线性方程组的直接解法

包承龙

丘成桐数学科学中心

本章研究对象及目标

求解线性方程组：$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{m}$

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{1}$$

设$\mathbf{A}$是满秩矩阵

- 若$m < n$，称(1)为欠定方程组（无穷多个解）
- 若$m > n$, 称(1)为超定方程组（唯一解或者没有解）
- 若$m = n$, (1)有唯一解

目标：$m = n$, 如何求解(1)?
方法: 找到“简单矩阵”矩阵$\mathbf{M}$与$\mathbf{N}$, 满足

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{MANy} = \mathbf{Mb}, \mathbf{x} = \mathbf{Ny}$$

其中，$\mathbf{MAN}$具有“简单形式”的矩阵（例：下（上）三角矩阵）

目录

1. Gauss消去法
2. 选主元素的消去法
3. 直接三角分解方法
4. 矩阵条件数及误差分析

Gauss消去法

增广矩阵：$[\mathbf{A}|\mathbf{b}]$
核心想法：寻找初等矩阵$\mathbf{M}$,使得$\mathbf{MA}$为下三角矩阵，则

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{MAx} = \mathbf{Mb}$$

$\mathbf{M}$的构造：$\mathbf{M} = \mathbf{L}_{n-1}(\mathbf{l}_{n-1}) \cdots \mathbf{L}_2(\mathbf{l}_2)\mathbf{L}_1(\mathbf{l}_1)$
定义：$\mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{L}_{k-1}(\mathbf{l}_{k-1}) \cdots \mathbf{L}_2(\mathbf{l}_2)\mathbf{L}_1(\mathbf{l}_1)$, 则$\mathbf{A}^{(k)}$具有如下形式：

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(k)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix} \tag{2}$$

设$a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 令 $\ell_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$, $i = k+1, \ldots, n$, 则

$$\mathbf{L}_k(-\mathbf{l}_k) = \mathbf{L}(\mathbf{l}_k)^{-1} = \mathbf{I} - \mathbf{l}_k \mathbf{e}_k^\top = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix}$$

最后可知，$\mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{MA}$为一个上三角矩阵
求解$\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{Mb}$, 可用后向消去法求解:

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)}/a_{nn}^{(n)}, \\ x_i = \left(b_i^{(n)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j\right)/a_{ii}^{(i)}, \quad i = n-1, \cdots, 2, 1 \end{cases}$$

顺序消去的实现条件

第k步消去法，要求$a_{kk}^{(k)} \neq 0$

定理

设$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，对$k = 1, 2, \ldots, n$，*Gauss*顺序消去过程的对角元素$a_{11}^{(1)} \neq 0, a_{22}^{(2)} \neq 0, \ldots, a_{kk}^{(k)} \neq 0$的充分必要条件是$\Delta_1 \neq 0$, $\Delta_2 \neq 0, \ldots, \Delta_k \neq 0$.

证明：必要性。$\Delta_i = \det \mathbf{A}^{(i)} = a_{11}^{(1)} \cdots a_{ii}^{(i)}$

充分性。利用数学归纳法可证 $\mathbf{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{(k)} & \mathbf{A}_{12}^{(k)} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_{22}^{(k)} \end{bmatrix}$

推论： 若$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \det A \neq 0$且顺序主子式$\Delta_1 \neq 0, \ldots, \Delta_{n-1} \neq 0$，则Gauss消去法可得$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$的唯一解。

LU分解

定理

设$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \det A \neq 0$且顺序主子式$\Delta_1 \neq 0, \ldots, \Delta_{n-1} \neq 0$，则存在唯一的单位下三角矩阵$\mathbf{L}$和非奇异的单位上三角矩阵$\mathbf{U}$, 使得$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$

