# 计算方法

令 丹

数学与统计学院

邮箱：danling@xjtu.edu.cn

# 第三章
# 解线性方程组的迭代法

# 迭代法

针对大型稀疏线性方程组, 常用于迭代法求解.

- 迭代法特点：存储量小、算法简单、收敛速度快
- 迭代法的思想：对原线性方程组 $Ax = b$ 作某种等价变形

$$x = Bx + g$$

由此构造迭代格式. 给定初始点 $x^{(0)}$,

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g$$

得到迭代序列 $\{x^{(k)}\}$, 逐步逼近方程组的精确解.

# 主要内容

1. 向量及矩阵序列的极限
2. 基本迭代法
3. 迭代法的收敛性
4. 共轭梯度法
5. Krylov 子空间方法

# 1. 向量及矩阵序列的极限

# 向量序列的极限

## 定义

设 $\{x^{(k)}\}$ 是 $\mathbf{R}^n$ 中的向量序列, 其中 $x^{(k)}=\left(x_1^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}\right)^T$.
若 $\{x^{(k)}\}$ 的每一个分量 $x_i^{(k)}$ 都收敛于 $x_i^*$, 即

$$\lim_{k\to\infty} x_i^{(k)}=x_i^*,\quad i=1,\cdots,n$$

则称向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于向量 $x^*=(x_1^*,\cdots,x_n^*)^T$, 或者说 $x^*$ 为向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 的极限, 记为 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)}=x^*$.

# 矩阵序列的极限

## 定义

设 $\{A^{(k)}\}$ 是 $\mathbf{R}^{n\times n}$ 中的矩阵序列, 其中 $A^{(k)}=\left(a_{ij}^{(k)}\right)_{n\times n}$.
若 $\{A^{(k)}\}$ 的每一个元素 $a_{ij}^{(k)}$ 都收敛于 $a_{ij}$, 即

$$\lim_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)}=a_{ij},\quad i,j=1,\cdots,n$$

则称矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$ 收敛于 $A=\left(a_{ij}\right)_{n\times n}$, 或者说 $A$ 为矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$ 的极限, 记为 $\lim\limits_{k\to\infty} A^{(k)}=A$.

# 向量序列和矩阵序列的收敛性

## 定理

(1) $\mathbf{R}^n$ 中的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于向量 $x^*$ 的充分必要条件是

$$\lim_{k\to\infty} \|x^* - x^{(k)}\| = 0.$$

(2) $\mathbf{R}^{n\times n}$ 中的矩阵序列 $\{A^{(k)}\}$ 收敛于矩阵 $A$ 的充分必要条件是

$$\lim_{k\to\infty} \|A - A^{(k)}\| = 0.$$

# 矩阵序列的收敛性

**定理**

设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, 则 $\lim\limits_{k\to\infty} A^k = 0$ 的充分必要条件是 $\rho(A) < 1$.

**定理**

设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$, 则 $\lim\limits_{k\to\infty} A^k = 0$ 的充分必要条件是

$$\lim_{k\to\infty} A^k x = 0, \quad \forall x \in \mathbf{R}^n.$$

**定理 (Gelfand 公式)**

$$\rho(A) = \lim_{k\to\infty} \|A^k\|^{\frac{1}{k}}, \quad A \in \mathbf{R}^{n\times n}.$$

# 2. 基本迭代法

# 迭代法的一般格式

设有方程组 $Ax=b$ $(|A|\neq 0,\ b\neq 0)$, 将 $Ax=b$ 等价变形为

$$x=Bx+g.$$

构造迭代格式

$$x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+g,\quad k=0,1,2,\cdots$$

给定初始向量 $x^{(0)}$, 由迭代格式产生迭代序列 $\{x^{(k)}\}$. 设 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 $x^*$, 两边令 $k\to\infty$ 取极限, 得到

$$\lim_{k\to\infty}x^{(k+1)}=\lim_{k\to\infty}\left(Bx^{(k)}+g\right)\quad\Longrightarrow\quad x^*=Bx^*+g.$$

由此可知, $x^*$ 满足 $Ax^*=b$, 即为方程组 $Ax=b$ 的解.

# 雅可比 (Jacobi) 迭代法

设 $Ax = b,\ |A| \neq 0,\ b \neq 0,\ a_{ii} \neq 0,$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad \cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases}$$

上述方程组可改写为

$$\begin{cases} x_1 = \big(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \cdots - a_{1n}x_n\big)/a_{11}, \\ x_2 = \big(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \cdots - a_{2n}x_n\big)/a_{22}, \\ \qquad \cdots \\ x_i = \big(b_i - a_{i1}x_1 - \cdots - a_{i,i-1}x_{i-1} - a_{i,i+1}x_{i+1} - \cdots - a_{in}x_n\big)/a_{ii}, \\ \qquad \cdots \\ x_n = \big(b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}\big)/a_{nn}. \end{cases}$$

# 雅可比 (Jacobi) 迭代法

令

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \big(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}\big)/a_{11}, \\
x_2^{(k+1)} = \big(b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}\big)/a_{22}, \\
\qquad \cdots\cdots \\
x_i^{(k+1)} = \big(b_i - a_{i1}x_1^{(k)} - \cdots - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} - a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} - \cdots - a_{in}x_n^{(k)}\big)/a_{ii}, \\
\qquad \cdots\cdots \\
x_n^{(k+1)} = \big(b_n - a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)}\big)/a_{nn}.
\end{cases}
$$

# 雅可比 (Jacobi) 迭代法

令

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \big(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}\big)/a_{11}, \\
x_2^{(k+1)} = \big(b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}\big)/a_{22}, \\
\qquad \cdots\cdots \\
x_i^{(k+1)} = \big(b_i - a_{i1}x_1^{(k)} - \cdots - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} - a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} - \cdots - a_{in}x_n^{(k)}\big)/a_{ii}, \\
\qquad \cdots\cdots \\
x_n^{(k+1)} = \big(b_n - a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)}\big)/a_{nn}.
\end{cases}
$$

Jacobi 迭代： $x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)/a_{ii}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$

# 雅可比 (Jacobi) 迭代法

给定初始向量 $x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)}\right)^T$ 后, 产生迭代序列 $\{x^{(k)}\}$, 写成矩阵形式如下：

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g,$$

其中

$$\boxed{B = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{3n}}{a_{33}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \frac{b_3}{a_{33}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}.}$$

例 1：给定 $x^{(0)} = (0,0,0)^T$，求解

$$
\begin{cases}
10x_1 - x_2 - 2x_3 = 72, \\
-x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 83, \\
-x_1 - x_2 + 5x_3 = 42.
\end{cases}
$$

**解** 由题可知

$$
A = \begin{pmatrix} 10 & -1 & -2 \\ -1 & 10 & -2 \\ -1 & -1 & 5 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 72 \\ 83 \\ 42 \end{pmatrix}.
$$

于是

$$
B = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{10} & \frac{2}{10} \\ \frac{1}{10} & 0 & \frac{2}{10} \\ \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & 0 \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} \frac{72}{10} \\ \frac{83}{10} \\ \frac{42}{5} \end{pmatrix}.
$$

# 雅可比 (Jacobi) 迭代法

**迭代格式**： 考试

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g \quad \Longrightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)} + 72\right)/10, \\ x_2^{(k+1)} = \left(x_1^{(k)} + 2x_3^{(k)} + 83\right)/10, \\ x_3^{(k+1)} = \left(x_1^{(k)} + x_2^{(k)} + 42\right)/5. \end{cases}$$

**准确解**： $x_1 = 11,\ x_2 = 12,\ x_3 = 13$

| $k$ | $x_1^{(k)}$ | $x_2^{(k)}$ | $x_3^{(k)}$ | $k$ | $x_1^{(k)}$ | $x_2^{(k)}$ | $x_3^{(k)}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 6 | 10.9834 | 11.9834 | 12.9804 |
| 1 | 7.2000 | 8.3000 | 8.4000 | 7 | 10.9944 | 11.9944 | 12.9933 |
| 2 | 9.7100 | 10.7000 | 11.5000 | 8 | 10.9981 | 11.9981 | 12.9978 |
| 3 | 10.5700 | 11.5710 | 12.4820 | 9 | 10.9994 | 11.9994 | 12.9992 |
| 4 | 10.8535 | 11.8534 | 12.8282 | 10 | 10.9998 | 11.9998 | 12.9997 |
| 5 | 10.9510 | 11.9510 | 12.9414 | 11 | 10.9999 | 11.9999 | 12.9999 |

# 高斯-赛德尔 (Gauss-Seidel) 迭代法

用最新的迭代值代替

在 Jacobi 迭代法中，计算 $x_i^{(k+1)}$ 时 $x_1^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 均已算出. 因此可用 $x_1^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 替代 $x_i^{(k+1)}$ 表达式中的 $x_1^{(k)}, \cdots, x_{i-1}^{(k)}$, 得到

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}\right)/a_{11}, \\
x_2^{(k+1)} = \left(b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}\right)/a_{22}, \\
\qquad \cdots\cdots \\
x_i^{(k+1)} = \left(b_i - a_{i1}x_1^{(k+1)} - \cdots - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} - \cdots - a_{in}x_n^{(k)}\right)/a_{ii}, \\
\qquad \cdots\cdots \\
x_n^{(k+1)} = \left(b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}\right)/a_{nn}.
\end{cases}
$$

# 高斯-赛德尔 (Gauss-Seidel) 迭代法

**Gauss-Seidel 迭代：**

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - \sum\limits_{j=2}^{n} a_{1j} x_j^{(k)}\right) / a_{11}, \\
x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\right) / a_{ii}, \quad i = 2, \cdots, n
\end{cases}
$$

# 高斯-赛德尔 (Gauss-Seidel) 迭代法

例 2：用 Gauss-Seidel 迭代法求解例 1 中的方程组.

# 高斯-赛德尔 (Gauss-Seidel) 迭代法

例 2：用 Gauss-Seidel 迭代法求解例 1 中的方程组.

**解** Gauss-Seidel 迭代格式：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)} + 72\right)/10, \\ x_2^{(k+1)} = \left(x_1^{(k+1)} + 2x_3^{(k)} + 83\right)/10, \\ x_3^{(k+1)} = \left(x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)} + 42\right)/5. \end{cases}$$

准确解：$x_1 = 11,\ x_2 = 12,\ x_3 = 13$

| $k$ | $x_1^{(k)}$ | $x_2^{(k)}$ | $x_3^{(k)}$ | $k$ | $x_1^{(k)}$ | $x_2^{(k)}$ | $x_3^{(k)}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 4 | 10.9913 | 11.9947 | 12.9972 |
| 1 | 7.2000 | 9.0200 | 11.6440 | 5 | 10.9989 | 11.9993 | 12.9996 |
| 2 | 10.4308 | 11.6719 | 12.8205 | 6 | 10.9999 | 11.9999 | 13.0000 |
| 3 | 10.9313 | 11.9572 | 12.9777 | | | | |

# 逐次超松弛 (SOR) 迭代法

对 Gauss-Seidel 迭代方法进行改写, 得到

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} + \left( b_1 - \sum\limits_{j=1}^{n} a_{1j} x_j^{(k)} \right) / a_{11}, \\
x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \left( b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum\limits_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii}, \quad i = 2, \cdots, n
\end{cases}
$$

# 逐次超松弛 (SOR) 迭代法

定义第 $k+1$ 步迭代的残向量如下：

$$r_1^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)},$$

$$r_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}, \quad i = 2, \cdots, n,$$

$$r^{(k+1)} \triangleq \left( r_1^{(k+1)}, r_2^{(k+1)}, \cdots, r_n^{(k+1)} \right)^T.$$

于是

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + r_i^{(k+1)} / a_{ii}, \quad i = 1, \cdots, n.$$

显然, 当 $\{x_i^{(k+1)}\}$ 收敛时, 有 $r_i^{(k+1)} \to 0 \ (k \to \infty)$.

