计算方法

刘景铖

计算机软件新技术国家重点实验室
南京大学

回顾

上节课：

- 最小二乘法
- 正交系统中的最小二乘法

正交系统中的最小二乘法：离散三角级数

给定数据点 $\{x_j, y_j\}_{j=0}^{2m-1}$，其中 $x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0,1,\dots,2m-1$
能否找到系数 $\{a_i, b_i\}$ 使得，$\forall j$

$$y_j \approx \frac{a_0}{2} + a_n \cos nx_j + \sum_{k=1}^{n-1}\left(a_k \cos kx_j + b_k \sin kx_j\right)$$

使用最小二乘法建模：

- 思考：这里的变量是什么，线性关系是什么？
- 记误差向量为

$$E(x_j) \coloneqq f(x_j) - \left(\frac{a_0}{2} + a_n \cos nx_j + \sum_{k=1}^{n-1}\left(a_k \cos kx_j + b_k \sin kx_j\right)\right)$$

- 考虑 $\|E(x)\|_2^2 = \sum_{j=0}^{2m-1} E(x_j)^2$
- 这里的离散三角级数也有正交性
- 因此也可以证明

$$a_k = \frac{1}{m}\sum_{j=0}^{2m-1} y_j \cos kx_j$$

$$b_k = \frac{1}{m}\sum_{j=0}^{2m-1} y_j \sin kx_j$$

离散三角级数的正交性

设 $\phi_0 = 1,$

$$\phi_k(x) = \cos(kx), k = 1,2, \dots, n,$$
$$\phi_{n+k}(x) = \sin(kx), k = 1,2, \dots, n-1$$

