第4章 逐次逼近法

4.5 共轭梯度法

4.5 共轭梯度法

SOR迭代法是解大型稀疏线性方程组的有效方法，但是需选取适用的松驰因子。出现在**20**世纪**50**年代的共轭梯度法是解大型稀疏线性方程组的理想方法之一。经过适当改进还可用于解病态线性方程组。在介绍本方法前，首先需将线性方程组进行等价变形。

设线性方程组：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \qquad \text{(4-62)}$$

其中$\boldsymbol{A}$为$\boldsymbol{n}$阶对称正定矩阵，$\boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^n$，$\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$ 为待求向量。

考察二次函数 $\varphi(\boldsymbol{x}):\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}$

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})-(\boldsymbol{b},\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{n}a_{ij}x_i\right)x_j-\sum_{j=1}^{n}b_jx_j$$

则有

定理4.9 x^*是$Ax=b$解（A为对称正定矩阵）的充分必要条件

为x^*满足
$$\varphi\left(x^*\right)=\min_{x\in\mathbf{R}^n}\varphi\left(x\right)$$

证 必要性 设$Ax=b$, 取$x=x^*+tp$, 其中 $t\in\mathbf{R}, 0\neq p\in\mathbf{R}^n$, 则

$$\varphi\left(x^*+tp\right)=\frac{1}{2}\left(A\left(x^*+tp\right), x^*+tp\right)-\left(b, x^*+tp\right)$$ 注意到$A=A^T$,

$$=\frac{1}{2}\left(Ax^*, x^*\right)+\frac{t}{2}\left(Ax^*, p\right)+\frac{t}{2}\left(Ap, x^*\right)+\frac{\lambda^2}{2}\left(Ap, p\right)-\left(b, x^*\right)-t\left(b, p\right)$$

$$=\frac{1}{2}\left(Ax^*, x^*\right)-\left(b, x^*\right)+\frac{t}{2}\left[\left(Ax^*, p\right)+\left(Ap, x^*\right)-2\left(b, p\right)\right]+\frac{t^2}{2}\left(Ap, p\right)$$

$$=\varphi\left(x^*\right)+t\left(Ax^*-b, p\right)+\frac{t^2}{2}\left(Ap, p\right)$$

$$=\varphi\left(x^*\right)+\frac{t^2}{2}\left(Ap, p\right)$$

因为A为正定矩阵，所以 $\frac{t^2}{2}\left(Ap, p\right)\geq 0$，故

$$\varphi\left(x^*+tp\right)\geq\varphi\left(x^*\right)$$

即x^*使 $\varphi\left(x\right)$ 达到最小。

$$\varphi\left(\boldsymbol{x}^{*}+t\boldsymbol{p}\right)=\varphi\left(\boldsymbol{x}^{*}\right)+t\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{*}-\boldsymbol{b}\,,\,\boldsymbol{p}\right)+\frac{t^{2}}{2}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}\,,\,\boldsymbol{p}\right)$$

充分性　设 $\varphi\left(\boldsymbol{x}^{*}\right)=\min\limits_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^{n}}\varphi\left(\boldsymbol{x}\right)$, 则应有 $\varphi\left(\boldsymbol{x}^{*}+t\boldsymbol{p}\right)$ 于$\boldsymbol{t}$=0取极小值, 也即 $\forall\boldsymbol{p}\in\mathbf{R}^{n}$

$$\left[\varphi'\left(\boldsymbol{x}^{*}+t\boldsymbol{p}\right)\right]\Big|_{t=0}=\left[\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{*}-\boldsymbol{b}\,,\,\boldsymbol{p}\right)+t\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}\,,\,\boldsymbol{p}\right)\right]\Big|_{t=0}=\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{*}-\boldsymbol{b}\,,\,\boldsymbol{p}\right)=0$$

从而 $\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{*}-\boldsymbol{b}\,,\,\boldsymbol{p}\right)=0 \Leftrightarrow$　$\boldsymbol{x}^*$是$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$的解。

