

数值代数习题解答

原生生物

作者 QQ: 3257527639

对应教材: 数值线性代数 (第二版)

使用资料: 个人解题为主, 答案来源包括助教的习题课讲义、同学解出的难题或网络上的论文与解答等。

*解答中的伪代码采用严格缩进判断嵌套关系, 总体类似 Python

目录

第一章 线性方程组的直接解法	2
第二章 线性方程组的敏度分析与消去法的舍入误差分析	5
第三章 最小二乘问题的解法	7
第四章 线性方程组的古典迭代解法	8
第五章 共轭梯度法	11
第六章 非对称特征值问题的计算方法	12
第七章 对称特征值问题的计算方法	16

第一章 线性方程组的直接解法

1. 假设输入方阵下标 1 到 n , $A[i]$ 表示 A 的第 i 个行向量, O 代表 n 维零方阵 (采用增广矩阵求逆的思路):

```
def inverse(A, In):
    In = 0;
    for j = 1 to n
        A[j] /= A[j][j]
        In[j][j] = 1/A[j][j]
    for j = 1 to n
        for i = j+1 to n
            In[i] -= A[i][j]In[j];
```

2. 构造辅助 n 维向量 y , 初始为零向量, 设方阵下标为 1 到 n : 令 k 从 n 到 1 循环, 每次计算

$$x_k = \frac{b_k - \sum_{i=k}^n s_{ki}y_i}{s_{kk}t_{kk} - \lambda}, y_j = y_j + x_k t_{jk} (j \geq n+1-k)$$

由定义可发现, 每次循环的计算量都是 $O(n)$, 因此总计算量为 $O(n^2)$ 。

证明思路: 将矩阵分块为已算过的部分和将算的部分, 已算过的部分通过 y_i 进行“消除偏差” (y_i 在每步后为假设 x 除了已算过的分量外均为 0 后被 T 左乘的结果) 后, 即可通过直接的减法、除法得到将算的值。

3. 直接计算可验证其为逆。由定义 l_k 只需满足前 k 个分量为 0, 而 $-l_k$ 亦满足此要求, 因此成立。

4. 由于 $7 = 3 + 2 \times 2, 8 = 4 + 2 \times 2$, 可直接构造 $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ 。

5. 若有 $L_1 U_1 = L_2 U_2 = A$, 由 A 非奇异可知 L_1, L_2, U_1, U_2 非奇异, 而 $L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1}$, 左侧为单位下三角阵, 右侧为上三角阵, 因此均只能是 I , 从而得证。

6. 令 $L_k = I + t_k e_k^T$, 其中 t_k 的前 k 个分量为 0, 其余为 1, 考虑 $L_n \dots L_1 A = U$ 的结果。由于这相当于分别将 A 的每一行加到其下的所有行上, U 的左上角 $n-1 \times n-1$ 子矩阵为单位阵, 最后一列为 $1, 2, \dots, 2^{n-1}$, 其余为 0, 即为所求。而所求的 L 为 $L_1^{-1} \dots L_n^{-1}$, 除了主对角线外下三角部分的元素为 -1 , 满足要求。

7. 由对称阵定义, 设变换后矩阵为 B , 只需说明 $b_{ij} = b_{ji}$ ($i, j \geq 2$), 由高斯消去进行的行变换操作可知范围内 $b_{ij} = a_{ij} - a_{1j} \frac{a_{i1}}{a_{11}}$, 而 $a_{ij} - a_{1j} \frac{a_{i1}}{a_{11}} = a_{ji} - a_{j1} \frac{a_{i1}}{a_{11}} = b_{ji}$, 从而得证。

8. 利用习题 7 结论, 同乘 a_{11} 后即需证明 $|a_{11}b_{kk}| = |a_{11}a_{kk} - a_{1k}a_{k1}| > \sum_{j=2, j \neq k}^n |a_{11}a_{kj} - a_{1j}a_{k1}|$ 。而

$$\sum_{j=2, j \neq k}^n |a_{11}a_{kj} - a_{1j}a_{k1}| \leq \sum_{j=2, j \neq k}^n |a_{11}a_{kj}| + \sum_{j=2, j \neq k}^n |a_{1j}a_{k1}| = \sum_{j=2, j \neq k}^n |a_{11}a_{kj}| + \sum_{j=2}^n |a_{1j}a_{k1}| - |a_{1k}a_{k1}|$$

$$\leq \sum_{j=2, j \neq k}^n |a_{11}a_{kj}| + |a_{11}a_{k1}| - |a_{1k}a_{k1}| < |a_{11}a_{kk}| - |a_{1k}a_{k1}| \leq |a_{11}a_{kk} - a_{1k}a_{k1}|$$

从而得证。又由习题 7 可知对称性保持, 从而现在的主对角线对应元素是行列中的最大值, 不需要再进行交换, 由此即知列主元与直接消去结果相同。

9. 不必储存 L : 将 A 与 b 同时左乘高斯变换阵, 这样当 A 化为上三角阵时 b 也成为了合适的形式。此时再使用回代法即可。

运算次数: 高斯变换时, 第 k 次需要对右下角 $n-k \times n+1-k$ 子方阵的每一个进行操作, 每次操作需要减法、乘法、除法各一次, 因此总数量为 $\sum_{k=1}^n (n-k)(n+1-k) = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n$ 。回代法需要的乘法运算数量为 $\frac{(n-1)n}{2}$, 因此总数量为 $\frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n$ 。

10. 由习题 7 可知其对称, 下面进一步说明正定。

设变换后的 $B = LA$, 考虑 $C = LAL^T$, 由于右乘 L^T 对应的操作为左下角右侧的列减去第一列, 而此时第一列只有 b_{11} 不为 0, C 的右下角仍然为 A_2 , 更进一步, 由正定阵性质, 相合变换后仍正定, 因此 C 为正定阵, 由对称性可知 C 必然为 $\text{diag}(a_{11}, A_2)$ 。考虑特征值可知 A_2 必然也为正定阵, 由此得证。

11. 设 k 次后对应左乘的 L 为 $\begin{pmatrix} L_k & O \\ M & I_{n-k} \end{pmatrix}$, 则由算法有 $\begin{pmatrix} L_k & O \\ M & I_{n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_k & N \\ O & S \end{pmatrix}$ 。考虑下方一列可知 $MA_{11} + A_{21} = O, MA_{12} + A_{22} = S$, 左式可解出 $M = -A_{21}A_{11}^{-1}$, 代入右式即得结论。

12. 由于全主元第 i 次消去时将 u_{ii} 调整为右下角矩阵中最大元, 此时其必然大于等于右侧的任何元素, 而此后的操作并不会影响第 i 行及其上方的部分, u_{ii} 大于等于本行右边的性质得以保存, 从而得证。

13. 通过列主元高斯消去, 可得到 $PA = LU$, 利用习题 1 实现的求逆算法 (对上三角阵类似) 可得到 L^{-1} 与 U^{-1} , 再计算 $U^{-1}L^{-1}P$ 即为 A 的逆。

14. 记 a_j 为 A^{-1} 的第 j 列, 考虑方程 $LUa_j = e_j$ 即可解出 a_j , 而其第 i 个分量即为所求 (由于只需要知道一个分量, 最后一步解 $Ua_j = L^{-1}e_j$ 的过程进行部分即可)。

15. 由于 A^T 是严格对角占优阵, A 的主对角线元素模长大于本列其他所有元素模长之和。类似习题 8 估算可证明每次高斯消去后的 A_2 仍满足 A_2^T 严格对角占优, 从而选出的列主元即为主对角线上元素, 因此直接高斯消元与列主元效果相同。由于每次保证了对角元模长是本列最大, 当 $i \neq j$ 时有 $|l_{ij}| < 1$ 。

16. (1) 由于 $(I - ye_k^T)(I + ye_k^T) = I - y_k ye_k^T$, 有 $(I - ye_k^T)(I + ye_k^T - y_k I) = (1 - y_k)I$, 由此即得非奇异时逆为 $I + \frac{ye_k^T}{1 - y_k}$, 而直接计算行列式可验证 $1 - y_k = 0$ 时奇异。

(2) $(I - ye_k^T)x = e_k$, 即 $x_k y = I - e_k$, 存在解要求 x_k 不能为 0。

(3) 算法类似高斯消去, 每次操作后成为 $\begin{pmatrix} I_k & M \\ O & A_{n-k} \end{pmatrix}$, 需要 A_{n-k} 左上角的元素非零才能继续取解。

利用分块考虑每次操作使用的方阵的 k 阶顺序主子式部分, 其为单位下三角阵, 与定理 1.1.1 完全相同可知每次得到的 A_{n-k} 左上角的元素非零等价于 A 的各阶顺序主子式非奇异。

17. 若有 $A = L_1 L_1^T = L_2 L_2^T$, 则有 $L_2^{-1} L_1 = L_2^T L_1^{-T}$, 由于左侧为下三角, 右侧为上三角, 最终乘积一定为对角阵。但由于 $L_2^T L_1^{-T} = (L_1^{-1} L_2)^T = (L_2^{-1} L_1)^{-T}$, 此对角阵与自己逆转置相同, 每个元素只能为正负 1。由于 L_1 与 L_2 对角元为正, 计算可知每个元素只能为此对角阵元素必须为正, 因此即为单位阵, 从而得证。

18. 带宽 $2n+1$, 也即 $|i-j| > n$ 的部分均为 0, 由平方根法的计算过程对 k 归纳可得 l_{ik} 亦会满足 $|i-k| > n$ 的部分为 0 (对 $k+1$ 时的情况, 在 $|i-k-1| > n$ 时, $a_{i,k+1} = 0$, 且 $\sum_{p=1}^k l_{ip}l_{kp}$ 的每一个 l_{ip} 均为 0, 因此 $l_{i,k+1} = 0$), 又因其为三角阵, 可知带宽为 $n+1$ 。
19. 设 $L = \begin{pmatrix} L_k & O \\ M & N_{n-k} \end{pmatrix}$, 直接计算可知 $A = \begin{pmatrix} L_k L_k^T & L_k M^T \\ M L_k^T & M M^T + N_{n-k} N_{n-k}^T \end{pmatrix}$, 从而有结论 (由 L_k 为对角均正的下三角阵, 也可推出 A_k 正定对称)。
20. 类似习题 10 的过程, 在每次高斯变换左乘 L_k 时, 同时右乘 L_k^T 。每次右乘不改变右下角的子矩阵, 因此仍可通过定理 1.1.1 推知操作可进行至结束。由于每步保持对称性, 在进行 $n-1$ 次消去后即得对角阵, 此时 $A = L_1^{-1} \dots L_{n-1}^{-1} D L_{n-1}^{-T} \dots L_1^{-T}$, 即可合并为 LDL^T 。

21. 利用平方根法计算可知 $L = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 3 & 1 \end{pmatrix}$, 进一步计算得原方程组解为 $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 。