则函数族$\phi_0(x), \phi_1(x), \dots$在$[-\pi, \pi]$上是正交的

正交性的离散版本：

考虑对 $[-\pi, \pi]$进行2m等分：

$$x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0,1, \dots, 2m-1$$

则 $\sum_{j=0}^{2m-1} \phi_k(x_j)\phi_l(x_j) = 0, \forall k \neq l$

离散三角级数的正交性

正交性的离散版本：

考虑对 $[-\pi,\pi]$进行2m等分：

$$\phi_k(x)=\cos(kx),k=1,2,\dots,n,$$
$$\phi_{n+k}(x)=\sin(kx),k=1,2,\dots,n-1$$

$$x_j=-\pi+\frac{j}{m}\pi,j=0,1,\dots,2m-1$$

则 $\sum_{j=0}^{2m-1}\phi_k(x_j)\phi_l(x_j)=0,\forall k\neq l$

主要思路：

同样使用积化和差

$$\cos(kx_j)\sin(lx_j)=\frac{1}{2}(\sin(l+k)\,x_j+\sin(l-k)\,x_j)$$

类似可得其它的正交性

离散三角级数的正交性

正交性的离散版本：

考虑对 $[-\pi,\pi]$进行2m等分：

$$\phi_k(x)=\cos(kx),k=1,2,\dots,n,$$
$$\phi_{n+k}(x)=\sin(kx),k=1,2,\dots,n-1$$

$$x_j=-\pi+\frac{j}{m}\pi,j=0,1,\dots,2m-1$$

则 $\sum_{j=0}^{2m-1}\phi_k(x_j)\phi_l(x_j)=0,\forall k\neq l$

我们将使用如下引理：

设整数r不能整除$2m$，则

$\sum_{j=0}^{2m-1}\cos(rx_j)=0,\sum_{j=0}^{2m-1}\sin(rx_j)=0.$

并且，$\sum_{j=0}^{2m-1}\cos^2(rx_j)=m,\sum_{j=0}^{2m-1}\sin^2(rx_j)=m.$

证明将会使用到复数，而且本质上和傅里叶变换的正交性证明一样

傅里叶变换 (Fourier Transform)：多项式乘法

给定：最多n次的多项式$p(x), q(x)$的系数
目标：求它们的乘积$r(x) = p(x)q(x)$的系数

多项式的表示方式：

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \cdots + a_n x^n$$

1. 多项式的系数$a_0, a_1, \ldots, a_n$
   - 计算$r(x) = p(x)q(x)$需要$O(n^2)$
   - $c_k = \sum_{j=0}^{k} a_j b_{k-j}$
2. 多项式插值：选定基点$x_0, x_1, \ldots, x_m$，写下$p(x_0), p(x_1), \ldots, p(x_m)$，则多项式$p(x)$是唯一确定的
   - 计算$r(x) = p(x)q(x)$只需要$O(n)$
   - 令$m \geq 2n + 1$，计算$r(x_0), r(x_1), \ldots, r(x_m)$只需要写下$p(x_0)q(x_0), p(x_1)q(x_1), \ldots, p(x_m)\ q(x_m)$

多项式乘法

给定：最多n次的多项式$p(x), q(x)$的系数
目标：求它们的乘积$r(x) = p(x)q(x)$的系数

想法：

1. 给定$p(x), q(x)$的系数
2. 令$m \geq 2n + 1$，选定基点$x_0, x_1, \ldots, x_m$，计算$p(x_0), \ldots, p(x_m)$和$q(x_0), \ldots, q(x_m)$
3. 计算$r(x_j) = p(x_j)q(x_j)$
4. 对$\{r(x_j)\}$插值，得到$r(x) = p(x)q(x)$的系数

愿望：

- 第2步只需要$O(n \log n)$
- 第4步也只需要$O(n \log n)$
- 这样总的步骤就只需要$O(n \log n)$

复数 (Complex number)

$$z = a + b\,i = r\,e^{i\,\theta}, i = \sqrt{-1}$$

单位根

n次单位根 = $\{z \in C : z^n = 1\}$

2次单位根=$\{\pm 1\}$

4次单位根=$\{\pm 1, \pm i\}$

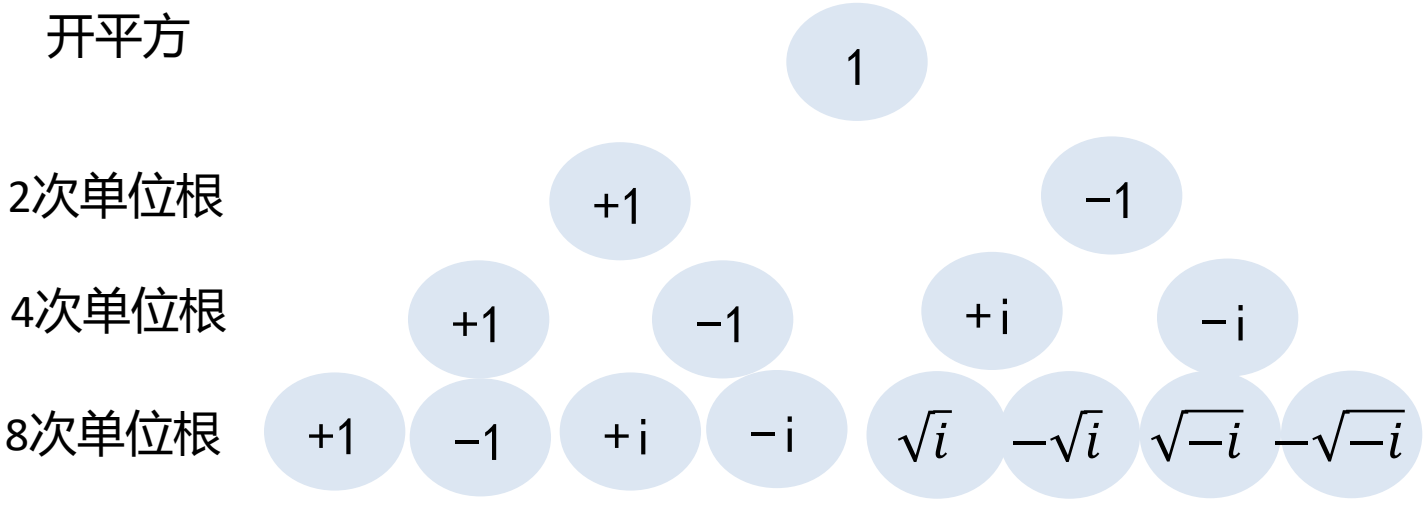
在复平面上的单位圆上，等距分布的n个点

$$e^{\frac{2\pi l}{n}i} = \cos\frac{2\pi l}{n} + i\sin\frac{2\pi l}{n}, l = 0,1,\dots,n-1$$

