



数值线性代数与算法

第三章 线性方程组的矩阵分裂迭代法





在科学与工程计算中, 很多问题往往最终归结为求解一个线性方程组问题, 如结构分析、网络分析、大地测量、数据分析, 以及用有限差分法或有限元法求解微分方程边值问题等. 因此, 研究求解大规模线性方程组快速、稳定的数值算法已成为当前科学与工程计算的核心问题之一. 本章主要讨论求解线性方程组

$$Ax = b \quad (3.1)$$

的迭代方法, 其中 A 是 n 阶可逆矩阵, b 是 n 维列向量. 在实际应用中, 矩阵 A 的阶数 n 一般很大, 通常采用迭代法来求解. 迭代法一般只涉及矩阵与向量的乘法运算. 本章介绍迭代法的一些基本理论, 以及基于矩阵分裂的几种经典迭代法, 如 Jacobi 迭代法、Gauss-Seidel 迭代法以及松弛型迭代法、HSS 分裂迭代法等. 当迭代矩阵的谱半径接近 1 时, 迭代的收敛速度变得很缓慢, 此时可用加速技巧对这些迭代法进行加速.



Back

Close



§3.1 迭代法的一般理论

§3.1.1 迭代法的定义与分类

迭代法本质上是一个递推公式, 或者说是基于算子的重复利用. 一般地, 求解式 (3.1) 的迭代法定义如下.

定义 3.1 求解式 (3.1) 的迭代法就是寻找一个式 (3.1) 的近似解序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$, 使得

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(0)} = \phi_0(\mathbf{A}, \mathbf{b}), \\ \mathbf{x}^{(k)} = \phi_k(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(k-1)}; \mathbf{A}, \mathbf{b}), \quad k = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (3.2)$$

式中: $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ 称为迭代序列; $\{\phi_k\}_{k=0}^{\infty}$ 称为迭代算子序列; k 为迭代指标或迭代步数.

定义 3.2 若对某个整数 $s > 0$, $k \geq s$ 时, ϕ_k 与 k 无关, 则称此迭代法为定常的, 否则称为非定常的. 若对任意的 k , ϕ_k 是





$\boldsymbol{x}^{(0)}, \boldsymbol{x}^{(1)}, \dots, \boldsymbol{x}^{(k-1)}$ 的线性函数, 则称迭代法是线性的, 否则称为非线性的.

按照定义 3.2, 可以将迭代法分为线性定常迭代法、线性非定常迭代法、非线性定常迭代法、非线性非定常迭代法四类.

构造迭代法的一个基本思路是将式 (3.1) 变成如下形式的同解不动点方程组:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{f}, \quad (3.3)$$

然后任取一个初始点 $\boldsymbol{x}^{(0)}$, 由迭代公式

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.4)$$

产生迭代序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$, 其中 \boldsymbol{B} 称为迭代矩阵. 当然, 若 \boldsymbol{B} 与迭代指标 k 有关, 则迭代为非定常迭代, 否则为定常迭代. 可以构造各种可能的迭代矩阵 \boldsymbol{B} , 但必须保证迭代序列收敛 (收敛性问题),





且收敛到方程组 (3.1) 的解 \boldsymbol{x}^* (相容性问题), 并由此确定出有效的迭代法. 一般地, 迭代序列的收敛过程是无限的, 而实际计算中只能且只需得到满足精度要求的某个近似解, 因此还要求适当地选取收敛准则, 这样, 一个迭代法才算完整.

§3.1.2 收敛性与收敛速度

设 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 是 \mathbb{C}^n 中的某个向量序列, $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{C}^n$ 是某个向量, 有如下定义:

定义 3.3 若按某种范数有 $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\| = 0$, 则称向量序列收敛于 \boldsymbol{x}^* , 并记为 $\lim_{k \rightarrow \infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$.

事实上, $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\| = 0$ 当且仅当对 $i = 1, 2, \dots, n$, $\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^*$.



Back

Close



记线性方程组 (3.1) 的精确解为 \boldsymbol{x}^* , 第 k 步迭代的误差向量记为 $\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}^{(k)}$, 相应的残差向量记为 $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}$.

定义 3.4 设 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 是某个迭代法产生的迭代序列, 若对任意的初始点 $\boldsymbol{x}^{(0)}$, 序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 均收敛到一个与 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 无关的极限, 则称此迭代法是收敛的. 若在精确运算下, 存在某个正整数 l , 使得 $\boldsymbol{x}^{(l)} = \boldsymbol{x}^*$, 则称此迭代法是精确收敛的或有限终止的.

下面给出收敛速度的概念. 注意到迭代法 (3.4) 的误差传播方程为

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{e}^{(k-1)} = \dots = \boldsymbol{B}^k\boldsymbol{e}^{(0)}, \quad (3.5)$$

这里, $\boldsymbol{e}^{(0)} = \boldsymbol{x}^{(0)} - \boldsymbol{x}^*$ 是解的初始近似 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 与精确解的误差. 注意到迭代法 (3.4) 的误差向量 $\boldsymbol{e}^{(k)}$ 与右端项 \boldsymbol{f} 无关, 故其收敛性和收敛速度完全由迭代矩阵 \boldsymbol{B} 确定.



Back

Close



引进误差向量后, 迭代的收敛问题就等价于误差向量序列收敛于 $\mathbf{0}$ 的问题.

欲使迭代法 (3.4) 对任意的初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$ 都收敛, 误差向量 $\mathbf{e}^{(k)}$ 应对任意的初始误差 $\mathbf{e}^{(0)}$ 都收敛于零向量. 于是迭代法 (3.4) 对任意的初始向量都收敛的充分必要条件是

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{B}^k = \mathbf{O}. \quad (3.6)$$

定理 3.1 迭代法 (3.4) 对任意的初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$ 都收敛的充分必要条件是 $\rho(\mathbf{B}) < 1$, 这里 $\rho(\mathbf{B})$ 表示 \mathbf{B} 的谱半径.

证明 必要性. 设对初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$, 迭代法 (3.4) 是收敛的, 那么式 (3.6) 成立. 由定理 1.17(1), 对于任意的矩阵范数, 有

$$\rho(\mathbf{B}) \leq \|\mathbf{B}\|.$$





若 $\rho(\mathbf{B}) < 1$ 不成立, 即 $\rho(\mathbf{B}) \geq 1$, 则

$$\|\mathbf{B}^k\| \geq \rho(\mathbf{B}^k) = [\rho(\mathbf{B})]^k \geq 1,$$

这与式 (3.6) 矛盾.

充分性. 若 $\rho(\mathbf{B}) < 1$, 则存在一个正数 ε , 使得

$$\rho(\mathbf{B}) + 2\varepsilon < 1.$$

根据定理 1.17 (2), 存在一种矩阵范数 $\|\mathbf{B}\|_\varepsilon$, 使

$$\|\mathbf{B}\|_\varepsilon < \rho(\mathbf{B}) + \varepsilon < 1 - \varepsilon.$$

故得

$$\|\mathbf{B}^k\|_\varepsilon \leq \|\mathbf{B}\|_\varepsilon^k < (1 - \varepsilon)^k,$$

从而当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\|\mathbf{B}^k\|_\varepsilon \rightarrow 0$, 即 $\mathbf{B}^k \rightarrow 0$. 证毕.

□



Back

Close



由此可见, 迭代是否收敛仅与迭代矩阵的谱半径有关, 即仅与方程组的系数矩阵和迭代格式的构造有关, 而与方程组的右端向量 b 及初始向量 $x^{(0)}$ 无关.

推论 3.1 若迭代矩阵 B 的某种算子范数 $\|B\|_p < 1$, 则迭代法 (3.4) 收敛.

设 B 有 n 个线性无关的特征向量 u_1, u_2, \dots, u_n (可作为 n 维线性空间的一组基), 相应的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. 那么在这组基下, 初始误差向量 $e^{(0)}$ 可以线性表示为

$$e^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i u_i,$$

将其代入式 (3.5), 得

$$e^{(k)} = B^k e^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i B^k u_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k u_i. \quad (3.7)$$



Back

Close



故当 $\rho(\mathbf{B}) < 1$ 时, 其值越小, 迭代法收敛越快. 因此, 用 $\rho(\mathbf{B})$ 来刻画迭代法 (3.4) 的收敛速度是合适的.

另外, 对任何向量范数及相应的矩阵范数, 根据式 (3.5), 利用范数的性质, 有

$$\|\mathbf{e}^{(k)}\|_p \leq \|\mathbf{B}^k\|_p \|\mathbf{e}^{(0)}\|_p.$$

可见, $\|\mathbf{B}^k\|_p (< 1)$ 也给出了一种尺度, 它表示经 k 次迭代后误差向量范数减少的程度. 由此可定义平均收敛速度为

$$R_k(\mathbf{B}) = -\frac{1}{k} \log_{10} \|\mathbf{B}^k\|_p.$$

可以证明, 若 $\rho(\mathbf{B}) < 1$, 则有

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left(\|\mathbf{B}^k\|_p \right)^{\frac{1}{k}} = \rho(\mathbf{B}).$$

由于这一性质, 可定义渐近收敛速度为

$$R(\mathbf{B}) = \lim_{k \rightarrow \infty} R_k(\mathbf{B}) = -\log_{10} \rho(\mathbf{B}).$$



Back

Close



根据这个定义, $\rho(\mathbf{B})$ 越小, $R(\mathbf{B})$ 越大, 迭代法收敛越快. 值得注意的是, 尽管 $R_k(\mathbf{B})$ 依赖于所用的范数, 但 $R(\mathbf{B})$ 却与的无关. 因此, 通常将 $R(\mathbf{B})$ 称为收敛速度.

如果要使误差向量的范数减少一个因子 10^{-k_1} ($k_1 > 0$), 需迭代 k 次, 则可粗略求得 k 是满足不等式

$$k \geq k_1 / R(\mathbf{B})$$

的最小正整数, 即所要迭代次数与收敛速度成反比.

迭代法 (3.4) 是收敛的, 还可以给出近似解与准确解的误差估计.

定理 3.2 设迭代法 (3.4) 的迭代矩阵 \mathbf{B} 满足 $\|\mathbf{B}\| = q < 1$,



Back

Close

则迭代法是收敛的, 且有误差估计式

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^{(1)}\|, \quad (3.8)$$

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{q}{1-q} \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\|. \quad (3.9)$$



12/183

证明 由式 (3.5), 有

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| = \|\mathbf{e}^{(k)}\| \leq \|\mathbf{B}^k\| \cdot \|\mathbf{e}^{(0)}\| \leq q^k \|\mathbf{e}^{(0)}\|.$$

注意到 $\mathbf{x}^* = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\mathbf{f}$, 于是

$$\begin{aligned} \|\mathbf{e}^{(0)}\| &= \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\| = \|\mathbf{x}^{(0)} - (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\mathbf{f}\| \\ &= \|(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}[(\mathbf{I} - \mathbf{B})\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{f}]\| \\ &= \|(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}(\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^{(1)})\| \\ &\leq \|(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\| \cdot \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^{(1)}\|. \end{aligned}$$



Back

Close



因为 $\|B\| < 1$, 根据定理 1.19, 有

$$\|(I - B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|} = \frac{1}{1 - q},$$

于是

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

下证式 (3.9). 由于

$$\begin{aligned} e^{(k)} &= x^{(k)} - x^* = (Bx^{(k-1)} + f) - (Bx^* + f) \\ &= Bx^{(k-1)} - Bx^* = Bx^{(k-1)} - B(I - B)^{-1}f \\ &= B(I - B)^{-1}[(I - B)x^{(k-1)} - f] \\ &= B(I - B)^{-1}(x^{(k-1)} - x^{(k)}), \end{aligned}$$

利用定理 1.19, 对上式两边取范数即得式 (3.9). 证毕. \square

在理论上, 可用式 (3.8) 估计近似解达到某一精度所需要的迭



Back

Close



代次数 (但由于 q 不易计算, 故计算实践中很少使用). 而式 (3.9) 则表明, 只要 $\|B\|$ 不很接近于 1, 即可用 $\{x^{(k)}\}$ 的相邻两项之差的范数 $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$ 来估计 $\|x^{(k)} - x^*\|$ 的大小, 这为用 $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$ 作为算法的终止准则值提供了理论上的依据.

下面简要介绍一下矩阵分裂迭代法的基本知识. 设矩阵 A 非奇异且具有分裂

$$A = M - N, \quad (3.10)$$

其中 M 是非奇异的, 则方程组 (3.1) 等价于

$$Mx = Nx + b. \quad (3.11)$$

构造迭代法

$$Mx^{(k+1)} = Nx^{(k)} + b, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.12)$$



Back

Close



求解方程组 (3.1), 这种方法统称为矩阵分裂迭代法, 许多迭代法都可以写成这样的形式, 如后面要介绍的 Richardson 迭代法、Jacobi 迭代法、Gauss-Seidel 迭代法、SOR 迭代法等. 在迭代法 (3.12) 中, 由于每一次迭代需要解一个以 M 为系数矩阵的方程组, 故一般要求非奇异矩阵 M 的形式比较简单, 如对角矩阵、三对角矩阵、上(下)三角形矩阵等. 从后面的讨论知道, 当 M 是 A 的一个很好的近似时, 迭代解将很快收敛到方程组 (3.1) 的真解.

显然, 迭代法 (3.12) 的迭代矩阵为 $B = M^{-1}N$, 并且它是线性定常迭代法. 根据定理 3.1 可知线性定常迭代法收敛的充要条件是

$$\rho(B) < 1. \quad (3.13)$$



Back

Close

§3.1.3 相容性和敏感性分析

假设由一个迭代法所得的迭代序列是收敛的, 问题是它是否收敛到待求解方程组的解. 对于线性定常迭代法, 只要适当构造迭代矩阵, 这不是个太大的问题. 但对非定常迭代法, 就必须回答这问题. 需要指出, 对于非定常迭代法, 每一步迭代矩阵的谱半径 $\rho(\mathbf{B}_k) < 1$ 既不是收敛的必要条件, 也不是收敛的充分条件.

例 3.1 考虑方程组 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, 其中

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

其精确解为

$$\mathbf{x}^* = \begin{bmatrix} -1/3 \\ 2/3 \end{bmatrix}.$$



非定常迭代法

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_1 \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}_1, & k \text{ 为偶数,} \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_2 \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}_2, & k \text{ 为奇数,} \end{cases} \quad (3.14)$$

式中:

$$\mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}_1 = \begin{bmatrix} -1/3 \\ 4/3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}_2 = \begin{bmatrix} -5/3 \\ 2/3 \end{bmatrix}.$$

显然, 每个迭代法均收敛, 因为 $\rho(\mathbf{B}_1) = \rho(\mathbf{B}_2) = 0$. 然而, 有

$$\mathbf{B}_k = \begin{cases} \mathbf{B}_1(\mathbf{B}_2\mathbf{B}_1)^{k/2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 2^{k+1} & 0 \end{bmatrix}, & k \text{ 为偶数,} \\ (\mathbf{B}_2\mathbf{B}_1)^{(k+1)/2} = \begin{bmatrix} 2^{k+1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, & k \text{ 为奇数,} \end{cases}$$

从而式 (3.13) 不成立.



17/183



Back

Close



设

$$\mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \mathbf{f}_1 = \begin{bmatrix} 1/3 \\ -2/3 \end{bmatrix}, \mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{bmatrix}, \mathbf{f}_2 = \begin{bmatrix} -1/4 \\ 1/2 \end{bmatrix}.$$

显然前一方法不收敛. 然而, 有

$$\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{B}_k = \begin{cases} \mathbf{B}_1 (\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1)^{k/2} = \begin{bmatrix} (1/2)^{(k-2)/2} & 0 \\ 0 & (1/2)^{(k-2)/2} \end{bmatrix}, & k \text{ 为偶数,} \\ (\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1)^{(k+1)/2} = \begin{bmatrix} (1/2)^{(k+1)/2} & 0 \\ 0 & (1/2)^{(k+1)/2} \end{bmatrix}, & k \text{ 为奇数,} \end{cases}$$

从而 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{B}_k = \mathbf{O}$, 且非定常迭代法 (3.14) 收敛.



Back

Close



下面考虑一种非定常迭代法, 其每一步使用公式

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}_{k+1}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}_{k+1}, \quad k \geq 0. \quad (3.15)$$

显然, $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 可表示为

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = \tilde{\boldsymbol{B}}_k \boldsymbol{x}^{(0)} + \tilde{\boldsymbol{f}}_k, \quad k \geq 1. \quad (3.16)$$

其中

$$\tilde{\boldsymbol{B}}_k = \boldsymbol{B}_k \boldsymbol{B}_{k-1} \cdots \boldsymbol{B}_1, \quad (3.17)$$

且

$$\tilde{\boldsymbol{f}}_k = \boldsymbol{f}_k + \boldsymbol{B}_k \boldsymbol{f}_{k-1} + \boldsymbol{B}_k \boldsymbol{B}_{k-1} \boldsymbol{f}_{k-2} + \cdots + \boldsymbol{B}_k \boldsymbol{B}_{k-1} \cdots \boldsymbol{B}_2 \boldsymbol{f}_1. \quad (3.18)$$

定义 3.5 (相容性) (1) 若 $\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$, 且对所有的 $k' \geq k$ 有 $\boldsymbol{x}^{(k')} = \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$, 则称非定常迭代法 (3.16) 与式 (3.1) 是相容的.



Back

Close



(2) 若由非定常迭代法 (3.16) 定义的序列 $\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots$ 收敛, 且收敛到式 (3.1) 的解 \mathbf{x}^* , 则称非定常迭代法 (3.16) 反相容于式 (3.1).

(3) 若非定常迭代法 (3.16) 与式 (3.1) 既是相容的又是反相容的, 则称其与式 (3.1) 是完全相容的.

定理 3.3 假设非定常迭代法 (3.16) 由式 (3.15) 而得, 若对每个 $s = 1, 2, \dots$, 线性定常迭代

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_s \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}_s, \quad k \geq 0 \quad (3.19)$$

是相容的, 则非定常迭代法 (3.16) 是相容的. 反之, 若非定常迭代法 (3.16) 是相容的, 则对每个 s , 线性定常迭代法 (3.19) 是相容的.

定理 3.4 若 \mathbf{A} 是非奇异的且非定常迭代法 (3.16) 是相容的,



则对每个 k , 有

$$\tilde{\mathbf{f}}_k = (\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{B}}_k) \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}.$$

定理 3.5 非定常迭代法 (3.16) 收敛的充要条件是: $\{\tilde{\mathbf{f}}_k\}$ 收敛, 且 $\lim_{k \rightarrow \infty} \tilde{\mathbf{B}}_k = \mathbf{O}$.

§3.1.4 几种常见的矩阵分裂

设 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n} (\mathbb{C}^{n \times n})$ 非奇异, 若存在矩阵 \mathbf{M} 和 \mathbf{N} 满足 $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$, 且 \mathbf{M} 是可逆的, 则称 \mathbf{M} 和 \mathbf{N} 为 \mathbf{A} 的一个分裂.

定理 3.6 设 $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ 是非奇异矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的一个分裂, 则

$$\mathbf{M}^{-1} \mathbf{N} \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{N} \mathbf{M}^{-1}, \quad (3.20)$$

矩阵 $\mathbf{M}^{-1} \mathbf{N}$ 与 $\mathbf{A}^{-1} \mathbf{N}$ 可交换, 且 $\mathbf{N} \mathbf{M}^{-1}$ 与 $\mathbf{N} \mathbf{A}^{-1}$ 也可交换.





从而, 矩阵 $M^{-1}N$ 与 $A^{-1}N$ (或 NM^{-1} 与 NA^{-1}) 具有相同的特征向量.

证明 直接验证式 (3.20), 得

$$\begin{aligned} M^{-1}NA^{-1} &= M^{-1}(MA^{-1} - I) = A^{-1} - M^{-1} \\ &= A^{-1}(M - A)M^{-1} = A^{-1}NM^{-1}. \end{aligned}$$

由式 (3.20) 立即可得矩阵 $M^{-1}N$ 与 $A^{-1}N$ 及 NM^{-1} 与 NA^{-1} 可交换.

设 x 为 $A^{-1}N$ 对应于特征值 λ 的特征向量, 则有

$$A^{-1}Nx = \lambda x \implies Nx = \lambda Ax = \lambda(M - N)x.$$

由此可得

$$M^{-1}Nx = \frac{\lambda}{1 + \lambda}x, \quad \lambda \neq -1.$$



Back

Close



上式表明 x 也是矩阵 $M^{-1}N$ 对应于特征值 $\frac{\lambda}{1+\lambda}$ 的特征向量. 证毕. \square

定理 3.7 设 $A = M - N$ 是非奇异矩阵 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的一个分裂, 则有

$$\lambda(M^{-1}N) = \frac{\lambda(A^{-1}N)}{1 + \lambda(A^{-1}N)}. \quad (3.21)$$

因此, 若 $\lambda(A^{-1}N) \in \mathbb{R}$, 则相应的特征值 $\lambda(M^{-1}N) \in \mathbb{R}$, 反之亦然. 若 $\lambda(A^{-1}N) \in \mathbb{C}$, 则相应的特征值 $\lambda(M^{-1}N) \in \mathbb{C}$, 反之亦然.

下面给出文献中常见的一些矩阵分裂.

定义 3.6 设 $A = M - N$ 是非奇异矩阵 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的一个分裂.

(1) 若 $M^{-1} \geq O$ 且 $N \geq O$, 则称为正规分裂.



Back

Close



(2) 若 $M^{-1} \geq O$, $M^{-1}N \geq O$ 且 $NM^{-1} \geq O$, 则称为非负分裂.

(3) 若 $\rho(M^{-1}N) = \rho(NM^{-1}) < 1$, 则称为收敛的分裂.

定理 3.8 设 $A = M - N$ 是非奇异矩阵 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的一个分裂, 如果 $M^{-1}N$ 和 $A^{-1}N$ 均非负, 则分裂是收敛的且有

$$\rho(M^{-1}N) = \frac{\rho(A^{-1}N)}{1 + \rho(A^{-1}N)}. \quad (3.22)$$

定义 3.7 设 $A = M - N$ 是非奇异矩阵 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的一个分裂.

(1) 若 $M^H + N$ 是 Hermite 正定的, 且 $N \geq O$, 则称为 P 正规分裂.

(2) 若 $\langle M \rangle - |N|$ 是单调的 (即 $(\langle M \rangle - |N|)^{-1} \geq O$), 则称为 H 分裂.





(3) 若 $\langle \mathbf{A} \rangle = \langle \mathbf{M} \rangle - |\mathbf{N}|$, 则称为 H 相容分裂.

(4) 若 \mathbf{M} 是一个 M 矩阵且 $\mathbf{N} \geq \mathbf{O}$, 则称为 M 分裂.

下面给出使几种常见分裂收敛的一些条件及一些比较定理, 这些知识在证明相应的分裂迭代法的收敛性方面是很有用的.

定理 3.9 (1) 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 且 $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ 为正规分裂, 如果 $\mathbf{A}^{-1} \geq \mathbf{O}$, 则

$$\rho(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}) = \frac{\rho(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N})}{1 + \rho(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N})} < 1. \quad (3.23)$$

反之, 若 $\rho(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}) < 1$, 则 $\mathbf{A}^{-1} \geq \mathbf{O}$.

(2) 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是 Hermite 的且 $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ 为 P 正规分裂, 则 $\rho(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}) < 1$ 当且仅当 \mathbf{A} 是 Hermite 正定的.

定理 3.9 说明, 在满足定理的条件下, 以 $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$ 为迭代矩阵的分裂迭代法是收敛的.



Back

Close



定理 3.10 设 $A^{-1} \geqslant O$ 且 $A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2$ 为正规分裂, 如果下面条件之一成立:

- (1) $N_1 \leqslant N_2$.
- (2) $M_1^{-1} \geqslant M_2^{-1}$.
- (3) $M_2^{-1}N_2 \geqslant N_1M_1^{-1} \geqslant O$.
- (4) $A^{-1}N_2 \geqslant N_1A^{-1} \geqslant O$.

则

$$\rho(M_1^{-1}N_1) \leqslant \rho(M_2^{-1}N_2). \quad (3.24)$$

特别地, 若 $A^{-1} \geqslant O$ 且 $N_2 \geqslant N_1$ 而 $N_2 \neq N_1$ (或 $M_1^{-1} > M_2^{-1}$),

则

$$\rho(M_1^{-1}N_1) \leqslant \rho(M_2^{-1}N_2). \quad (3.25)$$



Back

Close



定理 3.10 说明, 在满足定理的条件下, 以 $A = M_1 - N_1$ 构造的分裂迭代法比以 $A = M_2 - N_2$ 构造的分裂迭代法收敛得更快.

定理 3.11 若 $A = M - N$ 为 A 的一个 H 分裂, 则 A 和 M 都是 H 矩阵, 且 $\rho(M^{-1}N) \leq \rho(\langle M \rangle^{-1}|N|) < 1$. 若分裂是一个 H 相容分裂, 则它一定是 H 分裂, 从而是收敛的分裂.

