$$b=\sum_{i=1}^{n}\beta_i U_i \tag{7-4}$$

将（7-2）式和（7-4）式分别带入（7-1）式，并注意到矩阵 U 、V 的正交性可得到方程（7-1）式的解：

$$x=\sum_{i=1}^{n}\frac{\beta_i}{\sigma_i}V_i \tag{7-5}$$

为了计算稳定，可以将表示解的级数（7-5）式中对应较小的奇异值去掉，即选择一个正数 $k(k<n)$，取 $\sum_{i=1}^{k}\frac{\beta_i}{\sigma_i}V_i$ 作为问题（7-1）式的解。

奇异值分解法的具体实现过程及其误差分析可参见刘伊克（1988）、刘家琦（1993）以及杨文采（1997）等人文章。

第二节 最小平方 QR 分解法（LSQR）

LSQR 方法是 Paige 和 Saunders 于 1982 年提出的一种特别适合求解系数矩阵为大型、稀疏矩阵线性方程组的方法。LSQR 方法求解的思路是首先把任意系数矩阵方程化为系数矩阵为方阵的方程，然后利用 Lanczos 方法，求解方程的最小二乘解。由于在求解过程中用到 QR 因子分解法，因此这种方法叫做 LSQR（Least Square QR-factorization）方法。在参阅文献（刘伊克，1988；刘家琦，1993）的基础上，本文对 LSQR 算法进行了详细的推导，给出了无阻尼和有阻尼情况下的 LSQR 算法。

一、Lanczos 方法

考虑方程

$$Bx=b \tag{7-6}$$

其中，B 为 $n\times n$ 实数对称方阵，x 和 b 为 n 维列向量，x 为待求未知量。求解方程（7-6）的 Lanczos 方法是一种子空间投影法。设 v_1，v_2，…，v_m 为 n 维空间中 m 个无关向量。令 $V_m=[v_1,v_2,\dots,v_m]$ 为 $n\times m$ 矩阵，$K_m=\text{span}\{v_1,v_2,\dots,v_m\}$ 为 v_1，v_2，…，v_m 张成的子空间。投影法的基本思想是寻找（7-6）式的近似解 x_m，使得：

$$\begin{cases} x_m \in K_m \\ (Bx_m - b) \perp v_i, \quad i = 1, 2, \ldots, m \end{cases} \tag{7-7}$$

令 $x_m = V_m y_m$，其中 y_m 为 $m \times 1$ 的实向量，则（7-7）式等价于

$$(V_m^T B V_m) y_m = V_m^T b \tag{7-8}$$

假设（7-8）式有唯一解，则通过解（7-8）式可得 y_m，从而得 x_m。如何选择 v_1，v_2，…，v_m 使（7-8）式中的矩阵 $V_m^T B V_m$ 具有较简单的形式，使求解（7-8）式在计算机上容易实现。下面给出构造向量 v_1，v_2，…，v_m 的 Lanczos 方法，使得矩阵 $V_m^T B V_m$ 具有三对角形式。

$$\begin{cases} v_1 = b / \beta_1, \quad \beta_1 = \|b\|, \quad v_0 = 0 \\ \text{对} i = 1, 2, \ldots \\ w_i = B v_i - \beta_i v_{i-1} \\ \alpha_i = v_i^T w_i \\ v_{i+1} = (w_i - \alpha_i v_i) / \beta_{i+1} \\ \text{这里} \beta_{i+1} \text{使} \|v_{i+1}\|, \text{如不存在这样的} \beta_{i+1} \text{则停止} \end{cases} \tag{7-9}$$

按（7-9）式构造的 Lanczos 向量 v_1，v_2，…，v_m 是 m 个标准正交向量，记

$$T_m = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_m \\ & & & \beta_m & \alpha_m \end{bmatrix}$$

则（7-9）式等价于：

$$BV_m = V_m T_m + \beta_{m+1}(0, 0, \ldots, 0, v_{m+1}) \tag{7-10}$$

下面计算 $V_m^T B V_m$ 的形式：

$$\begin{aligned} V_m^T B V_m &= V_m^T \left[V_m T_m + \beta_{m+1}(0, 0, \ldots, 0, v_{m+1}) \right] \\ &= V_m^T V_m T_m + \beta_{m+1} V_m^T (0, 0, \ldots, 0, v_{m+1}) \end{aligned}$$

注意到$V_m^T V_m = I$和$v_{m+1} \perp K_m$，$V_m^T v_{m+1} = 0$，所以，$V_m^T B V_m = T_m$，从而（3）式化为：

$$T_m y_m = V_m^T b = \beta_1 (1,0,\ldots,0)^T \tag{7-11}$$

（7-11）式是容易求解的。这就是 Lanczos 方法。

二、系数矩阵的对角化

在 Lanczos 方法中，系数矩阵为对称方阵。当系数矩阵不为对称方阵时，就不能直接应用该方法，不过，我们可以将方程 $Ax = b$ 化成一系数矩阵为对称方阵的等价方程，然后再应用 Lanczos 方法。在这一节，我们先介绍系数矩阵的对角化问题。