22. 假设输入方阵下标 1 到 n , O 代表 n 维零方阵 (实际计算过程与平方根法完全相同, 只是改变计算顺序。实际操作时可直接用 A 的对应部分保存 l , 此处为清晰将两矩阵分开):

```
def Cholesky(A, l):
    l = 0
    for i = 1 to n
        for j = 1 to i-1
            l[i][j] = a[i][j]
            for p = 1 to j-1
                l[i][j] -= l[i][p]*l[j][p]
            l[i][j] /= l[j][j];
        l[i][i] = a[i][i]
        for p = 1 to i-1
            l[i][i] -= l[i][p]*l[i][p]
        l[i][i] = sqrt(l[i][i])
```

23. 假设正定对称矩阵 A 可以分解为 LDL^T , 则 $A^{-1} = (L^{-1})^T D^{-1} L^{-1}$, 利用习题 1 的算法可算出 L^{-1} , 再计算转置, D^{-1} 即为每个对角元取倒数, 最后计算乘法即可。
24. (1) 由 Hermite 性计算知 A 对称、 B 反对称, 从而 C 对称。由正定 $(x+yi)^H(A+Bi)(x+yi) > 0$, 从而 $x^T A x + y^T A y + y^T B x - x^T B y > 0$, 此即为 $\begin{pmatrix} x^T & y^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & -B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} > 0$, 由于 x, y 可任取, 知 C 正定。
- (2) 此方程即 $\begin{pmatrix} A & -B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix}$, 利用上题结论可知 $\begin{pmatrix} A & -B \\ B & A \end{pmatrix}$ 为对称正定阵, 从而由改进平方根法作出分解 LDL^T 后即可通过 $LDL^T \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix}$ 解出所求的 x, y 。

第二章 线性方程组的敏度分析与消去法的舍入误差分析

1. 正定性：由于 $\alpha_i > 0$ 可知其良定，进一步由定义可知。

齐次性：直接代入计算可知。

三角不等式：记 $x' = (\alpha_1 x_1, \dots, \alpha_n x_n), y' = (\alpha_1 y_1, \dots, \alpha_n y_n)$ ，由于 $\|x'\|_2 + \|y'\|_2 \geq \|x' + y'\|_2$ ，代入可知此范数具有三角不等式。

2. 利用 $\|x + y\|_2 \leq \|x\|_2 + \|y\|_2$ 的证明过程可知取等当且仅当 $x^T y = \|x\|_2 \|y\|_2$ ，同平方得 $(x_1 y_1 + \dots + x_n y_n)^2 = (x_1^2 + \dots + x_n^2)(y_1^2 + \dots + y_n^2)$ ，作差配方有 $\sum_{i < j} (x_i y_j - x_j y_i)^2 = 0$ ，即可知 x, y 各分量成比例。

3. 直接计算 $\|A\|_F^2 = \sum_{i,j} |a_{ij}|^2 = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n |a_{ij}|^2 = \sum_{j=1}^n \|a_j\|_2^2$ 。

4. 左：由二范数定义有 $\|A\|_2 \geq \frac{\|Ab_i\|_2}{\|b_i\|_2}$ ，其中 $B = \begin{pmatrix} b_1 & \dots & b_n \end{pmatrix}$ ，平方得 $\|A\|_2^2 \geq \frac{\|Ab_i\|_2^2}{\|b_i\|_2^2}$ ，利用习题 3，将右侧进行加权平均有 $\|A\|_2^2 \geq \sum_{i=1}^n \frac{\|b_i\|_2^2}{\|B\|_F^2} \frac{\|Ab_i\|_2^2}{\|b_i\|_2^2}$ ，即 $\|A\|_2^2 \|B\|_F^2 \geq \sum_{i=1}^n \|Ab_i\|_2^2 = \|AB\|_F^2$ ，最后一步再次运用了习题 3。

右：利用左可知 $\|B^T A^T\|_F \leq \|B^T\|_2 \|A^T\|_F$ ，而二范数与 Frobenius 范数均在转置下不变，因此同作转置即可。

5. 正定、齐次：由定义直接得。

三角不等式： $\max_{i,j} |a_{ij} + b_{ij}| \leq \max_{i,j} (|a_{ij}| + |b_{ij}|) \leq \max_{i,j} |a_{ij}| + \max_{i,j} |b_{ij}|$ ，两边同乘 n 即可。

相容性： $\max_{i,j} |\sum_k a_{ik} b_{kj}| \leq \max_{i,j} \sum_k |a_{ik}| |b_{kj}| \leq n \max_{i,j} |a_{ij}| \max_{i,j} |b_{ij}|$ ，两边同乘 n 即可。

ν 不满足相容： n 维时两个全 1 矩阵的乘积为全 n 矩阵，当 $n > 1$ 时即可知 ν 不满足相容性。

6. 当：由 A 正定，其可作 Cholesky 分解 LL^T ，由定义可发现 $f(x) = \|L^T x\|_2$ ，由 L^T 可逆可知其正定，直接计算可知齐次，又由 $L^T(x + y) = L^T x + L^T y$ 可知满足三角不等式，故为范数。

仅当：若 A 不正定，由定义存在非零的 x 使得 $x^T A x \leq 0$ ，此时不满足正定性或根号内为负数，不为范数。

7. 正定性：由 $\text{rank } A = n$ 可知方程组 $Ax = 0$ 中可以选出 n 个独立方程，从而由 $x \in \mathbb{R}^n$ 可知解只能为 $x = 0$ ，由此利用 $\|Ax\| = 0 \Leftrightarrow Ax = 0$ 可知正定。

齐次性：由原范数齐次性，直接计算 $\|\lambda x\|_A = \|A\lambda x\| = \lambda \|Ax\|$ ，由此得证。

三角不等式：由 $\|Ax\| + \|Ay\| \geq \|Ax + Ay\| = \|A(x + y)\|$ 可知成立。

8. 先说明 $I - A$ 可逆。由 $\|A\| < 1$ 与 $\|A^n\| \leq \|A\|^n$ 可知 $\lim_{n \rightarrow \infty} A^n = O$ ，从而 $\rho(A) < 1$ 。考虑 A 的 Jordan 标准型 J 可发现对角元素模长小于 1，而其右侧的副对角线上元素模长不超过 1，从而估算可知 J^k 中任何元素不超过 $Ck^n \rho(A)^k$ ，此级数求和收敛，因此 $\sum_{k=0}^{\infty} A^k$ 收敛。由于 $(I - A) \sum_{k=0}^{n-1} A^k = I - A^n$ ，取极限可知收敛极限即为 $(I - A)^{-1}$ 。

$1 + \|(I - A)^{-1}\| \|A\| \geq 1 + \|(I - A)^{-1} A\| \geq \|(I - A)^{-1} (I - A) + (I - A)^{-1} A\| = \|(I - A)^{-1}\|$ ，同除以 $1 - \|A\|$ 后移项即得证。

9. 由于 A 可逆， $\{Ax | x \in \mathbb{R}^n\} = \mathbb{R}^n$ ，从而 $\|A^{-1}\| = \max_{\|x\|=1} \|A^{-1}x\| = \max_{\|Ax\|=1} \|A^{-1}Ax\| = \max_{\|Ax\|=1} \|x\| = \max_x \frac{\|x\|}{\|Ax\|} = \left(\min_x \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \right)^{-1} = \left(\min_{\|x\|=1} \|Ax\| \right)^{-1}$ ，因此得证。

10. 由 L 下三角， U 上三角可知 $a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kj}$ ，但只有当 $k \leq \min i, j$ 时才可能 l_{ik}, u_{kj} 均非 0，从而之后的项可忽略，对第 i 行可写成 $a_{ij} = \sum_{k=1}^i l_{ik} u_{kj}$ ，又由 LU 分解性质可知 $l_{ii} = 1$ ，从而 $a_{ij} - u_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}$ ，由于所有下标 j 对应，写为行向量后即为题中形式。

将此式两边取一范数后, 利用三角不等式与 $|l_{ij}| \leq 1$ 可知 $\|a_i^T\|_1 + \sum_{j=1}^{i-1} \|u_j^T\|_1 \geq \|u_i^T\|_1$, 由此归纳可得 $\|u_i^T\|_1 \leq \sum_{j=1}^{i-1} 2^{i-1-j} \|a_j^T\|_1 + \|a_i^T\|_1 \leq 2^{i-1} \|A\|_\infty$, 右边的不等号是由于 $\|A\|_\infty$ 为所有 $\|a_i^T\|_1$ 中最大的一个。由此, $\forall i, \|u_i^T\|_1 \leq 2^{n-1} \|A\|_\infty$, 从而 $\|U\|_\infty \leq 2^{n-1} \|A\|_\infty$ 。

