Chapter 4

数值线性代数

4.1 数值线性代数知识点总结

数值线性代数

§1. 矩阵代数基础

§1.1. 问题背景

① 偏微分方程数值解

② 线性最小二乘问题.

§1.2 Schur分解和奇异值分解

一. Schur分解

引理1. 对于任意非零 $x=(a_1,\cdots,a_n)^T\in\mathbb{C}^n$, 若令

$$p=\begin{cases}\|x\|_2, & \text{当 } a_1=0\text{时}\\ -e^{i\arg a_1}\|x\|_2, & \text{当 } a_1\neq 0\text{时}\end{cases}$$

其中 $\|x\|_2=\sqrt{|a_1|^2+\cdots+|a_n|^2}$

定义: $H(w)=I-2w\cdot w^*$, 其中 $w=\dfrac{x-pe_1}{\|x-pe_1\|_2}$, $H(w)$ 为Hermite矩阵, 则有 $H(w)x=pe_1$.

定理1: (Schur分解定理)

设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$, 则存在 $U\in\mathcal{U}_n$, 使得 $U^*AU=T$.

其中T为上三角矩阵, T中对角元顺序依赖于U的选取, 其对角线元素为A的特征值.

推论1. (1) A是正规矩阵 ($AA^*=A^*A$) $\Leftrightarrow \exists U\in\mathcal{U}_n$, s.t. $U^*AU=\mathrm{diag}(\lambda_1,\cdots,\lambda_n)$

(2) A是Hermite矩阵的充分必要条件是存在 $U\in\mathcal{U}_n$, 和实对角矩阵 Λ, s.t. $U^*AU=\Lambda$.

二、奇异值分解

定义：设 $A\in\mathbb{C}^{m\times n}$，$A^*A$ 的特征值的非负平方根称为 A 的奇异值，A 的奇异值全体记作 $\sigma(A)$.

定理2：（奇异值分解定理（SVD））
设 $A\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$，则存在 $U\in\mathcal{U}_m$ 和 $V\in\mathcal{U}_n$，使得：

$$U^*AV=\begin{array}{c c} \begin{bmatrix}\Sigma_r & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix} & \begin{matrix} r\\ m-r\end{matrix} \\ \begin{matrix} r \quad & n-r\end{matrix} & \end{array},$$

其中 $\Sigma_r=\mathrm{diag}(\sigma_1,\cdots,\sigma_r)$，$\sigma_1\geq\cdots\geq\sigma_r>0$.

定义：σ_i 的右奇异向量：$v_i=Ve_i$
σ_i 的左奇异向量：$u_i=Ue_i$

推论：设 $A\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$，则：
① A 的非零奇异值个数 $=\mathrm{rank}(A)=r$.
② $v_{r+1},\cdots,v_n$ 是 $N(A)$ 的一组标准正交基.
③ $u_1,\cdots,u_r$ 是 $R(A)$ 的一组标准正交基
④ $A=\sum_{i=1}^{r}\sigma_i u_i v_i^*=U_1\Sigma_r V_1^*$.

§1.3 向量范数和矩阵范数

一、向量范数

定义：$\mathbb{C}^n$ 上的非负实值函数 $\|\cdot\|$，对 $\forall x,y\in\mathbb{C}^n$ 和 $\alpha\in\mathbb{C}$ 都有：
(1) 正定性：$x\neq 0\Rightarrow\|x\|>0$
(2) 齐次性：$\|\alpha x\|=|\alpha|\|x\|$
(3) 三角不等式：$\|x+y\|\leq\|x\|+\|y\|$
则称 $\|\cdot\|$ 为 $\mathbb{C}^n$ 上的向量范数.

定义：l_p 范数：$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$

$x=(x_1,\cdots,x_n)^T\in\mathbb{C}^n$，$1\le p<+\infty$

（$p=+\infty$ 时，$\|x\|_\infty = \max_{1\le i\le n}|x_i|$.）

Hölder 不等式：$\sum_{i=1}^{n}|x_i y_i| \le \|x\|_p\|y\|_q$，$\frac{1}{p}+\frac{1}{q}=1$，$p,q>1$.

性质：(1) $1\le p<q$，$\|x\|_q\le\|x\|_p$，$\forall x\in\mathbb{C}^n$

(2) $\lim_{p\to\infty}\|x\|_p=\|x\|_\infty$. $\forall x\in\mathbb{C}^n$.

定义：设 $\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{C}^m$ 上的范数，$A\in\mathbb{C}_n^{m\times n}$ $(m\ge n)$，则由

$\nu_A(x)=\|Ax\|$，$x\in\mathbb{C}^n$ 所定义的非负实函数 ν_A 是 $\mathbb{C}^n$ 上的范数.

定义：设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 为正定矩阵，则由

$\|x\|_A=\sqrt{x^*Ax}$，$x\in\mathbb{C}^n$ 定义的 $\|\cdot\|_A$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的范数.

定理3：设 $\|\cdot\|$ 和 $\|\cdot\|_*$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的任意两个范数，则存在正数 δ_1 和 δ_2，使得对任意的 $x\in\mathbb{C}^n$ 都有：

$\delta_1\|x\|\le\|x\|_*\le\delta_2\|x\|$

即：这两个范数等价.

（注：等价性成立的条件是 V 为一个有限维空间.）

定理4，设 $\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的任意范数，则

$\lim_{k\to\infty}\|x^{(k)}-x^*\|=0 \iff \lim_{k\to\infty}x_i^{(k)}=x_i^{(*)}$，$i=1,2,\cdots,n$.

二. 矩阵范数（线性算子范数）

定义：若定义在 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上的一个非负实值函数 $\|\cdot\|$ 对 $\forall A, B, C \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 和 $\alpha \in \mathbb{C}$ 满足：

(1) 正定性：$A \neq 0 \Rightarrow \|A\| > 0$，

(2) 齐次性：$\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$

(3) 次可加性：$\|A+B\| \le \|A\| + \|B\|$

(4) 相容性：$\|AB\| \le \|A\| \cdot \|B\|$

则称 $\|\cdot\|$ 为 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上的矩阵范数。

定义：Frobenius 范数：$\|A\|_F = \left(\sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}} \underset{(SVD)}{=} \left(\sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$.

性质：(1) $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上任意范数等价

(2) $\lim_{k\to\infty} \|A^{(k)} - A^{(0)}\| = 0 \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty} \max_{j} |a_{ij}^{(k)} - a_{ij}^{(0)}| = 0$

定义：诱导范数：设 $\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的范数，则由 $|||A||| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$，$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 所定义的范数 $|||\cdot|||$ 为 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上由 $\|\cdot\|$ 诱导出的范数.

几种常见的诱导范数：

(1) $|||A|||_1 = \max_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$ （列和范数）

(2) $|||A|||_\infty = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$ （行和范数）

(3) $|||A|||_2 = \sigma_1$ （谱范数）

谱范数的性质：

(1) $|||A|||_2 = \max\limits_{\|x\|_2=\|y\|_2=1} |y^* A x|$

(2) $|||A^*|||_2 = |||A^T|||_2 = |||A|||_2$ } SVD分解

(3) $|||A^*A|||_2 = |||A|||_2^2 = |||AA^*|||_2$ 谱范数 + SVD分解

(4) $|||A|||_2^2 \le |||A|||_1 \cdot |||A|||_\infty$

(5) $|||UAV|||_2 = |||A|||_2$，$\forall U,V \in \mathcal{U}_n$.

Pf

$\left(A^*Az = \sigma_1^2 z,\ 则\ \sigma_1^2\|z\|_1 = \|A^*Az\|_1 \le |||A^*|||_1 |||A|||_1 \cdot \|z\|_1 = |||A|||_\infty |||A|||_1 \cdot \|z\|_1\right)$.