设 $A \in R^{m \times n}$，令

$$B = \begin{bmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \tag{7-12}$$

易知，$B = B^T$，满足 Lanczos 方法所需条件。

设W矢量为：

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & \ldots & w_{2k} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} u_1 & 0 & \ldots & u_k & 0 \\ 0 & v_1 & \ldots & 0 & v_k \end{bmatrix} \tag{7-13}$$

且 $W^T W = I$。

矢量T为：

$$T = \begin{bmatrix} 0 & \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \alpha_1 & 0 & \beta_2 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & \alpha_2 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \alpha_k & 0 \end{bmatrix} \tag{7-14}$$

T 是三对角矩阵。

假设：

$$BW = WT \tag{7-15}$$

$$BW=\begin{bmatrix} 0 & Av_1 & \dots & 0 & Av_k \\ A^T u_1 & 0 & \dots & A^T u_k & 0 \end{bmatrix} \tag{7-16}$$

$$WT=\begin{bmatrix} 0 & \alpha_1 u_1+\beta_2 u_2 & \dots & 0 & \alpha_i u_i+\beta_{i+1}u_{i+1} & \dots & 0 & \alpha_k u_k \\ \alpha_1 v_1 & 0 & \dots & \alpha_i v_i+\beta_i v_{i-1} & 0 & \dots & \alpha_k v_k+\beta_k v_{k-1} & 0 \end{bmatrix} \tag{7-17}$$

比较（7-16）式与（7-17）式的对应项，有：

$$\begin{cases} \alpha_1 v_1 = A^T u_1 \\ \beta_{i+1}u_{i+1} = Av_i - \alpha_i u_i \qquad i=1,2,\dots \\ \alpha_{i+1}v_{i+1} = A^T u_{i+1} - \beta_{i+1}v_i \end{cases} \tag{7-18}$$

令初始矢量：

$$u_1=\frac{b}{\beta_1}$$

其中：$\alpha_i>0$，$\beta_i>0$，且 $\|u_i\|=\|v_i\|=1$。

设：

$$U_k=\begin{bmatrix} u_1 & \dots & u_k \end{bmatrix}$$

$$V_k=\begin{bmatrix} v_1 & \dots & v_k \end{bmatrix}$$

由（7-18）式可知U_k、V_k为正交矩阵，即：

$$U_k^T U_k = V_k^T V_k = I \tag{7-19}$$

则（7-18）式可以写成矩阵形式：

$$U_{k+1}(\beta_1 e_1)=b \tag{7-20}$$

$$AV_k = U_{k+1}B_k \tag{7-21}$$

$$A^T U_{k+1} = V_k B_k^T + \alpha_{k+1}v_{k+1}e_{k+1}^T \tag{7-22}$$

其中，

$$B_k=\begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \beta_3 & \alpha_3 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \alpha_k \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \beta_{k+1} \end{bmatrix}_{(k+1)\times k} \tag{7-23}$$

由（7-21），有

$$A=U_{k+1}B_kV_k^T \tag{7-24}$$

同理，可以把A化成上双对角矩阵形式。

令矩阵B：

$$B=\begin{bmatrix}0 & A^T\\ A & 0\end{bmatrix} \tag{7-25}$$

有$B=B^T$。

设矩阵W为：

$$W=\begin{bmatrix}v_1 & 0 & \dots & v_k & 0\\ 0 & p_1 & \dots & 0 & p_k\end{bmatrix} \tag{7-26}$$

三对角矩阵T为：

$$T=\begin{bmatrix}0 & \rho_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0\\ \rho_1 & 0 & \theta_2 & 0 & \dots & \dots & 0\\ 0 & \theta_2 & 0 & \rho_2 & 0 & \dots & 0\\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots\\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \rho_k & 0\end{bmatrix} \tag{7-27}$$

T、W满足 Lanczos 条件：

$$BW=WT$$

$$BW=\begin{bmatrix}0 & A^Tp_1 & \dots & 0 & A^Tp_k\\ Av_1 & 0 & \dots & Av_k & 0\end{bmatrix} \tag{7-28}$$

$$WT=\begin{bmatrix}0 & \rho_1v_1+\theta_2v_2 & \dots & 0 & \rho_iv_i+\theta_{i+1}v_{i+1} & \dots & 0 & \rho_kv_k\\ \rho_1p_1 & 0 & \dots & \rho_ip_i+\theta_ip_{i-1} & 0 & \dots & \rho_kp_k+\theta_kp_{k-1} & 0\end{bmatrix} \tag{7-29}$$