在这节课中，我们主要关心$n = 2^k$次单位根

共轭复数: $\bar{z} = a - b\,i$

复数 (Complex number):单位根



- 从上往下，开平方
- 从下往上，平方
- 如果x是一个单位根，则$-x$也是

离散傅里叶变换 (Discrete Fourier Transform)

DFT

- 输入：多项式的系数$a_0, a_1, \ldots, a_n$

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$$

- 输出：选定$x_0, x_1, \ldots, x_m$为m+1次单位根，计算$p(x_0), \ldots, p(x_m)$

例子：计算[1,1,1,1]的DFT.

- $p(x) = 1 + x + x^2 + x^3$
- 4次单位根=$\{\pm 1, \pm i\}$
- $p(1)$ =4
- $p(x)$ =0 otherwise

注意：书上的定义中还要除上$\sqrt{n+1}$

离散傅里叶变换 (Discrete Fourier Transform)

DFT

- 输入：多项式的系数$a_0, a_1, \ldots, a_n$

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$$

- 输出：选定$x_0, x_1, \ldots, x_m$为m+1次单位根，计算$p(x_0), \ldots, p(x_m)$

逆变换（插值）

- 输入：给定$x_0, x_1, \ldots, x_m$为m+1次单位根，以及$p(x_0), \ldots, p(x_m)$
- 输出： 多项式的系数$a_0, a_1, \ldots, a_n$

快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

FFT：分治

输入：n次多项式$p(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$
输出：$p(x)$在n+1次单位根上的值

计算$(n+1)/2$次多项式在$(n+1)/2$次单位根上的值

计算$(n+1)/2$次多项式在$(n+1)/2$次单位根上的值

只需要O(n)次操作合并

快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

输入：n次多项式$p(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$
输出：$p(x)$在n+1次单位根上的值

FFT：分治

$$E(z) = a_0 + a_2 z + a_4 z^2 + a_6 z^3 + \ \dots$$
$$O(z) = a_1 + a_3 z + a_5 z^2 + a_7 z^3 + \ \dots$$

观察:

$$p(z) = E(z^2) + z\, O(z^2)$$

$$p(\{n+1\text{次单位根}\}) \leftarrow E(\{n+1\text{次单位根}\}^2), O(\{n+1\text{次单位根}\}^2)$$

$$\{n+1\text{次单位根}\}^2 = \{(n+1)/2\text{次单位根}\}$$

特别地 $p(-z) = E(z^2) - z\, O(z^2)$

$E(z)$， $O(z)$ 的次数为 $(n+1)/2$次

$$\mathrm{FFT}(a_0, a_1, .., a_n) \leftarrow \mathrm{FFT}(a_0, a_2, \dots), \mathrm{FFT}(a_1, a_3, \dots)$$

快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

Figure 2.7 The fast Fourier transform (polynomial formulation)

