第 3 章　线性方程组的直接解法

线性方程组(linear equation system)可写成如下形式：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases},$$

其中包含 m 个方程、n 个未知量($x_1, x_2, \cdots, x_n$)。若 $m>n$，则这种线性方程组称为*超定方程组*，一般没有解，但可求出最小二乘解，详见第 6 章有关线性最小二乘的内容。若 $m<n$，则线性方程组一般有无穷多个解，实际应用中常将它与其他约束条件一起考虑，构成一个约束优化问题，它超出了本书的讨论范围。当 $m=n$ 时，这是常见的线性方程组求解问题，记为

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}, \tag{3.1}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 维矩阵，称为*系数矩阵*(coefficient matrix)；$\boldsymbol{x}$ 为 n 维向量，称为*解向量*；$\boldsymbol{b}$ 为 n 维向量，称为*右端向量*或*右端项*(right-hand side)。本章主要考虑 $m=n$ 的情况，并且假设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为实数矩阵、$\boldsymbol{b}$ 为实数向量，因此待求的 $\boldsymbol{x}$ 也是实向量。

除了很多应用问题可直接转换为线性方程组求解问题外，本书其他章节的数值计算问题也常归结为线性方程组的求解。例如，第 2 章讨论非线性方程组求解时，算法 2.6 就包含了对线性方程组求解的步骤。本章介绍线性方程组的直接解法以及有关的几种矩阵分解方法。所谓*直接解法*，就是理论上经过有限步计算能得到准确解的方法。第 4 章介绍线性方程组的迭代解法。

3.1　基本概念与问题的敏感性

线性方程组的求解问题与矩阵的关系密切，无论是理论分析，还是实际的算法设计，都需要使用矩阵这一工具。本节先对线性代数中的一些基本概念和结果进行复习，然后介绍向量与矩阵的范数，最后讨论线性方程组求解问题的敏感性。

3.1.1　线性代数中的有关概念

1. 解的存在性与唯一性

下面首先给出最基本的单位阵和零向量的定义，然后给出线性无关和线性相关的定义。

定义 3.1：(1) 分量都为 0 的向量称为*零向量*，记为 $\mathbf{0}$，分量都为 0 的矩阵称为*零矩阵*，记为 $\boldsymbol{O}$。

(2) 仅主对角线上元素均为 1，其他元素均为 0 的矩阵称为*单位阵*(identity matrix)，通常记为 $\boldsymbol{I}$。

定义 3.2：设向量 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m \in \mathbb{R}^n$，如果存在不全为零的数 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_m \in \mathbb{R}$，使得

$$\alpha_1 \boldsymbol{x}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{x}_2 + \cdots + \alpha_m \boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{0}, \tag{3.2}$$

则称向量 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m$ 线性相关,否则,若式(3.2)只有当 $\alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_m = 0$ 时成立,则称 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m$ 线性无关。

线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的解的个数与系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是否为奇异矩阵有关,下面的定理给出了判断矩阵奇异性的依据。

定理 3.1:设矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$,若它满足下列等价条件之一:

(1) 存在逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$,即存在一个矩阵,记为 $\boldsymbol{A}^{-1}$,满足 $\boldsymbol{AA}^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$。

(2) $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$, 其中,$\det(\boldsymbol{A})$表示 $\boldsymbol{A}$ 的行列式(determinant)。

(3) $\boldsymbol{A}$ 的秩 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=n$ (矩阵的秩为其包含的线性无关的行或列的最多个数)。

(4) 对任意向量 $\boldsymbol{z} \neq \boldsymbol{0}$, 有 $\boldsymbol{Az} \neq \boldsymbol{0}$。

则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵(nonsingular matrix),否则为奇异矩阵(singular matrix)。

定理 3.2 说明了线性方程组解的存在性与唯一性。

定理 3.2:设矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$,

(1) 若 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵,则方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 有唯一的解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$。

(2) 若 $\boldsymbol{A}$ 为奇异矩阵,且 $\boldsymbol{b} \in \text{span}(\boldsymbol{A})$,集合 $\text{span}(\boldsymbol{A})$表示 $\boldsymbol{A}$ 的各个列向量张成的线性空间,则方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 有无穷多个解。

(3) 若 $\boldsymbol{A}$ 为奇异矩阵,且 $\boldsymbol{b} \notin \text{span}(\boldsymbol{A})$,则方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 没有解。

2. 有关矩阵的基本知识

下面首先给出几种特殊类型矩阵的定义,然后给出顺序主子式的定义,并讨论对称正定矩阵的性质。

定义 3.3:设矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$,则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为

(1) 对角矩阵(diagonal matrix),当 $i \neq j$ 时,$a_{ij}=0$。

(2) 三对角矩阵(tridiagonal matrix),当$|i-j|>1$ 时,$a_{ij}=0$。

(3) 上三角矩阵(upper triangle matrix),当 $i>j$ 时,$a_{ij}=0$。

(4) 下三角矩阵(lower triangle matrix),当 $i<j$ 时,$a_{ij}=0$。

(5) 对称矩阵(symmetric matrix),如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$,则 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置(transpose)。

(6) 对称正定矩阵(symmetric positive definite matrix),如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$, 且对任意非零向量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, 则二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}>0$。

(7) 对称半正定矩阵(symmetric positive semidefinite matrix),如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$, 且对任意非零向量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, 则二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax} \geqslant 0$。

(8) 正交矩阵(orthogonal matrix),$\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$。

定义 3.3 中,前 4 种矩阵中包含较多的零元素,属于稀疏矩阵(sparse matrix),它们的非零元素分布情况如图 3-1 所示(假设 $n=4$)。在图 3-1 中,用“×”标记非零矩阵元素的位置,按此方式得到的矩阵图示也称为矩阵的威尔金森图(Wilkinson graph)。容易看出,对角矩阵的逆矩阵(inverse matrix)、若干对角矩阵的乘积仍为对角矩阵,上(下)三角矩阵的逆矩阵、若干上(下)三角矩阵的乘积仍为上(下)三角矩阵。另外,通常称对角线元素均为 1 的上(下)三角矩阵为单位上(下)三角矩阵。

$$\begin{bmatrix} \times & & & \\ & \times & & \\ & & \times & \\ & & & \times \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \times & \times & & \\ \times & \times & \times & \\ & \times & \times & \times \\ & & \times & \times \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times \\ & & \times & \times \\ & & & \times \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \times & & & \\ \times & \times & & \\ \times & \times & \times & \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix}$$

（a）对角矩阵　（b）三对角矩阵　（c）上三角矩阵　（d）下三角矩阵

图 3-1　矩阵的威尔金森图

定义 3.3 中的其余 4 种矩阵可能是稀疏矩阵，也可能是稠密矩阵。对于正交矩阵 $\boldsymbol{A}$，它的转置 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 也是正交矩阵，并且它的行向量、列向量各自构成 n 维向量空间的一组单位正交基向量。

定义 3.4：设矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 k 阶顺序主子阵为

$$\boldsymbol{A}_k=\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{bmatrix},\quad (k=1,2,\cdots,n)。$$

并且顺序主子阵的行列式 $\det(\boldsymbol{A}_k)$，$(k=1,2,\cdots,n)$称为顺序主子式。

从定义 3.4 看出，n 阶顺序主子阵 $\boldsymbol{A}_n=\boldsymbol{A}$，而 1 阶顺序主子阵就是一个数——$a_{11}$。

定义 3.5：设矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$，若存在数 λ（实数或复数）和非零向量 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^{\mathrm{T}}$（实向量或复向量），使

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x},$$

则称 λ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值(eigenvalue)，$\boldsymbol{x}$ 为 λ 对应的 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量(eigenvector)。

由定义 3.5 知，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ 为特征方程

$$\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=0 \tag{3.3}$$

的解。由于式(3.3)为 n 次代数多项式方程，因此矩阵 $\boldsymbol{A}$ 一定有 n 个特征值(m 重特征值计为 m 个)，并且特征值可能是复数。