# 逐次超松弛 (SOR) 迭代法

为了得到更快的收敛速度，引入参数 $\omega$ ($\omega > 0$, 松弛因子)

$$
\begin{aligned}
x_i^{(k+1)} &= x_i^{(k)} + \omega r_i^{(k+1)} / a_{ii} \\
&= x_i^{(k)} + \omega \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii} \\
&= (1-\omega) x_i^{(k)} + \omega \underbrace{\boxed{\left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii}}}_{\text{Gauss–Seidel的迭代公式}}
\end{aligned}
$$

SOR 迭代： $x_i^{(k+1)} = (1-\omega) x_i^{(k)} + \omega\, x_{i,\text{G-S}}^{(k+1)}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$

# 3. 迭代法的收敛性

# 迭代法的矩阵表示

三种迭代法的统一迭代格式:

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g, \qquad B \longrightarrow \text{迭代矩阵}.$$

对线性方程组的系数矩阵 $A$ 作分解

$$A = D - E - F,$$

其中

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

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

# 迭代法的矩阵表示

(1) Jacobi 迭代法:

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)/a_{ii}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= D^{-1}\left(b + (E+F)x^{(k)}\right) \\ &= D^{-1}b + D^{-1}(E+F)x^{(k)} \end{aligned}$$

因此

$$B = D^{-1}(E+F), \quad g = D^{-1}b$$

# 迭代法的矩阵表示

(2) Gauss-Seidel 迭代法：

$$x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - \sum_{j=2}^{n} a_{1j}x_j^{(k)}\right)/a_{11}$$

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)/a_{ii}, \quad i = 2, \cdots, n$$

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= D^{-1}\left(b + Ex^{(k+1)} + Fx^{(k)}\right) \\ &= D^{-1}b + D^{-1}Ex^{(k+1)} + D^{-1}Fx^{(k)} \\ x^{(k+1)} &= (D-E)^{-1}Fx^{(k)} + (D-E)^{-1}b. \end{aligned}$$

因此

$$B = (D-E)^{-1}F, \quad g = (D-E)^{-1}b$$

# 迭代法的矩阵表示

(3) SOR 迭代法：

$$
\begin{aligned}
x_i^{(k+1)} &= (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega\ x_{i,\text{G-S}}^{(k+1)}, \quad i = 1, 2, \cdots, n \\
x^{(k+1)} &= (1-\omega)x^{(k)} + \omega\ x_{\text{G-S}}^{(k+1)} \\
&= (1-\omega)x^{(k)} + \omega D^{-1}\left(b + Ex^{(k+1)} + Fx^{(k)}\right) \\
&= \left((1-\omega)I + \omega D^{-1}F\right)x^{(k)} + \omega D^{-1}b + \omega D^{-1}Ex^{(k+1)} \\
x^{(k+1)} &= (D-\omega E)^{-1}\left((1-\omega)D + \omega F\right)x^{(k)} + \omega(D-\omega E)^{-1}b
\end{aligned}
$$

因此

$$
B = (D-\omega E)^{-1}\left((1-\omega)D + \omega F\right), \quad g = \omega(D-\omega E)^{-1}b.
$$

# 迭代法的收敛性

**定理** 给定范数

若迭代矩阵 $B$ 的范数 $\|B\| < 1$, 则对任意给定的初始向量 $x^{(0)}$, 由迭代格式

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

产生的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 都收敛于方程组 $x = Bx + g$ 的解 $x^*$, 并且有误差估计式

$$\|x^* - x^{(k)}\| \leqslant \frac{\|B\|}{1 - \|B\|}\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|,$$

$$\|x^* - x^{(k)}\| \leqslant \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|}\|x^{(1)} - x^{(0)}\|.$$

$\boxed{\|B\| < 1 \quad \longrightarrow \quad \text{迭代法收敛的充分条件}}$

# 迭代法的收敛性

证　(1) 收敛性. 由题设, $x^* = Bx^* + g$, 同时有

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g,$$

收敛性只和 B 有关，和 g无关

两式相减得到

$$x^* - x^{(k+1)} = B(x^* - x^{(k)}).$$

因此有

$$x^* - x^{(k)} = B(x^* - x^{(k-1)}) = \cdots = B^k(x^* - x^{(0)}),$$

由此得到

$$\|x^* - x^{(k)}\| \leqslant \|B\|^k \|x^* - x^{(0)}\|.$$

相容性

两边令 $k \to \infty$ 取极限

$$\lim_{k\to\infty} \|x^* - x^{(k)}\| \leqslant \lim_{k\to\infty} \|B\|^k \|x^* - x^{(0)}\| = 0,$$

即 $\lim\limits_{k\to\infty} \|x^* - x^{(k)}\| = 0$, 所以 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*$.

(2) 误差估计式. 对任意的 $n \geqslant 1,\ n = 1, 2, \cdots,$

$$
\begin{aligned}
\|x^{(k+n)} - x^{(k)}\| &= \|x^{(k+n)} - x^{(k+n-1)} + x^{(k+n-1)} \\
&\qquad - x^{(k+n-2)} + \cdots + x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \\
&= \|x^{(k+n)} - x^{(k+n-1)}\| + \cdots + \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \\
&= \sum_{i=1}^{n} \|x^{(k+i)} - x^{(k+i-1)}\|,
\end{aligned}
$$

而

$$
\begin{aligned}
\|x^{(k+i)} - x^{(k+i-1)}\| &= \|Bx^{(k+i-1)} + g - Bx^{(k+i-2)} - g\| \\
&= \|Bx^{(k+i-1)} - Bx^{(k+i-2)}\| \\
&\leqslant \|B\| \|x^{(k+i-1)} - x^{(k+i-2)}\| \\
&\leqslant \|B\|^{i-1} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|.
\end{aligned}
$$

于是

$$\|x^{(k+n)}-x^{(k)}\| \leqslant \sum_{i=1}^{n} \|B\|^{i-1}\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\| = \frac{1-\|B\|^n}{1-\|B\|}\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\|.$$

两边令 $n \to \infty$ 取极限，由迭代序列的收敛性及 $\|B\| < 1$ 可知

$$x^{(k+n)} \to x^*, \quad \|B\|^n \to 0, \qquad n \to \infty.$$

因此

$$\boxed{\begin{aligned} \|x^* - x^{(k)}\| &\leqslant \frac{1}{1-\|B\|}\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \\ &= \frac{1}{1-\|B\|}\|Bx^{(k)} - Bx^{(k-1)}\| \\ &\leqslant \frac{\|B\|}{1-\|B\|}\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \\ &\leqslant \cdots \leqslant \frac{\|B\|^k}{1-\|B\|}\|x^{(1)} - x^{(0)}\|. \end{aligned}}$$

# 迭代法的收敛性

由误差估计式 (1) 知, 当 $\|B\|$ 不太接近 1 时, 若事先给定误差精度 $\varepsilon$, 则可用

$$\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leqslant \varepsilon$$

作为迭代终止的条件, 即在迭代过程中, 若 $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leqslant \varepsilon$, 则可取 $x^{(k)}$ 为近似解.

由误差估计式 (2) 可事先估计迭代次数. 令

$$\frac{\|B\|^k}{1-\|B\|}\|x^{(1)} - x^{(0)}\| \leqslant \varepsilon \quad \Longrightarrow \quad \|B\|^k \leqslant \frac{\varepsilon(1-\|B\|)}{\|x^{(1)} - x^{(0)}\|},$$

两边取对数, 得到

$$\boxed{k \geqslant \frac{\ln\big(\varepsilon(1-\|B\|)\big) - \ln\|x^{(1)} - x^{(0)}\|}{\ln\|B\|}.}$$

# 迭代法的收敛性

## 定理

对任意给定的初始向量 $x^{(0)}$, 由迭代格式

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

产生的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 都收敛的**充分必要条件**是以下两条件之一成立:

(1) $B^k \to 0 \ (k \to \infty)$;

(2) 迭代矩阵 $B$ 的谱半径 $\rho(B) < 1$. 常用

谱半径是矩阵范数的下确界

**证** (1) 设 $x^*$ 是方程组的解, 满足 $x^* = Bx^* + g$, 因此

$$x^* - x^{(k)} = B(x^* - x^{(k-1)}) = \cdots = B^k(x^* - x^{(0)}).$$

必要性：设 $x^{(k)} \to x^*$ $(k \to \infty)$, 对上式两端取范数有

$$\|x^* - x^{(k)}\| = \|B^k(x^* - x^{(0)})\|.$$

令 $k \to \infty$ 两边取极限, 由 $x^{(0)}$ 的任意性可知 $x^* - x^{(0)} \neq 0$, 于是

$$\lim_{k\to\infty} B^k = 0.$$

充分性：若 $B^k \to 0$ $(k \to \infty)$, 则

$$\lim_{k\to\infty} \|x^* - x^{(k)}\| \leqslant \lim_{k\to\infty} \|B^k\|\|x^* - x^{(0)}\| = 0,$$

因此

$$\lim_{k\to\infty} \|x^* - x^{(k)}\| = 0 \quad \Longrightarrow \quad x^{(k)} \to x^* \ (k \to \infty).$$

# 迭代法的收敛性

(2) 设 $\lambda$ 是 $B$ 的特征值, $\xi$ 为特征向量, 则 $B\xi = \lambda\xi,\ B^k\xi = \lambda^k\xi$.
由于 $x^{(k)} \to x^*\ (k \to \infty)$ 等价于 $B^{(k)} \to 0\ (k \to \infty)$, 因此只需证 (1) (2) 等价即可.

若 $B^k \to 0\ (k \to \infty)$, 则有 $\lambda^k \to 0$. 于是有 $|\lambda| < 1,\ \rho(B) < 1$.
若 $\rho(B) < 1$, 由定理 3.1.2 知 $B^k \to 0\ (k \to \infty)$.

# 迭代法的收敛性

## 推论

逐次超松弛迭代法收敛的必要条件是 $0 < \omega < 2$.

**证**　SOR 的迭代矩阵

$$B = (D - \omega E)^{-1}\left[(1-\omega)D + \omega F\right].$$

设 $\lambda_i\ (i = 1, 2, \cdots, n)$ 是矩阵 $B$ 的特征值, 则

$$\begin{aligned}
|B| = \lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n &= \left|(D - \omega E)^{-1}\right| \left|(1-\omega)D + \omega F\right| \\
&= \frac{\left|(1-\omega)D + \omega F\right|}{|D - \omega E|} \\
&= \frac{(1-\omega)^n a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}}{a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}} = (1-\omega)^n.
\end{aligned}$$

# 迭代法的收敛性

若 SOR 迭代收敛, 则由定理 3.3.2 可知,

$$\rho(B) = \max_{1 \leqslant i \leqslant n} |\lambda_i| < 1.$$

于是

$$|\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n| = \Big|1 - \omega\Big|^n < 1,$$

因此

$$|1 - \omega| < 1 \quad \Longrightarrow \quad 0 < \omega < 2.$$

# 迭代法的收敛性

## 引理

设 $A$ 是严格对角占优矩阵, $0<\omega\leqslant 1$, 当 $|\lambda|>1$ 时, 矩阵

$$(\lambda+\omega-1)D-\lambda\omega E-\omega F$$

是严格对角占优矩阵, 从而是非奇异矩阵.

**证** 先证严格对角占优.

$$\begin{aligned}
&|(\lambda+\omega-1)a_{ii}|-\sum_{j=1}^{i-1}|\lambda\omega a_{ij}|-\sum_{j=i+1}^{n}|\omega a_{ij}|\\
\geqslant&\big(|\lambda|-(1-\omega)\big)|a_{ii}|-|\lambda|\omega\sum_{j=1}^{i-1}|a_{ij}|-\sum_{j=i+1}^{n}\omega\,|a_{ij}|
\end{aligned}$$

# 迭代法的收敛性

$$
\begin{aligned}
&> (|\lambda| - (1-\omega))\left(\sum_{j=1}^{i-1}|a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^{n}|a_{ij}|\right) \\
&\quad - |\lambda|\omega\sum_{j=1}^{i-1}|a_{ij}| - \omega\sum_{j=i+1}^{n}|a_{ij}| \\
&= (|\lambda| - (1-\omega) - |\lambda|\omega)\sum_{j=1}^{i-1}|a_{ij}| + (|\lambda| - 1)\sum_{j=i+1}^{n}|a_{ij}| \\
&= (|\lambda| - 1)(1-\omega)\sum_{j=1}^{i-1}|a_{ij}| + (|\lambda| - 1)\sum_{j=i+1}^{n}|a_{ij}| \\
&\geqslant 0, \qquad i = 1, 2, \cdots, n.
\end{aligned}
$$

因此, $(\lambda+\omega-1)D - \lambda\omega E - \omega F$ 是严格对角占优矩阵, 由线性代数知识可知, $(\lambda+\omega-1)D - \lambda\omega E - \omega F$ 是非奇异矩阵.

# 迭代法的收敛性

## 推论

设线性方程组的系数矩阵 $A$ 是严格对角占优矩阵, 则对任意给定的初始向量 $x^{(0)}$, Jacobi、Gauss-Seidel 和 $0 < \omega \leqslant 1$ 的 SOR 迭代方法收敛.

设 $A$ 是严格对角占优矩阵, $0 < \omega \leqslant 1$, 当 $|\lambda| > 1$ 时, 矩阵

$$(\lambda + \omega - 1)D - \lambda\omega E - \omega F$$

是严格对角占优矩阵, 从而是非奇异矩阵.

# 迭代法的收敛性

**推论**

设线性方程组的系数矩阵 $A$ 是严格对角占优矩阵, 则对任意给定的初始向量 $x^{(0)}$, Jacobi、Gauss-Seidel 和 $0 < \omega \leqslant 1$ 的 SOR 迭代方法收敛.

**证** (1) Jacobi 迭代法的迭代矩阵是

$$B = D^{-1}(E+F),$$

则

$$|\lambda I - B| = |\lambda I - D^{-1}(E+F)| = |D^{-1}||\lambda D - (E+F)|.$$

# 迭代法的收敛性

由于 $A$ 是严格对角占优且 $A = D - E - F$, 因此 $|\lambda| \geqslant 1$ 时, $\lambda D - (E + F)$ 是严格对角占优矩阵, 从而非奇异.

因此 $|\lambda D - (E + F)| \neq 0$. 故当 $|\lambda| \geqslant 1$ 时, $|\lambda I - B| \neq 0$. 反之, $|\lambda I - B| = 0$ 必有 $|\lambda| < 1$.

据此, $B$ 的特征值 $|\lambda| < 1 \implies \rho(B) < 1$, 因此 Jacobi 迭代收敛.