三、谱半径和矩阵序列的收敛性.

定义：谱半径：$\rho(A) = \max\{|\lambda| \cdot \lambda \in \lambda(A)\}$

性质：(1) $\rho(A) \le \|A\|$.（任意范数）

(2) 对 $\forall \varepsilon > 0$，存在 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上的范数 $\|\cdot\|$ 使得 $\|A\| \le \rho(A) + \varepsilon$.

定理5、设 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，则 $\lim\limits_{k\to\infty} A^k = 0 \Leftrightarrow \rho(A) < 1$.

定理6、设 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，则有：

(1) $\sum\limits_{k=0}^{\infty} A^k$ 收敛的充分必要条件是 $\rho(A) < 1$，

(2) 当 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} A^k$ 收敛时，有 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} A^k = (I-A)^{-1}$，且：

有 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上的算子范数 $\|\cdot\|$，使得：

$$\left\| (I-A)^{-1} - \sum_{k=0}^{m} A^k \right\| \le \frac{\|A\|^{m+1}}{1-\|A\|}, \quad \forall m \in \mathbb{Z}.$$

定理7. 设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$，$\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 上的任意矩阵范数，
则：$\lim\limits_{k\to\infty}\|A^k\|^{\frac{1}{k}}=\rho(A)$.

§1.4. 正交投影和子空间之间的距离.

正交投影定义：设 $\mathcal{X}\subset\mathbb{C}^n$ 是一个子空间，如果 $P\in\mathbb{C}^{n\times n}$，满足
(1) $R(P)=\mathcal{X}$，(2) $P^2=P$，(3) $P^*=P$，则称 P 是映射到 $\mathcal{X}$ 的正交投影，记为 $P_{\mathcal{X}}$.

定理8. $\forall\mathcal{X}\subset\mathbb{C}^n$ 是一个子空间．在 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 中有且仅有一个映射到 $\mathcal{X}$ 的正交投影.

定义： 子空间的距离：$\mathrm{dist}(\mathcal{X},\mathcal{Y})=\|P_{\mathcal{X}}-P_{\mathcal{Y}}\|_2$

定理9. (C-S分解定理)
设酉矩阵 Q 分块为
$$Q=\begin{array}{cc}\left[\begin{array}{cc}Q_{11} & Q_{12}\\ Q_{21} & Q_{22}\end{array}\right] & \begin{array}{c}k\\ j\end{array}\\ \begin{array}{cc}\;\;k & \;\;\;j\end{array} & \end{array},\quad k\le j.$$

则存在酉矩阵 $U=\mathrm{diag}(\underset{k}{U_1},\underset{j}{U_2})$，$V=\mathrm{diag}(\underset{k}{V_1},\underset{j}{V_2})$，
s.t.
$$U^*QV=\begin{array}{cc}\left[\begin{array}{ccc}C & S & 0\\ -S & C & 0\\ 0 & 0 & I\end{array}\right] & \begin{array}{c}k\\ k\\ j-k\end{array}\\ \begin{array}{ccc}k & \;k & \;j-k\end{array} & \end{array}$$

其中 $C=\mathrm{diag}(c_1,\cdots,c_k)$，$c_i=\cos\theta_i$，$S=\mathrm{diag}(s_1,\cdots,s_k)$，
$s_i=\sin\theta_i$，$\frac{\pi}{2}\geqslant\theta_1\geqslant\theta_2\geqslant\cdots\geqslant\theta_k\geqslant 0$.

定理10. 设 $\mathcal{X}=R(X_1)$，$\mathcal{Y}=R(Y_1)$，其中 $X_1,Y_1\in\mathbb{C}^{n\times k}$，$X_1^*X_1=Y_1^*Y_1=I_k$
则 $\mathrm{dist}(\mathcal{X},\mathcal{Y})=(1-\sigma_{\min}^2(X_1^*Y_1))^{\frac{1}{2}}$，其中 $\sigma_{\min}(X_1^*Y_1)$ 表示 $X_1^*Y_1$ 的最小奇异值.

§1.5. 非负矩阵

定义：设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$，如果 $a_{ij}\geq 0$（或 $a_{ij}>0$），$\forall i,j$，则称 A 是非负（或正）矩阵，记作 $A\geq 0$，（或 $A>0$）。

定理11.（谱半径的单调性）
设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$，$B\in\mathbb{R}^{n\times n}$，如果 $|A|\leq B$，则 $\rho(A)\leq\rho(B)$。

定义：设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$，若存在 n 阶排列方阵 P s.t.

$$PAP^T=\begin{bmatrix}A_{11} & A_{12}\\ 0 & A_{22}\end{bmatrix}$$，其中 A_{11} 和 A_{12} 是两个低阶方阵。

则称 A 是可分的（可约的），否则称作不可分的。

定理12. 设非负矩阵 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$，$A$ 不可分的 $\Leftrightarrow (I+A)^{n-1}>0$。

定理13.（Perron-Frobenius 定理）
设非负矩阵 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是不可分的，则：
(1) $\rho(A)>0$，而且是 A 的一个单特征值。
(2) $\exists x\in\mathbb{R}^n$，且 $x>0$，s.t. $Ax=\rho(A)x$
(3) 不存在非负特征向量

引理1. 设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是非负矩阵，$z\in\mathbb{R}^n$，$z>0$，如果 $\xi\in\mathbb{R}$，s.t. $Az>\xi z$，则 $\rho(A)>\xi$。

引理2. 设 $v_j\in\mathbb{C}$，$a_j\in\mathbb{R}$，$a_j>0$，$j=1,2,\cdots,m$，则

$$\left|\sum_{j=1}^m a_jv_j\right|\leq\sum_{j=1}^m a_j|v_j|$$

等号成立的充要条件是 $\exists y\in\mathbb{C}$，$|y|=1$，s.t. $yv_j\geq 0$，$j=1,2,\cdots,m$.

引理3. 设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$，且 $A>0$，若 $u=(u_1,\cdots,u_n)^T\in\mathbb{C}^n$，$u\neq 0$，满足：

$Au=\lambda u$，$|\lambda|=\rho(A)$，则有 $\lambda=\rho(A)>0$，$|u|>0$ 和 $A|u|=\rho(A)|u|$ 成立。

推论：设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$，且 $A>0$，则

(1) $\rho(A)$ 是 A 的正特征值；

(2) $\rho(A)$ 的几何重数是1，且对应的特征向量可以取作正向量。

(3) 对任意的 $\lambda\in\lambda(A)$，且 $\lambda\neq\rho(A)$，必有 $|\lambda|<\rho(A)$。

引理4. 设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$，$\lambda\in\lambda(A)$，则 λ 是 A 的单特征值的充分必要条件是

(1) $\mathrm{rank}(A-\lambda I)=n-1$，即 λ 的几何重数是1。

(2) 属于 λ 的左右特征向量 v 和 u 满足 $v^Tu\neq 0$。

定理14. 设 A 是 n 阶非负不可分矩阵，h 是 A 的模等于 $\rho(A)$ 的不同特征值的个数。

则：(1) A 的模为 $\rho(A)$ 的 h 个特征值为 $\lambda_j=\rho(A)e^{i\frac{2j\pi}{h}}$，$j=0,1,\cdots,h-1$。

(2) A 的特征多项式具有如下形式：

$$p(t)=t^m[t^h-\rho(A)^h][t^h-\delta_2\rho(A)^h]\cdots[t^h-\delta_r\rho(A)^h],$$

其中 $rh+m=n$，当 $r>1$ 时，$0<|\delta_j|<1$，$j=2,\cdots,r$。

定义：双随机阵，设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$，如果 A 满足

$$a_{ij}\geq 0,\quad \sum_{i=1}^n a_{ij}=\sum_{j=1}^n a_{ij}=1,\quad i,j=1,2,\cdots,n$$

则称 A 为双随机阵。

性质：$\rho(A)=1$，且特征向量为 $e=(1,\cdots,1)^T$。

§1.6. 几个重要的定理

定理16. (Gerschgorin定理—圆盘定理)

设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{C}^{n\times n}$，令

$$G_i(A)=\{z\in\mathbb{C}:|z-a_{ii}|\leq\sum_{j\neq i}|a_{ij}|\},\quad i=1,2,\cdots,n.$$

则 (1) $\lambda(A)\subset\bigcup_{i=1}^{n}G_i(A)$

(2) 如果上式所定义的 n 个圆盘中，有 m 个互相连通且与其余 $n-m$ 个不连通，则在此 m 个圆盘所成的连通区域中，恰有 A 的 m 个特征值.

