

矩阵计算

潘建瑜

华东师范大学数学系

课程主要内容

- 线性方程组的直接解法
- 线性最小二乘问题的数值算法
- 非对称矩阵的特征值计算
- 对称矩阵特征值计算与奇异值分解
- 线性方程组迭代算法
- 特征值问题的迭代算法 (部分特征值和特征向量)

主要参考资料

- G. H. Golub and C. F. van Loan, “[Matrix Computations \(4th\)](#),” 2013.
对应中文版为: 《[矩阵计算](#)》(第三版), 袁亚湘等译, 2001.
- J. W. Demmel, “[Applied Numerical Linear Algebra](#),” 1997.
对应中文版为: 《[应用数值线性代数](#)》, 王国荣译, 2007.
- L. N. Trefethen and D. Bau, III, “[Numerical Linear Algebra](#),” 1997.
对应中文版为: 《[数值线性代数](#)》, 陆金甫等译, 2006.
- 徐树方, “[矩阵计算的理论与方法](#),” 北京大学出版社, 1995.
- 曹志浩, “[数值线性代数](#),” 复旦大学出版社, 1996.

课程主页

<http://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/MatrixComp/>

第一讲 线性代数基础

- 1 引言
- 2 线性空间与内积空间
- 3 向量范数与矩阵范数
- 4 矩阵与投影
- 5 矩阵标准型
- 6 几类特殊矩阵
- 7 Kronecker 积

1 引言

计算数学, 也称 数值分析 或 计算方法.

1947 年 Von Neumann 和 Goldstine 在《美国数学会通报》发表了题为“高阶矩阵的数值求逆”的著名论文, 开启了现代计算数学的研究

一般来说, 计算数学主要研究如何求出数学问题的近似解 (数值解), 包括算法的设计与分析 (收敛性, 稳定性, 复杂性等)

计算数学主要研究内容:

数值逼近, 数值微积分, 数值代数, 微分方程数值解, 最优化等

为什么计算数学

科学计算是 20 世纪重要科学技术进步之一, 已与理论研究和实验研究相并列成为科学研究的第三种方法. 现今科学计算已是体现国家科学技术核心竞争力的重要标志, 是国家科学技术创新发展的关键要素

—— 国家自然科学基金·重大项目指南, 2014

计算科学是 21 世纪确保国家核心竞争能力的战略技术之一

—— 计算科学: 确保美国竞争力, 2005

科学计算的核心/数学基础: 计算数学.

If any other mathematical topic is as fundamental to the mathematical sciences as calculus and differential equations, it is numerical linear algebra.

— Trefethen & Bau, 1997.

国家自然科学基金委员会关于**计算数学**的分类 (2017):

- 计算数学与科学与工程计算 (A0117)
 - 偏微分方程数值解 (A011701)
 - 流体力学中的数值计算 (A011702)
 - 一般反问题的计算方法 (A011703)
 - 常微分方程数值计算 (A011704)
 - 数值代数 (A011705)
 - 数值逼近与计算几何 (A011706)
 - 谱方法及高精度数值方法 (A011707)
 - 有限元和边界元方法 (A011708)
 - 多重网格技术与区域分解 (A011709)
 - 自适应方法 (A011720)
 - 并行计算 (A011711)

计算数学的主要任务

- 算法设计: 构造求解各种数学问题的数值方法
- 算法分析: 收敛性、稳定性、复杂性、计算精度等
- 算法实现: 编程实现、软件开发

好的数值方法一般需满足以下几点:

- 易于在计算机上实现
- 有可靠的理论分析, 即收敛性稳定性等有数学理论保证
- 有良好的计算复杂性 (时间和空间)
- 要有具体的数值试验来证明是行之有效的

数值线性代数基本问题

数值代数: 数值线性代数和数值非线性代数

数值线性代数: 也称矩阵计算, 主要研究以下问题:

- 线性方程组求解

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ 非奇异}$$

- (线性) 最小二乘问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad m \geq n$$

- 矩阵特征值问题

$$Ax = \lambda x, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \lambda \in \mathbb{C}, x \in \mathbb{C}^n, x \neq 0$$

- 矩阵奇异值问题

$$A^T Ax = \sigma^2 x, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \sigma \geq 0, x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0$$

- 其它问题:

广义特征值问题, 二次特征值问题, 非线性特征值问题, 矩阵方程, 特征值反问题, 张量计算,

† 数值方法一般都是近似方法, 求出的解是有误差的, 因此误差分析非常重要.

常用研究方法

- 矩阵分解
- 矩阵分裂
- 扰动分析

† 问题的特殊结构对算法的设计具有非常重要的影响.

† 在编程实现时, 要充分利用现有的优秀程序库.