定理 3.12 设 $A = M - N$ 为 A 的一个 M 分裂, 则

(1) 若 A 是不可约的, 则存在一个正向量 $x > 0$ 使得

$$(M^{-1}N)x = \rho(M^{-1}N)x.$$

(2) $\rho(M^{-1}N) < 1$ 当且仅当 $A = M - N$ 是一个非奇异 M 分裂.



Back

Close



§3.2 几种经典迭代法

本节给出求解 $Ax = b$ 的几个经典迭代法及相应的收敛性定理.

§3.2.1 Richardson 迭代法

在式 (3.10) 中取 $M = I$, $N = I - A$, 则相应于式 (3.12) 的迭代法为

$$x^{(k)} = (I - A)x^{(k-1)} + b = x^{(k-1)} + r^{(k-1)}, \quad (3.26)$$

式中: $r^{(k-1)} = b - Ax^{(k-1)}$ 为前一步的残差.

这就是著名的 Richardson 迭代法. 式 (3.26) 基本上不具有实用性, 因为它要求迭代矩阵 $I - A$ 的谱半径 $\rho(I - A) < 1$, 这等价于 $\rho(A) < 2$. 但它对于加速技术、Krylov 子空间方法及多重网格法都具有理论意义.



Back

Close



用 $-A$ 乘以式 (3.26) 两边并加上 b , 有

$$\mathbf{r}^{(k)} = (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{r}^{(k-1)} = \cdots = (\mathbf{I} - \mathbf{A})^k \mathbf{r}^{(0)} = p_k(\mathbf{A})\mathbf{r}^{(0)}, \quad (3.27)$$

式中: $p_k(\mathbf{A})$ 为 \mathbf{A} 的 k 次多项式.

式 (3.27) 表明, 如果 $\|\mathbf{I} - \mathbf{A}\|$ 比 1 小得多, 则可期望其具有快速的收敛性.

注意到式 (3.27) 将残差表示成 \mathbf{A} 的一个多项式与初始残差的乘积, 对于标准的 Richardson 迭代法, 此多项式非常简单, 即 $p_k(\mathbf{A}) = (\mathbf{I} - \mathbf{A})^k$. 以后将会看到, 许多流行的迭代法都具有类似的性质: 第 k 步的残差 $\mathbf{r}^{(k)}$ 可以表示为 \mathbf{A} 的某个 k 次多项式 $p_k(\mathbf{A})$ 与初始残差 $\mathbf{r}^{(0)}$ 的乘积, 并称此多项式为残差多项式. 这种性质是得到迭代法收敛界的一个有力工具.

还可以引进参数化的 Richardson 迭代法. 考虑 $\alpha > 0$ 并将 \mathbf{A}



Back

Close

分裂为

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\alpha} \mathbf{I} - \left(\frac{1}{\alpha} \mathbf{I} - \mathbf{A} \right),$$

则导致一种定常的参数化 Richardson 迭代:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} + \alpha \mathbf{r}^{(k-1)}. \quad (3.28)$$

若在每一步迭代取不同的参数 α_k , 则得到非定常的参数化 Richardson 迭代:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} + \alpha_k \mathbf{r}^{(k-1)}. \quad (3.29)$$

上式中的 α_k 可有多种选取方式, 如通过极小化 $\|\mathbf{r}^{(k)}\|$ 来选取. 注意到

$$\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)} - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{r}^{(k-1)} = (\mathbf{I} - \alpha_k \mathbf{A})\mathbf{r}^{(k-1)},$$



容易推得

$$\mathbf{r}^{(k)} = p_k(\mathbf{A})\mathbf{r}^{(0)}, \quad \text{其中} \quad p_k(\mathbf{A}) = \prod_{i=1}^k (\mathbf{I} - \alpha_i \mathbf{A}).$$

注 3.1 从式 (3.26)、式 (3.28) 和式 (3.29) 可知, Richardson 迭代法新的近似解 $\mathbf{x}^{(k)}$ 是前一步近似解 $\mathbf{x}^{(k-1)}$ 的一个校正, 校正量或者是前一步的残差 $\mathbf{r}^{(k-1)}$, 或者是沿残差方向前进某个步长 α_k (即 $\alpha_k \mathbf{r}^{(k-1)}$). 这一思想在现代变分迭代法中得到了很好的继承和发展. 最具代表性的是共轭梯度 (CG) 法和多重网格 (MG) 法.

由定理 3.1 不难得到定常的参数化 Richardson 迭代法 (3.28) 的收敛性定理.

定理 3.13 (1) 设 \mathbf{A} 为对称正定矩阵且其特征值 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n > 0$, 则定常的参数化 Richardson 迭代法 (3.28) 收敛的充要条件是 $\alpha < \frac{2}{\lambda_1}$.



31/183



Back

Close



(2) 对于定常的参数化 Richardson 迭代法 (3.28), 参数 α 的最优值为 $\alpha_{\text{opt}} = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_n}$, 此时,

$$\rho(\mathbf{I} - \alpha_{\text{opt}}\mathbf{A}) = \frac{\kappa(\mathbf{A}) - 1}{\kappa(\mathbf{A}) + 1},$$

式中: $\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\lambda_1}{\lambda_n}$.

§3.2.2 Jacobi 迭代法

将系数矩阵 $\mathbf{A} = (a_{ij})$ 分裂为

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}, \quad (3.30)$$

式中: $\mathbf{D} = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn})$,





$$\mathbf{L} = - \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ a_{21} & 0 & & & \\ a_{31} & a_{32} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{U} = - \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & & 0 \end{bmatrix}.$$



Back

Close

在式 (3.10) 中, 取

$$\mathbf{M} = \mathbf{D}, \quad \mathbf{N} = \mathbf{L} + \mathbf{U}, \quad (3.31)$$

则迭代法 (3.4) 中的迭代矩阵和右端项分别为

$$\mathbf{B}_J = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U}), \quad \mathbf{f}_J = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}.$$

相应的迭代法为

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_J \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}_J, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.32)$$

式 (3.32) 称为 Jacobi 迭代法. 其分量形式为

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad k = 0, 1, \dots. \quad (3.33)$$

该迭代法具有与 $\mathbf{x}^{(k+1)}$ 中分量的计算次序无关, 因此容易实现并行计算等优点.





为了便于编程, 下面给出 Jacobi 迭代法的具体算法步骤如下:

算法 3.1 (Jacobi 迭代法)

步 1, 取初始点 $\mathbf{x}^{(0)}$, 精度要求 ε , 最大迭代次数 N , 置 $k := 0$.

步 2, 由式 (3.32) 或式 (3.33) 计算 $\mathbf{x}^{(k+1)}$.

步 3, 若 $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)}\|/\|\mathbf{b}\| \leq \varepsilon$, 则停算, 输出 $\mathbf{x}^{(k+1)}$ 作为方程组的近似解.

步 4, 置 $\mathbf{x}^{(k)} := \mathbf{x}^{(k+1)}$, $k := k + 1$, 转步 2.

根据算法 3.1, 可编制 MATLAB 程序如下:

```
%Jacobi迭代法程序-mjacobi.m  
function [x,k,err,time]=mjacobi(A,b,x,tol,max_it)  
if nargin<5, max_it=1000; end  
if nargin<4, tol=1.e-5; end  
if nargin<3, x=zeros(size(b)); end
```



Back

Close



```
tic;  bnorm2 = norm(b);  
r=b-A*x;  %计算初始残差r0=b-Ax  
err=norm(r)/bnrm2;  
if (err<tol), return; end  
D=diag(diag(A));  
for k=1:max_it,    % 迭代开始  
    x=D\((D-A)*x+b);  
    r=b-A*x;    %计算残差r=b-Ax  
    err=norm(r)/bnrm2;  
    if(err<=tol), break; end  
end  
time=toc;
```

下面的定理给出了 Jacobi 迭代法的一个充分必要条件.



Back

Close



定理 3.14 设 $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是对称矩阵, 且 $a_{ii} > 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 则 Jacobi 迭代法收敛的充要条件是 \mathbf{A} 和 $2\mathbf{D} - \mathbf{A}$ 都是正定矩阵.

证明 记 $\mathbf{D}^{\frac{1}{2}} = \text{diag}(\sqrt{a_{11}}, \sqrt{a_{22}}, \dots, \sqrt{a_{nn}})$, $\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} = (\mathbf{D}^{\frac{1}{2}})^{-1}$, 则

$$\mathbf{B}_J = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{D} - \mathbf{A}) = \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}})\mathbf{D}^{\frac{1}{2}},$$

即 \mathbf{B}_J 与 $\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$ 相似, 从而它们有相同的特征值. 再由 \mathbf{A} 的对称性可得

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

即 $\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值都是实数, 从而 \mathbf{B}_J 的特征值都是实数.

必要性. 设 Jacobi 迭代法收敛, 即 $\rho(\mathbf{B}_J) < 1$, 则 $\rho(\mathbf{I} -$





$D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}) < 1$. 设实数 λ 是实对称矩阵 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 的任一特征值, 则有

$$0 = \det(\lambda I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}) = (-1)^n \det[(1 - \lambda)I - (I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})],$$

即实数 $1 - \lambda$ 是实对称矩阵 $I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值, 从而有

$$|1 - \lambda| < 1 \quad \text{或者} \quad 0 < \lambda < 2.$$

因此 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 是正定矩阵. 由于 A 与 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 合同, 所以 A 也是正定矩阵.

再设 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 的全体特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, 则存在正交矩阵 P , 使得

$$P^T(D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})P = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n).$$



Back

Close



于是有

$$\mathbf{P}^T(2\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}})\mathbf{P} = \text{diag}(2 - \lambda_1, 2 - \lambda_2, \dots, 2 - \lambda_n).$$

由于 $2 - \lambda_i > 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), 故 $2\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$ 正定. 注意到 $2\mathbf{D} - \mathbf{A} = \mathbf{D}^{\frac{1}{2}}(2\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}})\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}$ 合同于 $2\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$, 可得 $2\mathbf{D} - \mathbf{A}$ 正定.

充分性. 设 \mathbf{A} 和 $2\mathbf{D} - \mathbf{A}$ 都是正定矩阵, 则有

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \text{ 正定} &\implies \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \text{ 正定} \implies \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \text{ 的特征值大于零,} \\ 2\mathbf{D} - \mathbf{A} \text{ 正定} &\implies 2\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}(2\mathbf{D} - \mathbf{A})\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \text{ 正定} \\ &\implies 2\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \text{ 的特征值大于零.} \end{aligned}$$

设 μ 是 \mathbf{B}_J 的任一特征值, 从而也是 $\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值, 且



为实数, 则有

$$\begin{aligned} 0 &= \det(\mu \mathbf{I} - \mathbf{B}_J) = \det[\mu \mathbf{I} - (\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}})] \\ &= \begin{cases} (-1)^n \det[(1 - \mu) \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}] \\ \det[(\mu + 1) \mathbf{I} - (2\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}})] \end{cases}, \end{aligned}$$

即 $1 - \mu$ 是 $\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值, $\mu + 1$ 是 $2\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值, 所以

$$1 - \mu > 0, \mu + 1 > 0 \implies |\mu| < 1 \implies \rho(\mathbf{B}_J) < 1.$$

由定理 3.1 知 Jacobi 迭代法收敛. 证毕. □

下面的定理是 Jacobi 迭代法的另一个收敛性定理.

定理 3.15 若 \mathbf{A} 为严格对角占优, 或不可约对角占优, 或 \mathbf{A} 为 H 矩阵, 则 Jacobi 迭代法收敛.





证明 只证明 A 是严格对角占优或不可约对角占优的情形.
注意到 Jacobi 迭代法的迭代矩阵为

$$B_J = D^{-1}(D - A) = I - D^{-1}A.$$

只需证明 $\rho(B_J) < 1$. 事实上, 设 λ 为 B_J 的特征值, 对于行的情形, 当 A 为严格对角占优或不可约对角占优时, 矩阵 $I - B_J = D^{-1}A$ 也为严格对角占优或不可约对角占优. 因此, 当 $|\lambda| \geq 1$ 时, $I - \frac{1}{\lambda}B_J$ 也是严格对角占优或不可约对角占优的 (相当于 $I - B_J$ 的对角元不变, 非对角元模变小). 根据引理 1.1, 当 $|\lambda| \geq 1$ 时, 有

$$\det\left(I - \frac{1}{\lambda}B_J\right) \neq 0 \implies \det(\lambda I - B_J) \neq 0,$$

故 B_J 的特征值 λ 不满足 $|\lambda| \geq 1$, 即 $\rho(B_J) < 1$, 从而 Jacobi 迭代法收敛.

对于列的情形, 当 A 为严格对角占优或不可约对角占优时, 矩



阵



42/183

$$\mathbf{I} - \mathbf{D}\mathbf{B}_J\mathbf{D}^{-1} = \mathbf{A}\mathbf{D}^{-1}$$

也为严格对角占优或不可约对角占优. 因此, 当 $|\lambda| \geq 1$ 时,

$$\mathbf{I} - \frac{1}{\lambda}\mathbf{D}\mathbf{B}_J\mathbf{D}^{-1}$$

也是严格对角占优或不可约对角占优的. 根据引理 1.1, 当 $|\lambda| \geq 1$ 时, 有

$$\det\left(\mathbf{I} - \frac{1}{\lambda}\mathbf{D}\mathbf{B}_J\mathbf{D}^{-1}\right) \neq 0,$$

从而

$$\det\left(\mathbf{I} - \frac{1}{\lambda}\mathbf{B}_J\right) \neq 0 \Rightarrow \det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{B}_J) \neq 0,$$

故 \mathbf{B}_J 的特征值 λ 不满足 $|\lambda| \geq 1$, 即 $\rho(\mathbf{B}_J) < 1$, 从而 Jacobi 迭代法收敛. 证毕. □



Back

Close

Jacobi 迭代法的一种推广是将其用于分块矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \cdots & \mathbf{A}_{1m} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \cdots & \mathbf{A}_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{m1} & \mathbf{A}_{m2} & \cdots & \mathbf{A}_{mm} \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} \mathbf{A}_{ir} &\in \mathbb{R}^{n_i \times n_r}, \quad 1 \leq i, r \leq m, \\ n_1 + n_2 + \cdots + n_m &= n, \end{aligned} \quad (3.34)$$

式中: 每个主对角块 $\mathbf{A}_{ii} (i = 1, 2, \cdots, m)$ 为非奇异的方阵. 将 $\mathbf{x}^{(k+1)}$, $\mathbf{x}^{(k)}$ 和 \mathbf{b} 作相应的分块, 有

$$\mathbf{A}_{ii}\mathbf{x}_i^{(k+1)} = \mathbf{b}_i - \sum_{r=1}^{i-1} \mathbf{A}_{ir}\mathbf{x}_r^{(k)} - \sum_{r=i+1}^m \mathbf{A}_{ir}\mathbf{x}_r^{(k)},$$

$$i = 1, 2, \cdots, m, \quad k = 0, 1, \cdots. \quad (3.35)$$

称上述迭代法为块 Jacobi (BJ) 迭代法, 其中用 \mathbf{x}_i 表示第 i 个块分量以示区别. 它也有上面类似的收敛性定理.





另一种推广是在 Jacobi 迭代法中引入外推法技术, 即进行如下迭代

$$\begin{cases} D\tilde{\mathbf{x}}^{(k+1)} = (\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}, \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \gamma\tilde{\mathbf{x}}^{(k+1)} + (1 - \gamma)\mathbf{x}^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots, \quad (3.36)$$

式中: γ 为外推因子. 或等价地, 有

$$\frac{1}{\gamma}D\mathbf{x}^{(k+1)} = \frac{1 - \gamma}{\gamma}D\mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}, \quad (3.37)$$

该方法称为外推 Jacobi 方法, 其中, 若 $\gamma > 1$ 也称为 JOR 方法. 它相应于将 \mathbf{A} 分裂为

$$\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N} = \frac{1}{\gamma}D - \left[\frac{1 - \gamma}{\gamma}D + (\mathbf{L} + \mathbf{U}) \right].$$

关于外推 Jacobi 迭代法, 有下面的收敛性定理.



Back

Close



定理 3.16 (1) 设 A 为对称正定的, 若 $\frac{2}{\gamma}D - A$ 是对称正定的, 则迭代法 (3.37) 对任意 $x^{(0)}$ 都收敛.

(2) 设 A 对称且 D 为正定矩阵, 则 $\frac{2}{\gamma}D - A$ 是对称正定的充要条件是

$$0 < \gamma < \frac{2}{1 - \lambda_{\min}(D^{-1}(D - A))}.$$

§3.2.3 Gauss–Seidel (GS) 迭代法

从前面的讨论可以看到, Jacobi 迭代法的主要优点是方法简单, 在一定条件下具有实用性, 比如它可用作建立其他一些迭代过程的辅助方法. 然而, Jacobi 迭代法并不总是收敛的, 收敛时通常速度也很缓慢. 下面以 Jacobi 迭代法为基础, 考虑关于方程组 (3.1) 的其他迭代法. 仍假设 A 的对角元素不为零. 从串行计算的角度



Back

Close



来看, Jacobi 迭代法很自然地先计算分量 x_1 的新迭代值

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - \sum_{r=2}^n a_{1r} x_r^{(k)} \right). \quad (3.38)$$

得到 $x_1^{(k+1)}$ 后, 在后面 $x_i^{(k+1)}$ 的计算中就有理由用 $x_1^{(k+1)}$ 取代 $x_1^{(k)}$.

依次对 $x_2^{(k+1)}, x_3^{(k+1)}$ 等也用得到的新值立即取代旧值. Gauss-Seidel 原理就是“一旦获得新信息便立即利用”. 按此原理, 有

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{r=1}^{i-1} a_{ir} x_r^{(k+1)} - \sum_{r=i+1}^n a_{ir} x_r^{(k)} \right),$$
$$i = 1, 2, \dots, n; \quad k = 0, 1, \dots. \quad (3.39)$$

此方法称为 Gauss-Seidel 迭代法 (GS 迭代法). 沿用前面的记号, 取

$$\mathbf{M} = \mathbf{D} - \mathbf{L}, \quad \mathbf{N} = \mathbf{U}, \quad (3.40)$$



Back

Close



则式 (3.39) 可以写成

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{U} \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{b}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.41)$$

因此, Gauss-Seidel 迭代法的迭代矩阵 $\mathbf{B}_S = (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{U}$, 常向量 $\mathbf{f}_S = (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{b}$. \mathbf{A} 的对角元素非零的假设确保了 $(\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}$ 的存在性.

与 Jacobi 迭代法相比, Gauss-Seidel 迭代法使用了最新已经计算的分量. 因此, 一般情况下 Gauss-Seidel 迭代法要比 Jacobi 迭代法有效, 且在编程时 Gauss-Seidel 迭代法只要一个数组就够了, 将新计算出来的分量及时覆盖旧的分量.

为了便于计算机编程实现, 给出 Gauss-Seidel 迭代法的具体算法步骤如下.



Back

Close



算法 3.2 (GS 迭代法)

步 1, 输入矩阵 \mathbf{A} , 右端向量 \mathbf{b} , 初始点 $\mathbf{x}^{(0)}$, 精度要求 ε , 最大迭代次数 N , 置 $k := 0$.

步 2, 由式 (3.41) 或式 (3.39) 计算 $\mathbf{x}^{(k+1)}$.

步 3, 若 $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)}\|/\|\mathbf{b}\| \leq \varepsilon$, 则停算, 输出 $\mathbf{x}^{(k+1)}$ 作为方程组的近似解.

步 4, 置 $\mathbf{x}^{(k)} := \mathbf{x}^{(k+1)}$, $k := k + 1$, 转步 2.

根据算法 3.2, 编制 MATLAB 程序如下:

```
%GS迭代法程序-mseidel.m
```

```
function [x,k,err,time]=mseidel(A,b,x,tol,max_it)
```

```
if nargin<5, max_it=1000; end
```

```
if nargin<4, tol=1.e-5; end
```

```
if nargin<3, x=zeros(size(b)); end
```



Back

Close



```
tic;  bnrm2=norm(b);  
r=b-A*x;    %计算初始残差r0=b-Ax  
err=norm(r)/bnrm2;  
if (err<tol), return; end  
DL=tril(A); U=-triu(A,1);  
for k=1:max_it,    % 迭代开始  
    x=DL\ (U*x+b);  
    r=b-A*x;    %计算残差r=b-Ax  
    err=norm(r)/bnrm2;  
    if (err<=tol), break; end  
end  
time=toc;
```

下面考虑 Gauss-Seidel 迭代法的收敛性.



Back

Close



定理 3.17 设 A 为严格对角占优, 或不可约对角占优, 或 A 是 H 矩阵, 则 Gauss-Seidel 迭代法收敛.

证明 只证明 A 为严格对角占优, 或不可约对角占优时的结论. 只需证 Gauss-Seidel 迭代法的迭代矩阵 $B_S = (D - L)^{-1}U$ 满足 $\rho(B_S) < 1$ 即可. 事实上, 设 μ 为 B_S 的特征值, 对于行的情形, 注意到 $(D - L) - U = A$, 若 A 为严格对角占优或不可约对角占优, 当 $|\mu| \geq 1$ 时,

$$(D - L) - \frac{1}{\mu}U$$

也是严格对角占优或不可约对角占优. 根据引理 1.1, 当 $|\mu| \geq 1$ 时, 有

$$\det \left[(D - L) - \frac{1}{\mu}U \right] \neq 0 \implies \det [\mu I - (D - L)^{-1}U] \neq 0,$$

故 B_S 特征值 μ 不满足 $|\mu| \geq 1$, 即 $\rho(B_S) < 1$, 从而 Gauss-Seidel 迭代法收敛.



Back

Close



对于列的情形, 注意到矩阵

$$(I - LD^{-1}) - UD^{-1} = (D - L - U)D^{-1} = AD^{-1},$$

因此, 若 A 为严格对角占优或不可约对角占优, 当 $|\mu| \geq 1$ 时, 有

$$(I - LD^{-1}) - \frac{1}{\mu}UD^{-1}$$

也为严格对角占优或不可约对角占优. 根据引理 1.1, 当 $|\mu| \geq 1$ 时, 有

$$\det \left[(I - LD^{-1}) - \frac{1}{\mu}UD^{-1} \right] = \det \left[(D - L) - \frac{1}{\mu}U \right] \det(D^{-1}) \neq 0,$$

故

$$\det \left[(D - L) - \frac{1}{\mu}U \right] \neq 0 \implies \det[\mu I - (D - L)^{-1}U] \neq 0,$$

即 B_S 特征值 μ 不满足 $|\mu| \geq 1$, 即 $\rho(B_S) < 1$, 从而 Gauss-Seidel 迭代法收敛. 证毕. □



Back

Close



可见, 定理 3.15 中 Jacobi 迭代法收敛的充分条件也是 Gauss-Seidel 迭代法收敛的充分条件. 然而, 由于 Gauss-Seidel 迭代法利用了最新迭代信息, 在两种方法都收敛的情形下, Gauss-Seidel 迭代法往往比 Jacobi 迭代法收敛更快, 这是因为 $D - L$ 用到了 A 的更多的信息, 或 $(D - L)^{-1}A$ 比 $D^{-1}A$ 更接近单位矩阵.

定理 3.18 设 A 是 Hermite 正定矩阵, 则 Gauss-Seidel 迭代法收敛.

证明 设 λ 是 B_S 的任一特征值, 对应的特征向量为 y . 由 $B_S y = \lambda y$, 得

$$(D - L)^{-1}Uy = \lambda y \implies Uy = \lambda(D - L)y.$$

两端同时左乘 y^H , 得

$$y^H Uy = \lambda(y^H Dy - y^H Ly).$$



Back

Close



因为 $A = D - L - U$ 是 Hermite 矩阵, 故 $U = L^H$. 记

$$\mathbf{y}^H D \mathbf{y} = p, \quad \mathbf{y}^H L \mathbf{y} = c + \mathrm{i} d \quad (c, d \text{ 为实数}),$$

则 $\mathbf{y}^H U \mathbf{y} = c - \mathrm{i} d$. 再由 A 正定, 得

$$D \text{ 正定} \implies p = \mathbf{y}^H D \mathbf{y} > 0,$$

$$\mathbf{y}^H (D - L - U) \mathbf{y} = \mathbf{y}^H A \mathbf{y} > 0 \implies p - 2c > 0.$$

于是有

$$\lambda = \frac{c - \mathrm{i} d}{p - (c + \mathrm{i} d)}, \quad |\lambda|^2 = \frac{c^2 + d^2}{(p - c)^2 + d^2}.$$

由于

$$c^2 - (p - c)^2 = -p(p - 2c) < 0,$$

所以 $|\lambda|^2 < 1$, 从而 $\rho(\mathbf{B}_S) < 1$, 故 Gauss-Seidel 迭代法收敛. 证毕.

□



Back

Close



对具有如式 (3.34) 结构的分块系数矩阵及相应的向量划分, 有 Gauss-Seidel 迭代法的一种推广:

$$\begin{aligned} A_{ii} \mathbf{x}_i^{(k+1)} &= \mathbf{b}_i - \sum_{r=1}^{i-1} A_{ir} \mathbf{x}_r^{(k+1)} - \sum_{r=i+1}^m A_{ir} \mathbf{x}_r^{(k)}, \\ i &= 1, 2, \dots, m; \quad k = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (3.42)$$

此即块 Gauss-Seidel (BGS) 迭代法.