定理17. (Bauer-Fike定理)

设 $A,B\in\mathbb{C}^{n\times n}$，其中 A 可对角化，即 $A=Q^{-1}\Lambda Q$，Λ 为对角矩阵，则对任意 $\mu\in\lambda(B)$，必有 $\lambda\in\lambda(A)$，s.t.

$$|\lambda-\mu|\leq\|Q^{-1}\|_2\|Q\|_2\cdot\|A-B\|_2.$$

引理：设 $J_k(\lambda)$ 的奇异值为 $\sigma_1\geq\sigma_2\geq\cdots\geq\sigma_k>0$，则

$$\sigma_k\geq\frac{|\lambda|^k}{(1+|\lambda|)^{k-1}}$$

定理18. (广义Bauer-Fike定理)

设 $A,B\in\mathbb{C}^{n\times n}$，并假定 A 的Jordan分解为 $Q^{-1}JQ$，其中 J 是 A 的Jordan标准形，则对任意的 $\mu\in\lambda(B)$，必有 $\lambda\in\lambda(A)$，s.t.

$$\frac{(\lambda-\mu)^m}{(1+|\lambda-\mu|)^{m-1}}\leq\|Q(A-B)Q^{-1}\|_2$$

其中 m 是 J 中 λ 的最大Jordan块的阶数.

定理19、设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是正规矩阵 $(A^*A=AA^*)$，任取 $x\in\mathbb{C}^{n\times n}$，$\|x\|_2=1$，定义 $\mu(x)=x^*Ax$，则 $\min\limits_{\lambda\in\lambda(A)}|\lambda-\mu(x)|\leq\|(A-\mu(x)I)x\|_2$

推论：设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是正规矩阵，令

$$D_i(A)=\left\{z\in\mathbb{C}: |z-a_{ij}|\le \left(\sum_{j\neq i}|a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}}\right\},\quad i=1,2,\cdots,n.$$

则每个圆盘 $D_i(A)$ 中至少有 A 的一个特征值.

定理20.（Hoffmann-Wielandt 定理）

设 A 和 B 是两个 n 阶正规矩阵，它们的特征值是 $\lambda_1,\cdots,\lambda_n$ 和 $\mu_1,\cdots,\mu_n$，则存在 $1,2,\cdots,n$ 的一个排列 $\pi(1),\cdots,\pi(n)$，s.t.

$$\left(\sum_{i=1}^{n}|\mu_{\pi(i)}-\lambda_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}\le\|B-A\|_F.$$

推论6.2．$A,B\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是 Hermite 矩阵，它们的特征值分别为：

$$\lambda_1\geq\cdots\geq\lambda_n \text{ 和 } \mu_1\geq\cdots\geq\mu_n.$$

则有 $\left[\sum_{i=1}^{n}(\lambda_i-\mu_i)^2\right]^{\frac{1}{2}}\le\|B-A\|_F$.

推论6.3．设 $A,B\in\mathbb{C}^{n\times n}$，它们的奇异值分别是

$$\sigma_1\geq\cdots\geq\sigma_n\geq 0,\text{ 和 } \tau_1\geq\cdots\geq\tau_n\geq 0.$$

则有：$\left[\sum_{i=1}^{n}(\sigma_i-\tau_i)^2\right]^{\frac{1}{2}}\le\|B-A\|_F$.

定理21.（Courant-Fisher 极小极大原理）

设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 为 Hermite 矩阵，其特征值为 $\lambda_1\geq\cdots\geq\lambda_n$.

则有：

$$\lambda_i=\max_{X\in G_i^n}\min_{u\in S(X)}u^*Au=\min_{X\in G_{n-i+1}^n}\max_{u\in S(X)}u^*Au,\quad i=1,2,\cdots,n.$$

其中 G_i^n 表示 $\mathbb{C}^n$ 中所有 i 维子空间的全体，

$$S(X)=\{u\in X\mid \|u\|_2=1\}$$

定理22. (分隔定理)

设A为n阶Hermite矩阵，$B=U^*AU$，其中 $U\in\mathbb{C}^{n\times(n-1)}$，满足 $U^*U=I_{n-1}$，再设A与B的特征值分别是

$\lambda_1\geq\cdots\geq\lambda_n$ 和 $\mu_1\geq\cdots\geq\mu_n$，则 $\lambda_1\geq\mu_1\geq\lambda_2\geq\mu_2\geq\cdots\geq\lambda_n$.

推论：设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 为Hermite矩阵，B是A的一个k阶主子阵 $(1\leq k\leq n-1)$，并设A与B的特征值分别为 $\lambda_1\geq\cdots\geq\lambda_n$，和 $\mu_1\geq\cdots\geq\mu_k$.
则 $\lambda_i\geq\mu_i\geq\lambda_{n-k+i}$，$i=1,2,\cdots,k$.

定理23. 设n阶Hermite矩阵A与B的特征值分别是 $\lambda_1\geq\cdots\geq\lambda_n$ 和 $\mu_1\geq\cdots\geq\mu_n$，并设 $E=B-A$ 的最大与最小特征值分别是 ε_1 和 ε_n.

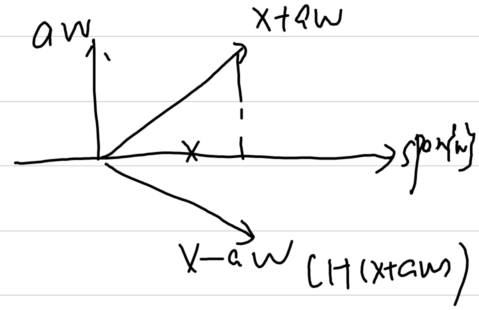
则 $\lambda_i+\varepsilon_n\leq\mu_i\leq\lambda_i+\varepsilon_1$，$i=1,2,\cdots,n$.

定理24. (Weyl定理)

在定理23的假设下，$|\mu_i-\lambda_i|\leq\|A-B\|_2$ $i=1,2,\cdots,n$.

§1.7 几种常用的变换

一、Householder变换



定义：$H=I-2ww^T$，$w\in\mathbb{R}^n$，$\|w\|_2=1$

性质：H是Householder矩阵：

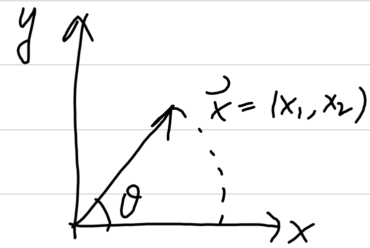
(1) H是实对称的正交矩阵

(2) $\lambda(H)=\{-1,\underbrace{1,1,\cdots,1}_{n-1个}\}$，$Hw=-w$

(3) $\det(H)=-1$，(4) $\forall x\in(\mathrm{span}\{w\})^\perp$ 和 $a\in\mathbb{R}$，$H(x+aw)=x-aw$.