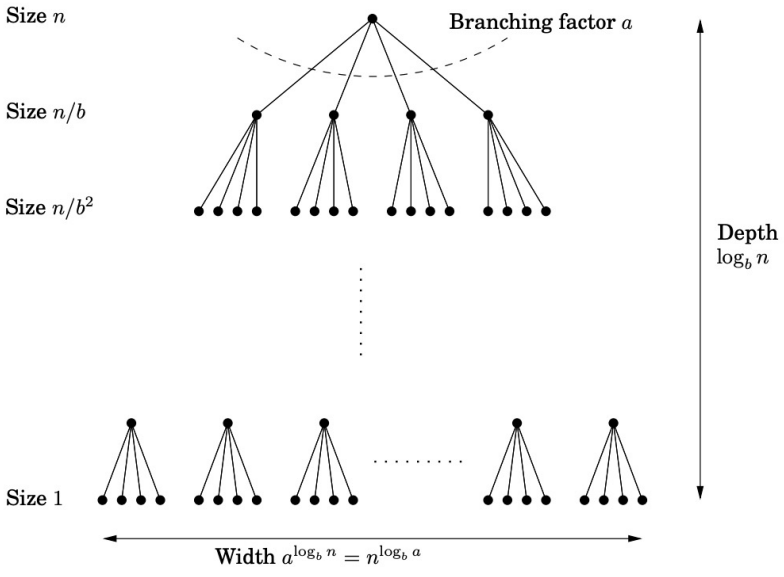
```
function FFT(A, ω)
Input:  Coefficient representation of a polynomial A(x)
        of degree ≤ n − 1, where n is a power of 2
        ω, an nth root of unity
Output:  Value representation A(ω^0), ..., A(ω^{n−1})

if ω = 1:  return A(1)
express A(x) in the form A_e(x^2) + xA_o(x^2)
call FFT(A_e, ω^2) to evaluate A_e at even powers of ω
call FFT(A_o, ω^2) to evaluate A_o at even powers of ω
for j = 0 to n − 1:
   compute A(ω^j) = A_e(ω^{2j}) + ω^j A_o(ω^{2j})

return A(ω^0), ..., A(ω^{n−1})
```

Source: Algorithms by S. Dasgupta, C.H. Papadimitriou, and U.V. Vazirani

快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

- 记$T(n)$为n阶FFT需要的操作次数
- $T(n) = 2T\left(\frac{n}{2}\right) + Cn$
- $T(n) = 4T\left(\frac{n}{4}\right) + 2Cn = \cdots$
- 设$n = 2^k$,
- $T(n) = 2^k T\left(\frac{n}{2^k}\right) + kCn$
- $T(n) = O(n \log n)$

Figure 2.3 Each problem of size n is divided into a subproblems of size n/b.



then

$$T(n) = \begin{cases} O(n^d) & \text{if } d > \log_b a \\ O(n^d \log n) & \text{if } d = \log_b a \\ O(n^{\log_b a}) & \text{if } d < \log_b a\,. \end{cases}$$

Source: Algorithms by S. Dasgupta, C.H. Papadimitriou, and U.V. Vazirani

快速傅里叶逆变换 (Inverse FFT)

逆变换（插值）

- 输入：给定$x_0, x_1, \dots, x_m$为m+1次单位根，以及$p(x_0), \dots, p(x_m)$
- 输出： 多项式的系数$a_0, a_1, \dots, a_n$

考虑n+1次单位根：$\omega = e^{\frac{2\pi}{n+1}i} = \cos\frac{2\pi}{n+1} + i\sin\frac{2\pi}{n+1}$

DFT: $p(\omega^l) = \sum_{j=0}^{n} a_j \omega^{lj}$

FFT:快速计算DFT的算法

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$$

Inverse FFT: $a_l = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} p\left(\omega^j\right)\omega^{-lj}$

也是一个DFT, 唯一区别是把$\omega \to \omega^{-1}$，并且前面多了系数$\frac{1}{n+1}$

傅里叶变换的矩阵表达形式

给定 $\{a_j\}$，求 $\{p(\omega^l)\}$

$$p(\omega^l) = \sum_{j=0}^{n} a_j \omega^{lj}$$

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$$

$$\begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \cdots & \omega^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^n & \cdots & \omega^{n^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(\omega^0) \\ p(\omega^1) \\ \vdots \\ p(\omega^n) \end{pmatrix}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数 $\omega \to \omega^{-1}$，这对应于Hermitian