11. (1) $A^{-1} = \begin{pmatrix} 375 & -187 \\ -376 & 375/2 \end{pmatrix}$, $\kappa_\infty(A) = (752 + 750)(376 + \frac{375}{2}) = 846377$
 (2) $b = (1, 1)^T$ 时 $x = (188, -188.5)^T$, 而 $b = (1, 1.1)^T$ 时 $x = (169.3, -169.75)^T$ 。
 (3) $x = (1, -1)^T$ 时 $b = (1, 2)^T$, 而 $x = (1.1, -1)^T$ 时 $b = (38.5, 77.2)^T$ 。
12. 由于 $\|I\| \|I\| \geq \|I\|$ 且 $\|I\| > 0$, 可知 $\|I\| \geq 1$, 从而 $\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \geq \|AA^{-1}\| \geq 1$ 。
13. 右侧即为 $\|A^{-1}\| \|(A+E) - A\| \|(A+E)^{-1}\| \geq \|A^{-1} - (A+E)^{-1}\| = \|(A+E)^{-1} - A^{-1}\|$, 从而得证。
14. 由于 $\text{fl}(\prod_{i=1}^n x_i) = \prod_{i=1}^n x_i (1 + \delta_{i-1})$, δ_i 代表每次乘法运算的舍入产生的误差, $\delta_0 = 0$ 。从而可知 ε 的上界为 $(1 + \mathbf{u})^{n-1} - 1$, 由定理 2.3.3, 当 $(n-1)\mathbf{u} \leq 0.01$ 时即不超过 $1.01(n-1)\mathbf{u}$ 。
15. 由定义可知 $\text{fl}(\sum_{i=1}^n x_i) = \sum_{i=1}^n x_i \prod_{j=i}^n (1 + \delta_j)$, 其中 δ_i 表示每次加法运算产生的误差, $\delta_1 = 0$ 。由 $n\mathbf{u} \leq 0.01$ 可知 $k\mathbf{u} \leq 0.01$ 当 $k \leq n$ 时成立, 从而由定理 2.3.3 考虑每个 x_i 右边的 $(1 + \delta_j)$ 个数可知结论。
16. 设 a_i^T 为 A 的第 i 个行向量, 则 $\text{fl}(Ax_i) = \text{fl}(a_i^T x) = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j (1 + \lambda_{ij}) \prod_{k=j}^n (1 + \delta_{ik})$, 其中 λ_{ij} 表示乘法运算产生的误差, δ_{ik} 代表加法运算产生的误差, $\delta_{1k} = 0$, 由于 a_{ij} 的右侧乘上了 $\begin{cases} n & j = 1 \\ n - j + 2 & j \neq 1 \end{cases}$ 个误差项, 由定理 2.3.3 可知结论成立。
17. $\text{fl}(x^T x) = \sum_{i=1}^n x_i^2 (1 + \lambda_i) \prod_{j=i}^n (1 + \delta_i)$, 其中 δ_i 表示每次加法运算产生的误差, $\delta_1 = 0$ 。由于每个 x_i^2 右侧最多有 n 个误差项, 每个 x_i 的误差必在 $(1 - \mathbf{u})^n$ 与 $(1 + \mathbf{u})^n$ 之间。由于 x_i^2 均为正, 最大误差在同取 $+$ 或 $-$ 时, 因此即有 $\frac{\text{fl}(x^T x)}{x^T x} \in [(1 - \mathbf{u})^n, (1 + \mathbf{u})^n]$, 于是 $\alpha \leq n\mathbf{u} + O(\mathbf{u}^2)$ 。
18. 类似第一章习题 18 可说明 L 与 U 均为带宽为 2 的带状矩阵, 利用习题 10 等式, 当 A 为三对角阵时, 由于其他项都为 0, 有 $u_i^T = a_i^T - l_{i,i-1} u_{i-1}^T, i \geq 2$, 从而由 $|l_{ij}| \leq 1$ 可知 $|a_{1j}| \geq |u_{1j}|, |a_{ij}| + |u_{i-1,j}| \geq |u_{ij}|, i \geq 2$ 。
 由于 U 为带宽 2 的上三角阵, 当且仅当 $i = j-1$ 或 j 时 $u_{ij} \neq 0$, 从而 $|u_{j-1,j}| \leq |a_{j-1,j}| + |u_{j-2,j}| = |a_{j-1,j}|, |u_{ii}| \leq |a_{ii}| + |u_{i-1,i}| \leq |a_{i-1,i}| + |a_{ii}|$, 因此 U 中任何元素不超过 $2 \max_{i,j} |a_{ij}|$, 从而得证。
19. 利用习题 10 等式可知 $a_{ij} - u_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}$, 第一章习题 15 已说明每一步分解中 A 的右下角子矩阵为列对角占优, 因此 $\sum_{k=1}^{i-1} |l_{ik}| < 1$, 于是 $|u_{ij}| \leq |a_{ij}| + \max_{k < i} |u_{kj}|$ 。
 对上式归纳, $|u_{1j}| \leq |a_{1j}|$, 此后每次最大值最多增加 $|a_{ij}|$, 因此 $i \leq j$ 时 $|u_{ij}| \leq \sum_{k=1}^i |a_{kj}| \leq \sum_{k=1}^j |a_{kj}| \leq 2|a_{jj}|$, 而由于其为上三角阵, $i < j$ 时恒为 0, 从而 $\rho \leq 2$ 。
20. 由算法过程可以发现, 由于每个元素所在的行列最多还有 m 个其他元素, 计算 L, U 的过程中每个元素至多产生 m 次减法、 m 次乘法与 1 次除法的误差, 由定理 2.3.3 可知每个元素的误差至多为 $(2m+1)\mathbf{u} + O(\mathbf{u}^2)$, 而计算回 A 的部分需要 m 次乘法与 $m-1$ 次加法, 类似得最终误差为 $(2m-1)(2m+1)\mathbf{u} + O(\mathbf{u}^2)$, 当 \mathbf{u} 较小时以 $4m^2\mathbf{u}$ 为上界, $m=3$ 时即为 $36\mathbf{u}$ 。
21. 由算法过程可以发现, 计算 L 的过程中每个元素至多产生 n 次减法、 n 次乘法与 1 次除法或开方的误差, 而计算回 A 得过程中最多需要 n 次乘法与 $n-1$ 次加法, 类似习题 20 知最终误差为 $\prod_{i=1}^{4n^2-1} (1 + \delta_i)$, 类似引理 2.4.1 计算方法可知条件下误差可以用 $4.09n^2\mathbf{u}$ 控制。

第三章 最小二乘问题的解法

1. $C = \begin{pmatrix} 35 & 44 \\ 44 & 56 \end{pmatrix}, d = \begin{pmatrix} 9 \\ 12 \end{pmatrix}$, 解为 $\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 。

2. $C = \begin{pmatrix} 6 & 3 & 1 & 1 \\ 3 & 9 & 3 & 3 \\ 1 & 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 & 1 \end{pmatrix}, d = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 可发现 C 的零化子空间一组基为 $u = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}, v = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$, 而一个

特解为 $x_0 = \begin{pmatrix} 3/5 \\ 2/15 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, 由此通解为 $x_0 + au + bv, a, b \in \mathbb{R}$ 。

3. 由乘正交阵不改变二范数可知变换前后二范数必然相同, 从而 $\alpha = 5$ 。由定义设 $H = I - 2ww^T$, 可知 $2ww^T(1, 0, 4, 6, 3, 4)^T = (0, -5, 0, 0, 3, 4)$, 也即 $2w^T(1, 0, 4, 6, 3, 4)^T w = (0, -5, 0, 0, 3, 4)$, 可得 $w = \frac{\sqrt{2}}{10}(0, -5, 0, 0, 3, 4)$ 。

4. 即 $5c + 12s = -5s + 12c$, 有 $17s = 7c$, 解得 $s = \frac{7\sqrt{2}}{26}, c = \frac{17\sqrt{2}}{26}$, 此时 $\alpha = \frac{13\sqrt{2}}{2}$ 。

5. 即 $-sx_1 + cx_2 = 0$, 设 $s = a + bi, x_i = a_i + b_i i$ 可知 $\begin{cases} -a_1a + b_1b + b_2c = 0 \\ -b_1a - a_1b + a_2c = 0 \end{cases}$ 。若 $|x_1| = 0$, 取 $s = 1, c = 0$ 即可, 否则方程组中 a, b 线性无关, 可令 $c = 1$ 得到此方程的特解, 再对模长进行归一化 (三个分量同时除以模长) 即可。

6. 当 $a_j \neq 0$ 时, 类似习题 5 解方程可构造二阶 Givens 方阵 Q 使得 $Q \begin{pmatrix} a_i \\ a_j \end{pmatrix}$ 的第二个分量为 0, 记其角度为 θ , 则 a_i, a_j 在向量 α 的第 i, j 行时, 计算知 $Q(i, j, \theta)\alpha$ 可使 $a_j = 0$, 且不影响 i, j 外的其他行。

于是得到算法: 对 x 除第一行外的每一行, 若为 0 则跳过, 否则找到对应将其置为 0 的 $Q(1, j, \theta_j)$ 。同理, 对 y 除第一行外的每一行找到 $P(1, k, \theta_k)$, 则 $\prod_{k=n}^1 P(1, k, -\theta_k) \prod_{j=1}^n Q(1, j, \theta_j)$ 即为所求。

证明: 记 $Q = \prod_{j=1}^n Q(1, j, \theta_j), P = \prod_{k=1}^n P(1, k, \theta_k)$, 则根据构造过程可知 $Qx = Py = e_1$, 而每个 Givens 方阵的逆为其转置, 也即将 θ 变为 $-\theta$, 于是 P 的逆为 $\prod_{k=n}^1 P(1, k, -\theta_k)$, 即有 $P^{-1}Qx = y$ 。

7. 类似习题 3, 先计算 $\alpha = \frac{\|x\|_2}{\|y\|_2}$, 设 H 为 $I - 2ww^T$, 可发现 $2(w^Tx)w = x - \alpha y$, 从而先令 $w_0 = \alpha y - x$, 再计算 $w = \frac{w_0}{\|w_0\|_2}$ 即可得到 H 。

8. 思路事实上与定理 3.3.1 完全一致, 只是改变操作顺序与边的序号。归纳构造:

H_k 操作前, 后 $k-1$ 列已符合要求, 而 H_k 将倒数第 k 列 $(0, \dots, 0, a_{n-k+1}, \dots, a_n, a_{n+1}, \dots, a_m)^T$ 变为 $(0, \dots, 0, \alpha, a_{n-k+2}, \dots, a_n, 0, \dots, 0)^T$ 。这样得到的 w_k 只有第 $n-k+1$ 与后 $m-n$ 个分量非零, 而后 $k-1$ 列这些分量都是 0, 因此利用 x, w 非零分量不重合时 $(I - 2ww^T)x = x - 2(w^Tx)w = x$ 可知不会破坏已符合要求的部分, 从而成立。

9. 由定理 3.1.4 知只需求解 $L^T Lz = L^T Pb$, 由于 L 为单位下三角, 其列满秩, 于是 $L^T Lz = L^T Pb$ 有唯一解。将其分解为 $H \begin{pmatrix} L_1 \\ O \end{pmatrix}$ 后, 计算发现即为求解 $L_1^T L_1 z = L^T Pb$, 而这可以直接通过求解 $L_1^T z_0 = L^T Pb$ 与 $L_1 z = z_0$ 两个方程得到解。

当 $Ux = z$ 时, 由于 z 满足 $L^T Lz = L^T Pb$, 代入知 $L^T LUx = L^T Pb$, 于是 $U^T L^T LUx = U^T L^T Pb$, 即 $A^T Ax = A^T Pb$, 由定理 3.1.4 可知结论。

10. 由定理 3.1.4 可知 $A^TAXb = A^Tb$ 对任何 b 成立, 取 b 为 e_i 并拼接可知 $A^TAXI = A^TI$, 从而 $A^TAX = A^T$, 同取转置有 $X^TA^TA = A$.

在 $A^TAX = A^T$ 两边同时左乘 X^T 可知 $AX = X^TA^TAX = X^TA^T = (AX)^T$, 从而得证第二个式子, 而 $A = X^TA^TA = (AX)^TA = AXA$, 从而得证第一个式子。

11. 定义 Givens 函数 $g(a, b) = \arccos \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}}$, 用于生成左乘 $(a, b)^T$ 使 b 成为 0 的 θ , 下文 I 为单位阵, $G(i, j, \theta)$ 与书上定义相同, 乘法为矩阵乘法:

```
def QR(A, Q):
    Q = I
    for i = n downto 3
        if (A[i][1] != 0)
            Q = Q * G(i-1, i, -g(A[i-1][1], A[i][1]))
            A = G(i-1, i, g(A[i-1][1], A[i][1])) * A
    for i = 2 to n
        if (A[i][i-1] != 0)
            Q = Q * G(i-1, i, -g(A[i-1][i-1], A[i][i-1]))
            A = G(i-1, i, g(A[i-1][i-1], A[i][i-1])) * A
```

算法分为两步, 第一步自下而上第一列的每个元素与上面的元素合并 (只要为 0 则跳过), 这样合并后, 每次合并过程可能让下三角部分的 $a_{i,i-1}$ 变为非 0, 但其他元素不会受影响。于是, 完全合并后, 矩阵除了上三角部分, 至多还有 $a_{i,i-1}$ 一条对角线非零。第二步针对这条对角线再用 Givens 方阵操作, 可发现此时不会再影响下三角部分, 因此最多通过 $(n-1) + (n-2) = 2n-3$ 个 Givens 方阵即可实现上三角化, 再对应计算 Q 即可。

