第9章　线性方程组的迭代解法

§9.1 迭代法的一般概念

设$A \in R_n^{n\times n}$, $b \in R^n$，考虑线性方程组$Ax = b$，将其变为同解方程组$x = Bx + f$，形成迭代格式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f, \quad k = 0, 1, \cdots \tag{1}$$

其中B 称为迭代矩阵，$x^{(0)}$ 是任给的初始向量。由于$x^{(k+1)}$ 是$x^{(k)}$ 的线性函数，(1) 称为线性迭代。

1. 定义：如果迭代公式(1) 产生的序列$\{x^{(k)}\}$ 满足

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*, \quad \forall x^{(0)} \in R^n,$$

则称迭代法(1) 是收敛的。

2. 定理：下面3 个命题是等价的：

(1) 迭代法$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ 收敛.

(2) $\rho(B) < 1$.

(3) 至少存在一个矩阵范数$\|\cdot\|$，使$\|B\| < 1$.

3. 定理：设x^* 是方程$x = Bx + f$ 的唯一解，$\|B\| < 1$，则由(1) 产生的向量序列$x^{(k)}$ 满足

$$\|x^{(k)} - x^*\| \le \frac{\|B\|}{1-\|B\|}\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|; \qquad (2)$$

$$\|x^{(k)} - x^*\| \le \frac{\|B\|^k}{1-\|B\|}(\|f\| + 2\|x^{(0)}\|)\|. \qquad (3)$$

式(3) 可用来估计达到指定精度需要的迭代次数，若要使$\|x^{(k)} - x^*\| \le \varepsilon$, 只要

$$\frac{\|B\|^k}{1-\|B\|}(\|f\| + 2\|x^{(0)}\|) \le \varepsilon,$$

即

$$k \ge \ln\left(\frac{\varepsilon(1-\|B\|)}{\|f\| + 2\|x^{(0)}\|}\right) / \ln\|B\|.$$

在线性迭代法中，我们用$R(B) = -\ln \rho(B)$ 表示迭代法的收敛速度。

现在来确定迭代次数k，使

$$[\rho(B)]^k < 10^{-\varepsilon},$$

取对数得

$$k \geq \frac{\varepsilon \ln 10}{-\ln \rho(B)}.$$

由此看出，当$R(B) = -\ln \rho(B)$ 越大，上式成立所需迭代次数越少，表明迭代次数与收敛速度成反比。

§9.2 J 迭代法和G-S 迭代法

迭代法的构造

如将A 分裂为

$$A = M - N \tag{4}$$

其中M 非奇异。则由$Ax = b$ 可得

$$x = M^{-1}Nx + M^{-1}b. \tag{5}$$

令

$$B = M^{-1}N = I - M^{-1}A,$$

$$f = M^{-1}\mathbf{b},$$

就可以得到$x = Bx + f$ 的形式。

Jacobi迭代法

考虑非奇异线性方程组$Ax=b$ $a_{ii}\neq 0$，把A 分裂为$A=D+L+U$，其中

$$D=\mathrm{diag}(a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn})$$

$$L=\begin{pmatrix} 0 & & & & \\ a_{21} & 0 & & & \\ a_{31} & a_{32} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix},U=\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & 0 & a_{n-1,n} \\ & & & & 0 \end{pmatrix}$$

对应于(4) 形式的一般分裂式,

令$M = D$, $N = -L - U$, 则(5) 等价于

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

由此构造迭代法

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = B_J\mathbf{x}^{(k)} + f, \quad k = 0, 1, \cdots, \tag{6}$$

其中向量f 和迭代矩阵B_J 为

$$\begin{aligned} f &= D^{-1}\mathbf{b}, \\ B_J &= -D^{-1}(L+U) = I - D^{-1}A. \end{aligned} \tag{7}$$

(6) 称为Jacobi 迭代法(简称J 法)。

若给定初始向量$x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)})^T$, Jacobi 迭代格式为

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

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

Gauss-Seidel 迭代法

如果令$M = D + L$, $N = -U$，对应于(4) 的分裂式有

$$\begin{aligned} f &= (D+L)^{-1}\mathbf{b}, \\ B_G &= -(D+L)^{-1}U = I - (D+L)^{-1}A, \end{aligned} \tag{8}$$

便得到Gauss—Seidel 迭代法（简称G-S 法）

$$x^{(k+1)} = B_G x^{(k)} + f, \quad k = 0, 1, \cdots . \tag{9}$$

若给定初始向量$x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)})^T$,

Gauss－Seidel 迭代格式为

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

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

例：用Jacobi 迭代法求解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 &= 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 &= 3 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 &= 5 \end{cases}$$

初始向量$x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$.

