

甲部：核心概念

1 歐幾里得範數(Euclidean norm)

對於向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top$ ，其歐幾里得範數定義為

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}.$$

例子

若 $\mathbf{x} = (1, 3, 1)$ ，則 $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{1^2 + 3^2 + 1^2} = \sqrt{11}$ 。

備註

你可以驗證歐幾里得範數滿足以下性質：

1. $\|\mathbf{x}\| \geq 0$ ，且 $\|\mathbf{x}\| = 0$ 當且僅當 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ ，其中 $\mathbf{0}$ 為零向量。
2. 對所有 $\alpha \in \mathbb{R}$ ， $\|\alpha\mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|$ 。
3. （三角不等式）： $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ 。

在此基礎上，我們可以推廣並定義更一般的 p -範數。

2 向量的 p -範數(vector p -norm)

對於向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top$ ，其 p -範數定義為

$$\|\mathbf{x}\|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leq p \leq \infty.$$

例子

對於向量 $\mathbf{x} = (2, -3)^\top$ ， $\|\mathbf{x}\|_3 = \sqrt[3]{|2|^3 + |-3|^3} = \sqrt[3]{35}$ 。

備註

$\|\mathbf{x}\|_2$ 即為歐幾里得範數。此外，我們有

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

以及

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|.$$

你可以視後者為已知（雖然它亦可由定義導出，但需要一些技巧）。我們可以證明所有 p -範數均滿足範數的三個基本性質（包括三角不等式）。

其中 A 是 $m \times n$ 矩陣，元素為 a_{ij} ， \mathbf{x} 是 $n \times 1$ 向量， \mathbf{b} 是 $m \times 1$ 向量。

當 $m > n$ 時，稱為**過定(overdetermined)**方程組（條件數多於未知數）。當 $m < n$ 時，稱為**欠定(underdetermined)**方程組（條件數少於未知數）。

現階段我們關注 $m = n$ 的情況。由非奇異矩陣的定義可知，上述線性方程組有唯一解當且僅當 A 非奇異，解為 $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$ 。雖然概念上簡單，但當 n 很大時，實際求解非常困難。現今 $n = 1,000,000$ 的線性方程組在計算問題中經常出現。即使對於較小的 n ，也存在一些潛在的陷阱。我們將探討如何既高效又精確地求解 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 。

6 三角矩陣(Triangular matrix)

矩陣 L 稱為**下三角矩陣(lower triangular)**，若其對角線上方所有元素均為零：

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ l_{n1} & \cdots & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}.$$

注意其行列式為

$$\det(L) = l_{11}l_{22}\cdots l_{nn}$$

因此矩陣非奇異當且僅當所有對角元均非零。

例子

我們看到求解 $L\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 在 $n = 4$ 時十分容易。

方程組為

$$\begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix}$$

等價於

$$\begin{cases} l_{11}x_1 = b_1, \\ l_{21}x_1 + l_{22}x_2 = b_2, \\ l_{31}x_1 + l_{32}x_2 + l_{33}x_3 = b_3, \\ l_{41}x_1 + l_{42}x_2 + l_{43}x_3 + l_{44}x_4 = b_4. \end{cases}$$

我們可以逐步求解：

$$x_1 = \frac{b_1}{l_{11}}, \quad x_2 = \frac{b_2 - l_{21}x_1}{l_{22}}, \quad x_3 = \frac{b_3 - l_{31}x_1 - l_{32}x_2}{l_{33}}, \quad x_4 = \frac{b_4 - l_{41}x_1 - l_{42}x_2 - l_{43}x_3}{l_{44}}.$$

這方法是可行的，因為我們知道當解存在時， $l_{11}, l_{22}, l_{33}, l_{44}$ 皆為非零值。

一般地，任何下三角方程組 $L\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 可通過下式求解：

$$x_j = \frac{b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}x_k}{l_{jj}}, \quad j = 1, \dots, n.$$