定理 3.3：设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称矩阵，则

（1）$\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ_i，$(i=1,2,3,\cdots,n)$均为实数。

（2）对于 $\boldsymbol{A}$，存在实特征向量 $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n$ 为 $\mathbb{R}^n$ 空间的一组单位正交基，即

$$\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_j=\begin{cases}0, & i\neq j\\ 1, & i=j\end{cases}。$$

（3）可将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 做特征值分解：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\Lambda\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}},$$

其中，Λ 为对角矩阵，对角线元素为 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征值，$\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵，且它的列向量 $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征向量(排列顺序与 Λ 中特征值的顺序对应)。

定理 3.4：设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称半正定矩阵，则除了满足定理 3.3 的结论外，有特征值 $\lambda_i\geqslant 0$，$(i=1,2,3,\cdots,n)$。

定理 3.5：设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称正定矩阵，则除了满足定理 3.3 的结论外，还满足

（1）$\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，且 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 也是对称正定矩阵。

（2）$\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda_i>0$，$(i=1,2,\cdots,n)$。

（3）记 $\boldsymbol{A}_k$，$(k=1,2,3,\cdots,n)$为 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子阵，则 $\boldsymbol{A}_k$ 也是对称正定矩阵，且 $\det(\boldsymbol{A}_k)>0$。

3.1.2 向量范数与矩阵范数

三维空间中向量的长度也称为向量的模或范数,将其进行推广,我们对一般的 n 维向量可以定义范数的概念。本节介绍的向量和矩阵范数的概念,对于分析线性方程组求解问题的误差非常重要。

定义 3.6:记 $\|\boldsymbol{x}\|$ 为向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ 的某个实值函数,若它满足条件:

(1) 对 $\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$,$\|\boldsymbol{x}\|\geqslant 0$,当且仅当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 时,$\|\boldsymbol{x}\|=0$; (正定条件)

(2) 对 $\forall\alpha\in\mathbb{R}$,$\|\alpha\boldsymbol{x}\|=|\alpha|\,\|\boldsymbol{x}\|$;

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

则 $\|\boldsymbol{x}\|$ 是 $\mathbb{R}^n$ 上的*向量范数*(vector norm)。

定义 3.6 中的 3 个条件实际上也是一般线性空间中范数定义的要求。对于某个数域 $\mathbb{K}$ 上的线性空间 S,将条件中的 $\mathbb{R}$ 替换为 $\mathbb{K}$,$\mathbb{R}^n$ 替换为 S,条件(1)~(3)即定义了线性空间 S 上的*范数*。定义了范数的线性空间被称为*赋范线性空间*。

对于实向量 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,x_3,\cdots,x_n]^{\mathrm{T}}$,下面给出常用的几种范数,它们都满足定义 3.6 的条件。

(1) 1-范数:$\|\boldsymbol{x}\|_1=\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i|$。

(2) 2-范数:$\|\boldsymbol{x}\|_2=\left(\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}=(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})^{\frac{1}{2}}$。

(3) ∞-范数:$\|\boldsymbol{x}\|_\infty=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|x_i|$。

1-范数也称为*曼哈顿范数*;2-范数也称为*欧氏范数*,是欧几里得几何空间中向量长度的直接推广。应当指出,对某个数域上的线性空间,还可以定义*内积*(inner product)的概念,$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的内积记为 $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$。内积为零,则说两个向量*正交*。在实向量空间中,内积的计算公式为

$$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y},$$

而在更一般的复向量空间中,内积的计算公式为

$$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\sum_{i=1}^{n}x_i\overline{y_i}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{y}}。$$

根据内积可以定义一种范数,$\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle}$ 称为*内积范数*[①]。无论上述哪种情况,内积范数都与 2-范数相同。

上面给出的 3 种向量范数都属于一大类范数,称为 p-范数。

定义 3.7:对于实向量 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,x_3,\cdots,x_n]^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n$,它的 *p-范数*为

$$\|\boldsymbol{x}\|_p=\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}},\quad p\geqslant 1。$$

可以证明,p-范数符合范数的定义 3.6,并且 1-范数、2-范数和 ∞-范数是 p-范数的 3 种特殊情况(分别对应 $p=1$,$p=2$,$p\to\infty$)。

① 关于内积的一般定义,请参考线性代数有关的书籍,本书第 6 章也会涉及。

例 3.1(3 种向量范数)：分别针对二维向量的 1-范数、2-范数和∞-范数度量，在二维坐标系中绘出单位长度向量的端点集合(即“单位圆”)，并计算向量 $\boldsymbol{x}=[-1.6, 1.2]^{\mathrm{T}}$ 的这 3 种范数。

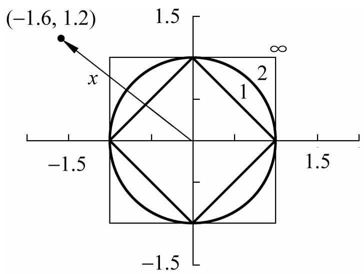

图 3-2 依据 3 种范数得到的二维空间“单位圆”的图形

【解】 不同范数定义下二维空间单位“圆”的图形如图 3-2 所示。$\boldsymbol{x}$ 的 3 种范数为 $\|\boldsymbol{x}\|_1=2.8$，$\|\boldsymbol{x}\|_2=2$，$\|\boldsymbol{x}\|_\infty=1.6$。 ■

感兴趣的读者可以思考，按照这 3 种范数，三维坐标系中的“单位球”分别是什么图形？

下面给出与向量范数有关的几个定义和定理。

定义 3.8：设 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 为 $\mathbb{R}^n$ 中一向量序列，$\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^n$，设 $\boldsymbol{x}^{(k)}=[x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)}]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{x}^*=[x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*]^{\mathrm{T}}$。如果 $\lim\limits_{k\to\infty} x_i^{(k)}=x_i^*$，$(i=1,2,3,\cdots,n)$，则称序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 收敛于向量 $\boldsymbol{x}^*$，记为 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{x}^*$。

定理 3.6：$\mathbb{R}^n$ 上的任一种向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|$ 都是关于 $\boldsymbol{x}$ 分量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的连续函数。

定理 3.7：设 $\|\boldsymbol{x}\|_s$ 和 $\|\boldsymbol{x}\|_t$ 为 $\mathbb{R}^n$ 上的任意两种向量范数，则存在常数 $c_1, c_2>0$，使得对一切 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$，有

$$c_1\|\boldsymbol{x}\|_s \leqslant \|\boldsymbol{x}\|_t \leqslant c_2\|\boldsymbol{x}\|_s\,。$$

定理 3.8：$\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{x}^*$ 的充分必要条件是 $\lim\limits_{k\to\infty}\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|=0$，其中算符 $\|\cdot\|$ 表示任一种向量范数。

定义 3.8 给出了向量序列收敛的定义，即一个向量序列收敛等价于它的各分量形成的序列都收敛。定理 3.6 指出任意向量范数是关于向量分量的连续函数。定理 3.7 指出有限维向量空间中不同范数的等价性，根据它可得到一个推论：若在某种范数意义下向量序列的范数收敛到 0，则该向量序列的任一种范数都收敛到 0。定理 3.8 指出向量序列的收敛等价于向量与极限向量之差的范数收敛到 0。关于这 3 个定理的证明，感兴趣的读者可参考文献[8]。

关于向量范数，再补充说明以下两点。

(1) 在进行一些理论分析时，可利用不同范数的等价性，将按某一种范数得出的结论推广到所有范数情况下都成立。

(2) 除了常用的 p-范数，还可以定义其他形式的向量范数，如 $\|\boldsymbol{x}\|_A=\sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}$，其中 $\boldsymbol{A}$ 为对称正定矩阵，也是一种向量范数。

所有的矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，对于矩阵加法、矩阵与实数乘法运算，也构成一个线性空间，因此也可以在此空间中定义矩阵范数。与一般的线性空间不同，$\mathbb{R}^{n\times n}$ 空间还包括一个自我封闭的“矩阵乘”运算，因此有关的范数定义中一般也增加对矩阵乘运算的要求。