比较（7-28）式和（7-29）式，有：

$$\begin{cases}Av_1=\rho_1p_1\\ \theta_{i+1}v_{i+1}=A^Tp_i-\rho_iv_i\\ \rho_{i+1}p_{i+1}=Av_{i+1}-\theta_{i+1}p_i\end{cases}\qquad i=1,2,\dots \tag{7-30}$$

令（7-30）式中的v_1为：

$$v_1=\frac{A^Tb}{\theta_1} \tag{7-31}$$

并且，$\rho_i > 0$，$\theta_i > 0$，$\|p_i\| = \|v_i\| = 1$，则根据（2-19）式可以计算出 ρ_i、θ_i、p_i 和 v_i（$i = 1,2,\ldots$）。

令

$$P_k = [p_1 \quad p_2 \quad \ldots \quad p_k] \tag{7-32}$$

$$V_k = [v_1 \quad v_2 \quad \ldots \quad v_k] \tag{7-33}$$

$$R_k = \begin{bmatrix} \rho_1 & \theta_2 & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ 0 & \rho_2 & \theta_3 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & \rho_{k-1} & \theta_k \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & \rho_k \end{bmatrix} \tag{7-34}$$

易知，$P_k^T P_k = V_k^T V_k = I$。

上边的（7-30）式可改写为：

$$\begin{cases} V_k(\theta_1 e_1) = A^T b \\ A V_k = P_k R_k \\ A^T P_k = V_k R_k^T + \theta_{k+1} v_{k+1} e_k^T \end{cases} \tag{7-35}$$

由（7-35）式，有 $P_k^T A V_k = R_k$，即系数矩阵 A 可化为一上双对角阵。

从 B_k、R_k 的推导过程可知：

$$B_k^T B_k = R_k^T R_k \tag{7-36}$$

由（7-36）式，根据矩阵 QR 分解定理，则存在一正交矩阵 Q_k，使得

$$Q_k B_k = \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix} \tag{7-37}$$

三、无阻尼最小二乘问题

考虑线性方程

$$A_{m\times n} x_{n\times 1} = b_{m\times 1} \tag{7-38}$$

方程（7-38）的最小二乘问题是指求 x，使得

$$\|Ax-b\|_2=\min\{\|Av-b\|_2; v\in R^n\} \tag{7-39}$$

根据公式（7-20）、（7-21），可设

$$x_k=V_k y_k \tag{7-40}$$

$$r_k=b-Ax_k \tag{7-41}$$

由（7-40）式、（7-41）式，有

$$\begin{aligned} r_k &= b-Ax_k=U_{k+1}(\beta_1 e_1)-AV_k y_k \\ &= U_{k+1}(\beta_1 e_1)-U_{k+1}B_k y_k \\ &= U_{k+1}(\beta_1 e_1-B_k y_k) \end{aligned}$$

记

$$t_{k+1}=\beta_1 e_1-B_k y_k \tag{7-42}$$

则

$$r_k=U_{k+1}t_{k+1} \tag{7-43}$$

因为 $U_{k+1}^T U_{k+1}=I$，所以（7-42）式可写为

$$U_{k+1}^T r_k=t_{k+1} \tag{7-44}$$

从（7-44）式可以看出，希望 $\|r_k\|$ 取极小，则变为 $\|t_{k+1}\|$ 取极小，即：

$$\min\|\beta_1 e_1-B_k y_k\| \tag{7-45}$$

因为 B_k 是双对角阵，因此（7-45）式通过 QR 方法解 y_k 是很容易的。但是，如果对每个 k 都要求解（7-44），然后再由（7-45）产生 x_k 的话，在计算 x_{k+1} 时就不能充分利用 x_k 已经得到的信息，这势必带来一定的浪费。能否利用 x_k 已有信息来计算 x_{k+1} 呢？这是下面将要讨论的中心问题。

对（7-45）式中的 $[B_k \quad \beta_1 e_1]$ 作 QR 分解，B_k 变成上双对角阵 R_k，$\beta_1 e_1$ 变成 $k+1$ 维列向量。即：

$$Q_k[B_k \quad \beta_1 e_1] = \begin{bmatrix} R_k & j_k \\ 0 & \bar{\phi}_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_1 & \theta_2 & 0 & \ldots & 0 & \phi_1 \\ 0 & \rho_2 & \theta_3 & \ldots & 0 & \phi_2 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & \rho_{k-1} & \theta_k & \phi_{k-1} \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & \rho_k & \phi_k \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & \bar{\phi}_{k+1} \end{bmatrix}_{(k+1)\times(k+1)} \tag{7-46}$$