類似地，上三角矩陣(upper triangular) U 具有形式

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & u_{nn} \end{pmatrix}$$

而上三角方程組 $U\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 可通過下式求解：

$$x_j = \frac{b_j - \sum_{k=j+1}^n u_{jk}x_k}{u_{jj}}, \quad j = n, \dots, 1.$$

7 高斯消元法(Gaussian elimination)

若矩陣 A 不是三角矩陣，我們可嘗試將其化為三角形式。高斯消元法使用基本行運算將方程組化為上三角形式 $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$ 。

基本行運算包括交換兩行，以及將一行的倍數加到另一行。這些運算不會改變解 \mathbf{x} ，但會改變矩陣 A 和右端項 \mathbf{b} 。

設 $A^{(1)} = A$ ， $b^{(1)} = b$ 。對於 $k = 1$ 到 $n - 1$ ，按以下步驟計算新矩陣 $A^{(k+1)}$ 和右端項 $b^{(k+1)}$ ：

1. $m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k + 1, \dots, n.$

2. 利用這些倍數消去第 $k + 1$ 至 n 條方程中的未知數 x_k ，得到：

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik}a_{kj}^{(k)}, \quad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik}b_k^{(k)}, \quad i, j = k + 1, \dots, n.$$

最終矩陣 $A^{(n)} = U$ 將會是一個上三角矩陣。這些符號可能看起來比較繁瑣，讓我們來看一個簡單的例子。

例子

將下列方程組化為上三角形式：

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, \\ x_1 - 2x_2 + 2x_3 = 4, \\ 2x_1 + 12x_2 - 2x_3 = 4. \end{cases}$$

矩陣表示：

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \\ 2 & 12 & -2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

從方程2減去1×方程1，從方程3減去2×方程1：

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, \\ -4x_2 + x_3 = 4, \\ 8x_2 - 4x_3 = 4. \end{cases}$$

更新後的矩陣：

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 8 & -4 \end{pmatrix}, \quad b^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad m_{21} = 1, \quad m_{31} = 2.$$

從方程3減去-2×方程2：

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, \\ -4x_2 + x_3 = 4, \\ -2x_3 = 12. \end{cases}$$

最終上三角形式：

$$A^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad b^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 12 \end{pmatrix}, \quad m_{32} = -2.$$

解為：

$$x_1 = 11, \quad x_2 = -\frac{5}{2}, \quad x_3 = -6.$$

8 LU分解(LU decomposition)

若 $n \times n$ 矩陣 A 可分解為 $A = LU$ ，其中 L 是對角元均為1的下三角矩陣， U 是上三角矩陣，則稱該分解為**LU分解**。

我們將看到，將 A 化為 U 的一系列列運算等價於左乘一個矩陣 F ，使得

$$FA = U, \quad Ux = Fb.$$

為此，注意到高斯消元法的第 k 步可寫成以下形式：

$$A^{(k+1)} = F^{(k)} A^{(k)}, \quad b^{(k+1)} = F^{(k)} b^{(k)}, \quad \text{其中} \quad F^{(k)} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & -m_{k+1,k} & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & -m_{n,k} & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

左乘 $F^{(k)}$ 的效果是：對所有 $i = k + 1, \dots, n$ ，從第 i 行中減去第 k 行的 $-m_{ik}$ 倍。

例子

在前面的例子中可驗證

$$F^{(1)}A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \\ 2 & 12 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1-1(1) & -2-1(2) & 2-1(1) \\ 2-2(1) & 12-2(2) & -2-2(1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 8 & -4 \end{pmatrix} = A^{(2)},$$

$$F^{(2)}A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 8 & -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 8+2(-4) & -4+2(1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} = A^{(3)} = U.$$

於是

$$U = A^{(n)} = F^{(n-1)}F^{(n-2)} \dots F^{(1)}A.$$

現在 $F^{(k)}$ 是可逆的，其逆矩陣只需將原本的「減去行」改為「加上行」即可得出：

$$(F^{(k)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & m_{k+1,k} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & m_{n,k} & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

因此 $A = (F^{(1)})^{-1}(F^{(2)})^{-1} \dots (F^{(n-1)})^{-1}U$.