解：Jacobi 迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k)} = 1 - 2x_2^{(k-1)} + 2x_3^{(k-1)} \\ x_2^{(k)} = 3 - x_1^{(k-1)} - x_3^{(k-1)} \\ x_3^{(k)} = 5 - 2x_1^{(k-1)} - 2x_2^{(k-1)} \end{cases}$$

可得，$x^{(1)} = (1, 3, 5)^T$, $x^{(2)} = (5, -3, -3)^T$, $x^{(3)} = (1, 1, 1)^T$, $x^{(4)} = (1, 1, 1)^T$. 所以方程组的解为$x = (1, 1, 1)^T$.

例：用Gauss-Seidel 迭代法求解方程组

$$\begin{cases} 9x_1 - x_2 - x_3 & = 7 \\ -x_1 + 8x_2 & = 7 \\ -x_1 + 9x_3 & = 8 \end{cases}$$

初始向量$x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$.

解：Gauss-Seidel 迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k)} = \frac{1}{9}(7 + x_2^{(k-1)} + x_3^{(k-1)}) \\ x_2^{(k)} = \frac{1}{8}(7 + x_1^{(k)}) \\ x_3^{(k)} = \frac{1}{9}(8 + x_1^{(k)}) \end{cases}$$

可得，$x^{(1)} = (0.7778, 0.9722, 0.9753)^T$,

$x^{(2)} = (0.9942, 0.9993, 0.9994)^T$,

$x^{(3)} = (0.9999, 0.9999, 0.9999)^T$, $x^{(4)} = (1, 1, 1)^T$,

$x^{(5)} = (1, 1, 1)^T$. 所以方程组的解为$x = (1, 1, 1)^T$.

J 法与G-S 法的收敛性

J 法和G-S 法并无包含关系。如设方程组的系数矩阵分别为

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}, A_2 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

可验证：A_1 对J 法是收敛的，但G-S 法不收敛；而A_2 对J 法不收敛，但G-S 法收敛。

1. 定义：若$A=(a_{ij})\in R^{n\times n}$，满足

$$|a_{ii}|>\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}|,\quad i=1,2,\cdots,n,$$

称A 为严格对角占优矩阵。若A 满足

$$|a_{ii}|\geq\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}|,\quad i=1,2,\cdots,n,$$

且其中最少有一个严格不等式成立，称A 为弱对角占优矩阵。

2. 设$A=(a_{ij})\in R^{n\times n}$，若不能找到置换矩阵$P$，使得

$$P^TAP=\begin{pmatrix}\widetilde{A}_{11} & \widetilde{A}_{12}\\ 0 & \widetilde{A}_{22}\end{pmatrix} \tag{10}$$

其中$\widetilde{A}_{11}$ 与$\widetilde{A}_{22}$ 均为方阵，则称A 为不可约矩阵。

3. 定理：若$A=(a_{ij})$ 严格对角占优，
   则$a_{ii}\neq 0$，$i=1,2,\cdots,n$，且A 非奇异。
4. 定理：若$A=(a_{ij})$ 不可约且弱对角占优，
   则$a_{ii}\neq 0$，$i=1,2,\cdots,n$，且A 非奇异。

5. 若系数矩阵$\boldsymbol{A}$ 严格对角占优或不可约弱对角占优矩阵，则Jacobi 迭代法和G-S 迭代法收敛。

5. 若系数矩阵A 严格对角占优或不可约弱对角占优矩阵，则Jacobi 迭代法和G-S 迭代法收敛。

证明：若矩阵A 严格对角占优，则$|a_{ii}| > 0$, 因此D 可逆. 现假设Jacobi 迭代矩阵B 的某个特征值$|\lambda| \geq 1$，那么矩阵$\lambda D - L - U$ 也是严格对角占优的，因此$\lambda D - L - U$ 非奇异.