从（7-45）和（7-46）式得到

$$R_k y_k = j_k \tag{7-47}$$

对（7-42）式

$$t_{k+1} = \beta_1 e_1 - B_k y_k$$

两边左乘 Q_k，有

$$Q_k t_{k+1} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\phi}_{k+1} \end{bmatrix}$$

即

$$t_{k+1} = Q_k^T \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\phi}_{k+1} \end{bmatrix} \tag{7-48}$$

把 x_k 可表示成如下形式：

$$x_k = V_k y_k = D_k j_k \tag{7-49}$$

由（7-47）式，从而有，

$$R_k^T D_k^T = V_k^T \tag{7-50}$$

矩阵 D_k 写成分量形式

$$D_k = [d_1 \quad d_2 \quad \ldots \quad d_k] \tag{7-51}$$

由（7-50）式，d_k 可表示为

$$d_k = \frac{1}{\rho_k}(v_k - \theta_k d_{k-1}), \quad d_0 = 0 \tag{7-52}$$

（7-49）式用分量表示

$$x_k = D_k j_k = \begin{bmatrix} D_{k-1} & d_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_{k-1} \\ \phi_k \end{bmatrix}$$

$$= x_{k-1} + d_k \phi_k \tag{7-53}$$

卜面导出x_k的显示循环关系，由QR分解（7-46）式，用第k步平面旋转变换$Q_{k,k+1}$，对$\begin{bmatrix} B_k & \beta_1 e_1 \end{bmatrix}$进行变换，消去第$k$行对角线下元素$\beta_{k+1}$。

令

$$Q_{k,k+1} = \begin{bmatrix} c_k & s_k \\ s_k & -c_k \end{bmatrix}$$

设$k-1$步平面旋转后$\begin{bmatrix} B_k & \beta_1 e_1 \end{bmatrix}$的形式为

$$\begin{bmatrix} \bar{\rho}_k & 0 & \bar{\phi}_k \\ \beta_{k+1} & \alpha_{k+1} & 0 \end{bmatrix}$$

这样有

$$\begin{bmatrix} c_k & s_k \\ s_k & -c_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\rho}_k & 0 & \bar{\phi}_k \\ \beta_{k+1} & \alpha_{k+1} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_k & \theta_{k+1} & \phi_k \\ 0 & \bar{\rho}_{k+1} & \bar{\phi}_{k+1} \end{bmatrix} \tag{7-54}$$

其中，

$$\bar{\rho}_1 = \alpha_1, \quad \bar{\phi}_1 = \beta_1$$

由（7-54）式，有

$$c_k \bar{\rho}_k + s_k \beta_{k+1} = \rho_k \tag{7-55}$$

$$s_k = \frac{c_k \beta_{k+1}}{\bar{\rho}_k} \tag{5-56}$$

$$\phi_k = c_k \bar{\phi}_k \tag{5-57}$$

$$\theta_{k+1} = s_k \alpha_{k+1} \tag{7-58}$$

$$\bar{\rho}_{k+1} = -c_k \alpha_{k+1} \tag{7-59}$$

$$\bar{\phi}_{k+1} = s_k \bar{\phi}_k \tag{7-60}$$

联立（7-55）、（7-56）式，消去c_k，再由（7-58）式消去s_k，整理化简得

$$\bar{\rho}_k^2 + \beta_{k+1}^2 = \rho_k \frac{\alpha_{k+1}\beta_{k+1}}{\theta_{k+1}} \tag{7-61}$$

