3.2.4　超松弛迭代法（SOR）

——迭代法的加速

考虑解线性方程组的Gauss－Seidel迭代法

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}}b_i$$

$$= \frac{1}{a_{ii}}b_i - \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}$$

$$= \frac{1}{a_{ii}}b_i - \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + x_i^{(k)}$$

$$= x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)$$

令 $r_i^{(k)} = x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}$

$$= \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)})$$

$r_i^{(k)}$为第$k+1$次迭代时x_i的改变量

因此 $x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + r_i^{(k)}$

在改变量$r_i^{(k)}$前加一个因子$\omega,(0<\omega<2)$,得

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega r_i^{(k)}$$

$$= x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)})$$

在上式中合并$x_i^{(k)}$,得

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)})$$

$$i = 1,2,\cdots n \quad , \quad k = 0,1,2,\cdots$$

上式称为逐次超松弛法(SOR迭代法)，ω称为松弛因子

下面推导SOR迭代法的矩阵形式:

由G－S迭代法的矩阵形式

$$x^{(k+1)} = B_{G-S} x^{(k)} + f_{G-S}$$

$$= (D-L)^{-1} U x^{(k)} + (D-L)^{-1} b$$

得 $$(D-L)x^{(k+1)}=Ux^{(k)}+b$$

$$Dx^{(k+1)}=Lx^{(k+1)}+Ux^{(k)}+b$$

故

$$x^{(k+1)}=D^{-1}Lx^{(k+1)}+D^{-1}Ux^{(k)}+D^{-1}b$$

$$=x^{(k)}-x^{(k)}+D^{-1}Lx^{(k+1)}+D^{-1}Ux^{(k)}+D^{-1}b$$

记 $$r^{(k)}=x^{(k+1)}-x^{(k)}$$

(第$k+1$次迭代时x的改变量)

$$=-x^{(k)}+D^{-1}Lx^{(k+1)}+D^{-1}Ux^{(k)}+D^{-1}b$$

则SOR迭代即为

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega r^{(k)} \quad \text{在} r^{(k)} \text{前加上因子} \omega$$

$$= (1-\omega)x^{(k)} + \omega(D^{-1}Lx^{(k+1)} + D^{-1}Ux^{(k)} + D^{-1}b)$$

两边同时左乘D，可得

$$Dx^{(k+1)} = (1-\omega)Dx^{(k)} + \omega(Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)} + b)$$

$$(D-\omega L)x^{(k+1)} = ((1-\omega)D + \omega U)x^{(k)} + \omega b$$

即

$$x^{(k+1)} = (D-\omega L)^{-1}((1-\omega)D + \omega U)x^{(k)} + \omega(D-\omega L)^{-1}b$$

令 $$B_\omega=(D-\omega L)^{-1}((1-\omega)D+\omega U)$$

$$f_\omega=\omega(D-\omega L)^{-1}b$$

$$x^{(k+1)}=B_\omega x^{(k)}+f_\omega$$

上式为逐次超松弛法(SOR迭代法)的矩阵形式.

B_ω为SOR法的迭代矩阵

当ω＝1时，SOR法化为

$$x^{(k+1)}=(D-L)^{-1}Ux^{(k)}+(D-L)^{-1}b \qquad \text{G—S迭代法}$$

故G—S法为SOR法的特例, SOR法为G—S法的加速.

例1. 用G－S法和SOR法求下列方程组的解:

(取$\omega = 1.45$)

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & -1 \\ -2 & 4 & -2 \\ -1 & -2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

（要求精度 $\varepsilon = 10^{-6}$）

解: (1) G－S迭代法

$$B_{G-S} = (D-L)^{-1}U = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ -2 & 4 & 0 \\ -1 & -2 & 3 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0.5 & 0.25 \\ 0 & 0.25 & 0.625 \\ 0 & 1/3 & 0.5 \end{pmatrix}$$

$$f_{G-S} = (D-L)^{-1}b = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ -2 & 4 & 0 \\ -1 & -2 & 3 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -0.5 \\ 2/3 \end{pmatrix}$$

取初值$x^{(0)} = (1,1,1)^T$

x_1	x_2	x_3
1	1	1
0.7500000	0.3750000	1.5000000
0.5625000	0.5312500	1.5416667
0.6510417	0.5963542	1.6145833
0.7018229	0.6582031	1.6727431
……	……	……
0.9999933	0.9999923	1.9999926
0.9999943	0.9999935	1.9999937
0.9999952	0.9999944	1.9999946