# 迭代法的收敛性

由于 $A$ 是严格对角占优且 $A=D-E-F$, 因此 $|\lambda| \geqslant 1$ 时, $\lambda D-(E+F)$ 是严格对角占优矩阵, 从而非奇异.

因此 $|\lambda D-(E+F)| \neq 0$. 故当 $|\lambda| \geqslant 1$ 时, $|\lambda I-B| \neq 0$. 反之, $|\lambda I-B|=0$ 必有 $|\lambda|<1$.

据此, $B$ 的特征值 $|\lambda|<1 \quad \Longrightarrow \quad \rho(B)<1$, 因此 Jacobi 迭代收敛.

(2) SOR 方法的迭代矩阵为

$$B=(D-\omega E)^{-1}\left[(1-\omega) D+\omega F\right],$$

则

$$\begin{aligned}
|\lambda I-B| &= \left|\lambda I-(D-\omega E)^{-1}[(1-\omega) D+\omega F]\right| \\
&= \left|(D-\omega E)^{-1}\right| |\lambda(D-\omega E)-(1-\omega) D-\omega F| \\
&= \left|(D-\omega E)^{-1}\right| |(\lambda+\omega-1) D-\lambda \omega E-\omega F| .
\end{aligned}$$

由引理 3.3.1, 当 $0 < \omega \leqslant 1$ 且 $|\lambda| \geqslant 1$ 时, 有

$$|(\lambda + \omega - 1)D - \lambda\omega E - \omega F| \neq 0.$$

又因为

$$\left|(D - \omega E)^{-1}\right| = \frac{1}{a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}} \neq 0,$$

从而 $|\lambda I - B| \neq 0$.

据此可知, 对于 $0 < \omega \leqslant 1$, 只有当 $|\lambda| < 1$ 时有 $|\lambda I - B| = 0$.
即 $B$ 的特征值 $|\lambda| < 1 \implies \rho(B) < 1$, 因此 SOR 迭代收敛.

特别地, $\omega = 1$ 时, SOR 即 Gauss-Seidel, 故 Gauss-Seidel 迭代收敛.

# 迭代法的收敛性

## 推论

设线性方程组的系数矩阵 $A$ 对称正定，则对任意给定的初始向量 $x^{(0)}$，Jacobi 迭代方法收敛的充分必要条件是 $2D-A$ 是对称正定矩阵.

**证** 设 Jacobi 迭代收敛，由 $A$ 对称知，

$$A = D - E - F = D - E - E^T = D - (E + E^T),$$

则迭代矩阵

$$\begin{aligned} B &= D^{-1}(E+F) = D^{-1}(E+E^T) = D^{-1}(D-A) \\ &= I - D^{-1}A = D^{-\frac{1}{2}}\left(I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}\right)D^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

因此 $B$ 与 $I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 相似，有相同的特征值.

# 迭代法的收敛性

必要性：设 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值为 $\mu$, 则 $I-D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值为 $1-\mu$. 故 $B$ 的特征值为 $1-\mu$. 由 Jacobi 收敛可知,

$$\rho(B)<1 \implies |1-\mu|<1 \implies 0<\mu<2,$$

故 $2I-D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值为 $(2-\mu)\in(0,2)$. 所以

$$2I-D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$$

是正定矩阵, 由此

$$2D-A=D^{\frac{1}{2}}(2I-D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{\frac{1}{2}}$$

是正定矩阵.

# 迭代法的收敛性

充分性：设 $2D - A$ 是正定矩阵, 由于 $A$ 对称正定可知 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 对称正定. 设其特征值为 $\mu$ $(\mu > 0)$, 则 $B$ 的特征值 $\lambda = 1 - \mu$. 由 $\mu > 0$ 知 $\lambda = 1 - \mu < 1$.

另一方面,

$$
\begin{aligned}
-B &= -D^{-\frac{1}{2}}(I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{\frac{1}{2}} \\
&= D^{-\frac{1}{2}}\left(I - D^{-\frac{1}{2}}(2D - A)D^{-\frac{1}{2}}\right)D^{\frac{1}{2}},
\end{aligned}
$$

由此可知, $-B$ 的特征值与 $I - D^{-\frac{1}{2}}(2D - A)D^{-\frac{1}{2}}$ 相同, 由 $2D - A$ 对称正定可知, $D^{-\frac{1}{2}}(2D - A)D^{-\frac{1}{2}}$ 对称正定.

# 迭代法的收敛性

设其特征值为 $\overline{\mu}$ $(\overline{\mu}>0)$, 而 $I-D^{-\frac{1}{2}}(2D-A)D^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值为 $1-\overline{\mu}$. 所以有

$$-\lambda=1-\overline{\mu}<1 \quad\Longrightarrow\quad \lambda>-1,$$

因此有

$$|\lambda|<1 \quad\Longrightarrow\quad \rho(B)<1 \quad\Longrightarrow\quad \text{Jacobi 迭代收敛.}$$

# 迭代法的收敛性

## 推论

设线性方程组的系数矩阵 $A$ 是对称正定矩阵, 则对任意给定的初始向量 $x^{(0)}$, SOR 迭代方法收敛的充分必要条件是 $0 < \omega < 2$.

复数域的特征值、特征向量

**证** 由 $A$ 对称正定矩阵可知, SOR 的迭代矩阵可写为

$$B = (D - \omega E)^{-1}\big((1-\omega)D + \omega F\big) = (D - \omega E)^{-1}\big((1-\omega)D + \omega E^T\big),$$

设 $\lambda$ 是 $B$ 的特征值, $y$ 是相应的特征向量, 记 $\overline{y}$ 是 $y$ 的共轭向量, 则有

$$\big[(1-\omega)D + \omega E^T\big]y = \lambda(D - \omega E)y,$$

从而有

$$(1-\omega)\overline{y}^T Dy + \omega\overline{y}^T E^T y = \lambda(\overline{y}^T Dy - \omega\overline{y}^T Ey).$$

# 迭代法的收敛性

设 $\overline{y}^T E y = a + ib$, 则 $\overline{y}^T E^T y = a - ib$. 由 $A$ 对称正定可知, 其对角元全大于 0, 故 $D$ 是对称正定矩阵, 所以 $\overline{y}^T D y = d > 0$,

$$\lambda = \frac{d(1-\omega) + \omega(a - ib)}{d - \omega(a + ib)} \triangleq \frac{s}{t}.$$

$$\begin{aligned}
|s|^2 - |t|^2 &= \left(d(1-\omega) + \omega a\right)^2 + \omega^2 b^2 - (d - \omega a)^2 - \omega^2 b^2 \\
&= d^2(1 + \omega^2 - 2\omega - 1) + 2(1-\omega)\omega d a + 2\omega d a \\
&= d^2(\omega^2 - 2\omega) + 2\omega d a(2 - \omega) \\
&= \omega d(2-\omega)(2a - d).
\end{aligned}$$

另一方面, 由于 $A$ 对称正定, 所以有

$$\overline{y}^T A y = \overline{y}^T (D - E - E^T) y = \overline{y}^T D y - \overline{y}^T E y - \overline{y}^T E^T y$$

$$= d - (a + ib) - (a - ib) = d - 2a > 0.$$

# 迭代法的收敛性

必要性：若 SOR 迭代收敛, 则 $\rho(B) < 1$, 即有 $|\lambda| < 1$,

$$|\lambda| = \frac{|s|}{|t|} < 1 \quad \Longrightarrow \quad |s|^2 - |t|^2 < 0,$$

于是

$$\omega d(2-\omega)(2a-d) < 0 \quad \Longrightarrow \quad 0 < \omega < 2.$$

充分性：若 $0 < \omega < 2$, 则有 $|\lambda| = \frac{|s|}{|t|} < 1$, 因此

$$\rho(B) < 1 \quad \Longrightarrow \quad \text{SOR 迭代收敛.}$$

# 迭代法的收敛性

SOR 迭代收敛的快慢取决于 $\omega$ 的选取, 自然选取最佳松弛因子 $\omega$, 使得 SOR 有较快的收敛速度, 目前尚无可供计算 $\omega$ 的实用方法.

$A$ 对称正定且三对角时, Young (1950) 提出建立最佳松弛因子的计算方式

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(B_J)}},$$

其中 $B_J$ 为 Jacobi 迭代矩阵.

迭代矩阵B，谱半径<1

例 1：对如下给定的 $A$, 讨论 $Ax=b$ 的三种迭代法的收敛性.

$$(1)\ A=\begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & 7 \end{pmatrix};\quad (2)\ A=\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

正定：二次型判断

**解** (1) $A$ 对称正定, $2D-A$ 对称正定, Jacobi 收敛.

$0<\omega<2$ 时, SOR 收敛, Gauss-Seidel 收敛.<= w=1

(2) $2D-A$ 不正定, Jacobi 发散.

$A$ 对称正定, $0<\omega<2$ 时, SOR 收敛, Gauss-Seidel 收敛.

# 迭代法的收敛性

例 2：设线性方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵

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

若要 Jacobi、Gauss-Seidel 迭代法收敛，请给出 $a$ 的取值范围.

**解**　对于 Jacobi 迭代，其迭代矩阵

$$B=D^{-1}(E+F)=\begin{pmatrix} 0 & -a \\ -a & 0 \end{pmatrix},$$

$$\det(\lambda I-B)=\lambda^2-a^2=0 \quad\Longrightarrow\quad \lambda=\pm|a|.$$

因此，当 $\rho(B)=|a|<1$ 时，Jacobi 迭代收敛.

spectral radius

# 迭代法的收敛性

对于 Gauss-Seidel 迭代方法,

$$
\begin{aligned}
B = (D-E)^{-1}F &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ a & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 & -a \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -a & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -a \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & -a \\ 0 & a^2 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

$$
\det(\lambda I - B) = \lambda(\lambda - a^2) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \rho(B) = a^2 < 1,
$$

即 $|a| < 1$ 时, Gauss-Seidel 收敛.

例 3：方程组 $\begin{cases} 3x_1 - 10x_2 = 7 \\ 9x_1 - 4x_2 = 5 \end{cases}$，写出两种收敛格式，并说明为什么收敛.

**解** 选主元得

$$\begin{cases} 9x_1 - 4x_2 = 5 \\ 3x_1 - 10x_2 = 7 \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad A = \begin{pmatrix} 9 & -4 \\ 3 & -10 \end{pmatrix},$$

$A$ 严格对角占优，所以 Jacobi 迭代收敛，$0 < \omega \leqslant 1$ 的 SOR 迭代收敛.

# 迭代法的收敛性

Jacobi 迭代
$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{9}\big(5 + 4x_2^{(k)}\big), \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{10}\big(-7 + 3x_1^{(k)}\big). \end{cases}$$

SOR 迭代
$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{\omega}{9}\big(5 + 4x_2^{(k)}\big) + (1-\omega)x_1^{(k)}, \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{\omega}{10}\big(-7 + 3x_1^{(k+1)}\big) + (1-\omega)x_2^{(k)}. \end{cases}$$

# 4. 共轭梯度法

# 共轭梯度法

大型稀疏对称正定矩阵 $Ax = b \quad \longrightarrow$ 共轭梯度法

原理：把求解线性方程组问题转化为求解一个与之等价的二次函数极小化问题

二次泛函，functional

$$Ax = b \quad \Longleftrightarrow \quad \min_{x \in \mathbf{R}^n} f(x)$$

# 线性方程组与二次函数极小点的等价性

$n$ 元函数的梯度：$\nabla f(x) = \mathrm{grad} f(x) = \left( \frac{\partial f}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T$.

例 1：求 $n$ 元二次函数 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$ 的梯度，其中为 $A$ 为 $n$ 阶对称正定矩阵.

**解**　设 $A = \left( a_{ij} \right)_{n \times n}$，$x = \left( x_1, x_2, \cdots, x_n \right)^T$，$b = (b_1, \cdots, b_n)^T$.

于是有

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j - \sum_{i=1}^{n} b_i x_i.$$

# 线性方程组与二次函数极小点的等价性

由 $A$ 是对称矩阵知, $a_{jk} = a_{kj}$. 对 $f(x)$ 关于 $x_k$ 求偏导数得

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f(x)}{\partial x_k} &= \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{ik}x_i + \sum_{j=1}^{n} a_{kj}x_j\right) - b_k \\
&= \frac{1}{2}\left(\sum_{j=1}^{n} a_{jk}x_j + \sum_{j=1}^{n} a_{kj}x_j\right) - b_k \\
&= \sum_{j=1}^{n} a_{kj}x_j - b_k, \quad k = 1, 2, \cdots, n
\end{aligned}
$$

由此得

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{n} a_{1j}x_j \\ \sum_{j=1}^{n} a_{2j}x_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{n} a_{nj}x_j \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = Ax - b$$

# 线性方程组与二次函数极小点的等价性

**定理**

设 $A$ 是 $n$ 阶对称正定矩阵, 则 $x^*$ 是方程组 $Ax = b$ 的解的充分必要条件是 $x^*$ 是二次函数 $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$ 的极小点, 即

$$Ax^* = b \quad \Longleftrightarrow \quad f(x^*) = \min_{x \in \mathbf{R}^n} f(x).$$

**证** 必要性：设 $x^*$ 是 $Ax = b$ 的解, 即 $Ax^* = b$. 注意到 $A$ 为对称正定矩阵, 故 $\forall x \in \mathbf{R}^n$, 有

$$\begin{aligned} f(x) - f(x^*) &= \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x - \frac{1}{2}(x^*)^T Ax^* + b^T x^* \\ &= \frac{1}{2}\left(x^T Ax - (x^*)^T Ax^*\right) - b^T (x - x^*) \end{aligned}$$

# 线性方程组与二次函数极小点的等价性

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\left(x^T A x - x^T A x^* + x^T A x^* - (x^*)^T A x^*\right) - (x^*)^T A(x - x^*) \\
&= \frac{1}{2}\left(x^T A(x - x^*) + (x - x^*)^T A x^*\right) - (x^*)^T A(x - x^*) \\
&= \frac{1}{2}\left(x^T A(x - x^*) + (x^*)^T A(x - x^*)\right) - (x^*)^T A(x - x^*) \\
&= \frac{1}{2}\left(x^T A(x - x^*) - (x^*)^T A(x - x^*)\right) \\
&= \frac{1}{2}(x - x^*)^T A(x - x^*) \geqslant 0
\end{aligned}
$$

即 $x^*$ 是 $f(x)$ 的极小点.

