数值线性代数：求解线性方程组

- 矩阵的三角分解
    - LU分解：若A的前$n-1$顺序主子式不等于0，则存在唯一的L是单位下三角阵，U是上三角阵，使得$A=LU$

      【证明】存在性由Gauss消元法过程给出，唯一性用数学归纳法计算：

      $$\begin{aligned} A=\begin{pmatrix} A_{n-1} & \mu \\ \nu^T & a_{nn} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} L_{n-1} & 0 \\ \sigma^T & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_{n-1} & \tau \\ 0 & u_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \widetilde{L}_{n-1} & 0 \\ \widetilde{\sigma}^T & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \widetilde{U}_{n-1} & \widetilde{\tau} \\ 0 & \widetilde{u}_n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

      推论：相同的条件，存在唯一的单位上（下）三角阵L（U），对角矩阵D，使得$A=LDU$
    - PLU分解：若$\det A\neq 0$，则存在排列阵P、单位下三角L和上三角U，使得$PA=LU$
    - Cholesky分解：若A对称正定，则存在对角元为正的下三角阵L使得$A=LL^T$

      【证明】正定⇒所有顺序主子式都是正数，特别地都不得零，因此有LDLT分解，再结合正定可知D的对角线都是正数，所以$A=L\sqrt{D}\sqrt{D}L^T=\widetilde{L}\widetilde{L}^T$，其中$\widetilde{L}$的对角线元素就是$\sqrt{D}$的对角线元素，为正数

      【例题】

      设$A=\begin{pmatrix} 5 & a \\ a & 3 \end{pmatrix}$，$a\in\mathbb{R}$，要想$A$正定，则$a$的取值范围是？此时做Cholesky分解$A=LL^T$，计算$L$.

      【解答】A的特征多项式为$p(\lambda)=(\lambda-3)(\lambda-5)-a^2$，若要两根都为正，则$p(0)=15-a^2>0$，且$p(4)=-1-a^2<0$. 其中解第一个不等式可得$|a|<\sqrt{15}$，第二个不等式自动满足（也可以用性质：实对称矩阵$A$是正定的，当且仅当$A$的每个顺序主子式都大于零）. 因此所求$a$的范围是$|a|<\sqrt{15}$.

      对于Cholesky分解，首先根据Gauss消元法可得矩阵分解：

      $$A=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{a}{5} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & a \\ 0 & 3-\frac{a^2}{5} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{a}{5} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 3-\frac{a^2}{5} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \frac{a}{5} \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

      所以

      $$L=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{a}{5} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{5} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{15-a^2}{5}} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sqrt{5} & 0 \\ \frac{a}{\sqrt{5}} & \sqrt{\frac{15-a^2}{5}} \end{pmatrix}.$$
    - LDLT分解：设A是对称阵，且前$n-1$顺序主子式不得零，则A可以唯一分解为$A=LDL^T$，其中L是单位下三角阵，D是对角阵

      【证明】对A做LDU分解$A=LDU$，根据对称可知$U=L^T$，得证。
- 矩阵的条件数
    - 直接求解线性方程组的先验误差估计：

      设$\det A\neq 0$，$\mathbf{b}\neq 0$，$\left\|A^{-1}\right\|\|\delta A\|<1$，则有：

      $$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\leq\frac{\|A\|\left\|A^{-1}\right\|}{1-\|A\|\left\|A^{-1}\right\|\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\cdot\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}\right).$$

      【证明】根据题给条件可知$A+\delta A=A(I+A^{-1}\delta A)$，根据$\left\|A^{-1}\delta A\right\|\leq\left\|A^{-1}\right\|\|\delta A\|<1$可知$A+\delta A$是可逆矩阵，所以：

      $$\delta\mathbf{x}=(A+\delta A)^{-1}[\mathbf{b}+\delta\mathbf{b}-(A+\delta A)\mathbf{x}]=(I+A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1}(\delta\mathbf{b}-\delta A\mathbf{x})$$

      所以：

      $$\|\delta\mathbf{x}\|\leq\frac{\left\|A^{-1}\right\|}{1-\left\|A^{-1}\right\|\|\delta A\|}\cdot[\|\delta\mathbf{b}\|+\|\delta A\|\|\mathbf{x}\|],$$