联立（7-55）、（7-56）式，消去s_k，整理化简得

$$c_k = \frac{\bar{\rho}_k \rho_k}{\bar{\rho}_k^2 + \beta_{k+1}^2} \tag{7-62}$$

根据（7-62）式

$$B_k^T B_k = R_k^T R_k$$

可得到α_i、β_i与ρ_i、θ_i的关系：

$$\alpha_1^2 + \beta_2^2 = \rho_1^2 \tag{7-63}$$

$$\alpha_1 \beta_1 = \theta_1 \tag{7-64}$$

$$\alpha_i^2 + \beta_{i+1}^2 = \rho_i^2 + \theta_i^2 \tag{7-65}$$

$$\alpha_i \beta_i = \rho_{i-1} \theta_i \tag{7-66}$$

由（7-66）式，（7-61）式化为

$$\rho_k^2 = \bar{\rho}_k^2 + \beta_{k+1}^2 \tag{7-67}$$

（7-62）式可变为

$$c_k = \frac{\bar{\rho}_k}{\rho_k} \tag{7-68}$$

将（7-68）式带入（7-56）式，得

$$s_k = \frac{\beta_{k+1}}{\rho_k} \tag{7-69}$$

现在，我们已能利用（7-53）式通过迭代方式求解 x_k 了，但求解过程较为纷乱，迭代格式还不太紧凑。为此，我们引进新的中间变量，寻求一种更紧凑的迭代格式。

设

$$w_k = v_k - \theta_k d_{k-1} \tag{7-70}$$

则

$$d_k = \frac{w_k}{\rho_k} \tag{7-71}$$

由（7-70）、（7-71）式，有

$$w_{i+1} = v_{i+1} - \frac{\theta_{i+1}}{\rho_i} w_i \tag{7-72}$$

其中

$$w_1 = v_1$$

因而（3-16）式可以写为

$$x_{i+1} = x_i + \frac{\phi_i}{\rho_i} w_i \tag{7-73}$$

我们把本节的 LSQR 算法作如下小结：

（1）初始条件

$\beta_1 u_1 = b$，$\alpha_1 v_1 = A^T u_1$，$w_1 = v_1$，$x_0 = 0$

$\bar{\phi}_1 = \beta_1$，$\bar{\rho}_1 = \alpha_1$

（2）对 $i = 1,2,3,\ldots$ 重复（3）—（6）

（3）对角化系数矩阵

（a）$\beta_{i+1} u_{i+1} = A v_i - \alpha_i u_i$

（b）$\alpha_{i+1} v_{i+1} = A^T u_{i+1} - \beta_{i+1} v_i$

（4）计算 QR 分解中间变量

(a) $\rho_i = \sqrt{\bar{\rho}_i^2 + \beta_{i+1}^2}$

(b) $c_i = \dfrac{\bar{\rho}_i}{\rho_i}$

(c) $s_i = \dfrac{\beta_{i+1}}{\rho_i}$

(d) $\theta_{i+1} = s_i \alpha_{i+1}$

(e) $\bar{\rho}_{i+1} = -c_i \alpha_{i+1}$

(f) $\phi_i = c_i \bar{\phi}_i$

(g) $\bar{\phi}_{i+1} = s_i \bar{\phi}_i$

（5）更新 x 、 w

(a) $x_{i+1} = x_i + \dfrac{\phi_i}{\rho_i} w_i$

(b) $w_{i+1} = v_{i+1} - \dfrac{\theta_{i+1}}{\rho_i} w_i$

（6）判断迭代条件

如果迭代结果满足要求，则终止迭代。

四、阻尼最小二乘问题

方程 $A_{m\times n} x_{n\times 1} = b_{m\times 1}$ 关于阻尼因子 λ 最小二乘问题是寻求 x，使得

$$\left\| \begin{bmatrix} A \\ \lambda I \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2 = \min\left\{ \left\| \begin{bmatrix} A \\ \lambda I \end{bmatrix} v - \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2, v \in R^n \right\} \tag{7-74}$$

阻尼最小二乘问题是无阻尼最小二乘问题的推广，因此我们会很自然地想到利用上节的方法来得到其相应的解。

（7-21）、（7-22）式用矩阵表示为：

$$\begin{bmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & B_k \\ B_k^T & 0 \end{bmatrix} \tag{7-75}$$

从上式可看出在矩阵$\begin{bmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix}$和矩阵$\begin{bmatrix} 0 & B_k \\ B_k^T & 0 \end{bmatrix}$的对角元上加上任何参量等式仍然成

立。我们加上阻尼因子λ，（7-75）式成为

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & -\lambda^2 I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & B_k \\ B_k^T & -\lambda^2 I \end{bmatrix} \tag{7-76}$$

因为$\begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix}$是正交矩阵，而正交变换不改变矩阵的对角元素，所以$U_{k+1}$、$V_k$、$P_k$、

R_k和B_k均与阻尼因子λ无关。

阻尼最小二乘问题解满足

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & -\lambda^2 I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \tag{7-77}$$

其中

$$r = b - Ax$$

与无阻尼方法相同，仍把求残差范数$\|r\|_2$极小变成求$\|t_{k+1}\|_2$极小。把（7-40）、（7-43）式写成矩阵形式

$$\begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{k+1} \\ y_k \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} r_k \\ x_k \end{bmatrix} \tag{7-78}$$

(7-76)式右乘$\begin{bmatrix} t_{k+1} \\ y_k \end{bmatrix}$，由（7-77）、（7-78）式，得

$$\begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & B_k \\ B_k^2 & -\lambda^2 I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{k+1} \\ y_k \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \tag{7-79}$$

上式左乘$\begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix}$，有

$$\begin{bmatrix} I & B_k \\ B_k^2 & -\lambda^2 I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{k+1} \\ y_k \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \beta_1 e_1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{7-80}$$