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\left(x^T A x - x^T A x^* + x^T A x^* - (x^*)^T A x^*\right) - (x^*)^T A (x - x^*) \\
&= \frac{1}{2}\left(x^T A (x - x^*) + (x - x^*)^T A x^*\right) - (x^*)^T A (x - x^*) \\
&= \frac{1}{2}\left(x^T A (x - x^*) + (x^*)^T A (x - x^*)\right) - (x^*)^T A (x - x^*) \\
&= \frac{1}{2}\left(x^T A (x - x^*) - (x^*)^T A (x - x^*)\right) \\
&= \frac{1}{2}(x - x^*)^T A (x - x^*) \geqslant 0
\end{aligned}
$$

即 $x^*$ 是 $f(x)$ 的极小点.

充分性：设 $x^*$ 为 $f(x)$ 的极小点, 由于 $\nabla f(x)$ 存在, 则有

$$\nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0,$$

即 $x^*$ 是 $Ax = b$ 的解.

# 共轭梯度法

如何求解二次函数 $f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$ 的极小点 $x^*$？

最速下降法: 由一点 $x^{(0)}$ 出发, 找到下降的方向 $p^{(0)}$, 在下降的方向上做一定的步长下降,

$$x^{(1)}=x^{(0)}+\alpha_0p^{(0)},$$

使得 $f(x^{(1)})\leqslant f(x^{(0)})$.

一般地, 由一点 $x^{(k)}$ 出发, 找到下降的方向 $p^{(k)}$, 在下降的方向上做一定的步长下降

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_kp^{(k)},$$

使得 $f(x^{(k+1)})\leqslant f(x^{(k)})$.

# 最速下降法

Q1：如何确定步长 $\alpha_k$ ？

在直线 $x = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$ 上确定 $\alpha_k$, 使得 $f(x)$ 在

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

处达到极小. 设 $\varphi(\alpha) = f\left(x^{(k)} + \alpha p^{(k)}\right)$, 于是有

$$\varphi'(\alpha) = \alpha p^{(k)T} A p^{(k)} + (Ax^{(k)} - b)^T p^{(k)}.$$

令 $\varphi'(\alpha) = 0$, 得到

$$\alpha = \frac{\left(b - Ax^{(k)}\right)^T p^{(k)}}{p^{(k)T} A p^{(k)}} \triangleq \alpha_k.$$

Q2：如何确定下降方向 $p^{(k)}$ ？　　负梯度方向

# 最速下降法

当靠近极小值时, 收敛变慢, 出现“之字形”下降, 因为

$$\alpha_k = \arg\min f(x^{(k)} + \alpha r^{(k)})$$

$$\frac{\partial f(x^{(k)} + \alpha r^{(k)})}{\partial \alpha} = r^{(k)T} \nabla f(x^{(k)} + \alpha r^{(k)T}) \approx r^{(k)T} r^{(k+1)}$$

近似正交.

负梯度方向从局部看是最佳搜索方向, 但从整体来看并非最佳. 如何寻找更好的下降方向?

**共轭梯度法**

# 共轭向量

与复数的共轭相区分，共轭与正交

## 定义

设 $A$ 是 $n$ 阶对称正定矩阵, 若 $\mathbf{R}^n$ 中的一组非零向量 $d^{(0)}$, $d^{(1)}, \cdots, d^{(n)}$ 满足

$$\left(d^{(i)}, Ad^{(j)}\right) = 0, \quad i \neq j$$

则称 $d^{(i)}, d^{(j)}$ 是关于矩阵 $A$ 的共轭向量, $d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$ 为关于矩阵 $A$ 的共轭向量组.

当 $A = I$ 时, 共轭向量组即正交向量组.

# 共轭向量

## 定理

关于矩阵 $A$ 的共轭向量 $d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$ 线性无关.

**证** 设 $c_0 d^{(0)} + c_1 d^{(1)} + \cdots + c_m d^{(m)} = 0$, 对两边用 $Ad^{(i)}$ $(i = 0, 1, \cdots, m)$ 作内积, 有

$$\left( Ad^{(i)}, \sum_{j=0}^{m} c_j d^{(j)} \right) = c_i \left( Ad^{(i)}, d^{(i)} \right) = 0, \quad i = 0, 1, 2, \cdots, m$$

由于 $A$ 是对称正定矩阵, 及 $d^{(i)} \neq 0$ 知

$$\left( Ad^{(i)}, d^{(i)} \right) > 0 \quad \Longrightarrow \quad c_i = 0$$

即向量组 $d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m)}$ 线性无关.

给定初始点 $x^{(0)}$, 由迭代格式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \boldsymbol{\alpha_k d^{(k)}},$$

产生迭代序列 $x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots$ , 求得 $f(x)$ 的最小点, 也就是方程组 $Ax = b$ 的解.

共轭梯度法中的关键两点:

(1) 最佳步长 $\alpha_k$ $(\alpha \geqslant 0)$

(2) 搜索方向 $d^{(k)}$

# 共轭梯度法

① 确定最佳步长 $\alpha_k$

给定迭代点 $x^{(k)}$ 和搜索方向 $d^{(k)}$, 选取非负实数 $\alpha_k$ 使得 $f\left(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}\right)$ 最小, 即选择 $\alpha_k$ 满足

$$f\left(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}\right)=\min_{\alpha\geqslant 0} f\left(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}\right).$$

设

$$\begin{aligned}
\varphi(\alpha) &= f\left(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}\right)^T A\left(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}\right)-b^T\left(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}\right), \\
\varphi'(\alpha) &= \alpha d^{(k)T} A d^{(k)}+\left(A x^{(k)}-b\right)^T d^{(k)} \\
&= \left(A x^{(k)}+\alpha A d^{(k)}-b\right)^T d^{(k)} \\
&= \nabla f\left(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}\right)^T d^{(k)}.
\end{aligned}$$

令 $\varphi'(\alpha) = 0$, 得到

$$\left(Ax^{(k)} - b + \alpha A d^{(k)}\right)^T d^{(k)} = 0,$$

记 $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$, 即 $\left(\alpha A d^{(k)} - r^{(k)}\right)^T d^{(k)} = 0$. 于是有

$$\alpha(Ad^{(k)}, d^{(k)}) = r^{(k)T} d^{(k)} \quad \Longrightarrow \quad \alpha = \frac{r^{(k)T} d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}}.$$

② 确定搜索方向 $d_k$ 下降方法的选择

给定初始向量 $x^{(0)}$ 后, 由于负梯度方向是函数下降最快的方向, 故第 1 次迭代搜索方向

$$d^{(0)} = r^{(0)} = -\nabla f(x^{(0)}) = b - Ax^{(0)}.$$

令

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 d^{(0)}, \quad \alpha_0 = \frac{r^{(0)T} d^{(0)}}{d^{(0)T} A d^{(0)}}.$$

第 2 次迭代时, 从 $x^{(1)}$ 出发的搜索方向不再取 $r^{(1)}$, 而是选取 $d^{(1)} = r^{(1)} + \beta_0 d^{(0)}$, 使得 $d^{(1)}$ 与 $d^{(0)}$ 是关于 $A$ 的共轭向量, 即要求 $d^{(1)}$ 满足

$$(d^{(1)}, Ad^{(0)}) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \beta_0 = -\frac{r^{(1)T} A d^{(0)}}{d^{(0)T} A d^{(0)}}.$$

# 共轭梯度法

然后从 $x^{(1)}$ 出发, 沿方向 $d^{(1)}$ 进行搜索得

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \alpha_1 d^{(1)}, \quad \alpha_1 = \frac{r^{(1)T} d^{(1)}}{d^{(1)T} A d^{(1)}}.$$

一般地, 设已经求出 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, 计算

$$r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)}.$$

令 $d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}$, 选取 $\beta_k$ 使得 $d^{(k+1)}$ 与 $d^{(k)}$ 是关于 $A$ 的共轭向量, 即要求

$$\left(d^{(k+1)}, Ad^{(k)}\right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \beta_k = -\frac{r^{(k+1)T} A d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}},$$

这就确定了搜索方向 $d^{(k+1)}$.

# 共轭梯度法

共轭梯度法的计算公式：

$$
\begin{cases}
d^{(0)} = r^{(0)} = b - Ax^{(0)} \\
\alpha_k = \dfrac{r^{(k)T} d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}} \\
x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)} \\
r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)} \\
\beta_k = -\dfrac{r^{(k+1)T} A d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}} \\
d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}
\end{cases}
$$

# 共轭梯度法

## 定理

设 $r^{(i)}$, $d^{(i)}$ $(i=0,1,\cdots,n-1)$ 分别是共轭梯度法中产生的非零残差向量和搜索方向, 则

(1) $\left(r^{(k)},d^{(k-1)}\right)=0.$

(2) $\left(r^{(k)},d^{(k)}\right)=\left(r^{(k)},r^{(k)}\right).$

(3) $r^{(0)},r^{(1)},\cdots,r^{(k)}$ $(k\leqslant n-1)$ 是正交向量组;

$d^{(0)},d^{(1)},\cdots,d^{(k)}$ $(k\leqslant n-1)$ 是关于 $A$ 的共轭向量组.

证 (1) 由于

$$
\begin{aligned}
r^{(k)} &= b - Ax^{(k)} = b - A\left(x^{(k-1)} + \alpha_{k-1} d^{(k-1)}\right) \\
&= b - Ax^{(k-1)} - \alpha_{k-1} A d^{(k-1)} \\
&= r^{(k-1)} - \alpha_k A d^{(k-1)}.
\end{aligned}
$$

故

$$
\left(r^{(k)}, d^{(k-1)}\right) = \left(r^{(k-1)}, d^{(k-1)}\right) - \alpha_{k-1}\left(Ad^{(k-1)}, d^{(k-1)}\right).
$$

由于

$$
\alpha_{k-1} = \frac{r^{(k-1)T} d^{(k-1)}}{d^{(k-1)T} A d^{(k-1)}} = \frac{\left(r^{(k-1)}, d^{(k-1)}\right)}{\left(Ad^{(k-1)}, d^{(k-1)}\right)},
$$

因此得到

$$
\left(r^{(k)}, d^{(k-1)}\right) = 0.
$$

# 共轭梯度法

(2) 已知 $d^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} d^{(k-1)}$, 由 (1) 得

$$\left(r^{(k)}, d^{(k)}\right) = \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) + \beta_{k-1}\left(r^{(k)}, d^{(k-1)}\right) = \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right).$$

# 共轭梯度法

(2) 已知 $d^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} d^{(k-1)}$, 由 (1) 得

$$\left(r^{(k)}, d^{(k)}\right) = \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) + \beta_{k-1}\left(r^{(k)}, d^{(k-1)}\right) = \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right).$$

(3) 数学归纳法.

① 证当 $m = 1$ 时, $r^0, r^{(1)}$ 正交, $d^{(0)}, d^{(1)}$ 关于 $A$ 共轭.

$$\begin{aligned}\left(r^{(0)}, r^{(1)}\right) &= \left(r^{(0)}, b - Ax^{(0)}\right) = \left(r^{(0)}, b - A(x^{(0)} + \alpha_0 d^{(0)})\right) \\ &= \left(r^{(0)}, r^{(0)} - \alpha_0 A d^{(0)}\right) = \left(r^{(0)}, r^{(0)}\right) - \alpha_0\left(r^{(0)}, A d^{(0)}\right).\end{aligned}$$

代入 $\alpha_0$, 利用 $r^{(0)} = d^{(0)}$, 得到 $\left(r^{(0)}, r^{(1)}\right) = 0$.

另一方面,

$$\begin{aligned}\left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right) &= \left(d^{(0)}, A(r^{(1)} + \beta_0 d^{(0)})\right) \\ &= \left(r^{(0)}, Ar^{(1)}\right) + \beta_0 \left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right).\end{aligned}$$

代入 $\beta_0$, 得到 $\left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right) = 0$.

# 共轭梯度法

另一方面,

$$\begin{aligned}\left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right) &= \left(d^{(0)}, A(r^{(1)} + \beta_0 d^{(0)})\right)\\ &= \left(r^{(0)}, Ar^{(1)}\right) + \beta_0\left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right).\end{aligned}$$

代入 $\beta_0$, 得到 $\left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right) = 0$.

