第六章 解线性方程组的直接解法 （20万阶以下）

6-1 Gauss 消去法.（消元一回代）

消元计算过程：

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)}, \quad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} & (i \le k,\ j \le n) \\ a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \left(\dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}\right) a_{kj}^{(k)}, & \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - \left(\dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}\right) b_k^{(k)} & (k+1 \le i \le n,\ k+1 \le j \le n) \\ a_{ij}^{(k+1)} = 0 & (1 \le j \le k < i \le n) \end{cases}$$

其中，k 为消元步数 $(k = 1, 2, \cdots, n-1)$

回代计算过程：

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} & \\ x_i = \dfrac{b_i^{(i)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}} & (i = n-1, n-2, \cdots, 1) \end{cases}$$

计算量：$\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$（乘除法）

6.2 主元素消去法

目的：抑制系数矩阵对角线元素接近于0时出现的舍入误差的扩散。

1° 全主元素消去法

把系数矩阵中绝对值最大的数选为对角线元素。

一般步骤：1) 在第 i 步时，将余下的系数阵中最大绝对值的元素交换行列至 i 行 i 列.

$$\begin{cases} A'^{(i+1)} = P_i A^{(i)} Q_i \\ X^{(i+1)} = Q_i X^{(i)} \\ b'^{(i+1)} = P_i b^{(i)} \end{cases}$$

2) 对第 i 列作消元

$$\begin{cases} A^{(i+1)} = M_i A'^{(i+1)} \\ b^{(i+1)} = M_i b'^{(i+1)} \end{cases}$$

2° 列主元素消去法

把余下系数矩阵中第一列的绝对值最大的数选为对角线元素。

一般步骤：1) 在第 i 步时，把余下矩阵中第1列的绝对值最大的元素交换至第 i 行。

$$\begin{cases} A'^{(i+1)} = P_i A^{(i)} \\ b'^{(i+1)} = P_i b^{(i)} \end{cases}$$

2) 对第 i 列作消元

$$\begin{cases} A^{(i+1)} = M_i A'^{(i+1)} \\ b^{(i+1)} = M_i b'^{(i+1)} \end{cases}$$

6.3 LU分解

定理：若 $A \in R^{n \times n}$，则

A 有唯一的LU分解 $\Leftrightarrow$ A 的各阶顺序主子式不为0。

计算公式：1° $\begin{cases} u_{1j} = a_{1j} & (j = 1, 2, \cdots, n) \\ l_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{u_{11}} & (i = 2, 3, \cdots, n) \end{cases}$

2° 对第 k 步 $(k = 2, 3, \cdots, n)$

$$u_{kj} = a_{kj} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{km} u_{mj} \quad (j = k, k+1, \cdots, n)$$

$$l_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{im} u_{mk}\right) / u_{kk} \quad (i = k+1, k+2, \cdots, n)$$

优势：在系数矩阵固定的情况下，对矩阵作了预处理，实际计算只剩两趟回代过程。

计算量：$\frac{1}{3}n^3 + O(n^2)$

6.4 对称正定矩阵的平方根法和 LDL^T 分解

1° 定理：若 A 是对称正定阵，则存在唯一的主对角线元素都是正数的

(平方根法) 下三角矩阵 L，使得 $A = LL^T$

计算公式：对 $k = 1, 2, \cdots, n$

$$\begin{cases} l_{kk} = \left(a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ l_{jk} = \left(a_{jk} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ji} l_{ki}\right) / l_{kk} \quad (j = k+1, k+2, \cdots, n) \end{cases}$$

计算量：$\frac{1}{6}n^3 + O(n^2) + n$ 次开平方。

2° (LDL^T 分解)

计算公式：1° $d_1 = a_{11}$

2° 对 $j = 2, 3, \cdots, n$

$$\left.\begin{cases} \tilde{a}_{jk} = a_{jk} - \sum_{m=1}^{k-1} \tilde{a}_{jm} a_{km} \\ l_{jk} = \tilde{a}_{jk} / d_k \end{cases}\right\} (k = 1, 2, \cdots, j-1)$$

$$d_j = a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} \tilde{a}_{jm} l_{jm}$$

优势：没有开平方运算。

6.5 误差分析

1、向量范数

要求：1° 正定性（$\vec{x}=0$ 的情况）

2° 齐次性

3° 三角不等式.