定义 3.9：记 $\|\boldsymbol{A}\|$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 的某个实值函数，若它满足条件

(1) 对 $\forall \boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，$\|\boldsymbol{A}\|\geqslant 0$，当且仅当 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}$ 时，$\|\boldsymbol{A}\|=0$； (正定条件)

(2) 对 $\forall \alpha\in\mathbb{R}$，$\|\alpha\boldsymbol{A}\|=|\alpha|\,\|\boldsymbol{A}\|$；

(3) 对 $\forall \boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，$\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|+\|\boldsymbol{B}\|$； (三角不等式)

(4) $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\,\|\boldsymbol{B}\|$，

则 $\|\boldsymbol{A}\|$ 是$\mathbb{R}^{n\times n}$上的矩阵范数(matrix norm)。

在定义 3.9 中,条件(4)是对矩阵乘运算的要求。

与向量范数一样,满足定义 3.9 的矩阵范数并不是唯一的。由于常常需要进行矩阵与向量相乘的运算,还应将矩阵范数与向量范数联系起来。在定义 3.9 的基础上,实际使用的矩阵范数往往还满足如下相容性条件:

对 $\forall \boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$,$\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$都有

$$\|\boldsymbol{Ax}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{x}\| 。\tag{3.4}$$

下面定义的矩阵算子范数也称为向量范数诱导出的矩阵范数,就是满足相容性条件的矩阵范数。

定义 3.10:设 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$,$\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$,对某种给定的向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_v$,矩阵的算子范数为

$$\|\boldsymbol{A}\|_v=\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_v}{\|\boldsymbol{x}\|_v} 。$$

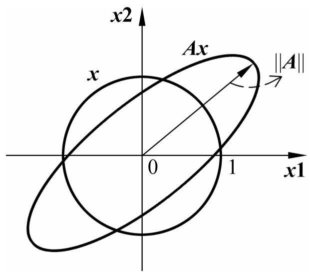

图 3-3 矩阵的算子范数表示线性变换 $\boldsymbol{Ax}$ 对向量 $\boldsymbol{x}$ 的最大"拉长"倍数

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 代表了线性空间$\mathbb{R}^n$中的一种线性变换,将它作用于向量 $\boldsymbol{x}$ 的结果是矩阵与向量的乘积$\boldsymbol{Ax}$。因此,从定义 3.10 看出,矩阵的算子范数就是这个线性变换对向量 $\boldsymbol{x}$ 的最大"拉长"倍数(可能小于 1)。图 3-3 中绘出了二维向量空间中所有长度为 1 的向量的端点轨迹(采用 2-范数),即单位圆,则经过某个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的作用,变换后向量端点的轨迹为椭圆,其长轴的一半长度就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的算子范数。下面通过一个定理严格说明矩阵的算子范数是满足相容性条件的矩阵范数。

定理 3.9:定义 3.10 的算子范数是满足定义 3.9 以及相容性条件(3.4)的矩阵范数。

【证明】 此定理的条件是算子范数 $\|\boldsymbol{A}\|=\max\limits_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}$,要证明

(1) 是矩阵范数,即满足

(a) $\|\boldsymbol{A}\|\geqslant 0$,当且仅当 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}$ 时,$\|\boldsymbol{A}\|=0$;

(b) $\|\alpha\boldsymbol{A}\|=|\alpha|\ \|\boldsymbol{A}\|$,$\alpha\in\mathbb{R}$;

(c) $\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|+\|\boldsymbol{B}\|$;

(d) $\|\boldsymbol{AB}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{B}\|$。

(2) 与向量范数有相容性,即

(e) $\|\boldsymbol{Ax}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{x}\|$

命题(a)、(b)、(c)的证明很简单,这里略去。下面证明(d)和(e)。先证明命题(e):

当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 时显然成立,然后设 $\boldsymbol{x}\neq 0$,

$$\|\boldsymbol{A}\|=\max_{\boldsymbol{x}\neq 0}\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\geqslant\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \quad\Rightarrow\quad \|\boldsymbol{Ax}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{x}\| 。$$

再利用(e)的结论证明(d):

$$对\ \forall\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0},\ \|\boldsymbol{ABx}\|=\|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{Bx})\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{Bx}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{B}\|\ \|\boldsymbol{x}\| \quad\Rightarrow\quad \max_{\boldsymbol{x}\neq 0}\frac{\|\boldsymbol{ABx}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\leqslant$$

$$\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{B}\|\ \|\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}=\|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{B}\|,即\ \|\boldsymbol{AB}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\ \|\boldsymbol{B}\| 。$$ ■

针对 3 种常用的向量范数，可以给出对应的矩阵算子范数。

定理 3.10：对应于向量的 1-范数、2-范数和∞-范数，矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 的算子范数分别为

（1）1-范数：$\|\boldsymbol{A}\|_1=\max\limits_{1\leqslant j\leqslant n}\sum\limits_{i=1}^{n}|a_{ij}|$。

（2）2-范数：$\|\boldsymbol{A}\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}$，其中 $\lambda_{\max}(\cdot)$ 表示取矩阵最大特征值的函数。

（3）∞-范数：$\|\boldsymbol{A}\|_\infty=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}\sum\limits_{j=1}^{n}|a_{ij}|$。

【证明】 矩阵的 1-范数和∞-范数的公式很容易通过定义 3.10 进行推导，相关的证明留给读者思考。下面对 2-范数的公式进行证明。

对于任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2\geqslant 0$，又 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$，所以矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 为对称半正定矩阵。根据定理 3.3 和定理 3.4，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值为非负实数，设它们为

$$\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n\geqslant 0,$$

与之对应的特征向量 $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3,\cdots,\boldsymbol{q}_n$ 构成一组单位正交基，任一非零向量 $\boldsymbol{x}$ 可表示为这组基的线性组合：

$$\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{q}_i,$$

其中，$c_i\in\mathbb{R}$ 为组合系数，则

$$\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2}{\|\boldsymbol{x}\|_2^2}=\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}=\frac{\left(\sum\limits_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{q}_i\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\sum\limits_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{q}_i}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{q}_i\right)^{\mathrm{T}}\sum\limits_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{q}_i}=\frac{\left(\sum\limits_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{q}_i\right)^{\mathrm{T}}\sum\limits_{i=1}^{n}c_i\lambda_i\boldsymbol{q}_i}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{q}_i\right)^{\mathrm{T}}\sum\limits_{i=1}^{n}c_i\boldsymbol{q}_i}$$

$$=\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(c_i^2\lambda_i)}{\sum\limits_{i=1}^{n}c_i^2}\leqslant\lambda_1。$$

并且，当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{q}_1$ 时，$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2/\|\boldsymbol{x}\|_2^2=\lambda_1$。因此，根据定义 3.10，有

$$\|\boldsymbol{A}\|_2=\max_{\boldsymbol{x}\neq 0}\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2}=\sqrt{\max_{\boldsymbol{x}\neq 0}\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2}{\|\boldsymbol{x}\|_2^2}}$$

$$=\sqrt{\lambda_1}=\sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}。\quad\blacksquare$$

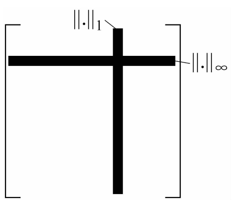

图 3-4　矩阵的 1-范数和∞-范数计算公式中涉及的元素

应当说明的是，矩阵 2-范数的计算涉及特征值，比其他两种范数要复杂得多。矩阵的 1-范数和∞-范数计算比较简便，应熟练掌握。图 3-4 是一个矩阵的示意图，可帮助记忆 1-范数和∞-范数的公式，据此也称 1-范数为列范数、∞-范数为行范数。在不加特殊说明的情况下，后面讨论的矩阵范数均为算子范数。

应当指出，这 3 种常用的矩阵范数并不局限于方阵。对于一般矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$，根据定义 3.10 的条件也可以定义 1-范数、2-范数和∞-范数，它们同样满足定理 3.9 和定理 3.10 的结论。此外，很多场合也使用矩阵的 Frobenius 范数 $\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}=\left(\sum\limits_{i=1}^{m}\sum\limits_{j=1}^{n}a_{ij}^2\right)^{1/2}$，它相当于将矩阵元素排成一个向量，然后计算其 2- 范数。当 $\boldsymbol{A}$ 退化为一个