另一种重要推广是双步法. 在第 $k+1$ 步, 作 Gauss-Seidel 迭代并将结果记为 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$:

$$\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{U} \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{b}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.43)$$

然后各方程按相反顺序利用 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$ 进行计算:



Back

Close



$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{r=1}^{i-1} a_{ir} x_r^{(k+\frac{1}{2})} - \sum_{r=i+1}^n a_{ir} x_r^{(k+1)} \right) / a_{ii},$$

$$i = n, n-1, \dots, 1; k = 0, 1, 2, \dots. \quad (3.44)$$

上式可写成矩阵形式

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \mathbf{U})^{-1} \mathbf{L} \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + (\mathbf{D} - \mathbf{U})^{-1} \mathbf{b}, \quad k = 0, 1, 2, \dots. \quad (3.45)$$

\mathbf{L} 与 \mathbf{U} 在式 (3.45) 中的作用正好与式 (3.43) 相反. 将式 (3.43) 代入式 (3.45), 得

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \mathbf{U})^{-1} \mathbf{L} (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{U} \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.46)$$

式中:

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

式 (3.46) 称为对称 Gauss-Seidel (SGS) 迭代法.





§3.3 松弛型迭代法

§3.3.1 SOR 迭代法

如前面对 Jacobi 迭代法每个迭代步引入外推参数 (松弛因子) 那样, 可在 Gauss-Seidel 迭代法每个迭代步引入松弛因子, 从而得到所谓的 SOR 迭代法.

对 Gauss-Seidel 迭代法的一种重要改进如下:

$$x_i^{(k+1)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} + \omega\tilde{x}_i^{(k+1)}, \quad i = 1, 2, \dots; \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.47)$$

式中: $\omega > 0$ 为松弛因子, 是一个可以适当选取的参数, 用来加快收敛速度; $\tilde{x}_i^{(k+1)}$ 为式 (3.39) 的右端, 将其代入式 (3.47), 得



Back

Close



$$x_i^{(k+1)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{r=1}^{i-1} a_{ir}x_r^{(k+1)} - \sum_{r=i+1}^n a_{ir}x_r^{(k)} \right),$$

$$i = 1, 2, \dots, n; \quad k = 0, 1, \dots. \quad (3.48)$$

也可以由矩阵分裂导出迭代法的矩阵向量形式. 取

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\omega} \mathbf{D} - \mathbf{L}, \quad \mathbf{N} = \frac{1 - \omega}{\omega} \mathbf{D} + \mathbf{U}, \quad (3.49)$$

则有

$$\left(\frac{1}{\omega} \mathbf{D} - \mathbf{L} \right) \mathbf{x}^{(k+1)} = \left(\frac{1 - \omega}{\omega} \mathbf{D} + \mathbf{U} \right) \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}, \quad (3.50)$$

或等价地, 有

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})^{-1} [(1 - \omega) \mathbf{D} + \omega \mathbf{U}] \mathbf{x}^{(k)} + \omega (\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})^{-1} \mathbf{b}, \quad (3.51)$$



Back

Close



这样定义的迭代法称为逐次超松弛迭代法 (Successive Over Relaxation, SOR 迭代法), 参数 ω 称为松弛因子. 适当选取 ω , 可使 SOR 迭代法的收敛速度优于 Gauss-Seidel 迭代法. 尽管 $0 < \omega < 1$ 时应该称为低松弛, 但为了方便, 对于任意的 $\omega \in (0, 2)$ 均使用超松弛这一术语. 注意到, 在实际计算中, 松弛因子 ω 的选取通常是十分困难的. 没有一个通用的选取规则, 只能就某些具有特殊结构的矩阵讨论最佳松弛因子的计算.

SOR 迭代法的迭代矩阵和右端向量分别为

$$\mathbf{B}_\omega = (\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})^{-1} [(1 - \omega) \mathbf{D} + \omega \mathbf{U}], \quad \mathbf{f}_\omega = \omega (\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})^{-1} \mathbf{b}. \quad (3.52)$$

在 \mathbf{A} 的对角元素均非零的条件下 $(\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})^{-1}$ 是存在的. 显然, 当 $\omega = 1$ 时, SOR 迭代法退化为 Gauss-Seidel 迭代法.

为了便于计算机编程实现, 下面给出 SOR 迭代法的具体算法步骤.



Back

Close



算法 3.3 (SOR 迭代法)

步 1, 输入矩阵 A , 右端向量 b , 初始点 $x^{(0)}$, 精度要求 ε , 最大迭代次数 N , 置 $k := 0$.

步 2, 由式 (3.48) 或式 (3.51) 计算 $x^{(k+1)}$.

步 3, 若 $\|b - Ax^{(k+1)}\|/\|b\| \leq \varepsilon$, 则停算, 输出 $x^{(k+1)}$ 作为方程组的近似解.

步 4, 置 $x^{(k)} := x^{(k+1)}$, $k := k + 1$, 转步 2.

根据算法 3.3, 编制 MATLAB 程序如下:

```
%SOR迭代法程序-msor.m
```

```
function [x,k,err,time]=msor(A,b,w,x,tol,max_it)
```

```
if nargin<6, max_it=1000; end
```

```
if nargin<5, tol=1.e-5; end
```



Back

Close



60/183

```
if nargin<4, x=zeros(size(b)); end
tic; bnorm2=norm(b);
r=b-A*x; %计算初始残差r0=b-Ax
err=norm(r)/bnrm2;
if (err<tol), return; end
D=diag(diag(A)); L=-tril(A,-1); U=-triu(A,1);
for k=1:max_it % 迭代开始
    x=(D-w*L)\(((1-w)*D+w*U)*x+w*b);
    r=b-A*x; %计算残差r=b-Ax
    err= norm(r)/bnrm2;
    if (err<=tol), break; end
end
time=toc;
```



Back

Close



61/183

关于 SOR 迭代法的收敛性, 有如下的定理.

定理 3.19 对于任何参数 ω , SOR 迭代法的迭代矩阵 B_ω 满足

$$\rho(B_\omega) \geq |1 - \omega|. \quad (3.53)$$

证明 在

$$\begin{aligned} B_\omega &= (D - \omega L)^{-1} [(1 - \omega)D + \omega U] \\ &= (I - \omega D^{-1}L)^{-1} [(1 - \omega)I + \omega D^{-1}U] \end{aligned}$$

中, $D^{-1}L$ 和 $D^{-1}U$ 分别是严格下三角和严格上三角矩阵, 所以

$$\det(B_\omega) = \det(I - \omega D^{-1}L)^{-1} \det[(1 - \omega)I + \omega D^{-1}U] = (1 - \omega)^n.$$

再由 B_ω 的 n 个特征值之积等于 $\det(B_\omega)$, 得

$$\rho(B_\omega) \geq (|\det(B_\omega)|)^{\frac{1}{n}} = |1 - \omega|.$$



Back

Close

证毕. □

定理 3.20 设 ω 为实参数, 若 SOR 迭代法收敛, 则 $\omega \in (0, 2)$.

证明 根据定理 3.1, SOR 迭代法收敛时, $\rho(\mathbf{B}_\omega) < 1$. 再由定理 3.19, 得 $|1 - \omega| < 1$, 即 $0 < \omega < 2$. 证毕. □

定理 3.20 表明, 如果松弛参数 $\omega \notin (0, 2)$, 则 SOR 迭代法不收敛. 但反之结论一般不成立, 即 $\omega \in (0, 2)$ 不能保证 SOR 迭代法收敛. 然而, 对 Hermite 正定矩阵 (对称正定矩阵), 这一条件是充分必要的.

定理 3.21 设 \mathbf{A} 是 Hermite 正定矩阵, 则 SOR 迭代法收敛的充分必要条件是松弛因子 $\omega \in (0, 2)$.

证明 仅证明充分性即可. 设 λ 是 \mathbf{B}_ω 的任一特征值, 对应的





特征向量为 \mathbf{y} . 由 $B_\omega \mathbf{y} = \lambda \mathbf{y}$, 得

$$[(1 - \omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{U}]\mathbf{y} = \lambda(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})\mathbf{y}.$$

两端同时左乘 \mathbf{y}^H , 得

$$(1 - \omega)\mathbf{y}^H \mathbf{D} \mathbf{y} + \omega \mathbf{y}^H \mathbf{U} \mathbf{y} = \lambda(\mathbf{y}^H \mathbf{D} \mathbf{y} - \omega \mathbf{y}^H \mathbf{L} \mathbf{y}).$$

因为 $\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$ 是 Hermite 矩阵, 故 $\mathbf{U} = \mathbf{L}^H$. 记

$$\mathbf{y}^H \mathbf{D} \mathbf{y} = p, \quad \mathbf{y}^H \mathbf{L} \mathbf{y} = c + \mathrm{i}d \quad (c, d \text{ 为实数}),$$

则 $\mathbf{y}^H \mathbf{U} \mathbf{y} = c - \mathrm{i}d$. 再由 \mathbf{A} 正定, 得

$$\mathbf{D} \text{ 正定} \implies p = \mathbf{y}^H \mathbf{D} \mathbf{y} > 0,$$

$$\mathbf{y}^H (\mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}) \mathbf{y} = \mathbf{y}^H \mathbf{A} \mathbf{y} > 0 \implies p - 2c > 0.$$



Back

Close



于是, 当 $0 < \omega < 2$ 时, $p - \omega(c + id) \neq 0$, 且有

$$\lambda = \frac{(1 - \omega)p + \omega(c - id)}{p - \omega(c + id)}, \quad |\lambda|^2 = \frac{[(1 - \omega)p + \omega c]^2 + \omega^2 d^2}{(p - \omega c)^2 + \omega^2 d^2}.$$

由于

$$[(1 - \omega)p + \omega c]^2 - (p - \omega c)^2 = -p\omega(2 - \omega)(p - 2c) < 0,$$

所以 $|\lambda|^2 < 1$, 从而 $\rho(B_\omega) < 1$, 故 SOR 迭代法收敛. 证毕. \square

定理 3.22 设 A 严格对角占优或不可约对角占优, 则当实参数 ω 满足 $0 < \omega \leq 1$ 时, SOR 迭代法收敛.

证明 设 A 按行不可约对角占优, 且 λ 为 B_ω 的特征值. 如果 λ 满足 $|\lambda| \geq 1$, 则由 $0 < \omega \leq 1$, 得 $1 - \omega - \lambda \neq 0$. 再由

$$\lambda = (\lambda + \omega - 1) + (1 - \omega),$$

得



Back

Close



$$|\lambda + \omega - 1| \geq |\lambda| - (1 - \omega)$$

及

$$\left| \frac{\omega}{\lambda + \omega - 1} \right| \leq \left| \frac{\omega\lambda}{\lambda + \omega - 1} \right| \leq \frac{|\omega\lambda|}{|\lambda| - (1 - \omega)} \leq \frac{\omega|\lambda|}{|\lambda| - (1 - \omega)|\lambda|} = 1.$$

因为 $\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$ 按行不可约对角占优, 从而

$$\mathbf{D} - \frac{\omega\lambda}{\lambda + \omega - 1} \mathbf{L} - \frac{\omega}{\lambda + \omega - 1} \mathbf{U}$$

也按行不可约对角占优, 根据引理 1.1, 得

$$\det \left(\mathbf{D} - \frac{\omega\lambda}{\lambda + \omega - 1} \mathbf{L} - \frac{\omega}{\lambda + \omega - 1} \mathbf{U} \right) \neq 0,$$

即

$$\det [\lambda(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L}) - (1 - \omega)\mathbf{D} - \omega\mathbf{U}] \neq 0,$$

或

$$\det (\lambda\mathbf{I} - (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1}[(1 - \omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{U}]) \neq 0.$$





故 B_ω 的特征值 λ 不满足 $|\lambda| \geq 1$, 即 $\rho(B_\omega) < 1$, 从而 SOR 迭代法收敛.

当 A 为另外三种情形 (按列不可约对角占优、按行 (列) 严格对角占优) 时, 采用和上面类似的方法可以推得 SOR 迭代法收敛. 注意: 列的情形需要考虑矩阵 $I - LD^{-1} - UD^{-1} = AD^{-1}$. 证毕.

□

定理 3.23 设 A 为 H 矩阵, 若松弛因子 ω 满足

$$0 < \omega < \frac{2}{1 + \rho(B_J)},$$

式中: B_J 为 Jacobi 迭代法的迭代矩阵. 则 SOR 迭代法对任意的初始点 $x^{(0)}$ 均收敛.

SOR 迭代法也可推广到分块矩阵的情形. 对具有如式 (3.34) 结构的分块系数矩阵及相应的向量划分, 有 SOR 迭代法的一种推



广:

$$\mathbf{x}_i^{(k+1)} = (1 - \omega)\mathbf{x}_i^{(k)} + \omega \mathbf{A}_{ii}^{-1} \left(\mathbf{b}_i - \sum_{r=1}^{i-1} \mathbf{A}_{ir} \mathbf{x}_r^{(k+1)} - \sum_{r=i+1}^n \mathbf{A}_{ir} \mathbf{x}_r^{(k)} \right),$$
$$i = 1, 2, \dots, n; \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.54)$$

此即块 SOR (BSOR) 迭代法.

特别地, 对于 2×2 分块的经典鞍点方程组

$$\mathcal{A}u := \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & \mathbf{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix} := \mathbf{b}, \quad (3.55)$$

式中: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 为对称正定阵; $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 为列满秩阵.

注意: 此时系数矩阵 \mathcal{A} 非奇异, 且 Schur 补 $\mathbf{S} = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}$ 对



67/183



Back

Close



称正定. 给出分裂 $\mathcal{A} = \mathcal{D} - \mathcal{L} - \mathcal{U}$, 其中

$$\mathcal{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{S} \end{bmatrix}, \quad \mathcal{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{O} \\ -\mathbf{B}^T & \mathbf{O} \end{bmatrix}, \quad \mathcal{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{O} & -\mathbf{B} \\ \mathbf{O} & \mathbf{S} \end{bmatrix},$$

由此得到迭代公式

$$(\mathcal{D} - \omega \mathcal{L}) \mathbf{u}^{(k+1)} = [(1 - \omega) \mathcal{D} + \omega \mathcal{U}] \mathbf{u}^{(k)} + \omega \mathbf{b},$$

即有

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{O} \\ \omega \mathbf{B}^T & \mathbf{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(k+1)} \\ \mathbf{y}^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - \omega) \mathbf{A} & -\omega \mathbf{B} \\ \mathbf{O} & (1 - \omega) \mathbf{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(k)} \\ \mathbf{y}^{(k)} \end{bmatrix} + \omega \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}.$$

整理可得

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = (1 - \omega) \mathbf{x}^{(k)} + \omega \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{f} - \mathbf{B} \mathbf{y}^{(k)}), \\ \mathbf{y}^{(k+1)} = (1 - \omega) \mathbf{y}^{(k)} + \omega \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{g} - \mathbf{B}^T \mathbf{x}^{(k+1)}), \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots.$$





在实际计算中, 可选取对称正定矩阵 P 和 Q 为 A 和 Schur 补 S 的近似矩阵, 即得到所谓的非精确类算法.

§3.3.2 SSOR 迭代法

SOR 迭代法的计算公式为

$$(\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})\mathbf{x}^{(k+1)} = ((1 - \omega)\mathbf{D} + \omega \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k)} + \omega \mathbf{b}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.56)$$

它的计算是依赖顺序的, 即它是按从第 1 个到第 n 个分量依次计算的. 一个自然的想法是改变计算顺序, 即按从第 n 个到第 1 个分量逆序计算, 只需将式 (3.56) 中的 \mathbf{L} 和 \mathbf{U} 互换位置即得

$$(\mathbf{D} - \omega \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k+1)} = ((1 - \omega)\mathbf{D} + \omega \mathbf{L})\mathbf{x}^{(k)} + \omega \mathbf{b}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.57)$$



Back

Close



这种技巧导致一个对称方案, 称其为对称 SOR 迭代法 (Symmetric Successive Over Relaxation, SSOR 迭代法). 具体表示为

$$\begin{cases} (\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = ((1 - \omega)\mathbf{D} + \omega \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k)} + \omega \mathbf{b}, \\ (\mathbf{D} - \omega \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k+1)} = ((1 - \omega)\mathbf{D} + \omega \mathbf{L})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \omega \mathbf{b}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.58)$$

若消去 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$, 即得到形如式 (3.4) 的迭代法

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_{\text{SSOR}}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}_{\text{SSOR}}, \quad (3.59)$$

式中:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{\text{SSOR}} &= (\mathbf{D} - \omega \mathbf{U})^{-1}[(1 - \omega)\mathbf{D} + \omega \mathbf{L}](\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})^{-1}[(1 - \omega)\mathbf{D} + \omega \mathbf{U}], \\ \mathbf{f}_{\text{SSOR}} &= \omega(2 - \omega)(\mathbf{D} - \omega \mathbf{U})^{-1}\mathbf{D}(\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})^{-1}\mathbf{b}. \end{aligned} \quad (3.60)$$



Back

Close



从矩阵分裂的观点, SSOR 迭代法对应于分裂 $A = M - N$, 其中

$$M = \frac{1}{\omega(2-\omega)}(D - \omega L)D^{-1}(D - \omega U), \quad (3.61)$$

$$N = \frac{1}{\omega(2-\omega)}((1-\omega)D + \omega L)D^{-1}((1-\omega)D + \omega U). \quad (3.62)$$

此外, 若记 B_ω 是式 (3.52) 中定义的 SOR 迭代矩阵, \bar{B}_ω 是由 B_ω 中的 L 和 U 互换得到的. 则迭代矩阵 B_{SSOR} 可表示为

$$B_{\text{SSOR}} = M^{-1}N = \bar{B}_\omega B_\omega, \quad (3.63)$$

为了便于计算机编程实现, 下面给出 SSOR 迭代法的具体算法步骤.

算法 3.4 (SSOR 迭代法)

步 1, 输入矩阵 A , 右端向量 b , 初始点 $x^{(0)}$, 精度要求 ε , 最大迭代次数 N , 置 $k := 0$.



Back

Close



步 2, 由式 (3.58) 计算 $\mathbf{x}^{(k+1)}$.

步 3, 若 $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)}\|/\|\mathbf{b}\| \leq \varepsilon$, 则停算, 输出 $\mathbf{x}^{(k+1)}$ 作为方程组的近似解.

步 4, 置 $\mathbf{x}^{(k)} := \mathbf{x}^{(k+1)}$, $k := k + 1$, 转步 2.

根据算法 3.4, 编制 MATLAB 程序如下:

%SSOR迭代法程序-mssor.m

```
[x,k,err,time]=mssor(A,b,w,x,tol,max_it)
```

```
if nargin<6, max_it=1000; end
```

```
if nargin<5, tol=1.e-6; end
```

```
if nargin<4, x=zeros(size(b)); end
```

```
tic; bnorm2=norm(b);
```

```
r=b-A*x; %计算初始残差
```

```
err=norm(r)/bnorm2;
```



Back

Close



```
if (err<tol), return; end
D=diag(diag(A)); L=-tril(A,-1); U=-triu(A,1);
for k=1:max_it %迭代开始
    x=(D-w*L)\(((1-w)*D+w*U)*x+w*b);
    x=(D-w*U)\(((1-w)*D+w*L)*x+w*b);
    r=b-A*x; %计算残差
    err=norm(r)/bnrm2;
    if (err<= tol), break; end
end
time=toc;
```

关于 SSOR 迭代法, 有下面的收敛性定理.

定理 3.24 SSOR 迭代法收敛的一个必要条件是 $|\omega - 1| < 1$.

对于 $\omega \in \mathbb{R}$, 条件变为 $\omega \in (0, 2)$.



Back

Close



定理 3.25 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 为具有正对角元的 Hermite 矩阵. 则对任意的 $\omega \in (0, 2)$, SSOR 迭代矩阵 B_{SSOR} 具有实非负特征值. 此外, 若 A 是对称正定的, 则 SSOR 迭代法收敛. 反之, 若 SSOR 迭代法收敛且 $\omega \in \mathbb{R}$, 则 $\omega \in (0, 2)$ 且 A 是对称正定的.

注 3.2 SSOR 迭代法实质上就是将 L 和 U 等同看待连续两次使用 SOR 迭代法. 这样做好处有两个:

(1) 某些特殊问题, 用 SOR 迭代法不收敛, 但依然可构造出收敛的 SSOR 迭代法.

(2) 一般来说, SOR 迭代法的渐近收敛速度对松弛因子 ω 的选择是非常敏感的, 而 SSOR 却不敏感.



Back

Close



SSOR 迭代法的一种推广是它的两个半步迭代格式中使用不同的松弛因子:

$$\begin{cases} (\mathbf{D} - \omega_1 \mathbf{L}) \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = ((1 - \omega_1) \mathbf{D} + \omega_1 \mathbf{U}) \mathbf{x}^{(k)} + \omega_1 \mathbf{b}, \\ (\mathbf{D} - \omega_2 \mathbf{U}) \mathbf{x}^{(k+1)} = ((1 - \omega_2) \mathbf{D} + \omega_2 \mathbf{L}) \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \omega_2 \mathbf{b}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.64)$$

若消去 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$, 得

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_{\omega_1, \omega_2} \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}_{\omega_1, \omega_2}, \quad (3.65)$$

式中:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{\omega_1, \omega_2} &= (\mathbf{D} - \omega_2 \mathbf{U})^{-1} [(1 - \omega_2) \mathbf{D} + \omega_2 \mathbf{L}] \\ &\quad \cdot (\mathbf{D} - \omega_1 \mathbf{L})^{-1} [(1 - \omega_1) \mathbf{D} + \omega_1 \mathbf{U}], \\ \mathbf{f}_{\omega_1, \omega_2} &= (\omega_1 + \omega_2 - \omega_1 \omega_2) (\mathbf{D} - \omega_2 \mathbf{U})^{-1} \mathbf{D} (\mathbf{D} - \omega_1 \mathbf{L})^{-1} \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (3.66)$$



Back

Close



这种推广得到的迭代法通常称为不对称 SOR 迭代法, 简记为 US-SOR 迭代法.

进一步, SSOR 迭代法也可推广到分块矩阵的情形. 对具有如式 (3.34) 结构的分块系数矩阵及相应的向量划分, 有 SSOR 迭代法的另一种推广:

$$\mathbf{x}_i^{(k+\frac{1}{2})} = (1 - \omega)\mathbf{x}_i^{(k)} + \omega \mathbf{A}_{ii}^{-1} \left(\mathbf{b}_i - \sum_{r=1}^{i-1} \mathbf{A}_{ir} \mathbf{x}_r^{(k+1)} - \sum_{r=i+1}^n \mathbf{A}_{ir} \mathbf{x}_r^{(k)} \right),$$
$$i = 1, 2, \dots, n,$$

$$\mathbf{x}_i^{(k+1)} = (1 - \omega)\mathbf{x}_i^{(k+\frac{1}{2})} + \omega \mathbf{A}_{ii}^{-1} \left(\mathbf{b}_i - \sum_{r=1}^{i-1} \mathbf{A}_{ir} \mathbf{x}_r^{(k+\frac{1}{2})} - \sum_{r=i+1}^n \mathbf{A}_{ir} \mathbf{x}_r^{(k+1)} \right),$$
$$i = n, n-1, \dots, 1; \quad k = 0, 1, 2, \dots. \quad (3.67)$$

此即块 SSOR (BSSOR) 迭代法.





例 3.2 用不同的迭代法求解 n 元线性方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, 其中

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ \vdots \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}. \quad (3.68)$$

方程的精确解为 $\mathbf{x}^* = (1, 1, \dots, 1)^T$. 取 $n = 2^{12} - 1 = 4095$, 初始向量为零向量, 容许误差为 10^{-10} .

解 用 Jacobi, GS, SOR 和 SSOR 四种迭代法进行测试, 取松弛因子 $\omega = 1.1$, 得到计算结果如表 3.1 所示.



Back

Close



表 3.1 Jacobi, GS, SOR 和 SSOR 四种迭代法的数值比较

迭代法	迭代次数(k)	CPU 时间	相对残差 ($\ r^{(k)}\ _2/\ b\ _2$)
Jacobi	34	0.0043	5.8104e-11
GS	21	0.0030	9.5383e-11
SOR	17	0.0049	3.4644e-11
SSOR	9	0.0051	8.0601e-12

§3.3.3 AOR 迭代法

有一种技术可以对收敛的迭代格式进行“加速”，或者使得不收敛的迭代格式变得收敛. 这种“加速”技术通常是通过引进一个“加速”或“松弛”参数 $\gamma \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ 来实现的. 基于矩阵分裂 $A = M - N$, 考虑一个新的矩阵 $M_\gamma = \frac{1}{\gamma}M$. 设原迭代法的迭代格式为 $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$, 则新迭代法的迭代格式为

$$x^{(k+1)} = B_\gamma x^{(k)} + f_\gamma, \quad B_\gamma = (1 - \gamma)I + \gamma B, \quad f_\gamma = \gamma f.$$



Back

Close



参数 $\gamma \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ 称为外推参数, 且相应的格式称为原格式的外推. 最优外推参数的确定一般需要较强的假设条件并涉及原迭代矩阵 B 的谱 $\sigma(B)$ 的有关信息.