由於各個連續運算之間並不會互相干擾，或者透過直接計算，我們可以寫成：

$$(F^{(1)})^{-1}(F^{(2)})^{-1} \dots (F^{(n-1)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ m_{2,1} & 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ m_{3,1} & m_{3,2} & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ m_{4,1} & m_{4,2} & m_{4,3} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1 & 0 \\ m_{n,1} & m_{n,2} & m_{n,3} & \dots & m_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} := L.$$

從而得到LU 分解。

方程組 $Ax = b$ 變為 $LUx = b$ ，我們可令 $Ux = y$ 依次求解：先解 $Ly = b$ 得 y ，再解 $Ux = y$ 得 x 。兩者均為三角方程組。

例子

用LU 分解求解之前的同一個問題。

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \\ 2 & 12 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

我們像之前一樣進行高斯消元，但暫時忽略右端項 b ，得到

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

在消元過程中，我們記錄乘數(multipliers) m_{ik} ，以構造矩陣

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

於是得到分解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \\ 2 & 12 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

有了 L 和 U ，我們可以對任意右端項 b 求解。我們以當前的 b 為例說明。首先，求解 $Ly = b$ ：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix} \implies y_1 = 0, \quad y_2 = 4 - y_1 = 4, \quad y_3 = 4 - 2y_1 + 2y_2 = 12.$$

注意 y 正是之前構造的右端項 $b^{(3)}$ 。然後，求解 $Ux = y$ ：

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 12 \end{pmatrix} \implies x_3 = -6, \quad x_2 = -\frac{1}{4}(4 - x_3) = -\frac{5}{2}, \quad x_1 = -2x_2 - x_3 = 11.$$

9 選主元(Pivoting)

若對角線上出現零，高斯消元法和LU 分解都將失效。但這並不意味著矩陣 A 是奇異的。

例子

方程組

$$\begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

顯然有解 $x_1 = x_2 = x_3 = 1$ 。但高斯消元法會失敗，因為 $a_{11}^{(1)} = 0$ ，無法計算 m_{21} 和 m_{31} 。

不過，我們可以通過交換方程的順序來避免問題，得到等價方程組

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

現在高斯消元法沒有問題。

交換行或列稱為**選主元**。當主元為零時（如上例），需要選主元。此外，選主元也可用於減少捨入誤差。

例子

考慮方程組

$$\begin{pmatrix} 10^{-4} & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

1. 使用精確算術進行高斯消元：

$$m_{21} = -10^4, \quad a_{22}^{(2)} = 2 + 10^4, \quad b_2^{(2)} = 1 + 10^4.$$

故此，經回代法得出解為：

$$x_2 = \frac{1 + 10^4}{2 + 10^4} = 0.9999, \quad x_1 = \frac{1 - x_2}{a_{11}} = 10^4 \left(1 - \frac{1 + 10^4}{2 + 10^4} \right) = \frac{10^4}{2 + 10^4} = 0.9998.$$

2. 現在以3位有效數字算術進行計算。我們得到：

$$m_{21} = \text{fl}(-10^4) = -10^4, \quad a_{22}^{(2)} = \text{fl}(2 + 10^4) = 10^4, \quad b_2^{(2)} = \text{fl}(1 + 10^4) = 10^4.$$

回代得

$$x_2 = \text{fl}\left(\frac{10^4}{10^4}\right) = 1, \quad x_1 = \text{fl}(10^4(1 - 1)) = 0.$$

由於 m_{21} 很大，產生了捨入誤差，隨後在計算 x_1 時導致有效數字損失。

3. 若先交換方程順序，便能以3位有效數字算術得出正確計算結果：

$$\begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 10^{-4} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

現在，

$$m_{21} = \text{fl}(-10^{-4}) = -10^{-4}, \quad a_{22}^{(2)} = \text{fl}(1 + 10^{-4}) = 1, \quad b_2^{(2)} = \text{fl}(1 + 10^{-4}) = 1,$$