5. 若系数矩阵A 严格对角占优或不可约弱对角占优矩阵，则Jacobi 迭代法和G-S 迭代法收敛。

证明：若矩阵A 严格对角占优，则$|a_{ii}| > 0$, 因此D 可逆. 现假设Jacobi 迭代矩阵B 的某个特征值$|\lambda| \geq 1$，那么矩阵$\lambda D - L - U$ 也是严格对角占优的，因此$\lambda D - L - U$ 非奇异. 再由

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

可知$\lambda \mathrm{I} - B$ 非奇异，所以$det(\lambda \mathrm{I} - B) \neq 0$，这与$\lambda$ 是B 的特征值矛盾。

故B 的特征值的模均小于1，即Jacobi 迭代收敛。

6. 定理：设A 具有正的对角元且为对称矩阵，则Jacobi方法收敛的充分必要条件是A 和$2D-A$ 同为正定矩阵。

6. 定理：设A 具有正的对角元且为对称矩阵，则Jacobi 方法收敛的充分必要条件是A 和$2D-A$ 同为正定矩阵。
7. 定理：若系数矩阵A 对称正定，则G-S 迭代法收敛。

例：设$Ax = b$ 的系数矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ -1 & 1 & -1 \\ -2 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

证明J 迭代法收敛而G-S 迭代法发散。

解：由$B_J=-D^{-1}(L+U)$，所以B_J 的特征方程为

$$\begin{aligned}\det(\lambda I-B_J)&=\det[\lambda I+D^{-1}(L+U)]\\&=\det(D^{-1})\det[\lambda D+(L+U)]=0,\end{aligned}$$

等价于$\det[\lambda D+(L+U)]=0$，即

$$\begin{vmatrix}\lambda & -2 & 2\\ -1 & \lambda & -1\\ -2 & -2 & \lambda\end{vmatrix}=0.$$

解得特征值为$\lambda_1=\lambda_2=\lambda_3=0$，因此$\rho(B_J)=0<1$，知J 法收敛。

由$B_G = -(D+L)^{-1}U$，所以B_G 的特征方程为

$$\det(\lambda I - B_G) = \det[\lambda I + (D+L)^{-1}U]$$
$$= \det[(D+L)^{-1}]\det[\lambda(D+L)+U] = 0,$$

等价于$\det[\lambda(D+L)+U] = 0$，即

$$\begin{vmatrix} \lambda & -2 & 2 \\ -\lambda & \lambda & -1 \\ -2\lambda & -2\lambda & \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

解得特征值为$\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 2(\sqrt{2}-1)$, $\lambda_3 = 2(\sqrt{2}+1)$，因此$\rho(B) = 2(\sqrt{2}+1) > 1$，知G-S 法发散。

§9.3 超松弛迭代法

在G-S 迭代格式中

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

令$\Delta x = x^{(k+1)} - x^{(k)}$，则有$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x$.

§9.3 超松弛迭代法

在G-S 迭代格式中

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

令$\Delta x = x^{(k+1)} - x^{(k)}$，则有$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x$. 若修正项$\Delta x$ 乘上一个参数α，便得到超松弛迭代法，简记为SOR 法，其计算式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha D^{-1}[Lx^{(k+1)} + (D+U)x^{(k)} - b]$$

超松弛法也是线性迭代

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = B_\alpha x^{(k)} + f_\alpha; \\ B_\alpha = (D+\alpha L)^{-1}[(1-\alpha)D - \alpha U]; \\ f_\alpha = \alpha(D+\alpha L)^{-1} b. \end{cases}$$

用分量形式即是

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

$$i = 1, 2, \cdots, n.$$

SOR 法的收敛性

1. 定理：在矩阵A 是实对称正定矩阵的条件下，SOR 法收敛的充要条件是$0 < \alpha < 2$.

SOR 法的收敛性

1. 定理：在矩阵A 是实对称正定矩阵的条件下，SOR 法收敛的充要条件是$0 < \alpha < 2$.
2. 定理：若矩阵A 严格对角占优或不可约弱对角占优，则当$0 < \alpha \leq 1$时，SOR 法收敛.