利用外推法的思想, Hadjidimas (哈吉迪马斯) 于 1978 年引进一种具有两个松弛参数 r 和 ω 的 SOR 类迭代法, 称为加速超松弛方法 (简记为 AOR 方法), 其定义如下:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_{r,\omega} \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}_{r,\omega}, \quad (3.69)$$

式中:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{r,\omega} &= (\mathbf{D} - r\mathbf{L})^{-1} [(1 - \omega)\mathbf{D} + (\omega - r)\mathbf{L} + \omega\mathbf{U}], \\ \mathbf{f}_{r,\omega} &= \omega(\mathbf{D} - r\mathbf{L})^{-1} \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

容易证明: 当 $r = 0$ 时, AOR 方法就是具有外推参数 ω 的外推 Jacobi 方法; 当 $r \neq 0$ 时, AOR 方法就是具有外推参数 $s = \omega/r$ 的





外推 SOR 方法, 其中 r 是原 SOR 方法的松弛因子. 此外, 显然前面的 Jacobi, Gauss-Seidel, SOR 方法等均可认为是 AOR 方法的特殊情形:

- (1) 当 $r = 0, \omega = 1$ 时, AOR 方法即为 Jacobi 方法.
- (2) 当 $r = \omega = 1$ 时, AOR 方法即为 Gauss-Seidel 方法.
- (3) 当 $r = \omega \neq 0$ 时, AOR 方法即为 SOR 方法.

关于 AOR 方法, 有下面的收敛性定理.

定理 3.26 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 为 Hermite 矩阵, 且 $A = D - L - L^H$, D 是 Hermite 正定的, $\det(D - rL) \neq 0, \forall \omega \in (0, 2)$ 且 $r \in (\omega + (2 - \omega)/\mu_{\min}, \omega + (2 - \omega)/\mu_{\max})$, 其中 $\mu_{\min} < 0 < \mu_{\max}$ 为矩阵 $D^{-1}(L + L^H)$ 的最小和最大特征值. 则 $\rho(B_{r,\omega}) < 1$ 当且仅当 A 是正定的.

类似于 SSOR 方法, 可以推广 AOR 方法得到对称 AOR 方法



Back

Close

(简记为 SAOR 方法). 具体形式为

$$\begin{cases} (\mathbf{D} - r\mathbf{L})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = [(1 - \omega)\mathbf{D} + (\omega - r)\mathbf{L} + \omega\mathbf{U}]\mathbf{x}^{(k)} + \omega\mathbf{b}, \\ (\mathbf{D} - r\mathbf{U})\mathbf{x}^{(k+1)} = [(1 - \omega)\mathbf{D} + (\omega - r)\mathbf{U} + \omega\mathbf{L}]\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \omega\mathbf{b}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

上式可以化简为

$$\begin{cases} (\mathbf{D} - r\mathbf{L})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = (\mathbf{D} - r\mathbf{L} - \omega\mathbf{A})\mathbf{x}^{(k)} + \omega\mathbf{b}, \\ (\mathbf{D} - r\mathbf{U})\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D} - r\mathbf{U} - \omega\mathbf{A})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \omega\mathbf{b}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.71)$$

消去 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$, 得

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_{\text{SAOR}}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}_{\text{SAOR}}, \quad (3.72)$$

式中:

$$\mathbf{B}_{\text{SAOR}} = (\mathbf{D} - r\mathbf{L})^{-1}(\mathbf{D} - r\mathbf{U} - \omega\mathbf{A})(\mathbf{D} - r\mathbf{U})^{-1}(\mathbf{D} - r\mathbf{L} - \omega\mathbf{A}),$$

$$\mathbf{f}_{\text{SAOR}} = \omega(\mathbf{D} - \omega\mathbf{U})^{-1}(2\mathbf{D} - r\mathbf{L} - \omega\mathbf{A})(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1}\mathbf{b}.$$



同样可以将 AOR 方法推广到非对称 AOR 方法 (UAOR 方法) 和分块 AOR 方法 (BAOR 方法) 的情形, 这里不再详述.



82/183



Back

Close

§3.4 HSS 迭代法

本节内容主要取材于文献 [21,22]. HSS 迭代法是中国学者白中治等提出的用于求解大型稀疏非 Hermite 正定方程组的一种有效的数值方法. 它是基于系数矩阵的 Hermite 和反 Hermite 分裂 (Hermitian / skew-Hermitian splitting, HSS), 其中包括 HSS 迭代和非精确 HSS (IHSS) 迭代, IHSS 在 HSS 外迭代的每一步用某种 Krylov 子空间方法 (见第 4 章) 求解子问题作为其内迭代过程. 理论分析显示 HSS 方法无条件地收敛到线性方程组的唯一解. 目前, 基于 HSS 的各种迭代方法及与不同预处理方式的结合成为一个研究热点.



Back

Close

§3.4.1 HSS 和 IHSS 方法



84/183

许多科学计算问题需要求解 (复) 线性方程组

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (3.73)$$

式中: $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 为非奇异的大型稀疏非 Hermite 正定矩阵; $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$.

将矩阵 \mathbf{A} 进行 Hermite-反 Hermite 分裂 (HS) 分裂

$$\mathbf{A} = \mathbf{H} + \mathbf{S}, \quad (3.74)$$

式中:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{H}}), \quad \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^{\mathrm{H}}). \quad (3.75)$$

下面将研究基于此特殊矩阵分裂的求解线性方程组 (3.73) 的有效迭代方法.





基于 HS 分裂式 (3.74), 文献 [21] 提出了求解线性方程组 (3.73) 的 Hermite-反 Hermite 分裂迭代法 (简称 HSS 迭代法), 其形式如下:

算法 3.5 (HSS 迭代法)

步 1, 给定初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$, 选取参数 $\alpha > 0$, 容许误差 $\varepsilon > 0$, 置 $k := 0$.

步 2, 计算

$$\begin{cases} (\alpha \mathbf{I} + \mathbf{H})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = (\alpha \mathbf{I} - \mathbf{S})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}, \\ (\alpha \mathbf{I} + \mathbf{S})\mathbf{x}^{(k+1)} = (\alpha \mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \mathbf{b}, \end{cases}$$

步 3, 计算残差 $\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)}$. 若 $\|\mathbf{r}^{(k+1)}\|_2 \leq \varepsilon$, 停算. 否则, 置 $k := k + 1$, 转步 2.

明显地, HSS 迭代法的每一步都在矩阵 \mathbf{A} 的 Hermite 部分和





反 Hermite 部分之间进行交替, 这类似于求解偏微分方程的交替方向隐式 (ADI) 迭代法.

注意到可以调换上述 HSS 迭代法中矩阵 H 和 S 的角色, 即先解关于 $\alpha I + S$ 的方程组, 然后再解关于 $\alpha I + H$ 的方程组. 每个 HSS 迭代的两个半步需要精确求解具有 n 阶系数矩阵 $\alpha I + H$ 和 $\alpha I + S$ 的方程组. 然而, 这在实际实现中是耗时和不切实际的. 为了改进 HSS 迭代法的计算效率, 例如, 在 HSS 迭代法的每一步利用共轭梯度法 (CG 法) 求解关于 $\alpha I + H$ 的方程组 (因为 $\alpha I + H$ 是 Hermite 正定的), 并用某种 Krylov 子空间方法 (如 GMRES 方法, 见第 4 章) 解关于 $\alpha I + S$ 的方程组, 直到预先设定的精度. 这导致一种非精确的 Hermite-反 Hermite 分裂迭代法, 简称 IHSS 迭代法. 内迭代的阈值 (或内迭代步数) 可随外迭代方案的不同而变化. 因此, IHSS 迭代实际上是求解式 (3.73) 的一种非定常迭代法.



Back

Close

对给定正常数 α , IHSS 迭代法形式如下.

算法 3.6 (IHSS 迭代法)

步 1, 给定初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$, 选取参数 $\alpha > 0$, 容许误差 $\varepsilon > 0$, 置 $k := 0$.

步 2, 以 $\mathbf{x}^{(k)}$ 为初值, 利用一种内迭代 (如 CG 法) 近似求解 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$:

$$(\alpha \mathbf{I} + \mathbf{H})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} \approx (\alpha \mathbf{I} - \mathbf{S})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}.$$

步 3, 以 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$ 为初值, 利用一种内迭代 (如某种 krylov 子空间方法) 近似求解 $\mathbf{x}^{(k+1)}$:

$$(\alpha \mathbf{I} + \mathbf{S})\mathbf{x}^{(k+1)} \approx (\alpha \mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \mathbf{b}.$$

步 4, 计算残差 $\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)}$. 若 $\|\mathbf{r}^{(k+1)}\|_2 \leq \varepsilon$, 停算. 否则, 置 $k := k + 1$, 转步 2.



87/183



Back

Close



为了便于数值实现和理论分析, 可将上面的 IHSS 迭代法重写为如下等价形式: 其中 $\|\cdot\|$ 是某种向量范数, 并记原方程组的残差为 $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}$, $\mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$, 内迭代的残差分别记为

$$\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)} - (\alpha\mathbf{I} + \mathbf{H})\mathbf{z}^{(k)}; \quad (3.76)$$

$$\mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})} - (\alpha\mathbf{I} + \mathbf{S})\mathbf{z}^{(k+\frac{1}{2})}. \quad (3.77)$$

则可以改写算法 3.6 为如下形式.

算法 3.7 (IHSS 迭代法)

步 1, 给定初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$, 选取参数 $\alpha > 0$, 容许误差 $\varepsilon > 0$, 置 $k := 0$.

步 2, 以 $\mathbf{x}^{(k)}$ 为初值, 迭代求解 $(\alpha\mathbf{I} + \mathbf{H})\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)}$, 直到 $\|\mathbf{p}^{(k)}\| \leq \varepsilon_k \|\mathbf{r}^{(k)}\|$.

步 3, 计算 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{z}^{(k)}$.



Back

Close



步 4, 以 $\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$ 为初值, 迭代求解 $(\alpha \mathbf{I} + \mathbf{S})\mathbf{z}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})}$, 直到 $\|\mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}\| \leq \eta_k \|\mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})}\|$.

步 5, 计算 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \mathbf{z}^{(k+\frac{1}{2})}$.

步 6, 计算残差 $\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)}$. 若 $\|\mathbf{r}^{(k+1)}\|_2 \leq \varepsilon$, 停算. 否则, 置 $k := k + 1$, 转步 2.

事实上, 这里构造了求解非 Hermite 正定方程组的一个一般的迭代法框架. 在此迭代框架下有一些组合. 可精确或非精确地求解 Hermite 部分, 也可精确或非精确地求解反 Hermite 部分. 最佳选择依赖于 Hermite 和反 Hermite 矩阵的结构. 所得的相应精确或非精确 Hermite-反 Hermite 分裂迭代的收敛性理论可类似于下面的分析来建立, 只要做少许的修改即可.

下面考虑 HSS 和 IHSS 迭代法的收敛性和收敛速度方面的一些理论结果. 首先注意到 HSS 迭代法可推广到两步分裂迭代框架,





下面的引理先给出两步分裂迭代的一个一般性收敛条件.

引理 3.1 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $A = M_i - N_i$ ($i = 1, 2$) 为矩阵 A 的两个分裂. $\mathbf{x}^{(0)}$ 为给定的初始向量. 如果 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 是由下面两步分裂迭代法所定义的序列

$$\begin{cases} M_1 \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = N_1 \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}, \\ M_2 \mathbf{x}^{(k+1)} = N_2 \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \mathbf{b}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

则

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = M_2^{-1} N_2 M_1^{-1} N_1 \mathbf{x}^{(k)} + M_2^{-1} (M_1 + N_2) M_1^{-1} \mathbf{b},$$
$$k = 0, 1, 2, \dots$$

进一步, 如果迭代矩阵 $M_2^{-1} N_2 M_1^{-1} N_1$ 的谱半径 $\rho(M_2^{-1} N_2 M_1^{-1} N_1)$ 小于 1, 则迭代序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 对所有初始向量 $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{C}^n$ 都收敛于线性方程组 (3.73) 的唯一解 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^n$.



Back

Close



对于 HSS 迭代法, 应用引理 3.1 及矩阵谱的相似不变性易得如下定理.

定理 3.27 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 为正定矩阵, $\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{H}})$ 和 $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^{\mathrm{H}})$ 为其 Hermite 和反 Hermite 部分, 且 α 是一个正常数. 则 HSS 迭代矩阵 $\mathbf{M}(\alpha)$ 为

$$\mathbf{M}(\alpha) = (\alpha \mathbf{I} + \mathbf{S})^{-1}(\alpha \mathbf{I} - \mathbf{H})(\alpha \mathbf{I} + \mathbf{H})^{-1}(\alpha \mathbf{I} - \mathbf{S}), \quad (3.78)$$

且其谱半径 $\rho(\mathbf{M}(\alpha))$ 有上界

$$\sigma(\alpha) \equiv \max_{\lambda_i \in \lambda(\mathbf{H})} \left| \frac{\alpha - \lambda_i}{\alpha + \lambda_i} \right|,$$

式中: $\lambda(\mathbf{H})$ 为矩阵 \mathbf{H} 的谱集, 因此成立

$$\rho(\mathbf{M}(\alpha)) \leq \sigma(\alpha) < 1, \quad \forall \alpha > 0,$$

即 HSS 迭代收敛到线性方程组 (3.73) 的唯一解 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^n$.





证明 在引理 3.1 中, 记

$$M_1 = \alpha I + H, N_1 = \alpha I - S, M_2 = \alpha I + S, N_2 = \alpha I - H,$$

注意到对任意的 $\alpha > 0$, $\alpha I + H$ 和 $\alpha I + S$ 是非奇异的, 则由引理 3.1 立即可得式 (3.78).

进一步, 利用矩阵谱的相似不变性, 得

$$\begin{aligned} \rho(M(\alpha)) &= \rho((\alpha I + S)^{-1}(\alpha I - H)(\alpha I + H)^{-1}(\alpha I - S)) \\ &= \rho((\alpha I - H)(\alpha I + H)^{-1}(\alpha I - S)(\alpha I + S)^{-1}) \\ &\leq \|(\alpha I - H)(\alpha I + H)^{-1}\|_2 \cdot \|(\alpha I - S)(\alpha I + S)^{-1}\|_2. \end{aligned}$$

记 $Q(\alpha) = (\alpha I - S)(\alpha I + S)^{-1}$, 注意到 $S^H = -S$, 有

$$\begin{aligned} Q(\alpha)^H Q(\alpha) &= (\alpha I - S)^{-1}(\alpha I + S)(\alpha I - S)(\alpha I + S)^{-1} \\ &= (\alpha I - S)^{-1}(\alpha I - S)(\alpha I + S)(\alpha I + S)^{-1} = I, \end{aligned}$$



Back

Close



即 $Q(\alpha)$ 是酉矩阵, 故有 $\|Q(\alpha)\|_2 = 1$. 从而, 有

$$\rho(M(\alpha)) \leq \|(\alpha I - H)(\alpha I + H)^{-1}\|_2 = \max_{\lambda_i \in \lambda(H)} \left| \frac{\alpha - \lambda_i}{\alpha + \lambda_i} \right| \equiv \sigma(\alpha).$$

由于 $\lambda_i > 0 (i = 1, 2, \dots, n)$ 及 $\alpha > 0$, 容易推得 $\rho(M(\alpha)) \leq \sigma(\alpha) < 1$. 证毕. \square

定理 3.27 表明 HSS 迭代法的收敛速度以 $\sigma(\alpha)$ 为上界, 而 $\sigma(\alpha)$ 仅依赖于 A 的 Hermite 部分 H 的谱 (而不依赖于反 Hermite 部分 S 的谱或系数矩阵 A 的谱).

现引入向量范数 $\|x\|_* = \|(\alpha I + S)x\|_2 (\forall x \in \mathbb{C}^n)$ 且其诱导矩阵范数表示为

$$\|A\|_* = \|(\alpha I + S)A(\alpha I + S)^{-1}\|_2 (\forall A \in \mathbb{C}^{n \times n}),$$

则由定理 3.27 的证明可见

$$\|M(\alpha)\|_* = \|(\alpha I - H)(\alpha I + H)^{-1}(\alpha I - S)(\alpha I + S)^{-1}\|_2 \leq \sigma(\alpha),$$



从而

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_* \leq \sigma(\alpha) \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_*, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

因此, $\sigma(\alpha)$ 也是 HSS 迭代压缩因子在 $\|\cdot\|_*$ 范数意义下的一个上界. 如果 Hermite 部分 \mathbf{H} 的特征值的上界和下界是已知的, 则可得 $\sigma(\alpha)$ (或 $\rho(\mathbf{M}(\alpha))$ 和 $\|\mathbf{M}(\alpha)\|_*$ 之上界) 的最优参数. 此事实下面的推论中陈述.

推论 3.2 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 为正定矩阵, $\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^H)$ 和 $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^H)$ 为其 Hermite 和反 Hermite 部分, 且 λ_{\min} 和 λ_{\max} 分别为矩阵 \mathbf{H} 的最小和最大特征值, α 是一个正常数. 则

$$\alpha^* \equiv \arg \min_{\alpha} \left\{ \max_{\lambda_{\min} \leq \lambda \leq \lambda_{\max}} \left| \frac{\alpha - \lambda}{\alpha + \lambda} \right| \right\} = \sqrt{\lambda_{\min} \lambda_{\max}},$$



94/183



Back

Close

且

$$\sigma(\alpha^*) = \frac{\sqrt{\lambda_{\max}} - \sqrt{\lambda_{\min}}}{\sqrt{\lambda_{\max}} + \sqrt{\lambda_{\min}}} = \frac{\sqrt{\kappa(\mathbf{H})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathbf{H})} + 1},$$

式中: $\kappa(\mathbf{H}) = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ 为 \mathbf{H} 的谱条件数.

证明 注意到对任意的 $\alpha > 0$, 函数 $f(\lambda) = \frac{\alpha - \lambda}{\alpha + \lambda}$ 关于 λ 是单调递减的 ($f'(\lambda) = -2\alpha/(\alpha + \lambda)^2 < 0$), 故有

$$\sigma(\alpha) = \max \left\{ \left| \frac{\alpha - \lambda_{\min}}{\alpha + \lambda_{\min}} \right|, \left| \frac{\alpha - \lambda_{\max}}{\alpha + \lambda_{\max}} \right| \right\}. \quad (3.79)$$

若 α^* 是 $\sigma(\alpha)$ 的极小点, 则必有 $\alpha^* = \lambda_{\min} > 0$, $\alpha^* - \lambda_{\max} < 0$,

$$\frac{\alpha^* - \lambda_{\min}}{\alpha^* + \lambda_{\min}} = -\frac{\alpha^* - \lambda_{\max}}{\alpha^* + \lambda_{\max}}.$$

从上式解得

$$\alpha^* = \sqrt{\lambda_{\min} \lambda_{\max}},$$

从而推论的结论成立. 证毕. □



95/183



Back

Close



这里强调在推论 3.2 中, 最优参数 α^* 极小化迭代矩阵谱半径的上界 $\sigma(\alpha)$, 而不是极小化迭代矩阵的谱半径. 推论表明当使用最优参数 α^* 时, HSS 迭代法的收敛速度上界与共轭梯度方法的大致相同, 且当 A 为 Hermite 时, 它们是相同的. 应该指出, 当系数矩阵 A 为正规矩阵时, 有 $HS = SH$, 因此 $\rho(M(\alpha)) = \|M(\alpha)\|_* = \sigma(\alpha)$, 此时最优参数 α^* 极小化所有这三个量.

下面的定理在更一般的情况下分析 IHSS 迭代法. 特别地, 考虑对两步分裂技术的非精确迭代 (比较引理 3.1). 为此, 将 $\|\cdot\|_*$ 推广到 $\|\cdot\|_{M_2}$, 现定义为 $\|x\|_{M_2} = \|M_2 x\|_2$ ($\forall x \in \mathbb{C}^n$) 且它诱导矩阵范数为 $\|A\|_{M_2} = \|M_2 A M_2^{-1}\|_2$ ($\forall A \in \mathbb{C}^{n \times n}$).

定理 3.28 设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 且 $A = M_i - N_i$ ($i = 1, 2$) 为 A 的两个分裂. 如果 $\{x^{(k)}\}$ 是一个如下定义的迭代序列

$$x^{(k+\frac{1}{2})} = x^{(k)} + z^{(k)}, \quad M_1 z^{(k)} = r^{(k)} - p^{(k)} \quad (3.80)$$





满足 $\|\mathbf{p}^{(k)}\|_2 \leq \varepsilon_k \|\mathbf{r}^{(k)}\|_2$, 其中 $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}$, 且

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \mathbf{z}^{(k+\frac{1}{2})}, \quad \mathbf{M}_2 \mathbf{z}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})} - \mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})} \quad (3.81)$$

满足 $\|\mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}\|_2 \leq \eta_k \|\mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})}\|_2$, 其中 $\mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}$, 则 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 形如

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(k+1)} = & \mathbf{M}_2^{-1} \mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{M}_2^{-1} (\mathbf{I} + \mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1}) \mathbf{b} \\ & - \mathbf{M}_2^{-1} (\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{p}^{(k)} + \mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}). \end{aligned} \quad (3.82)$$

进一步, 如果 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^n$ 是方程组 (3.73) 的精确解, 则有

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} & \leq (\sigma + \mu\theta\varepsilon_k + \theta(\rho + \theta\nu\varepsilon_k)\eta_k) \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2}, \\ k & = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (3.83)$$



式中:

$$\begin{aligned}\sigma &= \|\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 \mathbf{M}_2^{-1}\|_2, \quad \rho = \|\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 \mathbf{M}_2^{-1}\|_2, \\ \mu &= \|\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1}\|_2, \quad \theta = \|\mathbf{A} \mathbf{M}_2^{-1}\|_2, \quad \nu = \|\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^{-1}\|_2.\end{aligned}$$

特别地, 如果

$$\sigma + \mu\theta\varepsilon_{\max} + \theta(\rho + \theta\nu\varepsilon_{\max})\eta_{\max} < 1,$$

则迭代序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 收敛到 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^n$, 其中 $\varepsilon_{\max} = \max_k \{\varepsilon_k\}$ 且 $\eta_{\max} = \max_k \{\eta_k\}$.