二、Givens 变换（平面旋转变换）

$$G(i,k,\theta)=\begin{array}{c}\left[\begin{array}{ccccccc}1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & c & & s & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & -s & & c & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1\end{array}\right]\begin{array}{c} \\ \\ i \\ \\ k \\ \\ \\ \end{array} \\ \begin{array}{ccccccc} & & i & & k & & \end{array}\end{array}$$



算法 $x=(\xi_1,\cdots,\xi_n)^T \xrightarrow{\text{Givens}} y=(\eta_1,\cdots,\eta_n)^T$，使得 $\eta_k=0$.

三、Gauss 变换

定义：Gauss 变换 L_k，设 $x=(\xi_1,\cdots,\xi_n)^T\in\mathbb{R}^n$，$\xi_k\neq 0$，
令 $l_{ik}=\xi_i/\xi_k$，$i=k+1,\cdots,n$.
并定义：$L_k=I-l_k e_k^T$，其中 $l_k=(0,0,\cdots,0,l_{k+1,k},\cdots,l_{nk})^T$.
则有 $L_k x = x-\xi_k l_k=(\xi_1,\cdots,\xi_k,0,0,\cdots,0)^T$，
则称 L_k 为 Gauss 变换.

Section 2. 线性方程组的直接解法

§2.1、矩阵的条件数

定义：矩阵 A 的条件数 $\kappa(A)=\|A\|\cdot\|A^{-1}\|$.

定理 2.1：设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$，A 非奇异，则：

(1) $\kappa(A)\geq 1$，$\kappa(A)=\kappa(A^{-1})$，$\kappa(A)=\kappa(\sigma A)$，$\sigma\neq 0$.

(2) $\kappa_2(A)=\sigma_1(A)/\sigma_n(A)$

(3) 若 A 正规，$\kappa_2(A)=\max\limits_{\lambda\in\lambda(A)}|\lambda| \Big/ \min\limits_{\lambda\in\lambda(A)}|\lambda|$.

(4) A 是酉矩阵，$K(A)=1$

(5) $K_2(A)=K_2(UA)=K_2(AU)$，$\forall U\in \mathcal{U}_n$.

定义：$K(A)$很大，则称 $Ax=b$ 病态或 A 病态，否则为良态.

定理22：设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 非奇异，$b\in\mathbb{R}^n$ 为非零向量，再假定 $\delta A\in\mathbb{R}^{n\times n}$，满足 $\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1$，若 x 和 $x+\delta x$ 分别是

$Ax=b$ 和 $(A+\delta A)(x+\delta x)=b+\delta b$ 的解

则 $\dfrac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le \dfrac{k}{1-k\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\left(\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}+\dfrac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right)$，其中 $k=K(A)=\|A\|\|A^{-1}\|$.

§2.2. 基本解法回顾.

一、Gauss 消去法.

1. Gauss 变换和LU分解

(1) 利用Gauss 变换求 A 的 LU 分解：$A=LU$，其中 L 是单位下三角阵，U 是上三角阵.

(2) 求解 $Ly=b$，得 y.

(3) 求解 $Ux=y$，得 y

2. 全选主元素的 Gauss 消去法.

(1) 求排列方阵 P 和 Q 和分解 $PAQ=LU$，其中 U 是上三角阵，$L=[l_{ij}]$ 满足 $|l_{ij}|\le 1$ 的单位下三角阵.

(2) 求解 $P^{-1}LUQ^{-1}x=b$（分解成4个方程）

3. 部分选主元素的 Gauss 消去法：

只需取 $Q=I$，即只在当前列中选取主元素.

二、Cholesky分解法 —— 只适用于A为对称正定的矩阵.

(1) 求Cholesky分解：$A=GG^T$，其中G为对角线元素都大于0的下三角矩阵.

(2) 求解 $Gy=b$

(3) 求解 $G^Tx=y$

设 $G=[g_{ij}]$，由 $a_{ij}=\sum_{k=1}^{j} g_{ik}g_{jk}$，$1\le j\le i\le n$. 逐列求出 g_{ij}

(本质是不选主元的Gauss消去法，且计算量仅是Gauss消去法一半)

三、LDL^T分解 —— 求解对称不定方程组的解法

对于对称不定的方程，Cholesky分解：$A=GG^T$不一定成立，考虑类似Cholesky分解的算法.

设A为一般对称矩阵，则 $A=LU$.

若A非奇异，A的LU分解可以写成 $A=LDL^T$，其中D是对角矩阵

可因为要保证对称性，必须通过如下变换选取元：$PAP^T=LDL^T$

尝试进行 LTL^T分解，其中 L为下三角矩阵，T为对称三对角阵.

四、Vandermonde方程组的解法

Vandermonde矩阵：

$$V=V(x_0,\cdots,x_n)=\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix}_{(n+1)\times(n+1)}$$

五、Toeplitz方程组的解法

定义：Toeplitz 矩阵：

$$A=\begin{bmatrix} r_0 & r_1 & \cdots & r_{n-1} \\ r_{-1} & r_0 & \cdots & r_{n-2} \\ r_{-2} & r_{-1} & \cdots & r_{n-3} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r_{1-n} & r_{2-n} & & r_1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

一、Yule-Walker 方程组：

$$T_n y = -(r_1,\cdots,r_n)^T，其中\ T_n=\begin{bmatrix} 1 & r_1 & \cdots & r_{n-1} \\ r_1 & 1 & \cdots & r_{n-2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ r_{n-1} & r_{n-2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

二、一般右端项的 Toeplitz 方程组　　与上类似

$$T_n x = b,\quad b=(\beta_1,\cdots,\beta_n)^T$$

三、Toeplitz 矩阵的逆

设 $T_n^{-1}=\begin{bmatrix} T_{n-1} & E_{n-1}r_{n-1} \\ r_{n-1}^T E_{n-1} & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} x & v \\ v^T & \sigma \end{bmatrix} \begin{array}{l} n-1 \\ 1 \end{array} \\ \begin{array}{cc} n-1 & 1 \end{array} \end{array}$

第三章、线性方程组的迭代解法

§1. 迭代法概述

主要讨论单步定常迭代法，即：

$$x_k = G x_{k-1} + c,\quad k=1,2,\cdots$$

其中 $G\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 称作迭代矩阵. x_0 称为初值.

定义：残差向量 $r_k = x_k - x_*$，易证：$r_k = G^k r_0$.

定理1. 迭代法(2)收敛的充分必要条件是 $\rho(G)<1 \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty} G^k = 0$.

定理2. 设 $\|\cdot\|$ 是由向量范数 $\|\cdot\|_\alpha$ 诱导出的算子范数,
如果 $\|G\|<1$, 则迭代法 $x_k = Gx_{k-1}+C$ 收敛.
且有: $\|x_k - x_*\|_\alpha \le \dfrac{\|G\|^k}{1-\|G\|}\cdot\|x_0-x_1\|_\alpha$
和: $\|x_k - x_*\|_\alpha \le \dfrac{\|G\|}{1-\|G\|}\|x_k - x_{k-1}\|_\alpha$
对一切自然数成立.

