

第二章第一节：范数

定义2.1.1（向量范数，p41）

$$\|\cdot\|_1, \|\cdot\|_2, \|\cdot\|_\infty, \text{ (p42)}$$

定义2.1.2（矩阵范数，p43）

定理2.1.3（从向量范数诱导出的矩阵范数，p44）

定理2.1.4（矩阵范数例子， $\|\cdot\|_1, \|\cdot\|_2, \|\cdot\|_\infty$, p46）

定义2.1.4（ A 的谱半径， $\rho(A)$, p48）

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \in \lambda(A)\},$$

这里 $\lambda(A)$ 代表 A 的特征值的全体。

定理2.1.6（谱半径与矩阵范数关系，p49）

定理2.1.7（ A^k 收敛的充分必要条件，p50）

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^k = 0 \iff \rho(A) < 1.$$

定理2.1.8（ A 的Neumann series, p51）

(1) $\sum_{k=0}^{\infty} A^k$ 收敛 $\iff \rho(A) < 1$ 。

(2) 当 $\sum_{k=0}^{\infty} A^k$ 收敛时，有

$$\sum_{k=0}^{\infty} A^k = (I - A)^{-1}.$$

且存在范数 $\|\cdot\|$ 使得对于任意自然数 m , 有

$$\|(I - A)^{-1} - \sum_{k=0}^m A^k\| \leq \frac{\|A\|^{m+1}}{1 - \|A\|}.$$

第三章第一节：最小二乘问题

定义3.1.1（最小二乘问题，LS问题，p77）

定理3.1.1，定理3.1.2，推论3.1.1（p78-79）：
讨论了 $Ax = b$ 的解的存在唯一性，和不唯一情形下解的集合表达式。

定理3.1.3（p80）：
线性最小二乘问题存在性，和唯一性的充要条件。

定理3.1.4（p80）：
最小二乘问题的正则化方程。对于正则化方程 $A^T Ax = A^T b$ 和最小二乘解的关系，还可从变分法推出。定理3.1.4证明如下：

若 x 为最小二乘解，则 $x = \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|Ay - b\|_2^2$ 。
对于 $\forall y \in \mathbb{R}^n$ ，我们可以定义 $f(a) = \|A(x + ay) - b\|_2^2$ ，则有 $f(a)$ 在0点取到最小值。
若 $f(a)$ 在 $a = 0$ 处可导，其必为零。我们计算 $f'(0)$ 如下

$$\begin{aligned} f'(0) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-1} \left(\|A(x + \epsilon y) - b\|_2^2 - \|Ax - b\|_2^2 \right) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-1} \left(\|A(x + \epsilon y)\|_2^2 + \|b\|_2^2 - 2\langle A(x + \epsilon y), b \rangle - \|Ax\|_2^2 - \|b\|_2^2 + 2\langle Ax, b \rangle \right) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-1} \left(\|Ax\|_2^2 + \epsilon^2 \|Ay\|_2^2 + 2\epsilon \langle Ax, Ay \rangle - 2\epsilon \langle Ay, b \rangle - \|Ax\|_2^2 \right) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \|Ay\|_2^2 + 2\langle Ax - b, Ay \rangle \\ &= 2\langle A^T(Ax - b), y \rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

所以我们有 $\forall y \in \mathbb{R}^n$ ， $\langle A^T(Ax - b), y \rangle = 0$ 。这意味着 $A^T Ax = A^T b$ 。

若正则化方程成立，即 x 满足 $A^T Ax = A^T b$ ，对于 $\forall a \in \mathbb{R}$ ， $y \in \mathbb{R}^n$ ，我们有

$$\begin{aligned} &\|A(x + ay) - b\|_2^2 \\ &= a^2 \|Ay\|_2^2 - 2a \langle Ax - b, Ay \rangle + \|Ax - b\|_2^2 \\ &= a^2 \|Ay\|_2^2 - 2a \langle A^T(Ax - b), y \rangle + \|Ax - b\|_2^2 \\ &= a^2 \|Ay\|_2^2 + \|Ax - b\|_2^2 \\ &\geq \|Ax - b\|_2^2. \end{aligned}$$

由 a, y 的任意性，我们有 x 为 $Ax = b$ 的最小二乘解。

定理3.1.5, 定理3.1.6 (p82-83):
敏度分析和最小二乘问题条件数。条件数定义为 $\kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^\dagger\|_2$ 。