例：用SOR 法求解方程组

$$\begin{cases} 4x_1 - x_2 &= 1 \\ -x_1 + 4x_2 - x_3 &= 4 \\ -x_2 + 4x_3 &= -3 \end{cases}$$

分别取$\alpha = 1.03$, $\alpha = 1$, $\alpha = 1.1$, 要求当$\|x^* - x^{(k)}\|_\infty \le 5 \times 10^{-6}$ 时迭代终止，并对每个α 确定迭代次数, 其中精确解$x^* = (\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2})^T$.

解：SOR 迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (1-\alpha)x_1^{(k)} + \frac{\alpha}{4}(1 + x_2^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = (1-\alpha)x_2^{(k)} + \frac{\alpha}{4}(4 + x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = (1-\alpha)x_3^{(k)} + \frac{\alpha}{4}(-3 + x_2^{(k+1)}) \end{cases}$$

取初始向量$x^{(0)} = (0,0,0)^T$，当$\alpha = 1.03$ 时，迭代5 次达到要求，

$$x^{(5)} = (0.50000043, 1.0000001, -0.499999)^T$$

当$\alpha = 1$ 时，迭代6 次达到要求，

$$x^{(6)} = (0.50000038, 1.0000002, -0.4999995)^T$$

当$\alpha = 1.1$ 时，迭代6 次达到要求，

$$x^{(6)} = (0.50000035, 0.9999989, -0.5000003)^T$$

§9.4 极小化方法

与方程组等价的变分问题

考虑方程组

$$Ax = b$$

其中A 为n 阶对称正定矩阵，$b \in R^n$ 为给定向量。定义二次函数

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)\\ &= \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x\end{aligned}$$

函数φ 的性质

1. 对一切$x \in R^n$, $\mathbf{grad}\varphi(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b}$.
2. 对一切$x, y \in R^n$, $\alpha \in R$,

$$\begin{aligned}\varphi(x+\alpha y) &= \frac{1}{2}(A(x+\alpha y), \mathbf{x}+\alpha y) - (b, x+\alpha y) \\ &= \varphi(x) + \alpha(Ax - b, y) + \frac{\alpha^2}{2}(Ay, y).\end{aligned}$$

3. 设x^* 为$Ax = b$ 的解，则对一切$x \in R^n$，有

$$\varphi(x) - \varphi(x^*) = \frac{1}{2}(A(x - x^*), x - x^*). \qquad (11)$$

定理：设A 对称正定，则x^* 为方程组$Ax=b$ 的解的充要条件是x^* 满足

$$\varphi(x^*)=\min_{x\in R^n}\varphi(x).$$

定理：设A 对称正定，则x^* 为方程组$Ax = b$ 的解的充要条件是x^* 满足

$$\varphi(x^*) = \min_{x \in R^n} \varphi(x).$$

证明：设x^* 为$Ax = b$ 的解，由(11) 及A 的正定性，有$\varphi(x) - \varphi(x^*) \geq 0$，即$x^*$ 使$\varphi(x)$ 最小。

反正，若有$\overline{x}$ 使$\varphi(x)$ 达到最小，则$\varphi(\overline{x}) \leq \varphi(x^*)$
又$\varphi(\overline{x}) \geq \varphi(x^*)$，所以$\varphi(\overline{x}) - \varphi(x^*) = 0$，故由(11) 可知

$$(A(\overline{x} - x^*), \overline{x} - x^*) = 2(\varphi(x) - \varphi(x^*)) = 0.$$