由上式可看出，求A最小二乘问题化成求B_k最小二乘问题。

通过上述讨论可以看出：有阻尼最小二乘问题与无阻尼最小二乘问题的区别只是在

QR 分解上。有阻尼的 QR 分解 Q_k 是由一系列的平面旋转矩阵 $P_{i,j}$ 组成的正交算子。平面旋转变换 $P_{i,j}$ 为

$$P_{i,j} = \begin{array}{c} \\ \\ \\ i \\ \\ j \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} & & i & & j & & \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & s & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & -s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 1 \end{bmatrix} \end{array} \tag{7-81}$$

其中，

$$c^2 + s^2 = 1 \tag{7-82}$$

$P_{i,j}$ 为一正交矩阵，它与单位矩阵只是在（i , i）、（i , j）、（j , i）、（j , j）位置元素不同，其它相同。利用矩阵 $P_{i,j}$ 可以使向量的指定元素为零。

若定义 Q_i 为

$$Q_0 = I$$

$$Q_i = P_{i,i+1} P_{i,k+1+i} Q_{i-1}, \qquad k \in N \tag{7-83}$$

则存在一正交矩阵 Q_k，使得

$$Q_k \begin{bmatrix} B_k & \beta_1 e_1 \\ \lambda I & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_k & j_k \\ 0 & \bar{\phi}_{k+1} \\ 0 & q_k \end{bmatrix} \tag{7-84}$$

其中，j_k 为一 k 维列向量，$\bar{\phi}_{k+1}$ 为一实数，q_k 亦为一 k 维列向量。设

$$j_k = [\phi_1, \ \ \phi_2, \ \ \cdots, \ \ \phi_k]^T \tag{7-85}$$

$$q_k = [\psi_1, \ \ \psi_2, \ \ \ldots, \ \ \psi_k] \tag{7-86}$$

把（7-84）式写成如下分量形式

$$
Q_k\begin{bmatrix} B_k & \beta_1 e_1 \\ \lambda I & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
\rho_1 & \theta_2 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \phi_1 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \rho_{k-1} & \theta_k & \phi_{k-1} \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \rho_k & \phi_k \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & \bar{\phi}_{k+1} \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \psi_1 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \psi_{k-1} \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \psi_k
\end{bmatrix} \tag{7-87}
$$

设

$$
Q_{k-1}\begin{bmatrix} B_k & \beta_1 e_1 \\ \lambda I & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
\rho_1 & \theta_2 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \phi_1 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & & \rho_{k-1} & \theta_k & \phi_{k-1} \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \bar{\rho}_k & \bar{\phi}_k \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \beta_{k+1} & 0 \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \psi_1 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \psi_{k-1} \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \lambda & 0
\end{bmatrix} \tag{7-88}
$$

$$
P_{k,2k+1} = \begin{array}{c c}
 & \begin{array}{ccccccc} & & & k & & & 2k+1 \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ \\ \\ k \\ \\ \\ 2k+1 \end{array} & \begin{bmatrix}
1 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\
\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \ldots & 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\
0 & \ldots & 0 & c_k' & 0 & \ldots & s_k' \\
0 & \ldots & 0 & 0 & 1 & \ldots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & \ldots & 0 & -s_k' & 0 & \ldots & c_k'
\end{bmatrix}
\end{array} \tag{7-89}
$$

$$P_{k,k+1}=\begin{array}{c c} & \begin{array}{ccccccc} & & & k & k+1 & & 2k+1 \end{array} \\ \begin{array}{c} \\ \\ \\ k \\ k+1 \\ \\ 2k+1 \end{array} & \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & c_k & s_k & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -s_k & c_k & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \end{array} \tag{7-90}$$

使用旋转矩阵 $P_{k,2k+1}$，消去（7-88）式中第 k 列第 $2k+1$ 中的 λ，得到

$$P_{k,2k+1}Q_{k-1}\begin{bmatrix} B_k & \beta_1 e_1 \\ \lambda I & 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \rho_1 & \theta_2 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \phi_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \rho_{k-1} & \theta_k & \phi_{k-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \rho'_k & \phi'_k \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \beta_{k+1} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \psi_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \psi_{k-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \psi_k \end{bmatrix} \tag{7-91}$$

然后使用旋转矩阵 $P_{k,k+1}$ 消去（7-91）式中的 β_{k+1}，得到（7-87）式，即

$$P_{k,k+1}\,P_{k,2k+1}\,Q_{k-1}\begin{bmatrix} B_k & \beta_1 e_1 \\ \lambda I & 0 \end{bmatrix}=Q_k\begin{bmatrix} B_k & \beta_1 e_1 \\ \lambda I & 0 \end{bmatrix} \tag{7-92}$$