证明 由式 (3.80) 并将 $\mathbf{r}^{(k)}$ 代入其中, 得

$$\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{M}_1^{-1}(\mathbf{r}^{(k)} - \mathbf{p}^{(k)}) = \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{b} - \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{p}^{(k)}.$$

(3.84)





类似地, 由式 (3.81) 并将 $\mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})}$ 代入其中, 得

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(k+1)} &= \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \mathbf{M}_2^{-1}(\mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})} - \mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}) \\ &= \mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{N}_2\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{b} - \mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}.\end{aligned}$$

因此有

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(k+1)} &= \mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{N}_2(\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{N}_1\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{b} - \mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{p}^{(k)}) \\ &\quad + \mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{b} - \mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})} \\ &= \mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{N}_2\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{N}_1\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{M}_2^{-1}(\mathbf{I} + \mathbf{N}_2\mathbf{M}_1^{-1})\mathbf{b} \\ &\quad - \mathbf{M}_2^{-1}(\mathbf{N}_2\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{p}^{(k)} + \mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}).\end{aligned}\tag{3.85}$$

由于 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^n$ 是方程组 (3.73) 的精确解, 必满足

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{N}_1\mathbf{x}^* + \mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{b},\tag{3.86}$$

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{N}_2\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{N}_1\mathbf{x}^* + \mathbf{M}_2^{-1}(\mathbf{I} + \mathbf{N}_2\mathbf{M}_1^{-1})\mathbf{b}.\tag{3.87}$$





分别由式 (3.84) 减去式 (3.86), 由式 (3.85) 减去式 (3.87), 有

$$\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} - \mathbf{x}^* = \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 (\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*) - \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{p}^{(k)}, \quad (3.88)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^* &= \mathbf{M}_2^{-1} \mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 (\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*) \\ &\quad - \mathbf{M}_2^{-1} (\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{p}^{(k)} + \mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}). \end{aligned} \quad (3.89)$$

式 (3.88) 和式 (3.89) 两边取范数, 得

$$\begin{aligned} &\|\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\ &\leq \|\mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 (\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*)\|_{M_2} + \|\mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{p}^{(k)}\|_{M_2} \\ &\leq \|\mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1\|_{M_2} \cdot \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} + \|\mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{p}^{(k)}\|_{M_2} \\ &\leq \|\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 \mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} + \|\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{p}^{(k)}\|_2, \end{aligned} \quad (3.90)$$



Back

Close



$$\begin{aligned}
& \|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
& \leq \|\mathbf{M}_2^{-1} \mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1\|_{M_2} \cdot \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
& \quad + \|\mathbf{M}_2^{-1} (\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{p}^{(k)} + \mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})})\|_{M_2} \\
& = \|\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 \mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
& \quad + \|\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{p}^{(k)} + \mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}\|_2 \\
& \leq \|\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{N}_1 \mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
& \quad + \|\mathbf{N}_2 \mathbf{M}_1^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{p}^{(k)}\|_2 + \|\mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}\|_2.
\end{aligned} \tag{3.91}$$

注意到

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{r}^{(k)}\|_2 &= \|\mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(k)}\|_2 = \|\mathbf{A}(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(k)})\|_2 \\
&\leq \|\mathbf{A} \mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(k)}\|_{M_2},
\end{aligned}$$



Back

Close



$$\begin{aligned}\|\mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})}\|_2 &= \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}\|_2 = \|\mathbf{A}(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})})\|_2 \\ &\leq \|\mathbf{A}\mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}\|_{M_2},\end{aligned}$$

由式 (3.88) 和序列 $\{\mathbf{p}^{(k)}\}$ 和 $\{\mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}\}$ 的定义, 有

$$\|\mathbf{p}^{(k)}\|_2 \leq \varepsilon_k \|\mathbf{r}^{(k)}\|_2 \leq \varepsilon_k \|\mathbf{A}\mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2}, \quad (3.92)$$

$$\|\mathbf{q}^{(k+\frac{1}{2})}\|_2 \leq \eta_k \|\mathbf{r}^{(k+\frac{1}{2})}\|_2 \quad (3.93)$$

$$\begin{aligned}&\leq \eta_k \|\mathbf{A}\mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \left(\|\mathbf{M}_2\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{N}_1\mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \cdot \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \right. \\ &\quad \left. + \|\mathbf{M}_2\mathbf{M}_1^{-1}\| \cdot \|\mathbf{p}^{(k)}\|_2 \right) \\ &\leq \eta_k \|\mathbf{A}\mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \left(\|\mathbf{M}_2\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{N}_1\mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon_k \|\mathbf{M}_2\mathbf{M}_1^{-1}\|_2 \|\mathbf{A}\mathbf{M}_2^{-1}\|_2 \right) \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2}.\end{aligned}$$





将式 (3.92) 和式 (3.93) 代入式 (3.91), 得

$$\begin{aligned}
 & \| \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^* \|_{M_2} \\
 & \leq \left[\| \boldsymbol{N}_2 \boldsymbol{M}_1^{-1} \boldsymbol{N}_1 \boldsymbol{M}_2^{-1} \| + \varepsilon_k \| \boldsymbol{N}_2 \boldsymbol{M}_1^{-1} \| \cdot \| \boldsymbol{A} \boldsymbol{M}_2^{-1} \| + \eta_k \| \boldsymbol{A} \boldsymbol{M}_2^{-1} \| \right. \\
 & \quad \times \left. \left(\| \boldsymbol{M}_2 \boldsymbol{M}_1^{-1} \boldsymbol{N}_1 \boldsymbol{M}_2^{-1} \| + \varepsilon_k \| \boldsymbol{M}_2 \boldsymbol{M}_1^{-1} \| \cdot \| \boldsymbol{A} \boldsymbol{M}_2^{-1} \| \right) \right] \cdot \| \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* \|_{M_2} \\
 & \leq \left[\sigma + \mu \theta \varepsilon_k + \theta (\rho + \theta \nu \varepsilon_k) \eta_k \right] \cdot \| \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* \|_{M_2}.
 \end{aligned}$$

证毕. □

注 3.3 如果在某些应用中可精确求解内方程组, 相应的量 $\{\varepsilon_k\}$ 和 $\{\eta_k\}$ 及 ε_{\max} 和 η_{\max} 等于零. 从而得到 IHSS 迭代法的收敛速度与 HSS 迭代法的相同.



Back

Close



将定理 3.28 应用到 Hermite 和反 Hermite 分裂

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= \mathbf{M}_1 - \mathbf{N}_1 \equiv (\alpha \mathbf{I} + \mathbf{H}) - (\alpha \mathbf{I} - \mathbf{S}) \\ &= \mathbf{M}_2 - \mathbf{N}_2 \equiv (\alpha \mathbf{I} + \mathbf{S}) - (\alpha \mathbf{I} - \mathbf{H}),\end{aligned}$$

直接得到下面关于 IHSS 迭代法的收敛性定理.

定理 3.29 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 为正定矩阵, $\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{H}})$ 和 $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^{\mathrm{H}})$ 为其 Hermite 和反 Hermite 部分, 且 α 是一个正常数. 若 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 是由 IHSS 迭代法产生的迭代序列且方程组 (3.73) 的精确解是 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^n$, 则成立

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_* \leq (\sigma(\alpha) + \theta \rho \eta_k)(1 + \theta \varepsilon_k) \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_*, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

式中: 范数 $\|\cdot\|_*$ 的定义如前,

$$\rho = \|(\alpha \mathbf{I} + \mathbf{S})(\alpha \mathbf{I} + \mathbf{H})^{-1}\|_2, \quad \theta = \|\mathbf{A}(\alpha \mathbf{I} + \mathbf{S})^{-1}\|_2. \quad (3.94)$$



Back

Close



特别地, 若 $(\sigma(\alpha) + \theta\rho\eta_{\max})(1 + \theta\varepsilon_{\max}) < 1$, 则迭代序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 收敛到 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^n$, 其中 $\varepsilon_{\max} = \max_k \{\varepsilon_k\}$ 且 $\eta_{\max} = \max_k \{\eta_k\}$.

依据定理 3.28, 可选择阈值来极小化两步分裂迭代法的计算工作量. 注意到不需要当 k 增大时阈值 $\{\varepsilon_k\}$ 和 $\{\eta_k\}$ 趋向于零来得到 IHSS 迭代法的收敛性. 下面的定理给出选择阈值 $\{\varepsilon_k\}$ 和 $\{\eta_k\}$ 的一种方式, 使得两步分裂迭代法的原收敛速度 (比较引理 3.1) 可被渐近地恢复.

定理 3.30 设定理 3.28 的条件成立, $\{\tau_1(k)\}$ 和 $\{\tau_2(k)\}$ 是满足 $\tau_1(k) \geq 1$, $\tau_2(k) \geq 1$ 的非降正数序列, 且 $\limsup_{k \rightarrow \infty} \tau_1(k) = \limsup_{k \rightarrow \infty} \tau_2(k) = +\infty$, δ_1 和 δ_2 为属于 $(0, 1)$ 区间的实常数, 满足

$$\varepsilon_k \leq c_1 \delta_1^{\tau_1(k)}, \quad \eta_k \leq c_2 \delta_2^{\tau_2(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.95)$$



Back

Close



式中: c_1 和 c_2 为非负常数, 则有

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \leq (\sqrt{\sigma} + \omega\theta\delta^{\tau(k)})^2 \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

式中:

$$\tau(k) = \min\{\tau_1(k), \tau_2(k)\}, \quad \delta = \max\{\delta_1, \delta_2\},$$

$$\omega = \max\left\{\sqrt{c_1 c_2 \nu}, \frac{1}{2\sqrt{\sigma}}(c_1 \mu + c_2 \rho)\right\}.$$

特别地, 有

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2}}{\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2}} = \sigma,$$

即非精确两步分裂迭代法的收敛速度渐近地与精确两步分裂迭代法的相同.



Back

Close



证明 由式 (3.83) 和式 (3.95), 得

$$\begin{aligned}
 \|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} &\leq (\sigma + \mu\theta\varepsilon_k + \theta(\rho + \theta\nu\varepsilon_k)\eta_k) \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
 &\leq [\sigma + \mu\theta c_1 \delta_1^{\tau_1(k)} + \theta(\rho + \theta\nu c_1 \delta_1^{\tau_1(k)}) c_2 \delta_2^{\tau_2(k)}] \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
 &\leq [\sigma + \mu\theta c_1 \delta^{\tau(k)} + \theta(\rho + \theta\nu c_1 \delta^{\tau(k)}) c_2 \delta^{\tau(k)}] \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
 &= [\sigma + (c_1\mu + c_2\rho)\theta\delta^{\tau(k)} + c_1c_2\nu\theta^2\delta^{2\tau(k)}] \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
 &\leq (\sigma + 2\omega\sqrt{\sigma}\theta\delta^{\tau(k)} + \omega^2\theta^2\delta^{2\tau(k)}) \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2} \\
 &= (\sqrt{\sigma} + \omega\theta\delta^{\tau(k)})^2 \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{M_2}.
 \end{aligned}$$

由此即得定理的结论. 证毕. \square

由定理 3.29 和定理 3.30 立即可导出下面 IHSS 迭代法的收敛性结果.

定理 3.31 设定理 3.29 的条件成立, $\{\tau_1(k)\}$ 和 $\{\tau_2(k)\}$ 是满足 $\tau_1(k) \geq 1$, $\tau_2(k) \geq 1$ 的非降正数序列, 且 $\limsup_{k \rightarrow \infty} \tau_1(k) =$



Back

Close



$\limsup_{k \rightarrow \infty} \tau_2(k) = +\infty$, δ_1 和 δ_2 为属于 $(0, 1)$ 区间的实常数, 满足式 (3.95). 则成立

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_* \leq (\sqrt{\sigma(\alpha)} + \omega\theta\delta^{\tau(k)})^2 \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_*, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

式中: ρ 和 θ 由式 (3.94) 定义; $\tau(k)$ 和 δ 由定理 3.30 定义, 且

$$\omega = \max \left\{ \sqrt{c_1 c_2 \rho}, \frac{1}{2\sqrt{\sigma(\alpha)}} (c_1 \sigma(\alpha) + c_2 \rho) \right\}.$$

特别地, 有

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|_*}{\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_*} = \sigma(\alpha),$$

即 IHSS 迭代法的收敛速度渐近地与 HSS 迭代法的相同. 此处的范数 $\|\cdot\|_*$ 定义如前.

定理 3.31 表明如果阈值 $\{\varepsilon_k\}$ 和 $\{\eta_k\}$ 如式 (3.95) 中所选择, 则 IHSS 迭代法收敛到方程组 (3.73) 的唯一解 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^n$, 且 IHSS 迭代





渐近收敛因子的上界趋向于 HSS 迭代的 $\sigma(\alpha)$ (见定理 3.27). 进一步, 式 (3.95) 也可用 $\{\varepsilon_k\}$ 和 $\{\eta_k\}$ 趋向于零来替代.

下面给出 IHSS 迭代法的运算量和存储量估计.

用 ν 表示一次矩阵向量乘积 Ax 所需要的运算量, $\chi_k(H)$ 和 $\chi_k(S)$ 分别是用阈值 $\{\varepsilon_k\}$ 和 $\{\eta_k\}$ 来非精确求解涉及 H 和 S 的内方程组所需的运算量, 则一次 IHSS 迭代的计算工作量可由表 3.2 来估计. 直接计算表明计算 IHSS 迭代每一步的总工作量是 $O(4n - 2\nu + \chi_k(H) + \chi_k(S))$.

表 3.2 一次 IHSS 迭代所需的工作量

运算	工作量	运算	工作量
$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$	$n + \nu$	$(\alpha I + H)z^{(k+\frac{1}{2})} = r^{(k)}$	$\chi_k(H)$
$x^{(k+\frac{1}{2})} = x^{(k)} + z^{(k+\frac{1}{2})}$	n	$r^{(k+\frac{1}{2})} = b - Ax^{(k+\frac{1}{2})}$	$n + \nu$
$(\alpha I + S)z^{(k+\frac{1}{2})} = r^{(k+\frac{1}{2})}$	$\chi_k(S)$	$x^{(k+1)} = x^{(k+\frac{1}{2})} + z^{(k+1)}$	n



Back

Close



另外, 简单的计算表明所需要的存储量是储存 $x^{(k)}$, b , $r^{(k)}$, $z^{(k)}$. 对于内方程组的非精确解法器, 只需要另外一些辅助向量, 例如, CG 方法需要大约五个向量 (见第 4 章). 另外, 不需要显式地存储 H 和 S , 所需要的仅是执行关于这两个矩阵的矩阵向量乘积子程序. 因此, 所需的存储总量是 $O(n)$, 即与未知量个数的量同阶.

§3.4.2 PHSS 迭代法

预处理技术可以大大加快迭代法的收敛速度. 利用 HSS 迭代技术, 文献 [22] 对 2×2 块结构的正半定线性方程组, 建立了一类预处理 HSS 迭代法, 简称 PHSS 迭代法. 理论分析表明方法无条件地收敛到线性方程组的唯一解. 此外, 推导出其收缩因子的上界并给出所涉及迭代参数的最佳选择.



Back

Close

考虑具有块系数矩阵的线性方程组

$$\mathcal{A}x := \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{B}^H & \mathbf{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix} := \mathbf{b}, \quad (3.96)$$

式中: 子矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ 是 Hermite 正定的; $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ ($m \geq n$) 是列满秩的. 因此, 矩阵 $\mathcal{A} \in \mathbb{C}^{(m+n) \times (m+n)}$ 是非奇异、非 Hermite 半正定矩阵.

块线性方程组 (3.96) 相应于线性约束二次规划问题或鞍点问题的 Kuhn–Tucker 条件. 这些方程组典型地来自于二阶椭圆方程、弹性问题或 Stokes 方程的混合有限元近似. 下面首先给出预处理块线性方程组 (3.96) 一个等价的形式, 然后应用 HSS 方法于预处理块线性方程组, 从而对非 Hermite 半正定方程组 (3.96) 建立一类 PHSS 迭代法.





引入预处理矩阵

$$\mathcal{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{S} \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{(m+n) \times (m+n)} \text{ 和 } \hat{\mathbf{B}} = \mathbf{A}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{B} \mathbf{S}^{-\frac{1}{2}} \in \mathbb{C}^{m \times n}, \quad (3.97)$$

式中: $\mathbf{S} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 为可自由选择的 Hermite 正定子矩阵, 其最佳选择在后面讨论. 定义

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{A}} &= \mathcal{P}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{A} \mathcal{P}^{-\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \hat{\mathbf{B}} \\ -\hat{\mathbf{B}}^{\text{H}} & \mathbf{O} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}} \\ \hat{\mathbf{z}} \end{bmatrix} = \mathcal{P}^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{\frac{1}{2}} \mathbf{y} \\ \mathbf{S}^{\frac{1}{2}} \mathbf{z} \end{bmatrix}, \\ \hat{\mathbf{b}} &= \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{f}} \\ \hat{\mathbf{g}} \end{bmatrix} = \mathcal{P}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{f} \\ \mathbf{S}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{g} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$



Back

Close



则线性方程组 (3.96) 可转换成下面等价的预处理形式:

$$\hat{\mathcal{A}} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}} \\ \hat{\mathbf{z}} \end{bmatrix} = \hat{\mathbf{b}}. \quad (3.98)$$

显然, 矩阵 $\hat{\mathcal{A}} \in \mathbb{C}^{(m+n) \times (m+n)}$ 的 Hermite 和反 Hermite 部分分别为

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathcal{A}} + \hat{\mathcal{A}}^{\mathrm{H}}) = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{O} \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathcal{A}} - \hat{\mathcal{A}}^{\mathrm{H}}) = \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \hat{\mathbf{B}} \\ -\hat{\mathbf{B}}^{\mathrm{H}} & \mathbf{O} \end{bmatrix}.$$

对式 (3.98) 直接应用 HSS 迭代格式, 得

$$\begin{cases} (\alpha \mathbf{I} + \hat{\mathbf{H}}) \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}^{(k+\frac{1}{2})} \\ \hat{\mathbf{z}}^{(k+\frac{1}{2})} \end{bmatrix} = (\alpha \mathbf{I} - \hat{\mathbf{S}}) \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}^{(k)} \\ \hat{\mathbf{z}}^{(k)} \end{bmatrix} + \hat{\mathbf{b}}, \\ (\alpha \mathbf{I} + \hat{\mathbf{S}}) \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}^{(k+1)} \\ \hat{\mathbf{z}}^{(k+1)} \end{bmatrix} = (\alpha \mathbf{I} - \hat{\mathbf{H}}) \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}^{(k+\frac{1}{2})} \\ \hat{\mathbf{z}}^{(k+\frac{1}{2})} \end{bmatrix} + \hat{\mathbf{b}}. \end{cases}$$



Back

Close



或等价地, 有

$$\begin{bmatrix} \alpha \mathbf{I} & \hat{\mathbf{B}} \\ -\hat{\mathbf{B}}^{\text{H}} & \alpha \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}^{(k+1)} \\ \hat{\mathbf{z}}^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\alpha(\alpha-1)}{\alpha+1} \mathbf{I} & -\frac{\alpha-1}{\alpha+1} \hat{\mathbf{B}} \\ \hat{\mathbf{B}}^{\text{H}} & \alpha \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}^{(k)} \\ \hat{\mathbf{z}}^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{2\alpha}{\alpha+1} \hat{\mathbf{f}} \\ 2\hat{\mathbf{g}} \end{bmatrix}$$

从而按原变量, 得

$$\begin{bmatrix} \alpha \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{B}^{\text{H}} & \alpha \mathbf{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}^{(k+1)} \\ \mathbf{z}^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\alpha(\alpha-1)}{\alpha+1} \mathbf{A} & -\frac{\alpha-1}{\alpha+1} \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^{\text{H}} & \alpha \mathbf{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}^{(k)} \\ \mathbf{z}^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{2\alpha}{\alpha+1} \mathbf{f} \\ 2\mathbf{g} \end{bmatrix} \quad (3.99)$$

这导致下面求解块线性方程组 (3.96) 的 PHSS 迭代法.

算法 3.8 (PHSS 迭代法)

步 1, 给定一个初始向量 $\mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}^{(0)} \\ \mathbf{z}^{(0)} \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{m+n}$, 参数 $\alpha > 0$,

容许误差 $\varepsilon > 0$. 置 $k := 0$.

步 2, 用 HSS 迭代法求解式 (3.99) 计算 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}^{(k+1)} \\ \mathbf{z}^{(k+1)} \end{bmatrix} \in$



Back

Close

\mathbb{C}^{m+n} .

步 3, 计算残差 $\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{b} - \mathcal{A}\mathbf{x}^{(k+1)}$. 若 $\|\mathbf{r}^{(k+1)}\|_2 \leq \varepsilon$, 停算.
否则, 置 $k := k + 1$, 转步 2.



115/183

明显地, PHSS 迭代法可等价地重写为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}^{(k+1)} \\ \mathbf{z}^{(k+1)} \end{bmatrix} = \mathcal{T}(\alpha) \begin{bmatrix} \mathbf{y}^{(k)} \\ \mathbf{z}^{(k)} \end{bmatrix} + \mathcal{M}(\alpha)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}, \quad (3.100)$$

式中:

$$\begin{cases} \mathcal{T}(\alpha) = \begin{bmatrix} \alpha \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{B}^H & \alpha \mathbf{S} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\alpha(\alpha-1)}{\alpha+1} \mathbf{A} & -\frac{\alpha-1}{\alpha+1} \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^H & \alpha \mathbf{S} \end{bmatrix}, \\ \mathcal{M}(\alpha)^{-1} = \begin{bmatrix} \alpha \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{B}^H & \alpha \mathbf{S} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{2\alpha}{\alpha+1} \mathbf{I} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & 2\mathbf{I} \end{bmatrix}. \end{cases} \quad (3.101)$$



Back

Close



这里 $\mathcal{T}(\alpha)$ 是 PHSS 迭代法的迭代矩阵. 事实上, 式 (3.100) 也可来自于系数矩阵 \mathcal{A} 的分裂

$$\mathcal{A} = \mathcal{M}(\alpha) - \mathcal{N}(\alpha) = \begin{bmatrix} \frac{\alpha+1}{2}\mathbf{A} & \frac{\alpha+1}{2\alpha}\mathbf{B} \\ -\frac{1}{2}\mathbf{B}^H & \frac{\alpha}{2}\mathbf{S} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\alpha-1}{2}\mathbf{A} & -\frac{\alpha-1}{2\alpha}\mathbf{B} \\ \frac{1}{2}\mathbf{B}^H & \frac{\alpha}{2}\mathbf{S} \end{bmatrix}. \quad (3.102)$$

在实际计算中, PHSS 迭代法的每次迭代需要求解具有如下系数矩阵的线性方程组

$$\widetilde{\mathcal{M}}(\alpha) = \begin{bmatrix} \alpha\mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{B}^H & \alpha\mathbf{S} \end{bmatrix}, \quad (3.103)$$

或等价地, 有

$$\mathcal{M}(\alpha) = \begin{bmatrix} \frac{\alpha+1}{2}\mathbf{A} & \frac{\alpha+1}{2\alpha}\mathbf{B} \\ -\frac{1}{2}\mathbf{B}^H & \frac{\alpha}{2}\mathbf{S} \end{bmatrix}. \quad (3.104)$$



Back

Close



由于这些矩阵是正定的, 可用另一个迭代过程非精确地求解前述线性方程组, 如 HSS 迭代. 这导致非 Hermite 正半定线性方程组 (3.96) 的一个非精确预处理 Hermite-反 Hermite 分裂迭代法 (简记为 IPHSS), 并已经在前面有所讨论.

为了对 PHSS 迭代法进行收敛性分析, 通过简单推导、奇异值分解等可得式 (3.101) 中矩阵 $\mathcal{T}(\alpha)$ 的显式表达式、特征值结构以及谱半径, 这由下面的三个引理描述, 其证明详见文献 [22].

引理 3.2 考虑线性方程组 (3.96). 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ 是 Hermite 正定的, $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 列满秩, $\alpha > 0$ 是一个给定常数. 假设 $\mathbf{S} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是 Hermite 正定矩阵. 则划分式 (3.101) 中的迭代矩阵 $\mathcal{T}(\alpha)$ 为

$$\mathcal{T}(\alpha) = \begin{bmatrix} \mathcal{T}_{11}(\alpha) & \mathcal{T}_{12}(\alpha) \\ \mathcal{T}_{21}(\alpha) & \mathcal{T}_{22}(\alpha) \end{bmatrix},$$



Back

Close



式中:

$$\mathcal{T}_{11}(\alpha) = \frac{\alpha - 1}{\alpha + 1} \mathbf{I} - \frac{2}{\alpha + 1} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} \tilde{\mathbf{S}}(\alpha)^{-1} \mathbf{B}^{\mathrm{H}},$$

$$\mathcal{T}_{12}(\alpha) = -\frac{2\alpha}{\alpha + 1} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} \tilde{\mathbf{S}}(\alpha)^{-1} \mathbf{S},$$

$$\mathcal{T}_{21}(\alpha) = \frac{2\alpha}{\alpha + 1} \mathbf{S} \tilde{\mathbf{S}}(\alpha)^{-1} \mathbf{B}^{\mathrm{H}} \mathbf{A}^{-1},$$

$$\mathcal{T}_{22}(\alpha) = -\frac{\alpha - 1}{\alpha + 1} \mathbf{I} + \frac{2\alpha^2}{\alpha + 1} \tilde{\mathbf{S}}(\alpha)^{-1} \mathbf{S},$$

且

$$\tilde{\mathbf{S}}(\alpha) = \alpha \mathbf{S} + \frac{1}{\alpha} \mathbf{B}^{\mathrm{H}} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}$$

为式 (3.103) 中矩阵 $\tilde{\mathcal{M}}(\alpha)$ 的 Schur 补.

引理 3.3 设引理 3.2 中的条件满足. 如果 $\sigma_k (k = 1, 2, \dots, n)$ 是式 (3.97) 中矩阵 $\hat{\mathbf{B}} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 的正奇异值, 则 PHSS 方法迭代矩



Back

Close



阵 $\mathcal{T}(\alpha)$ 的特征值是具有重数 $m - n$ 的

$$\frac{\alpha - 1}{\alpha + 1}$$

和

$$\frac{1}{(\alpha + 1)(\alpha^2 + \sigma_k^2)} \left(\alpha(\alpha^2 - \sigma_k^2) \pm \sqrt{(\alpha^2 + \sigma_k^2)^2 - 4\alpha^4 \sigma_k^2} \right), \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

引理 3.4 设引理 3.2 中的条件满足. 如果 σ_k ($k = 1, 2, \dots, n$) 是式 (3.97) 中矩阵 $\hat{\mathbf{B}} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 的正奇异值, 且 λ 是 PHSS 方法迭代矩阵 $\mathcal{T}(\alpha)$ 的主特征值, 即 $\mathcal{T}(\alpha)$ 的谱半径可由 $|\lambda|$ 达到, 则对 $k = 1, 2, \dots, n$, 成立



Back

Close



$$|\lambda| = \begin{cases} \frac{|\alpha - 1|}{\alpha + 1}, \\ \frac{\alpha}{\alpha + 1} \left(\frac{|\alpha^2 - \sigma_k^2|}{\alpha^2 + \sigma_k^2} + \sqrt{\frac{1}{\alpha^2} - \frac{4\alpha^2\sigma_k^2}{(\alpha^2 + \sigma_k^2)^2}} \right), & \text{对 } \alpha^2 + \sigma_k^2 > 2\alpha^2\sigma_k; \\ \sqrt{\frac{\alpha - 1}{\alpha + 1}}, & \text{对 } \alpha^2 + \sigma_k^2 \leq 2\alpha^2\sigma_k. \end{cases}$$

基于引理 3.4, 下面证明求解线性方程组 (3.96) 的 PHSS 迭代法的收敛性.