又由 $\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}^*+t\boldsymbol{p})$于$t=0$取极小值的充分条件, 即得

$$\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}\,,\,\boldsymbol{p}\right)=\varphi''\left(0\right)>0 \quad \forall\boldsymbol{p}\in\mathbf{R}^{n}$$

故$\boldsymbol{A}$必为正定矩阵。

定理4. 9说明，求$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$的解的问题等价于求$\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})$的最小值问题。

在介绍共轭梯度法前, 先介绍较为直观的最速下降法。

4.5.1 最速下降法

取初始向量$\boldsymbol{x}_0$，从$\boldsymbol{x}_0$出发构造向量序列$\{\boldsymbol{x}_k\}$使 $\varphi(\boldsymbol{x}_{k-1}) > \varphi(\boldsymbol{x}_k)$

构造方法：选取方向$\boldsymbol{x}_0$，使$\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})$在$\boldsymbol{x}_0$处沿$\boldsymbol{y}_0$方向减小的速度最快。

据多元函数场论可知，$\boldsymbol{y}_0$应为$\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})$的负梯度方向，即

$$\boldsymbol{y}_0 = -\nabla\varphi(\boldsymbol{x}_0) \quad = \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 \qquad \varphi(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b}$$

再在方向$\boldsymbol{r}_0$上进行一维极小搜索， 即在 $\boldsymbol{x}_0 + \alpha\boldsymbol{r}_0$ 中选取 α_0 使得

$\varphi(\boldsymbol{x}_0 + \alpha\boldsymbol{r}_0)$ 极小，即求 $\min\limits_{\alpha\in R}\varphi(\boldsymbol{x}_0 + \alpha\boldsymbol{r}_0)$

$$\frac{\mathrm{d}\varphi(\boldsymbol{x}_0 + \alpha\boldsymbol{r}_0)}{\mathrm{d}\alpha} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\left[\varphi(\boldsymbol{x}_0) + \alpha(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{b}, \boldsymbol{r}_0) + \frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)\right]$$

$$= -(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0) + \alpha(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0) = 0$$

则 $\alpha = \alpha_0 = \dfrac{(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)}$， 由于 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\alpha^2}\varphi(\boldsymbol{x}_0 + \alpha \boldsymbol{r}_0) = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0) > 0$

故 $$\min_{\alpha \in R} \varphi(\boldsymbol{x}_0 + \alpha \boldsymbol{r}_0) = \varphi(\boldsymbol{x}_0 + \alpha \boldsymbol{r}_0)$$

令 $\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha \boldsymbol{r}_0$，重复上面的过程，可得

$$\begin{cases} \boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k \\ \alpha_k = \dfrac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)} \\ \boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{r}_k \end{cases} \tag{4-63}$$

由于 $\varphi(\boldsymbol{x}_0) > \varphi(\boldsymbol{x}_1) > \cdots > \varphi(\boldsymbol{x}_k) > \cdots \geq \varphi(\boldsymbol{x}^*)$， $\{\varphi(\boldsymbol{x}_k)\}$ 存在极限，

而且 $$\lim_{k \to \infty} \boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$$

还可以证明

（1） $(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_k) = 0 \quad k = 0, 1, 2, \cdots$ （**4-64**）