12. 等式的证明: 直接利用 $\|x\|_2^2 = x^Tx$ 展开计算可发现成立。

当 $\|Ax-b\|_2$ 为最小时, 任意 $\|A(x+\alpha w)-b\|_2 \geq \|Ax-b\|_2$, 于是 $2\alpha w^TA^T(Ax-b) + \alpha^2\|Aw\|^2 \geq 0$ 对任何 α, w 成立。由于 α 与 w 同时取相反数不影响结果, 可不妨设 $\alpha > 0$, 此时即需要 $2w^TA^T(Ax-b) + \alpha\|Aw\|^2 \geq 0$ 恒成立。

若 $A^T(Ax-b) \neq \mathbf{0}$, 假设其第 i 个分量不为 0, 可取合适的 $w \in \{\pm e_i\}$, 使 $2w^TA^T(Ax-b) < 0$, 再令 $\alpha \rightarrow 0$ 即有矛盾。于是, 必须 $A^T(Ax-b) = \mathbf{0}$, 即 $A^TAx = A^Tb$ 。

第四章 线性方程组的古典迭代解法

1. A_1 在 Jacobi 迭代法迭代矩阵是 $\begin{pmatrix} 0 & 1/2 & -1/2 \\ -1 & 0 & -1 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$, 谱半径为 $\frac{\sqrt{5}}{2}$, 不收敛; 而 G-S 迭代法迭代矩阵是 $\begin{pmatrix} 0 & 1/2 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & -1/2 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$, 谱半径为 $\frac{1}{2}$, 收敛。

A_2 在 Jacobi 迭代法迭代矩阵是 $\begin{pmatrix} 0 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -2 & 0 \end{pmatrix}$, 谱半径为 0, 收敛; 而 G-S 迭代法迭代矩阵是 $\begin{pmatrix} 0 & -2 & 2 \\ 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$, 谱半径为 2, 不收敛。

2. 由谱半径可知 B 特征值全为 0, 考虑 Jordan 标准型可发现必有 $B^n = O$, 而 $x_n = B^n x_0 + B^{n-1}g + \cdots + Bg + g$, 由 $B^n = O$ 知 $x_n = (B^{n-1} + \cdots + I)g$, 进一步计算可发现 $Bx_n + g$ 仍为 x_n , 也就是此即为精确解且此后不再变化。

3. (1) 也即 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + 2ax_1x_3 > 0$ 对非零向量恒成立成立, $a \in (-1, 1)$ 时配方知满足要求, 否则令 $x_1 = x_3 = 1, x_2 = 0$ 得矛盾。于是结论为 $a \in (-1, 1)$ 。

(2) Jacobi 迭代法迭代矩阵是 $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -a \\ 0 & 0 & 0 \\ -a & 0 & 0 \end{pmatrix}$, 特征值为 $0, -a, a$, 收敛需谱半径小于 1, 即 $a \in (-1, 1)$ 。

(3) G-S 迭代法迭代矩阵是 $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -a \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{pmatrix}$, 特征值为 $0, 0, a^2$, 收敛需谱半径小于 1, 即 $a \in (-1, 1)$ 。

4. 先证明: 可以找到排列方阵 P 使得 PA 左上角元素非零, 右下角 $n-1$ 阶子矩阵非奇异。

考虑 Laplace 展开 $\det(A) = \sum_i a_{i1}(-1)^{i+1} \det(A_{i1})$, 其中 A_{ij} 为去掉 a_{ij} 所在行列的子矩阵。由于行列式非零, 右边至少有一项非零, 不妨设为 t , 则 a_{t1} 与 $\det(A_{t1})$ 均非零, 取 P 为交换 1 与 t 的置换阵即可验证成立。

于是, 通过归纳, 一阶时成立, 假设 $n-1$ 阶时成立, n 阶时先取出如上的 P_0 , 再对右下角取出符合要求的 Q , 令 $P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix} P_0$ 即可。

5. 利用定理 4.2.4, 只需说明 $\|B\|_\infty < 1$, 而 $\sum_{j=1}^n |b_{ij}| = \sum_{j \neq i} |\frac{a_{ij}}{a_{ii}}| = \frac{\sum_{j \neq i} |a_{ij}|}{|a_{ii}|} < 1$, 于是其对 i 取最大值也小于 1, 从而得证。

6. 归纳, 一阶时可直接说明成立, 若 $n-1$ 阶时成立, 下证 n 阶成立。记 $m_i = |a_{ii}| - \sum_{j \neq i} a_{ij}$

利用第一章习题 8 的证明过程中的小于号步骤, 经过一步高斯消去, 剩下的 A_2 乘 a_{11} 后的对角元 $|a_{11}a_{kk} - a_{1k}a_{k1}|$ 减去 $\sum_{j=2, j \neq k}^n |a_{11}a_{kj} - a_{1j}a_{k1}|$ 至少为 $|a_{11}a_{kk}| - \sum_{j=1, j \neq k}^n |a_{11}a_{kj}| = m_k |a_{11}|$, 于是除以 $|a_{11}|$ 后得其至少为 m_k 。

于是, $|\det(A)| = |a_{11}| |\det(A_2)| \geq |a_{11}| \prod_{k=2}^n m_k \geq \prod_{k=1}^n m_k$ 。

* 归纳可发现这题的界可以作较大改进

7. 由于 b 不影响收敛性, 不妨设其为 0, 则有 $x_{n+1} = (D-L)^{-1}L^T x_n$, 于是 $(D-L)x_{n+1} = L^T x_n$ 。两边同左乘 x_n^T 与 x_{n+1}^T , 利用 $x^T A x = x^T A^T x$ 分解为 L, D 计算可发现

$$x_{n+1}^T A x_{n+1} - x_n^T A x_n = -(x_n - x_{n+1})^T D (x_n - x_{n+1}) \leq 0$$

于是若 A 不正定, 存在非零 x 使 $x^T A x \leq 0$ 。若某次迭代中 x_n 与 x_{n+1} 不同, 则由 D 正定知 $x_{n+1}^T A x_{n+1} - x_n^T A x_n < 0$, 于是 $x_{n+1}^T A x_{n+1} < 0$, 此后不增, 不可能收敛到解。否则, x 一直不变, 由非零亦不是解, 从而矛盾。

8. 若不收敛, 则 $\rho(H) \geq 1$, 即有 λ 使得 $\lambda H = \alpha\lambda, |\alpha| \geq 1$, 则计算知 $\lambda^H B \lambda = (1 - |\alpha|^2) \lambda^H P \lambda$. 记 $\lambda = a + bi$ 可发现正定阵对任何复向量 λ 仍有 $\lambda^H P \lambda > 0, \lambda^H B \lambda > 0$, 于是矛盾。
9. $\omega = 1$ 时, 计算发现即为 Jacobi 迭代矩阵, 也即要证, 当 $\rho(I - C) < 1$ 时, $\rho(I - \omega C) < 1, \omega \in (0, 1)$ 。若否, 有 $(I - \omega C)\lambda = \alpha\lambda, |\alpha| \geq 1$, 于是 $(I - C)\lambda = (\frac{\alpha-1}{\omega} + 1)\lambda$. 记 $c = \frac{1}{\omega}$, 乘共轭计算此特征值的模长平方为

$$c^2|\alpha|^2 + (c-1)^2 - 2(c-1)c\operatorname{Re}(\alpha) \geq c^2|\alpha|^2 + (c-1)^2 - 2(c-1)c|\alpha| = (c(|\alpha|-1)+1)^2 \geq |\alpha|^2 \geq 1$$

从而矛盾。

10. 与定理 4.2.6 类似, 由于

$$I - B = D^{-1/2}(\omega^{-1}D)^{-1/2}A(\omega^{-1}D)^{-1/2}D^{1/2}$$

$$I + B = D^{-1/2}(2I - (\omega^{-1}D)^{-1/2}A(\omega^{-1}D)^{-1/2})D^{1/2}$$

特征值均为正实数, 因此 $(\omega^{-1}D)^{-1/2}A(\omega^{-1}D)^{-1/2}, 2I - (\omega^{-1}D)^{-1/2}A(\omega^{-1}D)^{-1/2}$ 正定对称, 从而相合得结论。

11. 直接计算可得

$$\lambda I - L_\omega = (D - \omega L)^{-1}((\lambda + \omega - 1)D - \lambda\omega L - \omega U)$$

类似定理 4.2.9, 只需说明 $|\lambda| \geq 1$ 时 $(\lambda + \omega - 1)D - \lambda\omega L - \omega U$ 严格对角占优或不可约对角占优。同除以 ω 得 $(\frac{\lambda-1}{\omega} + 1)D - \lambda L - U$, 由习题 9 证明过程知 $\frac{\lambda-1}{\omega} + 1$ 模长大于等于 λ , 从而严格对角占优或不可约对角占优性仍保持, 即得证。

12. 非对角线非零元素为 12, 13, 21, 24, 31, 34, 42, 43, 分为 $\mathcal{S}_1 = \{1\}, \mathcal{S}_2 = \{2, 3\}, \mathcal{S}_3 = \{4\}$ 即可。

13. (a) 直接计算 $a_{11} = \sqrt{2}$, 而考虑到 -1 可知 $a_{i+1,i} = -\frac{1}{a_{ii}}$, 利用第一章习题 18 可知除了 a_{ii} 与 $a_{i+1,i}$ 外的元素均为 0, 因此只需要考虑 a_{ii} 的递推。由 T_n 的对角线为 2, 有 $a_{i+1,i+1}^2 + a_{i+1,i}^2 = 2$, 因此 $a_{i+1,i+1}^2 = 2 - \frac{1}{a_{ii}^2}$, 解得 $a_{ii} = \sqrt{\frac{i+1}{i}}$, 于是 $a_{i+1,i} = -\sqrt{\frac{i}{i+1}}$ 。

(b) 与上方类似, 递推可得 L 为 $L_{ii} = 1, L_{i+1,i} = -\frac{i}{i+1}$, U 为 $U_{ii} = \frac{i+1}{i}, U_{i,i+1} = -1$ 。

(c) 由于 T 的特征值互不相同, 其特征向量能张成全空间, 即特征向量作为列构成的矩阵 P 可逆。而 $TP = PD$, 其中 D 为特征值排列为的对角阵, 于是 $T = PDP^{-1}$, 由条件, D, P 均已知。原方程化为 $PDP^{-1}U + UPDP^{-1} = h^2F$, 记 $U_0 = P^{-1}UP$, 则 $DU_0 + U_0D = h^2P^{-1}FP$ 。按如下步骤求解: 先计算 P^{-1} , 复杂度 n^3 , 然后计算 $P^{-1}FP$, 矩阵乘法复杂度可不超过 n^3 。而注意到 D 为对角阵, $DU_0 + U_0D$ 可直接逐元素求解, 于是解 $DU_0 + U_0D = h^2P^{-1}FP$ 的复杂度为 n^2 , 最后计算 $U = PU_0P^{-1}$, 复杂度 n^3 , 最终复杂度 $O(n^3)$ 。