且

$$x_2 = \text{fl}\left(\frac{1}{1}\right) = 1, \quad x_1 = \text{fl}(-[1 - 2(1)]) = 1.$$

此時 x_1 和 x_2 均精確至3位有效數字。

10 正交性(Orthogonality)

回想兩個列向量 $x, y \in \mathbb{R}^n$ 的內積(inner product) 定義為

$$x \cdot y = x^\top y = \sum_{k=1}^n x_k y_k.$$

它與2-範數的關係為 $\|x\|_2 = \sqrt{x^\top x}$ 。向量 x 與 y 的夾角 θ 滿足

$$x^\top y = \|x\|_2 \|y\|_2 \cos \theta.$$

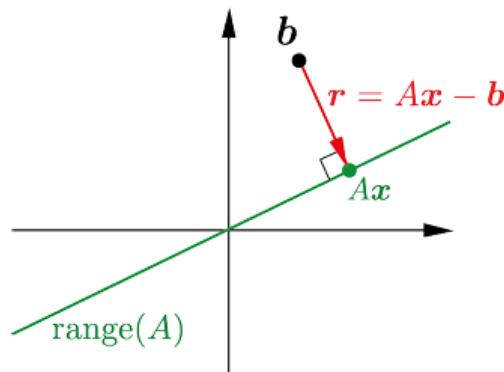
若 $x^\top y = 0$ ，則稱向量 x 與 y 互相正交(orthogonal)。

設 $S = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 為一組 n 個向量。若對所有 $i \neq j$ 均有 $x_i^\top x_j = 0$ ，則稱 S 為正交集。

11 離散最小二乘問題(Discrete least-squares problem)

在本節中，我們感興趣的是當 A 為一個 $m \times n$ 長方矩陣且 $m > n$ 的情況，此時線性方程組 $Ax = b$ 是超定(overdetermined) 的，通常沒有精確解。但我們仍可尋找近似解。**離散最小二乘問題**便是要尋找一個能使2-範數 $\|Ax - b\|_2$ 最小化的 x 。

若要解決此問題，從幾何角度思考會很有幫助。 A 的值域，記作 $\text{range}(A)$ ，為所有可能向量 $Ax \in \mathbb{R}^m$ (其中 $x \in \mathbb{R}^n$) 的集合。它只是 \mathbb{R}^m 中的一個子空間，通常不包含 b 。因此我們要尋找 $x \in \mathbb{R}^n$ ，使得 Ax 在 \mathbb{R}^m 中(以2-範數距離衡量) 盡可能接近 b 。



從 Ax 到 b 的距離由 $\|r\|_2 = \|Ax - b\|_2$ 給出。從幾何上可以觀察到，當 r 與 Ax 正交時， $\|r\|_2$ 將達到最小值，即：

$$(Ax)^\top (Ax - b) = 0 \iff x^\top (A^\top Ax - A^\top b) = 0.$$

當 x 滿足以下 $n \times n$ 線性方程組時，上述條件即成立：

$$A^\top Ax = A^\top b.$$

注意 $A^\top A$ 是 $n \times n$ 矩陣，我們可用之前介紹的方法求解。

例子

對數據 $f(-3) = f(0) = 0$, $f(6) = 2$ 擬合最小平方方法直線。

這裡 $n = 1$ (擬合直線), $m = 2$ (3 個數據點), 故 $x_0 = -3$, $x_1 = 0$, $x_2 = 6$ 。

過定方程組為

$$\begin{pmatrix} 1 & -3 \\ 1 & 0 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix},$$

正規方程為

$$\begin{pmatrix} 3 & x_0 + x_1 + x_2 \\ x_0 + x_1 + x_2 & x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) \\ x_0 f(x_0) + x_1 f(x_1) + x_2 f(x_2) \end{pmatrix}$$
$$\iff \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 45 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 12 \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{7} \\ \frac{5}{21} \end{pmatrix}.$$