定理 3.32 考虑线性方程组 (3.96). 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ 是 Hermite 正定的, $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 列满秩, $\alpha > 0$ 是一个给定常数. 假设 $\mathbf{S} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是 Hermite 正定矩阵, 则

$$\rho(\mathcal{T}(\alpha)) < 1, \quad \forall \alpha > 0,$$

即 PHSS 迭代序列收敛到线性方程组 (3.96) 的精确解.



Back

Close



证明 显然有

$$\frac{|\alpha - 1|}{\alpha + 1} < 1 \quad (\forall \alpha > 0) \quad \text{和} \quad \sqrt{\frac{\alpha - 1}{\alpha + 1}} < 1 \quad (\forall \alpha > 1).$$

因为对 $k = 1, 2, \dots, n$, 当 $\alpha^2 + \sigma_k^2 > 2\alpha^2\sigma_k$ 时, 成立

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha}{\alpha + 1} \left(\frac{|\alpha^2 - \sigma_k^2|}{\alpha^2 + \sigma_k^2} + \sqrt{\frac{1}{\alpha^2} - \frac{4\alpha^2\sigma_k^2}{(\alpha^2 + \sigma_k^2)^2}} \right) \\ & < \frac{\alpha}{\alpha + 1} \left(\frac{|\alpha^2 - \sigma_k^2|}{\alpha^2 + \sigma_k^2} + \frac{1}{\alpha} \right) < \frac{\alpha}{\alpha + 1} \left(1 + \frac{1}{\alpha} \right) = 1, \end{aligned}$$

利用引理 3.4 易见对 $\forall \alpha > 0$ 均成立 $\rho(\mathcal{T}(\alpha)) < 1$. 证毕. □

下面的定理描述了 PHSS 迭代法的最佳迭代参数和相应的渐近收敛因子.

定理 3.33 考虑线性方程组 (3.96). 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ 是 Hermite 正定的, $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 列满秩, $\alpha > 0$ 是一个给定常数. 假设 $\mathbf{S} \in$



Back

Close



$\mathbb{C}^{n \times n}$ 是 Hermite 正定矩阵. 如果 $\sigma_k (k = 1, 2, \dots, n)$ 是矩阵 $\mathbf{A}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{B} \mathbf{S}^{-\frac{1}{2}} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 的正奇异值, 且 $\sigma_{\min} = \min_{1 \leq k \leq n} \sigma_k$ 和 $\sigma_{\max} = \max_{1 \leq k \leq n} \sigma_k$, 则对线性方程组 (3.96) 的 PHSS 迭代法, 迭代参数 α 的最佳值由下式给出,

$$\alpha^* = \arg \min_{\alpha} \rho(\mathcal{T}(\alpha)) = \sqrt{\sigma_{\min} \sigma_{\max}},$$

且相应地, 有

$$\rho(\mathcal{T}(\alpha^*)) = \frac{\sigma_{\max} - \sigma_{\min}}{\sigma_{\max} + \sigma_{\min}}.$$

证明 首先注意到下面两个事实成立:

(1) 当 $\alpha \leq 1$ 时, $\alpha^2 + \sigma_k^2 > 2\alpha^2 \sigma_k$, $k = 1, 2, \dots, n$.

(2) 当 $\alpha > 1$ 时, 记 $\alpha_- = \alpha^2 - \alpha\sqrt{\alpha^2 - 1}$ 和 $\alpha_+ = \alpha^2 + \alpha\sqrt{\alpha^2 - 1}$, 则

① $\alpha^2 + \sigma_k^2 > 2\alpha^2 \sigma_k$ 当且仅当 $\sigma_k \in (0, \alpha_-) \cup (\alpha_+, +\infty)$, $k \in \{1, 2, \dots, n\}$;



Back

Close



② $\alpha^2 + \sigma_k^2 \leq 2\alpha^2\sigma_k$ 当且仅当 $\sigma_k \in [\alpha_-, \alpha_+]$, $k \in \{1, 2, \dots, n\}$;

$$\textcircled{3} \quad \frac{\alpha - 1}{\alpha + 1} < \sqrt{\frac{\alpha - 1}{\alpha + 1}}.$$

设

$$\theta(\alpha, \sigma) = \frac{\alpha}{\alpha + 1} \left(\frac{|\alpha^2 - \sigma^2|}{\alpha^2 + \sigma^2} + \sqrt{\frac{1}{\alpha^2} - \frac{4\alpha^2\sigma^2}{(\alpha^2 + \sigma^2)^2}} \right).$$

则基于事实 (1) 和 (2), 根据引理 3.4, 易知

$$\rho(\mathcal{T}(\alpha)) = \begin{cases} \max \left\{ \frac{1 - \alpha}{1 + \alpha}, \max_{1 \leq k \leq n} \theta(\alpha, \sigma_k) \right\}, & \alpha \leq 1, \\ \max \left\{ \sqrt{\frac{\alpha - 1}{\alpha + 1}}, \max_{\substack{\sigma_k < \alpha_- \text{ 或 } \sigma_k > \alpha_+ \\ k \in \{1, 2, \dots, n\}}} \theta(\alpha, \sigma_k) \right\}, & \alpha > 1. \end{cases} \quad (3.105)$$

对任意固定的 $\beta > 0$, 定义两个函数 $\theta_1, \theta_2 : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$,





即

$$\theta_1(t) = \frac{\beta - t}{\beta + t}, \quad \theta_2(t) = \frac{1}{\beta} - \frac{4\beta t}{(\beta + t)^2}.$$

直接计算, 得

$$\frac{d\theta_1(t)}{dt} = \frac{-2\beta}{(\beta + t)^2}, \quad \frac{d\theta_2(t)}{dt} = \frac{4\beta(t - \beta)}{(\beta + t)^3}.$$

则

(1) 对 $\alpha \leq 1$ 且 $\sigma_{\min} \leq \alpha \leq \sigma_{\max}$, 有

$$\max_{1 \leq k \leq n} \theta(\alpha, \sigma_k) = \max\{\theta(\alpha, \sigma_{\min}), \theta(\alpha, \sigma_{\max})\}.$$

(2) 对 $\alpha > 1$ 且 $\sigma_{\min} < \alpha_-$ 或 $\sigma_{\max} > \alpha_+$, 有

$$\max_{\substack{\sigma_k < \alpha_- \text{ 或 } \sigma_k > \alpha_+ \\ k \in \{1, 2, \dots, n\}}} \theta(\alpha, \sigma_k) = \max\{\theta(\alpha, \sigma_{\min}), \theta(\alpha, \sigma_{\max})\}.$$

因此, 当 $\alpha \leq 1$ 时, 最佳参数 α^* 必须满足 $\sigma_{\min} \leq \alpha^* \leq \sigma_{\max}$ 和下面三个条件之一:



Back

Close



$$\frac{1 - \alpha^*}{1 + \alpha^*} = \theta(\alpha^*, \sigma_{\min}) \geq \theta(\alpha^*, \sigma_{\max});$$

$$\frac{1 - \alpha^*}{1 + \alpha^*} = \theta(\alpha^*, \sigma_{\max}) \geq \theta(\alpha^*, \sigma_{\min});$$

$$\theta(\alpha^*, \sigma_{\min}) = \theta(\alpha^*, \sigma_{\max}) \geq \frac{1 - \alpha^*}{1 + \alpha^*}.$$

且当 $\alpha > 1$ 时, 最佳参数 α^* 必须满足 $\sigma_{\min} < \alpha_-^*$ 或 $\sigma_{\max} > \alpha_+^*$ 及下面三个条件之一:

$$\sqrt{\frac{\alpha^* - 1}{\alpha^* + 1}} = \theta(\alpha^*, \sigma_{\min}) \geq \theta(\alpha^*, \sigma_{\max});$$

$$\sqrt{\frac{\alpha^* - 1}{\alpha^* + 1}} = \theta(\alpha^*, \sigma_{\max}) \geq \theta(\alpha^*, \sigma_{\min});$$

$$\theta(\alpha^*, \sigma_{\min}) = \theta(\alpha^*, \sigma_{\max}) \geq \sqrt{\frac{\alpha^* - 1}{\alpha^* + 1}}.$$

其中 $\alpha_-^* = (\alpha^*)^2 - \alpha^* \sqrt{(\alpha^*)^2 - 1}$ 和 $\alpha_+^* = (\alpha^*)^2 + \alpha^* \sqrt{(\alpha^*)^2 - 1}$.



Back

Close



直接求解当 $a \leq 1$ 的三个条件和 $a > 1$ 的三个条件, 可得 α^* 的具体表达式. 然后将 α^* 代入式 (3.105), 可得 $\rho(\mathcal{T}(\alpha^*))$. 证毕. \square

由定理 3.33 可见应该选择 Hermite 正定矩阵 $S \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 使得具有系数矩阵 S 的线性方程组是易于求解的且矩阵 $A^{-\frac{1}{2}}BS^{-\frac{1}{2}} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 的奇异值是紧密聚集的, 换言之, S 应该是 Schur 补 $B^H A^{-1} B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 的一个好的预处理器. 寻求好的矩阵 S 对加快 PHSS 迭代法的收敛速度是至关重要的. 至于最佳参数 $\alpha^* = \sqrt{\sigma_{\min} \sigma_{\max}}$ 在实际应用中的计算, 由于矩阵 $A^{-\frac{1}{2}}BS^{-\frac{1}{2}}$ 的最小和最大奇异值 σ_{\min} 和 σ_{\max} 分别等于矩阵 $S^{-1}B^H A^{-1} B$ 的最小和最大特征值 λ_{\min} 和 λ_{\max} 的平方根, 即 $\sigma_{\min} = \sqrt{\lambda_{\min}}$ 和 $\sigma_{\max} = \sqrt{\lambda_{\max}}$, 从而通过计算 λ_{\min} 和 λ_{\max} , 可得 $\alpha^* = \sqrt[4]{\lambda_{\min} \lambda_{\max}}$.



§3.5 迭代法的加速方法

使用一阶线性定常迭代法 (3.4), 或者其他的迭代格式求解方程组 (3.1) 时, 迭代过程可能收敛, 也可能不收敛. 即便收敛, 也可能收敛得很慢. 无论是哪种情况, 都希望找到一种改进方法, 使得不收敛的格式变得收敛, 收敛慢的格式变得收敛快.

给定第 k 次迭代后的估计解 $x^{(k)}$, 由迭代格式 (3.4) 得到了一个新的估计解 $Bx^{(k)} + f$, 再将它与 $x^{(k)}, x^{(k-1)}$ 等进行适当的组合, 就可能得到更快的迭代收敛速度. 这就是迭代法加速的基本思想.



§3.5.1 外推方法



128/183

在迭代格式 (3.4) 中引入一个参数 $\gamma \neq 0$, 构造新的迭代格式

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (1 - \gamma)\mathbf{x}^{(k)} + \gamma(\mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}) := \mathbf{B}_\gamma\mathbf{x}^{(k)} + \gamma\mathbf{f}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (3.106)$$

式中:

$$\mathbf{B}_\gamma = (1 - \gamma)\mathbf{I} + \gamma\mathbf{B}. \quad (3.107)$$

当 $\gamma = 1$ 时, 就退化为原迭代格式 (3.4). 若迭代格式 (3.106) 收敛到某个 \mathbf{x}^* , 则有

$$\mathbf{x}^* = (1 - \gamma)\mathbf{x}^* + \gamma(\mathbf{B}\mathbf{x}^* + \mathbf{f}) \implies \mathbf{x}^* = \mathbf{B}\mathbf{x}^* + \mathbf{f}.$$

所以, 不管 $\gamma \neq 0$ 如何选取, 当迭代格式 (3.106) 收敛时, 它必定收敛到原来方程组 $\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{f}$ 的解. 选取适当的 \mathbf{B} , 根据式 (3.3) 中的定义可知, 这样的解也是 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的解. 因此, 可望选取一个比较好的参数 γ , 使得迭代格式 (3.106) 收敛得尽可能快. 这就



Back

Close



是外推法, 它依赖于原迭代矩阵 B 的选择. 所以分别有 Jacobi 迭代、Gauss-Seidel 迭代和 SOR 迭代的外推格式.

注 3.4 设 B 是 Gauss-Seidel 迭代矩阵, 即使 γ 取为 SOR 迭代法的松弛因子 ω , 式 (3.106) 与 SOR 迭代法也是截然不同的. 在式 (3.106) 中, 当 $Bx^{(k)} + f$ 的每个分量计算完之后, 才能再与 $x^{(k)}$ 作加权平均得到 $x^{(k+1)}$.

为了使得外推格式 (3.106) 收敛得尽可能快, 需要选择参数 γ 使得 $\rho(B_\gamma)$ 尽可能小. 如果 B 的所有特征值均为实数, 且分布在 $[a, b]$ 之间, 则有

$$\begin{aligned}\rho(B_\gamma) &= \max_{\lambda \in \lambda(B)} |(1 - \gamma) + \gamma\lambda| \leq \max_{\lambda \in [a, b]} |(1 - \gamma) + \gamma\lambda| \\ &= \max\{|(1 - \gamma) + \gamma a|, |(1 - \gamma) + \gamma b|\} \\ &= \max\{|1 + (a - 1)\gamma|, |1 + (b - 1)\gamma|\}.\end{aligned}$$



Back

Close



上式第 2 个等式成立是因为 $(1 - \gamma) + \gamma\lambda$ 是 λ 的线性函数, 其在 $[a, b]$ 上的最大绝对值必在端点取得. 为使 $\rho(B_\gamma)$ 尽可能小, 只要右端项尽可能小即可. 下面的定理给出了最佳 γ 的取法.

定理 3.34 设 B 的所有特征值均为实数, 且分布在 $[a, b]$ 之间, 又假定 $1 \notin [a, b]$, 则函数

$$f(\gamma) = \max\{|1 + (a - 1)\gamma|, |1 + (b - 1)\gamma|\}$$

在极小点

$$\gamma_{\min} = \frac{2}{2 - a - b} \quad (3.108)$$

处取得极小值

$$f_{\min} = \begin{cases} 1 - (a - 1)|\gamma_{\min}|, & \text{当 } 1 < a \leq b, \\ 1 - (1 - b)|\gamma_{\min}|, & \text{当 } a \leq b < 1. \end{cases}$$



Back

Close

根据定理 3.34, 得

$$\rho(\mathbf{B}_\gamma) = f_{\min} = 1 - d|\gamma_{\min}| < 1, \quad (3.109)$$

式中: d 为 1 到 $[a, b]$ 的距离, 即

$$d = \begin{cases} a - 1, & 1 < a \leq b, \\ 1 - b, & a \leq b < 1. \end{cases}$$

所以, 取 $\gamma = \gamma_{\min}$ 时, 式 (3.106) 收敛. 由于 $\gamma_{\min} \neq 1$, 故取 $\gamma = \gamma_{\min}$ 时的式 (3.106) 要比式 (3.4) (即取 $\gamma = 1$ 时的迭代法) 收敛得更快. 此外, 为了使得 f_{\min} 尽可能小, 可取 a, b 分别为迭代矩阵 \mathbf{B} 的最小和最大特征值.

§3.5.2 整体校正方法

设 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m$ ($m > 1$) 是方程组 (3.1) 按照某种方式获取





的互异近似解, 并设 $Ax_i \neq b$ ($i = 1, 2, \dots, m$). 利用诸 x_i 提供的信息, 构造向量 x , 使得它比 x_i 都更接近于方程组 (3.1) 的精确解 x^* , 即要求

$$\|b - Ax\|_2 < \min_{1 \leq i \leq m} \|b - Ax_i\|_2, \quad (3.110)$$

称满足式 (3.110) 的向量 x 为方程组 (3.1) 关于 x_1, x_2, \dots, x_m 的校正解, 确定 x 的过程称为校正过程. 建立整体校正模型

$$\begin{cases} x = \sum_{i=1}^m \alpha_i x_i, & \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1, \\ \|b - Ax\|_2 = \min. \end{cases} \quad (3.111)$$

所谓整体校正, 是指 x_i 的每一个分量对 x 的对应分量的贡献比例相同. 下面求解模型 (3.111).



Back

Close



任意选定 $s \in \{1, 2, \dots, m\}$, 则有

$$\begin{aligned}\mathbf{x} &= \mathbf{x}_s + \sum_{i \neq s} \alpha_i (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_s), \\ \mathbf{r}(\mathbf{x}) &= \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} = (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_s) - \sum_{i \neq s} \alpha_i (\mathbf{A}\mathbf{x}_i - \mathbf{A}\mathbf{x}_s) \\ &= \mathbf{r}_s + \sum_{i \neq s} \alpha_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_s).\end{aligned}\tag{3.112}$$

记

$$\begin{aligned}\beta_i &= \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_s, \quad \mathbf{Q}_s = [\beta_1, \dots, \beta_{s-1}, \beta_{s+1}, \dots, \beta_m], \\ \mathbf{y}_s &= (\alpha_1, \dots, \alpha_{s-1}, \alpha_{s+1}, \dots, \alpha_m)^\mathrm{T}.\end{aligned}$$

那么式 (3.112) 可写为 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \mathbf{r}_s + \mathbf{Q}_s \mathbf{y}_s$, 从而求

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{x}_i = \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \alpha_2 \mathbf{x}_2 + \dots + \alpha_m \mathbf{x}_m$$



Back

Close



使得 $\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2 = \min$, 等价于求 $\mathbf{y}_s \in \mathbb{C}^{m-1}$ 使得 $\|\mathbf{r}_s + \mathbf{Q}_s \mathbf{y}_s\|_2 = \min$, 其极小范数解为 (见定理 5.2 和定理 5.3)

$$\mathbf{y}_s = -\mathbf{Q}_s^\dagger \mathbf{r}_s. \quad (3.113)$$

再由 $\alpha_s = 1 - \sum_{i \neq s} \alpha_i$, 即可确定数组 $\alpha_1, \dots, \alpha_m$, 从而可确定校正解 \mathbf{x} .

特别地, 对于 $m = 2$, 取 $s = 2$ 时, 有

$$\begin{cases} \alpha_1 = y_2 = -\mathbf{Q}_2^\dagger \mathbf{r}_2 = -\boldsymbol{\beta}_1^\dagger \mathbf{r}_2 = -\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^\mathrm{H} \mathbf{r}_2}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_2^2}, \\ \alpha_2 = 1 - \alpha_1 = \frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^\mathrm{H} \mathbf{r}_1}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_2^2}. \end{cases} \quad (3.114)$$



Back

Close



取 $s = 1$ 时,

$$\begin{cases} \alpha_2 = y_1 = -\mathbf{Q}_1^\dagger \mathbf{r}_1 = -\beta_2^\dagger \mathbf{r}_1 = -\frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^H \mathbf{r}_1}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|_2^2}, \\ \alpha_1 = 1 - \alpha_2 = \frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^H \mathbf{r}_2}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|_2^2}. \end{cases} \quad (3.115)$$

易见, 式 (3.114) 与式 (3.115) 的结果一致.

下面来看模型 (3.111) 的几何意义 (图 3.1). 把 $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 和 \mathbf{r}_i 分别

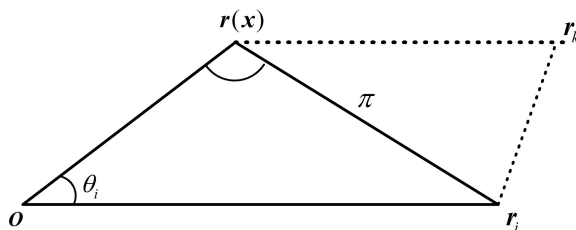


图 3.1 整体校正模型

看作以坐标原点为起点, 以 $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 和 \mathbf{r}_i 为终点的空间向量, 那么由 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \alpha_1 \mathbf{r}_1 + \alpha_2 \mathbf{r}_2 + \cdots + \alpha_m \mathbf{r}_m$ 及 $\alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_m = 1$ 可得: 点



Back

Close



$\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 在由点 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_m$ 确定的超平面 π 上, 且当 $i \neq s$ 时, 有

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_s)^H \mathbf{r}(\mathbf{x}) &= \beta_i^H (\mathbf{r}_s + \mathbf{Q}_s \mathbf{y}_s) \\ &= \beta_i^H (\mathbf{r}_s - \mathbf{Q}_s \mathbf{Q}_s^\dagger \mathbf{r}_s) = \beta_i^H [\mathbf{r}_s - (\mathbf{Q}_s \mathbf{Q}_s^\dagger)^H \mathbf{r}_s] \\ &= [\beta_i^H - (\mathbf{Q}_s \mathbf{Q}_s^\dagger \beta_i)^H] \mathbf{r}_s = (\beta_i^H - \beta_i^H) \mathbf{r}_s = 0. \end{aligned} \quad (3.116)$$

上述推导过程用到了广义逆矩阵的性质

$$(\mathbf{Q}_s \mathbf{Q}_s^\dagger)^H = \mathbf{Q}_s \mathbf{Q}_s^\dagger, \quad \mathbf{Q}_s \mathbf{Q}_s^\dagger \mathbf{Q}_s = \mathbf{Q}_s.$$

式 (3.116) 表明 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) \perp \pi$. 由于“垂足”为 $\mathbf{r}(\mathbf{x})$, 所以

$$\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2 \leq \|\mathbf{r}_i\|_2, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (3.117)$$

定理 3.35 模型 (3.111) 的校正解 \mathbf{x} 满足 $\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2 < \min_{1 \leq i \leq m} \|\mathbf{r}_i\|_2$ 的充分必要条件是 $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_i (i = 1, 2, \dots, m)$.



Back

Close



证明 必要性. 由 $\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2 < \|\mathbf{r}_i\|_2$, 得 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{r}_i$, 即 $\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} \neq \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_i$, 从而有

$$\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_i, \quad (i = 1, 2, \dots, m).$$

充分性. 由 $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_i$, 得 $\mathbf{A}\mathbf{x} \neq \mathbf{A}\mathbf{x}_i$, 即 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{r}_i$, 从而有

$$\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2 \neq \|\mathbf{r}_i\|_2 \quad (\text{垂足唯一性}).$$

再由式 (3.117), 得 $\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2 < \|\mathbf{r}_i\|_2, i = 1, 2, \dots, m$. 证毕. \square

如果 $m = n + 1$, 且 $\beta_1, \dots, \beta_{s-1}, \beta_{s+1}, \dots, \beta_m$ 线性无关, 则由 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) \perp \beta_i (i \neq s)$ 可得 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, 从而校正解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$.

为了衡量校正过程的效果, 引进整体缩减系数

$$\alpha = \frac{\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2}{\min_{1 \leq i \leq m} \|\mathbf{r}_i\|_2}. \quad (3.118)$$



Back

Close



由式 (3.117) 知 $0 \leq \alpha \leq 1$. 当 $\alpha = 1$ 时, 称校正过程失败; 当 $0 \leq \alpha < 1$ 时, 称校正过程成功. 特别地, 当 $\alpha = 0$ 时, 称校正过程完成, 此时校正解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$. 若用 θ_i 表示 $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 与 \mathbf{r}_i 之间的夹角 (图 3.1), 则由 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) \perp \pi$ 及 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) \in \pi$ 可得 $\mathbf{r}(\mathbf{x}) \perp (\mathbf{r}(\mathbf{x}) - \mathbf{r}_i)$. 于是有

$$\begin{aligned}\sin \theta_i &= \frac{\|\mathbf{r}(\mathbf{x}) - \mathbf{r}_i\|_2}{\|\mathbf{r}_i\|_2}, \\ \cos \theta_i &= \frac{\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2}{\|\mathbf{r}_i\|_2} = \left(1 - \frac{\|\mathbf{r}(\mathbf{x}) - \mathbf{r}_i\|_2^2}{\|\mathbf{r}_i\|_2^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \left(1 - \frac{\|\mathbf{Q}_i \mathbf{y}_i\|_2^2}{\|\mathbf{r}_i\|_2^2}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(1 - \frac{\|\mathbf{Q}_i \mathbf{Q}_i^\dagger \mathbf{r}_i\|_2^2}{\|\mathbf{r}_i\|_2^2}\right)^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}$$

选取 s_0 满足 $\|\mathbf{r}_{s_0}\|_2 < \min_{1 \leq i \leq m} \|\mathbf{r}_i\|_2$, 则有

$$\alpha = \frac{\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2}{\|\mathbf{r}_{s_0}\|_2} = \left(1 - \frac{\|\mathbf{Q}_{s_0} \mathbf{Q}_{s_0}^\dagger \mathbf{r}_{s_0}\|_2^2}{\|\mathbf{r}_{s_0}\|_2^2}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.119)$$





应用式 (3.119) 能够事先估计校正过程的效果.

将整体校正过程施加于任何一种求解方程组 (3.1) 的迭代格式, 都可以改善原始式的收敛性态. 设求解方程组 (3.1) 的单步迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(i)} = \varphi(\boldsymbol{x}^{(i-1)}) \quad (i = 1, 2, 3, \cdots). \quad (3.120)$$

改造格式 (3.120) 为以下算法.