② 假定当 $m = k$ 时结论成立, 即 $r^0, r^{(1)}, \cdots, r^{(k)}$ 是正交向量组, $d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(k)}$ 是关于 $A$ 的共轭向量组.

另一方面,

$$\begin{aligned}\left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right) &= \left(d^{(0)}, A(r^{(1)} + \beta_0 d^{(0)})\right) \\ &= \left(r^{(0)}, Ar^{(1)}\right) + \beta_0\left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right).\end{aligned}$$

代入 $\beta_0$, 得到 $\left(d^{(0)}, Ad^{(1)}\right) = 0$.

② 假定当 $m = k$ 时结论成立, 即 $r^0, r^{(1)}, \cdots, r^{(k)}$ 是正交向量组, $d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(k)}$ 是关于 $A$ 的共轭向量组.

③ 证明当 $m = k + 1$ 时结论也成立, 即证 $r^0, r^{(1)}, \cdots, r^{(k+1)}$ 是正交向量组, $d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(k+1)}$ 是关于 $A$ 的共轭向量组.

# 共轭梯度法

由于 $r^{(0)} = d^{(0)}$, 则有

$$\begin{aligned}
\left(r^{k+1}, r^{(0)}\right) &= \left(b - A(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}), r^{(0)}\right) \\
&= \left(r^{(k)} - \alpha_k A d^{(k)}, r^{(0)}\right) \\
&= \left(r^{(k)}, r^{(0)}\right) - \alpha_k \left(A d^{(k)}, d^{(0)}\right) = 0.
\end{aligned}$$

# 共轭梯度法

由于 $r^{(0)} = d^{(0)}$, 则有

$$\begin{aligned}\left(r^{k+1}, r^{(0)}\right) &= \left(b - A(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}), r^{(0)}\right)\\ &= \left(r^{(k)} - \alpha_k A d^{(k)}, r^{(0)}\right)\\ &= \left(r^{(k)}, r^{(0)}\right) - \alpha_k \left(A d^{(k)}, d^{(0)}\right) = 0.\end{aligned}$$

而对 $i = 1, 2, \cdots, k-1$, 由

$$d^{(i)} = r^{(i)} + \beta_{i-1} d^{(i-1)} \quad \Longrightarrow \quad r^{(i)} = d^{(i)} - \beta_{i-1} d^{(i-1)},$$

可得

$$\begin{aligned}\left(r^{(k+1)}, r^{(i)}\right) &= \left(r^{(k)} - \alpha_k A d^{(k)}, r^{(i)}\right) = \left(r^{(k)}, r^{(i)}\right) - \alpha_k \left(A d^{(k)}, r^{(i)}\right)\\ &= \left(r^{(k)}, r^{(i)}\right) - \alpha_k \left(A d^{(k)}, d^{(i)} - \beta_{i-1} d^{(i-1)}\right)\\ &= \left(r^{(k)}, r^{(i)}\right) - \alpha_k \left(A d^{(k)}, d^{(i)}\right) + \alpha_k \beta_{i-1} \left(A d^{(k)}, d^{(i-1)}\right)\\ &= 0.\end{aligned}$$

# 共轭梯度法

当 $i = k$ 时,

$$\begin{aligned}\left(r^{(k+1)}, r^{(k)}\right) &= \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) - \alpha_k\left(Ad^{(k)}, d^{(k)}\right) \\ &= \left(r^{(k)}, d^{(k)}\right) - \alpha_k\left(Ad^{(k)}, d^{(k)}\right) = 0,\end{aligned}$$

即 $r^{(0)}, r^{(1)}, \cdots, r^{(k+1)}$ 是正交向量组.

# 共轭梯度法

当 $i=k$ 时,

$$\begin{aligned}\left(r^{(k+1)}, r^{(k)}\right) &= \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) - \alpha_k\left(Ad^{(k)}, d^{(k)}\right)\\ &= \left(r^{(k)}, d^{(k)}\right) - \alpha_k\left(Ad^{(k)}, d^{(k)}\right) = 0,\end{aligned}$$

即 $r^{(0)}, r^{(1)}, \cdots, r^{(k+1)}$ 是正交向量组.

下面证 $\quad \left(d^{(k+1)}, Ad^{(i)}\right) = 0, \quad i = 0, 1, \cdots, k.$

由于 $d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}$, 则有

$$\left(d^{(k+1)}, Ad^{(i)}\right) = \left(r^{(k+1)}, Ad^{(i)}\right) + \beta_k\left(d^{(k+1)}, d^{(i)}\right)$$

当 $i = 0, 1, \cdots, k-1$ 时, 由 $r^{(i+1)} = r^{(i)} - \alpha_i Ad^{(i)}$ 可得

$$Ad^{(i)} = \left(r^{(i)} - r^{(i+1)}\right)/\alpha_i, \quad \alpha_i > 0.$$

# 共轭梯度法

代入, 并由 $\{r^{(i)}\}$ 的正交性及前面假设得

$$\begin{aligned}\left(d^{(k+1)}, Ad^{(i)}\right) &= \left(r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}, \frac{r^{(i)} - r^{(i+1)}}{\alpha_i}\right) \\ &= \frac{1}{\alpha_i}\left(r^{(k+1)}, r^{(i)} - r^{(i+1)}\right) + \beta_k\left(d^{(k)}, Ad^{(i)}\right) = 0.\end{aligned}$$

当 $i = k$ 时,

$$\begin{aligned}\left(d^{(k+1)}, Ad^{(k)}\right) &= \left(r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}, Ad^{(k)}\right) \\ &= \left(r^{(k+1)}, Ad^{(k)}\right) + \beta_k\left(d^{(k)}, Ad^{(k)}\right) = 0,\end{aligned}$$

即 $d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(k)}, d^{(k+1)}$ 是关于矩阵 $A$ 的共轭向量组, 即结论在 $m = k+1$ 时也成立. 根据归纳法, 结论得证.

# 共轭梯度法

根据上述定理, 可以将 $\alpha_k$ 和 $\beta_k$ 的表达式化简为

$$\alpha_k = \frac{r^{(k)T}d^{(k)}}{d^{(k)T}Ad^{(k)}} = \frac{r^{(k)T}r^{(k)}}{d^{(k)T}Ad^{(k)}} = \frac{\|r^{(k)}\|_2^2}{d^{(k)T}Ad^{(k)}},$$

$$\begin{aligned}\beta_k &= -\frac{r^{(k+1)T}Ad^{(k)}}{d^{(k)T}Ad^{(k)}} = -\frac{r^{(k+1)T}\left(r^{(k)} - r^{(k+1)}\right)}{\alpha_k d^{(k)T}Ad^{(k)}} \\ &= \frac{r^{(k+1)T}r^{(k+1)}}{\alpha_k d^{(k)T}Ad^{(k)}} \xlongequal{\text{代入 } \alpha_k} \frac{r^{(k+1)T}r^{(k+1)}}{\|r^{(k)}\|_2^2} = \frac{\|r^{(k+1)}\|_2^2}{\|r^{(k)}\|_2^2}.\end{aligned}$$

注意到

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)} = -\nabla f\big(x^{(k)}\big).$$

若 $r^{(k)} \neq 0$, 由上述定理的结论 (2) 有

$$\big(-\nabla f(x^{(k)}), d^{(k)}\big) = \big(r^{(k)}, d^{(k)}\big) = \big(r^{(k)}, r^{(k)}\big) > 0.$$

这说明 $d^{(k)}$ 是 $f(x)$ 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向, 即有

$$f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)}),$$

因此是 $\{f(x^{(k)})\}$ 是单调下降数列, 共轭梯度法是一个下降算法.

# 共轭梯度法

## 定理

设 $A$ 是 $n$ 阶对称正定矩阵, 用共轭梯度法求解线性方程组 $Ax = b$, 或等价地求二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$$

的极小点, 若计算过程中无舍入误差, 则最多迭代 $n$ 次就可得到方程组 $Ax = b$ 的解或二次函数的最小点.

# 共轭梯度法

**证**　在共轭梯度法的迭代过程中，若某个 $r^{(k)} = b - Ax^{(k)} = 0$ $(0 \leqslant k \leqslant n-1)$, 则 $x^{(k)}$ 是方程组的准确解.

若 $r^{(k)} \neq 0$ $(k = 0, 1, \cdots, n-1)$, 则有 $r^{(n)} = b - Ax^{(n)}$. 假设 $r^{(n)} \neq 0$, 则 $r^{(0)}, r^{(1)}, \cdots, r^{(n)}$ 是正交向量组, 即 $\mathbf{R}^n$ 中存在 $n+1$ 个线性无关的向量, 而在 $\mathbf{R}^n$ 空间中最多有 $n+1$ 个相互正交的向量, 故产生矛盾.

因此必然有 $r^{(n)} = b - Ax^{(n)} = 0$, 即 $x^{(n)}$ 是方程组的准确解.

# 共轭梯度法

## 定理

设 $\{x^{(k)}\}$ 是用共轭梯度法求得的迭代序列, 则有误差估计

$$\|x^{(k)} - x^*\|_A \leqslant 2\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^k \|x^{(0)} - x^*\|_A,$$

其中范数 $\|x\|_A = \sqrt{x^T Ax}$, $K = \mathit{Cond}_2(A)$.

# 共轭梯度法

## 定理

设 $\{x^{(k)}\}$ 是用共轭梯度法求得的迭代序列, 则有误差估计

$$\|x^{(k)}-x^*\|_A \leqslant 2\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^k \|x^{(0)}-x^*\|_A,$$

其中范数 $\|x\|_A=\sqrt{x^TAx},\ K=\mathit{Cond}_2(A)$.

**证** 由于

$$x^{(k)}=x^{(k-1)}+\alpha_{k-1}d^{(k-1)}=\cdots=x^{(0)}+\sum_{j=0}^{k-1}\alpha_j d^{(j)},$$

而 $d^{(0)}=r^{(0)},\ d^{(j)}=r^{(j)}+\beta_{j-1}d^{(j-1)}, j=1,2,\cdots,k-1$, 于是有

$$\forall j=0,1,\cdots,k-1,\quad d_j\in \mathrm{span}\{r^{(0)},\cdots,r^{(j)}\}.$$

# 共轭梯度法

因此

$$\begin{aligned} x \in\ & x^{(0)} + \mathsf{span}\{r^{(0)}, r^{(1)} \cdots, r^{(k-1)}\} \\ &= x^{(0)} + \mathsf{span}\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{k-1}r^{(0)}\}, \end{aligned}$$

即有

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= x^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^j r^{(0)} = x^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^j \left(b - Ax^{(0)}\right) \\ &= x^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^{j+1} \left(A^{-1}b - x^{(0)}\right) \\ &= x^{(0)} + \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^{j+1} \left(x^* - x^{(0)}\right). \end{aligned}$$

# 共轭梯度法

$$
\begin{aligned}
x^{(k)} - x^* &= x^{(0)} - x^* - \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^{j+1}\left(x^{(0)} - x^*\right) \\
&= \left(I - \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^{j+1}\right)\left(x^{(0)} - x^*\right) = p_k(A)\left(x^{(0)} - x^*\right),
\end{aligned}
$$

其中 $p_k(\xi) = 1 - \sum\limits_{j=0}^{k-1} \gamma_j \xi^{j+1}$ 为 $k$ 次多项式.

# 共轭梯度法

$$x^{(k)} - x^* = x^{(0)} - x^* - \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^{j+1} \big(x^{(0)} - x^*\big)$$

$$= \left(I - \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^{j+1}\right) \big(x^{(0)} - x^*\big) = p_k(A) \big(x^{(0)} - x^*\big),$$

其中 $p_k(\xi) = 1 - \sum\limits_{j=0}^{k-1} \gamma_j \xi^{j+1}$ 为 $k$ 次多项式.