二十世纪十大优秀算法 (SIAM News, 2000)

1. Monte Carlo method
2. Simplex Method for Linear Programming
3. Krylov Subspace Iteration Methods
4. The Decompositional Approach to Matrix Computations
5. The Fortran Optimizing Compiler
6. QR Algorithm for Computing Eigenvalues
7. Quicksort Algorithm for Sorting
8. Fast Fourier Transform
9. Integer Relation Detection Algorithm
10. Fast Multipole Method

2 线性空间与内积空间

- 数域, 如: $\mathbb{Q}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$
- 线性空间, 如: $\mathbb{R}^n, \mathbb{C}^n, \mathbb{R}^{m \times n}$
- 线性相关与线性无关, 秩, 基, 维数
- 线性子空间
- 像空间 (列空间, 值域) $\text{Ran}(A)$, 零空间 (核) $\text{Ker}(A)$
- 张成子空间: $\text{span}(x_1, x_2, \dots, x_k), \text{span}(A)$

直和

设 $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ 是线性空间 \mathcal{S} 的两个线性子空间, 如果 $\mathcal{S}_1 + \mathcal{S}_2$ 中的任一元素 x 都可以唯一表示成

$$x = x_1 + x_2, \quad x_1 \in \mathcal{S}_1, x_2 \in \mathcal{S}_2,$$

则称 $\mathcal{S}_1 + \mathcal{S}_2$ 为**直和**, 记为 $\mathcal{S}_1 \oplus \mathcal{S}_2$.

定理 设 \mathcal{S}_1 是线性空间 \mathcal{S} 的一个线性子空间, 则存在 \mathcal{S} 的另一个线性子空间 \mathcal{S}_2 , 使得

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_1 \oplus \mathcal{S}_2.$$

例: 设 $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, 则

$$\mathbb{C}^n = \text{Ker}(A) \oplus \text{Ran}(A^*), \quad \mathbb{C}^m = \text{Ker}(A^*) \oplus \text{Ran}(A)$$

内积空间

- 内积, 内积空间, 欧氏空间, 酉空间
- 常见内积空间:
 - $\mathbb{C}^n : (x, y) = y^* x$
 - $\mathbb{R}^n : (x, y) = y^T x$
 - $\mathbb{R}^{m \times n} : (A, B) = \text{tr}(B^T A)$

正交与正交补

- 正交: 向量正交, 子空间正交
- 正交补: 存在且唯一

3 向量范数与矩阵范数

定义 (向量范数) 若函数 $f: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}$ 满足

- (1) $f(x) \geq 0, \forall x \in \mathbb{C}^n$, 等号当且仅当 $x = 0$ 时成立;
- (2) $f(\alpha x) = |\alpha| \cdot f(x), \forall x \in \mathbb{C}^n, \alpha \in \mathbb{C}$;
- (3) $f(x + y) \leq f(x) + f(y), \forall x, y \in \mathbb{C}^n$;

则称 $f(x)$ 为 \mathbb{C}^n 上的范数, 通常记作 $\|\cdot\|$

相类似地, 我们可以定义实数空间 \mathbb{R}^n 上的向量范数.

常见的向量范数:

- 1-范数: $\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$
- 2-范数: $\|x\|_2 = \sqrt{|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_n|^2}$
- ∞ -范数: $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$
- p -范数: $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty$

定义 (范数的等价性) \mathbb{C}^n 上的向量范数 $\|\cdot\|_\alpha$ 与 $\|\cdot\|_\beta$ 等价:
存在正常数 c_1, c_2 , 使得

$$c_1 \|x\|_\alpha \leq \|x\|_\beta \leq c_2 \|x\|_\alpha, \quad \forall x \in \mathbb{C}^n$$

定理 \mathbb{C}^n 空间上的所有向量范数都是等价的, 特别地, 有

$$\|x\|_2 \leq \|x\|_1 \leq \sqrt{n} \|x\|_2,$$

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \sqrt{n} \|x\|_\infty,$$

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_1 \leq n \|x\|_\infty.$$

(证明留作练习)

定理 (Cauchy-Schwartz 不等式) 设 (\cdot, \cdot) 是 \mathbb{C}^n 上的内积, 则对任意 $x, y \in \mathbb{C}^n$, 有

$$|(x, y)|^2 \leq (x, x) \cdot (y, y)$$

(证明留作练习)

推论 设 (\cdot, \cdot) 是 \mathbb{C}^n 上的内积, 则 $\|x\| \triangleq \sqrt{(x, x)}$ 是 \mathbb{C}^n 上的一个向量范数.

(证明留作练习)

定理 (范数的连续性) 设 $\|\cdot\|$ 是 \mathbb{C}^n 上的一个向量范数, 则 $f(x) \triangleq \|x\|$ 是 \mathbb{C}^n 上的连续函数.

矩阵范数

定义 (矩阵范数) 若函数 $f: \mathbb{C}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{C}$ 满足

- (1) $f(A) \geq 0, \forall A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 等号当且仅当 $A = 0$ 时成立;
- (2) $f(\alpha A) = |\alpha| \cdot f(A), \forall A \in \mathbb{C}^{n \times n}, \alpha \in \mathbb{C}$;
- (3) $f(A + B) \leq f(A) + f(B), \forall A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$;

则称 $f(x)$ 为 $\mathbb{C}^{n \times n}$ 上的范数, 通常记作 $\|\cdot\|$.

相容的矩阵范数: $f(AB) \leq f(A)f(B), \quad \forall A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$

注: 本讲义所涉及的矩阵范数一般都指**相容矩阵范数**

引理 设 $\|\cdot\|$ 是 \mathbb{C}^n 上的向量范数, 则

$$\|A\| \triangleq \sup_{x \in \mathbb{C}^n, x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

是 $\mathbb{C}^{n \times n}$ 上的范数, 称为**算子范数**, 或**诱导范数**, **导出范数**.

† 算子范数都是相容的, 且

$$\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|, \quad A \in \mathbb{C}^{n \times n}, x \in \mathbb{C}^n$$

注: 类似地, 我们可以定义 $\mathbb{C}^{m \times n}$ 上的矩阵范数.