算法 3.9 (整体校正法)

步 1, 输入矩阵 \boldsymbol{A} , 右端向量 \boldsymbol{b} , 初始点 $\boldsymbol{x}^{(0)}$, 精度要求 ε , 最大迭代次数 N , 取定整数 m 及 $s \in [1, m]$. 置 $k := 1$.

步 2, 置 $\boldsymbol{x}_1^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k-1)}$, 计算

$$\boldsymbol{x}_i^{(k)} = \varphi(\boldsymbol{x}_{i-1}^{(k)}), \quad i = 2, 3, \cdots, m.$$

步 3, 由式 (3.113) 计算 $\boldsymbol{y}_s^{(k)} = (\alpha_1^{(k)}, \cdots, \alpha_{s-1}^{(k)}, \alpha_{s+1}^{(k)}, \cdots, \alpha_m^{(k)})^T$



Back

Close

及

$$\alpha_s^{(k)} = 1 - \sum_{i=1, i \neq s}^m \alpha_i^{(k)}.$$

步 4, 计算 $\mathbf{x}^{(k)} = \alpha_1^{(k)} \mathbf{x}_1^{(k)} + \alpha_2^{(k)} \mathbf{x}_2^{(k)} + \cdots + \alpha_m^{(k)} \mathbf{x}_m^{(k)}$.

步 5, 若 $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}\|/\|\mathbf{b}\| \leq \varepsilon$, 则停算, 输出 $\mathbf{x}^{(k)}$ 作为方程组的近似解.

步 6, 置 $k := k + 1$, 转步 2.

注 3.5 记 $\mathbf{r}_i^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_i^{(k)}$, 由式 (3.117) 可得: $\|\mathbf{r}^{(k)}\|_2$ 是坐标原点与“由点 $\mathbf{r}^{(k-1)}, \mathbf{r}_2^{(k)}, \dots, \mathbf{r}_m^{(k)}$ ”确定的超平面 π_k 之间的最短距离. 因此, $\|\mathbf{r}^{(k)}\|_2 < \|\mathbf{r}^{(k-1)}\|_2$ 等价于 π_k 不与“以 $\mathbf{r}^{(k-1)}$ 为法向量”的超平面

$$S_k = \{\mathbf{r}(z) : \mathbf{r}^{(k-1)} \perp (\mathbf{r}(z) - \mathbf{r}^{(k-1)}), z \in \mathbb{C}^n\}$$





重合, 即存在 $i_0 \in \{2, 3, \dots, m\}$, 使 $\mathbf{r}_{i_0}^{(k)} \notin S_k$, 也就是

$$\mathbf{x}_{i_0}^{(k)} \notin T_k = \{\mathbf{z} : \mathbf{r}^{(k-1)} \perp (\mathbf{r}(\mathbf{z}) - \mathbf{r}^{(k-1)}), \mathbf{z} \in \mathbb{C}^n\}.$$

若用空间 \mathbb{C}^n 中的“体积”定义集合的测度, 那么超平面集合 T_k 的测度值为零. 因此, $\mathbf{x}_i^{(k)}$ ($i = 2, 3, \dots, m$) 几乎不同时落入集合 T_k , 从而可得: $\|\mathbf{r}^{(k)}\|_2 < \|\mathbf{r}^{(k-1)}\|_2$ 几乎对所有的 k 成立.

一方面, 当式 (3.120) 收敛时, 算法 3.9 必定收敛. 进一步, 若第 k 次校正过程的整体缩减系数

$$\alpha^{(k)} = \frac{\|\mathbf{r}^{(k)}\|_2}{\min_{1 \leq i \leq m} \|\mathbf{r}_i^{(k)}\|_2} < 1,$$

则算法 3.9 比式 (3.120) 收敛得快; 另一方面, 当式 (3.120) 不收敛时, 由于 $\|\mathbf{r}^{(i)}\|_2 < \|\mathbf{r}^{(i-1)}\|_2$ 几乎对所有的 i 成立, 所以算法 3.9 也能收敛.





例 3.3 设

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1.2 & 0.3 & 0.4 \\ 0.4 & 1.2 & 0.3 \\ 0.3 & 0.4 & 1.2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

取 $\mathbf{x}^{(0)} = (1, 2, 0)^T$, 式 (3.120) 采用 Richardson 迭代格式 (3.26), 其中

$$\mathbf{B} = \mathbf{I} - \mathbf{A} = - \begin{bmatrix} 0.2 & 0.3 & 0.4 \\ 0.4 & 0.2 & 0.3 \\ 0.3 & 0.4 & 0.2 \end{bmatrix}.$$

取终止准则值为

$$\frac{\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2} \leq 10^{-5}.$$

整体校正法中的 $m = 2, s = 2$. 由 $\rho(\mathbf{B}) \leq \|\mathbf{B}\|_1 = 0.9$ 知格式 (3.4) 收敛, 而算法 3.9 收敛较快. 计算结果如表 3.3 所示.



Back

Close

表 3.3 整体校正取 $m = 2, k = 2$

迭代法	迭代次数	CPU 时间	相对残差
Richardson 迭代	109	0.0004	9.2614e-06
算法 3.9	11	0.0004	2.9541e-06

方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的精确解为 $\mathbf{x}^* = \left(\frac{1}{1.9}, \frac{1}{1.9}, \frac{1}{1.9} \right)^T$.

例 3.4 设

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1023 \times 1023}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ \vdots \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$



Back

Close

取 $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$, 式 (3.120) 仍采用 Richardson 迭代格式 (3.26), 其中

$$\mathbf{B} = \mathbf{I} - \mathbf{A} = \begin{bmatrix} -3 & 1 & & & \\ 1 & -3 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -3 & 1 \\ & & & 1 & -3 \end{bmatrix}.$$

取终止准则值为

$$\frac{\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2} \leq 10^{-10}.$$

整体校正法中的 $m = 10, s = 10$. 由 $\rho(\mathbf{B}) > 1$ 知格式 (3.4) 发散, 而算法 3.9 收敛. 计算结果如表 3.4 所示.



表 3.4 整体校正取 $m = 10, k = 10$

迭代法	迭代次数	CPU 时间	相对残差
Richardson 迭代	1000	0.4950	NaN
算法 3.9	5	0.1458	2.7583e-12

§3.5.3 基于矩阵特征值的外推方法

考虑迭代格式 (3.4), 当 $\rho(\mathbf{B}) < 1$, 但 $\rho(\mathbf{B}) \approx 1$ 时, 格式收敛缓慢. 下面使用外推技术, 改善格式 (3.4) 的收敛性态.

设迭代矩阵 \mathbf{B} 的 n 个实特征值满足 $1 > |\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$, 对应的特征向量分别为 $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \cdots, \mathbf{z}_n$, 且它们线性无关. 分解

$$\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)} = c_1 \mathbf{z}_1 + c_2 \mathbf{z}_2 + \cdots + c_n \mathbf{z}_n,$$

$$\mathbf{x}^{(i+1)} - \mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{B}^i (\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}) = c_1 \lambda_1^i \mathbf{z}_1 + c_2 \lambda_2^i \mathbf{z}_2 + \cdots + c_n \lambda_n^i \mathbf{z}_n,$$

则有

$$\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)} = c_1 \lambda_1^k \mathbf{z}_1 + O(\lambda_2^k).$$



Back

Close



由于 $\rho(\mathbf{B}) < 1$, 所以 $\lim_{m \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(m)} = \mathbf{x}^*$, 且有

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(k)} &= \lim_{m \rightarrow \infty} (\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{x}^{(k)}) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{i=k}^{m-1} (\mathbf{x}^{(i+1)} - \mathbf{x}^{(i)}) \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{i=k}^{m-1} (c_1 \lambda_1^i \mathbf{z}_1 + c_2 \lambda_2^i \mathbf{z}_2 + \cdots + c_n \lambda_n^i \mathbf{z}_n) \\ &= \frac{\lambda_1^k}{1 - \lambda_1} c_1 \mathbf{z}_1 + \frac{\lambda_2^k}{1 - \lambda_2} c_2 \mathbf{z}_2 + \cdots + \frac{\lambda_n^k}{1 - \lambda_n} c_n \mathbf{z}_n. \quad (3.121) \end{aligned}$$

从而可得

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^{(k)} + \frac{1}{1 - \lambda_1} (\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}) + O(\lambda_2^k).$$

记

$$\tilde{\mathbf{x}}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \frac{1}{1 - \lambda_1} (\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}),$$

则有 $\tilde{\mathbf{x}}^{(k+1)} - \mathbf{x}^* = O(\lambda_2^k)$. 再由式 (3.121), 得 $\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^* = O(\lambda_1^{k+1})$.



Back

Close



当 $|\lambda_2| \ll |\lambda_1| < 1$ 且 $|\lambda_1| \approx 1$ 时, 有

$$\frac{\lambda_2^k}{\lambda_1^{k+1}} = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \frac{1}{\lambda_1} \rightarrow 0 \quad (k \rightarrow \infty).$$

因此, $\tilde{\mathbf{x}}^{(k+1)}$ 比 $\mathbf{x}^{(k+1)}$ 更接近于 \mathbf{x}^* .

将外推技术施加于迭代格式 (3.4), 即可得到基于迭代矩阵特征值的外推格式.

算法 3.10 (基于特征值的外推法)

给定整数 $m \geq 1$, 初始值 $\mathbf{x}_1^{(0)}$ 及最大迭代次数 N .

while $i \leq N$

for $k = 1 : m$

$$\mathbf{x}_i^{(k)} = B\mathbf{x}_i^{(k-1)} + \mathbf{f};$$

end



Back

Close



$$\mathbf{x}_{i+1}^{(0)} = \mathbf{x}_i^{(m-1)} + \frac{1}{1 - \lambda_1}(\mathbf{x}_i^{(m)} - \mathbf{x}_i^{(m-1)});$$

$$i = i + 1;$$

end

易知, 当 $|\lambda_2| \ll |\lambda_1| < 1$ 且 $|\lambda_1| \approx 1$ 时, 算法 3.10 比迭代格式 (3.4) 收敛得快.

例 3.5 在例 3.2 中, 用 Jacobi 迭代法收敛的速度相当缓慢. 现在对 Jacobi 迭代法进行加速. 先计算 Jacobi 迭代矩阵 \mathbf{B}_J 的特征值. 注意到 \mathbf{B}_J 可以表示为

$$\mathbf{B}_J = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{D} - \mathbf{A}) = \frac{1}{4}(2\mathbf{I} - \mathbf{S}), \quad (3.122)$$



Back

Close

式中: \mathbf{I} 为 n 阶单位矩阵.

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (3.123)$$

\mathbf{S} 的第 k 个特征值为 $4 \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2(n+1)} \right)$, $k = 1, 2, \dots, n$. 故 \mathbf{B}_J 的第 k 个特征值为

$$\lambda_k = \frac{1}{4} \left[2 - 4 \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2(n+1)} \right) \right] = \frac{1}{2} \cos \frac{k\pi}{n+1}, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (3.124)$$

由式 (3.124) 可知 \mathbf{B}_J 模最大特征值为 $\lambda_1 = \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{n+1}$. 取 $n = 2^{14} - 1 = 16383$, 初始向量为零向量, 容许误差为 10^{-10} . 利用算法 3.10, 得到计算结果如表 3.5 所示.





表 3.5 Jacobi 迭代法和特征值外推法的数值比较

迭代格式	迭代次数 (k)	CPU 时间	相对残差
Jacobi 迭代法	34	0.0158	5.8182e-11
特征值外推法	4	0.0076	1.1501e-12

§3.5.4 Chebyshev 加速方法

考虑迭代格式 (3.4). 设 $\rho(\mathbf{B}) < 1$, 由初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$ 出发, 经过 k 次迭代得到 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}$ ($k \geq 1$). 选择数组 $\alpha_0^{(k)}, \alpha_1^{(k)}, \dots, \alpha_k^{(k)}$, 使得

$$\mathbf{u}^{(k)} = \sum_{i=0}^k \alpha_i^{(k)} \mathbf{x}^{(i)}, \quad \sum_{i=0}^k \alpha_i^{(k)} = 1. \quad (3.125)$$

设 $\mathbf{x}^* = \mathbf{B}\mathbf{x}^* + \mathbf{f}$, 则

$$\mathbf{u}^{(k)} - \mathbf{x}^* = \sum_{i=0}^k \alpha_i^{(k)} (\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^*) = \sum_{i=0}^k \alpha_i^{(k)} \mathbf{B}^i (\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*).$$



Back

Close

定义 k 次多项式

$$p_k(t) = \sum_{i=0}^k \alpha_i^{(k)} t^i, \quad p_k(1) = 1,$$

即有

$$\mathbf{u}^{(k)} - \mathbf{x}^* = p_k(\mathbf{B})(\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*).$$

根据上式, 有

$$\|\mathbf{u}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_2 \leq \|p_k(\mathbf{B})\|_2 \cdot \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\|_2.$$

对所有的 $\|p_k(\mathbf{B})\|_2$ 取下确界就是 $\rho(p_k(\mathbf{B}))$. 很自然地, 要求选取多项式 p_k 使得 $\rho(p_k(\mathbf{B}))$ 达到最小. 设 S 是复平面上包含 \mathbf{B} 的所有特征值的集合, 则

$$\rho(p_k(\mathbf{B})) \leq \max_{\lambda \in \lambda(\mathbf{B})} |p_k(\lambda)| \leq \max_{\lambda \in S} |p_k(\lambda)|.$$





设迭代矩阵 B 的 n 个特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 均为实数, 都在区间 $[a, b]$ 上, 并且 $1 \notin [a, b]$. 这里只考虑 $a < b < 1$ 的情形. 为了使 $\rho(p_k(B))$ 达到极小, 只要考虑极小极大问题

$$\min_{p_k \in \mathcal{P}_k^{(1)}} \left\{ \max_{\lambda \in [a, b]} |p_k(\lambda)| \right\}, \quad (3.126)$$

式中: $\mathcal{P}_k^{(1)}$ 为满足 $p_k(1) = 1$ 所有次数不超过 k 的实系数多项式的集合. 这是一个在多项式空间有归一化条件的最佳一致逼近问题, 它与 Chebyshev 多项式有关. k 次 Chebyshev 多项式 $C_k(t)$ 是极小极大问题

$$\min_{p_k \in \mathcal{P}_k^{(1)}} \left\{ \max_{t \in [-1, 1]} |p_k(t)| \right\} \quad (3.127)$$





的解. k 次 Chebyshev 多项式的定义为

$$C_k(t) = \begin{cases} \cos(k \cdot \arccos t), & |t| \leq 1, \\ \cosh(k \cdot \operatorname{arccosh} t), & |t| > 1, \end{cases} \quad (3.128)$$

它满足递推关系

$$\begin{cases} C_0(t) = 1, & C_1(t) = t, \\ C_{k+1}(t) = 2tC_k(t) - C_{k-1}(t), & k \geq 1. \end{cases} \quad (3.129)$$

下面的引理给出了在归一化条件下极小极大问题 (3.127) 的最优解.

引理 3.5 设 $\beta \notin [-1, 1]$. 若 $p_k \in \mathcal{P}_k$, $p_k(\beta) = 1$, 则

$$\|p_k\| \equiv \max_{-1 \leq t \leq 1} |p_k(t)| \geq \frac{1}{C_k(\beta)}.$$

特别地, 当取 $p_k(t) = \frac{C_k(t)}{C_k(\beta)}$ 时, $\|p_k\| = \frac{1}{C_k(\beta)}$.



Back

Close



证明 令 $\alpha = \frac{1}{C_k(\beta)}$. 不难求得 $C_k(t)$ 的极值点为 $t_i = \cos\left(\frac{i\pi}{k}\right)$, 满足 $C_k(t_i) = \cos(i\pi) = (-1)^i$, $i = 0, 1, \dots, k$. 用反证法. 若 $\|p_k\| < \alpha$, 则有

$$\text{sign}(\alpha)(-1)^i(\alpha C_k(t_i) - p_k(t_i)) \geq |\alpha| - \|p_k\| > 0,$$

这表明多项式 $\alpha C_k(t) - p_k(t)$ 在 t_i ($i = 0, 1, \dots, k$) 处有交替的正负号, 所以它在 $(-1, 1)$ 中有 k 个零点. 但 $\beta \notin [-1, 1]$ 也是 $\alpha C_k(t) - p_k(t)$ 的零点, 故 k 次多项式 $\alpha C_k(t) - p_k(t)$ 有 $k+1$ 个零点, 矛盾. 因此, 必有 $\|p_k\| \geq \alpha$. 另外, 显然当 $p_k(t) = C_k(t)/C_k(\beta)$ 时, $\|p_k\| = \alpha$. 证毕. \square

下面的引理给出了极小极大问题 (3.126) 的最优解.



Back

Close



引理 3.6 设 $a < b < 1$. 若 $p_k \in \mathcal{P}_k$ 且满足 $p_k(1) = 1$, 则

$$\|p_k\| \equiv \max_{a \leq t \leq b} |p_k(t)| \geq \frac{1}{C_k(w(1))},$$

式中:

$$w(t) = \frac{2t - a - b}{b - a}.$$

特别地, 当取 $p_k(t) = \frac{C_k(w(t))}{C_k(w(1))}$ 时, $\|p_k\| = \frac{1}{C_k(w(1))}$.

证明 记 $\beta = w(1) = \frac{2 - a - b}{b - a} > 1$. 注意到 $w(t) : [a, b] \rightarrow [-1, 1]$, 取 $q_k \in \mathcal{P}_k$, 使得 $p_k(t) = q_k(w(t))$. 显然有 $1 = p_k(1) = q_k(w(1)) = q_k(\beta)$. 根据引理 3.5, 有

$$\|q_k\| = \max_{-1 \leq w(t) \leq 1} |q_k(w(t))| \geq \frac{1}{C_k(\beta)},$$

即

$$\|p_k\| = \max_{a \leq t \leq b} |p_k(t)| \geq \frac{1}{C_k(\beta)} = \frac{1}{C_k(w(1))}.$$



Back

Close



此外, 显然当 $p_k(t) = \frac{C_k(w(t))}{C_k(w(1))}$ 时, $\|p_k\| = \frac{1}{C_k(w(1))}$. 证毕. □

注 3.6 若 $1 < a < b$, 只需作变换 $w(t) : [a, b] \rightarrow [-1, 1]$,

$$w(t) = \frac{2t - a - b}{a - b},$$

则有

$$\beta = w(1) = \frac{2 - a - b}{a - b} = 1 + 2\frac{1 - a}{a - b} > 1,$$

从而亦可推导出, 当 $p_k(t) = \frac{C_k(w(t))}{C_k(w(1))}$ 时, $\|p_k\| = \frac{1}{C_k(w(1))}$.

下面的引理给出了最优解 p_k 的递推关系.

引理 3.7 $p_k(t) = C_k(w(t))/C_k(w(1))$ 满足如下的递推关系:

$$\begin{cases} p_0(t) = 1, & p_1(t) = w(t)/w(1) = (2t - a - b)/(2 - a - b), \\ p_k(t) = \rho_k p_1(t) p_{k-1}(t) + (1 - \rho_k) p_{k-2}(t), & k \geq 2, \end{cases} \quad (3.130)$$



Back

Close



式中: ρ_k 满足的递推关系为

$$\rho_1 = 2, \quad \rho_k = (1 - \alpha\rho_{k-1})^{-1}, \quad \alpha = (2w(1))^{-2}, \quad k \geq 2. \quad (3.131)$$

证明 令 $\beta_k = C_k(w(1))$. 根据 C_k 的递推关系, 得

$$\begin{aligned} p_k(t) &= \beta_k^{-1} C_k(w(t)) = \beta_k^{-1} [2w(t)C_{k-1}(w(t)) - C_{k-2}(w(t))] \\ &= 2\beta_k^{-1}\beta_{k-1}w(1)p_1(t)p_{k-1}(t) - \beta_k^{-1}\beta_{k-2}p_{k-2}(t). \end{aligned} \quad (3.132)$$

定义

$$\rho_k = 2\beta_k^{-1}\beta_{k-1}w(1) = \alpha^{-1/2}\beta_k^{-1}\beta_{k-1}. \quad (3.133)$$

则由 C_k 的递推过程可以推出 β_k 的递推关系为

$$\beta_k = C_k(w(1)) = 2w(1)C_{k-1}(w(1)) - C_{k-2}(w(1)) = \alpha^{-1/2}\beta_{k-1} - \beta_{k-2}.$$

从而有

$$\beta_k^{-1}\beta_{k-2} = \beta_k^{-1}(\alpha^{-1/2}\beta_{k-1} - \beta_k) = \rho_k - 1. \quad (3.134)$$



Back

Close



将式 (3.133) 和式 (3.134) 代入式 (3.132) 即可得到 p_k 的递推公式 (3.130). ρ_k 的递推关系亦可从 β_k 的递推过程中得到, 即由式 (3.133), 得

$$\begin{aligned}\rho_k &= \alpha^{-1/2} \beta_{k-1} \beta_k^{-1} = \alpha^{-1/2} \beta_{k-1} (\alpha^{-1/2} \beta_{k-1} - \beta_{k-2})^{-1} \\ &= (1 - \alpha^{1/2} \beta_{k-1}^{-1} \beta_{k-2})^{-1} = (1 - \alpha \rho_{k-1})^{-1}.\end{aligned}$$

证毕. □

引理 3.7 的意义在于表明了由 Chebyshev 加速方法得到的序列 $\{u^{(k)}\}$ 也有递推公式, 从而在加速过程中没有必要真正地引入 Chebyshev 多项式. 有下面的定理.

定理 3.36 设 $\{u^{(k)}\}$ 是由 Chebyshev 加速方法得到的序列,



Back

Close



则对于任意的 $\mathbf{u}^{(0)}$, 有如下的递推公式

$$\begin{cases} \mathbf{u}^{(1)} = (1 - \gamma)\mathbf{u}^{(0)} + \gamma(\mathbf{B}\mathbf{u}^{(0)} + \mathbf{f}), & \gamma = 2/(2 - a - b), \\ \mathbf{u}^{(k)} = (1 - \rho_k)\mathbf{u}^{(k-2)} + \rho_k[(1 - \gamma)\mathbf{u}^{(k-1)} + \gamma(\mathbf{B}\mathbf{u}^{(k-1)} + \mathbf{f})], & k \geq 2, \end{cases} \quad (3.135)$$

式中: 序列 $\{\rho_k\}$ 由式 (3.131) 所定义.

证明 由于

$$\mathbf{u}^{(k)} = \sum_{i=0}^k \alpha_i^{(k)} \mathbf{x}^{(i)}, \quad p_k(t) = \sum_{i=0}^k \alpha_i^{(k)} t^i, \quad \sum_{i=0}^k \alpha_i^{(k)} = 1,$$

故 $\mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{x}^{(0)}$, $\mathbf{u}^{(1)}$ 由式 (3.135) 的第 1 式给出. 设 $\mathbf{u}^* = \mathbf{B}\mathbf{u}^* + \mathbf{f}$, 则

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(k)} - \mathbf{u}^* &= p_k(\mathbf{B})(\mathbf{u}^{(0)} - \mathbf{u}^*) \\ &= [\rho_k p_1(\mathbf{B}) p_{k-1}(\mathbf{B}) + (1 - \rho_k) p_{k-2}(\mathbf{B})](\mathbf{u}^{(0)} - \mathbf{u}^*) \\ &= \rho_k p_1(\mathbf{B})(\mathbf{u}^{(k-1)} - \mathbf{u}^*) + (1 - \rho_k)(\mathbf{u}^{(k-2)} - \mathbf{u}^*), \end{aligned}$$



Back

Close

即

$$\mathbf{u}^{(k)} = \rho_k p_1(\mathbf{B}) \mathbf{u}^{(k-1)} + (1 - \rho_k) \mathbf{u}^{(k-2)} + \rho_k (\mathbf{I} - p_1(\mathbf{B})) \mathbf{x}^*, \quad k \geq 2. \quad (3.136)$$

注意到

$$p_1(\mathbf{B}) = (1 - \gamma) \mathbf{I} + \gamma \mathbf{B}, \quad (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mathbf{x}^* = \mathbf{f},$$

代入式 (3.136) 即得要证的递推式. 证毕. \square

注 3.7 式 (3.135) 中的迭代格式表明, 对于 $\mathbf{u}^{(k-1)}$, 用原来的迭代格式迭代一次产生 $\mathbf{B}\mathbf{u}^{(k-1)} + \mathbf{f}$, 它与 $\mathbf{u}^{(k-1)}$ 组合产生 $(1 - \gamma)\mathbf{u}^{(k-1)} + \gamma(\mathbf{B}\mathbf{u}^{(k-1)} + \mathbf{f})$, 其中组合系数 γ 由 a, b 决定, 这种组合就是外推格式. 这样外推之后的结果再与前一步迭代向量 $\mathbf{u}^{(k-2)}$ 做组合, 组合系数 ρ_k 由式 (3.131) 的递推公式确定. 可以期望, Chebyshev 加速应该比一般的外推加速具有更快的收敛速度.