定义: 收敛速度: 假设 $r_k = x_k - x_*$, 残差范数满足:
$\|r_k\| \le C\|r_{k-1}\|^\beta$.
线性收敛: $\beta=1$
超线性收敛: $\beta>1$
二次收敛: $\beta=2$
在迭代法 $x_k = Gx_{k-1}+C$ 中, 我们可以得到: $\|r_k\| \le \|G^k\|\cdot\|r_0\|$.
平均收敛速度定义为: $R_k(G) = -\frac{1}{k}\ln\|G^k\|$.
渐近收敛速度定义为: $R(G) = \lim\limits_{k\to\infty} R_k(G) = -\ln\rho(G)$

§2、基本迭代法:

假定 A 有如下分裂: $A=M-N$, 其中 M 为非奇异矩阵,
令 $G=M^{-1}N$, $C=M^{-1}b$, 则此迭代法是相容的.
为了避免计算 M^{-1}, 将迭代法 $x_k = Gx_{k-1}+C$ 修改为:
$$Mx_k = Nx_{k-1}+b,\quad k=1,2,\cdots$$

下面给出基于矩阵分裂的4种常用迭代法:

设 $A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1k} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{k1} & A_{k2} & \cdots & A_{kk} \end{bmatrix}$, 其对角块为易求解矩阵

令 $D = \mathrm{diag}(A_{11}, A_{22}, \cdots, A_{kk})$

$$C_L = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ A_{21} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{k1} & A_{k2} & \cdots & A_{k,k-1} & 0 \end{bmatrix}$$

$$C_U = -\begin{bmatrix} 0 & A_{12} & \cdots & A_{1,k-1} & A_{1k} \\ 0 & 0 & \cdots & A_{2,k-1} & A_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & 0 & A_{k-1,k} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A = D - C_L - C_U = D(I - L - U)$$

($L = D^{-1}C_L$, $U = D^{-1}C_U$, 其中 L 为严格下三角, U 为严格上三角矩阵)

1. Jacobi 迭代

$A = M_J - N_J$, 其中 $M_J = D$, $N_J = C_L + C_U$

迭代矩阵为 $J = M_J^{-1} N_J = D^{-1}(C_L + C_U) = L + U = I - D^{-1}A$

迭代格式为: $Dx_m = (C_L + C_U)x_{m-1} + b$, $m = 1, 2, \cdots$

2. Gauss-Seidel 迭代法

$A = M_G - N_G$, 其中 $M_G = D - C_L$, $N_G = C_U$

迭代矩阵为: $G = (D - C_L)^{-1} C_U = (I - L)^{-1} U$

迭代格式为: $(D - C_L)x_m = C_U x_{m-1} + b$

3. 超松弛迭代法 (SOR)

$A = M_W - N_W$, 其中 $M_W = \frac{1}{w}D - C_L$, $N_W = \frac{1-w}{w}D + C_U$

$w \neq 0$, $w \in \mathbb{R}^1$, 称为松弛因子.

迭代矩阵为: $G_W = M_W^{-1} N_W = (I - wL)^{-1}(wU + (1-w)I)$

迭代格式：$(D-\omega C_L)x_m=(\omega C_U+(1-\omega)D)x_{m-1}+\omega b$,
$m=1,2,\cdots$ （两边同乘 ω，避免 ω 很小）

4. 对称超松弛法 (SSOR)

$A=M_S-N_S$

其中 $M_S=\frac{1}{\omega(2-\omega)}\{D-\omega(C_L+C_U)+\omega^2 C_L D^{-1}C_U\}$

$$=\frac{1}{\omega(2-\omega)}(D-\omega C_L)^{-1}D^{-1}(D-\omega C_U).$$

$$N_S=\frac{1}{\omega(2-\omega)}\{(1-\omega)^2D+\omega(1-\omega)(C_L+C_U)+\omega^2C_LD^{-1}C_U\}$$

$$=\frac{1}{\omega(2-\omega)}[(1-\omega)D+\omega C_L]D^{-1}[(1-\omega)D+\omega C_U].$$

§3、正定矩阵和某些迭代法的收敛性.

引理3.1 设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是 Hermite 矩阵，且 A 分裂为 $A=M-N$，其中 M 为非奇异矩阵，则 M^*+N 是 Hermite 矩阵，且对任意的 $x\in\mathbb{C}^n$，有：

$$x^*Ax-\tilde{x}^*A\tilde{x}=u^*(M^*+N)u,\ \text{其中}\ \tilde{x}=M^{-1}Nx,\ u=x-\tilde{x}.$$

定理3.1、假设条件同引理3.1，则：

(1) A 和 M^*+N 正定 $\Longleftrightarrow \rho(M^{-1}N)<1$

(2) $\rho(M^{-1}N)<1$ 和 M^*+N 正定 $\Rightarrow A$ 正定

定理3.2. 设上节讨论的矩阵 A 是对称正定的，则：

(1) 当 $2D-A$ 正定时，Jacobi 迭代法收敛.

(2) 当 $0<\omega<2$ 时，SOR 和 SSOR 迭代法收敛.

定理3.3. 设上节讨论的矩阵 A 是对称正定的. 则

(1) 当 $2D-A$ 正定时，Jacobi 迭代法收敛.

(2) 当 $0<\omega<2$ 时，SOR 和 SSOR 迭代法收敛。

定理 3.3 设上节讨论的矩阵 A 是实对称的，则
(1) 当 2D−A 正定且 Jacobi 迭代法收敛时 A 正定
(2) 当 D 正定，且存在 $\omega\in(0,2)$ 使得 SOR 或 SSOR 迭代法收敛时，A 正定。

§4. H 矩阵和某些迭代法的收敛性

定义：M 矩阵：设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$，若 A 可表示成 $A=SI-B$，其中 $B\geq 0$，则当 $S>\rho(B)$ 时，称 A 为非奇异的 M 矩阵，简称 M 矩阵。
若 A 满足：$a_{ij}\leq 0$，$1\leq i\neq j\leq n$，$a_{ii}>0$，$i=1,2,\cdots,n$。
称 A 为 L 矩阵。

定理 4.1 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是 M 矩阵的充分必要条件是 A 是 L 矩阵且 $A^{-1}\geq 0$。

定义：比较矩阵 $m(A)$，设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$，$m(A)$ 是非奇异 M 矩阵，则 A 为非奇异 H 矩阵。(弱) 严格对角占优矩阵，设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$，满足：
$$|a_{ii}|\geq\sum_{j\neq i}|a_{ij}|,\quad i=1,2,\cdots,n.$$

引理 4.1、严格对角占优矩阵或不可约的弱严格对角占优矩阵是非奇异矩阵。

定理 4.2. 严格对角占优或不可约的弱对角占优矩阵是 H 矩阵。

迭代法 Part II.

引理4.2. 设 $M=[w_{ij}]\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是严格对角占优矩阵，则对任意矩阵 $N=[\eta_{ij}]\in\mathbb{C}^{n\times n}$，有：

$$\|M^{-1}N\|_\infty \le \max_{1\le i\le n}\frac{\sum_{j=1}^{n}|\eta_{ij}|}{|w_{ii}|-\sum_{j\ne i}|w_{ij}|}$$

引理4.3. 设 $M=[w_{ij}]\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是严格对角占优的L矩阵，$N=[\eta_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是非负矩阵，则

$$\rho(M^{-1}N)\ge \min_{1\le i\le n}\frac{\sum_{j=1}^{n}|\eta_{ij}|}{|w_{ii}|-\sum_{j\ne i}|w_{ij}|}$$

* AOR 和 SAOR 迭代法.

D, C_L, C_U 的定义同 SOR, SSOR，$A=D-C_L-C_U$.

AOR 迭代矩阵定义为：（快速松弛迭代法矩阵）

$$G_{AOR}=(D-rC_L)^{-1}[(1-w)D+(w-r)C_L+wC_U]$$

其中 r, w 为松弛参数.