因此, 利用直線進行的最小平方近似為:

$$p_1(x) = \frac{3}{7} + \frac{5}{21}x.$$

12 特徵值與特徵向量 (Eigenvalues and eigenvectors)

設 A 為 $n \times n$ 實矩陣。非零向量 $v \in \mathbb{R}^n$ 稱為 A 的**特徵向量(eigenvector)**, 若存在純量 λ 使得 $Av = \lambda v$ 。純量 λ 稱為對應於特徵向量 v 的**特徵值(eigenvalue)**。

例子

$$\text{設 } A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}, \quad v_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \text{及} \quad v_2 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

由於 $Av_1 = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 2 \end{pmatrix} = -2 \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = -2v_1$, v_1 是 A 的特徵向量, 對應的特徵值 $\lambda_1 = -2$ 。另外,

$$Av_2 = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15 \\ 20 \end{pmatrix} = 5 \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = 5v_2,$$

所以 v_2 是 A 的特徵向量, 對應的特徵值 $\lambda_2 = 5$ 。

定理及其證明

設 A 為 $n \times n$ 實矩陣。則 λ 是 A 的特徵值當且僅當 $\det(A - \lambda I_n) = 0$ 。

證明:

λ 是 A 的特徵值的特徵值當且僅當存在非零向量 $v \in \mathbb{R}^n$ 使得 $Av = \lambda v$, 即 $(A - \lambda I_n)(v) = 0$ 。這等價於 $A - \lambda I_n$ 不可逆, 而這又等價於 $\det(A - \lambda I_n) = 0$ 。多項式 $f(t) = \det(A - tI_n)$ 稱為 A 的**特徵多項式**。

例子

若要求解 A 的特徵值, 我們計算其特徵多項式:

$$\det(A - tI_2) = \det \begin{pmatrix} 1-t & 1 \\ 4 & 1-t \end{pmatrix} = t^2 - 2t - 3 = (t-3)(t+1).$$

由定理可知, A 的特徵值僅有 3 和 -1。

乙部：基礎問題

1. 考慮向量 $a = (1, -2, 3)^T$, $b = (2, 0, -1)^T$, $c = (0, 1, 4)^T$ 。求 a 、 b 、 c 的 1-範數、2-範數和無窮範數。並驗證對單一向量 x , 範數滿足 $\|x\|_1 \geq \|x\|_2 \geq \|x\|_\infty$ 。

2. 設 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}$ 。用 2-範數度量時, \mathbb{R}^2 中的單位向量可寫為 $x = (\cos \theta, \sin \theta)^T$ 。此時 $Ax = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ 3 \cos \theta \end{pmatrix}$ 。利用此事實求 $\|A\|_2$ 。

3. 對矩陣 $A = \begin{pmatrix} -7 & 3 & -1 \\ 2 & 4 & 5 \\ -4 & 6 & 0 \end{pmatrix}$, 求 $\|A\|_1$ 和 $\|A\|_\infty$ 的值。

4. 用高斯消元法解下列線性方程組。

$$(a) \begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 = -1 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \\ 3x_1 + 5x_2 - 2x_3 = -1 \end{cases}$$

$$(b) \begin{cases} x_1 - 2x_2 - x_3 = 1 \\ 2x_1 - 3x_2 + x_3 = 6 \\ 3x_1 - 5x_2 = 7 \\ x_1 + 5x_3 = 9 \end{cases}$$

$$(c) \begin{cases} x_1 + 2x_2 + 2x_4 = 6 \\ 3x_1 + 5x_2 - x_3 + 6x_4 = 17 \\ 2x_1 + 4x_2 + x_3 + 2x_4 = 12 \\ 2x_1 - 7x_3 + 11x_4 = 7 \end{cases}$$

$$(d) \begin{cases} x_1 - x_2 - 2x_3 + 3x_4 = -63 \\ 2x_1 - x_2 + 6x_3 + 6x_4 = -2 \\ -2x_1 + x_2 - 4x_3 - 3x_4 = 0 \\ 3x_1 - 2x_2 + 9x_3 + 10x_4 = -5 \end{cases}$$