14. 先说明 $s = 2$ 时的情况, 由于

$$\begin{pmatrix} D_1 & C_2 \\ B_2 & D_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & O \\ B_2D_1^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1 & O \\ O & D_2 - B_2D_1^{-1}C_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & D_1^{-1}C_2 \\ O & I \end{pmatrix}$$

对两边取行列式可知 $\det \begin{pmatrix} D_1 & C_2 \\ B_2 & D_2 \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} D_1 & O \\ O & D_2 - B_2D_1^{-1}C_2 \end{pmatrix}$, 当 B_2 和 C_2 同乘的系数为 1 时不影响。

若 $s = k$ 时成立, 考虑 $s = k + 1$ 时, 左乘 $\begin{pmatrix} I & O & O \\ O & I & O \\ O & -\mu B_s D_{s-1}^{-1} & I \end{pmatrix}$, 右乘 $\begin{pmatrix} I & O & O \\ O & I & -\frac{1}{\mu} D_{s-1}^{-1} C_s \\ O & O & I \end{pmatrix}$ 可以使右下角元素变为 $D_s - B_s D_{s-1}^{-1} C_s$, C_s, D_s 部分变为 O , 而左上部分不变, 于是 $\det(A) = \det(A_{s-1}) \det(D_s - B_s D_{s-1}^{-1} C_s)$, 利用归纳假设知与 μ 无关。

$$15. \det(\lambda I - L_\omega) = 0$$

$$\Leftrightarrow \det(D - \omega C_L)^{-1} \det((\lambda + \omega - 1)D - \lambda \omega C_L - \omega C_U) = 0$$

$$\Leftrightarrow \det((\lambda + \omega - 1)D - \lambda \omega C_L - \omega C_U) = 0$$

$$\Leftrightarrow \det((\lambda + \omega - 1)D - \lambda^{1/2} \omega C_L - \lambda^{1/2} \omega C_U) = 0 \text{ (由习题 14)}$$

$$\Leftrightarrow \det\left(\frac{\lambda + \omega - 1}{\lambda^{1/2} \omega} D - C_L - C_U\right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \det(D^{-1}(\frac{\lambda + \omega - 1}{\lambda^{1/2} \omega} D - C_L - C_U)) = 0$$

$$\Leftrightarrow \det(\frac{\lambda + \omega - 1}{\lambda^{1/2} \omega} I - B) = 0$$

于是 $\mu = \frac{\lambda + \omega - 1}{\lambda^{1/2} \omega}$, 同平方后求解二次方程即得题中式 (注意到复数中 $a^{1/2}$ 存在两值)。

16. (暂缺)

第五章 共轭梯度法

$$1. (x - x_*)^T A(x - x_*) - x_*^T A x_* = x^T A x - (A x_*)^T x - x^T A x_* = x^T A x - b^T x - x^T b = \varphi(x)$$

$$2. \text{记 } x = x_{k-1}, \text{ 由算法 } \varphi(x) - \varphi(x_k) = \frac{(r^T r)^2}{r^T A r}, \text{ 其中 } r = b - A x, \text{ 题目即化为 } \frac{x^T A x - 2b^T x}{\kappa_2(A)} \leq \frac{(r^T r)^2}{r^T A r}.$$

分析特征值与正交相似对角化可知正定对称阵的逆也正定对称, 于是由 $x = A^{-1}(b - r)$ 可进一步化为 $\frac{r^T A^{-1} r - b^T A^{-1} b}{\kappa_2(A)} \leq \frac{(r^T r)^2}{r^T A r}$, 即 $\frac{r^T A r}{r^T r} \frac{r^T A^{-1} r - b^T A^{-1} b}{r^T r} \leq \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$.

由正定对称 $b^T A^{-1} b \geq 0$, 只需说明对正定对称阵 B 与任何非零向量 x , 有 $\frac{x^T B x}{x^T x} \leq \|B\|_2$. 而正定对称阵的奇异值即为特征值, 作奇异值分解可知左侧不超过最大特征值, 右侧即为最大特征值, 从而得证。

$$3. \text{由最后一次迭代可知迭代结果 } x_{k+1} \text{ 满足 } \phi(x_{k+1}) = -b^T A^{-1} b, \text{ 假设前一次为 } x, \text{ 则下降方向 } r = b - A x, \text{ 类似习题 2 代入得 } x^T A x - 2b^T x + b^T A^{-1} b = \frac{(r^T r)^2}{r^T A r}, \text{ 由 } x = A^{-1}(b - r) \text{ 化为 } r^T A^{-1} r r^T A r = (r^T r)^2.$$

考虑 A 的正交相似对角化 $P^T D P$, 记 $s = P r$, 可发现 $s^T D^{-1} s s^T D s = (s^T s)^2$, 利用柯西不等式可知左侧大于等于右侧, 等号成立当且仅当 $s^T D^{-1} s$ 的每个分量与 $s^T D s$ 的每个分量对应成比例 (或同为 0), 于是 s 只能在 D 有相同对角元的某些分量非零, 从而 s 是 D 的特征向量, 即 $D P r = \lambda P r$, 有 $P^T D P r = \lambda r$, 得证。

$$4. \text{只需说明系数矩阵可逆, 即行列式非零. 直接计算行列式 } r_k^T A r_k p_{k-1}^T A p_{k-1} - (r_k^T A p_{k-1})^2. \text{ 记 } A = L L^T, a = L^T r_k, b = L^T p_{k-1}, \text{ 则左式化为 } \|a\|^2 \|b\|^2 - (a \cdot b)^2, \text{ 由于 } r_k, p_{k-1} \text{ 线性无关, } L \text{ 可逆, } a, b \text{ 线性无关, } \|a\|^2 \|b\|^2 - (a \cdot b)^2 \text{ 必然大于 } 0, \text{ 从而得证.}$$

5. * 条件应增添每个 p_i 非零

若否, 不妨设 $p_1 = \sum_{i=2}^k \lambda_i p_i$, λ_i 不全为 0, 则 $p_1^T A p_1 = \sum_{i=2}^k \lambda_i p_i^T A p_1 = 0$, 与 p_1 非零矛盾。

$$6. \text{直接求导 } \varphi'(y_{i-1} + t e_i) = 2t a_{ii} + 2y_{i-1}^T A e_i - 2b_i, \text{ 于是 } t = \frac{y_{i-1}^T A e_i - 2b_i}{a_{ii}}. \text{ 接下来只需要归纳验证, 若 } y_{i-1} \text{ 是由 } (D - L)^{-1} U y_0 \text{ 的前 } i-1 \text{ 行与 } y_0 \text{ 的后 } n-i+1 \text{ 行组成, } y_i \text{ 是由 } L_1 y_0 + (D - L)^{-1} b \text{ 的前 } i \text{ 行与 } y_0 \text{ 的后 } n-i \text{ 行组成, 其中 } L_1 \text{ 为 G-S 的迭代矩阵.}$$

注意到, y_i 可以写为 $\begin{pmatrix} I_i & O \\ O & O \end{pmatrix} (D - L)^{-1} (U y_0 + b) + \begin{pmatrix} O & O \\ O & I_{n-i} \end{pmatrix} y_0$, 将 y_{i-1} 代入 $y_i = y_{i-1} + t e_i$,

分别考虑 y_0 部分和 b 部分的变化. 将 $(y_{i-1}^T A e_i) e_i$ 写为 $E_i A y_{i-1}$, 其中 E_i 为第 i 列为 1 的方阵, 则有 $y_i = (I + \frac{E_i A}{a_{ii}}) y_{i-1} - 2 \frac{E_i}{a_{ii}} b$, 代入计算第 i 个分量可得成立。

7. 利用相似对角化可知,若 A 的不同特征值为 $\lambda_1, \dots, \lambda_k$, 则多项式 $f(x) = \prod_{i=1}^k (x - \lambda_i)$ 满足 $f(A) = O$ 。
由于子空间中的任何向量都可以写为 $g(A)r$, $g(A)$ 为某个多项式, 而 $g(A)r = q(A)r$, 其中 $q(x)$ 为 $g(x)$ 商去 $f(x)$ 的余式, 因此任何元素可以通过一个次数不超过 $k-1$ 次的多项式乘 r 表示, 即可以被 $r, Ar, \dots, A^{k-1}r$ 线性表出, 从而得证。
8. 由习题 7, 这时 Krylov 子空间维数最高为 k , 于是利用定理 5.2.2, 经过 k 步已经找到了使 $\varphi(x)$ 全局最小的 x , 即为方程的解。
9. 利用定理 5.3.2, 记 $x = x_k - x_*$, $y = x_0 - x_*$ 变形后只需说明 $\frac{x^T x}{x^T A x} \frac{y^T A y}{y^T y} \leq \kappa_2(A)$ 。习题 2 已证明 $\frac{y^T A y}{y^T y} \leq \|A\|_2$, 下面说明 $\frac{x^T x}{x^T A x} \leq \|A^{-1}\|_2$ 。
仍利用正定对称性, 对 A 作相似对角化 $P^T D P$ 后, 记 $z = Px$, 则 $\frac{x^T x}{x^T A x} = \frac{z^T z}{z^T D z} \leq \frac{1}{\min_i D_{ii}} = \rho(D^{-1}) = \|D^{-1}\|_2 = \|A^{-1}\|_2$, 从而得证。
10. (暂缺)
11. 直接计算可知, 若 $x^T A y = 0$, 有 $\|x\|_A^2 + \|y\|_A^2 = \|x + y\|_A^2$, 于是 $r_k^T \mathcal{X} = 0 \Leftrightarrow (x_k - A^{-1}b)^T A \mathcal{X} = 0 \Leftrightarrow \forall x \in \mathcal{X}, \|x - A^{-1}b\|_A^2 = \|x_k - A^{-1}b\|_A^2 + \|x_k - x\|_A^2 \geq \|x_k - A^{-1}b\|_A^2$, 即得证。
12. 记 L2s 为二范数平方 (自己与自己点乘), T 为转置, mul 为矩阵与向量乘法 [此处为理想情况, 迭代可以自动终止, 初值设定为 0。由于只涉及到 $A^T A$ 与向量乘法, 可以不用计算矩阵乘法]:

```

p = rm1 = mul(T(A), b)
a = L2s(r) / L2s(mul(A,p))
x = a * p
r = rm1 - a * mul(T(A), mul(A,p))
while r != 0:
    b = L2s(r) / L2s(rm1)
    p = r + b*p
    a = L2s(r) / L2s(mul(A,p))
    x = x + a * p
    rm1 = r
    r = r - a * mul(T(A), mul(A,p))

```

第六章 非对称特征值问题的计算方法

1. $\det(\lambda I - BA) = \det \begin{pmatrix} \lambda I - BA & O \\ B & I \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} I & -B \\ O & I \end{pmatrix} \det \begin{pmatrix} I & O \\ \lambda^{-1}A & I \end{pmatrix} \det \begin{pmatrix} \lambda I & B \\ O & I - \lambda^{-1}AB \end{pmatrix}$
 $= \lambda^m \det(I - \lambda^{-1}AB) = \lambda^{m-n} \det(\lambda I - AB)$, 从而得证。
2. 由于 Q_k 每位模不超过 1, 根据有界收敛定理可知存在收敛子列。