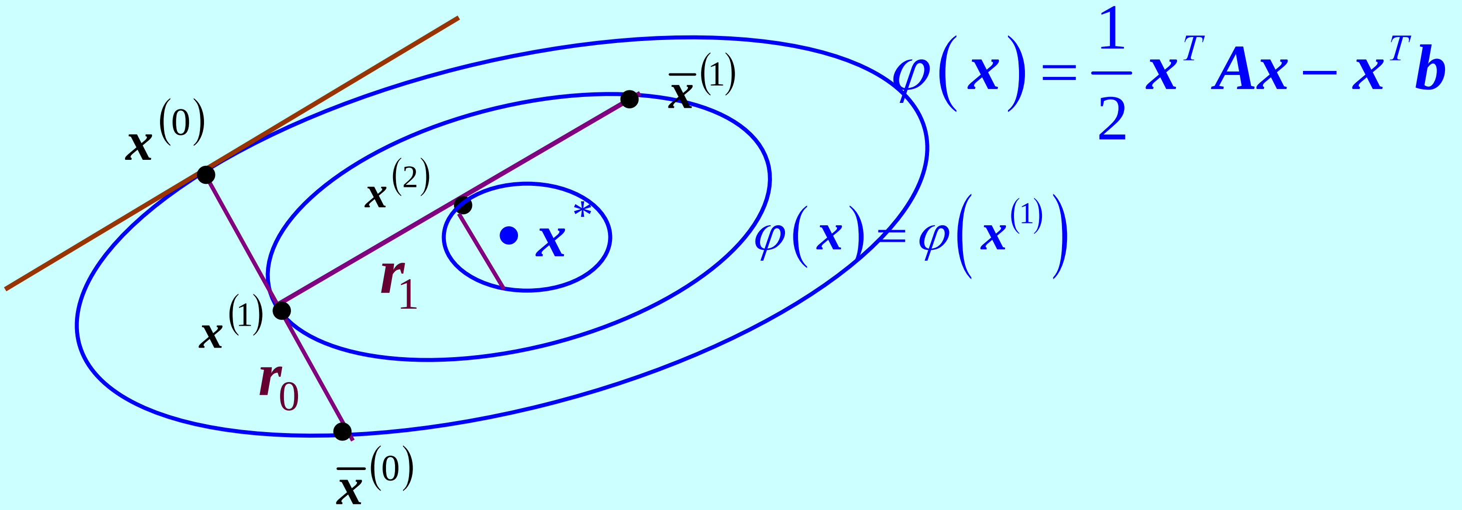
（2） $\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*\|_A \leq \left(\dfrac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n}\right)^k \|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}^*\|_A$ （**4-65**）

其中 λ_1, λ_n 分别为$\boldsymbol{A}$的模最大和最小特征值， $\|\boldsymbol{x}\|_A = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})^{\frac{1}{2}}$ 。

最速下降的几何意义

取定初始值$\boldsymbol{x}^{(0)}$， 于超椭圆 $\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi\left(\boldsymbol{x}^{(0)}\right)$ 上过$\boldsymbol{x}^{(0)}$, 作其内法线$\boldsymbol{r}^{(0)}$, 它就是 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 在$\boldsymbol{x}^{(0)}$点的最速下降方向，然后在射线 $\boldsymbol{x}^{(0)}+\alpha\boldsymbol{r}^{(0)}$ 上求与 $\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi\left(\boldsymbol{x}^{(0)}\right)$ 的另一交点 $\overline{\boldsymbol{x}}^{(0)}$， $\overline{\boldsymbol{x}}^{(0)}$, $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 的中点即为$\boldsymbol{x}^{(1)}$，它也是 $\boldsymbol{x}^{(0)}-\alpha\boldsymbol{r}^{(0)}$ 与 $\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi\left(\boldsymbol{x}^{(1)}\right)$ 的切点。

过$\boldsymbol{x}^{(1)}$再作 $\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi\left(\boldsymbol{x}^{(1)}\right)$ 的内法线$\boldsymbol{r}^{(1)}$, 然后沿着此方向求 $\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}$, $\boldsymbol{x}^{(2)}$, 等等…, 如此继续下去就得到最速下降的迭代序列。



验证 $\left(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_k\right) = 0 \quad k = 0, 1, 2, \cdots$ **（4-64）**

由 $\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{r}_k$

得 $\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{r}_k\right) = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_k$

从而 $\left(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_k\right) = \left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right) - \alpha_k \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right)$

$$\alpha_k = \frac{\left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right)} \qquad = \left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right) - \frac{\left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right)}{\cancel{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right)}} \cancel{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right)}$$

$$= \left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right) - \left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right)$$

$$0$$

当λ$_1$与λ$_n$相差很大时，据（**4-65**）可知，$\{\boldsymbol{x}_k\}$收敛很慢，而且当‖$\boldsymbol{r}_k$‖很小时,由于舍入误差的影响,由（**4-63**）的计算将出现不稳定现象,所以在实际计算中很少使用最速下降法。