第三章第二节: Householder变换和Givens变换

定义3.2.1 (p84):
对于 $w \in \mathbb{R}^n$ 且满足 $\|w\|_2 = 1$, 定义Householder变换 $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 如下:

$$H = I - 2ww^T.$$

定理3.2.1 (p84):
Householder变换性质, 对称性, 正交性, 对合性, 反射性。

定理3.2.2和之后内容 (p86-88):
若要将向量 x 的第2到 n 个元素全变为零, 选取

$$H = I - \beta vv^T, \quad v = x \pm \|x\|_2 e_1, \quad \beta = 2/(v^T v).$$

考虑更一般的情形, 若要将向量 x 的第 $k+1$ 到 j 个元素变为零, 令

$$H = I - \beta vv^T, \quad v = (0, \dots, 0, x_k - \alpha, x_{k+1}, \dots, x_j, 0, \dots, 0), \quad \alpha^2 = \sum_{i=k}^j x_i^2, \quad \beta = 2/(v^T v).$$

Givens变换, 也被称为平面旋转变换, 即在 (i, k) 平面内将 x 顺时针旋转 θ 度。

$$G(i, k, \theta) = I + s(e_i e_k^T - e_k e_i^T) + (c - 1)(e_i e_i^T + e_k e_k^T),$$

$$c = \cos \theta = x_i(x_i^2 + x_k^2)^{-1/2}, \quad s = \sin \theta = x_k(x_i^2 + x_k^2)^{-1/2},$$

则有 $y = G(i, k, \theta)x$, $y_i = (x_i^2 + x_k^2)^{1/2}$, $y_k = 0$ 。

第三章第三节: QR分解定理

定理3.3.1 (QR分解, p91)

正交变换法的实现, 理论部分 (p92), 算法部分 (p95)。

第四章：古典迭代法

$$\begin{aligned}Ax &= b \\ \implies \text{令 } A &= A_1 + A_2, \quad A_1 x = -A_2 x + b \\ \implies x &= -A_1^{-1} A_2 x + A_1^{-1} b \\ \implies x &= Mx + g.\end{aligned}$$

Jacobi迭代, Gauss-Seidel迭代, 定理4.2.1, 定理4.2.2, 定理4.2.3 (p105-107);
收敛性, 收敛速度。

定义4.2.1, 定义4.2.2 (p113), 定理4.2.8, 推论4.2.1 (p114-115): 对角占优,
可约, 可逆, 正定这些定义之间的关系。

第五章第一节：最速下降法

$$Ax = b, \varphi(x) = x^T Ax - 2b^T x.$$

定理5.1.1 (p138) 方程组和二次泛函 φ 的关系。

最速下降法思路 and 实现：确定方向 p_k ，确定距离 α_k 。

$$p_k = r_k = b - Ax_k, \quad \alpha_k = \frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}, \quad x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k.$$

迭代的过程为

$$x_k \implies (r_k, p_k, \alpha_k) \implies x_{k+1} \implies (r_{k+1}, p_{k+1}, \alpha_{k+1}) \implies \dots$$

算法5.1.1 (p141) 最速下降法的算法实现

定理5.1.2 (p141) 最速下降法的收敛性

第五章第二、三、四、五节：共轭梯度法

与最速下降法的区别在于下山方向和距离的选取。

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k, \quad \alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}, \quad \beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k},$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k.$$

迭代的过程为

$$(x_k, p_{k-1}, \alpha_{k-1}) \implies (r_k = b - Ax_k, \beta_{k-1}) \implies (p_k, \alpha_k, x_{k+1}) \implies \dots$$

关于共轭梯度法系数 α_k, β_k 化简的证明

已知信息: $x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1}p_{k-1}$; $\alpha_k = r_k^T p_k / (p_k^T A p_k)$ (P140, 5.1.3);
 $p_k = r_k + \beta_{k-1}p_{k-1}$; $\beta_k = -(r_{k+1}^T A p_k) / (p_k^T A p_k)$.

从 β_k 信息出发, 我们有

$$r_k^T A p_{k-1} + \beta_{k-1} p_{k-1}^T A p_{k-1} = 0 \implies (r_k^T + \beta_{k-1} p_{k-1}^T) A p_{k-1} = 0 \implies p_k^T A p_{k-1} = 0.$$

从 α_k 信息出发, 我们有

$$\begin{aligned} r_k^T p_{k-1} &= (b - A x_k)^T p_{k-1} = [b - A(x_{k-1} + \alpha_{k-1} p_{k-1})]^T p_{k-1} = (r_{k-1} - \alpha_{k-1} A p_{k-1})^T p_{k-1} \\ &= r_{k-1}^T p_{k-1} - \alpha_{k-1} p_{k-1}^T A p_{k-1} = 0. \end{aligned}$$