引理 可以证明:

$$(1) \text{ 1-范数 (列范数): } \|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \left(\sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right)$$

$$(2) \infty\text{-范数 (行范数): } \|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \left(\sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right)$$

$$(3) \text{ 2-范数 (谱范数): } \|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$$

(证明留作练习)

另一个常用范数

F-范数

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}$$

定理 (矩阵范数的等价性) $\mathbb{R}^{n \times n}$ 空间上的所有范数都是等价的, 特别地, 有

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \|A\|_2 \leq \|A\|_1 \leq \sqrt{n} \|A\|_2,$$

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \|A\|_2 \leq \|A\|_\infty \leq \sqrt{n} \|A\|_2,$$

$$\frac{1}{n} \|A\|_\infty \leq \|A\|_1 \leq n \|A\|_\infty,$$

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \|A\|_1 \leq \|A\|_F \leq \sqrt{n} \|A\|_2.$$

(证明留作练习)

矩阵范数的一些性质

- 对任意的算子范数 $\|\cdot\|$, 有 $\|I\| = 1$
- 对任意的相容范数 $\|\cdot\|$, 有 $\|I\| \geq 1$
- F -范数是相容的, 但不是算子范数
- $\|\cdot\|_2$ 和 $\|\cdot\|_F$ 是酉不变范数
- $\|A^T\|_2 = \|A\|_2$, $\|A^T\|_1 = \|A\|_\infty$
- 若 A 是正规矩阵, 则 $\|A\|_2 = \rho(A)$

向量序列的收敛

设 $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ 是 \mathbb{C}^n 中的一个向量序列, 如果存在 $x \in \mathbb{C}^n$, 使得

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

则称 $\{x^{(k)}\}$ (按分量) 收敛到 x , 记为 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x$.

定理 设 $\|\cdot\|$ 是 \mathbb{C}^n 上的任意一个向量范数, 则 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x$ 的充要条件是

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x\| = 0.$$

收敛速度

设点列 $\{\varepsilon_k\}_{k=1}^{\infty}$ 收敛, 且 $\lim_{k \rightarrow \infty} \varepsilon_k = 0$. 若存在一个有界常数 $0 < c < \infty$, 使得

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p} = c,$$

则称点列 $\{\varepsilon_k\}$ 是 p 次 (渐进) 收敛的. 若 $1 < p < 2$ 或 $p = 1$ 且 $c = 0$, 则称点列是超线性收敛的.

† 类似地, 我们可以给出矩阵序列的收敛性和判别方法.

4 矩阵与投影

特征值与特征向量

- 特征多项式, 特征值, 特征向量, 左特征向量, 特征对
- n 阶矩阵 A 的谱: $\sigma(A) \triangleq \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$
- 代数重数和几何重数, 特征空间
- 最小多项式
- 可对角化, 特征值分解
- 可对角化的充要条件
- 特征值估计: Bendixson 定理, 圆盘定理

Bendixson 定理

设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 令 $H = \frac{1}{2}(A + A^*)$, $S = \frac{1}{2}(A - A^*)$. 则有

$$\lambda_{\min}(H) \leq \operatorname{Re}(\lambda(A)) \leq \lambda_{\max}(H),$$

$$\lambda_{\min}(iS) \leq \operatorname{Im}(\lambda(A)) \leq \lambda_{\max}(iS),$$

其中 $\operatorname{Re}(\cdot)$ 和 $\operatorname{Im}(\cdot)$ 分别表示实部和虚部.

† 一个矩阵的特征值的实部的取值范围由其 Hermite 部分确定, 而虚部则由其斜 Hermite 部分确定.

Gerschgorin 圆盘定理

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

$$\mathcal{D}_i \triangleq \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \right\}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

这就是 A 的 n 个 Gerschgorin 圆盘.

定理 (Gerschgorin 圆盘定理) 设 $A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$. 则 A 的所有特征值都包含在 A 的 Gerschgorin 圆盘的并集中, 即 $\sigma(A) \subset \bigcup_{i=1}^n \mathcal{D}_i$.

投影变换与投影矩阵

设 $\mathcal{S} = \mathcal{S}_1 \oplus \mathcal{S}_2$, 则 \mathcal{S} 中的任意向量 x 都可唯一表示为

$$x = x_1 + x_2, \quad x_1 \in \mathcal{S}_1, \quad x_2 \in \mathcal{S}_2.$$

我们称 x_1 为 x 沿 \mathcal{S}_2 到 \mathcal{S}_1 上的投影, 记为 $x|_{\mathcal{S}_1}$.

设线性变换 $P: \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$. 如果对任意 $x \in \mathcal{S}$, 都有

$$Px = x|_{\mathcal{S}_1},$$

则称 P 是从 \mathcal{S} 沿 \mathcal{S}_2 到 \mathcal{S}_1 上的投影变换 (或投影算子), 对应的变换矩阵称为投影矩阵.

引理 设 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是一个投影矩阵, 则

$$\mathbb{R}^n = \text{Ran}(P) \oplus \text{Ker}(P). \quad (1.3)$$

反之, 若 (1.3) 成立, 则 P 是沿 $\text{Ker}(P)$ 到 $\text{Ran}(P)$ 上的投影.

投影矩阵由其像空间和零空间唯一确定.