常用范数：p-范数：$\|\vec{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$

（特例）1-范数：$\|\vec{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$ （列范数）

2-范数：$\|\vec{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}$ （欧氏范数）

∞-范数：$\|\vec{x}\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n}\{|x_i|\}$ （行范数）

范数性质：1° $\|\vec{x}\|_1 \ge \|\vec{x}\|_2 \ge \|\vec{x}\|_\infty \ge \frac{1}{n}\|\vec{x}\|_1$ （显然）

2° $\|\vec{x}\| = \|-\vec{x}\|$ （齐次性）

3° $\|\vec{x}-\vec{y}\| \ge \|\vec{x}\| - \|\vec{y}\|$ （三角不等式）

2、矩阵范数

$\|\cdot\| : \mathbb{R}^{n\times n} \longrightarrow \mathbb{R}$

要求：1° 正定性（$A=0$ 的情况）

2° 齐次性

3° 三角不等式

4° 相容性 $\|A\cdot B\| \le \|A\|\cdot\|B\|$

常用范数：1-范数：$\|A\|_1 = \max\limits_{1\le j\le n}\{\|\vec{x}_j\|_1\}$ （$\vec{x}_j$ 为列向量）（列范数）

2-范数：$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^TA)}$ （谱范数）

（$\rho(A^TA)$ 为求 A^TA 的最大特征值）

∞-范数：$\|A\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n}\{\|\vec{x}_i\|_1\}$ （$\vec{x}_i$ 为行向量）（行范数）

F-范数：$\|A\|_F = \left(\sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}}$ （欧氏范数）

定义：相容：若 $\forall A\in\mathbb{R}^{n\times n}, \vec{x}\in\mathbb{R}^n$：$\|A\vec{x}\| \le \|A\|\cdot\|\vec{x}\|$，

则称矩阵范数与向量范数相容.

定义：向量范数诱导出的矩阵范数.

$$\|A\| = \max_{\|\vec{x}\|=1}\{\|A\vec{x}\|\}$$

定理：诱导出的矩阵范数与原向量范数相容。

定理：向量与矩阵的 p-范数对应相容；（$p=1,2,\cdots,\infty$）

向量的2-范数还与矩阵的F-范数相容。

定义：谱半径 $\rho(A)$：（最大绝对特征值）（或称为"按模最大特征值的模"）

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

注：1° $\rho(A)\le\|A\|$

2° 若A为实对称阵，则 $\|A\|_2=\rho(A)$

定理：1° $\lim\limits_{k\to\infty}A^k=0 \iff \rho(A)<1$.

2° 若 $\rho(A)<1$，则 $(I-A)^{-1}$ 存在，且 $(I-A)^{-1}=\sum\limits_{j=0}^{\infty}A^j$.

3、条件数与误差估计.

扰动分析：

1° $\Delta\vec{b}$ 的影响

$$\frac{\|\Delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|}\le\left(\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\right)\frac{\|\Delta\vec{b}\|}{\|\vec{b}\|}$$

2° ΔA 的影响

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

定义：条件数 Condition Number.

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

性质：1° $\mathrm{Cond}(A)\ge\|I\|\ge1$

2° 置换矩阵、正交阵、单位矩阵的谱条件数为1 （谱条件数：$\mathrm{Cond}(A)_2$）

3° 若 $\alpha\ne0$，则 $\mathrm{Cond}(\alpha A)=\mathrm{Cond}(A)$

注：$\mathrm{Cond}(A)_2=\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}$，$\lambda_1,\lambda_n$ 为 A^TA 的最大、最小特征值。（AA^T与A^TA特征值相同 $\because |\lambda I-AA^T|=|\lambda I-A^TA|$）

定理：
$$\frac{\|\Delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|}\le\mathrm{Cond}(A)\frac{\|\vec{r}\|}{\|\vec{b}\|}$$

其中 A为非奇异阵，$\vec{x}$、$\vec{x}^*$为 $A\vec{x}=\vec{b}$ 的精确解和近似解.

$\vec{r}=\vec{b}-A\vec{x}^*$，为余向量。

定义病态方程组：

系数矩阵A的条件数 Cond(A)很大的方程组.

注：病态程度越大，解的相对误差就越大。

病态方程组的经验判据:

1° 在用主元素法时出现小主元;

2° 系数矩阵行或列近似线性相关,或其行列式近似为零。

迭代改善:

1° $A = LU$

2° 解 $A\vec{x}=\vec{b}$

3° 用高精度计算 $r=b-Ax$

4° 解 $A(\Delta\vec{x})=\vec{r}$

5° 若 Δx 小于允差,则停止;

否则,令 $x = x+\Delta x$,回到3°.