列向量时，Frobenius 范数与 2- 范数相等。此外还可以证明，Frobenius 范数也满足定理 3.9 结论中的各种范数性质。

3.1.3 问题的敏感性与矩阵条件数

有了向量范数、矩阵范数的概念，下面分析线性方程组求解问题的敏感性和条件数，研究初始数据误差对解的影响。先考虑方程(3.1)右端项发生扰动 $\Delta\boldsymbol{b}$ 的情况，相应的解变为 $\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}$，则

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b},$$

可推导出如下两个不等式：

$$\boldsymbol{A}\Delta\boldsymbol{x}=\Delta\boldsymbol{b} \quad\Rightarrow\quad \Delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{b} \quad\Rightarrow\quad \|\Delta\boldsymbol{x}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\,\|\Delta\boldsymbol{b}\|,$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \quad\Rightarrow\quad \|\boldsymbol{b}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\,\|\boldsymbol{x}\|。$$

根据问题的条件数的定义 1.9，得

$$\begin{aligned}\text{cond}&=\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|/\|\boldsymbol{x}\|}{\|\Delta\boldsymbol{b}\|/\|\boldsymbol{b}\|}=\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{b}\|}{\|\Delta\boldsymbol{b}\|\,\|\boldsymbol{x}\|}\leqslant\frac{\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\,\|\Delta\boldsymbol{b}\|\,\|\boldsymbol{A}\|\,\|\boldsymbol{x}\|}{\|\Delta\boldsymbol{b}\|\,\|\boldsymbol{x}\|}\\&=\|\boldsymbol{A}\|\,\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\ 。\end{aligned}\tag{3.5}$$

条件数 cond 反映了问题对数据相对误差的放大倍数，它随具体问题和数据而变，但式(3.5)说明了条件数的一个上限，而且这个上限 $\|\boldsymbol{A}\|\,\|\boldsymbol{A}^{-1}\|$ 仅依赖于方程的系数矩阵，下面把它定义为矩阵的条件数。

定义 3.11：设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，则称 $\text{cond}(\boldsymbol{A})_v=\|\boldsymbol{A}\|_v\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_v$ 为矩阵的条件数，其中下标 v 用于标识某种矩阵的算子范数。

除了方程(3.1)右端项发生扰动的情况，下面再考虑系数矩阵发生扰动的情况。设扰动量为 $\Delta\boldsymbol{A}$，它使解由 $\boldsymbol{x}$ 变为 $\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}$，即

$$(\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A})\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{b},$$

忽略一些推导，直接给出如下不等式：

$$\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|}{\|\hat{\boldsymbol{x}}\|}\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\,\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\,\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}\ 。\tag{3.6}$$

式(3.6)不等号左边的 $\dfrac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|}{\|\hat{\boldsymbol{x}}\|}$ 是解的相对误差的近似值，因此有如下近似关系：

$$\text{cond}\approx\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|/\|\hat{\boldsymbol{x}}\|}{\|\Delta\boldsymbol{A}\|/\|\boldsymbol{A}\|}\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\,\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\ 。\tag{3.7}$$

式(3.7)表明，在系数矩阵发生扰动的情况下，线性方程组求解问题的条件数的上限也近似为矩阵的条件数。

综上分析，系数矩阵的条件数对线性方程组求解问题的敏感性影响很大，它一般是线性方程组求解问题的条件数的上限。因此，了解系数矩阵条件数的大小非常重要。如果系数矩阵条件数很大，就称之为病态矩阵(ill-conditioned matrix)，对应的线性方程组求解问题是敏感(病态)问题；如果系数矩阵的条件数很小，就称之为良态矩阵(well-conditioned matrix)，相应的线性方程组求解问题不太敏感。

例 3.2(病态矩阵)：求解方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$：

$$\begin{bmatrix}1&1\\1&1.0001\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\2\end{bmatrix},$$

考虑右端项扰动 $\Delta\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}0\\0.0001\end{bmatrix}$的情况，通过问题的条件数和矩阵条件数研究问题的敏感性。

【解】　原方程解 $\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\0\end{bmatrix}$，扰动后方程为

$$\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & 1.0001\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\y_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\2.0001\end{bmatrix},$$

其解为 $\boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}y_1\\y_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$。右端项扰动造成解的误差 $\Delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}-1\\1\end{bmatrix}$，则在$\infty$-范数意义下，$\mathrm{cond}=\dfrac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|/\|\boldsymbol{x}\|}{\|\Delta\boldsymbol{b}\|/\|\boldsymbol{b}\|}=\dfrac{1/2}{0.0001/2}=10\,000$，而

$$\begin{aligned}\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})_\infty &= \|\boldsymbol{A}\|_\infty\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_\infty = 2.0001\times\left\|10^4\times\begin{bmatrix}1.0001 & -1.0000\\-1.0000 & 1.0000\end{bmatrix}\right\|_\infty\\ &= 2.0001\times10^4\times2.0001\approx 40\,000。\end{aligned}$$

这说明这个线性方程组求解问题很敏感，也验证了矩阵条件数为问题条件数的上限。■

例 3.3(良态矩阵)：求解方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$：

$$\begin{bmatrix}1 & -1\\1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\2\end{bmatrix},$$

考虑右端项扰动 $\Delta\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}0\\0.0001\end{bmatrix}$的情况，通过问题的条件数和矩阵条件数研究问题的敏感性。

【解】　原方程解 $\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$，扰动后方程为

$$\begin{bmatrix}1 & -1\\1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\y_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\2.0001\end{bmatrix},$$

其解为 $\boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}y_1\\y_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.000\,05\\1.000\,05\end{bmatrix}$。右端项扰动造成解的误差 $\Delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}0.000\,05\\0.000\,05\end{bmatrix}$。在$\infty$-范数意义下，问题和矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数分别为

$$\mathrm{cond}=\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|/\|\boldsymbol{x}\|}{\|\Delta\boldsymbol{b}\|/\|\boldsymbol{b}\|}=\frac{0.000\,05}{0.0001/2}=1,$$

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})_\infty=\|\boldsymbol{A}\|_\infty\|\boldsymbol{A}^{-1}\|_\infty=2\times\left\|\begin{bmatrix}0.5 & 0.5\\-0.5 & 0.5\end{bmatrix}\right\|_\infty=2\ 。$$

这说明此问题是不敏感的，系数矩阵是良态矩阵。■

例 3.4(希尔伯特矩阵)：希尔伯特(Hilbert)矩阵 $\boldsymbol{H}_n$ 定义如下：

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

试按∞-范数计算 $\boldsymbol{H}_3$ 和 $\boldsymbol{H}_4$ 的条件数。

【解】 $$\boldsymbol{H}_3=\begin{bmatrix}1&\frac{1}{2}&\frac{1}{3}\\ \frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\frac{1}{4}\\ \frac{1}{3}&\frac{1}{4}&\frac{1}{5}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{H}_3^{-1}=\begin{bmatrix}9&-36&30\\-36&192&-180\\30&-180&180\end{bmatrix},$$

则 $\|\boldsymbol{H}_3\|_\infty=\frac{11}{6}$, $\|\boldsymbol{H}_3^{-1}\|_\infty=408$,所以 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{H}_3)_\infty=748$。

$$\boldsymbol{H}_4=\begin{bmatrix}1&\frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\frac{1}{4}\\ \frac{1}{2}&\frac{1}{3}&\frac{1}{4}&\frac{1}{5}\\ \frac{1}{3}&\frac{1}{4}&\frac{1}{5}&\frac{1}{6}\\ \frac{1}{4}&\frac{1}{5}&\frac{1}{6}&\frac{1}{7}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{H}_4^{-1}=\begin{bmatrix}16&-120&240&-140\\-120&1200&-2700&1680\\240&-2700&6480&-4200\\-140&1680&-4200&2800\end{bmatrix},$$