5. 設 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 3 & 8 & 14 \\ 2 & 6 & 13 \end{pmatrix} = LU$, 其中 $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ L_{21} & 1 & 0 \\ L_{31} & L_{32} & 1 \end{pmatrix}$, $U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{pmatrix}$ 。

(a) 用直接矩陣乘法求 LU 分解。

(b) 用高斯消元法求 LU 分解。

6. 求矩陣 $A = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 12 & -3 \end{pmatrix}$ 的所有特徵值與特徵向量。

7. 在最小二乘法意義下求解 $Ax = b$, 其中 $A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ 。

丙部：進階問題

8. 考慮以下三對角矩陣

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

(a) 求 A 的 LU 分解。

(b) 利用上述結果解以下線性方程組：

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & 4 & -1 & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \\ 0 \\ 6 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

9. 設 A 為 $n \times n$ 可逆方陣。證明：若 λ 是 A 的特徵值，則 $\frac{1}{\lambda}$ 是 A^{-1} 的特徵值。

丁部：解答

1.

$$\begin{aligned}\|a\|_1 &= 1 + 2 + 3 = 6 & \|b\|_1 &= 2 + 0 + 1 = 3 & \|c\|_1 &= 0 + 1 + 4 = 5 \\ \|a\|_2 &= \sqrt{1+4+9} \approx 3.74 & \|b\|_2 &= \sqrt{4+0+1} \approx 2.24 & \|c\|_2 &= \sqrt{0+1+16} \approx 4.12 \\ \|a\|_\infty &= \max\{1, 2, 3\} = 3 & \|b\|_\infty &= \max\{2, 0, 1\} = 2 & \|c\|_\infty &= \max\{0, 1, 4\} = 4.\end{aligned}$$

2.

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \max_{\theta} (\sin^2 \theta + 9 \cos^2 \theta)^{1/2} = \max_{\theta} (1 + 8 \cos^2 \theta)^{1/2} = 3.$$

3.

$$\|A\|_1 = \max\{13, 13, 6\} = 13, \quad \|A\|_\infty = \max\{11, 11, 10\} = 11.$$

4. 高斯消元過程如下：

(a)

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & -1 \\ 0 & -2 & 3 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1.5 & -1.5 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1.5 & -1.5 \\ 0 & 0 & -0.5 & 0.5 \end{array} \right)$$

最終解為

$$\begin{cases} x_1 = 4 \\ x_2 = -3 \\ x_3 = -1 \end{cases}$$

(b)

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & -1 & 1 \\ 2 & -3 & 1 & 6 \\ 3 & -5 & 0 & 7 \\ 1 & 0 & 5 & 9 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 4 \\ 0 & 2 & 6 & 8 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

最終解為

$$\begin{cases} x_1 = 9 - 5a \\ x_2 = 4 - 3a \\ x_3 = a \end{cases}$$

其中 $a \in \mathbb{R}$ 為任意常數。

(c)

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 0 & 2 & 6 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & -4 & -7 & 7 & -5 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 0 & 2 & 6 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & 7 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 0 & 2 & 6 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{array} \right)$$

最終解為

$$\begin{cases} x_1 = 2 \\ x_2 = 3 \\ x_3 = -2 \\ x_4 = -1 \end{cases}$$

(d)

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -1 & -2 & 3 & -63 \\ 0 & 1 & 10 & 0 & 124 \\ 0 & -1 & -8 & 3 & -126 \\ 0 & 1 & 15 & 1 & 184 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -1 & -2 & 3 & -63 \\ 0 & 1 & 10 & 0 & 124 \\ 0 & 0 & 2 & 3 & -2 \\ 0 & 0 & 5 & 1 & 60 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -1 & -2 & 3 & -63 \\ 0 & 1 & 10 & 0 & 124 \\ 0 & 0 & 2 & 3 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -6.5 & 65 \end{array} \right)$$