      再根据$\|\mathbf{b}\|\leq\|A\|\|\mathbf{x}\|$可得
    - 条件数$\operatorname{cond}A=\|A\|\left\|A^{-1}\right\|$

      性质：

        - 对于任何范数，$\operatorname{cond}(A)\geq 1$（显然）
        - 对于2-范数，$\operatorname{cond}_2(U)=1$（对于酉矩阵）；$\operatorname{cond}_2(UA)=\operatorname{cond}_2(U)$；$\operatorname{cond}_2(A^TA)\geq\operatorname{cond}_2(A)$

          【证明】

(a) 断言：设Q为n阶正交阵，$A\in\mathbb{R}^{n\times n}$，则$\|A\|_2=\|QA\|_2=\|AQ\|_2$.

【事实上，
$\|QA\|_2=\sup_{\|x\|_2=1}\|QAx\|_2=\sup_{\|x\|_2=1}\sqrt{x^tA^tQ^tQAx}=\sup_{\|x\|_2=1}\sqrt{x^tA^tAx}=\sup_{\|x\|_2=1}\|Ax\|_2=\|A\|_2$
;
$\|AQ\|_2=\sup_{\|x\|_2=1}\|AQx\|_2=\sup_{\|Qx\|_2=1}\|AQx\|_2=\sup_{\|y\|_2=1}\|Ay\|_2=\|A\|_2$（这里用到正交矩阵不改变向量的2-范数）】

所以：

$$\text{cond}_2(QA)=\|QA\|_2\left\|(QA)^{-1}\right\|_2=\|QA\|_2\left\|A^{-1}Q^T\right\|_2=\|A\|_2\left\|A^{-1}\right\|_2=\text{cond}_2(A).$$

（这里用到Q是正交矩阵$\Rightarrow Q^T$也是正交矩阵）

(b)

断言：对所有$n\times n$实矩阵A，$\text{cond}_2(A)\geq 1$，从而$[\text{cond}_2(A)]^2\geq\text{cond}_2(A)$.

【按定义，$\text{cond}_2(A)=\|A\|_2\left\|A^{-1}\right\|_2\geq\left\|AA^{-1}\right\|_2=\|I_n\|_2=1$.】

断言：对所有$n\times n$实矩阵A，$\left\|A^TA\right\|_2\geq\|A\|_2^2$，$\left\|AA^T\right\|_2\geq\|A\|_2^2$.

【按定义，$\|Ax\|_2^2=x^TA^TAx\leq\|x\|_2\left\|A^TAx\right\|_2\leq\|x\|_2^2\left\|A^TA\right\|_2\Rightarrow\left(\sup_{x\neq0}\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}\right)^2\leq\left\|A^TA\right\|_2$，即$\|A\|_2^2\leq\left\|A^TA\right\|_2$. 用$A^T$替换$A$可得$\left\|A^T\right\|_2^2\leq\left\|AA^T\right\|_2$. 由$A^TA$和$AA^T$的特征多项式完全相同，以及二范数的定义可知$\left\|A^T\right\|_2^2=\lambda_{\max}(AA^T)=\lambda_{\max}(A^TA)=\|A\|_2^2$，即$\left\|AA^T\right\|_2\geq\|A\|_2^2$】

我们计算$\text{cond}_2(A^TA)$:

$$\text{cond}_2(A^TA)=\left\|A^TA\right\|_2\left\|A^{-1}(A^T)^{-1}\right\|_2=\left\|A^TA\right\|_2\left\|A^{-1}(A^{-1})^T\right\|_2\geq\|A\|_2^2\left\|A^{-1}\right\|_2^2=\text{cond}_2(A)^2\geq\text{cond}_2(A).$$

- 对于2−范数，$\text{cond}_2(A)=\frac{\sigma_{\max}(A)}{\sigma_{\min}(A)}$（最大奇异值和最小奇异值之比）

  【证明】注意到$\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}=\sigma_{\max}(A)$即可

- 后验误差估计

  设 $\overline{\mathbf{x}}$ 为 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 的一个近似解. $\mathbf{r}=\mathbf{b}-A\overline{\mathbf{x}}$ 称为 "残差". 有

$$\frac{1}{\text{cond}(A)}\frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|}\leq\frac{\|\mathbf{x}-\overline{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{x}\|}\leq\text{cond}(A)\frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