由于矩阵运算只涉及光滑函数, $Q^* A Q = \lim_{i \rightarrow \infty} Q_{k_i}^* A_{k_i} Q_{k_i}$, 由右侧每个为上三角阵知结果为上三角阵。

3. 记 $C = Q^*BQ$, 由条件直接计算可知 $CT = TC$, 而 T 为对角元互不相同的上三角阵。直接计算可知 $\sum_{k \leq j} c_{ik}t_{kj} = \sum_{k \geq i} t_{ik}c_{kj}$, 考虑所有 $i > j$ 的部分, 按照 $i - j$ 可反向归纳得出必然 c_{ij} 全为 0, 从而得证。
4. $\|Ax - \mu x\|_2^2 = (Ax - \mu x)^*(Ax - \mu x) = x^*A^*Ax - x^*(\mu^*A + \mu A^*)x + \mu^*\mu x^*x = x^*A^*Ax + (-\mu^*R(x) - \mu R(x)^* + \mu^*\mu)x^*x = x^*A^*Ax - R(x)^*R(x)x^*x + \|\mu - R(x)\|_2^2 x^*x$, 从而得证。
5. 对 α , 单位特征向量 $(1, 0)^T$, 左特征向量 $(1, \frac{\gamma}{\alpha - \beta})^T$, 条件数 $\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{(\alpha - \beta)^2}}$ 。
对 β , 单位特征向量 $(1 + \frac{\gamma^2}{(\alpha - \beta)^2})^{-1/2}(\frac{\gamma}{\beta - \alpha}, 1)^T$, 左特征向量 $(0, \sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{(\alpha - \beta)^2}})^T$, 条件数 $\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{(\alpha - \beta)^2}}$ 。
6. 设 $B = QAQ^*$, 若 x 为对特征值 λ 的单位特征向量, 则由于 $QAQ^*Qx = \lambda Qx$, Qx 为 b 模为 1 的特征向量, 类似知 $\bar{Q}y$ 为对应的左特征向量, 而 $\|\bar{Q}y\|_2 = \|y^T Q\|_2 = \|y^T\|_2$ 。另一方面, 由酉相似知 U_2 与 A_2 不变, 于是 Σ^\perp 不变, 对应的特征向量条件数不变。
7. 计算可知 $A^n = \begin{pmatrix} \lambda^n & n\lambda^{n-1} \\ 0 & \lambda^n \end{pmatrix}$ 。由归一化过程, A^n 等同于 $\begin{pmatrix} \lambda & n \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$, 分第二个分量是否为 0 讨论知一定收敛到 $(1, 0)^T$ 。
计算可知 $B^{2k} = \lambda^{2k}I$, 于是 B 的偶数次方与 I 等同, 奇数次方与 B 等同, 只要一开始不为特征向量, 不能收敛。
8. 计算知 $A^n u_0 = \begin{pmatrix} C_n^2 \\ n \\ 1 \end{pmatrix}$, 于是归一化后为 $\begin{pmatrix} 1 \\ 2(n-1)^{-1} \\ 2(n^2-n)^{-1} \end{pmatrix}$, 精确到 5 位需要 $2(n-1)^{-1} < 10^{-5}$, 即 $n > 200001$ 。
9. 由条件可知模第二大的特征值必然在 λ_2, λ_n 中, 由 6.3 节开头知需要 $\frac{|\lambda_1 - \mu|}{\max(|\lambda_2 - \mu|, |\lambda_n - \mu|)}$ 尽量大。
由于当 $\lambda_1 - \mu > \lambda_2 - \mu > 0$ 时有 $\frac{\lambda_1 - \mu}{\lambda_2 - \mu} > \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$ 。进一步讨论正负可发现最优时必须 $\lambda_1 - \mu > \lambda_2 - \mu \geq 0 \geq \lambda_n - \mu$, 且后两者模长相等, 从而得证。
10. 构造其友方阵 $\begin{pmatrix} & & -\alpha_n \\ 1 & & -\alpha_{n-1} \\ & \ddots & \vdots \\ & & 1 & -\alpha_1 \end{pmatrix}$, 其特征多项式即为 $p(\lambda)$, 因此模最大的特征值即为 $p(\lambda)$ 的模最大根, 在其唯一时用幂法计算即可。
11. Mathematica 计算可得约为 $(1, -0.7321, 0.2679)^T$ 。
12. 只要取 E 使得 $Ev = u$, 即有 $(A + E)v = \lambda Iv = \lambda v$, 而从 $Ev = u$ 可以得到 $\sum_{i=1}^n e_{ij}v_j = u_j$ 。利用柯西不等式, $\sum_{i=1}^n v_j^2 \sum_{i=1}^n e_{ij}^2 \geq u_j^2$, 且等号可以取到, 于是存在 $\sum_{i=1}^n e_{ij}^2 = \frac{u_j^2}{\sum_{i=1}^n v_j^2}$ 的解, 此时对 j 求和即有 $\|E\|_F^2 = \frac{\|u\|_2^2}{\|v\|_2^2}$, 从而得证。
13. 取 v 为 $A + E$ 对应 λ 的特征向量, 类似习题 12 计算可知 $Ev = u$, 从而 $\frac{\|u\|_2}{\|v\|_2} = \frac{\|Ev\|_2}{\|v\|_2} \leq \|E\|_2$, 即得证。
14. $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ 与 $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ 交替出现, 不收敛。
15. 若原本 a_{21} 到 a_{n1} 全为 0, 则已经结束, 否则可左乘 P 将其中非零元素置换到 α_{21} , 再左乘 M 进行行变换将整列剩下元素减去 α_{21} 的倍数以消去 (这里 P, M 都是针对后 $n-1$ 行进行了行变换)。这时, 右乘 P^{-1} 与 M^{-1} 都是对后 $n-1$ 列进行操作的列变换, 不会影响第一列的结果, 从而得证。

16. 使用归纳法。 $n = 1, 2$ 时成立, 否则可利用 M_1, P_1 将其相似为习题 15 的对应形式, 记作 $\begin{pmatrix} \alpha_{11} & u_1 \\ u_2 & A_2 \end{pmatrix}$, 其中 u_2 只有第一个分量可能非零。再构造 M_2, P_2 使得 $M_2 P_2 A_2 (M_2 P_2)^{-1}$ 将 A_2 化为了对应形式。注意到, 习题 15 的过程中没有改变第一行第一列, 因此 $M_2 P_2$ 的第一行第一列只有对角元的 1, 从而 $\begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M_2 P_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{11} & u_1 \\ u_2 & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & P_2^{-1} M_2^{-1} \end{pmatrix}$ 不会改变 u_2 除第一个分量均为 0 的性质, 重复此操作即得证。

17. 注意到 $X^{-1} A^{t-1} x = e_t$, 而 AX 的第 i 列为 $A^i x$, 于是 $X^{-1} A X$ 的前 $n-1$ 列为 e_2 到 e_n , 从而为上 Hessenberg。

18. * 非亏损即可对角化

由条件可知对任何 λ , $\lambda I - H$ 的左下角 $n-1$ 阶子矩阵可逆, 从而其特征值几何重数必然为 1, 由可对角化知代数重数亦为 1, 从而没有重特征值。

19. 直接取 $d_{11} = 1, d_{i+1,i+1} = \frac{d_{ii}}{h_{i+1,i}}$, 计算可知成立。由于 $d_{ii} d_{n-i,n-i} = \prod_{i=1}^{n-1} h_{i+1,i}$, 而 $\|D\|_2, \|D^{-1}\|_2$ 分别为特征值与特征值倒数中模最大者, 即 $\prod_{i=1}^k |h_{k,k+1}|$ 中最大的除以最小的。

20. 由于存在 Householder 变换 H_0 使得 $H_0 \alpha = \|\alpha\| e_1$, 而又由于 H_0 满足 H_0^2 的第一列是 e_1 , H_0 的第一列即为 $\frac{\alpha}{\|\alpha\|}$ 。这时计算可发现 $H_0^T A H_0$ 的第一列为 λe_1 , 从而再将右下角的部分类似算法 6.4.1 处理得到 H_2 , 取 $Q = H_0 H_2$ 即可。

21. 由于上 Hessenberg 矩阵不可约, 可从上往下通过 $n-1$ 个 Givens 方阵实现 QR 分解。而考虑每一次 Givens 变换, 当

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & b' \\ 0 & d' \end{pmatrix}$$

时, 计算可知

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & b'' \\ 0 & d'' \end{pmatrix}$$

也即 $Q^{-1} H Q$ 在乘左侧的 Q^{-1} 形成有零对角元的上三角矩阵后, 乘右侧的 Q 后此对角元仍然为 0, 从而得证。

22. 归纳, $U_0 R_0 = H_0 - \mu_0 I$ 成立, 当小于等于 $j-1$ 均成立时, 考虑 j 。

左侧 $= U_0 \dots U_{j-1} (H_j - \mu_j I) R_{j-1} \dots R_0 = U_0 \dots U_{j-1} H_j R_{j-1} \dots R_0 - \prod_{i=0}^{j-1} (H - \mu_i I) \mu_j I$, 于是由归纳假设只需要证明 $U_0 \dots U_{j-1} H_j R_{j-1} \dots R_0 = U_0 \dots U_{j-1} R_{j-1} \dots R_0 H$ 。直接计算发现 $H_t R_{t-1} = R_{t-1} H_{t-1}$, 反复利用可知结论成立。

23. 设第 i 个对角元为 λ_i , 考虑 $(A - \lambda_i I)x = 0$, 假设 $x_i = 0$, 利用剩下 $i-1$ 个方程独立性可以推出必须全为 0, 矛盾, 于是可设 $x_i = 1$ 求解。下面假设 B, b 分别为 $n-1$ 阶的方阵、向量, UpperSolve 为求解上三角线性方程组, 下标从 1 开始:

```
def find_eigen_system(A, result):
    for i = 1 to n:
        for j = 1 to n-1:
            for k = j to n-1:
                B[j][k] = A[j<i?j:j+1][k<i?k:k+1]
```

```

b[j] = -A[j<i?j:j+1][i]
b[j][j] -= A[i][i]
for j = 1 to n:
    result[i][j<i?j:j+1] = UpperSolve(B, b)[i]
result[i][i] = 1

```

24. 将 Householder 定义中的 ww^T 推广为 ww^H , 即为酉方阵, 于是对复向量仍有定理 3.2.2 结论。将定理 3.3.1 从第一列开始上三角化变为从最后一列开始下三角化, 即得到矩阵的 QL 分解。

此外, 将 LU 分解的过程变为对列进行 Gauss 变换可以得到 UL 分解的过程。

考虑 $A_{n-1} = Q_n L_n$, $A_n = L_n Q_n$ 的迭代, 将定理 6.4.1 的过程中的 LU 分解替换为 UL 分解, QR 分解替换为 QL 分解, 即证明了若 Y 有 UL 分解, 则对角线以上趋于 0, 对角线上趋于特征值。