对复数矩阵 A，“正交”的正确定义是指Unitary：$A^H A = I$

傅里叶逆变换的矩阵表达形式

给定 $\{p(\omega^l)\}$，求$\{a_j\}$

$$a_l = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} p(\omega^j)\omega^{-lj}$$

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$$

$$\frac{1}{n+1}\begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^{-1} & \cdots & \omega^{-n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^{-n} & \cdots & \omega^{-n^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p(\omega^0) \\ p(\omega^1) \\ \vdots \\ p(\omega^n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数$\omega \to \omega^{-1}$，这对应于Hermitian

对复数矩阵 A，“正交”的正确定义是指Unitary：$A^H A = I$

傅里叶变换的矩阵表达形式

为什么这是一个逆变换？

$$\begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^{-1} & \cdots & \omega^{-n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^{-n} & \cdots & \omega^{-n^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \cdots & \omega^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^n & \cdots & \omega^{n^2} \end{pmatrix} = (n+1)I$$

考虑乘积的(i,j)位置上的元素:

$$\sum_{k=0}^{n} \omega^{-ik}\omega^{kj} = \sum_{k=0}^{n} \omega^{k(j-i)} = \begin{cases} \dfrac{1-\omega^{(n+1)(j-i)}}{1-\omega^{j-i}}, & j \neq i \\ n+1, & j = i \end{cases}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数$\omega \to \omega^{-1}$，这对应于Hermitian

对复数矩阵 A，“正交”的正确定义是指Unitary：$A^H A = I$

回到离散三角级数的正交性

设整数r不能整除$2m$，则

$\sum_{j=0}^{2m-1}\cos(rx_j)=0,\sum_{j=0}^{2m-1}\sin(rx_j)=0.$

并且，$\sum_{j=0}^{2m-1}\cos^2(rx_j)=m,\sum_{j=0}^{2m-1}\sin^2(rx_j)=m.$

证明：设整数r不能整除$2m$

$$x_j=-\pi+\frac{j}{m}\pi, j=0,1,\dots,2m-1$$

$$e^{iz}=\cos z+i\sin z$$

$$\sum_{j=0}^{2m-1}\cos(rx_j)+i\sum_{j=0}^{2m-1}\sin(rx_j)=\sum_{j=0}^{2m-1}e^{i\,r\,x_j}$$

$$=e^{-i\,r\pi}\sum_{j=0}^{2m-1}e^{i\,rj\pi/m}=e^{-i\,r\pi}\frac{1-e^{i\,2\pi r}}{1-e^{i\,r\pi/m}}=0$$

实部和虚部都必须为零！

值得注意的是，$e^{i\,r\,x_j}=e^{-i\,r\pi}\,\omega^{rj}$，其中$\omega$为$2m$次单位根之一

傅里叶变换与离散三角插值的对比（选讲）

离散三角插值：给定数据点 $\{x_j, y_j\}_{j=0}^{2m-1}$，其中$x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0,1,\dots,2m-1$

能否找到系数$\{a_i, b_i\}$使得，$\forall j$

$$y_j \approx \frac{a_0}{2} + a_n \cos nx_j + \sum_{k=1}^{n-1}\left(a_k \cos kx_j + b_k \sin kx_j\right)$$

最小二乘法解得

$$a_k = \frac{1}{m}\sum_{j=0}^{2m-1} y_j \cos kx_j\,, \qquad b_k = \frac{1}{m}\sum_{j=0}^{2m-1} y_j \sin kx_j$$

傅里叶变换相当于直接找到复平面上的系数$\{c_k\}$使得，$\forall j$

$$y_j \approx \frac{1}{m}\sum_{k=0}^{2m-1} c_k e^{ikx_j}$$

由逆变换可得 $c_k = \sum_{k=0}^{2m-1} y_j e^{\frac{ik\pi j}{m}}$，进而由Euler公式可得

$$a_k + ib_k = \frac{1}{m}\sum_{j=0}^{2m-1} y_j\left(\cos kx_j + i \sin kx_j\right) = \frac{(-1)^k}{m} c_k.$$