则 $\|\boldsymbol{H}_4\|_\infty=\frac{25}{12}$, $\|\boldsymbol{H}_4^{-1}\|_\infty=13\,620$,所以 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{H}_4)_\infty=28\,375$ 。 ■

从这个例子看出,随着阶数从 3 增大到 4,希尔伯特矩阵的条件数增大了几十倍。事实上,希尔伯特矩阵 $\boldsymbol{H}_n$ 是一种著名的病态矩阵,阶数 n 越大,其病态性越严重。

上面的分析和例子说明,矩阵的条件数是判断线性方程组求解问题敏感性的重要指标,是数据传递误差放大倍数的上限。下面给出有关矩阵条件数的一些重要性质。

定理 3.11:在矩阵的算子范数意义下,矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数满足

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})=\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\Big/\min_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}。\tag{3.8}$$

【证明】 首先推导矩阵算子范数意义下 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的公式

$$\|\boldsymbol{A}^{-1}\|=\max_{\boldsymbol{y}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y}\|}{\|\boldsymbol{y}\|}=\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|}=\frac{1}{\min\limits_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}},\tag{3.9}$$

上述推导的第二步做了 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的变量代换。再根据条件数的定义,便得到式(3.8)。 ■

式(3.9)说明,$\boldsymbol{A}^{-1}$ 的算子范数为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对应的线性变换对向量的最小“拉长”倍数的倒数,或者说是最大“压缩”倍数。根据定理 3.11 可对矩阵条件数做出一个形象的解释,它反映了线性变换作用于 n 维空间的“单位球”后得到图形的扭曲程度。

可以将系数矩阵为奇异矩阵的情形看成最病态的线性方程组,因此规定奇异矩阵的条件数为无穷大。矩阵条件数越大,说明矩阵越接近奇异,其数值反映矩阵的近奇异程度①。与之对比,矩阵的行列式不能反映矩阵接近奇异的程度。

下面给出矩阵条件数的几条重要性质。

定理 3.12:矩阵的条件数满足如下性质:

(1) 设 $\boldsymbol{A}$ 为任意非奇异矩阵,则

① 在实际问题中很少遇到真正的奇异矩阵(由于误差),但会出现近奇异矩阵。

$$\begin{aligned}&\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) \geqslant 1,\\&\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}^{-1}) = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A}),\\&\mathrm{cond}(c\boldsymbol{A}) = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A}),\quad \forall c \neq 0\ 。\end{aligned}$$

(2) $\mathrm{cond}(\boldsymbol{I})=1$，$\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵。

(3) 设 $\boldsymbol{D}$ 为任意对角矩阵，则

$\mathrm{cond}(\boldsymbol{D})\geqslant\dfrac{\max_i|d_{ii}|}{\min_i|d_{ii}|}$，其中 $d_{ii}(i=1,2,\cdots,n)$ 为 $\boldsymbol{D}$ 的对角线元素。特别地，若采用 p-范数，则等号成立。

(4) 若采用 2-范数，则

$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})_2=\sqrt{\dfrac{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}{\lambda_{\min}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}}$，其中 $\lambda_{\max}(\cdot)$、$\lambda_{\min}(\cdot)$ 分别为求矩阵最大、最小特征值的函数。

(5) 若 $\boldsymbol{Q}$ 为任意正交矩阵，则

$$\begin{aligned}&\mathrm{cond}(\boldsymbol{Q})_2 = 1,\\&\mathrm{cond}(\boldsymbol{QA})_2 = \mathrm{cond}(\boldsymbol{AQ})_2 = \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})_2\ 。\end{aligned}$$

定理 3.12 中(1)的各条结论是显然的。例如，从式(3.8)可得出 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})\geqslant 1$ 的结论。定理 3.12 的其他内容也可根据矩阵算子范数的定义和特殊矩阵的性质加以证明，感兴趣的读者可以思考。

3.2　高斯消去法

高斯消去法(Gaussian elimination method)是求解线性方程组的基本方法，各种直接解法基本上都是高斯消去法的变形，或者是针对特殊矩阵的改进。本节介绍一般的高斯消去法和高斯-约当消去法。另外，在本章的后续讨论中，若没有特殊说明，都假设系数矩阵非奇异。

3.2.1　基本的高斯消去法

先通过一个例子简要说明高斯消去法求解线性方程组的过程。

例 3.5(高斯消去法求解线性方程组)：求解线性方程组

$$\begin{cases}10x_1-7x_2=7\\-3x_1+2x_2+6x_3=4\\5x_1-x_2+5x_3=6\end{cases}。$$

【解】 采用高斯消去法，求解过程分为消去和回代求解两个步骤。下面写出线性方程组对应的增广矩阵(包含系数矩阵和右端项)，根据它说明消去过程。

$$\left[\begin{array}{ccc:c}10&-7&0&7\\-3&2&6&4\\5&-1&5&6\end{array}\right]$$

高斯消去过程就是对增广矩阵做初等行变换，将系数矩阵变换为上三角矩阵。具体步骤如下：

将第一个方程中的所有系数及右端项系数均除以10(归一化操作),得

$$\left[\begin{array}{ccc:c} 1 & -0.7 & 0 & 0.7 \\ -3 & 2 & 6 & 4 \\ 5 & -1 & 5 & 6 \end{array}\right]。$$

将第二个方程加上第一个方程的3倍,第三个方程减去第一个方程的5倍,得

$$\left[\begin{array}{ccc:c} 1 & -0.7 & 0 & 0.7 \\ 0 & -0.1 & 6 & 6.1 \\ 0 & 2.5 & 5 & 2.5 \end{array}\right]。$$

将第二个方程中的所有系数及右端项系数均除以-0.1,得

$$\left[\begin{array}{ccc:c} 1 & -0.7 & 0 & 0.7 \\ 0 & 1 & -60 & -61 \\ 0 & 2.5 & 5 & 2.5 \end{array}\right]。$$

将第三个方程减去第二个方程的2.5倍,得

$$\left[\begin{array}{ccc:c} 1 & -0.7 & 0 & 0.7 \\ 0 & 1 & -60 & -61 \\ 0 & 0 & 155 & 155 \end{array}\right]。$$

它对应于与原方程组等价的上三角形方程组

$$\begin{cases} x_1 - 0.7x_2 = 0.7 \\ x_2 - 60x_3 = -61 \\ 155x_3 = 155 \end{cases}。$$

此时执行第二步:回代求解。先从第三个方程解出$x_3=1$,将它代入第二个方程解出$x_2=-1$,将它们再代入第一个方程解出$x_1=0$。 ■

一般地,高斯消去过程对增广矩阵执行两种初等行变换:

(1) 某一行乘以非零常数c(倍乘变换)。

(2) 将某一行乘以非零常数c后加到另一行(倍加变换)。

回代过程首先根据上三角形方程组的最后一个方程解出x_n,然后将解依次代入上一个方程,按$x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$的顺序解出所有的未知量。下面给出消去过程的算法描述。

算法3.1:求解线性方程组的高斯消去过程

输入:$\boldsymbol{A}$, n, $\boldsymbol{b}$;输出:$\boldsymbol{A}$,$\boldsymbol{b}$.

```
For k=1, 2, 3, …, n−1
    If a_kk =0 then 停止 ;
    For i=k+1, k+2,…,n
        c :=−a_ik/a_kk ;              {计算倍乘因子}
        For j=k+1, k+2, …, n
            a_ij :=a_ij +c a_kj ;     {更新矩阵元素}
        End
        b_i :=b_i +c b_k ;            {更新右端项}
```

```
    End
End
```

关于算法 3.1，说明两点：

（1）这里省略了归一化操作，变量 c 记录了当前行应乘以的倍数，通过行倍加变换将系数矩阵对角线以下部分变为 0。

（2）采用了“原地工作”的存储方式，即变换后的矩阵元素覆盖原来的值。最终，变换后得到的上三角矩阵存储在原始矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的上三角部分，而对角线以下部分的值没有意义。

算法 3.2 给出了回代过程的算法描述，它求解上三角形方程组 $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{b}$。

算法 3.2：求解上三角形方程组的回代过程

输入：**U**，n，$\boldsymbol{b}$；输出：$\boldsymbol{x}$.