4.5.2　共轭梯度法（简称CG法）

从（4-65）可以看出，我们采用一维搜索所沿的方向$\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_1$ $\cdots, \boldsymbol{r}_k\cdots$可能使的收敛速度缓慢，因此，我们需要另找一组方向$\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_k\cdots$进行一维极小搜索。设按方向 $\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_{k-1}$已经进行$\boldsymbol{k}$次一维搜索，已求出$\boldsymbol{x}_k$，下一步确定进行求解极小问题

$$\min \varphi\left(\boldsymbol{x}_k + \alpha \boldsymbol{p}_k\right)$$

与4.5.1中的方法一样，令

$$\frac{\mathrm{d}\varphi\left(\boldsymbol{x}_k + \alpha\, \boldsymbol{p}_k\right)}{\mathrm{d}\alpha} = 0$$

解得

$$\alpha=\alpha_k=\frac{(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_k)} \qquad (4\text{-}66)$$

从而得到下一个近似解和对应的余向量

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k+\alpha_k\boldsymbol{p}_k \qquad (4\text{-}67)$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_k+\alpha_k\boldsymbol{p}_k)$$

$$=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k-\alpha_k\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k=\boldsymbol{r}_k-\alpha_k\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k \qquad (4\text{-}68)$$

反复利用（4-67），可得

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k+\alpha_k\boldsymbol{p}_k=\boldsymbol{x}_{k-1}+\alpha_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}+\alpha_k\boldsymbol{p}_k$$

$$\cdots\cdots\cdot$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{p}_0+\alpha_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+\alpha_k\boldsymbol{p}_k$$

为讨论方便，又不失一般性，可以令$\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{0}$。

下面讨论 $\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_k \cdots$的取法。

开始时$\boldsymbol{p_0}=\boldsymbol{r_0}$取，如果$k\geqslant\mathbf{1}$时，$\boldsymbol{p_k}$的确定希望满足

$$（1）\quad \varphi(\boldsymbol{x}_{k+1}) = \min_{\alpha} \varphi(\boldsymbol{x}_k + \alpha \boldsymbol{p}_k)$$

其中 α 与$\boldsymbol{x_{k+1}}$由（**4-66**）、（**4-67**）确定。

$$（2）\quad \varphi(\boldsymbol{x}_{k+1}) = \min_{x \in R^{k+1}} \varphi(\boldsymbol{x})$$

其中 $\mathbf{R}^{k+1} = \mathrm{span}\{\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_k\}$

若$\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^{k+1}$时, $\boldsymbol{x}$可以写成 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} + \alpha\, \boldsymbol{p}_k$,

$$\boldsymbol{y} \in \mathrm{span}\{\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_{k-1}\} = \mathbf{R}^k$$

故有

$$\varphi(\boldsymbol{x}) = \varphi(\boldsymbol{y} + \alpha\, \boldsymbol{p}_k)$$

$$= \varphi(\boldsymbol{y}) + \alpha(\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}, \boldsymbol{p}_k) - \alpha(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}_k) + \frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) \qquad \text{（4-69）}$$

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi(\boldsymbol{y}+\alpha\boldsymbol{p}_k)=\varphi(\boldsymbol{y})+\alpha(\boldsymbol{Ay},\boldsymbol{p}_k)-\alpha(\boldsymbol{b},\boldsymbol{p}_k)+\frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{Ap}_k,\boldsymbol{p}_k)$$

为了能在（**4-69**）中分别对$\boldsymbol{y}$和α求极小，可以令 $(\boldsymbol{Ay},\boldsymbol{p}_k)=0$，其中$\boldsymbol{y}\in\mathbf{R}^k$，即

$$\boldsymbol{y}=\alpha_0\boldsymbol{p}_0+\alpha_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+\alpha_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}, \quad (\alpha_0,\cdots,\alpha_{k-1})^T\neq(0,\cdots,0)^T$$

故由 $(\boldsymbol{Ay},\boldsymbol{p}_k)=0$，立刻可以推出

$$(\boldsymbol{Ap}_j,\boldsymbol{p}_k)=0, \quad j=0,1,\cdots,k-1 \qquad (4\text{−}70)$$