由于 $A$ 对称正定, 则存在正交矩阵 $Q$ 使得 $A = Q^T \Lambda Q$, 其中

$$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n),$$

而 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$ 为 $A$ 的特征值, 因此

$$p_k(A) = I - \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j A^{j+1} = I - \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j Q^T \Lambda^{j+1} Q = Q^T p_k(\Lambda) Q.$$

记 $\mathbb{P}_k^{0,1} = \{p \in \mathbb{P}_k : \ p(0) = 1\}$, 则

$$
\begin{aligned}
\|x^{(k)} - x^*\|_A^2 &= \left(x^{(k)} - x^*\right)^T Q^T \Lambda Q \left(x^{(k)} - x^*\right) \\
&= \min_{p_k \in \mathbb{P}_k^{0,1}} \left(x^{(0)} - x^*\right)^T p_k^T(A) Q^T \Lambda Q p_k(A) \left(x^{(0)} - x^*\right) \\
&= \min_{p_k \in \mathbb{P}_k^{0,1}} \left(x^{(0)} - x^*\right)^T Q^T p_k(\Lambda) \Lambda p_k(\Lambda) Q \left(x^{(0)} - x^*\right) \\
&= \min_{p_k \in \mathbb{P}_k^{0,1}} \left(x^{(0)} - x^*\right)^T Q^T \mathsf{diag}\left(\lambda_i p_k^2(\lambda_i)\right) Q \left(x^{(0)} - x^*\right) \\
&\leqslant \min_{p_k \in \mathbb{P}_k^{0,1}} \max_{1 \leqslant i \leqslant n} p_k^2(\lambda_i) \cdot \left(x^{(0)} - x^*\right)^T Q^T \Lambda Q \left(x^{(0)} - x^*\right) \\
&= \min_{p_k \in \mathbb{P}_k^{0,1}} \max_{1 \leqslant i \leqslant n} p_k^2(\lambda_i) \cdot \|x^{(0)} - x^*\|_A^2,
\end{aligned}
$$

# 共轭梯度法

于是

$$\begin{aligned}\|x^{(k)}-x^*\|_A &\leqslant \min_{p_k\in\mathbb{P}_k^{0,1}}\max_{1\leqslant i\leqslant n}|p_k(\lambda_i)|\cdot\|x^{(0)}-x^*\|_A \\ &\leqslant \min_{p_k\in\mathbb{P}_k^{0,1}}\max_{\lambda_n\leqslant t\leqslant\lambda_1}|p_k(t)|\cdot\|x^{(0)}-x^*\|_A,\end{aligned}$$

即选择多项式 $q_k(t)\in\mathbb{P}_k^{0,1}$ 使得

$$\max_{\lambda_n\leqslant t\leqslant\lambda_1}|q_k(t)|=\min_{p_k\in\mathbb{P}_k^{0,1}}\max_{\lambda_n\leqslant t\leqslant\lambda_1}|p_k(t)|.$$

由逼近论相关知识, 可知

$$q_k(t)=\frac{T_k\left(\frac{\lambda_1+\lambda_n-2t}{\lambda_1-\lambda_n}\right)}{T_k\left(\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}\right)},$$ 其中 $T_k(t)$ 为 $k$ 次 Chebyshev 多项式.

# 共轭梯度法

由 Chebyshev 多项式性质，

$$\max_{\lambda_n\leqslant t\leqslant\lambda_1}|q_k(t)| = \frac{1}{T_k\left(\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}\right)} = \frac{2\left(\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}-\sqrt{\left(\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}\right)^2-1}\right)^k}{1+\left(\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}-\sqrt{\left(\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}\right)^2-1}\right)^{2k}},$$

其中

$$\begin{aligned}
&\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}-\sqrt{\left(\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}\right)^2-1}\\
=&\frac{\lambda_1+\lambda_n}{\lambda_1-\lambda_n}-\frac{\sqrt{4\lambda_1\lambda_n}}{\lambda_1-\lambda_n}=\frac{\left(\sqrt{\lambda_1}-\sqrt{\lambda_n}\right)^2}{\lambda_1-\lambda_n}\\
=&\frac{\sqrt{\lambda_1}-\sqrt{\lambda_n}}{\sqrt{\lambda_1}+\sqrt{\lambda_n}}=\frac{\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}-1}{\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}+1}=\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1},
\end{aligned}$$

# 共轭梯度法

因此

$$\begin{aligned}\|x^{(k)}-x^*\|_A &\leqslant \frac{2\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^k}{1+\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^{2k}}\|x^{(0)}-x^*\|_A \\ &\leqslant 2\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^k\|x^{(0)}-x^*\|_A.\end{aligned}$$

# 共轭梯度法

因此

$$\|x^{(k)} - x^*\|_A \leqslant \frac{2\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^k}{1 + \left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^{2k}} \|x^{(0)} - x^*\|_A$$

条件数K越大，越 ill–posed

$$\leqslant 2\left(\frac{\sqrt{K}-1}{\sqrt{K}+1}\right)^k \|x^{(0)} - x^*\|_A.$$

计算经验表明，对于不是十分病态的问题，共轭梯度法的收敛较快，迭代次数低于矩阵的阶数 $n$. 对于病态问题，只要进行足够多次迭代 (大约为 $n$ 的 $3 \sim 5$ 倍) 后，一般也能得到满意的结果. 因此，共轭梯度法是求解高阶稀疏线性方程组的一个常用有效方法.

例 2：给定 $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$, 用共轭梯度法求解对称正定方程组

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

# 共轭梯度法

例 2：给定 $x^{(0)} = (0,0,0)^T$, 用共轭梯度法求解对称正定方程组

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

解　取 $d^{(0)} = r^{(0)} = b - Ax^{(0)} = (3,1,3)^T$, 则

$$\|r^{(0)}\|_2^2 = 19, \quad d^{(0)T}Ad^{(0)} = 55,$$

故

$$\alpha_0 = \frac{\|r^{(0)}\|_2^2}{d^{(0)T}Ad^{(0)}} = \frac{19}{55}.$$

# 共轭梯度法

于是得到

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 d^{(0)} = \frac{19}{55}(3,1,3)^T,$$

$$r^{(1)} = b - Ax^{(1)} = \frac{6}{55}(-1,6,-1)^T.$$

于是得到

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 d^{(0)} = \frac{19}{55}(3,1,3)^T,$$

$$r^{(1)} = b - Ax^{(1)} = \frac{6}{55}(-1,6,-1)^T.$$

因此有

$$\|r^{(1)}\|_2^2 = \frac{38\times 36}{55^2}, \quad \beta_0 = \frac{\|r^{(1)}\|_2^2}{\|r^{(0)}\|_2^2} = \frac{72}{55^2},$$

$$d^{(1)} = r^{(1)} + \beta_0 d^{(0)} = \frac{6\times 19}{55^2}(-1,18,-1)^T,$$

$$d^{(1)T}Ad^{(1)} = \frac{(6\times 19)^2\times 6}{55^3}, \quad \alpha_1 = \frac{\|r^{(1)}\|_2}{d^{(1)T}Ad^{(1)}} = \frac{55}{57},$$

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \alpha_1 d^{(1)} = (1,1,1)^T, \quad r^{(2)} = b - Ax^{(2)} = (0,0,0)^T,$$

即迭代两次求得方程组的解.

# 5. Krylov 子空间方法

迭代加速方法，预条件方法

对于大型非对称线性方程组

$$Ax = b, \quad |A| \neq 0, \quad A \in \mathbf{R}^{n\times n}, \ b \in \mathbf{R}^n.$$

给定 $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$, 令 $x = x^{(0)} + z$, 则

$$Ax = b \iff Ax^{(0)} + Az = b \iff Az = r^{(0)} \triangleq b - Ax^{(0)}.$$

若求得 $z = z^{(m)}$, 则有 $x^{(m)} = x^{(0)} + z^{(m)}$ 是原方程组的解.

Q：如何求解 $Az = r^{(0)}$ ？

设 $\mathbf{R}^n$ 中两个 $m$ 维子空间 $K_m, L_m$ 的基分别是 $\{v_i\}_{i=1}^m$ 和 $\{w_i\}_{i=1}^m$, 则

$$K_m = \text{span}\{v_1, v_2, \cdots, v_m\},$$
$$L_m = \text{span}\{w_1, w_2, \cdots, w_m\}.$$

Galerkin 原理: 在空间 $K_m$ 中寻找方程组 $Az = r^{(0)}$ 的解 $z^{(m)}$, 使得 $r^{(0)} - Az^{(m)}$ 与 $L_m$ 中的所有向量正交, 即求 $z^{(m)} \in K_m$ 使得

$$\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, w_i\right) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m.$$

# Galerkin 原理的矩阵表示

设

$$V_m = (v_1, v_2, \cdots, v_m) \in \mathbf{R}^{n\times m},$$
$$W_m = (w_1, w_2, \cdots, w_m) \in \mathbf{R}^{n\times m}.$$

由 $z^{(m)} \in K_m$ 知

$$z^{(m)} = y_1 v_1 + y_2 v_2 + \cdots + y_m v_m = V_m y^{(m)},$$

其中 $y^{(m)} = (y_1, y_2, \cdots, y_m)^T$. 于是有

$$w_i^T \left(r^{(0)} - AV_m y^{(m)}\right) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

即

$$W_m^T \left(r^{(0)} - AV_m y^{(m)}\right) = 0 \implies \left(W_m^T A V_m\right) y^{(m)} = W_m^T r^{(0)}.$$

若 $W_m^T A V_m$ 可逆, 则 $y^{(m)} = \left(W_m^T A V_m\right)^{-1} W_m^T r^{(0)}$, 从而有

$$z^{(m)} = V_m y^{(m)} = V_m \left(W_m^T A V_m\right)^{-1} W_m^T r^{(0)}.$$

# Krylov 子空间法

选取不同的子空间 $K_m$ 和 $L_m$ 及它们的基 $\{v_i\}_{i=1}^m$, $\{w_i\}_{i=1}^m$, 便得到基于 Galerkin 原理求解方程组的不同算法.

Krylov 子空间：由 $A$ 与 $r^{(0)}$ 生成,

$$\text{span}\left\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\right\}.$$

Krylov 子空间法：$K_m = \text{span}\left\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\right\}$

① 如何选取 $L_m$ 使得 $W_m^T A V_m$ 可逆？

① 如何选取 $L_m$ 使得 $W_m^T A V_m$ 可逆？

② 当 $m = n$ 时, 由于 $r^{(0)} - Az^{(m)}$ 与 $L_m$ 中所有向量正交, 即 $r^{(0)} - Az^{(m)}$ 与 $\mathbf{R}^n$ 中所有向量正交. 因此有 $r^{(0)} = Az^{(m)}$, 即有 $z^{(m)}$ 是 $Az = r^{(0)}$ 的精确解 $z^*$.

① 如何选取 $L_m$ 使得 $W_m^T A V_m$ 可逆？

② 当 $m = n$ 时, 由于 $r^{(0)} - Az^{(m)}$ 与 $L_m$ 中所有向量正交, 即 $r^{(0)} - Az^{(m)}$ 与 $\mathbf{R}^n$ 中所有向量正交. 因此有 $r^{(0)} = Az^{(m)}$, 即有 $z^{(m)}$ 是 $Az = r^{(0)}$ 的精确解 $z^*$.

当 $m < n$ 时, 如何估计 $\|z^{(m)} - z^*\|_2$？

① 如何选取 $L_m$ 使得 $W_m^T A V_m$ 可逆？

② 当 $m=n$ 时, 由于 $r^{(0)} - Az^{(m)}$ 与 $L_m$ 中所有向量正交, 即 $r^{(0)} - Az^{(m)}$ 与 $\mathbf{R}^n$ 中所有向量正交. 因此有 $r^{(0)} = Az^{(m)}$, 即有 $z^{(m)}$ 是 $Az = r^{(0)}$ 的精确解 $z^*$.

当 $m < n$ 时, 如何估计 $\|z^{(m)} - z^*\|_2$ ?

★ 完全正交方法 (Arnoldi)： $L_m = K_m$ 正投影

★ 广义极小残差法 (GMRES)： $L_m = AK_m$ 斜投影

# Arnoldi 算法

Arnoldi 过程：利用 Gram-Schmidt 正交化方法,

由 $r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 构造 $K_m$ 的一组标准正交基.

# Arnoldi 算法

Arnoldi 过程：利用 Gram-Schmidt 正交化方法，

由 $r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 构造 $K_m$ 的一组标准正交基.

设 $r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 线性无关，

(1) 令 $v_1 = \frac{r^{(0)}}{\|r^{(0)}\|_2}$

Arnoldi 过程：利用 Gram-Schmidt 正交化方法，
由 $r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 构造 $K_m$ 的一组标准正交基.

设 $r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 线性无关，

(1) 令 $v_1 = \frac{r^{(0)}}{\|r^{(0)}\|_2}$

(2) 取 $\tilde{v}_2 = Av_1 - h_{11}v_1$, 要求 $\tilde{v}_2 \perp v_1$, 由

$$(\tilde{v}_2, v_1) = (Av_1, v_1) - h_{11}(v_1, v_1) = 0 \quad \Longrightarrow \quad h_{11} = \frac{(Av_1, v_1)}{\|v_1\|_2^2}.$$

记 $h_{21} = \|\tilde{v}_2\|_2$, 令 $v_2 = \frac{\tilde{v}_2}{\|\tilde{v}_2\|_2} = \frac{\tilde{v}_2}{h_{21}}$.

(3) 取 $\widetilde{v}_3 = Av_2 - h_{22}v_2 - h_{12}v_1$, 要求 $\widetilde{v}_3 \perp v_1, \widetilde{v}_3 \perp v_2$, 则

$$
\begin{aligned}
(\widetilde{v}_3, v_1) &= (Av_2, v_1) - h_{22}(v_2, v_1) - h_{12}(v_1, v_1) \\
&= (Av_2, v_1) - h_{12}\|v_1\|_2^2 = 0, \\
(\widetilde{v}_3, v_2) &= (Av_2, v_2) - h_{22}(v_2, v_2) - h_{12}(v_1, v_2) \\
&= (Av_2, v_2) - h_{22}\|v_2\|_2^2 = 0.
\end{aligned}
$$

于是得到

$$
h_{12} = \frac{(Av_2, v_1)}{\|v_1\|_2^2} = (Av_2, v_1), \quad h_{22} = \frac{(Av_2, v_2)}{\|v_2\|_2^2} = (Av_2, v_2).
$$

记 $h_{32} = \|\widetilde{v}_3\|_2$, 令 $v_3 = \frac{\widetilde{v}_3}{\|\widetilde{v}_3\|_2} = \frac{\widetilde{v}_3}{h_{32}}$.