For $i=n, n-1, n-2, \cdots, 1$

　　If $u_{ii}=0$ **then** 停止；

　　$x_i := b_i$；

　　For $j=n, n-1, \cdots, i+1$

　　　　$x_i := x_i - u_{ij}x_j$；

　　End

　　$x_i := x_i / u_{ii}$；

End

求解一般的线性方程组时，算法 3.2 中的上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 就是算法 3.1 执行后的结果。算法 3.2 是计算公式

$$x_n = \frac{b_n}{u_{nn}}, \quad x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j}{u_{ii}}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1$$

的直接实现，它对矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的元素按一行一行的顺序读取，并且算法的执行不会更改矩阵 $\boldsymbol{U}$。

需要注意的是，算法 3.1 要求当前消去步的矩阵对角元 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，($k=1,2,3,\cdots,n-1$)，这里用上标(k)表明它与原始矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的对角元不同，而算法 3.2 要求矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的对角元不为零（这是矩阵 $\boldsymbol{U}$ 非奇异的要求）。高斯消去过程中的元素 $a_{kk}^{(k)}$ 被称为**主元**(pivot)。关于主元为 0 情况的处理，将在第 3.4 节讨论。

下面对高斯消去法的复杂度进行分析，先分析时间复杂度，即统计算法中浮点数乘除法和加减法的运算次数。先看算法 3.1，最外层循环的第 k 步计算 $n-k$ 次除法、$(n-k)(n-k+1)$次乘法，因此乘法、除法的总次数如下。

除法：$(n-1)+(n-2)+\cdots+1=\dfrac{n(n-1)}{2}$次。

乘法：$n(n-1)+(n-1)(n-2)+\cdots+2\times 1=\dfrac{(n+1)n(n-1)}{3}$次。

乘除法的总次数为$\dfrac{1}{3}n^3+\dfrac{1}{2}n^2-\dfrac{5}{6}n$。当 n 较大时，最高次项$\dfrac{1}{3}n^3$ 的值远大于其他低次

项,所以我们一般说,消去过程中浮点数乘除法的计算次数约为$\frac{1}{3}n^3$。从算法3.1可以看出,浮点数加减法的总次数与乘法次数一样多,大约为$\frac{1}{3}n^3$。

考虑算法3.2,乘除法的次数为$1+2+3+\cdots+n=\frac{1}{2}n^2+\frac{1}{2}n$,加减法的次数为$0+1+2+\cdots+n-1=\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n$。如果忽略低次项,回代过程中浮点数乘除法的计算次数约为$\frac{1}{2}n^2$,浮点数加减法的次数也与它差不多。

综上分析,用高斯消去法求解一个n阶线性方程组(依次执行算法3.1和算法3.2)大约需要做$n^3/3$次浮点数乘除法,以及$n^3/3$次浮点数加减法。至于空间复杂度,上述算法都采用原地工作方式,除了原始输入数据和结果,几乎不需要额外的存储空间。

3.2.2 高斯-约当消去法

前面讨论的高斯消去过程只将系数矩阵对角线下方的元素消为0,对此过程做一点修改,可以将对角线下方和上方的元素都消去。这样,系数矩阵就被变换为对角矩阵(甚至单位矩阵)。这种方法称为高斯-约当(Gauss-Jordan)消去法。下面以例3.5中的方程加以说明。

例3.6(高斯-约当消去法求解线性方程组):求解线性方程组

$$\begin{cases}10x_1-7x_2=7\\-3x_1+2x_2+6x_3=4\\5x_1-x_2+5x_3=6\end{cases}。$$

【解】 将此线性方程组写成增广矩阵的形式

$$\left[\begin{array}{ccc:c}10&-7&0&7\\-3&2&6&4\\5&-1&5&6\end{array}\right]。$$

高斯-约当消去法的求解过程就是对增广矩阵做初等行变换,消去对角线下方和上方的元素。具体步骤如下。

首先将第二个方程加上第一个方程的0.3倍,第三个方程减去第一个方程的0.5倍,得

$$\left[\begin{array}{ccc:c}10&-7&0&7\\0&-0.1&6&6.1\\0&2.5&5&2.5\end{array}\right]。$$

然后将第一个方程减去第二个方程的70倍,第三个方程加上第二个方程的25倍,得

$$\left[\begin{array}{ccc:c}10&0&-420&-420\\0&-0.1&6&6.1\\0&0&155&155\end{array}\right]。$$

最后将一个方程加上第三个方程的420/155倍,第二个方程减去第三个方程的6/155倍,得

$$\left[\begin{array}{ccc:c}10&0&0&0\\0&-0.1&0&0.1\\0&0&155&155\end{array}\right]。$$

此时系数矩阵变换为对角矩阵，每个方程可独立解出一个未知量，得到 $x_1=0$，$x_2=-1$，$x_3=1$。■

对一般的情况，下面给出高斯-约当消去法的算法描述。

算法 3.3：求解线性方程组的高斯-约当消去法

输入：$\boldsymbol{A}$，n，$\boldsymbol{b}$；输出：$\boldsymbol{x}$.

```
For k=1, 2,3,…, n
    If a_kk=0 then 停止 ;
    For i =1, 2,3,…, n 且 i≠k
        c :=a_ik/a_kk ;
        For j=k+1, k+2, …, n
            a_ij :=a_ij−c a_kj ;
        End
        b_i :=b_i−c b_k ;
    End
End
For i=1, 2,…, n
    x_i :=b_i/a_ii ;
End
```

与算法 3.1 一样，算法 3.3 也要求主元不等于 0。如图 3-5 所示，高斯-约当消去法将系数矩阵第 k 行的灰色部分乘以倍数后加到其他各行，使阴影区域对应的矩阵元素得以更新，最终执行 $k=n$ 对应的消去操作后，矩阵变为对角矩阵。

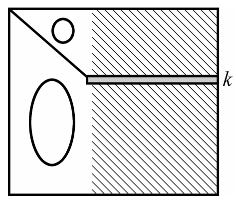

图 3-5　高斯-约当消去法对系数矩阵的操作示意图

下面分析高斯-约当消去法的算法复杂度。讨论时间复杂度时一般都忽略低次项，因此仅需考虑算法 3.3 中最内层 For 循环中执行的运算次数，乘法次数为

$$
\begin{aligned}
&(n-1)(n-1)+(n-1)(n-2)+\cdots+(n-1)\times 1\\
&=(n-1)\frac{n(n-1)}{2}\approx\frac{1}{2}n^3,
\end{aligned}
$$

加减法的次数也约为$\frac{1}{2}n^3$。所以，高斯-约当消去法的计算量大约比标准的高斯消去法多 50%。在空间复杂度方面，由于采用原地工作方式，几乎不需要额外的存储空间，但它也修改了原来的系数矩阵。

上面分析表明，高斯-约当消去法并不比标准的高斯消去法具有优势，一般不用它求解线性方程组。但由于高斯-约当消去法的消去过程中工作量分布均匀，解的所有分量可以同步算出，因此可以在一些并行算法中使用。

高斯-约当消去法的一个主要用途是计算矩阵的逆。在高斯-约当消去过程的基础上，对各矩阵行执行归一化操作可将其化为单位阵。将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 变为单位矩阵的一系列初等行变换对应初等变换矩阵 $\boldsymbol{E}_1$，$\boldsymbol{E}_2$，E_3，…，$\boldsymbol{E}_m$，则

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{E}_m\cdots\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}\\
\Rightarrow&\boldsymbol{E}_m\cdots\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1=\boldsymbol{A}^{-1}\\
\Rightarrow&\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{E}_m\cdots\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{I}。
\end{aligned}\tag{3.10}
$$

式(3.10)表明,如果将所有这些变换依次作用于单位矩阵,则得到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$。因此,得到如下的矩阵求逆算法。