$k =$ 71

满足精度的解

$x=$

0.999995

0.999994

1.999995

迭代次数为71次

(2) SOR迭代法

取$\omega = 1.45$

$$x^{(k+1)} = (D-\omega L)^{-1}((1-\omega)D+\omega U)x^{(k)} + \omega(D-\omega L)^{-1}b$$

x_1	x_2	x_3
1	1	1
0.6375000	0.0121875	1.3199063
0.2004270	0.3717572	1.3122805
0.6550335	0.5340119	1.6922848
0.7058468	0.7733401	1.7771932
……	……	……
0.9999990	0.9999976	1.9999991
0.9999984	0.9999993	1.9999989
0.9999998	0.9999994	1.9999998
0.9999996	0.9999998	1.9999997

$k = 24$

满足精度的解

$x=$
1.000000
1.000000
2.000000

迭代次数为24次

注： 选取适当的ω，SOR法的收敛速度比G–S法要快得多.

但是，松弛因子的选取是很困难的，一般采用**试算**进行.

SOR迭代法收敛条件的判定：

定理1 SOR收敛的充要条件是$\rho(B\omega)<1$.

定理2 （SOR收敛的必要条件）设解线性方程组$Ax=b$的SOR迭代法收敛，则 $0<\omega<2$.

定理2说明：解$Ax=b$的SOR迭代法只有在（0,2）内取松弛因子ω，才可能收敛.

定理3 已知线性方程组$Ax=b$，如果

1）A为对称正定；

2）$0<\omega<2$.

则求解$Ax=b$的SOR迭代法收敛.

定理4 已知线性方程组$Ax=b$，如果

1）A为严格对角占优矩阵；

2）$0<\omega\leq 1$.

则解$Ax=b$的SOR迭代法收敛.

3.2.5 分块迭代法

设 $A\in R^{n\times n}$，$x\in R^n$， $b\in R^n$，

将方程组$Ax=b$中系数矩阵A、右端向量b、未知向量x分块，得

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1r} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2r} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{r1} & A_{r2} & \cdots & A_{rr} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_r \end{bmatrix}$$

其中，$A_{ii}\in R^{ni\times ni}$， $A_{ij}\in R^{ni\times nj}$， $x_i\in R^{ni}$，$b_i\in R^{ni}$

将A分解，$A=D_B-L_B-U_B$，其中

$$D_B=\begin{bmatrix} A_{11} & & & \\ & A_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_{rr} \end{bmatrix} \qquad L_B=\begin{bmatrix} 0 & & & \\ -A_{21} & 0 & & \\ & & \ddots & \\ -A_{r1} & -A_{r2} & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

$$U_B=\begin{bmatrix} 0 & -A_{12} & \cdots & -A_{1r} \\ & 0 & \cdots & -A_{2r} \\ & & \ddots & \cdots \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

(1) 块Jacobi迭代法（BJ）

$$D_B x^{(k+1)} = (L_B + U_B)x^{(k)} + b$$

由分块矩阵乘法，得到块Jacobi迭代法的具体形式：

$$A_{ii} x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j \neq i} A_{ij} x_j^{(k)} \qquad i=1,2,\cdots, r$$

(2)块Gauss-Seidel迭代法

$$D_B x^{(k+1)} = L_B x^{(k+1)} + U_B x^{(k)} + b$$

块Gauss-Seidel迭代法的具体形式:

$$A_{ii} x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{r} A_{ij} x_j^{(k)}$$

$i=1,2,\cdots, r$

(3) 块SOR迭代法（BSOR）

$$x^{(k+1)} = B_\omega x^{(k)} + f$$

其中 $B_\omega = (D_B - \omega L_B)^{-1}((1-\omega)D_B + \omega U_B)$

$$f_\omega = \omega(D_B - \omega L_B)^{-1} b$$

块SOR迭代法的具体形式

$$A_{ii} x_i^{(k+1)} = A_{ii} x_i^{(k)} + \omega\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{r} A_{ij} x_j^{(k)}\right)$$

i=1,2,⋯, r，ω为松弛因子.