由（7-88）、（7-89）和（7-91）式，有

$$\rho'_k=\sqrt{\bar{\rho}_k^2+\lambda^2} \tag{7-93}$$

$$c'_k=\frac{\bar{\rho}_k}{\rho'_k} \tag{7-94}$$

$$s'_k=\frac{\lambda}{\rho'_k} \tag{7-95}$$

$$\phi'_k=c'_k\bar{\phi}_k \tag{7-96}$$

$$\psi_k = -s_k^{'}\bar{\phi}_k \tag{7-97}$$

其中，

$$\bar{\rho}_1 = \alpha_1 \tag{7-98}$$

$$\bar{\phi}_1 = \beta_1 \tag{7-99}$$

由（7-90）、（7-91）和（7-92）式，得

$$\rho_k = \sqrt{\rho_k^{'2} + \beta_{k+1}^2} \tag{7-100}$$

$$c_k = \frac{\rho_k^{'}}{\rho_k} \tag{7-101}$$

$$s_k = \frac{\beta_{k+1}}{\rho_k} \tag{7-102}$$

$$\phi_k = c_k \phi_k^{'} \tag{7-103}$$

$$\bar{\phi}_{k+1} = -s_k \phi_k^{'} \tag{7-104}$$

若进一步考虑，有

$$\theta_{k+1} = s_k \alpha_{k+1} \tag{7-103}$$

$$\bar{\rho}_{k+1} = c_k \alpha_{k+1} \tag{7-104}$$

与无阻尼的 LSQR 算法相比，带阻尼的 LSQR 算法只是在 QR 分解上略有不同。阻尼 LSQR 算法小结如下：

（1）设置初始值

$\beta_1 u_1 = b$， $\alpha_1 v_1 = A^T u_1$， $w_1 = v_1$， $x_0 = 0$

$\rho_1^{'} = \sqrt{\alpha_1^2 + \lambda^2}$， $\phi_1^{'} = \dfrac{\alpha_1\beta_1}{\rho_1^{'}}$

（2）对 $i = 1,2,3,\ldots$ 重复（3）—（6）

（3）对角化系数矩阵

（a） $\beta_{i+1}u_{i+1} = Av_i - \alpha_i u_i$

（b）$\alpha_{i+1}v_{i+1}=A^{T}u_{i+1}-\beta_{i+1}v_{i}$

（4）计算 QR 分解中间变量

（a）$\rho_{i}=\sqrt{\rho_{i}^{'2}+\beta_{i+1}^{2}}$

（b）$c_{i}=\dfrac{\rho_{i}^{'}}{\rho_{i}}$

（c）$s_{i}=\dfrac{\beta_{i+1}}{\rho_{i}}$

（d）$\theta_{i+1}=s_{i}\alpha_{i+1}$

(e) $\phi_{i}=c_{i}\phi_{i}^{'}$

（f）$\overline{\rho}_{i+1}=c_{i}\alpha_{i+1}$

（g）$\overline{\phi}_{i+1}=-s_{i}\phi_{i}^{'}$

（h）$\rho_{i+1}^{'}=\sqrt{\overline{\rho}_{i+1}^{2}+\lambda^{2}}$

（i）$c_{i+1}^{'}=\dfrac{\overline{\rho}_{i+1}}{\rho_{i+1}^{'}}$

（j）$s_{i+1}^{'}=\dfrac{\lambda}{\rho_{i+1}^{'}}$

（k）$\phi_{i+1}^{'}=c_{i+1}^{'}\overline{\phi}_{i+1}$

（5）更新 x、w

（a）$x_{i+1}=x_{i}+\dfrac{\phi_{i}}{\rho_{i}}w_{i}$

（b）$w_{i+1}=v_{i+1}-\dfrac{\theta_{i+1}}{\rho_{i}}w_{i}$

（6）判断迭代条件

如果迭代结果满足要求，则终止迭代。

五、LSQR 方法的矢量范数

1．$\|r\|$范数

$\|r\|$ 是残差范数。从（7-43）和（7-48）式，可得

$$r_k = U_{k+1} Q_k^T \bar{\phi}_{k+1} e_{k+1} \tag{7-105}$$

因为U_{k+1}、Q_k^T 是正交矩阵，所以有

$$\|r\| = |\bar{\phi}_{k+1}| \tag{7-106}$$

由（7-60）式，得

$$\|r\| = |s_1 s_2 \cdots s_k \beta_1| \tag{7-107}$$

2．$\|A^T r_k\|$范数

最小二乘问题的正规方程为：

$$A^T A x = A^T b \tag{7-108}$$

由（7-37）和（7-105）式，得

$$A^T r_k = \bar{\phi}_{k+1} V_k \begin{bmatrix} R_k^T & 0 \end{bmatrix} e_{k+1} + \bar{\phi}_{k+1} \alpha_{k+1} v_{k+1} e_{k+1}^T Q_k^T e_{k+1} \tag{7-109}$$