证明：由Gauss消去法的步骤可知，

$$
\begin{aligned}
\mathbf{M}\mathbf{A} &= \mathbf{L}_{n-1}(-\mathbf{l}_{n-1})\cdots\mathbf{L}_1(-\mathbf{l}_1)\mathbf{A} = \mathbf{U} \\
\Rightarrow \mathbf{A} &= \mathbf{L}_1(\mathbf{l}_1)\cdots\mathbf{L}_{n-1}(\mathbf{l}_{n-1})\mathbf{U}
\end{aligned}
$$

唯一性由反证法可得。

$$
\mathbf{A} = \mathbf{L}_1\mathbf{U}_1 = \mathbf{L}_2\mathbf{U}_2 \Rightarrow \mathbf{U}_1\mathbf{U}_2^{-1} = \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2 = \mathbf{I} \Rightarrow \mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2, \mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_2
$$

如果(2)中的$\mathbf{A}$非奇异条件可以删掉，则$\mathbf{U}$不一定是非奇异的。

目录

1 Gauss消去法

2 选主元素的消去法

3 直接三角分解方法

4 矩阵条件数及误差分析

有换行步骤的消去法

若$a_{kk}^{(k)} \approx 0$，则容易出现数值不稳定的现象

定理

设$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \det \mathbf{A} \neq 0$, 则存在排列矩阵$\mathbf{P}$，单位下三角矩阵$\mathbf{L}$及上三角矩阵$\mathbf{U}$，满足$\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$

证明：归纳法，假设命题对$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n-1\times n-1}$成立。有排列矩阵$\mathbf{P}'$，满足

$$\begin{aligned}\mathbf{P}'\mathbf{A} &= \begin{bmatrix} a_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & \mathbf{U}_{12} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{A}}_{22} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & \mathbf{U}_{12} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}^\top \tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{U}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}^\top \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \tilde{\mathbf{P}}\mathbf{L}_{21} & \tilde{\mathbf{L}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & \mathbf{U}_{12} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{U}} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

其中，$\tilde{\mathbf{A}}_{22} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{L}_{21}\mathbf{U}_{12}$，第三个等式由归纳假设而来（需验证$\det \tilde{\mathbf{A}}_{22} \neq 0$）

推论： 存在排列矩阵$\mathbf{P}$与$\mathbf{Q}$，单位下三角矩阵$\mathbf{L}$及上三角矩阵$\mathbf{U}$，满足$\mathbf{PAQ} = \mathbf{LU}$

设

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(k)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

方法一：选取$|a_{i_k k}^{(k)}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k)}|$，先换行，再用Gauss消去法，以上过程可以表示为：

$$\mathbf{U} = \mathbf{L}_{n-1}(-\mathbf{l}_{n-1})\mathbf{I}_{i_{n-1},n-1} \cdots \mathbf{L}_2(-\mathbf{l}_2) I_{i_2,2}\mathbf{L}_1 - \mathbf{l}_1 \mathbf{I}_{i_1,1}\mathbf{A}$$

方法二：选取$|a_{i_k j_k}^{(k)}| = \max_{k \le i \le n, k \le j \le n} |a_{ij}^{(k)}|$，先换行换列，再用Gauss消去法

目录

1. Gauss消去法
2. 选主元素的消去法
3. 直接三角分解方法
4. 矩阵条件数及误差分析

LU分解法

LU分解：$\mathbf{A}=\mathbf{LU}$，其中L为单位下三角矩阵，U为上三角矩阵

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

方程求解：第一行⇒第一列⇒第二行⇒第二列⇒ $\cdots$

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

$$a_{ik}=\sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk}+l_{ik}u_{kk} \Rightarrow l_{ik}=\frac{1}{u_{kk}}\left(a_{ik}-\sum_{r=1}^{k-1} l_{ir}u_{rk}\right), i=k+1,\ldots,n$$

对称矩阵的Cholesky方法

定理

设$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$对称正定，则存在唯一的对角线元素为正的下三角矩阵$\mathbf{L}$，使得$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^\top$