3.2.6　极小化方法

- 与线性方程组等价的变分问题
- 最速下降法
- 共轭梯度法(CG)
- 预条件共轭梯度法(PCG)

与线性方程组等价的变分问题:

设$x, y \in R^n$, 记 $(x, y) = x^T y$

- $(x, y) = (y, x)$;
- $(tx, y) = t(x, y)$;
- $(x+y, z) = (x, z) + (y, z)$;
- $(x, x) \geq 0$, 且$(x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$;

设A是n阶对称正定阵

- $(Ax, y) = (x, Ay)$;
- $(Ax, x) \geq 0$, 且$(Ax, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$

设A是n阶对称正定矩阵，求解的线性方程组为

$$Ax = b \qquad (1)$$

其中$A=(a_{ij})\in R^{n\times n}, x=(x_1,x_2,...,x_n)^T, b=(b_1,b_2,...,b_n)^T$

对应的二次函数φ ： $R^{n\times n}\to R$ ，称为模函数，定义为

$$\varphi(x)=\frac{1}{2}(Ax,x)-(b,x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_i x_j-\sum_{i=1}^{n}b_i x_i \qquad (2)$$

例 $A=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 6\end{bmatrix}$, $b=\begin{bmatrix}4\\ 10\end{bmatrix}$

$$\varphi(x)=\frac{1}{2}(x_1^2+6x_2^2+4x_1x_2)-(4x_1+10x_2)$$

模函数有如下性质：
$$\varphi(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_i x_j-\sum_{i=1}^{n}b_i x_i$$

（1）对一切$x\in R^n$，有$\nabla\varphi(x)=\mathrm{grad}\,\varphi(x)=Ax-b=-r$ (3)

证：
$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j-b_i=-r_i,\qquad i=1,2,\ldots,n$$

$$grad\,\varphi(x)=\begin{bmatrix}\frac{\partial\varphi}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial\varphi}{\partial x_n}\end{bmatrix}^T=Ax-b=-r$$

例
$$A=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 6\end{bmatrix},\qquad b=\begin{bmatrix}4\\ 10\end{bmatrix}$$

$$\varphi(x)=\frac{1}{2}(x_1^2+6x_2^2+4x_1x_2)-(4x_1+10x_2)$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_1}=x_1+2x_2-4=-r_1,\qquad \frac{\partial\varphi}{\partial x_2}=2x_1+6x_2-10=-r_2$$

（2）对一切$x, y \in R^n, \alpha \in R$

$$\varphi(x+\alpha y)=\frac{1}{2}(A(x+\alpha y), x+\alpha y)-(b, x+\alpha y)$$

$$=\frac{1}{2}(Ax, x)-(b, x)+\alpha(Ax, y)-\alpha(b, y)+\frac{\alpha^2}{2}(Ay, y)$$

$$=\varphi(x)+\alpha(Ax-b, y)+\frac{\alpha^2}{2}(Ay, y) \qquad (4)$$

$$\boxed{\varphi(x)=\frac{1}{2}(Ax, x)-(b, x)}$$

$$\varphi(x^*)=\frac{1}{2}(Ax^*,x^*)-(b,x^*)$$

（3）设x^*为$Ax=b$的解，则

$$\varphi(x^*)=-\frac{1}{2}(b,A^{-1}b)=-\frac{1}{2}(Ax^*,x^*)$$

对一切$x\in R^n$，有

$$\varphi(x)-\varphi(x^*)=\frac{1}{2}(Ax,x)-(b,x)+\frac{1}{2}(Ax^*,x^*)$$

$$=\frac{1}{2}(Ax,x)-(Ax^*,x)+\frac{1}{2}(Ax^*,x^*)$$

$$=\frac{1}{2}(A(x-x^*),x-x^*) \tag{5}$$

定理1 设A为n阶实对称正定矩阵, 则x^*为线性方程组$Ax=b$的解的充要条件是：x^*是二次函数$\varphi(x)$的极小值点，即

$$x^*=A^{-1}b \Leftrightarrow \varphi(x^*)=\min_{x\in R^n}\varphi(x)$$

其中 $\varphi(x)=\dfrac{1}{2}(Ax, x)-(b, x)$

证明: 《必要性》 设x^*是$Ax=b$的解，即$x^*=A^{-1}b$

由性质（3），对任意$x\in R^n$，都有

$$\varphi(x)-\varphi(x^*)=\frac{1}{2}(A(x-x^*), x-x^*)$$

因为A正定，故 $\varphi(x)-\varphi(x^*)\geq 0$

$\varphi(x)\geq\varphi(x^*)$ 故x^*是$\varphi(x)$的极小值点.