定理4.3. 设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 满足 $a_{ii}\ne0$，$i=1,\dots,n$，则A是H矩阵等价于 $\rho(|J|)<1$，其中J表示A的Jacobi迭代矩阵.

定理4.4. 设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 满足 $a_{ii}\ne0$，$i=1,\dots,n$，$0\le r\le w$，则下列三条等价：

(1) A是H矩阵

(2) 对任意的 $\sigma\in\Omega(A)$ 和 $w\in\left[0,\frac{2}{1+\rho(|J|)}\right]$，有 $\rho(G_{AOR})<1$.

(3) 对任意的 $\sigma\in\Omega(A)$ 和 $w\in\left[0,\frac{2}{1+\rho(|J|)}\right]$，有 $\rho(G_{SAOR})<1$

推论4.1. 如果A是严格对角占优矩阵或不可分弱严格对角占优矩阵，$0 \le \omega < 2/[1+\rho(J)]$，则对应的点Jacobi点，Gauss-Seidel，点SOR和点SSOR迭代法都是收敛的。

§5. 多项式加速

第四章 共轭梯度法

§1. 最速下降法

定义：$\varphi(x) = \frac{1}{2}x^TAx - b^Tx$，则 $\nabla\varphi(x) = Ax - b$，A为 φ 的Hessian矩阵。若A为对称正定矩阵，则 $\varphi(x)$ 有唯一极小点 x_*，且 $Ax_* = b \Leftrightarrow \varphi(x_*) = \min_x \varphi(x)$.

定理1.1 设A为特征值为 $0 < \lambda_1 \le \cdots \le \lambda_n$，则最速下降法产生的点列 $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ 满足

$$\|x_k - x_*\|_A \le \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^k \|x_0 - x_*\|_A$$

其中 $x_* = A^{-1}b$，$\|\cdot\|_A = \sqrt{x^TAx}$.

引理1.1. 设A的特征值为 $0 < \lambda_1 \le \cdots \le \lambda_n$，$p(t)$ 是t的一个多项式，则 $\|p(A)x\|_A \le \max_{1 \le i \le n} |p(\lambda_i)| \|x\|_A$，$\forall x \in \mathbb{R}^n$.

§2. 二次泛函的几何性质

定义：互相A共轭，$p^TAq = 0$

定义：k维超平面，设 $p_1, \cdots, p_{n-k}$ 线性无关，$\delta_1, \cdots, \delta_{n-k} \in \mathbb{R}$，则称 $\pi_k = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p_i^Tx = \delta_i, i = 1, \cdots, n-k\}$ 为k维超平面.

注：① $\Pi_k \subset \mathbb{R}^n$，一般不是 $\mathbb{R}^n$ 中的子空间，当 $\delta_1=\cdots=\delta_{n-k}=0$ 时，是 $\mathbb{R}^n$ 的 k 维子空间。

② Π_k 是 $Bx=b$ 的解集，其中 $B=[p_1,\cdots,p_{n-k}]^T$，$b=(\delta_1,\cdots,\delta_{n-k})^T$。

③ p_i 称为 Π_k 的法向量。

④ 设 $u_1,\cdots,u_k\in \operatorname{Ker}B$，$\forall x_0\in\Pi_k$，则 $x\in\Pi_k$，有：

$$x=x_0+a_1u_1+\cdots+a_ku_k，其中 a_i\in\mathbb{R}。$$

$$\therefore \Pi_k=\{x=x_0+Uy,\ y\in\mathbb{R}^k\},\ U=[u_1,\cdots,u_k].$$

⑤ 向量 p 在 Π_k 中 $\Leftrightarrow$ p 的起点和终点都在 Π_k 中 $\Leftrightarrow$ 起点在 Π_k 中，且 $p_i^Tp=0$，$i=1,\cdots,n-k$。

实际上，$p=\beta_1u_1+\cdots+\beta_ku_k$，$p\in\operatorname{Ker}B$。

⑥ $q\perp\Pi_k \Leftrightarrow q^Tu_i=0$，其中 $U=[u_1,\cdots,u_k]$。

定义：共轭超平面 $\hat{\Pi}_{n-k}$，设 Π_k 是以 $p_1,\cdots,p_{n-k}$ 为法向的 k 维平面，则 $\hat{\Pi}_{n-k}:=x_*+a_1A^{-1}p_1+\cdots+a_{n-k}A^{-1}p_{n-k}$ 为 Π_k 的共轭超平面，其中 $x_*=A^{-1}b$。

注：① $\forall p\in\Pi_k$，$q\in\hat{\Pi}_k$，$p\in\operatorname{Ker}[p_1,\cdots,p_{n-k}]$，$q\in\operatorname{span}\{A^{-1}p_1,\cdots,A^{-1}p_{n-k}\}$

$\therefore q^TAp=0$。

② 若 $\Pi_k=x_0+a_1u_1+\cdots+a_ku_k$，则 $Au_1,\cdots,Au_k$ 是 $\hat{\Pi}_k$ 的法向。

定义：$n-1$ 维超椭球面 $E_{n-1}:=\{x\in\mathbb{R}^n \mid (x-x_0)^TB(x-x_0)=r\}$，其中 $B>0$ 称为定矩阵，x_0 称为超椭球面的中心。

则：$E_{n-1}:\varphi(x)=r$，$(r>\varphi(x_*))$ 是以 $x_*=A^{-1}b$ 为中心的 $n-1$ 维超平面。

$$\varphi(x)=\frac12x^TAx-b^Tx=\frac12x^TAx-x_*^TAx=\frac12(x-x_*)^TA(x-x_*)-\frac12x_*^TAx_*=r.$$

定理2.1. 设 $\Pi_k: x = x_0 + Uy,\ y \in \mathbb{R}^k$ 是一个 k 维超平面，其中 $U \in \mathbb{R}^{n\times k}_k$，则：

(1) φ 在 Π_k 上的极小点是唯一的.

(2) φ 在 Π_k 上的极小点正好是 Π_k 截 $n-1$ 维超椭球面 $E_{n-1}: \varphi(x)=r$ 所得到的 $k-1$ 维超椭球面，$E_{k-1} = E_{n-1} \cap \Pi_k$ 所界定的超椭球的中心

(3) $\tilde{x}$ 是 φ 在 Π_k 上的极小点充分必要条件是 φ 在 $\tilde{x}$ 的梯度 $\nabla\varphi(\tilde{x})$ 垂直于 Π_k.

定理2.2 设 $p_1, \cdots p_{n-k}$ 是 $n-k$ 个线性无关的向量，则 φ 在任一以 $p_1, \cdots, p_{n-k}$ 为法向的 k 维超平面 Π_k 上的极小点必位于某共轭超平面 $\hat{\Pi}_{n-k}$ 上.

§3、共轭梯度法

假设 p_k 是比负梯度方向更好的方向，则最速下降法可改善为：

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_{k+1} p_k .$$

其中 $\alpha_{k+1} = r_k^T p_k / p_k^T A p_k$，$r_k = b - Ax_k$.