定义4.3 若$\boldsymbol{A}$为对称正定阵，如果向量组 $\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_k$满足

$$(\boldsymbol{Ap}_i,\boldsymbol{p}_j)=0 \qquad i\neq j$$

则称该向量组为***A*-正交向量组**或称***A*-共轭向量组**。

若$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$(单位阵)，则 $\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_k$就是普通的正交向量组。

现在求极小问题（**4-69**）的解，若取$\{\boldsymbol{p}_i\}$为$\boldsymbol{A}$-共轭向量组，$\boldsymbol{x}_k$已为前一步极小问题的解，则

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^{k+1}}\varphi(\boldsymbol{x})=\min_{\boldsymbol{y},\alpha}\varphi(\boldsymbol{y}+\alpha\boldsymbol{p}_k)=\min_{\boldsymbol{y}}\varphi(\boldsymbol{y})+\min_{\alpha}\left[\frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{Ap}_k,\boldsymbol{p}_k)-\alpha(\boldsymbol{b},\boldsymbol{p}_k)\right]$$

（1） $\min\limits_{y} \varphi(\boldsymbol{y})$ 的解, 由于$\boldsymbol{y} \in \mathbf{R}^k$, 其解已在前一步求得, 即

（2） $\min\limits_{\alpha} \left[\frac{\alpha^2}{2} (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) - \alpha (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}_k) \right]$ 的解。 其解为

$$\alpha = \alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)} \quad \alpha = \alpha_k = \frac{(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)} \tag{4-71}$$

因为$\boldsymbol{x}_k \in \mathbf{R}^k$, 所以 $\boldsymbol{x}_k = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_1 + \cdots + \alpha_{k-1} \boldsymbol{p}_{k-1}$, 故

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k = \alpha_0 \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_1 + \cdots + \alpha_{k-1} \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}$$

从而有

$$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{p}_k) = \alpha_0 (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_k) + \alpha_1 (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_k) + \cdots + \alpha_{k-1} (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{p}_k) = 0$$

这样就有

$$\underline{(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}_k)} = (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}_k) - (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{p}_k) = (\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{p}_k) = \underline{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)}$$

故（**4-66**）与（**4-71**）是相同的。

现在给出CG中的一种求法。

设$\boldsymbol{r}_0$=$\boldsymbol{p}_0$, $\boldsymbol{p}_1$, ⋯, $\boldsymbol{p}_{k\text{-}1}$已求出， 现在要求$\boldsymbol{p}_k$， 由于$\boldsymbol{p}_k$不唯一，所以可取一种简单方法来确定$\boldsymbol{p}_k$， 设

$$\boldsymbol{p}_k = \boldsymbol{r}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1} \qquad \text{(4-72)}$$

则
$$0 = \left(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}\right) = \left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}\right) + \beta_{k-1}\left(\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}\right)$$

$$\beta_{k-1} = -\frac{\left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}\right)}{\left(\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}\right)} \qquad \text{(4-73)}$$

由**(4-72)**、**(4-73)**得到的$\boldsymbol{p}_k$，还可用于简化 α_k的计算。

因为由**(4-68)**与**(4-66)**有

$$\left(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{p}_k\right) = \left(\boldsymbol{r}_k - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k\right) = \left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k\right) - \alpha_k\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k\right)$$

$$= \left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k\right) - \frac{\left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k\right)}{\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k\right)}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k\right) = 0$$

$$(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k) = (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}) = (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k) + \beta_{k-1}(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_{k-1})$$

$$= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k) \qquad \textbf{（4-74）}$$

故有

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)} = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)} \qquad \textbf{（4-75）}$$

当$\boldsymbol{r_k} \neq \boldsymbol{0}$时，$\alpha_k > 0$。

用前面的已有公式，还可以证明：

（1） $$(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j) = 0 \quad (i \neq j) \qquad \textbf{（4-76）}$$

（2） $$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_j) = (\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_j) = 0 \quad (i \neq j) \qquad \textbf{（4-77）}$$

即$\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_1, \cdots$构成正交向量组，$\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots$构成$\boldsymbol{A}$-正交向量组。