第一项因为有e_{k+1}，即单位矩阵第$k+1$列，所以区于零。第二项Q_k的$k+1$行对角元为$-c_k$，所以

$$A^T r_k = -\bar{\phi}_{k+1} \alpha_{k+1} c_k v_{k+1} \tag{7-110}$$

对（7-110）式取范数，有

$$\|A^T r_k\| = |\bar{\phi}_{k+1} \alpha_{k+1} c_k| \tag{7-111}$$

3．解范数$\|x_k\|$

把上对角矩阵R_k右乘正交矩阵$\bar{Q}_k^T$，设

$$\bar{L}_k = R_k \bar{Q}_k^T \tag{7-112}$$

其中，$\overline{L}_k$ 是一下双对角矩阵。

定义

$$\overline{L}_k \bar{z}_k = j_k \tag{7-113}$$

所以，

$$x_k = V_k \overline{Q}_k^T \bar{z}_k \tag{7-114}$$

对（7-114）式取范数

$$\|x_k\| = \|\bar{z}_k\| \tag{7-115}$$

当 n 较大时，这种计算方法节省计算量，因为 k 次迭代之后 $\bar{z}_k$ 不再改变。

4．F 范数 $\|A\|_F$

$$\|A\|_F = \sqrt{(\sum a_{i,j}^2)} \tag{7-116}$$

由（7-21）式，有

$$B_k^T B_k = V_k^T A^T A V_k \tag{7-117}$$

根据矩阵理论，由上式可得

$$\|B_k\| \le \|A\| \tag{7-118}$$

B_k 为一下双对角阵，由（7-23）式，得

$$\|B_k\|_F^2 = \|B_{k-1}\|_F^2 + \alpha_k^2 + \beta_{k+1}^2 \tag{7-119}$$

5．条件数 $cond(A)$

A 的条件数定义：

$$cond(A) = \|A\|\|A^+\| \tag{7-120}$$

因为 $B_k^T B_k = R_k^T R_k$，所以由（7-118）式，得

$$\|R_k^{-1}\| = \|B_k^+\| \le \|A^+\| \tag{7-121}$$

根据定义 $D_k = V_k R_k^{-1}$，得

$$1 \le \|B_k\|\|D_k\| \le \|A\|\|A^+\| = cond(A) \tag{7-122}$$

$\|D_k\|_F$ 有递推关系：

$$\|D_k\|_F^2 = \|D_{k-1}\|_F^2 + \|d_k\|_F^2 \tag{7-123}$$

六、停机准则

准则 1：对相容系统，满足

$$\|r_k\| \le BTOL\|b\| + ATOL\|A\|\|x\| \tag{7-124}$$

则停机。

其中，

$$ATOL = \frac{\|A - \overline{A}\|}{\|A\|}，\quad BTOL = \frac{\|b - \overline{b}\|}{\|b\|}$$

$\overline{A}$ 和 $\overline{b}$ 分别表示 A 、b 的真实值。

论证准则 1

设

$$r_k = b - Ax_k$$

$$\delta_k = BTOL\|b\| + ATOL\|A\|\|x_k\|$$

$$g_k = BTOL\|b\|\frac{r_k}{\delta_k}$$

$$h_k = ATOL\|A\|\|x_k\|\frac{r_k}{\delta_k}$$

则，

$$r_k = g_k + h_k$$

可以导出关系式：

$$(A + \frac{h_k x_k^T}{x_k^T x_k})x_k = b - g_k \tag{7-125}$$

由（7-125）式可以看出：即使 A 、b 都有扰动，x_k 也有严格的解，若满足准则 1，扰动

在允许的范围内。

准则2：对不相容系统，如果

$$\frac{\|A^T r_k\|}{\|A\|\|r_k\|} \le ATOL$$

则停机。

论证准则2

设

$$r_k = b - Ax_k$$

$$\bar{r}_k = b - (A + E_k)x_k$$

其中，

$$E_k = -\frac{r_k r_k^T A}{\|r_k\|^2}$$

则由最小二乘解的性质可知：

$$(A + E_k)^T \bar{r}_k = 0 \qquad (7\text{-}126)$$

由（7-126）式可知，在 A 有扰动时，x_k 和 r_k 分别有严格解和残差。若准则 2 满足，A 的扰动量可以忽略。

准则3：处理病态和奇异系统，如果

$$cond(A) > CONLIM$$

则停机。

$CONLIM$，根据不同病态程度，选择不同的值。假设机器精度为 ε，$CONLIM$ 可取为 $\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$。

第三节　大型稀疏方程的系数矩阵存储技术

本节介绍一种大型稀疏方程系数矩阵按行索引的一维存储技术（吴小平等，1999）。

设 A 为 $N \times N$ 阶矩阵，我们用两个一维数组 data_A 和 number_A 来描述矩阵 A。data_A 是一实型数组，number_A 是一整型数组。存储原则如下：

a．data_A 的前 N 个元素按顺序存储矩阵 A 的对角元素。