证明：假设当$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n-1\times n-1}$时，命题成立。若$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称正定，且具有如下形式：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \mathbf{a}^\top \\ \mathbf{a} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & \\ \mathbf{a}/\sqrt{a_{11}} & \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & \tilde{\mathbf{A}}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & \mathbf{a}^\top/\sqrt{a_{11}} \\ & \mathbf{I}_{n-1} \end{bmatrix}$$

其中，$a_{11} > 0$，$\tilde{\mathbf{A}}_{22} = \mathbf{A}_{22} - \frac{\mathbf{a}\mathbf{a}^\top}{a_{11}} \in \mathbb{R}^{n-1\times n-1}$且对称正定（需证明）

利用归纳假设可知，$\tilde{\mathbf{A}}_{22} = \tilde{L}\tilde{L}^\top$

平方根法

LU分解法

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{LL}^\top \mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{Ly} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{L}^\top \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

对**A**的下三角部分：

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

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

$$a_{ii} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik}^2 \Rightarrow |l_{ik}| \leq \sqrt{a_{ii}}, k = 1, 2, \ldots, n$$ （稳定算法）

推广： 加边的cholesky算法

若已知$\mathbf{A}_{i-1}=\mathbf{L}_{i-1}\mathbf{L}_{i-1}^{\top}$，有

$$\mathbf{A}_i=\begin{bmatrix}\mathbf{A}_{i-1} & \mathbf{c}\\ \mathbf{c}^{\top} & a_{ii}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{L}_{i-1} & \mathbf{0}\\ \mathbf{h}^{\top} & l_{ii}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{L}_{i-1}^{\top} & \mathbf{h}\\ \mathbf{0} & l_{ii}\end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{A}_{i-1}=\mathbf{L}_{i-1}\mathbf{L}_{i-1}^{\top}, \quad \mathbf{c}=\mathbf{L}_{i-1}\mathbf{h}, \quad a_{ii}=\mathbf{h}\mathbf{h}^{\top}+l_{ii}^2$$

若$\mathbf{A}$对称，且顺序主子式$\Delta_i\neq 0,\ i=1,2,\ldots,n$，则存在唯一的单位下三角矩阵$\mathbf{L}$和对角矩阵$\mathbf{D}$，使$\mathbf{A}=\mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^{\top}$

若$\mathbf{A}$对称、非奇异，则$\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}^{\top}=\mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^{\top}$, $\mathbf{P}$排列矩阵，$\mathbf{D}$为1×1或者2×2块对角矩阵

带状矩阵分解方法

三对角矩阵：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & l_n & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & u_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & u_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{U}}$$

追赶法：

$$u_1 = b_1, \quad l_i = \frac{a_i}{u_{i-1}},\ i = 2, \ldots, n, \quad u_i = b_i - l_i c_{i-1},\ i = 2, \ldots, n$$

充要条件： $u_i \neq 0,\ i = 1, 2, \ldots, n$

设三对角矩阵满足A满足：

$|b_1| > |c_1| > 0, \quad |b_i| \geq |a_i| + |c_i|, a_i c_i \neq 0,\ i = 2, \ldots, n-1, \quad |b_n| > |a_n| > 0$

则A非奇异，且追赶法满足：

$$u_i \neq 0, i = 1, \ldots, n, \quad 0 < \frac{|c_i|}{|u_i|} < 1, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1,$$
$$|b_i| - |a_i| < |u_i| < |b_i| + |a_i|, \quad i = 2, 3, \ldots, n$$

证明： 设$u_{i-1} \neq 0$且$\frac{|c_{i-1}|}{|u_{i-1}|} < 1$，有

$$|u_i| = |b_i - l_i c_{i-1}| \geq |b_i| - \frac{|a_i||c_{i-1}|}{|u_{i-1}|} > |b_i| - |a_i|$$