- 吉洪诺夫正则化方法
  - 根据奇异值分解$A=VDU^*$，我们有分解式：

$$A\mathbf{x}=\sum_{j=1}^r\sigma_j(\mathbf{x},\mathbf{u}_j)\mathbf{v}_j.$$

    【证明】注意到$A\mathbf{u}_k=\mu_j\mathbf{v}_j, j=1,\cdots,r$；$A\mathbf{u}_j=0, j=r+1,\cdots,n$，以及$\mathbf{x}=\sum_{j=1}^n(\mathbf{x},\mathbf{u}_j)\mathbf{u}_j$（由于标准正交）即可

  - 广义逆：

$$\mathbf{x}=\sum_{j=1}^r\frac{1}{\mu_j}(\mathbf{b},\mathbf{v}_j)\mathbf{u}_j.$$

    正则化方法：

$$\mathbf{x}=\sum_{j=1}^r\frac{\mu_j}{\alpha+\mu_j^2}(\mathbf{b},\mathbf{v}_j)\mathbf{u}_j.$$

    （相当于求解$(\alpha I+A^*A)\mathbf{x}_\alpha=A^*\mathbf{b}$，$\text{cond}_2(\alpha I+A^*A)=\frac{\mu_1^2+\alpha}{\mu_n^2+\alpha}$）

- 线性方程组的迭代求解——线性格式
  - 【命题】B是n阶复方阵，则以下等价：

    $B^k\to0$；$\rho(B)<1$；存在一种范数使得$\|B\|<1$.

    【证明】①->②：取特征向量即得$\lambda^k\to0$，因此B的所有特征值模都小于1；

    ②->③：回忆一个事实：对任何$\varepsilon>0$，存在一种范数$\|\|_\varepsilon$使得$\|B\|_\varepsilon\leq\rho(B)+\varepsilon$，由此立刻得

    ③->①：根据算子范数的性质$\left\|B^k\right\|\leq\|B\|^k$立刻得
  - 【定理】$\lim_k\left\|B^k\right\|^{1/k}=\rho(B)$

    【证明】对整数k做除法公式$k=qn(k)+r$，利用凸性证明$\limsup_k\left\|B^k\right\|^{1/k}=\liminf_k\left\|B^k\right\|^{1/k}$
  - 简单迭代格式

记号：$A=D-L-U=M-N$，构造类似于$\mathbf{x}=M^{-1}N\mathbf{x}+M^{-1}\mathbf{b}$的形式

Jacobi：$\mathbf{x}^{(n+1)}=D^{-1}(L+U)\mathbf{x}^{(n)}+D^{-1}\mathbf{b}=(I-D^{-1}A)\mathbf{x}^{(n)}+D^{-1}\mathbf{b}$

G-S: $\mathbf{x}^{(n+1)}=(D-L)^{-1}U\mathbf{x}^{(n)}+(D-L)^{-1}\mathbf{b}$

SOR: $\mathbf{x}^{(n+1)}=(D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega U]\mathbf{x}^{(n)}+(D-\omega L)^{-1}\omega\mathbf{b}$

- 简单迭代格式的收敛性
  - 若A严格对角占优或者不可约弱对角占优，则Jacobi和G-S收敛

    【证明】这里只对严格对角占优证明，不可约弱对角占优略去：

    只需验证$B=M^{-1}N$满足收敛性条件

    $B_J=D^{-1}(D-A)=I-D^{-1}A$，根据对角占优可知$\|B_J\|_\infty<1$

    $B_{G-S}=(D-L)^{-1}U$，取特征向量x，假设特征值$|\lambda|>1$，则根据对角占优可知$\lambda(D-L)-U$也是严格对角占优，所以：