由 $r_k^T p_{k-1} = 0$, 我们有

$$\begin{aligned} r_k^T r_{k+1} &= r_k^T (b - A x_{k+1}) = r_k^T [b - A(x_k + \alpha_k p_k)] = r_k^T (r_k - \alpha_k A p_k) \\ &= r_k^T (p_k - \beta_{k-1} p_{k-1} - \alpha_k A p_k) = r_k^T p_k - \alpha_k r_k^T A p_k. \end{aligned}$$

考虑到 $r_k = p_k - \beta_{k-1} p_{k-1}$ 和之前证明过的 $p_k^T A p_{k-1} = 0$ 还有 α_k 定义, 我们有
 $r_k^T p_k - \alpha_k r_k^T A p_k = r_k^T p_k - \alpha_k p_k^T A p_k + \alpha_k \beta_{k-1} p_{k-1}^T A p_k = 0$.
 因此, $r_k^T r_{k+1} = 0$.

对于 α_k , 从 $p_k = r_k + \beta_{k-1} p_{k-1}$, $r_k^T p_{k-1} = 0$ 出发我们有

$$\begin{aligned} r_k^T p_k - r_k^T r_k &= r_k^T \beta_{k-1} p_{k-1} = 0, \\ \text{所以 } \alpha_k &= r_k^T p_k / (p_k^T A p_k) = r_k^T r_k / (p_k^T A p_k). \end{aligned}$$

对于 β_k , 从 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ 出发, 我们有

$$r_{k+1} = b - A x_{k+1} = b - A(x_k + \alpha_k p_k) = r_k - \alpha_k A p_k \implies A p_k = \alpha_k^{-1} (r_k - r_{k+1}).$$

考虑到 $r_k^T r_{k+1} = 0$, 我们有

$$r_{k+1}^T A p_k = \alpha_k^{-1} r_{k+1}^T (r_k - r_{k+1}) = -\alpha_k^{-1} r_{k+1}^T r_{k+1}.$$

考虑到 $p_k = r_k + \beta_{k-1} p_{k-1}$, $r_k^T p_{k-1} = 0$, $r_k^T r_{k+1} = 0$, 我们有

$$p_k^T A p_k = \alpha_k^{-1} p_k^T (r_k - r_{k+1}) = \alpha_k^{-1} p_k^T r_k = \alpha_k^{-1} (r_k + \beta_{k-1} p_{k-1})^T r_k = \alpha_k^{-1} r_k^T r_k.$$

$$\text{所以 } \beta_k = -(r_{k+1}^T A p_k) / (p_k^T A p_k) = r_{k+1}^T r_{k+1} / (r_k^T r_k).$$

综上, $\alpha_k = r_k^T r_k / (p_k^T A p_k)$, $\beta_k = r_{k+1}^T r_{k+1} / (r_k^T r_k)$.

定理5.2.1 证明（详细版）

对于结论(1) – (4)，易知对于 $k = 1$ 时都成立。使用归纳法，假设 $k = n$ 时结论(1) – (4)成立，我们需要证明对于 $k = n + 1$ 时结论(1) – (4)成立。

对于（4）前半部分，由 $r_{n+1} = p_{n+1} - \beta_n p_n$ ，有
 $\text{Span}\{r_0, \dots, r_{n+1}\} = \text{Span}\{p_0, \dots, p_n, p_{n+1} - \beta_n p_n\} = \text{Span}\{p_0, \dots, p_n, p_{n+1}\}.$

对于（1），由归纳假设，我们有
 $p_i^T r_{n+1} = p_i^T (r_n - \alpha_n A p_n) = p_i^T r_n - \alpha_n p_i^T A p_n = 0, i = 0, \dots, n-1.$ 对于 $p_n^T r_{n+1}$ ，我们有 $p_n^T r_{n+1} = p_n^T (r_n - \alpha_n A p_n)$ 。由 α_n 定义，得知 $p_n^T r_{n+1} = 0$ 。因此，结论（1）成立。

对于（2），由结论（1）可得 r_{n+1} 与 $\text{Span}\{p_0, \dots, p_n\}$ 正交。再由结论（4）前半部分，有 r_{n+1} 与 $\text{Span}\{r_0, \dots, r_n\}$ 正交。因此，结论（2）成立。