25. 考虑 P25 底部和 P26 顶部的形式可知 $P^T L = (L_{n-1} P_{n-1} \dots L_1 P_1)^{-1}$ 。由于上 Hessenberg 阵的形式, 每一步的 L_i 除对角线上的 1 外至多有一个元素 $l_{i+1,i}$ 非 0, 而 P_i 则或为单位阵或为交换 $i, i+1$ 两行的矩阵 (右乘时变为列变换)。利用 P_i, L_i 逆的形式知其逆依然有此性质, 因此按照 1 到 $n-1$ 的顺序右乘上三角阵 U 后, L_t 作用完后下三角部分至多 $u_{21}, u_{32}, \dots, u_{t+1,t}$ 非零, 于是全部作用完后仍为上 Hessenberg 阵。

由 $\tilde{H} = (P^T L)^{-1} H P^T L$ 可知相似。

26. 设 x 是 A 对 α_{11} 的单位左特征向量, $Q = \begin{pmatrix} U & x \end{pmatrix}$ 是正交方阵, 计算可发现此即满足要求 (由于 α_{11} 为实特征值, 可使 x 是实向量)。

寻找 x : 直接由条件列方程求解, 可不妨设 $x_1 = 1$ 解, 因为下方构造正交矩阵的过程包含了单位化。

构造正交矩阵: 类似习题 20 用 Householder 变换构造即可。

27. 对于实特征值可直接利用反幂法, 接下来对复特征值推导过程:

设 2 阶方阵对角块对应的一对复特征值是 $a \pm bi$, 取其中一个, 反幂法的迭代步骤是 $(A - aI - biI)v_k = z_{k-1}$, 拆分为实向量 $vr_k + ivi_k, zr_k + izi_k$ 可知 $\begin{cases} (A - aI)vr_k + bvi_k = zr_{k-1} \\ (A - aI)vi_k - bvr_k = zi_{k-1} \end{cases}$, 于是

$$\begin{cases} ((A - aI)^2 + b^2)vr_k = (A - aI)zr_{k-1} - bzi_{k-1} \\ ((A - aI)^2 + b^2)vi_k = bzr_{k-1} + (A - aI)zi_{k-1} \end{cases}, \text{ 另一个递推可写为 } \begin{cases} l_k = \sqrt{\|vr_k\|^2 + \|vi_k\|^2} \\ zr_k = \frac{vr_k}{l_k} \\ zi_k = \frac{vi_k}{l_k} \end{cases}.$$

计算可发现, 将 b 改为 $-b$ 后, 递推事实上只是 vi, zi 变为相反数, 因此递推结束后只需要取 $zr \pm izi$ 即得到特征值。

于是, 取 a 与 b 的近似值进行如上的迭代即可得到复特征值的特征向量, 结合实特征值的特征向量计算可得到结论。

28. 幂法中每步 $y_k = A^T A u_{k-1}$ 即可, 这样无需显式计算矩阵乘积。最后得到的特征值需要开根号得到最大奇异值。

29. 左奇异向量即为 AA^T 的特征向量, 而右奇异向量为 $A^T A$ 的特征向量, 从而可得到奇异值后利用反幂法计算。

30. $A^n u = X \Lambda^n X^{-1} u_0$, 归一化的结果与 $X \text{diag}(e^{in\theta}, 1, \frac{\lambda_3}{\lambda_2}, \dots, \frac{\lambda_n}{\lambda_2}) X^{-1} u_0$ 相同, 于是可类似定理 6.2.1 计算得充分大时 $u_n \rightarrow e^{in\theta} (y_1^* u_0) x_1 + (y_2^* u_0) x_2$, 而代入 θ 得表达式即可知有 t 个对应的收敛子序列。

31. 由于 A 乘倍数不影响结果, 不妨设 $\lambda_1 = 1$ 。

由条件设 $A = PJP^{-1}$, J 对角, 计算知 $q_k = \frac{PJ^k P^{-1}u}{\|PJ^k P^{-1}u\|}$, 从而 $q_k^* A q_k = \frac{u^* P^{*-1} J^{*k} P^* P J^{k+1} P^{-1} u}{u^* P^{*-1} J^{*k} P^* P J^k P^{-1} u}$, 于是有 $|q_k^* A q_k - 1| = \left| \frac{u^* P^{*-1} J^{*k} P^* P J^k (J-I) P^{-1} u}{u^* P^{*-1} J^{*k} P^* P J^k P^{-1} u} \right|$ 。

注意到 $J^k (J-I)$ 中模最大的分量不超过 $2|\lambda_2|^k$, 而 J^{*k} 模最大分量不超过 1, 假设 $u^* P^{*-1} J^{*k} P^* P$ 与 $P^{-1}u$ 的模最大分量的界为 a, b , 分母不超过 $2n^2 ab |\lambda_2|^k$ 。另一方面, 趋于极限时分子的 J 只有第一个分量为 1, 由于分子为 $\|PJ^k P^{-1}u\|^2$, 由条件极限时结果 c 非零, 从而存在某个 k 之后大于等于 $\frac{c}{2}$, 综上可知原式不超过 $\frac{4n^2 ab}{c} |\lambda_2|^k$, 即得证 $O(|\lambda_2|^k)$ 。

当 A 为 Hermite 阵时, 可设 P 为正交阵, 上式变为 $|q_k^* A q_k - 1| = \left| \frac{u^* P^{*-1} |J|^{2k} (J-I) P^{-1} u}{u^* P^{*-1} |J|^{2k} P^{-1} u} \right|$, 其中 $|J|$ 为 $J^* J$ 每个元素开平方根, 即 J 每个元素取模。与上方类似过程可知此时为 $O(|\lambda_2|^{2k})$ 。

32. (1) 由于对应分块大小对应, 可以直接相乘, 从而通过分块矩阵计算知结果。

(2) 计算得 $U_k U_k^* = I - q_k q_k^*$, 于是有 $\rho_k^2 - \|g_k\|^2 = q_k^* A^* A q_k - \mu_k q_k^* A^* q_k - \mu_k^* q_k^* A q_k + \mu_k^* \mu_k - q_k^* A^* A q_k + q_k^* A^* q_k q_k^* A q_k = -\mu_k \mu_k^* - \mu_k^* \mu_k + \mu_k^* \mu_k + \mu_k \mu_k = 0$, 其中利用了 $q_k^* q_k = 1$ 。

(3) 展开知右 = $\frac{1}{\delta_k} (q_{k-1} + U_{k-1} (\mu_{k-1} I - C_{k-1})^{-1} g_{k-1})$, 由于 q_k 与目标式的计算过程都进行了归一化 (乘酉阵不影响模), 需说明 $q_{k-1} \parallel (A - \mu_{k-1} I) q_{k-1} + (A - \mu_{k-1} I) U_{k-1} (\mu_{k-1} I - C_{k-1})^{-1} g_{k-1}$, 而右式 = $Q_{k-1} \begin{pmatrix} 0 \\ g_{k-1} \end{pmatrix} + Q_{k-1} \begin{pmatrix} h_{k-1}^* \\ C_{k-1} - \mu_{k-1} I \end{pmatrix} y_k = Q_{k-1} \begin{pmatrix} 0 \\ g_{k-1} \end{pmatrix} + Q_{k-1} \begin{pmatrix} h_{k-1}^* y_k \\ -g_{k-1} \end{pmatrix} = (h_{k-1}^* y_k) q_{k-1}$, 从而得证。

(4) 类似幂法收敛性条件可知其收敛到的 μ 必然为单特征值, 否则将无法收敛。于是, 利用 (2) 可知极限中 C 的特征值是 A 除去 μ 后得到, $(\mu_k I - C_k)^{-1}$ 的极限存在。由此可知 $(\mu_k I - C_k)^{-1}$ 有界, 估算知 $y_k = O(\|g_{k-1}\|)$ 。

由于 $I + y_k y_k^*$ 是 Hermite 阵, 可进行正交相似对角化 $I + y_k y_k^* = R^* J R$, 由于 J 为 $I + y_k y_k^*$ 的特征值, 且 $\det(xI - y_k y_k^*) = x^{n-1}(x - y_k^* y_k)$, 可知对应特征值与 1 的差是 $O(\|y_k^* y_k\|)$ 量级, 而根据相合对角化的过程可知 $R - I$ 亦为 $O(\|y_k^* y_k\|)$ 量级, 从而取 $D = (\sqrt{J} R)^{-1}$ 放缩知 $\|I - D\| = O(\|y_k y_k^*\|)$, 从而得结论。

(5) 利用 (3) 计算可知右侧的第一列是 q_k , 从而只需说明 $P_k = \begin{pmatrix} 1 & -y_k^* \\ y_k & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_k^{-1} & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix}$ 是酉方阵, 而直接计算 $P_k^* P_k = I$, 因此得证。

(6) 利用 (5) 计算, g_k 为 $P_k^* Q_{k-1}^* A Q_{k-1} P_k$ 的对应部分, 于是计算知 $g_k = \frac{1}{\delta_k} (-\mu_{k-1} D^* y_k + D^* g_{k-1} - (h_{k-1}^* y_k) D^* y_k + D^* C_{k-1} y_k)$ 。

(4) 已经说明 y_k 是 $O(\|g_{k-1}\|)$, 而 C_{k-1}, δ_k, μ_k 是 $O(1)$, 再利用 (4) 对 D 的估算可得 $g_k = \frac{1}{\delta_k} (-\mu_{k-1} y_k + g_{k-1} - (h_{k-1}^* y_k) y_k + C_{k-1} y_k) + O(\|g_{k-1}\|^3)$ 。注意到 $-\mu_{k-1} y_k + g_{k-1} + C_{k-1} y_k = 0$ 即得结论。

(7) 由于 $y_k = O(\|g_{k-1}\|)$, 代入 (6), 再利用 (2) 可直接得结论。当 A 为 Hermite 阵时, 由于 $h_{k-1} = g_{k-1}$, 代入 (6) 后左右均为 $O(\|g_{k-1}\|^3)$, 从而有结论。

第七章 对称特征值问题的计算方法

1. 设其对应的单位特征向量为 α , 有 $A\alpha = \lambda\alpha$, 由对称可知 $\alpha^T A = \lambda\alpha^T$, 从而其亦为左特征向量, 且 $\alpha^T \alpha = 1$, 由条件数定义知为 1。
2. 利用定理 7.1.3, 计算知将 A 的第 i 行、列除对角元外变为 0 的对称矩阵 B 有特征值 a_{ii} , 而 $A - B$ 只有第 i 行/列非零, 记其第 i 列为 α , 可知 $A - B = e_i \alpha^T + \alpha e_i^T$ (由于 $\alpha_i = 0$), 从而 $\|(A - B)x\| = \sqrt{(\alpha^T x)^2 + (\|\alpha\| x_i)^2}$ 。

利用柯西不等式, 当 $x^T x = 1$ 时, 利用 $\alpha_i = 0$ 有 $(\alpha^T x)^2 + (\|\alpha\|x_i)^2 \leq \alpha^T \alpha(1 - x_i^2) + \alpha^T \alpha x_i^2 = \alpha^T \alpha$, 从而 $\|(A - B)x\|$ 最大为 $\sqrt{\alpha^T \alpha}$, 而此即为二范数, 因此 A 必然有一特征值在 B 的特征值 a_{ii} 的周围 $\sqrt{\alpha^T \alpha}$ 范围内, 从而得证。