    $$\det(\lambda I-B_{G-S})=\det{(D-L)}^{-1}\det(\lambda(D-L)-U)\neq 0$$

    这和λ是特征值矛盾，所以$\rho(B_{G-S})<1$
  - 设A对称正定，则Jacobi收敛当且仅当$2D-A$也正定

    【证明】根据正定可知对角线均为正，也就是D的元素都是正数，所以

    $B_J=D^{-1}(D-A)=I-D^{-1}A=\sqrt{D}^{-1}(I-\sqrt{D}^{-1}A\sqrt{D}^{-1})\sqrt{D}$

    $2D-A$正定，说明$2I-\sqrt{D}^{-1}A\sqrt{D}^{-1}$也正定（合同变换），所以其特征值落在$(0,2)$，因此$I-\sqrt{D}^{-1}A\sqrt{D}^{-1}$的特征值落在$(-1,1)$，其谱半径$\rho(I-\sqrt{D}^{-1}A\sqrt{D}^{-1})<1$，所以$B_J$的谱半径$\rho(B_J)=\rho(I-\sqrt{D}^{-1}A\sqrt{D}^{-1})<1$（相似变换不改变谱）
  - 1）设AHermite正定，$0<\omega<2$，则SOR方法收敛. 特别地，只要AHermite正定，则G-S收敛（$\omega=1$的情形）

    2）设A对角非零，则SOR收敛$\Rightarrow 0<\omega<2$

    【对角非零且正定：则ASOR收敛$\Leftrightarrow 0<\omega<2$】

    【证明】

    1）设λ是$(D-\omega L)^{-1}[\omega U+(1-\omega)D]$的特征值，$x$为特征向量，则有：

    $$(1-\omega)Dx+\omega Ux=(D-\omega L)x.$$

    注意到有如下分解：

    $$2(1-\omega)D+2\omega U=(2-\omega)D-\omega A+\omega(U-L),$$

    $$2(D-\omega L)=(2-\omega)D+\omega A+\omega(U-L).$$

    于是：

    $$\lambda=\frac{x^*(2-\omega D)x-\omega x^*Ax+\omega x^*(U-L)x}{x^*(2-\omega D)x+\omega x^*Ax+\omega x^*(U-L)x}.$$

    注意到$U-L$是Hermite反对称矩阵，所以$x^*(U-L)x$是纯虚数，而AHermite正定$\Rightarrow x^*Ax$为正实数且D的对角线大于0（于是$x^*(2-\omega D)x$也是正实数），所以：

    $$|\lambda|^2=\frac{[x^*(2-\omega D)x-\omega x^*Ax]^2+|\omega x^*(U-L)x|^2}{[x^*(2-\omega D)x+\omega x^*Ax]^2+|\omega x^*(U-L)x|^2}$$

    因为：

    $$|x^*(2-\omega D)x-\omega x^*Ax|<x^*(2-\omega D)x+\omega x^*Ax,$$

    所以$|\lambda|^2<1$，于是$\rho(B^\omega_{SOR})<1$，这里$B^\omega_{SOR}=(D-\omega L)^{-1}[\omega U+(1-\omega)D]$.

    2）设$\mu_1,\cdots\mu_n$是B^ω_{SOR}的特征值，则：

    $$\prod_{i=1}^n\mu_i=\det{(D-\omega L)}^{-1}\det((1-\omega)D+\omega U)=\det D^{-1}[(1-\omega)^n\det D]=(1-\omega)^n,$$

    此因U和L分别是严格上三角和严格下三角以及D对角非零.

    所以：

$$|\omega-1|=\sqrt[n]{\prod_{j=1}^{n}|\mu_j|}\le\max_{1\le j\le n}|\mu_j|=\rho(B_{SOR}^{\omega})<1$$

于是有$\omega\in(0,2)$.

- 最速下降法和共轭梯度法
  - Setting：A是实对称矩阵，求解$Ax=b$
  - 原理：$Ax=b$的真解x^*极小化泛函$\mathcal{F}[x]=\frac{1}{2}(Ax,x)-(b,x)$
  - 最速下降法：沿着残差方向下降

    $$p^{(k)}=-\nabla\mathcal{F}[x^{(k)}]=b-Ax^{(k)}=r^{(k)},$$

    一维搜索的最小值

    $$\alpha_k=\arg\min\mathcal{F}[x^{(k)}+\alpha_k p^{(k)}]=\frac{(r^{(k)},p^{(k)})}{(Ap^{(k)},p^{(k)})}$$

    可以证明：

    $$\mathcal{F}(x^{(k+1)})=\mathcal{F}(x^{(k)})-\frac{1}{2}\frac{(r^{(k)},r^{(k)})^2}{(Ar^{(k)},r^{(k)})}\le\mathcal{F}(x^{(k)})$$