引理 若 \mathcal{S}_1 和 \mathcal{S}_2 是 \mathbb{R}^n 的两个子空间, 且 $\mathbb{R}^n = \mathcal{S}_1 \oplus \mathcal{S}_2$, 则存在唯一的投影矩阵 P , 使得

$$\text{Ran}(P) = \mathcal{S}_1, \quad \text{Ker}(P) = \mathcal{S}_2.$$

投影矩阵的判别

定理 矩阵 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是投影矩阵的充要条件是 $P^2 = P$.

(证明留作练习)

投影算子的矩阵表示

设 \mathcal{S}_1 和 \mathcal{S}_2 是 \mathbb{R}^n 的两个 m 维子空间. 如果 $\mathcal{S}_1 \oplus \mathcal{S}_2^\perp = \mathbb{R}^n$, 则存在唯一的投影矩阵 P , 使得

$$\text{Ran}(P) = \mathcal{S}_1, \quad \text{Ker}(P) = \mathcal{S}_2^\perp.$$

此时, 我们称 P 是 \mathcal{S}_1 上与 \mathcal{S}_2 正交的投影矩阵, 且有

$$P = V(W^\top V)^{-1}W^\top,$$

其中 $V = [v_1, v_2, \dots, v_m]$ 和 $W = [w_1, w_2, \dots, w_m]$ 的列向量组分别构成 \mathcal{S}_1 和 \mathcal{S}_2 的一组基.

正交投影

设 \mathcal{S}_1 是内积空间 \mathcal{S} 的一个子空间, $x \in \mathcal{S}$, 则 x 可唯一分解成

$$x = x_1 + x_2, \quad x_1 \in \mathcal{S}_1, \quad x_2 \in \mathcal{S}_1^\perp,$$

其中 x_1 称为 x 在 \mathcal{S}_1 上的正交投影.

- 若 P 是沿 \mathcal{S}_1^\perp 到 \mathcal{S}_1 上的投影变换, 则称 P 为 \mathcal{S}_1 上的正交投影变换 (对应的矩阵为 正交投影矩阵), 记为 $P_{\mathcal{S}_1}$
- 如果 P 不是正交投影变换, 则称其为斜投影变换

定理 投影矩阵 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是正交投影矩阵的充要条件
 $P^\top = P$. (证明留作练习)

推论 设 P 是子空间 S_1 上的 **正交投影变换**. 令 v_1, v_2, \dots, v_m 是 S_1 的一组标准正交基, 则

$$P = VV^{\top},$$

其中 $V = [v_1, v_2, \dots, v_m]$.

性质 设 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是一个正交投影矩阵, 则

$$\|P\|_2 = 1,$$

且对 $\forall x \in \mathbb{R}^n$, 有

$$\|x\|_2^2 = \|Px\|_2^2 + \|(I - P)x\|_2^2.$$

下面是关于正交投影矩阵的一个很重要的应用.

定理 设 \mathcal{S}_1 是 \mathbb{R}^n 的一个子空间, $z \in \mathbb{R}^n$ 是一个向量. 则最佳逼近问题

$$\min_{x \in \mathcal{S}_1} \|x - z\|_2$$

的唯一解为

$$x_* = P_{\mathcal{S}_1} z.$$

即 \mathcal{S}_1 中距离 z 最近 (2-范数意义下) 的向量是 z 在 \mathcal{S}_1 上的正交投影.
(证明留作练习)

推论 设矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 对称正定, 向量 $x_* \in \mathcal{S}_1 \subseteq \mathbb{R}^n$. 则 x_* 是最佳逼近问题

$$\min_{x \in \mathcal{S}_1} \|x - z\|_A$$

的解的充要条件是

$$A(x_* - z) \perp \mathcal{S}_1.$$

这里 $\|x - z\|_A \triangleq \|A^{\frac{1}{2}}(x - z)\|_2$. (证明留作练习)

不变子空间

定义 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 子空间 $S \subseteq \mathbb{R}^n$. 若 $AS \subseteq S$, 即对任意 $x \in S$, 都有 $Ax \in S$, 则称 S 为 A 的一个**不变子空间**.

定理 设 x_1, x_2, \dots, x_m 是 A 的一组线性无关特征向量, 则

$$\text{span}\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$$

是 A 的一个 m 维不变子空间.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $X \in \mathbb{R}^{n \times k}$ 且 $\text{rank}(X) = k$. 则 $\text{span}(X)$ 是 A 的不变子空间的充要条件是存在一个矩阵 $B \in \mathbb{R}^{k \times k}$ 使得

$$AX = XB,$$

此时, B 的特征值都是 A 的特征值.

(板书)

推论 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $X \in \mathbb{R}^{n \times k}$ 且 $\text{rank}(X) = k$. 若存在一个矩阵 $B \in \mathbb{R}^{k \times k}$ 使得 $AX = XB$, 则 (λ, v) 是 B 的一个特征对当且仅当 (λ, Xv) 是 A 的一个特征对.

5 矩阵标准型

计算矩阵特征值的一个基本思想是通过相似变换, 将其转化成一个形式尽可能简单的矩阵, 使得其特征值更易于计算. 其中两个非常有用的特殊矩阵是 **Jordan 标准型** 和 **Schur 标准型**.