又因A 正定，所以$\overline{x} = x^*$。

最速下降法与共轭梯度法的定义

设x_0 为初始点，规定一方向p_0，求函数$f(x)$ 在直线

$$x = x_0 + tp_0$$

上的极小点x_1; 从x_1 出发规定一方向p_1，求函数$f(x)$ 在直线

$$x = x_1 + tp_1$$

上的极小点x_2; 如此继续下去，一般地，从点x_k 出发规定一方向p_k，求函数$f(x)$ 在直线

$$x = x_k + tp_k$$

上的极小点x_{k+1}, 称p_k 为搜索方向。

记$f(t)=\varphi(x_k+tp_k)$，欲确定α_k 使得f 在$t=\alpha_k$ 时为极小．由于

$$f(t)=\varphi(x_k)+t(Ax_k-b,p_k)+\frac{t^2}{2}(Ap_k,p_k)$$

由$f'(t)=0$，得

$$t=\alpha_k=-\frac{(Ax_k-b)^Tp_k}{p_k^TAp_k}$$

由于$f'' = p_k^T A p_k > 0$ $(p_k \neq 0)$，因此$t = \alpha_k$ 时，$f(t)$ 为极小. 记

$$r_k = Ax_k - b = \mathrm{grad}\varphi(x_k)$$

那么

$$\alpha_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}$$

迭代公式为

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

(1) 如果选取

$$p_k = -r_k = -\mathrm{grad}\varphi(x_k)$$

那么上述迭代法称为最速下降法。此时

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k - \alpha_k r_k \\ \alpha_k = \dfrac{(r_k, r_k)}{(Ar_k, r_k)}. \end{cases}$$

因为

$$\begin{aligned}\varphi(x_{k+1})-\varphi(x_k) &= \varphi(x_k+\alpha_k p_k)-\varphi(x_k)\\ &= -\alpha_k(r_k,r_k)+\frac{1}{2}\alpha_k^2(Ar_k,r_k)\\ &= -\frac{1}{2}\frac{(r_k,r_k)^2}{(Ar_k,r_k)}<0\end{aligned}$$

所以$\varphi(x_{k+1})<\varphi(x_k)$. 可以证明向量序列$\{x^k\}$ 收敛于方程组$Ax=b$ 的解，并且相邻两次的搜索方向是正交的，即$(r_{k+1},r_k)=0$。

(2) 若搜索方向

$$p_0, p_1, \cdots, p_{n-1}$$

为R^n 中的一个A 非零共轭向量系，即有性质

$$p_i^T A p_j = 0, \quad i \neq j$$

的向量系$\{p_k\}$，则称上述迭代法为共轭梯度法（CG法）。

设向量系$p_0, p_1, p_2, \cdots$ 线性无关，记

$$L_k = \mathrm{span}\{p_0, p_1, \cdots, p_{k-1}\},$$

令$\pi_k = \{x \mid x = x_0 + z,\ z \in L_k\}$.

设向量系$p_0, p_1, p_2, \cdots$ 线性无关，记

$$L_k = \mathrm{span}\{p_0, p_1, \cdots, p_{k-1}\},$$

令$\pi_k = \{x \mid x = x_0 + z,\ z \in L_k\}$.

定理9.12：从任意x_0 点出发，得到的点序列$x_0, x_1, \cdots$ 具有性质

$$\varphi(x_k) = \min_{z \in L_k} \varphi(x_0 + z) \tag{12}$$

的充分必要条件是$x_k \in \pi_k$ 且剩余向量$r_k = Ax_k - b$ 和L_k 直交，即

$$r_k^T z = 0, \qquad \forall z \in L_k$$

证明：必要性，由 (12) 知，x_k 为$\varphi(x)$ 在π_k 上的极小点，因此$\varphi(x)$ 在x_k 沿任一方向$z \in L_k$ 的方向导数都必须为零，即

$$(\mathrm{grad}\varphi(x_k), z) = r_k^T z = 0, \qquad \forall z \in L_k$$

充分性，任取$x \in \pi_k$，令

$$\Delta x_k = x - x_k,\ x = x_0 + z,\ x_k = x_0 + z_k$$

其中$z, z_k \in L_k$，则$\Delta x_k = z - z_k$, 于是

$$\varphi(x) - \varphi(x_k) = r_k^T \Delta x_k + \frac{1}{2}(\Delta x_k)^T A \Delta x_k$$

由于$r_k^T \Delta x_k = r_k^T z - r_k^T z_k = 0$, 且$A$ 正定，从而$(\Delta x_k)^T A(\Delta x_k) \geq 0$，即有$\varphi(x) \geq \varphi(x_k)$.

定理9.13：由共轭梯度法得到的点列$x_0, x_1, \cdots, x_k, \cdots$ 具有性质(12).