  - 共轭梯度法：不选择$p^{(k+1)}=r^{(k+1)}$，而是选择：

    $$p^{(k+1)}=r^{(k)}+\beta_k p^{(k)}$$

    其中β_k的选取使得$p^{(k+1)}$和$p^{(k)}$是A-共轭的，也就是：

    $$\beta_k=-\frac{(r^{(k+1)},Ap^{(k)})}{(p^{(k)},Ap^{(k)})}$$

    然后对新的$p^{(k+1)}$同样找一维搜索的最优参数 $\alpha_{k+1}=\arg\min\mathcal{F}[x^{(k+1)}+\alpha_{k+1}p^{(k+1)}]$
- Galerkin原理，Arnoldi算法和GMRES算法
  - 试验函数空间$K_m=\mathrm{Span}(v_i)_{i=1}^m$；测试函数空间$L_m=\mathrm{Span}(w_i)_{i=1}^m$
    要求解$Ax=b$（A未必是对称正定矩阵），为此令$x_0\in\mathbb{R}^n$是任一向量，求解残差方程：

    $$Az=r_0,\quad 其中z=x-x_0,\quad r_0=b-Ax_0,$$

    如果能较好地求解出z^*，则$x^*=x_0+z^*$就是真解的一个很好的近似
  - Galerkin原理：在子空间K_m中找向量z_m，使得残差r_0-Az_m和测试函数空间L_m中所有向量都是正交的，也就是：

    $$(r_0-Az_m,w_i)=0,\quad i=1,2,\cdots,n$$

    因为$K_m=\mathrm{Span}(v_i)_{i=1}^m$，所以不妨设$z_m=Vy_m$，其中$V=(v_1,\cdots,v_m)$，于是有：

    $$w_i^TAVy_m=w_i^Tr_0,\quad i=1,2,\cdots,n$$

    再定义$W=(w_1,\cdots,w_m)$，则有：

    $$W^TAVy_m=W^Tr_0\Rightarrow z_m^*=V_m(W^TAV)^{-1}W^Tr_0.$$

    这就是z_m的一个近似解
  - Arnoldi算法：$L_m=K_m=\mathrm{Span}(r_0,Ar_0,\cdots,A^{m-1}r_0)$（Krylov子空间）
    Arnoldi过程：生成K_m的标准正交基$(v_i)_{i=1}^m$的过程
    取$v_1=\frac{r_0}{\|r_0\|_2}$，我们希望扩充成$K_m$的**标准正交向量组**，设它们放在一起构成列正交矩阵$V=(v_1,\cdots,v_m)$
    我们假定V^TAV是上Hessenberg矩阵H，逐列计算：

    $$Av_1=h_{11}v_1+h_{21}v_2$$

    做内积可得：

    $$(v_1,Av_1)=h_{11}(v_1,v_1)+h_{21}(v_1,v_2)=h_{11}\Rightarrow h_{11}=(v_1,Av_1)$$

    $$\Rightarrow h_{21}v_2=Av_1-h_{11}v_1\equiv r_1\Rightarrow h_{21}=\|r_1\|_2.$$

    然后，写出第二列$Av_2=h_{12}v_1+h_{22}v_2+h_{32}v_3$，继续计算下去. 可以证明，这样产生的正交序列$\{v_i\}_{i=1}^m$就是$K_m=\mathrm{Span}(r_0,Ar_0,\cdots,A^{m-1}r_0)$的标准正交基. 可以用矩阵记号写出Arnoldi过程的通式：

$$AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T.$$

恶性中断现象：根据Galerkin原理求解残差方程时：

$$W_m^T A V_m y_m = W_m^T r_0,$$

这里$W_m^T = V_m^T$，$V_m^T A V_m = H_m$，$V_m^T r_0 = V_m^T \|r_0\| v_1 = \|r_0\| e_1$，所以近似解就是

$$z_m = V_m H_m^{-1} \|r_0\| e_1.$$

但是并不能保证H_m非奇异，如果H_m是奇异矩阵，则称Arnoldi算法发生了**恶性中断**，需要更换x_0重新求解

- GMRES方法（广义极小化残差方法）： $K_m = \mathrm{Span}(r_0, \cdots, A^{m-1} r_0)$（仍是Krylov子空间），而测试函数空间换成$L_m = AK_m$

【定理】设A是可逆矩阵，设$V_m = (v_1, \cdots, v_m)$是K_m的标准正交基，$W_m = (w_1, \cdots, w_m)$是L_m的标准正交基，则按照GMRES方法求解残差方程不会发生恶性中断，也就是$B_m = W_m^T A V_m$是非奇异矩阵.

