^{-1}\|_2\|A\|_2 = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_n}\right)^{\frac{1}{2}}$称为谱条件数，$\lambda_1, \lambda_n$分别是$A^H A$的最大和最小特征值.
  - 正交矩阵,酉矩阵的谱条件数为1.

- 扰动分析表明:条件数不大，扰动对解的影响不大;条件数越大,扰动对解的影响也越大.这就是说条件数是方程组敏感性以及病态或良态的度量.

- 系数矩阵的谱条件数：例6中$2.0001^2 \times 10^4$,例7中28000.

误差分析

- 后验误差估计--剩余量估计误差
  - 设x和$x^\star$分别为非奇异方程组$Ax = b(\neq 0)$的准确解和近似解,r为$x^\star$的剩余量$r = b - Ax^\star$则

$$\frac{1}{Cond(A)} \cdot \frac{||r||}{||b||} \leq \frac{||x^* - x||}{||x||} \leq Cond(A) \frac{||r||}{||b||}$$

  - 病态方程组剩余量小时误差还可能很大:

$$0.780x_1 + 0.563x_2 = 0.217$$
$$0.913x_1 + 0.659x_2 = 0.254$$

$x = (1, -1)^T, x^\star = (0.341, -0.087)^T,$

$r = (-0.000001,0)^T, x^\star - x = (-0.659,0.913)^T$

这里

$$Cond(A)_\infty \approx 2.7 \times 10^6$$

病态的发现与处理

- 下述情况会出现病态
  - 行或列近似线性相关
  - 行列式接近零
  - 主元素法出现小主元
  - 条件数估算很大
- 病态方程组的计算
  - 用双精度或更高精度计算
  - 用迭代改善法