3. 由于同时正交相似对角化不改变结果, 可不妨设 A 为对角阵。此时记 $t^{-1} = \|A^{-1}\|_2$ 为最小对角元的倒数, t 即代表 A 的最小对角元。

而对非零的 x , 由二范数定义 $x^T A x + x^T E x \geq t x^T x - \|x\| \|E x\| > t x^T x - \|x\| (t \|x\|) = 0$, 从而得证。

4. 由奇异值分解 $A = P \Sigma Q$ 可知 $A^T A = Q^T \Sigma^T \Sigma Q$, 由相似不影响特征值与 Q 正交可知 $A^T A$ 的特征值即为 $\Sigma^T \Sigma$ 对角元, 而由于 Σ 对角元非负, $\Sigma^T \Sigma$ 对角位置恰好为 Σ 对应对角元的平方, 从而得证。 AA^T 同理。

5. 由习题 4, 利用对称阵条件有 $A^T A = A^2$, 正交相似对角化可知 A^2 特征值为 A 对应特征值的平方, 从而奇异值平方与对应特征值平方相同, 又由奇异值非负可知结论。

6. 设奇异值分解 $A = P \Sigma Q$, 则由 P, Q 正交 $\|A\|_2 = \max_x \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{y=Qx} \frac{\|P \Sigma y\|}{\|Q^T y\|} = \max_y \frac{\|\Sigma y\|}{\|y\|}$ 。利用 Σ 为对角阵可直接算出 $\|A\|_2 = \sigma_1$, 同理可算出 $\|A^{-1}\|_2 = \frac{1}{\sigma_n}$, 因此得证。

7. 引理: 对于任何 n 的 $k-1$ 元子集 I , 任何 $U \in \mathcal{G}_k^n$ 中存在向量 $x \neq 0$ 使得 $x_i = 0, i \in I$ 。

证明: 不妨设 I 为前 $k-1$ 个分量, 其余同理。考虑 U 的一组基 $\{x_i\}$ 排成 $n \times k$ 矩阵, 对其上面的 $k-1 \times k$ 矩阵可右乘列变换阵 P 成为上三角阵 (多出的一列全为 0), 而由基线性无关, P 可逆, 右乘 P 后仍然满秩, 因此前 $k-1$ 个分量全为 0 的列其余分量不全为 0, 从而得证。

类似习题 6 可知不妨设 A 已经是 Σ 形式, 非负对角元从大到小排列的对角阵。由引理可知 \mathcal{G}_i^n 中一定存在非零向量使得前 $i-1$ 个分量全为 0, 此时 $\frac{\|\Sigma u\|}{\|u\|} \leq \sigma_i$, 因此对所有子空间取最大值不超过 σ_i , 而取前 i 个单位向量生成的子空间可以取到 σ_i , 从而第一个等号得证。

对右侧, 由于 \mathcal{G}_{n-i+1}^n 中一定存在非零向量使得后 $n-i$ 个分量为 0, 此时 $\frac{\|\Sigma u\|}{\|u\|} \geq \sigma_i$, 因此对所有子空间取最小值不低于 σ_i , 而取后 $n-i+1$ 个单位向量生成的子空间可以取到 σ_i , 从而第二个等号得证。

8. $O\left(\frac{(x+t)^T A(x+t)}{(x+t)^T (x+t)} - \lambda\right) = O((x+t)^T A(x+t)x^T x - x^T A x(x+t)^T (x+t)) = O(t^T A t x^T x) = O(t^T A t)$, 第二步利用了 $(x^T A)^T = A x = \lambda x$, 而一三两步利用同乘非小量的量不会改变量级。由于 $t = O(\varepsilon)$, 计算分量可得 $O(t^T A t) = O(\varepsilon^2)$, 从而得证。

9. 设 T 的对角元 α_1 到 α_n , 次对角元 β_1 到 β_n , 可知 $A q_i = \beta_{i-1} q_{i-1} + \alpha_i q_i + \beta_i q_{i+1}$, 范围外的下标对应数均为 0。

先任取单位向量 q_1 , 由于 $A q_1 - \alpha_1 q_1 = \beta_1 q_2$, $q_2^T q_1 = 0$, α_1 必然为 $A q_1$ 在 q_1 上的投影长度, 即 $\alpha_1 = \frac{q_1^T A q_1}{q_1^T q_1}$, 类似地, 每一步都可以变为确定新的 q_m 与 s, t 使得 $x - s q_{m-1} = t q_m$, 且 x 已没有在 q_1 到 q_{m-2} 的分量, 因此取 s 为投影长度 $\frac{x^T q_{m-1}}{q_{m-1}^T q_{m-1}}$ 即可得到 t 与 q_m 。重复此操作得到结果。

10. 在算法 7.6.1 的过程中, 将每次循环中第一个 v 与 β 累计左乘到左侧的 U 上, 第二个累计右乘到右侧的 V 上, 即得到 $U A V = B$ 的形式, 再分别取转置即可。

11. 直接计算可知 α_2 为位移时结果为 $-\frac{\varepsilon^3}{(\alpha_1 - \alpha_2)^2 + \varepsilon^2} = O(\varepsilon^3)$ 。

由 Wilkson 位移性质可知 $T - \mu I$ 不可逆, 因此分解出的 QR 中 R 第二行为 0, 从而 RQ 第二行为 0, 可得 $\tilde{T}(2, 1)$ 一定为 0。

12. 由 7.3.4 相加可知 $\beta_{pp} + \beta_{qq} = (c^2 + s^2)(\alpha_{pp} + \alpha_{qq}) = \alpha_{pp} + \alpha_{qq}$, 再由 7.3.15 即得证。

13. 即 $c\alpha_{12} + s\alpha_{22} = -s\alpha_{11} + c\alpha_{21}$, 于是记 $m = \sqrt{(\alpha_{11} + \alpha_{22})^2 + (\alpha_{12} - \alpha_{21})^2}$, 有 $c = \frac{\alpha_{11} + \alpha_{22}}{m}$, $s = \frac{\alpha_{21} - \alpha_{12}}{m}$.
利用此算法, 对此阵先化为对称, 再用 Jacobi 方法对角化, 对角元取模即为奇异值 (可由对角元为 1 与 -1 的对角阵调整符号)。
14. 先由习题 13 得到 θ_0 , 再根据书上对称阵算法得到 θ_2 使得 $J(p, q, -\theta_2)AJ(p, q, \theta_2)$ 为对角阵, 取 $\theta_1 = \theta_0 - \theta_2$ 即可。
由正交阵性质 $\sum_i \beta_{ii}^2 = \sum_{ij} \alpha_{ij}^2$, 于是直接计算 $E(B), E(A)$ 得证。
15. 先用 Householder 变换使其只剩下 $\min(m, n) \times \min(m, n)$ 的方阵, 再利用习题 14 的操作不断进行两边旋转, 极限为对角阵, 再由对角元为 1 与 -1 的对角阵调整符号得结果。
16. 计算知即 $cs(x^T x - y^T y) + (c^2 - s^2)x^T y = 0$, 此即 $(x^T x - y^T y) \sin 2\theta + 2x^T y \cos 2\theta = 0$, 可得到 $\varphi = 2\theta$ 后 $c = \cos \frac{\varphi}{2}, s = \sin \frac{\varphi}{2}$ (或用二次方程规避三角函数运算)。
17. * 此题题干应为 $\mathbb{R}^{m \times n}$
考虑 $\sum_{i < j} (a_i^T a_j)^2$, 其中 a_i 代表 A 的第 i 列。直接计算可发现如习题 16 操作 p, q 对其他列的影响在平方和中抵消, 因此每次操作 p, q 使此和减小了 $(a_p^T a_q)^2$, 而极限必然为 0, 因此不断选取两列如此操作可最终收敛至相互正交。
18. 由条件可知需要 d_i 满足 $\frac{\gamma_i d_i}{d_{i+1}} = \frac{\beta_i d_{i+1}}{d_i}$, 由于 $\gamma_i \beta_i > 0$, 可取 $d_{i+1} = \sqrt{\frac{\gamma_i d_i^2}{\beta_i}}$, 不妨设 $d_1 = 1$, 即可归纳构造出 d_i 。
19. (1) 若 $\xi_1 = 0$, 利用 $\alpha_1 \xi_1 + \beta_2 \xi_2 = \lambda \xi_1$, 由不可约知 $\beta_2 \neq 0$, 从而 $\xi_2 = 0$, 重复此过程可推出 $\xi = 0$, 矛盾。若 $\xi_n = 0$ 同理得矛盾, 从而得证。
(2) 设左侧为 t_i , 在 $i = 1$ 时记为 1, $i = 2$ 时计算可知为 $\lambda - \alpha_1$, 此时只需要满足相同的递推。在已知 ξ_{i-1} 与 ξ_i 时, 有 $\beta_i \xi_{i-1} + \alpha_i \xi_i + \beta_{i+1} \xi_{i+1} = \lambda \xi_i$, 于是 $\beta_i^2 \beta_{i+1} t_{i-1} + \alpha_i \beta_{i+1} t_i + \beta_{i+1} t_{i+1} = \lambda \beta_{i+1} t_i$, 由不可约消去 β_{i+1} 即可发现递推与 $(-1)^{i-1} p_{i-1}(\lambda)$ 相同, 得证。
20. 利用定理 7.4.1, 不可约对称三对角阵只有单特征值, 因此产生 k 重特征值至少需要分为 k 块, 即 $k - 1$ 个为零的次对角元。
21. (a) 由推论 7.4.1 知负定即首个顺序主子式为负且每次顺序主子式都变号, 计算验证知负定成立。
(b) 由负定, 考虑 $s_n(-2)$ 可知有两个落在指定范围内。
22. 每次计算 $(T - \tilde{\lambda}I)y_k = z_{k-1}$, 并令 z_k 为 y_k 模最大分量的归一化。
由于 T 为对称三对角阵, $T - \tilde{\lambda}I$ 利用高斯消元可做到 $O(n)$ 复杂度的 LU 分解, 进一步可得到计算 y_k 的复杂度为 $O(n)$, 每次迭代只需要 $O(n)$ 复杂度。
23. 即用二分法求 $B^T B$ 的特征值, 这个矩阵乘法的计算复杂度 $O(n)$, 可直接显示计算。
24. (暂缺)
25. (暂缺)
26. (暂缺)
27. $C^* = C \Leftrightarrow A^T - iB^T = A + iB \Leftrightarrow M^T = M$, 于是充要条件得证。

而 $M \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} A\alpha - B\beta = \lambda\alpha \\ B\alpha + A\beta = \lambda\beta \end{cases} \Leftrightarrow C(\alpha + \beta i) = \lambda(\alpha + \beta i)$, 计算发现 $\begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix}$ 亦为 λ 对应的特征向量。于是 M 对应特征值重数是 C 的两倍, 特征向量关系为 $\alpha + \beta i$ 对应 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ 与 $\begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix}$ 。