【证明】写$W_m = AU_m$，其中$U_m = (u_1, \cdots, u_m)$，$u_i \in K_m$，所以存在可逆矩阵$G \in M_m(\mathbb{R})$，使得$U_m = V_m G$，所以$W_m = AV_m G$，此时根据Galerkin原理：

$$B_m = W_m^T A V_m = G^T (AV_m)^T (AV_m),$$

根据A可逆，V_m列正交可知$(AV_m)^T(AV_m)$对称正定，因而可逆，而G也可逆，所以B可逆.

【定理】按照GMRES方法计算出来的近似解$\widetilde{x} = x_0 + \tilde{z}$在$x_0 + K_m$中极小化泛函$R[x] = \|b - Ax\|_2^2$，也就是：

$$R[\widetilde{x}] = \min_{x \in x_0 + K_m} R[x].$$

反过来，如果$R[\widetilde{x}] = \min_{x \in x_0 + K_m} R[x]$.成立，那么$\widetilde{x}$一定是GMRES方法计算出来的解.

【证明】

- 任取$x \in x_0 + K_m$，都有

  $$\|b - Ax\|_2^2 = \|b - A\widetilde{x} - A(x - \widetilde{x})\|_2^2 = \|b - A\widetilde{x}\|_2^2 - 2(b - A\widetilde{x}, A(x - \widetilde{x})) + \|A(x - \widetilde{x})\|^2$$

  因为$A(x - \widetilde{x}) \in AK_m = L_m$，所以$A(x - \widetilde{x}) \perp \tilde{z} = b - A\widetilde{x}$，所以：

  $$\|b - Ax\|_2^2 = \|b - A\widetilde{x}\|_2^2 + \|A(x - \widetilde{x})\|^2 \geq \|b - A\widetilde{x}\|_2^2.$$

  所以，$R[\widetilde{x}] = \min_{x \in x_0 + K_m} R[x]$

- 假设$\widetilde{x}$极小化残差泛函，只要证明：任取$v \in K_m$，都有$\widetilde{x} - x_0 \perp v$即可.

  考虑二次函数

  $$Q_v(\alpha) = \|b - A(\widetilde{x} + \alpha v)\|_2^2$$

  展开得：

  $$Q_v(\alpha) = \alpha^2 \|Av\|_2^2 - 2\alpha(b - A\widetilde{x}, Av) + \|b - A\widetilde{x}\|_2^2 = \alpha^2 \|Av\|_2^2 - 2\alpha(b - A\widetilde{x}, Av) + R[\widetilde{x}].$$

  根据假设条件，$Q_v(\alpha) \geq R[\widetilde{x}]$，对任何$\alpha \in \mathbb{R}$成立. 由此可知$Q_v(\alpha)$的极小值点是$\alpha = 0$，根据二次函数性质可得：

  $$(b - A\widetilde{x}, Av) = 0, \quad \forall v \in K_m$$

  这恰好就是Galerkin原理，证明完毕.

【定理】在$\mathbb{R}^m$中极小化$\|r_0 - Az_m\|$等价于在K_m中极小化$\left\| \|r_0\| e_1 - \widetilde{H}_m y_m \right\|$，其中$\widetilde{H}_m = \begin{pmatrix} H_m \\ h_{m+1,m} e_m^T \end{pmatrix}$

【证明】对于K_m，根据Arnoldi过程可知其标准正交基$(v_i)_{i=1}^m$满足矩阵方程

$$AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T = V_{m+1} \widetilde{H}_m,$$

根据Galerkin原理，$Az_m = AV_m y_m = V_{m+1} \widetilde{H}_m y_m$，所以：

$$\|r_0 - Az_m\| = \left\| v_1 \|r_0\| - V_{m+1} \widetilde{H}_m y_m \right\| = \left\| V_{m+1} (\|r_0\| e_1 - \widetilde{H}_m y_m) \right\| = \left\| \|r_0\| e_1 - \widetilde{H}_m y_m \right\|.$$

其中，最后一个等号是因为V_{m+1}是列正交矩阵，因而是等距矩阵.