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 则存在非奇异矩阵 $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 使得

$$X^{-1}AX = \begin{bmatrix} J_1 & & \\ & J_2 & \\ & & \ddots \\ & & & J_p \end{bmatrix} \triangleq J,$$

其中 J_i 的维数等于 λ_i 的代数重数, 且具有下面的结构

$$J_i = \begin{bmatrix} J_{i1} & & \\ & J_{i2} & \\ & & \ddots \\ & & & J_{i\nu_i} \end{bmatrix}, \quad J_{ik} = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_i & 1 \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix},$$

这里的 ν_i 为 λ_i 的几何重数, J_{ik} 称为 **Jordan 块**, 每个 Jordan 块对应于一个特征向量.

Jordan 标准型在理论研究中非常有用, 但数值计算比较困难, 目前还没有找到十分稳定的数值算法.

推论 所有可对角化矩阵组成的集合在所有矩阵组成的集合中是稠密的.

Schur 标准型

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 则存在一个酉矩阵 $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 使得

$$U^*AU = \begin{bmatrix} \lambda_1 & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & r_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} \triangleq R \quad \text{或} \quad A = URU^*, \quad (1.6)$$

其中 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 是 A 的特征值 (排序任意). (板书)

- Schur 标准型可以说是酉相似变化下的最简形式
- U 和 R 不唯一, R 的对角线元素可按任意顺序排列
- A 是正规矩阵当且仅当 (1.6) 中的 R 是对角矩阵;
- A 是 Hermite 矩阵当且仅当 (1.6) 中的 R 是实对角矩阵.

实 Schur 标准型

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则存在正交矩阵 $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 使得

$$Q^T A Q = T,$$

其中 $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是 **拟上三角矩阵**, 即 T 是块上三角的, 且对角块为 1×1 或 2×2 的块矩阵. 若对角块是 1×1 的, 则其就是 A 的一个特征值, 若对角块是 2×2 的, 则其特征值是 A 的一对共轭复特征值. (板书)

6 几类特殊矩阵

对称正定矩阵

设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$.

A 是 **半正定** $\iff \operatorname{Re}(x^* Ax) \geq 0, \forall x \in \mathbb{C}^n$

A 是 **正定** $\iff \operatorname{Re}(x^* Ax) > 0, \forall x \in \mathbb{C}^n, x \neq 0$

A 是 **Hermite 半正定** $\iff A$ Hermite 且半正定

A 是 **Hermite 正定** $\iff A$ Hermite 且正定

† 正定和半正定矩阵不一定对称或 Hermite .

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. 则 A 正定 (半正定) 的充要条件是矩阵 $H = \frac{1}{2}(A + A^*)$ 正定 (半正定). (证明留作练习)

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. 则 A 正定 (或半正定) 的充要条件是对任意非零向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 有 $x^T A x > 0$ (或 $x^T A x \geq 0$). (证明留作练习)

矩阵平方根

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是 Hermite 半正定, k 是正整数. 则存在唯一的 Hermite 半正定矩阵 $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 使得

$$B^k = A.$$

同时, 我们还有下面的性质:

- (1) $BA = AB$, 且存在一个多项式 $p(t)$ 使得 $B = p(A)$;
- (2) $\text{rank}(B) = \text{rank}(A)$, 因此, 若 A 是正定的, 则 B 也正定;
- (3) 如果 A 是实矩阵的, 则 B 也是实矩阵.

特别地, 当 $k = 2$ 时, 称 B 为 A 的平方根, 通常记为 $A^{\frac{1}{2}}$.

Hermite 正定矩阵与内积之间有这样的关系.

定理 设 (\cdot, \cdot) 是 \mathbb{C}^n 上的一个内积, 则存在一个 Hermite 正定矩阵 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 使得

$$(x, y) = y^* Ax.$$

反之, 若 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是 Hermite 正定矩阵, 则

$$f(x, y) \triangleq y^* Ax$$

是 \mathbb{C}^n 上的一个内积.

(证明留作练习)

† 上述性质在实数域中也成立.

对角占优矩阵

定义 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 若

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$$

对所有 $i = 1, 2, \dots, n$ 都成立, 且至少有一个不等式严格成立, 则称 A 为**弱行对角占优**. 若对所有 $i = 1, 2, \dots, n$ 不等式都严格成立, 则称 A 是**严格行对角占优**. 通常简称为**弱对角占优**和**严格对角占优**.

† 类似地, 可以定义**弱列对角占优** 和 **严格列对角占优**.

可约与不可约

设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 若存在置换矩阵 P , 使得 PAP^T 为块上三角, 即

$$PAP^T = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix},$$

其中 $A_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ ($1 \leq k < n$), 则称 A 为可约, 否则不可约.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 指标集 $\mathbb{Z}_n = \{1, 2, \dots, n\}$. 则 A 可约的充要条件是存在非空指标集 $J \subset \mathbb{Z}_n$ 且 $J \neq \mathbb{Z}_n$, 使得

$$a_{ij} = 0, \quad i \in J \text{ 且 } j \in \mathbb{Z}_n \setminus J.$$

这里 $\mathbb{Z}_n \setminus J$ 表示 J 在 \mathbb{Z}_n 中的补集.