对于（3），首先我们有 $p_{n+1} = r_{n+1} + \beta_n p_n$ ， $r_{i+1} = r_i - \alpha_i A p_i$ ，然后
 $p_i^T A p_{n+1} = p_i^T A r_{n+1} + \beta_n p_i^T A p_n = \alpha_i^{-1} (r_i - r_{i+1}) r_{n+1} + \beta_n p_i^T A p_n.$
 由结论（2）和归纳假设，我们有 $p_i^T A p_{n+1} = 0$ 对于 $i = 0, \dots, n-1$ 。
 对于 $p_n^T A p_{n+1}$ ，我们有 $p_n^T A p_{n+1} = p_{n+1}^T A p_n = (r_{n+1} + \beta_n p_n)^T A p_n = 0$ 。之前等式用到了 β_n 定义。因此结论（3）成立。

对于（4）后半部分，首先结论（2）和结论（4）前半部分给出了 $\{r_0, \dots, r_{n+1}\}$ 和 $\{p_0, \dots, p_{n+1}\}$ 的线性无关性质。再由 $r_{n+1} = r_n - \alpha_n A p_n$ ，我们有
 $\text{Span}\{r_0, \dots, r_{n+1}\} = \text{Span}\{r_0, \dots, A p_n\} = \text{Span}\{p_0, \dots, p_n, A p_n\}$
 $= \text{Span}\{r_0, \dots, A^n r_0, A p_n\} \subset \text{Span}\{r_0, \dots, A^n r_0, A^{n+1} r_0\}.$
 对于 $A^{n+1} r_0$ ，我们有
 $A^{n+1} r_0 = A(A^n r_0) \in \text{Span}\{A p_0, \dots, A p_n\} = \text{Span}\{A r_0, \dots, A^n r_0, A p_n\}$
 $\subset \text{Span}\{r_0, \dots, A^n r_0, A p_n\}.$
 从而可得 $\text{Span}\{r_0, \dots, A^n r_0, A^{n+1} r_0\} \subset \text{Span}\{r_0, \dots, A^n r_0, A p_n\}.$
 因此， $\text{Span}\{r_0, \dots, r_{n+1}\} = \text{Span}\{r_0, \dots, A^n r_0, A^{n+1} r_0\}$ 。结论（4）成立。

算法5.2.1 (p146) 共轭梯度法的算法实现

定理5.2.1 (p146) 共轭梯度法的性质, Krylov子空间定义。

定理5.2.2 (p148) 共轭梯度法和Krylov子空间关系。

算法5.3.1 (p150) 实用共轭梯度法, 其本质就是限制迭代次数。

定理5.3.1, 定理5.3.2 (p150-151) 共轭梯度法收敛性, 迭代次数和误差估计。

第六章第一节：线性代数知识回顾

特征值，特征向量，特征多项式，谱集，重数，单特征值，重特征值，半单特征值，非亏损

相似变换： $B = XAX^{-1}$ ，且 X 非奇异。

定理6.1.1：（Jordan分解定理，p162）

定理6.1.2：（Schur分解定理，p163）

定理6.1.3：（Gerschgorin圆盘定理，p163）

特征值、特征向量条件数： $\|y\|_2$ ， $\|\Sigma^\perp\|_2$ 。其中 $y^T A = \lambda y^T$ ， y 为 A 的属于 λ 的左特征向量。

实对称矩阵特征值均为实数。如何证明？

对于任意多项式 $P(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$ ，其友矩阵的特征多项式为 P 本身。如何证明？

第二第三节：幂法、反幂法

幂法算法：(6.2.6)，定理6.2.1（幂法收敛性），反幂法算法（6.3.1）

第四节：QR方法

迭代算法：(6.4.1)，定理6.4.1（收敛性定理）

章节6.4.2：实数情形

实Schur标准形（6.4.11），定理6.4.2（实Schur分解），上Hessenberg矩阵，上Hessenberg分解（p181），隐式QR算法（算法6.4.3）。

定理6.2.1证明补充:

之前的推导为若当型的基本应用, 补充部分从(6.2.8)开始, 即

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda_1^k} A^k u_0 = X_1 y_1.$$

且因为 u_0 在 λ_1 的特征子空间上投影不为零, 我们有 $X_1 y_1 \neq 0$ 。由以上结果, 我们可以得到

$$X_1 y_1 = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{\lambda_1^k} A^k u_0 = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{A}{\lambda_1} \frac{A^k}{\lambda_1^k} u_0 = \frac{A}{\lambda_1} (X_1 y_1).$$

这意味着 $X_1 y_1$ 为 A 关于 λ_1 的特征向量。接下来我们证明 u_k 的极限就是常数乘以 $X_1 y_1$ 。

关于幂法(6.2.6), 我们需要增加一个额外条件, 即当 Au_{k-1} 存在正负模最大分量时, 默认 μ_k 为正。否则未必能够得到 u_k 的收敛性。由幂法(6.2.6)得知

$$u_k = \frac{Au_{k-1}}{\mu_k} = \frac{A^k u_0}{\mu_k \cdots \mu_1} = \frac{A^k u_0}{\lambda_1^k} \frac{\lambda_1^k}{\mu_k \cdots \mu_1},$$