Chebyshev 加速迭代格式的速度由它的迭代矩阵的谱半径确定. 有

$$\rho(p_k(\mathbf{B})) \leq \max_{a \leq t \leq b} |p_k(\lambda)| = \frac{1}{C_k(w(1))}.$$

经过简单的计算 (定理 4.2 (2)) 可知

$$\frac{1}{C_k(w(1))} = \frac{2}{r^k + r^{-k}}, \quad r = t + \sqrt{t^2 - 1}, \quad t = w(1) = \frac{2 - a - b}{b - a} > 1.$$

外推格式和 Chebyshev 加速迭代格式都依赖于某个简单的迭代格式 (3.4). 当迭代格式 (3.4) 容易并行实现时, 相应的外推格式和 Chebyshev 加速迭代格式也都可以并行实现.

例 3.6 考虑用 Chebyshev 加速方法对例 3.2 中的 Jacobi 迭代法进行加速. 现在对 Jacobi 迭代法进行加速. 根据例 3.5, 可知 Jacobi 迭代矩阵 \mathbf{B}_J 的 n 个特征值为

$$\lambda_k = \frac{1}{2} \cos \frac{k\pi}{n+1}, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$



Back

Close



因此, B_J 所有特征值都在 $a = \lambda_n$ 和 $b = \lambda_1$ 之间. 取 $n = 2^{14} - 1 = 16383$, 初始向量为零向量, 容许误差为 10^{-10} . 由于 $\lambda_n = -\lambda_1$, 故外推参数 $\gamma = 2/(2 - a - b) = 1$, 因此外推法 (3.108) 对此例不起作用. 得到计算结果如表 3.6 所示.

表 3.6 Jacobi 迭代法和 Chebyshev 加速迭代的数值比较

迭代格式	迭代次数 (k)	CPU 时间	相对残差
Jacobi 迭代法	34	0.0130	5.8182e-11
Chebyshev 加速	21	0.0089	6.0411e-11



Back

Close

§3.6 块三对角方程组的迭代解法



163/183

本节讨论 A 为块三对角矩阵时, 方程组 $Ax = b$ 的迭代解法.

设

$$A = \begin{bmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A_{m-1} & B_{m-1} & C_{m-1} \\ & & & A_m & B_m \end{bmatrix}, \quad (3.137)$$

式中: B_i 为 n_i 阶矩阵 ($n_1 + n_2 + \cdots + n_m = n$).



Back

Close

§3.6.1 PE(α) 方法



164/183

对矩阵 A 进行块三角分解 (假定这种分解存在), 即

$$A = \begin{bmatrix} D_1 & & & \\ A_2 & D_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & A_m & D_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 & U_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & I_{m-1} & U_{m-1} \\ & & & I_m \end{bmatrix}, \quad (3.138)$$

式中: I_i 为 n_i 阶单位矩阵.

比较式 (3.137) 和式 (3.138), 得

$$D_1 = B_1,$$

$$U_i = D_i^{-1} C_i \quad (i = 1, 2, \dots, m-1),$$

$$D_i = B_i - A_i U_{i-1} = B_i - A_i D_{i-1}^{-1} C_{i-1} \quad (i = 2, 3, \dots, m).$$

由此, 在一定条件下, 有



Back

Close



$$\begin{aligned}
D_i^{-1} &= (B_i - A_i D_{i-1}^{-1} C_{i-1})^{-1} = (I_i - B_i^{-1} A_i D_{i-1}^{-1} C_{i-1})^{-1} B_i^{-1} \\
&= [I_i + B_i^{-1} A_i D_{i-1}^{-1} C_{i-1} + (B_i^{-1} A_i D_{i-1}^{-1} C_{i-1})^2 + \cdots] B_i^{-1} \\
&\approx (I_i + B_i^{-1} A_i D_{i-1}^{-1} C_{i-1}) B_i^{-1}.
\end{aligned}$$

若将右端的 $B_i^{-1} A_i D_{i-1}^{-1} C_{i-1}$ 也省略, 则有 $D_i^{-1} \approx B_i^{-1}$. 于是, 用 B_{i-1}^{-1} 代替 D_{i-1}^{-1} 时, 上式可写为 $D_i^{-1} \approx (I_i + B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1}) B_i^{-1}$, 或

$$D_i \approx B_i (I_i + B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1})^{-1} = S_i, \quad (3.139)$$

这样得到 A 的一个近似块三角分解

$$A \approx \begin{bmatrix} S_1 & & & \\ A_2 & S_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & A_m & S_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 & T_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & I_{m-1} & T_{k-1} \\ & & & I_m \end{bmatrix}, \quad (3.140)$$





式中:

$$\begin{cases} S_1 = B_1, \\ T_i = S_i^{-1} C_i \quad (i = 1, 2, \dots, m-1), \\ S_i = B_i (I_i + B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1})^{-1} \quad (i = 2, 3, \dots, m). \end{cases} \quad (3.141)$$

若用 L 和 U 分别表示式 (3.140) 右端的第 1 个和第 2 个矩阵, 则有 $A \approx LU$. 令

$$M = LU$$

$$= \begin{bmatrix} S_1 & C_1 & & & \\ A_2 & A_2 T_1 + S_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A_{m-1} & A_{m-1} T_{m-2} + S_{m-1} & C_{m-1} \\ & & & A_m & A_m T_{m-1} + S_m \end{bmatrix}$$

$$N = M - A = \text{diag}(O, N_2, \dots, N_m), \quad (3.142)$$





式中: $N_i = A_i T_{i-1} + S_i - B_i$ ($i = 2, 3, \dots, m$). 那么 $Ax = b$ 等价于 $Mx = Nx + b$. 建立迭代格式

$$Mx^{(k+1)} = Nx^{(k)} + b, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.143)$$

称式 (3.143) 为拟消去 (Pseudo-Elimination, PE) 迭代方法. 使用式 (3.143) 时, 对于每个 k , 求 $x^{(k+1)}$ 可转化为下面两个块三角方程组的求解问题:

$$Lz^{(k+1)} = Nx^{(k)} + b, \quad Ux^{(k+1)} = z^{(k+1)}.$$

若用 $b_i, x_i^{(k)}, x_i^{(k+1)}, z_i^{(k+1)}$ 分别表示向量 $b, x^{(k)}, x^{(k+1)}, z^{(k+1)}$ 的第 i 个子向量, 则分组计算的递推公式为

$$z_1^{(k+1)} = S_1^{-1} b_1, \quad z_i^{(k+1)} = S_i^{-1} (N_i x_i^{(k)} + b_i - A_i z_{i-1}^{(k+1)}), \quad i = 2, 3, \dots, m,$$

$$x_m^{(k+1)} = z_m^{(k+1)}, \quad x_i^{(k+1)} = z_i^{(k+1)} - T_i x_{i+1}^{(k+1)}, \quad i = m-1, \dots, 2, 1.$$



Back

Close



下面讨论 PE 方法的收敛性.

定理 3.37 设 A 为 Hermite 矩阵, 则 PE 方法中的矩阵 S_i , M 和 N 均为 Hermite 矩阵.

证明 由 $A^H = A$ 知 $B_i^H = B_i$, $A_i^H = C_{i-1}$, 故有

$$\begin{aligned}
 S_i^H &= [(I_i + B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1})^{-1}]^H B_i^H \\
 &= (I_i + A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1} B_i^{-1})^{-1} B_i \\
 &= [B_i (I_i + B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1}) B_i^{-1}]^{-1} B_i \\
 &= B_i (I_i + B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1})^{-1} \\
 &= S_i
 \end{aligned}$$



Back

Close

及

$$\begin{aligned}(\mathbf{A}_i \mathbf{T}_{i-1})^H &= (\mathbf{A}_i \mathbf{S}_{i-1}^{-1} \mathbf{C}_{i-1})^H = \mathbf{C}_{i-1}^H \mathbf{S}_{i-1}^{-1} \mathbf{A}_i^H \\ &= \mathbf{A}_i \mathbf{S}_{i-1}^{-1} \mathbf{C}_{i-1} = \mathbf{A}_i \mathbf{T}_{i-1}.\end{aligned}$$

因此 $\mathbf{M}^H = \mathbf{M}$, 从而 $\mathbf{N}^H = (\mathbf{M} - \mathbf{A})^H = \mathbf{M}^H - \mathbf{A}^H = \mathbf{N}$. 证毕.

□

引理 3.8 设 \mathbf{A} 的特征值 $\lambda(\mathbf{A})$ 为非负实数, \mathbf{B} 为 Hermite 正定矩阵, $\mathbf{C} = \mathbf{AB}$ (或 $\mathbf{C} = \mathbf{BA}$) 为 Hermite 矩阵, 则 \mathbf{C} 为半正定矩阵. 进一步, 若 $\lambda(\mathbf{A})$ 均为正数, 则 \mathbf{C} 为正定矩阵.

证明 设 $\lambda(\mathbf{A}) \geq 0$, 由于 \mathbf{A} 相似于

$$\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{AB}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{ABB}^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{CB}^{-\frac{1}{2}},$$

所以 $\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{CB}^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值也是非负实数, 从而 \mathbf{C} 的特征值是非负





实数. 故 C 为半正定矩阵. 同理, 可证 $C = BA$ 及 $\lambda(A) > 0$ 的情形. 证毕. \square

引理 3.9 设 $A = M - N$, 且 A 和 M 都可逆, 则对 $M^{-1}N$ 的任意特征值 μ , 存在 $A^{-1}N$ 的某个特征值 λ , 使得

$$\mu = \frac{\lambda}{1 + \lambda}. \quad (3.144)$$

证明 设 $M^{-1}N$ 的一个特征值为 μ , 对应的特征向量为 $z \neq 0$, 则有 $(M^{-1}N)z = \mu z$. 因为

$$M^{-1}N = (A + N)^{-1}N = (I + A^{-1}N)^{-1}(A^{-1}N),$$

所以

$$(I + A^{-1}N)^{-1}(A^{-1}N)z = \mu z,$$

即

$$(A^{-1}N)z = \mu(I + A^{-1}N)z.$$



Back

Close



若 $\mu = 1$, 则上式成为 $z = 0$, 这与 z 是特征向量矛盾. 故 $\mu \neq 1$, 从而有

$$(A^{-1}N)z = \frac{\mu}{1-\mu}z,$$

这表明 $\frac{\mu}{1-\mu}$ 是 $A^{-1}N$ 的一个特征值, 记作 λ , 即 $\lambda = \frac{\mu}{1-\mu}$. 易见 $\lambda \neq -1$, 从而有 $\mu = \frac{\lambda}{1+\lambda}$. 证毕. \square

定理 3.38 设 A 为 Hermite 正定矩阵, 则 PE 方法收敛.

证明 (1) 先证 PE 方法是适定的, 即算法中的矩阵 S_i ($i = 1, 2, \dots, m$) 均可逆. 由 A 正定知 B_i 均为正定矩阵, 从而 $A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1} = A_i B_{i-1}^{-1} A_i^H$ 半正定, 这是因为 $z \neq 0$ 时, 有

$$z^H A_i B_{i-1}^{-1} A_i^H z = (A_i^H z)^H B_{i-1}^{-1} (A_i^H z) \geq 0.$$



又由

$$B_i^{\frac{1}{2}}(B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1})B_i^{-\frac{1}{2}} = B_i^{-\frac{1}{2}}(A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1})B_i^{-\frac{1}{2}},$$

知 $B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1}$ 的特征值为非负实数, 从而 $I_i + B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1}$ 的特征值不为零 (实际上不小于 1). 因此 S_i 均可逆.

(2) 再证 PE 方法是收敛的, 即迭代矩阵 $M^{-1}N$ 的谱半径 $\rho(M^{-1}N) < 1$. 由于

$$\begin{aligned} N_i &= A_iT_{i-1} + S_i - B_i = A_iS_{i-1}^{-1}C_{i-1} + S_i - B_i \\ &= A_i(I_{i-1} + B_{i-1}^{-1}A_{i-1}B_{i-2}^{-1}C_{i-2})B_{i-1}^{-1}C_{i-1} \\ &\quad + B_i(I_i + B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1})^{-1} - B_i \\ &(i = 2, 3, \dots, m; A_1 = O, C_0 = O). \end{aligned}$$



利用恒等式

$$(I + G)^{-1} = I - G + G^2(I + G)^{-1},$$

改写上式第 2 项中的逆矩阵, 整理, 得

$$\begin{aligned} N_i &= A_i B_{i-1}^{-1} A_{i-1} B_{i-2}^{-1} C_{i-2} B_{i-1}^{-1} C_{i-1} \\ &\quad + A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1} B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1} (I + B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1})^{-1}. \end{aligned} \quad (3.145)$$

由 $A^H = C$ 知, 上式等号右端第 1 项为 Hermite 矩阵. 由定理 3.37 知 N_i 均为 Hermite 矩阵, 从而上式等号右端第 2 项也是 Hermite 矩阵. 由于

$$\begin{aligned} V_i &= A_i B_{i-1}^{-1} A_{i-1} B_{i-2}^{-1} C_{i-2} B_{i-1}^{-1} C_{i-1} \\ &= (A_i B_{i-1}^{-1} A_{i-1}) B_{i-2}^{-1} (A_i B_{i-1}^{-1} A_{i-1})^H, \end{aligned}$$





$$\begin{aligned}
W_i &= A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1} B_i^{-1} A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1} \\
&= (A_i B_{i-1}^{-1} A_i^H) B_i^{-1} (A_i B_{i-1}^{-1} A_i^H)^H, \\
Z_i &= B_i + A_i B_{i-1}^{-1} C_{i-1} = B_i + A_i B_{i-1}^{-1} A_i^H.
\end{aligned}$$

所以 V_i 和 W_i 为半正定矩阵, Z_i 为正定矩阵. 再由

$$W_i Z_i^{-1} = Z_i^{\frac{1}{2}} (Z_i^{-\frac{1}{2}} W_i Z_i^{-\frac{1}{2}}) Z_i^{-\frac{1}{2}},$$

知 $W_i Z_i^{-1}$ 的特征值为非负实数. 式 (3.145) 等号右端的第 2 项是 Hermite 矩阵, 且可写为 $(W_i Z_i^{-1}) B_i$, 而 B_i 正定, 根据引理 3.8 可得 $(W_i Z_i^{-1}) B_i$ 为半正定矩阵. 于是有



Back

Close



$$\mathbf{N}_i = \mathbf{V}_i + (\mathbf{W}_i \mathbf{Z}_i^{-1}) \mathbf{B}_i \text{ 半正定}$$

$$\Rightarrow \mathbf{N} = \text{diag}(\mathbf{O}, \mathbf{N}_2, \dots, \mathbf{N}_m) \text{ 半正定}$$

$$\Rightarrow \mathbf{A}^{-1} \mathbf{N} = \mathbf{A}^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{A}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{N} \mathbf{A}^{-\frac{1}{2}}) \mathbf{A}^{\frac{1}{2}} \text{ 的特征值为非负实数}$$

$$\Rightarrow 0 \leq \frac{\lambda(\mathbf{A}^{-1} \mathbf{N})}{1 + \lambda(\mathbf{A}^{-1} \mathbf{N})} < 1.$$

由式 (3.140) 知 \mathbf{M} 可逆, 根据引理 3.9, 得 $\rho(\mathbf{M}^{-1} \mathbf{N}) < 1$. 证毕. \square

在式 (3.139) 中, 改写 \mathbf{S}_i 为

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{B}_i (\mathbf{I}_i + \alpha \mathbf{B}_i^{-1} \mathbf{A}_i \mathbf{B}_{i-1}^{-1} \mathbf{C}_{i-1})^{-1} \quad (i = 2, 3, \dots, m), \quad (3.146)$$

式中: α 为参数, 相应的迭代格式 (3.143) 称为 $\text{PE}(\alpha)$ 方法. 可以验证: $\text{PE}(0)$ 方法为对称块 Gauss-Seidel 方法 (简记为 SBGS 方法).



Back

Close



定理 3.39 设 \mathbf{A} 为 Hermite 正定矩阵, 令 $\mathbf{G}_i = \mathbf{B}_i^{-1} \mathbf{A}_i \mathbf{B}_{i-1}^{-1} \mathbf{C}_{i-1}$, $\delta = \lambda_{\min}(\mathbf{G}_i)$, 若参数 α 满足

$$\begin{cases} \alpha \geq 0, & \text{当 } \delta \geq 1 \text{ 时,} \\ 0 \leq \alpha \leq \frac{1}{1-\delta}, & \text{当 } 0 \leq \delta < 1 \text{ 时,} \end{cases} \quad (3.147)$$

则 $\text{PE}(\alpha)$ 方法收敛.

在定理 3.39 中, \mathbf{G}_i 的特征值为非负实数. 因此, 当 $\alpha \geq 0$ 时, $\text{PE}(\alpha)$ 方法收敛. 特别地, 当 $\alpha = 1$ 时, PE 方法收敛; 当 $\alpha = 0$ 时, SBGS 方法收敛.

例 3.7 设 \mathbf{A} 形如式 (3.137), 其中

$$\mathbf{B}_i = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_i = \mathbf{C}_i = \begin{bmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{bmatrix}.$$



Back

Close



可以验证 \mathbf{A} 为对称正定矩阵. 取 $\mathbf{b} = (1, 2, \dots, n)^T$, 用 $\text{PE}(\alpha)$ 方法求解线性方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, 计算结果如表 3.7 所示 (终止准则为 10^{-12} , 时间单位为秒).

表 3.7 $\text{PE}(\alpha)$ 方法的数值结果

参数 α	$n = 6000$			$n = 12000$		
	迭代次数	计算时间	相对残差	迭代次数	计算时间	相对残差
0.5	22	0.8709	6.2931e-13	23	1.8432	3.3271e-13
1.0	15	0.6299	4.1516e-13	15	1.2642	7.6464e-13
1.4	8	0.3770	7.6054e-13	9	0.8406	4.6594e-14
1.5	7	0.3410	1.5256e-13	7	0.6851	2.8009e-13
1.6	9	0.4082	4.6582e-14	9	0.8277	8.5260e-14
2.0	17	0.6899	2.5846e-13	17	1.4063	4.7639e-13
SBGS	29	1.1470	8.4202e-13	30	2.4169	9.4989e-13

表 3.7 中最后一行是用 SBGS 方法求解该方程组时的迭代次数、计算时间和相对残差. 易见, 当参数 $\alpha = 1.5$ 时, $\text{PE}(\alpha)$ 方法的收敛速度较快.



Back

Close

§3.6.2 二次 PE(α) 方法



178/183

在式 (3.139) 中, 改写 S_i 为

$$S_i = B_i(I_i + G_i + G_i^2)^{-1} \quad (i = 2, 3, \dots, m), \quad (3.148)$$

式中: $G_i = B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1}$. 相应的迭代格式 (3.143) 称为二次 PE 方法.

定理 3.40 设 A 为 Hermite 矩阵, 则二次 PE 方法收敛.

证明 (1) 先证算法是适定的, 即所有的 S_i 是可逆的. 事实上, 由 A 正定知 B_i ($i = 1, 2, \dots, m$) 正定, 故 $S_1 = B_1$ 可逆. 而由 $A_i^H = C_{i-1}$ 知 $A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1} = A_iB_{i-1}^{-1}A_i^H$ 半正定. 再由

$$B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1} = B_i^{-\frac{1}{2}} \cdot B_i^{-\frac{1}{2}}(A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1})B_i^{-\frac{1}{2}}B_i^{\frac{1}{2}}, \quad (3.149)$$



Back

Close



得 $B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1}$ 的特征值为非负实数, 从而

$$I_i + (B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1}) + (B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1})^2$$

的特征值为正数, 故该矩阵可逆. 根据式 (3.148), 得 S_i ($i = 1, 2, \dots, m$) 可逆.

(2) 再证算法是收敛的, 即迭代矩阵的谱半径 $\rho(M^{-1}N) < 1$.

由于

$$\begin{aligned} N_i &= A_iT_{i-1} + S_i - B_i = A_iS_{i-1}^{-1}C_{i-1} + S_i - B_i \\ &= A_i[I_{i-1} + (B_{i-1}^{-1}A_{i-1}B_{i-2}^{-1}C_{i-2}) + (B_{i-1}^{-1}A_{i-1}B_{i-2}^{-1}C_{i-2})^2]B_{i-1}^{-1}C_{i-1} \\ &\quad + B_i[I_i + (B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1}) + (B_i^{-1}A_iB_{i-1}^{-1}C_{i-1})^2]^{-1} - B_i. \end{aligned}$$

利用恒等式 $(I_i - G_i)(I_i + G_i + G_i^2) = I_i - G_i^3$, 得

$$(I_i + G_i + G_i^2)^{-1} = I_i - G_i + G_i^3(I_i + G_i + G_i^2)^{-1}.$$



Back

Close



代入上式并整理, 得

$$\begin{aligned}
 N_i = & A_i(B_{i-1}^{-1}A_{i-1}B_{i-2}^{-1}C_{i-2})B_{i-1}^{-1}C_{i-1} \\
 & + A_i(B_{i-1}^{-1}A_{i-1}B_{i-2}^{-1}C_{i-2})^2B_{i-1}^{-1}C_{i-1} \\
 & + B_iG_i^3(I_i + G_i + G_i^2)^{-1}.
 \end{aligned} \tag{3.150}$$

可以验证, 式 (3.150) 右端的前两项均为 Hermite 半正定矩阵. 由式 (3.149) 知, 矩阵 $G_i^3(I_i + G_i + G_i^2)^{-1}$ 的特征值为非负实数, 而 B_i 为 Hermite 正定矩阵, 且

$$\begin{aligned}
 & B_iG_i^3(I_i + G_i + G_i^2)^{-1} \\
 & = B_i[(I_i + G_i + G_i^2)^{-1} + G_i - I_i] \\
 & = (B_i^{-1} + G_iB_i^{-1} + G_i^2B_i^{-1})^{-1} + B_iG_i - B_i
 \end{aligned}$$

为 Hermite 矩阵, 由引理 3.8 知式 (3.150) 右端的第 3 项为半正定矩阵. 因此, N_i 为半正定矩阵, 从而 N 亦为半正定矩阵. 再由



Back

Close



$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N} = \mathbf{A}^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{A}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{N}\mathbf{A}^{-\frac{1}{2}})\mathbf{A}^{\frac{1}{2}}$ 可知 $\lambda(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N})$ 为非负实数, 根据结论 (1) 可得 \mathbf{M} 为可逆矩阵, 于是有

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N} = (\mathbf{N} + \mathbf{A})^{-1}\mathbf{N} = (\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N} + \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}).$$

由此, 得

$$\lambda(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}) = \frac{\lambda(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N})}{1 + \lambda(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N})}.$$

因此 $0 \leq \lambda(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}) < 1$, 故迭代格式 (3.143) 收敛. 证毕. □

在式 (3.148) 中, 改写 \mathbf{S}_i 为

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{B}_i(\mathbf{I}_i + \mathbf{G}_i + \alpha\mathbf{G}_i^2)^{-1} \quad (i = 2, 3, \dots, m), \quad (3.151)$$

式中: α, β 为参数. 相应的迭代格式 (3.143) 称为二次 $\text{PE}(\alpha)$ 方法. 易见, $\text{PE}(\alpha)$ 方法和二次 PE 方法都是二次 $\text{PE}(\alpha)$ 方法的特殊情形. 特别地, 二次 $\text{PE}(0)$ 方法即为 PE 方法.



Back

Close



定理 3.41 设 \mathbf{A} 为 Hermite 正定矩阵, 若参数 α 满足式 (3.147), 则二次 $\text{PE}(\alpha)$ 方法收敛.

例 3.8 设 \mathbf{A} 形如式 (3.137), 其中

$$\mathbf{B}_i = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_i = \mathbf{C}_i = \begin{bmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{bmatrix}.$$

可以验证 \mathbf{A} 为对称正定矩阵. 取 $\mathbf{b} = (1, 2, \dots, n)^T$, 用二次 $\text{PE}(\alpha)$ 方法求解线性方程组 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, 计算结果如表 3.8 所示 (终止准则为 10^{-12} , 时间单位为秒).

表 3.8 中最后一行是用 SBGS 方法求解该方程组时的迭代次数、计算时间和相对残差. 易见, 当参数 $\alpha = 3.0$ 时, 二次 $\text{PE}(\alpha)$ 方法的收敛速度较快.



Back

Close

表 3.8 二次 $\text{PE}(\alpha)$ 方法的数值结果

参数 α	$n = 6000$			$n = 12000$		
	迭代次数	计算时间	相对残差	迭代次数	计算时间	相对残差
0.0	15	0.6491	2.6966e-13	15	1.2793	7.6464e-13
1.0	13	0.5943	1.5076e-13	13	1.1402	4.2746e-13
2.0	10	0.4680	5.2057e-13	11	0.9823	9.7413e-14
3.0	7	0.3516	1.3442e-13	7	0.6955	3.8024e-13
4.0	8	0.3927	7.4033e-13	9	0.8440	7.2741e-14
5.0	12	0.5265	8.9187e-14	12	1.0605	2.5292e-13
SBGS	29	1.1483	8.4202e-13	30	2.3955	9.4989e-13



Back

Close