# Arnoldi 算法

(4) 一般地, 对于 $k=1,2,\cdots,m-1$

取 $\widetilde{v}_{k+1}=Av_k-\sum\limits_{i=1}^{k}h_{ik}v_i$, 要求 $\widetilde{v}_{k+1}\perp v_i\ (i=1,2,\cdots,k)$, 则

$$\begin{aligned}(\widetilde{v}_{k+1},v_i)&=(Av_k,v_i)-\Big(\sum_{i=1}^{k}h_{ik}v_i,v_i\Big)\\&=(Av_k,v_i)-h_{ik}(v_i,v_i)\\&=(Av_k,v_i)-h_{ik}\|v_i\|_2^2=0,\end{aligned}$$

于是得到

$$h_{ik}=\frac{(Av_k,v_i)}{\|v_i\|_2^2}=(Av_k,v_i),\quad i=1,2,\cdots,k.$$

记 $h_{k+1,k}=\|\widetilde{v}_{k+1}\|_2$, 令 $v_{k+1}=\frac{\widetilde{v}_{k+1}}{\|\widetilde{v}_{k+1}\|_2}=\frac{\widetilde{v}_{k+1}}{h_{k+1,k}}$.

# Arnoldi 算法

(5) 当 $k=m$ 时,

取 $\widetilde{v}_{m+1}=Av_m-\sum\limits_{i=1}^{m}h_{im}v_i$, 要求 $\widetilde{v}_{m+1}\perp v_i\ (i=1,2,\cdots,m)$,

则

$$\begin{aligned}(\widetilde{v}_{m+1},v_i)&=(Av_m,v_i)-\Big(\sum_{i=1}^{m}h_{im}v_i,v_i\Big)\\&=(Av_m,v_i)-h_{im}(v_i,v_i)\\&=(Av_m,v_i)-h_{im}\|v_i\|_2^2=0,\end{aligned}$$

于是得到

$$h_{im}=\frac{(Av_m,v_i)}{\|v_i\|_2^2}=(Av_m,v_i),\quad i=1,2,\cdots,m.$$

记 $h_{m+1,m}=\|\widetilde{v}_{m+1}\|_2$, 当 $h_{m+1,m}\neq 0$, 令 $v_{m+1}=\frac{\widetilde{v}_{m+1}}{h_{m+1,m}}$, 否则 $v_{m+1}=0$.

# Arnoldi 算法

## 定理

设 $m < n$, 向量组 $r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 线性无关, 则由 Arnoldi 过程产生的向量组 $\{v_i\}_{i=1}^{m}$ 是 Krylov 子空间 $K_m$ 的一组标准正交基, 并且有

$$v_{m+1} \perp K_m = \mathit{span}\left\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\right\}.$$

Arnoldi 过程的矩阵表示：

由 $\widetilde{v}_{k+1} = Av_k - \sum_{i=1}^{k} h_{ik}v_i \ \ (k = 1, 2, \cdots, m)$ 及 $v_{k+1} = \widetilde{v}_{k+1}/h_{k+1,k}$ 得

$$Av_k = \widetilde{v}_{k+1} + \sum_{i=1}^{k} h_{ik}v_i = \sum_{i=1}^{k+1} h_{ik}v_i \quad (k = 1, 2, \cdots, m)$$

即

$$\begin{aligned} Av_1 &= h_{11}v_1 + h_{21}v_2, \\ Av_2 &= h_{12}v_1 + h_{22}v_2 + h_{32}v_3, \\ &\vdots \\ Av_m &= h_{1m}v_1 + h_{2m}v_2 + \cdots + h_{mm}v_m + h_{m+1,m}v_{m+1}. \end{aligned}$$

# Arnoldi 算法

记

$$
H_m = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1,m-1} & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2,m-1} & h_{2m} \\ & h_{32} & \cdots & h_{3,m-1} & h_{3m} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & h_{m,m-1} & h_{mm} \end{pmatrix}
$$

则有

$$
AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T, \quad e_m = (0, 0, \cdots, 1)^T \in \mathbf{R}^m.
$$

$H_m$：上 Hessenberg 矩阵. 下次对角线下方元素全为 0

# Arnoldi 算法

给定适当的初始向量 $x^{(0)}$ 和正整数 $m$, 使得向量组

$$r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$$

线性无关. 取子空间

$$L_m = K_m = \mathrm{span}\left\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\right\}.$$

# Arnoldi 算法

给定适当的初始向量 $x^{(0)}$ 和正整数 $m$, 使得向量组

$$r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$$

线性无关. 取子空间

$$L_m = K_m = \text{span}\left\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\right\}.$$

由 $L_m = K_m$ 知 $V_m = W_m$. 在式

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

两端左乘 $V_m^T$, 注意到 $V_m^T V_m = I$ 及 $v_{m+1}$ 与 $V_m$ 列向量正交, 得

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

又因为 $V_m = W_m$ 且

$$V_m^T r^{(0)} = \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_m^T \end{pmatrix} \left(\|r^{(0)}\|_2 v_1\right) = \|r^{(0)}\|_2 e_1 = \beta e_1, \quad \beta = \|r^{(0)}\|_2.$$

于是

$$\left(W_m^T A V_m\right) y^{(m)} = W_m^T r^{(0)} \quad \Longrightarrow \quad H_m y^{(m)} = V_m^T r^{(0)} = \beta e_1.$$

若 $H_m$ 非奇异, 则可唯一求解出 $y^{(m)}$, $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$.

若 $H_m$ 奇异, 则算法恶性中断.

# Arnoldi 算法

## 定理

对于给定的 $m > 0$, 设 $y^{(m)}$ 是方程组 $H_m y^{(m)} = \beta e_1$ 的唯一解, $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 则

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = h_{m+1,m} |e_m^T y^{(m)}|.$$

**定理**

对于给定的 $m > 0$, 设 $y^{(m)}$ 是方程组 $H_m y^{(m)} = \beta e_1$ 的唯一解, $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 则

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|.$$

**证**

$$\begin{aligned} r^{(0)} - Az^{(m)} &= r^{(0)} - AV_m y^{(m)} \\ &= r^{(0)} - \left(V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T\right) y^{(m)} \\ &= r^{(0)} - V_m H_m y^{(m)} - h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T y^{(m)} \\ &= r^{(0)} - \beta V_m e_1 - h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T y^{(m)} \\ &= r^{(0)} - \beta v_1 - h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T y^{(m)} \\ &= -h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T y^{(m)}. \end{aligned}$$

# Arnoldi 算法

当 $h_{m+1,m} \neq 0$ 时,

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|\|v_{m+1}\|_2 = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|.$$

当 $h_{m+1,m} = 0$ 时, 有 $r^{(0)} - Az^{(m)} = 0$, 因此

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = 0 = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|.$$

因此结论成立.

当 $h_{m+1,m} \neq 0$ 时,

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|\|v_{m+1}\|_2 = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|.$$

当 $h_{m+1,m} = 0$ 时, 有 $r^{(0)} - Az^{(m)} = 0$, 因此

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = 0 = h_{m+1,m}|e_m^T y^{(m)}|.$$

因此结论成立.

对于某个 $m > 0$, $H_m$ 非奇异, 而 $\widetilde{v}_{m+1} = 0$, 这时有 $r^{(0)} = Az^{(m)}$, 即 $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$ 是方程组 $r^{(0)} = Az$ 的准确解 $z^*$.

# Arnoldi 算法

原理型 Arnoldi 算法：给定 $\varepsilon > 0$, 不断增大 $m$, 确定 $z^{(m)}$, 使得 $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 < \varepsilon$.

① 给定 $\varepsilon > 0$, $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$, 取 $m = 1$.

② 计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$.

③ 由 Arnoldi 过程求出 $\{v_i\}_{i=1}^m$ 及 $v_{m+1}$.
若 $H_m$ 奇异, 则算法产生中断, 更换 $x^{(0)}$, 转 ②.
若 $H_m$ 非奇异, 解 $H_m y = \beta e_1$ 得到 $y^{(m)}$, $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$.

④ 若 $v_{m+1} = 0$, 则 $x^* = x^{(0)} + z^{(m)}$, 停止.
若 $v_{m+1} \neq 0$, $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 < \varepsilon$, 取 $x^* \approx x^{(0)} + z^{(m)}$, 停止.
若 $v_{m+1} \neq 0$, $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 \geqslant \varepsilon$, 取 $m = m + 1$, 转 ③.

循环型 Arnoldi 算法：固定 $m$, 不断迭代.

① 给定 $m << n$, $\varepsilon > 0$, $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$, 计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$,
取 $k = 0$.

② 由 Arnoldi 算法求解 $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$. 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + z^{(m)}$.

③ 若 $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 < \varepsilon$, 取 $x^* \approx x^{(k+1)}$, 停止.
否则, 令 $r^{(0)} = b - Ax^{(k+1)}$, 取 $k = k + 1$, 转 ②.

# Arnoldi 算法

**对称 Lanczos 算法**：若 $A$ 对称, 则由 $V_m^T A V_m = H_m$ 知 $H_m$ 对称, 此时的 Arnoldi 算法又称为对称 Lanczos 算法.

由 $H_m$ 是上 Hessenberg 矩阵, 知 $H_m$ 是对称的三对角矩阵, 即

$$H_m = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & & & & \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & h_{m-1,m-2} & h_{m-1,m-1} & h_{m-1,m} \\ & & & & h_{m,m-1} & h_{mm} \end{pmatrix}$$

# Arnoldi 算法

注意到 $h_{jk} = h_{kj}$, 记 $\alpha_k = h_{kk}$, $\beta_k = h_{k,k-1} = h_{k-1,k}$, 用 $T_m$ 表示 $H_m$, 则有

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{m-1} & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & & \beta_m & \alpha_m \end{pmatrix}$$

这时

$$Av_k = \sum_{i=1}^{k+1} h_{ik} v_i, \quad k = 1, 2, \cdots, m$$

可简化为

$$\begin{cases} \beta_1 = 0, \\ \beta_{k+1} v_{k+1} = Av_k - \alpha_k v_k - \beta_k v_{k-1}, \quad k = 1, 2, \cdots, m \end{cases}$$

对称 Lanczos 算法：

① 给定 $\varepsilon > 0$, $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$.

② 计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, \beta = \|r^{(0)}\|$, $v_1 = r^{(0)}/\beta$, 取 $m = 1$.

③ 由 Arnoldi 过程求解 $\alpha_i, \beta_i \ (i = 1, 2, \cdots, m)$ 及 $\{v_i\}_{i=1}^m$.
如果 $T_m$ 奇异, 更换 $x^{(0)}$, 转 ②.

④ 用追赶法解三对角方程组 $T_m y = \beta e_1$, 得到 $y^{(m)}$, 计算 $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$.

⑤ 若 $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 < \varepsilon$, 取 $x^* = x^{(0)} + z^{(m)}$, 停止.
否则, 取 $m = m + 1$, 转 ③.

# GMRES 算法

**大型非对称稀疏线性方程组**

$$Az = r^{(0)}, \quad |A| \neq 0$$

选取 $m$, $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$, 使得 $r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 线性无关. 由于 $A$ 非奇异, 故 $Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^m r^{(0)}$ 也线性无关.

# GMRES 算法

大型非对称稀疏线性方程组

$$Az = r^{(0)}, \quad |A| \neq 0$$

选取 $m$, $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$, 使得 $r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}$ 线性无关. 由于 $A$ 非奇异, 故 $Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^m r^{(0)}$ 也线性无关.

广义极小残差算法 (Generalized Minimal Residual, GMRES):

$$K_m = \text{span}\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \cdots, A^{m-1}r^{(0)}\},$$
$$L_m = \text{span}\{Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \cdots, A^m r^{(0)}\}.$$

记 $L_m = AK_m$, 取 $z^{(m)} \in K_m$ 使得 $(r^{(0)} - Az^{(m)}) \perp L_m$.

# GMRES 算法

## 定理

对于给定的 $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$ 和正整数 $m$, $z^{(m)} \in K_m$ 使得 $\left(r^{(0)} - Az^{(m)}\right) \perp L_m$ 的充分必要条件是

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = \min_{z\in K_m} \|r^{(0)} - Az\|_2.$$

**证** 必要性. 设 $z^{(m)} \in K_m$ 使得 $\left(r^{(0)} - Az^{(m)}\right) \perp L_m$, 则对任意的 $z \in K_m$ 有

$$\begin{aligned}\|r^{(0)} - Az\|_2^2 &= \|r^{(0)} - Az^{(m)} - A(z - z^{(m)})\|_2^2 \\ &= \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2^2 + \|A(z - z^{(m)})\|_2^2 \\ &\quad - 2\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, A(z - z^{(m)})\right),\end{aligned}$$

由 $z, z^{(m)} \in K_m$ 知 $z - z^{(m)} \in K_m$, $A(z - z^{(m)}) \in AK_m = L_m$.