且 $\frac{\mu_k \cdots \mu_1}{\lambda_1^k}$ 为 $\frac{A^k u_0}{\lambda_1^k}$ 的模最大分量。由红字部分可知当 $\frac{A^k u_0}{\lambda_1^k}$ 拥有正负模最大分量时, $\frac{\mu_k \cdots \mu_1}{\lambda_1^k}$ 符号为确定的。因此, 由 $\frac{A^k u_0}{\lambda_1^k}$ 的收敛性可以得到 $\frac{\mu_k \cdots \mu_1}{\lambda_1^k}$ 的收敛性。记 $\zeta = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\mu_k \cdots \mu_1}{\lambda_1^k}$, 我们有

$$\lim_{k \rightarrow \infty} u_k = X_1 y_1 / \zeta.$$

已证出 u_k 收敛到 A 关于 λ_1 的一个特征向量。再由

$$\zeta = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\mu_{k+1}}{\lambda_1} \frac{\mu_k \cdots \mu_1}{\lambda_1^k} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\mu_{k+1}}{\lambda_1} \zeta$$

可得 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_k = \lambda_1$ 。

第七章第一节：关于对称矩阵的性质

定理7.1.1：谱分解（对角化）。

定理7.1.2：极大极小定理（关于特征值）。

定理7.1.3，定理7.1.4：特征值特征向量敏感性。

定理7.1.5：SVD分解。

第二节：QR方法

三对角化 \implies 隐式对称QR迭代 \implies 隐式对称QR算法

第三节：Jacobi方法（和Givens变换有相似之处）

旋转曲面的选择和旋转角度的选取（7.3.2），（7.3.6），（7.3.7）。

第四节：二分法（针对实对称三对角阵，证明较难）

顺序主子式估计：定理7.4.1。

符号变化次数和特征值个数的估计：定理7.4.2，推论7.4.1，算法7.4.1。

第五节：分而治之法（分块，针对实对称三角阵）

如何分块：（7.5.3）

粘合：定理7.5.1，定理7.5.2。

过程简述：p231-232。

第六节：奇异值分解计算（非方阵，算法7.6.3）

P240习题2:

$\forall k$, 我们要证 D_k 中包含特征值。若 $\alpha_{k,k}$ 为特征值, 则结论显然成立。

考虑 $\alpha_{k,k}$ 不为特征值情形。有 $A - \alpha_{k,k}I$ 可逆, 且

$$(A - \alpha_{k,k}I)e_k = [\alpha_{1,k}; \alpha_{2,k}; \cdots; 0; \alpha_{k+1,k}; \cdots; \alpha_{n,k}].$$

因为 A 是实对称的, 考虑分解 $A = Q^T \text{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n) Q$, 其中 Q 为正交阵, 将分解代入上述等式, 有

$$\begin{aligned} Q^T \text{diag}(\lambda_1 - \alpha_{k,k}, \cdots, \lambda_n - \alpha_{k,k}) Q e_k &= [\alpha_{1,k}; \alpha_{2,k}; \cdots; 0; \alpha_{k+1,k}; \cdots; \alpha_{n,k}] \\ \implies e_k &= Q^T \text{diag}((\lambda_1 - \alpha_{k,k})^{-1}, \cdots, (\lambda_n - \alpha_{k,k})^{-1}) Q [\alpha_{1,k}; \alpha_{2,k}; \cdots; 0; \alpha_{k+1,k}; \cdots; \alpha_{n,k}]. \end{aligned}$$

在以上等式两端同时取2范数, 且考虑到 $\|Q\|_2 = \|Q^T\|_2 = 1$, 则有

$$\begin{aligned} 1 = \|e_k\|_2 &\leq \|\text{diag}((\lambda_1 - \alpha_{k,k})^{-1}, \cdots, (\lambda_n - \alpha_{k,k})^{-1})\|_2 \|[\alpha_{1,k}; \alpha_{2,k}; \cdots; 0; \alpha_{k+1,k}; \cdots; \alpha_{n,k}]\|_2 \\ &= \max\{|(\lambda_j - \alpha_{k,k})^{-1}| : j = 1, \cdots, n\} \left(\sum_{j \neq k} \alpha_{j,k}^2 \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

由上可得, $(\sum_{j \neq k} \alpha_{j,k}^2)^{1/2} \geq \min\{|\lambda_j - \alpha_{k,k}| : j = 1, \cdots, n\}$ 。证毕。