推论： $\det \mathbf{A} = \det \mathbf{L} \det \mathbf{U} = u_{11} u_{22} \cdots u_{nn}$

循环三对角矩阵

循环三对角矩阵

$$
\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & a_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ c_n & & & a_n & b_n \end{bmatrix}
= \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ \sigma_1 & \cdots & \sigma_{n-1} + l_n & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & \rho_1 \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & u_{n-1} & \rho_{n-1} + c_{n-1} \\ & & & u_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{U}}
$$

通过追赶法求待定参数。

带状矩阵

下带宽b_L，上带宽b_U

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1,b_U+1} & & & \\ \vdots & & & \ddots & & \\ a_{b_L+1,1} & & & & \ddots & \\ & \ddots & & & & a_{n-b_U,n} \\ & & \ddots & & & \vdots \\ & & & a_{n,n-b_L} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix}$$

$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, $\mathbf{L}$是具有下带宽b_L的单位下三角矩阵，$\mathbf{U}$是上带宽为b_U的上三角形矩阵

目录

1 Gauss消去法

2 选主元素的消去法

3 直接三角分解方法

4 矩阵条件数及误差分析

矩阵病态现象

考虑方程组

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 3.0001 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 4.0001 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 2.999 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 4.0002 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 10 \end{bmatrix}$$

目标方程组： $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$

实际方程组：$(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b}$

目标：如何判断方程组的解对$\mathbf{A}$或者$\mathbf{b}$的扰动是否敏感？

扰动误差分析

定理

设$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$且$\det \mathbf{A} \neq 0$, $\mathbf{x}$和$\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}$分别满足方程:

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

其中$\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$。若$\|\mathbf{A}^{-1}\|\|\delta\mathbf{A}\| < 1$，则有

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \frac{\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|}{1-\|\mathbf{A}^{-1}\|\|\delta\mathbf{A}\|}\left(\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}+\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}\right), \qquad \text{（任意矩阵范数）} \qquad (3)$$

证明：由$\mathbf{A}+\delta\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{I}+\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{A})$且$\|\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{A}\| < 1$可知，

$$\|(\mathbf{I}+\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{A})^{-1}\| \leq \frac{1}{1-\|\mathbf{A}^{-1}\|\|\delta\mathbf{A}\|}$$

由$\delta\mathbf{x} = (\mathbf{A}+\delta\mathbf{A})^{-1}[\mathbf{b}+\delta\mathbf{b}-(\mathbf{A}+\delta\mathbf{a})\mathbf{x}]$，可知$\|\delta\mathbf{x}\|$的估计

矩阵条件数

由公式(3)可知：

- 若$\delta\mathbf{A}=\mathbf{0}$, $\delta\mathbf{b}\neq\mathbf{0}$, 则有$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\leq\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}$
- 若$\delta\mathbf{A}\neq\mathbf{0}$, $\delta\mathbf{b}=\mathbf{0}$, 则有$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\leq\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}(1+O(\|\delta\mathbf{A}\|))$

矩阵条件数： 设$\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$且$\det\mathbf{A}\neq 0$, 则

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

常用条件数：

- $\mathrm{cond}(\mathbf{A})_1=\|\mathbf{A}\|_1\|\mathbf{A}^{-1}\|_1$
- $\mathrm{cond}(\mathbf{A})_2=\|\mathbf{A}\|_2\|\mathbf{A}^{-1}\|_2$
- $\mathrm{cond}(\mathbf{A})_\infty=\|\mathbf{A}\|_\infty\|\mathbf{A}^{-1}\|_\infty$