算法 3.4:矩阵求逆算法

输入:$\boldsymbol{A}$, n ;输出:$\boldsymbol{B}$.

```
B :=I;
For k =1, 2, 3, …, n
    If a_kk =0 then 停止;
    For j=k+ 1,k+ 2,…, n
        a_kj :=a_kj /a_kk ;        {对当前行归一化}
    End
    For j=1, 2, 3, …, k
        b_kj :=b_kj /a_kk ;
    End
    For i=1, 2, 3,…, n 且 i≠k
        For j=k+1, k+2, …, n
            a_ij :=a_ij -a_ik a_kj ;
        End
        For j=1, 2, 3,…,k
            b_ij :=b_ij -a_ik b_kj ;
        End
    End
End
```

在算法 3.4 中,矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的初始值为单位矩阵,算法执行结束后,它变成 $\boldsymbol{A}^{-1}$。在算法最外层循环的第 k 步,初等变换对矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的操作如图 3-6 所示,其中灰色区域和阴影区域为要更改的矩阵元素。对算法 3.4 分析计算复杂度(结合图 3-6),可知求矩阵的逆大约需要 n^3 次乘除法和 n^3 次加减法。与前面几个算法一样,这个求逆算法采用原地工作方式,修改了矩阵 $\boldsymbol{A}$(虽然逆矩阵存储于 $\boldsymbol{B}$ 中)。

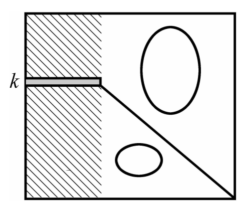

图 3-6　矩阵求逆过程中,对结果矩阵的操作示意图

例 3.7(矩阵求逆):求矩阵

$$
\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}10&-7&0\\-3&2&6\\5&-1&5\end{bmatrix}
$$

的逆矩阵。

【解】　使用算法 3.4 计算，为了表达方便，对增广矩阵$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{I}]$

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc}10 & -7 & 0 & 1 & 0 & 0\\ -3 & 2 & 6 & 0 & 1 & 0\\ 5 & -1 & 5 & 0 & 0 & 1\end{array}\right]$$

执行一系列初等行变换，使得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 变换为单位矩阵。具体步骤如下。

首先，对第一行执行归一化，得

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc}1 & -0.7 & 0 & 0.1 & 0 & 0\\ -3 & 2 & 6 & 0 & 1 & 0\\ 5 & -1 & 5 & 0 & 0 & 1\end{array}\right],$$

将第二行加上第一行的 3 倍，第三行减去第一行的 5 倍，得

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc}1 & -0.7 & 0 & 0.1 & 0 & 0\\ 0 & -0.1 & 6 & 0.3 & 1 & 0\\ 0 & 2.5 & 5 & -0.5 & 0 & 1\end{array}\right]。$$

然后，对第二行执行归一化，得

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc}1 & -0.7 & 0 & 0.1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & -60 & -3 & -10 & 0\\ 0 & 2.5 & 5 & -0.5 & 0 & 1\end{array}\right],$$

将第一行加上第二行的 0.7 倍，第三行减去第二行的 2.5 倍，得

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc}1 & 0 & -42 & -2 & -7 & 0\\ 0 & 1 & -60 & -3 & -10 & 0\\ 0 & 0 & 155 & 7 & 25 & 1\end{array}\right]。$$

最后，对第三行执行归一化，得

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc}1 & 0 & -42 & -2 & -7 & 0\\ 0 & 1 & -60 & -3 & -10 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0.0452 & 0.1613 & 0.0065\end{array}\right],$$

将第一行加上第三行的 42 倍，第二行加上第三行的 60 倍，得

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc}1 & 0 & 0 & -0.1032 & -0.2258 & 0.2710\\ 0 & 1 & 0 & -0.2903 & -0.3226 & 0.3871\\ 0 & 0 & 1 & 0.0452 & 0.1613 & 0.0065\end{array}\right],$$

为了简洁，这里只显示小数点后 4 位数字，最终得到

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\begin{bmatrix}-0.1032 & -0.2258 & 0.2710\\ -0.2903 & -0.3226 & 0.3871\\ 0.0452 & 0.1613 & 0.0065\end{bmatrix}。$$

■

应当注意的是，由于计算复杂度较高，在实际应用中应尽量避免对矩阵求逆。事实上，很多数学表达式中虽然包含了矩阵的逆，如 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$，但实际计算时并不需要真正计算 $\boldsymbol{A}^{-1}$，如求解方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 即得到 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ 的结果，这比求出 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 再做矩阵乘法更有效(矩阵乘法需要 n^3 次乘法运算)，也更准确。实际问题中真正需要 $\boldsymbol{A}$ 的逆的情况很少，因此一旦见到公式中的 $\boldsymbol{A}^{-1}$，首先应想到的是“解方程组”，而不是“求矩阵的逆”。

矩阵的条件数中包含了矩阵的逆,有时可以不精确计算条件数,而只是进行估计,相关的讨论见 3.7 节以及参考文献[1]。

3.3 矩阵的 LU 分解

本节首先讨论高斯消去过程的矩阵形式,引出矩阵的 LU 分解,然后给出一种直接计算 LU 分解的算法,最后介绍如何利用矩阵的 LU 分解求解线性方程组。

3.3.1 高斯消去过程的矩阵形式

高斯消去过程是通过一系列初等行变换将系数矩阵变为上三角矩阵的过程。根据线性代数知识,初等行变换可通过用初等变换矩阵左乘系数矩阵实现,而右乘初等变换矩阵则实现初等列变换。3 种初等变换矩阵 $\boldsymbol{E}^{(1)}$、$\boldsymbol{E}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{E}^{(3)}$ 具有如下形式:

$$\boldsymbol{E}^{(1)}=\begin{bmatrix}1&&&&\\&\ddots&&&\\&&c&&\\&&&\ddots&\\&&&&1\end{bmatrix},\ \boldsymbol{E}^{(2)}=\begin{bmatrix}\ddots&&&&\\&1&&&\\&&\ddots&&\\&c&&1&\\&&&&\ddots\end{bmatrix},\ \boldsymbol{E}^{(3)}=\begin{bmatrix}\ddots&&&&\\&0&&1&\\&&\ddots&&\\&1&&0&\\&&&&\ddots\end{bmatrix},$$

其中,矩阵中空白区域的元素均为 0,而对角线上“$\ddots$”处的元素均为 1。$\boldsymbol{E}^{(1)}$、$\boldsymbol{E}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{E}^{(3)}$ 分别对应倍乘变换、倍加变换和交换变换(交换两行或两列)。

对一般的 n 阶线性方程组,假设消去过程中的主元均不为 0,则只需使用行倍加变换。消去当前列中对角线下方的所有元素需要多次行倍加变换,它们可以统一用一个消去矩阵表示。

定义 3.12:若 $n\times n$ 的矩阵 $\boldsymbol{M}_k$ 具有如下形式:

$$\boldsymbol{M}_k=\begin{bmatrix}1&&&&\\&\ddots&&&\\&&1&&\\&&m_{k+1,k}&\ddots&\\&&\vdots&&\ddots\\&&m_{n,k}&&&1\end{bmatrix},\tag{3.11}$$

其中,除主对角线上和第 k 列最后 $n-k$ 个元素外的其他元素均为 0,则称 $\boldsymbol{M}_k$ 为第 k 类的 n 阶消去矩阵,下标 k 为类型数,m_{ik},$(i=k+1,k+2,\cdots,n)$为乘数(multiplier)。

根据这个定义,得到消去矩阵的一些性质。

定理 3.13:$n\times n$ 的消去矩阵满足如下性质:

(1) 消去矩阵为单位下三角矩阵,因此它一定非奇异。

(2) 若 $a_k\neq0$,且第 k 类的 n 阶消去矩阵 $\boldsymbol{M}_k$ 中的乘数 $m_{ik}=-a_i/a_k$,$(i=k+1,k+2,\cdots,n)$,则

$$\boldsymbol{M}_k\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}1&&&&\\&\ddots&&&\\&&1&&\\&&m_{k+1,k}&\ddots&\\&&\vdots&&\ddots\\&&m_{n,k}&&&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\\vdots\\a_k\\a_{k+1}\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_1\\\vdots\\a_k\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix},\tag{3.12}$$