数值线性代数：特征值问题

- 特征值的估计：盖氏圆盘定理

  A是$n\times n$复方阵，其盖氏圆盘为：

  $$D_i=\{z\in\mathbb{C}:|z-a_{ii}|<\sum_{j\neq i}|a_{ij}|\},\quad D_i^*=\{z\in\mathbb{C}:|z-a_{ii}|<\sum_{j\neq i}|a_{ji}|\}$$

  特征值的估计：

  - 每个特征值必然在某个盖氏圆盘中
  - 如果m个盖氏圆盘组成一个连通集S，且S和其他$n-m$个圆盘互不相交，则S中恰好有A的m个特征值

- 特征值的估计：Rayleigh商

  变分法：min-max原理

  A hermite，有n个实特征值$\lambda_1\geq\cdots\geq\lambda_n$，$n$个标准正交的特征向量$x_1,\cdots,x_n$，则有：

  $$\lambda_1=\max_{x\neq 0}\frac{(Ax,x)}{(x,x)},\quad \lambda_n=\min_{x\neq 0}\frac{(Ax,x)}{(x,x)}$$

  $$\lambda_i=\min_{x\in\mathrm{Span}(x_1,\cdots,x_i)}\frac{(Ax,x)}{(x,x)}=\max_{\dim W=i}\min_{x\in W}\frac{(Ax,x)}{(x,x)}.$$

  $$\lambda_i=\max_{x\in\mathrm{Span}(x_i,\cdots,x_n)}\frac{(Ax,x)}{(x,x)}=\min_{\dim W=n+1-i}\max_{x\in W}\frac{(Ax,x)}{(x,x)}.$$

  【证明】对于最后一条，我们只需要取W的o.n.基(z_j)，并取其中的一个向量$x=\sum_{j=1}^{n+1-i}(x,z_j)z_j$，解方程组$(x,x_k)=0,k=i+1,\cdots,n$，也就是：

  $$\sum_{j=1}^{n+1-i}(x,z_j)(z_j,x_k)=0,\quad \text{for } k=i+1,\cdots,n$$

  注意这一共有$n-i$个方程，但是有$n+1-i$个系数，因此必然存在一组$\{(x,z_j)\}$使得$(x,x_k)=0$对$k=i+1,\cdots,n$成立，也就是此时$x\perp\mathrm{Span}(x_{i+1},\cdots,x_n)$，所以此时$x=\sum_{k=1}^{n}(x,x_k)x_k=\sum_{k=1}^{i}(x,x_k)x_k$，于是：

  $$(Ax,x)=\sum_{k=1}^{i}\lambda_k|(x,x_k)|^2\geq\lambda_i(x,x)\Rightarrow\frac{(Ax,x)}{(x,x)}\geq\lambda_i$$

  另一方面，取$W=\mathrm{Span}(x_i,\cdots,x_n)$可得$\max_{x\in W}\frac{(Ax,x)}{(x,x)}=\lambda_i$，这就证明了结论.

- 幂法、反幂法

  - 幂法：求最大特征值

    取$v_0\neq 0$，$u_0=v_0$，$u_{n+1}=Au_n/m_n$，其中m_n是Au_n的最大模元素（保证$\|u_n\|_\infty=1$一直成立，防止浮点运算溢出）

    判断$|m_k-m_{k-1}|<\varepsilon$决定是否停止迭代，此时$x^{(1)}\approx u_k$，$\lambda_1\approx m_k$

  - 反幂法：求最小特征值

    取$v_0\neq 0$，$u_0=v_0$；求解$Av_{k+1}=u_k$得到v_{k+1}，然后$u_{k+1}=v_{k+1}/m_k$，其中m_k是v_{k+1}最大模元素

  - 借助Rayleigh商加速的幂法：**求Hermite矩阵最大特征值**

    和幂法流程相同，不过每一次判断$|R_k-R_{k-1}|<\varepsilon$决定是否停止迭代，其中$R_k=\frac{(Ax_k,x_k)}{(x_k,x_k)}$

  - 借助Rayleigh商加速的反幂法：如果已经有了μ是λ_1的好的近似，则：

    $\mu_k=\frac{(Ax_k,x_k)}{(x_k,x_k)}$，求解$(A-\mu_k I)y_{k+1}=x_k$得到$y_{k+1}$，归一化得到$x_{k+1}$

    可以验证, **借助Rayleigh商的反幂法**至少二次收敛. 如果 A 为 Hermite 阵可达三阶收敛.