条件数性质

- $\mathrm{cond}(\mathbf{A}) \geq 1$, $\mathrm{cond}(\mathbf{A}) = \mathrm{cond}(\mathbf{A}^{-1})$
- 若$\mathbf{A}$为正交矩阵，则$\mathrm{cond}(\mathbf{A})_2 = 1$
- 若$\mathbf{U}$为正交矩阵，则$\mathrm{cond}(\mathbf{A})_2 = \mathrm{cond}(\mathbf{AU})_2 = \mathrm{cond}(\mathbf{UA})_2$
- 设λ_1和λ_n为$\mathbf{A}$按模最大最小特征值，则

$$\mathrm{cond}(\mathbf{A}) \geq \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}, \qquad \text{（若A对称，则等号成立）}$$

- 由矩阵范数的等价性可知不同范数对应的矩阵条件数相互等价

设$\mathbf{A}$非奇异，则有

$$\min_{\mathbf{A}+\delta\mathbf{A}\text{奇异}} \left\{ \frac{\|\delta\mathbf{A}\|_2}{\|\mathbf{A}\|_2} \right\} = \frac{1}{\mathrm{cond}(\mathbf{A})_2}$$

定理

设$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$非奇异，$\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$, $\mathbf{x}$是方程组$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$的精确解，$\tilde{\mathbf{x}}$为近似解且$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$，则

$$\frac{1}{\text{cond}(\mathbf{A})}\frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|} \leq \frac{\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \text{cond}(\mathbf{A})\frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

例：Hilbert矩阵

$$\mathbf{H}_n = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n} \end{bmatrix}$$

有$\text{cond}(\mathbf{H}_{10})_2 = 1.6 \times 10^{13}$

常用处理方法：预处理，找到非奇异矩阵$\mathbf{P}$, $\mathbf{Q}$, 求解$\mathbf{PAQx} = \mathbf{Pb}$且

$$\mathrm{cond}(\mathbf{PAQ}) < \mathrm{cond}(\mathbf{A})$$

- 行平衡法：取$S_i = \max_{1\le j\le n} |a_{ij}|$, $i = 1, \ldots, n$

$$\mathbf{P} = \mathbf{D} = \mathrm{diag}(S_1^{-1}, S_2^{-1}, \ldots, S_n^{-1}), \quad \mathbf{Q} = \mathbf{I}$$

- 列平衡法：取$T_i = \max_{1\le i\le n} |a_{ij}|$, $j = 1, \ldots, n$

$$\mathbf{P} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{D} = \mathrm{diag}(T_1^{-1}, T_2^{-1}, \ldots, T_n^{-1}),$$

例：若$\mathbf{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} 10 & 10^5 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}}_{\mathrm{cond}(\mathbf{A})_\infty \approx 10^5} \Rightarrow \mathbf{DA} = \underbrace{\begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}}_{\mathrm{cond}(\mathbf{DA})_\infty \approx 4}$

舍入误差分析

刻画由浮点数表示造成的误差在计算过程中的传播

设$\mathbf{x}$是方程$\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$的真实解，$\tilde{\mathbf{x}}$是由Gauss消去法得到的近似解

- 向前误差分析：跟踪计算过程中的每一步误差（难以实现）
- 向后误差分析：近似解$\tilde{\mathbf{x}}$满足方程$(\mathbf{A}+\delta\mathbf{A})\tilde{\mathbf{x}}=\mathbf{b}$

设u为机器精度，$\rho=\max_{1\le i,j\le n}|a_{ij}^{(k)}|/\|\mathbf{A}\|_\infty$ 且$nu\le 0.01$，有

1. $\|\delta\mathbf{A}\|_\infty \le 1.01(n^3+3n^2)\rho\|\mathbf{A}\|_\infty u$
2. $\frac{\|\mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}}\|_\infty}{\|\mathbf{x}\|_\infty} \le \frac{\mathrm{cond}(\mathbf{A})_\infty}{1-\|\mathbf{A}^{-1}\|_\infty\|\delta\mathbf{A}\|_\infty}[1.01(n^3+3n^2)\rho u]$

当$\rho=2^{n-1}$，不等式右端的可以达到。

一般情况下，ρ与n呈多项式相关，总体来说，列主元素消去法是数值稳定的。