计算数学丛书

对称矩阵计算

蒋尔雄 编著

上海科学技术出版社

计算数学丛书

对称矩阵计算

蒋尔雄 编著

上海科学技术出版社

Dt06/12

计算数学丛书
对称矩阵计算
蒋尔雄 编著
上海科学技术出版社出版
(上海瑞金二路 450 号)
新华书店上海发行所发行 上海商务印刷厂印刷
开本 787×1092 1/32 印张 5.375 字数 115,000
1984 年11月第1版 1984 年11月第1次印刷
印数: 1—11,500

统一书号: 13119·1184 定价: 0.75 元

出 版 说 明

《计算数学丛书》是为了适应计算数学和计算机科学的发展，配合高等院校计算数学教学的需要而组织的一套参考读物。读者对象主要是高等院校数学系和计算机科学系的学生、研究生，亦可供高等院校数学系和计算机科学系的教师以及工矿企业、科研单位从事计算工作的技术人员参考。

本丛书向读者介绍近代计算方法的一些主要进展及其适用范围和实用效果。每种书集中介绍一个专题，针对本专题的近代发展作综合性的介绍，内容简明扼要，重点突出，有分析，有评价，力图使读者对该专题的动向和发展趋势得到一个完整的了解。

本丛书已拟定的选题计有：《线性代数与多项式的快速算法》、《数论变换》、《数值有理逼近》、《矩阵特征值问题》、《索伯列夫空间引论》、《计算组合数学》、《样条与插值》、《有限条形法》、《广义逆矩阵及其计算方法》、《非线性方程迭代解法》、《奇异摄动中的边界层校正法》、《沃尔什函数理论与应用》、《多项式最佳逼近的实现》、《坏条件常微分方程数值解》、《误差分析》、《最小二乘问题的数值解法》、《板壳问题非协调方法》、《外推法及其应用》、《Monte Carlo 方法》、《差分格式理论》、《高维偏微分方程数值解》等二十余种，于一九八〇年初起陆续出版。

引　言

矩阵计算是近代计算方法中发展最早、最快的领域. 尤其是对称矩阵计算是最成熟的部分.

本书比较深入地介绍了解线性代数方程组的共轭斜量法和Lanczos方法，解矩阵特征值问题的QL方法和Lanczos方法，以及与这些方法密切相关的对称三对角矩阵的理论.这些方法是经过实践考验的，认为是有效的方法. 其中解线性代数方程组的共轭斜量法和解特征值问题的Lanczos方法，都是五十年代初期就提出来了，经历了二十年曲折的历史，获得了理论上和实践上的支持，直到七十年代才站住了脚.

读者通过本书，一方面可以更好地掌握这些方法，应用于实际，也可以了解到目前在对称矩阵计算理论上达到的深度；并且会发现，尽管对称矩阵计算这个领域，在计算方法各个领域中，相对来说是比较成熟的，但仍然有不少问题有待解决.

本书的初稿曾是复旦大学计算数学专业77届、78届学生选修课的讲稿，在教学过程中，发现学生对这些内容还是比较感兴趣的. 现在写成此书，作为大学计算数学专业大学生的选修课和研究生课程的教材也是适当的.

本书中有很多素材来自美国California大学Berkeley分校数学系和计算机科学系教授B. N. Parlett的书“The Symmetric Eigenvalue Problem”，记得在1979年那书正式出版之前，Parlett教授把这书的打印稿给我阅读，使我能及时掌握有关的理论. 在此向Parlett教授表示衷心的感谢.

本书的其它材料，来自书后所列的参考文献和自己的心得．由于水平有限，错误和不妥之处在所难免，望读者批评指正．

蒋尔雄

于复旦大学　1982年10月

记 号 说 明

本书规定

1. 用大写英文字母表示矩阵，用黑体小写英文字母表示向量，用小写英文字母或希腊字母表示标量.