定理3.1 设 $m < n$，$1 \le k \le m$，有

(1) $p_i^T r_k = 0$，$i = 0, 1, \cdots k-1$

(2) $r_i^T r_k = 0$，$i = 0, 1, \cdots, k-1$

(3) $p_i^T A p_k = 0$，$i = 0, 1, \cdots, k-1$

(4) $\mathrm{span}\{r_0, r_1, \cdots, r_k\} = \mathrm{span}\{p_0, p_1, \cdots, p_k\} = \mathrm{span}\{r_0, Ar_0, \cdots, A^k r_0\}$

定义：Krylov子空间，$K(A, r_0, j) = \mathrm{span}\{r_0, Ar_0, \cdots, A^{j-1}r_0\}$

定理3.2：设CG算法执行到 $k=m$ 时结束，则对于 $\forall k$，$1 \le k < m$，有：

(1) x_k 是 φ 在 k 维超平面 Π_k：$x = x_0 + \xi_0 p_0 + \xi_1 p_1 + \cdots + \xi_{k-1} p_{k-1}$ 上的极小点。

(2) p_k 与 φ 在 x_k 的负梯度方向 $r_k = b - Ax_k$ 在 Π_k 的共轭超平面 Π_{n-k} 上的正交投影同向。

§4. 实用共轭梯度法和收敛性。

(令误差向量 $u_k = x_k - x_*$)

引理4.1：$\|u_k\|_A \le \min\limits_{g_k \in \mathcal{P}_k^{(0)}} \max\limits_{\lambda \in \lambda(A)} |g_k(\lambda)| \, \|u_0\|_A$.

其中 $\mathcal{P}_k^{(0)}$ 表示满足 $g_k(0)=1$ 的次数不超过 k 的实系数多项式全体。

定理4.1．在引理4.1的假设下，有：

$$\|u_k\|_A \le 2\left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^k \|u_0\|_A，\text{其中 } \kappa = \kappa_2(A).$$

定理4.2．

§5．预优共轭梯度法(PCG)

选取可逆矩阵 C，令 $\tilde{A} = C^{-1}AC^{-T}$，

使得 $\tilde{A}$ 的特征值分布在一个较小区间(或 $R(\tilde{A})$ 较小)

再应用共轭梯度法求解 $\tilde{A}\tilde{x}=\tilde{b}$，其中 $\tilde{x}=C^T x$，$\tilde{b}=C^{-1}b$.

预优矩阵 M 应该满足如下条件：

(1) M 对称正定，$M=CC^T$，C可逆

(2) M 应该与 A 的稀疏性差不多

(3) $M^{-1}A$（即 $\tilde{A}=C^{-1}AC^{-T}$）的特征值分布集中.

(4) $Mz=r$ 的方程组容易求解

§6. 不完全分解预处理方法

6.1. 松弛不完全LU分解

定义：松弛不完全 LU 分解（RILU）分解为：

$$A=LU+R.$$

定义：对角占优矩阵，$A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$，且 $|a_{ii}|\geq\sum_{i\neq j}|a_{ij}|$，$i=1,2,\cdots,n$.

定义：M矩阵，$A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$，满足：

(1) $a_{ii}>0$，$i=1,2,\cdots,n-1$，$a_{nn}\geq 0$

(2) $a_{ij}\leq 0$，$i\neq j$.

(3) $n(i)>i$，$i=1,2,\cdots,n-1$，其中 $n(i)=\max\{j: 1\leq j\leq n, a_{ij}\neq 0\}$

定理 6.1. 设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是对角占优的 M 矩阵，则松弛不完全 LU 分解产生的矩阵 $A_1, A_2, \cdots, A_n$ 都是对角占优的 M 矩阵，并且有：

(1) $a_{ij}^{(k+1)}\leq a_{ij}^{(k)}\leq 0$，$k+1\leq i\neq j\leq n$,

(2) $S_i^{(k+1)} \geq S_i^{(k)} \geq 0, \quad i=k+1,\cdots,n$

(3) $0 < a_{ii}^{(k+1)} \leq a_{ii}^{(k)}, \quad i=k+1$

(4) $0 \leq a_{nn}^{(k+1)} \leq a_{nn}^{(k)}$

其中 $S_i^{(k)}$ 表示 A_k 的第 i 行元素之和，$S_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^{(k)}$.

推论 6.1：设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对角占优的 M 矩阵，则对任意的指标集 $\mathcal{G}$ ($\mathcal{S}_n \supset \mathcal{G} \supset \mathcal{P}_A$) 和任意的参数 ω ($0 \leq \omega \leq 1$)，都存在 A 关于 $\mathcal{G}$ 和 ω 的松弛不完全 LU 分解.

6.2 松弛不完全 Cholesky 分解

设
$$A = \begin{bmatrix} D_1 & A_2^T & & 0 \\ A_2 & D_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & A_m^T \\ 0 & & A_m & D_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$
是块三对角矩阵，其中 D_k 是 $m_k \times m_k$ 的三对角矩阵.

考虑关于 $\mathcal{G}$ 和 ω 的松弛不完全 Cholesky 分解 (RIC):

$$A = LDL^T + R$$

其中 $R = [r_{ij}]$, $r_{ij} = 0$, $(i,j) \in \mathcal{G}$, $r_{ii} = -\omega \sum_{j\neq i} r_{ij}$. $i=1,2,\cdots,n$.

D 为对角矩阵，易知 R 也为对称矩阵.

RIC 的实现类似于 RILU

LDL^T 矩阵的正定性由如下定理保证，

定理 6.2. 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称弱严格对角占优的 M 矩阵，则对任意的对称指标集 $\mathcal{G}$，$\mathcal{S}_n \supset \mathcal{G} \supset \mathcal{P}_n$ 和任意的松弛参数 ω，$0 \leq \omega \leq 1$，A 都有关于 $\mathcal{G}$ 和 ω 的松弛不完全 Cholesky 分解，$A = LDL^T + R$，且 LDL^T 都是对称正定的，即 D 的每个对角元

素都是正数.

第五章：大型稀疏线性方程组求解

§1、Krylov子空间方法

一、CG, PCG

定义：$\mathrm{span}\{v, Av, \cdots, A^{m-1}v\} = K_m(A, v)$, $v = r_0$.

Krylov子空间性质

二、Arnoldi方法（正交方法） （类似于Schmidt正交化）

三、广义最小余量法（GMRES）

1、基本GMRES方法

设 $K_m = \mathrm{span}\{v_1, Av_1, \cdots, A^{m-1}v_1\}$，设 $v_1, \cdots, v_m$ 是一组标准正交基，令 $V_m = [v_1, \cdots, v_m]$

则 $\forall x \in x_0 + K_m$, $x = x_0 + V_m y$.

定义：$J(y) = \|b - Ax\|_2 = \|b - A(x + V_m y)\|_2$,

可计算得：$J(y) = \|b - A(x_0 + V_m y)\|_2 = \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$.

在GMRES中，我们求解：

$$\min_{x \in x_0 + K_m} \|b - Ax\|_2 \Leftrightarrow \min_{y \in \mathbb{R}^m} J(y) = \|b - A(x_0 + V_m y)\|_2 = \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$$

子空间上的大规模问题 $\Rightarrow$ $(m+1)\times m$ 阶矩阵的最小二乘问题.

GMRES算法，重启GMRES算法.

四、预条件GMRES.

三、多重网格.

1、粗问题和光滑子

2. Two-Grid cycles

六、区域分解方法

1、直接法和Schur补

1.1 块高斯消去法

1.2 Schur补

2. 区域分解法

第六章 最小二乘问题的数值解法

§1. 最小二乘解的数学性质

最小二乘解的特征：

设 $A\in\mathbb{R}^{m\times n}$, $m>n$, $b\in\mathbb{R}^m$. 最小二乘问题定义为：

$$\|Ax-b\|_2 = \min_{v\in\mathbb{R}^n}\|Av-b\|_2. \qquad \cdots (1)$$

记问题(1)的解集为：$\mathcal{X}_{LS}=\{x\in\mathbb{R}^n \mid x \text{ 满足(1)}\}$

定义最小范数解为：$x_{LS} = \underset{x\in\mathcal{X}_{LS}}{\arg\min}\|x\|_2$

定理1.1. $x\in\mathcal{X}_{LS} \iff A^T(Ax-b)=0$.