- Jacobi法

  经典Jacobi法：每一次迭代时扫描出最大非对角元素$|a_{kl}^{(m)}|=\max_{i\neq j}|a_{ij}^{(m)}|$

  依照以下规则确定角度θ：

  $$\tan 2\theta=\frac{2a_{kl}}{a_{kk}-a_{ll}}\quad(\text{如果}a_{kk}\neq a_{ll}),\quad \theta=\frac{\pi}{4}\quad(\text{如果}a_{kk}=a_{ll})$$

  然后做变换$A^{(m+1)}=J(k,l;\theta)A^{(m)}J(k,l;\theta)^T$，其中$J(k,l;\theta)$是Givens矩阵，其形状为：

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & & & \\ & & & c & & & & s & & & \\ & & & & 1 & & & & & & \\ & & & & & \ddots & & & & & \\ & & & & & & 1 & & & & \\ & & & -s & & & & c & & & \\ & & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

其中$c=\cos\theta$，$s=\sin\theta$

Jacobi 过关法：扫描时选定一个阈值$\delta_1=\sqrt{N(A)}/n$，其中$N(A)$指的是A最大非对角元的模，只要遇到$|a_{kl}|>\delta_m$就构造$J(k,l;\theta)$，做相似变换JAJ^T，随后更新$\delta_{m+1}=\delta_m/n$，继续迭代

【例题】证明实矩阵$A=\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} \\ 0 & a_{22} & 0 \\ a_{13} & 0 & a_{33} \end{pmatrix}$（其中$a_{13}\neq 0$）经过一次Givens变换就可以求出所有特征值.

【证明】显然我们需要做的Givens变换为$J(1,3;\theta)$，计算得：

$$J(1,3;\pi/4)AJ(1,3;\pi/4)^T=\begin{pmatrix} c & & s \\ & & \\ -s & & c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} \\ 0 & a_{22} & 0 \\ a_{13} & 0 & a_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c & & -s \\ & & \\ s & & c \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} * & 0 & D_1 \\ 0 & * & 0 \\ D_2 & 0 & * \end{pmatrix}.$$

其中$D_1=D_2=(c^2-s^2)a_{13}+(a_{33}-a_{11})cs$

如果$a_{33}=a_{11}$，选择$\theta=\pi/4$即可得$D_1=D_2=0$，于是变换后变为对角矩阵

如果$a_{33}\neq a_{11}$，选择θ使得$\tan 2\theta=\frac{2a_{13}}{a_{11}-a_{33}}$，此时：

$$(c^2-s^2)a_{13}+(a_{33}-a_{11})cs=\cos 2\theta a_{13}+\frac{1}{2}(a_{33}-a_{11})\sin 2\theta=(a_{11}-a_{33})(\cos 2\theta\cdot\frac{1}{2}\tan 2\theta-\sin 2\theta)=0.$$

变换后为对角矩阵

- QR法

  【命题】如果A是上Hessenberg矩阵，则此性质在 QR 算法中保持不变, 即所有 A_k 均为上 Hessenberg 阵.

  【证明】我们逐步说明：

  - 若$A=QR$，则$Q=AR^{-1}$，其中R^{-1}也是上三角矩阵，注意到，对于$1\le j\le i-2$：

    $$q_{ij}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}r_{kj}=\sum_{k=1}^{j}a_{ik}r_{kj}=0,$$

    这里r_{ij}指的是R^{-1}的i,j元，第二个等号是因为当$k>j$时$r_{kj}=0$，第三个等号则是因为当$k\le i-2$时$a_{ik}=0$

    所以，Q也是上Hessenberg矩阵

  - 设$B=RQ$，则对$1\le j\le i-2$有：

    $$b_{ij}=\sum_{k=1}^{n}r_{ik}q_{kj}=\sum_{k=i}^{n}r_{ik}q_{kj}=0.$$

    所以B也是上Hessenberg矩阵