2. A^T, $\boldsymbol{x}^T$ 表示 A, $\boldsymbol{x}$ 的转置; A^*, $\boldsymbol{x}^*$ 表示 A, $\boldsymbol{x}$ 的转置共轭.

3. 列向量 $\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$, $\boldsymbol{y}=(y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$ 的内积

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})=\sum_{i=1}^{n}\bar{x}_i y_i=\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{y}.$$

4. 向量 $\boldsymbol{x}$ 的范数 $\|\boldsymbol{x}\|$ 表示 $\boldsymbol{x}$ 的 l_2 范数，矩阵 A 的范数

$$\|A\|=\sup_{\boldsymbol{x}\neq 0}\|A\boldsymbol{x}\|/\|\boldsymbol{x}\|.$$

5. $\boldsymbol{e}_i$ 表示单位矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}$$

的第 i 列.

6. $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_j$ 是 j 个 n 维列向量，记$[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_j]$表示由这 j 个向量，按照所给的次序组成的矩阵.

$\{\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_j\}$表示由这 j 个向量所成的线性空间.

7. 没有特殊声明，矩阵、向量、常数全是指实矩阵、实向量、实数；任意矩阵，意指任意实矩阵.

目　录

第 1 章

共轭斜量法

共轭斜量法 (conjugate gradient method) 是解系数矩阵为对称正定的线性代数方程组的一种方法，它的产生在五十年代初期,参见参考文献[1]；经过几十年的考验,现在公认为它是一种好方法,可详阅[2]、[3]、[4]. 为了深入了解共轭斜量法，我们从最佳逼近的观点来介绍共轭斜量法. 另外我们也介绍一下，近年来产生的，引起广泛注意的不完全分解、预处理、共轭斜量法.

§1 斜 量 法

设 $A=(a_{ij})$ 是 $n\times n$ 实对称、正定矩阵. 考虑线性方程组

$$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \tag{1}$$

的求解问题. 这里 $\boldsymbol{x}=(x_1,\ x_2,\ \cdots,x_n)^T$ 是未知向量, $\boldsymbol{b}=(b_1,\ b_2,\ \cdots,\ b_n)^T$ 是已知的向量.

(1) 的求解问题,等价于下列泛函的求极小问题:

$$F(\boldsymbol{x})=(A\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})-2(\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{x})$$

或

$$F(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^TA\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}, \tag{2}$$

即使 (2) 达到极小的向量 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 为 (1) 的解，反之，(1) 的解是使 (2) 达到极小的向量.

实际上,因为 A 正定,故 A^{-1} 存在,记 $\tilde{\boldsymbol{x}}=A^{-1}\boldsymbol{b}$, 它是 (1) 的解,由

$$
\begin{aligned}
F(\boldsymbol{x}) &= (A\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}) - 2(\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{x}) = (A\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}) - 2(A\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}) \\
&= (A(\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ (\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}})) - (A\tilde{\boldsymbol{x}},\ \tilde{\boldsymbol{x}}) \\
&\geqslant -(A\tilde{\boldsymbol{x}},\ \tilde{\boldsymbol{x}}) = F(\tilde{\boldsymbol{x}})
\end{aligned}
$$

且因为 A 是正定的，故只有当 $\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}=0$ 时，才能使上式中的 $\geqslant$ 成为等号，否则是 $>$ 号. 这就证明了(1)的求解问题，等价于(2)的求极小问题.

(2)的求极小问题，等价于

$$F_1(\boldsymbol{x}) = (A(\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ (\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}})) \tag{3}$$

或

$$F_1(\boldsymbol{x}) = (A^{-1}(A\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}),\ (A\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})) \tag{4}$$

的求极小问题. 这是因为 $F_1(\boldsymbol{x}) = F(\boldsymbol{x}) + (A\tilde{\boldsymbol{x}},\ \tilde{\boldsymbol{x}})$，而 $(A\tilde{\boldsymbol{x}},\ \tilde{\boldsymbol{x}})$ 是常数.

(3)或(4)与(2)的主要差别在于(2)表示式中没有未知量，因此给定一个 $\boldsymbol{x}$，可以算出 $F(\boldsymbol{x})$，而(3)，(4)都有未知量出现，当不知道 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 或 A^{-1} 时，给定一个 $\boldsymbol{x}$，算不出 $F_1(\boldsymbol{x})$. 但当不需要计算泛函值时，用 $F_1(\boldsymbol{x})$ 更加直观.