傅里叶变换的unitary性质 ↔ 三角级数的正交性

快速傅里叶变换的实现与应用（选讲）

- 参考资料： TAOCP II 4.3.3.C, by Donald E. Knuth
- 通过FFT来实现整数乘法只需要$O(\log n)$位的精度
- 肉眼不可见的电子水印 digital watermarking
- 通过上传学习视频到B站来实现远程控制？

傅里叶变换的矩阵表达形式

给定 $\{a_j\}$，求 $\{p(\omega^l)\}$

$$p(\omega^l) = \sum_{j=0}^{n} a_j \omega^{lj}$$

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$$

$$\begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \cdots & \omega^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^n & \cdots & \omega^{n^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(\omega^0) \\ p(\omega^1) \\ \vdots \\ p(\omega^n) \end{pmatrix}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数 $\omega \to \omega^{-1}$，这对应于Hermitian

对复数矩阵 A，“正交”的正确定义是指Unitary：$A^H A = I$

傅里叶逆变换的矩阵表达形式

给定 $\{p(\omega^l)\}$，求$\{a_j\}$

$$a_l = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} p(\omega^j)\omega^{-lj}$$

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$$

$$\frac{1}{n+1}\begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^{-1} & \cdots & \omega^{-n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^{-n} & \cdots & \omega^{-n^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p(\omega^0) \\ p(\omega^1) \\ \vdots \\ p(\omega^n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数$\omega \to \omega^{-1}$，这对应于Hermitian

对复数矩阵 A，“正交”的正确定义是指Unitary：$A^H A = I$

傅里叶变换的矩阵表达形式

为什么这是一个逆变换？

$$\begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^{-1} & \cdots & \omega^{-n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^{-n} & \cdots & \omega^{-n^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \cdots & \omega^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^n & \cdots & \omega^{n^2} \end{pmatrix} = (n+1)I$$

考虑乘积的(i,j)位置上的元素:

$$\sum_{k=0}^{n} \omega^{-ik}\omega^{kj} = \sum_{k=0}^{n} \omega^{k(j-i)} = \begin{cases} \dfrac{1-\omega^{(n+1)(j-i)}}{1-\omega^{j-i}}, & j \neq i \\ n+1, & j = i \end{cases}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数$\omega \to \omega^{-1}$，这对应于Hermitian
对复数矩阵 A，“正交”的正确定义是指Unitary：$A^H A = I$

回到离散三角级数的正交性

设整数r不能整除$2m$，则

$\sum_{j=0}^{2m-1}\cos(rx_j)=0,\sum_{j=0}^{2m-1}\sin(rx_j)=0.$

并且，$\sum_{j=0}^{2m-1}\cos^2(rx_j)=m,\sum_{j=0}^{2m-1}\sin^2(rx_j)=m.$

证明：设整数r不能整除$2m$

$$x_j=-\pi+\frac{j}{m}\pi, j=0,1,\dots,2m-1$$

$$e^{iz}=\cos z+i\sin z$$

$$\sum_{j=0}^{2m-1}\cos(rx_j)+i\sum_{j=0}^{2m-1}\sin(rx_j)=\sum_{j=0}^{2m-1}e^{i\,r\,x_j}$$

$$=e^{-i\,r\pi}\sum_{j=0}^{2m-1}e^{i\,rj\pi/m}=e^{-i\,r\pi}\frac{1-e^{i\,2\pi r}}{1-e^{i\,r\pi/m}}=0$$

实部和虚部都必须为零！

值得注意的是，$e^{i\,r\,x_j}=e^{-i\,r\pi}\,\omega^{rj}$，其中$\omega$为$2m$次单位根之一

傅里叶变换与离散三角插值的对比（选讲）

离散三角插值：给定数据点 $\{x_j, y_j\}_{j=0}^{2m-1}$，其中$x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0,1,\dots,2m-1$