(证明留作练习)

定理 若 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 严格对角占优, 则 A 非奇异. (板书)

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 不可约弱对角占优, 则 A 非奇异. (板书)

其他常见特殊矩阵

- 带状矩阵:

$a_{ij} \neq 0$ only if $-b_u \leq i - j \leq b_l$, 其中 b_u 和 b_l 为非负整数, 分别称为下带宽和上带宽, $b_u + b_l + 1$ 称为 A 的带宽

- 上 Hessenberg 矩阵: $a_{ij} = 0$ for $i - j > 1$,

$$\begin{bmatrix} * & * & * & \cdots & * \\ * & * & * & \cdots & * \\ & * & * & \cdots & * \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & * & * \end{bmatrix}$$

- 下 Hessenberg 矩阵

- Toeplitz 矩阵:

$$T = \begin{bmatrix} t_0 & t_{-1} & \cdots & t_{-n+1} \\ t_1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & t_{-1} \\ t_{n-1} & \cdots & t_1 & t_0 \end{bmatrix}$$

- 循环矩阵 (circulant):

$$C = \begin{bmatrix} c_0 & c_{n-1} & c_{n-2} & \cdots & c_1 \\ c_1 & c_0 & c_{n-1} & \cdots & c_2 \\ c_2 & c_1 & c_0 & \cdots & c_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n-1} & c_{n-2} & c_{n-3} & \cdots & c_0 \end{bmatrix}$$

- Hankel 矩阵:

$$H = \begin{bmatrix} h_0 & h_1 & \cdots & h_{n-2} & h_{n-1} \\ h_1 & \ddots & \ddots & \ddots & h_n \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ h_{n-2} & \ddots & \ddots & \ddots & h_{2n-2} \\ h_{n-1} & h_n & \cdots & h_{2n-2} & h_{2n-1} \end{bmatrix}$$

7 Kronecker 积

定义 设 $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{C}^{p \times q}$, 则 A 与 B 的 **Kronecker 积** 定义为

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{mp \times nq}.$$

Kronecker 积也称为**直积**, 或**张量积**.

† 任意两个矩阵都存在 Kronecker 积, 且 $A \otimes B$ 和 $B \otimes A$ 是同阶矩阵, 但通常 $A \otimes B \neq B \otimes A$.

$$(1) (\alpha A) \otimes B = A \otimes (\alpha B) = \alpha(A \otimes B), \quad \forall \alpha \in \mathbb{C}$$

$$(2) (A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T, \quad (A \otimes B)^* = A^* \otimes B^*$$

$$(3) (A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$$

$$(4) (A + B) \otimes C = A \otimes C + B \otimes C$$

$$(5) A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$$

$$(6) \text{混合积: } (A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$$

$$(7) (A_1 \otimes A_2 \otimes \cdots \otimes A_k)(B_1 \otimes B_2 \otimes \cdots \otimes B_k) \\ = (A_1 B_1) \otimes (A_2 B_2) \otimes \cdots \otimes (A_k B_k)$$

$$(8) (A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2) \cdots (A_k \otimes B_k) \\ = (A_1 A_2 \cdots A_k) \otimes (B_1 B_2 \cdots B_k)$$

$$(9) \text{rank}(A \otimes B) = \text{rank}(A) \text{rank}(B)$$

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$, $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 并设 (λ, x) 和 (μ, y) 分别是 A 和 B 的一个特征对, 则 $(\lambda\mu, x \otimes y)$ 是 $A \otimes B$ 的一个特征对. 由此可知, $B \otimes A$ 与 $A \otimes B$ 具有相同的特征值.

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$, $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 则

- (1) $\text{tr}(A \otimes B) = \text{tr}(A)\text{tr}(B)$;
- (2) $\det(A \otimes B) = \det(A)^n \det(B)^m$;
- (3) $A \otimes I_n + I_m \otimes B$ 的特征值为 $\lambda_i + \mu_j$, 其中 λ_i 和 μ_j 分别为 A 和 B 的特征值;
- (4) 若 A 和 B 都非奇异, 则 $(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$;

推论 设 $A = Q_1 \Lambda_1 Q_1^{-1}$, $B = Q_2 \Lambda_2 Q_2^{-1}$, 则

$$A \otimes B = (Q_1 \otimes Q_2)(\Lambda_1 \otimes \Lambda_2)(Q_1 \otimes Q_2)^{-1}.$$

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$, $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 则存在 $m+n$ 阶置换矩阵 P 使得

$$P^T(A \otimes B)P = B \otimes A.$$

定理 设矩阵 $X = [x_1, x_2, \dots, x_n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 记 $\text{vec}(X)$ 为 X 按列拉成的 mn 维列向量, 即

$$\text{vec}(X) = [x_1^T, x_2^T, \dots, x_n^T]^T,$$

则有

$$\text{vec}(AX) = (I \otimes A)\text{vec}(X), \quad \text{vec}(XB) = (B^T \otimes I)\text{vec}(X),$$

以及

$$(A \otimes B)\text{vec}(X) = \text{vec}(BXA^T).$$

Kronecker 积与矩阵方程

定理 矩阵方程

$$AX + XB = D$$

等价于代数方程

$$(I \otimes A + B^T \otimes I) \text{vec}(X) = \text{vec}(D).$$

课后习题

见讲义

参考文献

- [1] J. O. Aasen, On the reduction of a symmetric matrix to tridiagonal form, BIT, 11 (1971), 233–242.
- [2] M. Arioli, V. Pták, and Z. Strakoš, Krylov sequences of maximal length and convergence of GMRES, BIT, 38 (1998), 636–643.
- [3] C. Ashcraft, R. G. Grimes and J. G. Lewis, Accurate symmetric indefinite linear equation solvers, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 20 (1998), 513–561.
- [4] O. Axelsson, Iterative Solution Methods, Cambridge University Press, Cambridge, 1994.
- [5] Z.-Z. Bai, G. H. Golub and M. K. Ng, Hermitian and skew-Hermitian splitting methods for non-Hermitian positive definite linear systems, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 24 (2003), 603–626.
- [6] M. Van Barel, G. Heinig and P. Kravanja, A stabilized superfast solver for non-symmetric toeplitz systems, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 23 (2001), 494–510. FORTRAN code <http://people.cs.kuleuven.be/~marc.vanbarel/software/>