定理9.13：由共轭梯度法得到的点列$x_0, x_1, \cdots, x_k, \cdots$ 具有性质(12).

定理9.14：共轭方向法至多进行n 步便可得到方程组$Ax = b$ 的解.

定理9.13：由共轭梯度法得到的点列$x_0, x_1, \cdots, x_k, \cdots$ 具有性质(12).

定理9.14：共轭方向法至多进行n 步便可得到方程组$Ax = b$ 的解.

证明：因为$r_n^T p_i = 0$, $i = 0, 1, 2, \cdots, n-1$, 而$p_0, p_1, \cdots, p_{n-1}$ 线性无关，因此$r_n = Ax_n - b = 0$.

求共轭向量系的方法

对任意初始值x_0，取p_0 为

$$p_0 = -r_0 = -(Ax_0 - b)$$

计算

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0$$

其中$\alpha_0 = -\frac{p_0^T r_0}{p_0^T A p_0}$，算出$r_1 = Ax_1 - b$. 则$r_1 \perp p_0$. 在$r_0$，$r_1$张成的子空间中找$p_1$, 令

$$p_1 = -r_1 - \beta_0 r_0 = -r_1 + \beta_0 p_0$$

要使p_0 与p_1 为A 共轭，必须

$$p_1^T A p_0 = (-r_1 + \beta_0 p_0)^T A p_0 = 0$$

从而得到

$$\beta_0 = \frac{(r_1, Ap_0)}{(p_0, Ap_0)}$$

计算

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 p_1$$

算出$r_2 = Ax_2 - b$，令

$$p_2 = -r_2 + \beta_1 p_1$$

要使p_1 与p_2 为A 共轭，必须

$$p_2^T A p_1 = (-r_2 + \beta_1 p_1)^T A p_1 = 0$$

从而得到

$$\beta_1 = \frac{(r_2, Ap_1)}{(p_1, Ap_1)}$$

一般地令

$$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_k p_k$$

要使p_{k+1} 与p_k 为A 共轭，必须

$$\beta_k = \frac{(r_{k+1}, Ap_k)}{(p_k, Ap_k)}$$

总结如下：

给定x_0，取$p_0 = -r_0 = b - Ax_0$，对于$k = 0, 1, 2, \cdots$ 计算

$$\alpha_k = -\frac{(r_k, p_k)}{(p_k, Ap_k)}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = Ax_{k+1} - b = r_k + \alpha_k Ap_k$$

$$\beta_k = \frac{(r_{k+1}, Ap_k)}{(p_k, Ap_k)}$$

$$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_k p_k$$

例：应用共轭梯度法求解方程组

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

解：取 $x_0 = (0,0,0)^T$, 则

$$r_0 = Ax_0 - b = (-3,-1,-3)^T, \quad p_0 = -r_0 = (3,1,3)^T$$

当 $k = 0$ 时， 计算得

$$Ap_0 = (9,1,9)^T, \quad p_0^T Ap_0 = 55$$

因此

$$\alpha_0 = -\frac{(r_0, p_0)}{(p_0, Ap_0)} = \frac{19}{55}$$

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0 = \frac{19}{55}(3, 1, 3)^T$$

$$r_1 = Ax_1 - b = r_0 + \alpha_0 A p_0 = \frac{6}{55}(1, -6, 1)^T$$

$$\beta_0 = \frac{(r_1, Ap_0)}{(p_0, Ap_0)} = \frac{6 \times 12}{55^2}$$

$$p_1 = -r_1 + \beta_0 p_0 = \frac{6 \times 19}{55^2}(-1, 18, -1)^T$$

当$k = 1$ 时我们有

$$Ap_1 = \frac{6 \times 3 \times 19}{55^2}(-1, 6, -1)^T, \quad p_1^T A p_1 = \frac{6^3 \times 19^2}{55^2}$$

$$r_1^T p_1 = -\frac{6^2 \times 19 \times 2}{55^2}, \quad \alpha_1 = -\frac{(r_1, p_1)}{(p_1, Ap_1)} = \frac{55}{3 \times 19}$$

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 p_1 = (1, 1, 1)^T, \quad r_2 = Ax_2 - b = 0$$

故方程组的解为$x_2 = (1, 1, 1)^T$.