最終解為

$$\begin{cases} x_1 = -21 \\ x_2 = -16 \\ x_3 = 14 \\ x_4 = -10 \end{cases}$$

5. (a) 將 LU 相乘並使其等於 A ，得

$$\begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ L_{21}U_{11} & L_{21}U_{12} + U_{22} & L_{21}U_{13} + U_{23} \\ L_{31}U_{11} & L_{31}U_{12} + L_{32}U_{22} & L_{31}U_{13} + L_{32}U_{23} + U_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 3 & 8 & 14 \\ 2 & 6 & 13 \end{pmatrix}.$$

由此得

$$U_{11} = 1, \quad U_{12} = 2, \quad U_{13} = 4.$$

考慮第二列，得

$$L_{21} = 3, \quad U_{22} = 2, \quad U_{23} = 2$$

解出其餘未知量，得

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 3 & 8 & 14 \\ 2 & 6 & 13 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

(b) 用高斯消元法會得到相同的結果。

6.

$$A - \lambda I = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 12 & -3 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 - \lambda & 1 \\ 12 & -3 - \lambda \end{pmatrix}$$

解方程

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

得特徵值為 $\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_2 = -6$ 。

對於 $\lambda_1 = 1$ ：

$$(A - I)\mathbf{v} = \begin{pmatrix} -3 & 1 \\ 12 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

得

$$-3v_1 + v_2 = 0 \Rightarrow \mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

對於 $\lambda_2 = -6$ ：

$$(A + 6I)\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 12 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

得

$$4v_1 + v_2 = 0 \Rightarrow \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -4 \end{pmatrix}$$

因此特徵值為 $\lambda_1 = 1$ ， $\lambda_2 = -6$ 。對應的特徵向量為 $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$ ， $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -4 \end{pmatrix}$ 。

7. 注意

$$A^T A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 18 & -4 \\ 0 & -4 & 2 \end{pmatrix}$$

由 $A^T A x = A^T b$ 得

$$x = \begin{pmatrix} \frac{5}{4} \\ \frac{1}{4} \\ -1 \end{pmatrix}$$

8. (a) 直接進行 LU 分解，得

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 & c_1 & & & \\ & v_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & v_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & v_n \end{pmatrix}$$

其中 $l_k = \frac{a_k}{v_{k-1}}$ ， $v_k = b_k - l_k c_{k-1}$ ($k = 2, \dots, n$)，且 $v_1 = b_1$ 。

(b) 對給定的方程組， LU 分解為：

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{4} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{4}{15} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{15}{56} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{56}{209} & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{15}{4} & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{56}{15} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{209}{56} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{780}{209} \end{pmatrix}$$

用前代法解 $Ly = b$ ：

$$\begin{cases} y_1 = 2 \\ y_2 = 6 + \frac{1}{4}y_1 = \frac{13}{2} \\ y_3 = 0 + \frac{4}{15}y_2 = \frac{26}{15} \\ y_4 = 6 + \frac{15}{56}y_3 = \frac{347}{56} \\ y_5 = 2 + \frac{56}{209}y_4 = \frac{780}{209} \end{cases}$$

再用回代法解 $Ux = y$ ：

$$\begin{cases} x_5 = \frac{y_5}{u_{55}} = 1 \\ x_4 = \frac{y_4 + x_5}{u_{44}} = 2 \\ x_3 = \frac{y_3 + x_4}{u_{33}} = 1 \\ x_2 = \frac{y_2 + x_3}{u_{22}} = 2 \\ x_1 = \frac{y_1 + x_2}{u_{11}} = 1 \end{cases}$$

9. 由於 λ 是 A 的特徵值，存在非零 $n \times 1$ 矩陣 x 滿足

$$Ax = \lambda x$$

則

$$A^{-1}Ax = \lambda A^{-1}x$$

因此

$$x = \lambda A^{-1}x \rightarrow A^{-1}x = \frac{1}{\lambda}x$$

證畢。