

# 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:  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (1)$$

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

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

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:  $[A|b]$

核心想法: 寻找初等矩阵 $M$ ,使得 $MA$ 为下三角矩阵, 则

$$Ax = b \Leftrightarrow MAx = Mb$$

$M$ 的构造:  $M = L_{n-1}(l_{n-1}) \cdots L_2(l_2)L_1(l_1)$

定义:  $A^{(k)} = L_{k-1}(l_{k-1}) \cdots L_2(l_2)L_1(l_1)$ , 则 $A^{(k)}$ 具有如下形式:

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

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

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

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

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

# 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 $k = 1, 2, \dots, n$ , Gauss顺序消去过程的对角元素 $a_{11}^{(1)} \neq 0, a_{22}^{(2)} \neq 0, \dots, a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 的充分必要条件是 $\Delta_1 \neq 0, \Delta_2 \neq 0, \dots, \Delta_k \neq 0$ .

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

# LU分解

## 定理

设  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $\det \mathbf{A} \neq 0$  且顺序主子式  $\Delta_1 \neq 0, \dots, \Delta_{n-1} \neq 0$ , 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  $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$

证明：由Gauss消去法的步骤可知，

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

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P与Q，单位下三角矩阵L及上三角矩阵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  $|a_{ik}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$ ，先换行，再用Gauss消去法，以上过程可以表示为：

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

方法二：选取  $|a_{ikj}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n, k \leq j \leq n} |a_{ij}^{(k)}|$ ，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:  $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$ , 其中 $\mathbf{L}$ 为单位下三角矩阵,  $\mathbf{U}$ 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 $\Rightarrow$ 第一列 $\Rightarrow$ 第二行 $\Rightarrow$ 第二列 $\Rightarrow \dots$

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

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

# 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， $\tilde{\mathbf{A}}_{22} = \tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}^\top$

# 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 $\mathbf{A}$ 的下三角部分:

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

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

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

**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

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

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

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

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

# 带状矩阵分解方法

三对角矩阵:

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

追赶法:

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

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



设三对角矩阵满足A满足:

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

则A非奇异, 且追赶法满足:

$$u_i \neq 0, i = 1, \dots, n, \quad 0 < \frac{|c_i|}{|u_i|} < 1, \quad i = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$|b_i| - |a_i| < |u_i| < |b_i| + |a_i|, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

**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

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

通过追赶法求待定参数。

# 带状矩阵

下带宽 $b_L$ , 上带宽 $b_U$

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

$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{L}$ 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

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

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

目标方程组:  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

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

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

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

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

常用条件数:

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

# 条件数性质

- $\text{cond}(\mathbf{A}) \geq 1$ ,  $\text{cond}(\mathbf{A}) = \text{cond}(\mathbf{A}^{-1})$
- 若 $\mathbf{A}$ 为正交矩阵, 则 $\text{cond}(\mathbf{A})_2 = 1$
- 若 $\mathbf{U}$ 为正交矩阵, 则 $\text{cond}(\mathbf{A})_2 = \text{cond}(\mathbf{AU})_2 = \text{cond}(\mathbf{UA})_2$
- 设 $\lambda_1$ 和 $\lambda_n$ 为 $\mathbf{A}$ 按模最大最小特征值, 则

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

- 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

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



## 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  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  的精确解,  $\tilde{\mathbf{x}}$  为近似解且  $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ , 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

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

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

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

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

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

- 列平衡法：取 $T_j = \max_{1 \leq i \leq n} |a_{ij}|$ ,  $j = 1, \dots, n$

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

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

# 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 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 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,  $\rho = \max_{1 \leq i, j \leq n} |a_{ij}^{(k)}| / \|\mathbf{A}\|_{\infty}$  且  $nu \leq 0.01$ , 有

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad & \|\delta\mathbf{A}\|_{\infty} \leq 1.01(n^3 + 3n^2)\rho\|\mathbf{A}\|_{\infty}u \\ \textcircled{2} \quad & \frac{\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|_{\infty}}{\|\mathbf{x}\|_{\infty}} \leq \frac{\text{cond}(\mathbf{A})_{\infty}}{1 - \|\mathbf{A}^{-1}\|_{\infty}\|\delta\mathbf{A}\|_{\infty}} [1.01(n^3 + 3n^2)\rho u] \end{aligned}$$

当 $\rho = 2^{n-1}$ , 不等式右端的可以达到。

一般情况下,  $\rho$ 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。