# GMRES 算法

又由 $r^{(0)} - Az^{(m)} \perp L_m$ 知,

$$\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, A(z - z^{(m)})\right) = 0,$$

因此

$$\begin{aligned} \|r^{(0)} - Az\|_2^2 &= \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2^2 + \|A(z - z^{(m)})\|_2^2 \\ &\geqslant \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2^2. \end{aligned}$$

# GMRES 算法

又由 $r^{(0)} - Az^{(m)} \perp L_m$ 知,

$$\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, A(z - z^{(m)})\right) = 0,$$

因此

$$\begin{aligned} \|r^{(0)} - Az\|_2^2 &= \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2^2 + \|A(z - z^{(m)})\|_2^2 \\ &\geqslant \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2^2. \end{aligned}$$

充分性：若 $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = \min\limits_{z \in K_m} \|r^{(0)} - Az\|_2$, 则对任意的 $v \in K_m$, $\alpha \in \mathbf{R}$, 都有

$$\|r^{(0)} - A(z^{(m)} + \alpha v)\|_2^2 \geqslant \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2^2.$$

记

$$\begin{aligned} q(\alpha) &= \|r^{(0)} - A(z^{(m)} + \alpha v)\|_2^2 \\ &= \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2^2 - 2\alpha\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, Av\right) + \alpha^2\|Av\|_2^2. \end{aligned}$$

由假定知 $\alpha = 0$ 时, $q(\alpha)$ 达到最小, 即 $\alpha = 0$ 为 $q(\alpha)$ 的极小值点.

$$q'(\alpha) = -2\big(r^{(0)} - Az^{(m)}, Av\big) + 2\alpha\|Av\|_2^2,$$

于是有

$$q'(0) = -2\big(r^{(0)} - Az^{(m)}, Av\big) = 0.$$

由 $v \in K_m$ 及 $\alpha \in \mathbf{R}$ 的任意性, 可知 $r^{(0)} - Az^{(m)} \perp AK_m$, 即

$$r^{(0)} - Az^{(m)} \perp L_m.$$

由假定知 $\alpha = 0$ 时, $q(\alpha)$ 达到最小, 即 $\alpha = 0$ 为 $q(\alpha)$ 的极小值点.

$$q'(\alpha) = -2\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, Av\right) + 2\alpha\|Av\|_2^2,$$

于是有

$$q'(0) = -2\left(r^{(0)} - Az^{(m)}, Av\right) = 0.$$

由 $v \in K_m$ 及 $\alpha \in \mathbf{R}$ 的任意性, 可知 $r^{(0)} - Az^{(m)} \perp AK_m$, 即

$$r^{(0)} - Az^{(m)} \perp L_m.$$

GMRES: 求 $z^{(m)}$ 等价于求解极小化问题 $\min\limits_{z \in K_m} \|r^{(0)} - Az\|_2$

# GMRES 算法

利用 Arnoldi 过程建立 $K_m$ 中的一组标准正交基 $\{v_i\}_{i=1}^m$ 及 $v_{m+1}$. 记

$$\overline{H}_m = \begin{pmatrix} H_m \\ h_{m+1,m}e_m^T \end{pmatrix}, \quad \text{其中 } e_m = (0, 0, \cdots, 0, 1)^T \in \mathbf{R}^m,$$

则

$$\begin{aligned} AV_m &= V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T \\ &= (V_m, v_{m+1}) \begin{pmatrix} H_m \\ h_{m+1,m}e_m^T \end{pmatrix} \\ &= V_{m+1} \overline{H}_m. \end{aligned}$$

记 $z \in K_m$, 则存在唯一的 $y \in \mathbf{R}^m$, 使得 $z = V_m y$.

# GMRES 算法

当 $v_{m+1} \neq 0$ 时, 注意到 $V_{m+1}^T V_{m+1} = I$, 因此

$$
\begin{aligned}
\|r^{(0)} - Az\|_2 &= \|r^{(0)} - AV_m y\|_2 = \|r^{(0)} - V_{m+1}\overline{H}_m y\|_2 \\
&= \|V_{m+1}V_{m+1}^T r^{(0)} - V_{m+1}\overline{H}_m y\|_2 \\
&= \|V_{m+1}\beta\bar{e}_1 - V_{m+1}\overline{H}_m y\|_2 \\
&= \|V_{m+1}\big(\beta\bar{e}_1 - \overline{H}_m y\big)\|_2 \\
&= \|\beta\bar{e}_1 - \overline{H}_m y\|_2, \quad \bar{e}_1 = (1, 0, \cdots, 0)^T \in \mathbf{R}^{m+1}.
\end{aligned}
$$

# GMRES 算法

当 $v_{m+1} \neq 0$ 时, 注意到 $V_{m+1}^T V_{m+1} = I$, 因此

$$
\begin{aligned}
\|r^{(0)} - Az\|_2 = \|r^{(0)} - AV_m y\|_2 &= \|r^{(0)} - V_{m+1}\overline{H}_m y\|_2 \\
&= \|V_{m+1}V_{m+1}^T r^{(0)} - V_{m+1}\overline{H}_m y\|_2 \\
&= \|V_{m+1}\beta\overline{e}_1 - V_{m+1}\overline{H}_m y\|_2 \\
&= \|V_{m+1}\left(\beta\overline{e}_1 - \overline{H}_m y\right)\|_2 \\
&= \|\beta\overline{e}_1 - \overline{H}_m y\|_2, \quad \overline{e}_1 = (1, 0, \cdots, 0)^T \in \mathbf{R}^{m+1}.
\end{aligned}
$$

当 $v_{m+1} = 0$ 时, 有 $AV_m = V_m H_m$, 因此

$$
\begin{aligned}
\|r^{(0)} - Az\|_2 = \|r^{(0)} - AV_m y\|_2 &= \|r^{(0)} - V_m H_m y\|_2 \\
&= \|V_m(\beta e_1 - H_m y)\|_2 \\
&= \|\beta e_1 - H_m y\|_2, \quad e_1 = (1, 0, \cdots, 0)^T \in \mathbf{R}^m.
\end{aligned}
$$

# GMRES 算法

因此

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = \min_{z \in K_m} \|r^{(0)} - Az\|_2 = \min_{y \in \mathbf{R}^m} \|\beta \overline{e}_1 - \overline{H}_m y\|_2.$$

于是问题转化为求解最小二乘问题

$$\min_{y \in \mathbf{R}^m} \|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2, \quad e_1 \in \mathbf{R}^{m+1}.$$

因此

$$\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 = \min_{z \in K_m} \|r^{(0)} - Az\|_2 = \min_{y \in \mathbf{R}^m} \|\beta \overline{e}_1 - \overline{H}_m y\|_2.$$

于是问题转化为求解最小二乘问题

$$\min_{y \in \mathbf{R}^m} \|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2, \quad e_1 \in \mathbf{R}^{m+1}.$$

精确解：$\beta e_1 - \overline{H}_m y = 0, \quad \overline{H}_m \in \mathbf{R}^{m+1,m}$,

$$\beta \overline{H}_m^T e_1 = \overline{H}_m^T \overline{H}_m y \quad \Longrightarrow \quad y^{(m)} = \beta \left(\overline{H}_m^T \overline{H}_m\right)^{-1} \overline{H}_m^T e_1.$$

因此 GMRES 不会发生恶性中断现象.

# GMRES 算法

原理型 GMRES 算法：不断增大 $m$ 使得 $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 < \varepsilon$.

① 给定 $\varepsilon > 0$, $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$, 取 $m = 1$.

② 计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|_2$.

③ 由 Arnoldi 过程求出 $\{v_i\}_{i=1}^m$, $v_{m+1}$ 及 $\overline{H}_m$.

④ 求解最小二乘问题 $\min\limits_{y \in \mathbf{R}^m} \|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2$ 得到 $y^{(m)}$.

⑤ $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$.

若 $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 < \varepsilon$, 取 $x^* \approx x^{(0)} + z^{(m)}$, 停止.

若 $\|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 \geqslant \varepsilon$, 取 $m = m + 1$, 转 ③.

# GMRES 算法

**循环型 GMRES 算法**： 固定 $m$, 不断迭代.

① 给定 $\varepsilon > 0$, 选取适当的 $m$ $(m << n)$ 及 $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$.

② 计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|_2$.

③ 由 Arnoldi 过程求出 $\{v_i\}_{i=1}^m$, $v_{m+1}$ 及 $\overline{H}_m$.

④ 求解最小二乘问题 $\min\limits_{y\in\mathbf{R}^m} \|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2$ 得到 $y^{(m)}$.

⑤ $z^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 令 $x^{(m)} = x^{(0)} + z^{(m)}$, 计算 $r^{(m)} = b - Ax^{(m)}$.

⑥ 若 $\|r^{(m)}\|_2 < \varepsilon$, 取 $x^* \approx x^{(m)}$, 停止.

否则 $x^{(0)} = x^{(m)}$, $r^{(0)} = r^{(m)}$, $\beta = \|r^{(0)}\|_2$, 转 ③.

# GMRES 算法

## 定理

设线性方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵 $A$ 是对称正定矩阵, 则对任意给定的 $m \geqslant 1$ 和任意的 $x^{(0)}$, GMRES (m) 收敛.

# GMRES 算法

## 定理

设线性方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵 $A$ 是对称正定矩阵, 则对任意给定的 $m \geqslant 1$ 和任意的 $x^{(0)}$, GMRES (m) 收敛.

## 定理

设线性方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵 $A$ 可对角化, 即存在非奇异矩阵 $X$ 使得 $A = X^{-1}\Lambda X$, 其中 $\Lambda = \text{diag}\,(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$, $\lambda_i\ (i = 1, 2, \cdots, n)$ 为 $A$ 的特征值, 则当 $m$ 充分大时, 对任意的 $x^{(0)}$, GMRES (m) 收敛.

# 最小二乘问题

最小二乘问题 $\min_{y\in\mathbf{R}^m} \|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2$ 的求解:

由 rank$(V_m) = m$ 及 $A$ 可逆知 rank$(AV_m) = m$.

再由 $AV_m = V_m\overline{H}_m$ 知 rank$(\overline{H}_m) = m$.

# 最小二乘问题

最小二乘问题 $\min\limits_{y\in\mathbf{R}^m} \|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2$ 的求解:

由 $\operatorname{rank}(V_m) = m$ 及 $A$ 可逆知 $\operatorname{rank}(AV_m) = m$.

再由 $AV_m = V_m\overline{H}_m$ 知 $\operatorname{rank}(\overline{H}_m) = m$.

由于 $\overline{H}_m$ 是 $(m+1)\times m$ 阶上 Hessenberg 矩阵, 对 $\overline{H}_m$ 和 $\beta e_1$ 同时作 Givens 变换有

$$P\overline{H}_m = \begin{pmatrix} R \\ 0^T \end{pmatrix}, \quad P(\beta e_1) = (c_1, c_2, \cdots, c_{m+1})^T,$$

其中 $P$ 为 $(m+1)$ 阶正交矩阵, $R$ 为可逆的上三角矩阵.

因此

$$
\begin{aligned}
\|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2^2 &= \|P(\beta e_1 - \overline{H}_m y)\|_2^2 \\
&= \left\| \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \\ c_{m+1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} R \\ 0^T \end{pmatrix} y \right\|^2 \\
&= \left\| \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} - Ry \right\|^2 + c_{m+1}^2.
\end{aligned}
$$

# 最小二乘问题

由此可知, $\min_{y \in \mathbf{R}^m} \|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2$ 的解 $y^{(m)}$ 是上三角方程组

$$Ry = (c_1, c_2, \cdots, c_m)^T$$

的唯一解, 且 $\|\beta e_1 - \overline{H}_m y^{(m)}\|_2 = |c_{m+1}|$. 因此

$$\begin{aligned}
\|b - Ax^{(m)}\|_2 &= \|r^{(0)} - Az^{(m)}\|_2 \\
&= \min_{y \in \mathbf{R}^m} \|\beta e_1 - \overline{H}_m y\|_2 \\
&= \|\beta e_1 - \overline{H}_m y^{(m)}\|_2 = |c_{m+1}|.
\end{aligned}$$

可将迭代终止准则 $\|b - Ax^{(m)}\|_2 < \varepsilon$ 改为 $|c_{m+1}| < \varepsilon$, 更简便.

迭代法 (大型稀疏矩阵): $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g, \quad k = 0, 1, \cdots$

- 基本迭代法
  - Jacobi
  - Gauss-Seidel
  - SOR
- 迭代法收敛性
  - $\|B\| < 1 \implies$ 迭代法收敛
  - $\left.\begin{array}{l} B^k \to 0\ (k \to \infty) \\ \rho(B) < 1 \end{array}\right\} \iff$ 迭代法收敛
  - $0 < \omega < 2 \impliedby$ SOR 收敛
  - $A$ 严格对角占优 $\xRightarrow{0<\omega\leqslant 1}$ Jacobi, G-S, SOR 收敛
  - $A$ 对称正定 $\xLeftrightarrow{2D-A\ \text{对称正定}}$ Jacobi 收敛
  - $A$ 对称正定 $\xLeftrightarrow{0<\omega\leqslant 2}$ SOR 收敛

# 本章总结

- 共轭梯度法 ($A$ 对称正定)
  - 只涉及矩阵与向量乘积、向量内积运算
  - 理论上最多 $n$ 次可得准确解
  - 良态问题迭代次数少
- Krylov 子空间法 (Galerkin 原理)
  - Arnoldi 算法
    - 原理型 Arnoldi 算法
    - 循环型 Arnoldi 算法
    - 对称 Lanczos 算法
  - GMRES 算法
    - 原理型 GMRES 算法
    - 循环型 GMRES 算法
    - 最小二乘问题的求解