要求：转换成 Jupyter 文档，按自己的期望有条件选做

1 内容

1. 共轭向量集
   定义: 设 A 是对称正定矩阵，若向量 p 和 q 满足 $p^T Aq = 0$, 则称这两个向量是 A 共轭的. 例 1: 对称正定矩阵
   $$A = \begin{pmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$
   验证 $p_1 = (1, 0, 0)^T, p_2 = (-\frac{3}{4}, 1, 0)^T, p_3 = (-\frac{3}{7}, \frac{4}{7}, 1)^T$

2. 利用 A 共轭向量集求解线性方程组
   由于 A 共轭向量组 $p_1, p_2, \ldots, p_n$ 是线性无关的，因此构成了向量空间 R^n 的一组基。下面的定理表明，线性方程组 $Ax = b$ 的解可以由这组基线性表示，即
   $$x_n = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \ldots + \alpha_n p_n$$
   而线性组合的系数可以由 (2) 式唯一确定。
   定理: 设 A 是对称正定矩阵，$p_1, p_2, \ldots, p_n$ 是一个 A 共轭集。任意给定初始向量 x_0，若不考虑舍入误差，则由
   $$\alpha_k = \frac{p_k^T (b - Ax_{k-1})}{p_k^T A p_k}, x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k, k = 1, 2, \ldots, n$$
   得到的 x_n 是线性方程组 $Ax = b$ 的解
   例 2: 利用例 1 中的 A 共轭向量集求解线性方程组
   $$\begin{pmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 24 \\ 30 \\ -24 \end{pmatrix}$$

3. 共轭梯度法
   给定初始值 x_0;
   $r_0 = b - Ax_0$
   $p_1 = r_0$
   $for \quad k = 1, 2, \ldots,$
   $\quad \alpha_k = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{p_k^T A p_k}$
   $\quad x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k$
   $\quad r_k = b - Ax_k = r_{k-1} - \alpha_k A p_k$
   $\quad if \quad \|r_k\| \leq \epsilon \quad then$
   停止计算
   end if
   $\quad \beta_k = \frac{r_k^T r_k}{r_{k-1}^T r_{k-1}}$
   $\quad p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k$
   end for

例 3: 用共轭梯度法求解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 0.2 & 0.1 & 1 & 1 & 0 \\ 0.1 & 4 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 60 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 8 & 4 \\ 0 & -1 & -2 & 4 & 700 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

4. 预处理共轭梯度法

给定初始值 x_0;

$r_0 = b - Ax_0$

$z_0 = M^{-1}r_0$

$p_1 = z_0$

$for \quad k = 1, 2, \dots,$

$\alpha_k = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{p_k^T A p_k}$

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

$r_k = b - Ax_k = r_{k-1} - \alpha_k A p_k$

$if \quad \|r_k\| \leq \epsilon \quad then$

停止计算

end if

$z_k = M^{-1}r_k$

$\beta_k = \frac{r_k^T r_k}{r_{k-1}^T r_{k-1}}$

$p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k$ end for

例 4: 取 $M = D$，用预处理共轭梯度法求解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 0.2 & 0.1 & 1 & 1 & 0 \\ 0.1 & 4 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 60 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 8 & 4 \\ 0 & -1 & -2 & 4 & 700 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

2 练习

1. 编写程序用共轭梯度法求解线性方程

$$(1)\begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 17 & 2.5 & 5 \\ 1 & 2.5 & 4.5 & 3 \\ 2 & 5 & 3 & 7 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -1 \\ 17.5 \\ 0 \\ 7 \end{pmatrix}$$

$$(2)\begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 & 0 & -1 \\ -2 & 3 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 5 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & 10 & 4 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & 10 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ X_5 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \\ 11 \\ 13 \end{pmatrix}$$

2. 考虑线性方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

(1) 分别用追赶法，Jacobi 迭代法，Gauss—Seidel 迭代法,SOR 迭代法（松弛因子 $w=2-\frac{2\pi}{n+1}$）以及共轭梯度法求解. 迭代法停止迭代条件为 $\frac{\|x_{k+1}-x_k\|}{\|x_{k+1}\|}<1\times10^{-5}$

(2) 分别取 $n=100,200,300,\ldots 1000$, 用最小二乘法分析这几种方法的计算量（乘除法次数）与 n 的关系

3 作业

1. 预处理共轭梯度法

实验目的：共轭梯度法与预处理共轭梯度法

实验内容：考虑线性代数方程组 $Ax=b$, 其中 b 为纯 1 向量。系数矩阵 $A=(a_{n,m})$ 的阶数 $N=(N_x+1)(N_y+1)$, 其中 N_x 和 N_y 为正整数; 其元素按如下方式确定: 对于任意正整数 $n=1,2,\ldots,N$, 有

$$a_{n,m}=\begin{cases} 4 & m=n \\ -1 & m=n-(N_x+1)\; m>0 \\ -1 & m=n+(N_x+1)\; m>0 \\ -1 & m=n-1\; m>0 \\ -1 & m=n+1\; m>0 \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

(1) 编写程序, 分别用共轭梯度法与预处理共轭梯度法 (取预处理矩阵 M 为线性方程组系数矩阵的 A 的三条主对角元素所组成的三对角阵)，求解该方程组。要求程序以 N_x 和 N_y，最大迭代步数 K 和控制精度 ϵ 为输入参数：停止迭代条件为 $\frac{\|b-Ax_k\|}{\|b\|}<\epsilon$

(2) 令 $\epsilon=10^{-6}, N_x=N_y=k$, 分别取 $n=100,200,300,\ldots,1000$, 用最小二乘法分析共轭迭代法的迭代次数与 k 的关系