- [7] R. Barrett, et.al, Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, SIAM, 1994. (<http://www.netlib.org/templates/index.html>)
- [8] V. Barwell and A. George, A comparison of algorithms for solving symmetric indefinite systems of linear equations, ACM Transactions on Mathematical Software, 2 (1976), 242–251.
- [9] Åke Björck, Solving linear least square problems by Gram-Schmidt orthogonalization, BIT, 7 (1967), 1–21.
- [10] Åke Björck, Numerical Methods for Least Squares Problems, SIAM, Philadelphia, PA, 1996.
- [11] J. R. Bunch, Analysis of the diagonal pivoting method, SIAM Journal on Numerical Analysis, 8 (1971), 656–680.
- [12] J. R. Bunch and L. Kaufman, Some stable methods for calculating inertia and solving symmetric linear systems, Mathematics of Computation, 31 (1977), 163–179.
- [13] J. R. Bunch and B. N. Parlett, Direct methods for solving symmetric indefinite systems of linear equations, SIAM Journal on Numerical Analysis, 8 (1971), 639–655.
- [14] R. P. Brent, Stability of fast algorithms for structured linear systems, <http://arxiv.org/pdf/1005.0671v1.pdf>, 2010.

- [15] G. Codevico, G. Heinig and M. Van Barel, A superfast solver for real symmetric Toeplitz systems using real trigonometric transformations, Numer. Linear Algebra Appl., 12 (2005), 699–713. MATLAB code <http://people.cs.kuleuven.be/~marc.vanbarel/software/>
- [16] J. J. M. Cuppen, A Divide and Conquer Method for the Symmetric Tridiagonal Eigenproblem, Numerische Mathematik, 36 (1981), 177–195.
- [17] J. W. Demmel, Applied Numerical Linear Algebra, SIAM, Philadelphia, PA, 1997.
- [18] J. J. Dongarra, I. S. Duff, D. C. Sorensen and H. A. van der Vorst, Numerical Linear Algebra for High-Performance Computers, SIAM, Philadelphia, PA, 1998.
- [19] Z. Drmač and K. Veselić, New fast and accurate jacobi SVD algorithm. I SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 29 (2008), 1322–1342.
- [20] Z. Drmač and K. Veselić, New fast and accurate jacobi SVD algorithm. II SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 29 (2008), 1343–1362.
- [21] V. Faber, W. Joubert, E. Knill and T. Manteuffel, Minimal residual method stronger than polynomial preconditioning, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 17 (1996), 707–729.
- [22] K. Fernando and B. Parlett, Accurate singular values and differential qd algorithms, Numerische Mathematik, 67 (1994), 191–229.

- [23] B. Fischer, Polynomial based iteration methods for symmetric linear systems, Wiley-Teubner Series Advances in Numerical Mathematics, John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 1996.
- [24] N. Gastinel, Linear Numerical Analysis, Kershaw Publishing, London, 1083.
- [25] G. H. Golub, History of numerical linear algebra: A personal view, Stanford, 2007. Available at <http://forum.stanford.edu/events/2007slides/plenary/history-revised-2007-03-19-golub.pdf>
- [26] G. H. Golub and W. Kahan, Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix, SIAM Journal on Numerical Analysis, Series B, 2 (1965), 205–224.
- [27] G. H. Golub and C. F. Van Loan, Matrix Computations, The 4th Edition, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 2013.
- [28] A. Greenbaum and L. Gurvits, Max-min properties of matrix factor norms, SIAM Journal on Scientific Computing, 15 (1994), 348–358.
- [29] A. Greenbaum, V. Pták and Z. Strakoš, Any nonincreasing convergence curve is possible for GMRES, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 17 (1996), 465–469.
- [30] A. Greenbaum and Z. Strakoš, Matrices that generate the same Krylov residual spaces, in Recent Advances in Iterative Methods, vol. 60 of IMA Vol. Math. Appl., Springer, New York, 1994, pp. 95–118.

- [31] M. Gu and S. C. Eisenstat, A stable algorithm for the rank-1 modification of the symmetric eigenproblem, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 15 (1994), 1266–1276.
- [32] M. Gu and S. C. Eisenstat, A Divide-and-Conquer algorithm for the bidiagonal SVD, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 16 (1995), 79–92.
- [33] M. Gu and S. C. Eisenstat, A Divide-and-Conquer algorithm for the symmetric tridiagonal eigenproblem, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 16 (1995), 172–191.
- [34] A. Hadjidimos, Accelerated overrelaxation method, *Mathematics of Computation*, 32 (1978), 149–157.
- [35] Nicholas J. Higham, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*, Second Edition, SIAM, Philadelphia, 2002.
- [36] L. Hogben, *Handbook of Linear Algebra*, 2nd, CRC Press, 2014.
- [37] R.A. Horn and C.R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, New York, 1985.
- [38] R.A. Horn and C.R. Johnson, *Topics in Matrix Analysis*, Cambridge University Press, New York, 1991.
- [39] W. Joubert, A robust GMRES-based adaptive polynomial preconditioning algorithm for nonsymmetric linear systems, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 15 (1994), 427–439.