《充分性》　设x^*是$\varphi(x)$的极小值点，则由性质（1）

$$\boxed{\nabla\varphi(x)=\mathrm{grad}\,\varphi(x)=Ax-b}$$

可得　$$\mathrm{grad}\,\varphi(x)\Big|_{x=x^*}=Ax^*-b=0,$$

故 x^*为线性方程组$Ax=b$的解.

求二次函数$\varphi(x)$极小值点的一般方法是：

构造一个向量序列$\left\{x^{(k)}\right\}$，使$\varphi(x^{(k)})\to\min\varphi(x)$

可以采取以下方法：

(1) 任取一个初始向量$x^{(0)}$,

（2）构造迭代格式

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k p^{(k)},\qquad (k=0,1,\ldots)$$

其中$p^{(k)}$是搜索方向，α_k是搜索步长,

(3) 选择$p^{(k)}$和α_k使得

$$\varphi(x^{(k+1)})=\varphi(x^{(k)}+\alpha_k p^{(k)})<\varphi(x^{(k)})$$

则当$k\to\infty$时，有$\varphi(x^{(k)})\to\varphi(x^{*})=\min\limits_{x\in R^n}\varphi(x)$

(4) 给出误差限ε，直到

$$\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\|<\varepsilon\text{或}\left\|r^{(k)}\right\|=\left\|b-Ax^{(k)}\right\|<\varepsilon$$

迭代终止.

对迭代格式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \qquad (k = 0,1,\ldots)$$

关键是要确定搜索方向$p^{(k)}$和搜索步长α_k.

（1）确定搜索方向$p^{(k)}$

最速下降法：$p^{(k)}$取为模函数$\varphi(x)$减少最快的方向，

即:$\varphi(x)$负梯度方向$-\mathrm{grad}(\varphi(x))$.

共轭梯度法：取A-共轭方向$p^{(k)}$.

（2）确定搜索步长α_k

确定α_k使得从k步到k+1步是最优的，即：

$$\varphi(x^{(k+1)}) = \varphi(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}) = \min_{\alpha} \varphi(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})$$

这称为沿$p^{(k)}$方向的一维极小搜索. $\varphi(x^{(k+1)})$是局部极小.

对确定的搜索方向$p^{(k)}$，构造一个关于α 的函数

$$F(\alpha)=\varphi(x^{(k+1)})=\varphi(x^{(k)}+\alpha p^{(k)})$$

$$=\frac{1}{2}(A(x^{(k)}+\alpha p^{(k)}),x^{(k)}+\alpha p^{(k)})-(b,x^{(k)}+\alpha p^{(k)})$$

$$=\frac{1}{2}(Ax^{(k)},x^{(k)})-(b,x^{(k)})+\alpha(Ax^{(k)},p^{(k)})-\alpha(b,p^{(k)})$$

$$+\frac{\alpha^2}{2}(Ap^{(k)},p^{(k)})$$

$$=\varphi(x^{(k)})+\alpha(Ax^{(k)}-b,p^{(k)})+\frac{\alpha^2}{2}(Ap^{(k)},p^{(k)})$$

$$=\varphi(x^{(k)})-\alpha(r^{(k)},p^{(k)})+\frac{\alpha^2}{2}(Ap^{(k)},p^{(k)})$$

$$F'(\alpha)=-(r^{(k)},p^{(k)})+\alpha(Ap^{(k)},p^{(k)})$$

$$F'(\alpha) = -(r^{(k)}, p^{(k)}) + \alpha(Ap^{(k)}, p^{(k)})$$

令$F'(\alpha) = 0$,即$:-(r^{(k)}, p^{(k)}) + \alpha(Ap^{(k)}, p^{(k)}) = 0$

得 $$\alpha = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

$$\because F''(\alpha) = (Ap^{(k)}, p^{(k)}) > 0, \qquad (A\text{正定})$$

取$\alpha_k = \dfrac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$, α_k是$\varphi(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})$下降的极小值点,

即α_k是$k \to k+1$步的最优步长.

下面介绍几种常用的极小化方法的算法.