推论1.1. (1) $\mathcal{X}_{LS}$ 是凸集

(2) x_{LS} 是唯一的

(3) $\mathcal{X}_{LS}=\{x_{LS}\}$ 的充要条件是 $\operatorname{rank}(A)=n$.

1.2、最小二乘解的一般表示

定义：Moore-Penrose 广义逆，记作 A^+，若 $A\in\mathbb{R}^{m\times n}$，$A^+\in\mathbb{R}^{n\times m}$ 满足

(1) $AA^+A=A$.

(2) $A^+AA^+=A^+$

(3) $(AA^+)^T=AA^+$

(4) $(A^+A)^T=A^+A$.

注：① $P_{R(A)}=AA^+$，$P_{N(A^+)}=I-AA^+$

$P_{R(A^T)}=A^+A$，$P_{N(A)}=I-A^+A$.

定理 2.1、LS问题的解由 $x=A^+b+(I-A^+A)z$ 给出，其中 $z\in\mathbb{R}^n$ 为任意向量。$x_{LS}=A^+b$.

1.3、最小二乘解的扰动分析

假定 $A,\delta A\in\mathbb{R}^{m\times n}$，$b,\delta b\in\mathbb{R}^m$. 设 $x=\arg\min\limits_{v\in\mathbb{R}^n}\|Av-b\|_2$，

$$x+\delta x=\arg\min_{v\in\mathbb{R}^n}\|(A+\delta A)v-(b+\delta b)\|_2.$$

即：$x=A^+b$，$x+\delta x=(A+\delta A)^+(b+\delta b)$.

定理 1.3、如果 $\operatorname{rank}(\tilde{A})=\operatorname{rank}(A)$，且 $\eta<1$，则：

$$\|\delta x\|_2\le\frac{\kappa}{1-\eta}\left(\varepsilon_A\|x\|_2+\frac{\|\delta b\|_2}{\|A\|_2}+\varepsilon_A\kappa\frac{\|r\|_2}{\|A\|_2}\right)+\varepsilon_A\kappa\|x\|_2.$$

其中 $r=b-Ax$.

§2. 求解满秩LS问题的数值方法

$A\in\mathbb{R}^{m\times n}$，$\operatorname{rank}(A)=n$，$\mathcal{X}_{LS}$ 中只有一个元素 x_{LS}.

2.1 正规化方法

由定理1.1，$x\in\mathcal{X}_{LS}\Leftrightarrow A^TAx=A^Tb$，$\because \operatorname{rank}A=n$，

$\therefore A^TAx=A^Tb$ 有唯一解，由于 A^TA 对称正定，$\therefore$ 可用 Cholesky 分解法求解.

2.2 正交化方法

$\because \|Ax-b\|_2 = \min_{v\in\mathbb{R}^n} \|Av-b\|_2 = \min_{v\in\mathbb{R}^n} \|Q^T(Av-b)\|_2$,

其中Q为m×m阶正交矩阵.

因此,可选择合适的Q,使问题转化为容易求解的LS问题.

设A有QR分解:$A = Q\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 R$,其中$Q\in\mathbb{R}^{m\times m}$是正交矩阵,

$Q=[Q_1, Q_2]$,$R\in\mathbb{R}^{n\times n}$是对角线为正数的上三角矩阵.

记$d = Q^T b = \begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \end{bmatrix} b = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix}\begin{matrix} n \\ m-n \end{matrix}$.

则有 $\|Q^T(Ax-b)\|_2^2 = \left\|\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}x - \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix}\right\|_2^2 = \|Rx-d_1\|_2^2 + \|d_2\|_2^2$.

$\therefore x\in\mathcal{X}_{LS} \Leftrightarrow Rx = d_1$.

正交化方法的步骤如下:

(1) 求矩阵A的QR分解. $A = Q_1 R$

(2) 计算 $d_1 = Q_1^T b$,

(3) 解方程组 $Rx = d_1$

QR分解的实现: <1> Householder方法

<2> Givens方法

<3> 改进的Gram-Schimit正交化方法.

§3. 求解秩亏LS问题的数值方法

$\text{rank}(A) < n$,$\mathcal{X}_{LS}$中有无穷多个解.

3.1 列主元QR分解法

思路:对A进行排列,使得其前r列线性无关,然后QR分解.

即:$AP = Q\begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{matrix} r \\ m-r \end{matrix}$ (列块大小 r, $n-r$),其中P是排列方阵,Q是正交方阵,R_{11}是上三角阵(可逆)

则 Q 的前 r 列就是 $R(A)$ 的一组标准正交基.

3.2 奇异值分解法

$$A = U\Sigma V^T, \quad \Sigma = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} r \\ m-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} & \end{array}, \quad \Sigma_r = diag(\sigma_1, \cdots, \sigma_r),$$

$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$.

则 $x_{LS} = A^+ b = V \begin{bmatrix} \Sigma_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T b = \sum_{i=1}^{r} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$

3.3. 数值秩的定义和确定方法

定义 3.1. 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 如果对某一正数 δ 有:

$$r = \min\{rank(B) : B \in \mathbb{R}^{m\times n}, \|B-A\|_2 \leq \delta\}.$$

则称 r 是矩阵 A 的数值秩

第七章. 求解特征值问题的QR方法

§1. 特征值和不变子空间的条件数.

1.1. 特征值的条件数.

Weilandt-Hoffmann定理, 若 A, B 是两个 n 阶正规矩阵,

$$\left(\sum_{i=1}^{n} |\mu_{\pi(i)} - \lambda_i|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq \|B-A\|_F.$$

定义: A 的谱条件数:

$$\nu(A) = \inf_{Q\in \mathcal{D}_A} \|Q\|_2 \cdot \|Q^{-1}\|_2$$

其中 $\mathcal{D}_A = \{Q \in \mathbb{C}^{n\times n} : Q^{-1}AQ = J\}$

注: (1) 若 A 是正规矩阵, $\nu(A) = 1$

(2) $\nu(A)$ 是 A 对全部特征值的条件数.

§1.2 不变子空间的条件数.

定义：矩阵 $B\in\mathbb{C}^{l\times l}$ 与 $C\in\mathbb{C}^{m\times m}$ 的分离度为：

$$\mathrm{sep}(B,C)=\inf_{\substack{P\in\mathbb{C}^{m\times l}\\ \|P\|_2=1}}\|PB-CP\|_2 .$$

注：① 当 $\lambda(B)\cap\lambda(C)=\phi$ 时，$\mathrm{sep}(B,C)>0$.

② $\mathrm{sep}(B,C)\le\min\{|\lambda-\mu|,\ \lambda\in\lambda(B),\ \mu\in\lambda(C)\}$

定义：不变子空间 $R(X_1)$ 的条件数：$\mathrm{sep}(A_{11},A_{22})$.

§2、双重步位移的QR算法

2.1. QR算法基本思想

2.2. 实Schur标准形

2.3 上Hessenberg化

2.4 双重步位移的QR迭代

§3. 特征向量和不变子空间

3.1 特征向量计算

第八章、逼近似的工具

一、单向量迭代

1.1 乘幂法

1.2 反幂法

二、收缩技术

2.1 Wielant Deflation

2.2 斜投影法

1. 正交投影法

2、Hermite矩阵

第九章 子空间迭代

一、简单子空间迭代

二、投影子空间迭代

三、Arnodi 方法

四、Lanczos 方法

五、块子空间方法

六、Lanczos 过程收敛性

1、特征向量与 K_m 的距离

2. 特征值收敛性

3. 特征向量.

4. Arnoldi 过程的收敛性.