- [40] W. Kahan Numerical Linear Algebra, Canadian Math. Bull., 9 (1966), 757–801.
- [41] C. T. Kelley, Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations, SIAM, Philadelphia, 1995.
- [42] D. Kressner, Numerical Methods for General and Structured Eigenvalue Problems, Lecture Notes in Computational Sciences and Engineering 46, Springer-Verlag, 2005.
- [43] R. Lehoucq, Analysis and Implementation of an Implicitly Restarted Arnoldi Iteration, Ph.D. thesis, Rice University, Houston, TX, 1995.
- [44] N. Levinson The Wiener RMS (root mean square) error criterion in filter design and prediction, J. Math. Phys., 25 (1946), 261–278.
- [45] J. Liesen, Computable convergence bounds for GMRES, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 21 (2000), 882–903.
- [46] J. Liesen and P. Tichý, Convergence analysis of Krylov subspace methods, GAMM-Mitteilungen, 27 (2004), 153–173.
- [47] E. H. Moore, On the reciprocal of the general algebraic matrix, Bull. Amer. Math. Soc., 26 (1920), 394–395.
- [48] Christopher C. Paige, Miroslav Rozložník and Zdeněk Strakoš, Modified Gram-Schmidt (MGS), least squares, and backward stability of MGS-GMRES, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, (28) 2006, 264–284.

- [49] B. N. Parlett, The Symmetric Eigenvalue Problem, The 2nd Edition, SIAM, Philadelphia, PA, 1998.
- [50] D. W. Peaceman and H. H. Rachford, Jr., The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations, Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, 3 (1955), 28–41.
- [51] R. Penrose, A generalized inverse for matrices, Proc. Cambridge Philos. Soc., 51 (1955), 406–413.
- [52] V. Britanak, P. Yip and K. Rao, Discrete Cosine and Sine Transforms: General properties, Fast algorithms and Integer Approximations, Academic Press, 2007.
- [53] J. Rutter, A Serial Implementation of Cuppen’s Divide and Conquer Algorithm for the Symmetric Eigenvalue Problem, Master’s Thesis, University of California, 1994.
- [54] Y. Saad and M. H. Schultz, GMRES: A generalized minimal residual method for solving nonsymmetric linear systems, SIAM Journal on Scientific & Statistical Computing, 7 (1986), 856–869.
- [55] Y. Saad, Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems: Theory and Algorithms, Manchester University Press, Manchester, UK, 1992.
- [56] D. Sorensen, Implicit application of polynomial filters in a k -step Arnoldi method, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 13 (1992), 357–385.

- [57] G. W. Stewart, Matrix Algorithms, Vol I: Basic Decomposition, SIAM, Philadelphia, PA, 1998.
- [58] G. W. Stewart, Matrix Algorithms, Vol II: Eigensystems, SIAM, Philadelphia, PA, 2001.
- [59] G. W. Stewart and Ji-guang Sun, Matrix Perturbation Theory, Academic Press, New York, 1990.
- [60] M. Stewart, Fast algorithms for structured matrix computations, in Handbook of Linear Algebra, 2nd, section 62, CRC Press, 2014.
- [61] L. N. Trefethen and D. Bau, Numerical Linear Algebra, SIAM, Philadelphia, PA, 1997.
- [62] L. N. Trefethen, Numerical Analysis, in Princeton Companion to Mathematics, Edited by T. Gowers, J. Barrow-Green and I. Leader, Princeton University Press, 2008.
- [63] D. S. Watkins, The Matrix Eigenvalue Problem: GR and Krylov Subspace Methods, SIAM, Philadelphia, 2007.
- [64] D. S. Watkins and L. Elsner, Convergence of algorithms of decomposition type for the eigenvalue problem, Linear Algebra and its Applications, 143 (1991), 19–47.
- [65] J. H. Wilkinson, The Algebraic Eigenvalue Problem, Clarendon Press, Oxford University, Oxford, 1965.

- [66] R. S. Varga, Matrix Iterative Analysis, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1962. 2nd edition, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [67] D. M. Young, Iterative Methods for Solving Partial Difference Equations of Elliptic Type, PhD thesis, Harvard University, 1950.
- [68] D. M. Young, Iterative Solution of Large Linear Systems, Academic Press, New York, 1971.
- [69] 北京大学数学系, 高等代数 (第三版), 高等教育出版社, 2003.
- [70] 陈志明, 科学计算: 科技创新的第三种方法, 中国科学院院刊, 27 (2012), 161-166.
- [71] 戴华, 矩阵论, 科学出版社, 2001.
- [72] 胡家赣, 线性代数方程组的迭代解法, 科学出版社, 1991.
- [73] 蒋尔雄, 矩阵计算, 科学出版社, 2008.
- [74] 李大明, 数值线性代数, 清华大学出版社.
- [75] 孙继广, 矩阵扰动分析, 科学出版社, 北京, 2001.
- [76] 魏木生, 广义最小二乘问题的理论与计算, 科学出版社, 北京, 2006.
- [77] 徐树方, 矩阵计算的理论与方法, 北京大学出版社, 北京, 1995.
- [78] 徐树方, 钱江, 矩阵计算六讲, 高等教育出版社, 北京, 2011.