即 $\boldsymbol{M}_k$ 可对向量 $\boldsymbol{a}$ 实施消元(使其第 $k+1$ 到第 n 个元素都变为 0);若 $a_k=0$，则不存在能对 $\boldsymbol{a}$ 实施相同消元功能的第 k 类消去矩阵。

(3) 消去矩阵 $\boldsymbol{M}_k$ 的逆矩阵为

$$\boldsymbol{M}_k^{-1}=\begin{bmatrix}1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & \ddots & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{n,k} & & & 1\end{bmatrix},$$

即它与 $\boldsymbol{M}_k$ 的区别只是乘数的符号相反。并且,$\boldsymbol{M}_k^{-1}$ 也是一个第 k 类消去矩阵(对应不同的向量 $\boldsymbol{a}$)。

(4) 如果 $\boldsymbol{M}_j$、$\boldsymbol{M}_k$($j>k$)分别为第 j 类、第 k 类消去矩阵,则乘积 $\boldsymbol{M}_k\boldsymbol{M}_j$ 也是单位下三角矩阵,且它的非零元素为 $\boldsymbol{M}_k$ 和 $\boldsymbol{M}_j$ 中非零元素的并集。更一般地,对 m 个($m<n$)消去矩阵 $\boldsymbol{M}_{k_j}$,$1\leqslant j\leqslant m$,若类型数 $k_1<k_2<\cdots<k_m$,则乘积 $\boldsymbol{M}_{k_1}\boldsymbol{M}_{k_2}\cdots\boldsymbol{M}_{k_m}$ 必为单位下三角矩阵,且它的非零元素为各个因子矩阵非零元素的并集。

定理 3.13 的性质(1)～(3)比较简单,也很直观,这里不再解释。下面对性质(4)做一些说明。首先看两个不同类消去矩阵相乘的情况,以 4 阶方阵为例,设

$$\boldsymbol{M}_1=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ m_{21} & 1 & 0 & 0\\ m_{31} & 0 & 1 & 0\\ m_{41} & 0 & 0 & 1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{M}_2=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & m_{32} & 1 & 0\\ 0 & m_{42} & 0 & 1\end{bmatrix},$$

显然,$\boldsymbol{M}_1$ 可看成是 3 个初等倍加变换依次作用于单位矩阵的结果,则计算 $\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{M}_2$ 只需对 $\boldsymbol{M}_2$ 做相应的 3 次初等行倍加变换,得到

$$\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{M}_2=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ m_{21} & 1 & 0 & 0\\ m_{31} & m_{32} & 1 & 0\\ m_{41} & m_{42} & 0 & 1\end{bmatrix},$$

即 $\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{M}_2$ 的非零元素为 $\boldsymbol{M}_1$ 和 $\boldsymbol{M}_2$ 的“并”。改变两个消去矩阵相乘的顺序,易得到如下结果:

$$\boldsymbol{M}_2\boldsymbol{M}_1=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ m_{21} & 1 & 0 & 0\\ m_{31}+m_{21}m_{32} & m_{32} & 1 & 0\\ m_{41}+m_{21}m_{42} & m_{42} & 0 & 1\end{bmatrix}。$$

$\boldsymbol{M}_2\boldsymbol{M}_1$ 仍是单位下三角矩阵,但不再是两个乘法因子矩阵的“并”了。基于类似的分析可证明上述性质(4),即当消去矩阵的类型数互不相同,且按从左到右递增的顺序相乘,其结果将是各个因子矩阵的“并”。

根据定义 3.12,高斯消去过程相当于对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不断左乘消去矩阵得到上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$,即

$$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{M}_{n-1}\cdots\boldsymbol{M}_2\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{A}, \tag{3.13}$$

其中,$\boldsymbol{M}_i(i=1,2,\cdots,n-1)$为第 i 类消去矩阵。由于消去矩阵均非奇异,因此式(3.13)等价于

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{M}_1^{-1}\boldsymbol{M}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{M}_{n-1}^{-1}\boldsymbol{U}, \tag{3.14}$$

根据定理3.13的性质(3),$\boldsymbol{M}_1^{-1}$、$\boldsymbol{M}_2^{-1}$、$\cdots$、$\boldsymbol{M}_{n-1}^{-1}$也都是消去矩阵,且它们的类型数分别为1、2、$\cdots$、$n-1$。令

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{M}_1^{-1}\boldsymbol{M}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{M}_{n-1}^{-1}, \tag{3.15}$$

根据定理3.13的性质(4),$\boldsymbol{L}$ 为单位下三角矩阵,因此

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}。 \tag{3.16}$$

式(3.16)被称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的LU分解(LU decomposition 或 LU factorization),也称为三角分解,其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角矩阵。$\boldsymbol{U}$ 为上三角矩阵。LU分解是一种重要的矩阵分解,也是高斯消去过程的矩阵形式表述。

定理3.14:对方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$,其中 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$,则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 存在唯一的LU分解的充分必要条件是执行高斯消去过程中的主元 $a_{kk}^{(k)}\neq 0(k=1,2,\cdots,n-1)$。

【证明】 只证明充分性,必要性的证明超出了本书的范围。前面的推导已说明LU分解的存在性,下面用反证法证明唯一性。

假设 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 是不唯一的,即存在两个单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}_1\neq\boldsymbol{L}_2$,或两个上三角矩阵 $\boldsymbol{U}_1\neq\boldsymbol{U}_2$,使得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{U}_2,$$

显然,$\boldsymbol{L}_1$、$\boldsymbol{L}_2$ 均为非奇异阵。

先考虑矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异的情况(这也是一般的情况)。由于 $\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{A}$,因此 $\boldsymbol{U}_1$ 为非奇异矩阵,上述方程等号两边左乘 $\boldsymbol{L}_2^{-1}$,然后右乘 $\boldsymbol{U}_1^{-1}$,得

$$\boldsymbol{L}_2^{-1}\boldsymbol{L}_1=\boldsymbol{U}_2\boldsymbol{U}_1^{-1} \tag{3.17}$$

由于 $\boldsymbol{L}_2^{-1}$ 是单位下三角矩阵,方程(3.17)的等号左边为单位下三角矩阵。类似地,等号右边为上三角矩阵。方程(3.17)成立的唯一可能是 $\boldsymbol{L}_2^{-1}\boldsymbol{L}_1=\boldsymbol{U}_2\boldsymbol{U}_1^{-1}=\boldsymbol{I}$,此时 $\boldsymbol{L}_1=\boldsymbol{L}_2$,$\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{U}_2$,与假设矛盾。

若 $\boldsymbol{A}$ 为奇异矩阵,$U_{nn}=0$,可用分块矩阵的技巧证明充分性。关于必要性的证明,感兴趣的读者请参考文献[30]。 ■

消去过程的最终结果是矩阵 $\boldsymbol{U}$,那么如何计算矩阵 $\boldsymbol{L}$ 呢?根据定理3.13以及式(3.15),矩阵 $\boldsymbol{L}$ 是 $n-1$ 个消去矩阵对角线下方元素取相反数再“合并”的结果,即

$$\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & 1 & \\ -m_{n1} & \cdots & -m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix},$$

其中,m_{ij} 为消去矩阵 $\boldsymbol{M}_j$ 中的乘数。设消去矩阵 $\boldsymbol{M}_1,\boldsymbol{M}_2,\cdots,\boldsymbol{M}_{n-1}$ 作用的对象分别为 $\boldsymbol{A}^{(1)}$,$\boldsymbol{A}^{(2)},\cdots,\boldsymbol{A}^{(n-1)}$,则 $m_{ij}=-a_{ij}^{(j)}/a_{jj}^{(j)}$,其中 $a_{jj}^{(j)}$ 为第 j 步消去步骤的主元。

综合上述讨论,得到用高斯消去过程进行矩阵LU分解的算法。