利用（4-68）和（4-76）还可简化 β_k的计算，

$$\beta_k = -\frac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k)} = -\frac{\left(\boldsymbol{r}_{k+1}, \alpha_k^{-1}(\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_{k+1})\right)}{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k)}$$

$$= -\frac{\alpha_k^{-1}(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k)} + \frac{\alpha_k^{-1}(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k)}$$

$$= \frac{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)} \cdot \frac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)} = \frac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)} \qquad \text{（4-78）}$$

当$\boldsymbol{r}_{k+1} \neq \boldsymbol{0}$时，$\beta_k > 0$。

共轭梯度法（CG法）：

（1）任取 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbf{R}^n$

（2）$\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$, 取 $\boldsymbol{p}_0=\boldsymbol{r}_0$

（3）对 $k=1, 2, \cdots$

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k)}$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k$$

$$\beta_k = \frac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$$

在计算过程中若有$\boldsymbol{r}_k=0$或$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)=0$时计算终止，即有$\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}^*$。

当$(\boldsymbol{Ap}_k, \boldsymbol{p}_k)$=0时，由于$\boldsymbol{A}$为正定阵，必有$\boldsymbol{p}_k$=0，则由（4−74）有

$$\left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k\right) = \left(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k\right) = 0$$

即 $\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}_k = \boldsymbol{0}$。

由于n维空间中正交向量组的向量个数最多只有n个，所以$\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_n$中至少有一个为零向量，若$\boldsymbol{r}_j$=0, 则$\boldsymbol{r}_j = \boldsymbol{x}^*$。所以使用CG法求解$n$阶线性方程组，理论上最多$n$步便可得到精确解，因此，也可称为直接法。但是，由于舍入误差的影响，$\{\boldsymbol{r}_k\}$的正交性很难达到, 所以在实际计算时往往不能在n步得到精确解, 因此，通常将CG法还是作为逐次逼近法使用。

例1 用CG法解线性方程组 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

解 显然方程组的系数阵为对称正定阵，取 $\boldsymbol{x}_0 = (0,0,0)^T$

$$\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{p}_0 = (1,1,1)^T, \quad \alpha_0 = \frac{(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0)}{(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_0)} = \frac{3}{10},$$

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 = \left(\frac{3}{10},\frac{3}{10},\frac{3}{10}\right)^T, \quad \boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_0 - \alpha_0 \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_0 = (1,1,1)^T - \left(\frac{9}{10},\frac{9}{10},\frac{12}{10}\right)^T = \left(\frac{1}{10},\frac{1}{10},-\frac{2}{10}\right)^T$$

$$\beta_0 = \frac{(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1)}{(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0)} = \frac{6}{100}\times\frac{1}{3} = \frac{1}{50} \qquad \boldsymbol{p}_1 = r_1 + \beta_0 \boldsymbol{p}_0 = \left(\frac{1}{10},\frac{1}{10},-\frac{2}{10}\right)^T + \left(\frac{1}{50},\frac{1}{50},\frac{1}{50}\right)^T = \frac{3}{50}(2,2,-3)^T$$

$$\alpha_1 = \frac{(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1)}{(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_1)} = \frac{6}{100}\times\frac{2500}{90} = \frac{5}{3}$$

$$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_1 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_1 = \frac{3}{10}(1,1,1)^T + \frac{1}{10}(2,2,-3)^T = \frac{1}{2}(1,1,0)^T$$

$$\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{r}_1 - \alpha_1 \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_1 = \frac{1}{10}(1,1,-2)^T - \frac{5}{3}\times\frac{3}{50}(1,1,-2)^T = (0,0,0)^T$$

则方程组的解为 $\boldsymbol{x}_2 = (0.5,0.5,0)^T$。

对于病态的线性方程组，**CG**法的收敛速度是很慢的，为了改进收敛速度，可以对方程组进行预处理，使系数矩阵的条件数降低，这种方法称预处理共轭梯度法（**PCG**法），**PCG**方法是目前求解病态线性方程组的有效方法之一，因此，它已成为很多计算工作者关心的方法之一，对此有兴趣的读者可以参阅文献**[6]**。

THE END