能否找到系数$\{a_i, b_i\}$使得，$\forall j$

$$y_j \approx \frac{a_0}{2} + a_n \cos nx_j + \sum_{k=1}^{n-1}\left(a_k \cos kx_j + b_k \sin kx_j\right)$$

最小二乘法解得

$$a_k = \frac{1}{m}\sum_{j=0}^{2m-1} y_j \cos kx_j\,, \qquad b_k = \frac{1}{m}\sum_{j=0}^{2m-1} y_j \sin kx_j$$

离散傅里叶变换相当于直接找到复平面上的系数$\{c_k\}$使得，$\forall j$

$$y_j \approx \frac{1}{m}\sum_{k=0}^{2m-1} c_k e^{ikx_j}$$

由逆变换可得 $c_k = \sum_{k=0}^{2m-1} y_j e^{\frac{ik\pi j}{m}}$，进而由Euler公式可得

$$a_k + ib_k = \frac{1}{m}\sum_{j=0}^{2m-1} y_j\left(\cos kx_j + i \sin kx_j\right) = \frac{(-1)^k}{m} c_k.$$

傅里叶变换的unitary性质 ⇔ 三角级数的正交性

求解线性方程

给定矩阵$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$，向量$b \in \mathbb{R}^m$，求$x \in \mathbb{R}^n$使得$Ax = b$

只有三种情况

- 对任意的向量b，存在唯一解
- 不可解，或方程不一致 (inconsistent, over-determined)
- 存在无穷多组解 (under-determined)

性质：只要存在两个不同的解，则一定存在无穷多组解。

性质：如果$m > n$则存在b使得方程不可解。

性质：如果$m < n$则存在b使得方程存在无穷多组解。

注：解线性方程组，与矩阵求逆是两回事

以下我们假设$m = n$

回顾高斯消元法

$$\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \end{array}$$

$$\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12} & \dots & a_{2n} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{1n} & b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} b_1 \end{array}$$

可以一行一行地消，也可以一列一列地消

这里以行为例，主要涉及三种操作

- 交换行（交换两组方程）
- 给一行乘上一个数
- 在一行上减去另一行的一个倍数

回顾高斯消元法：交换行

令 $\sigma \in S_n$ 为 $[n]$ 上的一个置换

$$P_\sigma = \begin{bmatrix} \cdots & e_{\sigma(1)}^T & \cdots \\ & \vdots & \\ \cdots & e_{\sigma(n)}^T & \cdots \end{bmatrix}$$

其中向量 e_j 是只有在第 j 个分量上为1的单位向量

回顾高斯消元法：给一行乘上一个数

考虑对角矩阵

$$D = \begin{bmatrix} c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & c_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & c_n \end{bmatrix}$$

回顾高斯消元法：在一行上减去另一行的一个倍数

在第j行减去第i行的c倍：

$$E = I - c\, e_j e_i^T$$

$e_j e_i^T$是一个矩阵，里面只有一个元素(j, i)是1

这是一个可逆的操作：

$$\left(I + c\, e_j e_i^T\right)\left(I - c\, e_j e_i^T\right) = I$$

回顾高斯消元法

$$Ax = b$$

$$E_1 Ax = E_1 b$$
$$E_2 E_1 Ax = E_2 E_1 b$$
$$\dots$$
$$E_k \cdots E_2 E_1 Ax = E_k \cdots E_2 E_1 b$$

如果一行一行地消，最后得到的将会是上三角阵
而且$E_k \cdots E_2 E_1$是下三角阵

$$A = LU$$

回顾高斯消元法

- 期间可能需要交换行/列，以选择一个非零/更大的主元 (pivoting)，例子：

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

- 交换行：左乘置换矩阵
- 交换列：右乘置换矩阵
- 如果找不到非零主元，则A一定是奇异的(singular, non-invertible)
- 每消去一个元素，最多$O(n)$次算术运算
- 最坏情况下总共需要$O(n^3)$次算术运算

- BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)
- LAPACK