一种求(1)解的想法是先取一个初始向量 $\boldsymbol{x}_0$，按某种规则求出一个向量 $\boldsymbol{x}_1$，使得 $F_1(\boldsymbol{x}_1) < F_1(\boldsymbol{x}_0)$，然后再从 $\boldsymbol{x}_1$，按上述规则求出一个向量 $\boldsymbol{x}_2$，使得 $F_1(\boldsymbol{x}_2) < F_1(\boldsymbol{x}_1)$，依此类推，得到一个向量序列 $\boldsymbol{x}_0$、$\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、$\cdots$，并且希望这个序列能收敛到解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$. 这是一种很一般的想法，很多方法都是基于这样的想法. 当然所得到的向量序列能不能收敛到 $\tilde{\boldsymbol{x}}$，收敛速度如何，都依赖于按什么样的规则从 $\boldsymbol{x}_i$ 确定 $\boldsymbol{x}_{i+1}$.

斜量法也是一种具体实现这种想法的方法. 它的规则是：从 $\boldsymbol{x}_0$，有 $A\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{r}_0$，如果 $\boldsymbol{r}_0=0$，那么 $\boldsymbol{x}_0$ 即为(1)的解；如果 $\boldsymbol{r}_0\neq 0$，那么令 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0$，当 α 变动时，表示一条过 $\boldsymbol{x}_0$ 的直线，它的方向跟 $\boldsymbol{r}_0$ 相同. 在这条直线上找一点 $\boldsymbol{x}_1=$

$\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{r}_0$，使得对所有的实数 α，

$$F_1(\boldsymbol{x}_1)\leqslant F_1(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0), \tag{5}$$

也即在这条直线上，$\boldsymbol{x}_1$ 使 $F_1(\boldsymbol{x})$ 达到极小.

现在来看 α_0 是什么？因为

$$\begin{aligned}F_1(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0)&=(A(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ (\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}))\\&=(A(\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ (\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}))\\&\quad+2\alpha(A(\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ \boldsymbol{r}_0)+\alpha^2(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0),\end{aligned}$$

有 $$\frac{\partial F(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0)}{\partial\alpha}=2(A(\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ \boldsymbol{r}_0)+2\alpha(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0),$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial\alpha^2}=2(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)>0,$$

因此取 $\dfrac{\partial F_1}{\partial\alpha}=0$ 得到的 α 即为 α_0，即

$$\begin{aligned}\alpha_0&=-(A(\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ \boldsymbol{r}_0)/(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)\\&=-(\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)/(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0),\end{aligned}$$

从而 $\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_0-[(\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)/(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)]\boldsymbol{r}_0$，而

$$\begin{aligned}F_1(\boldsymbol{x}_1)&=(A(\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ (\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}))\\&\quad-2[(\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)/(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)](\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)\\&\quad+[(\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)/(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)]^2(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)\\&=F(\boldsymbol{x}_0)-(\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)^2/(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)<F_1(\boldsymbol{x}_0).\end{aligned}$$

上面的 α_0 是通过 $\dfrac{\partial F_1}{\partial\alpha}=0$ 而导出的，也可通过另一种思想来导出．对于 R^n 引进一种新的内积：$[\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}]=(A\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})$，因为 A 是对称正定的，因此它满足内积的条件（参见[9]）从而有一种新的范数 $|\boldsymbol{x}|=\sqrt{(A\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})}=\sqrt{[\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}]}$．于是

$$F_1(\boldsymbol{x})=|\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}|^2,$$

$$F_1(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_2)=|\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}+\alpha\boldsymbol{r}_0|^2,$$

求 x_1 的问题，相当于向量 $\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}$ 减去 $\boldsymbol{r}_0$ 的某一倍数后，使

余量最小. 自然 α_0 使得 $\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}+\alpha_0\boldsymbol{r}_0$ 正交于 $\boldsymbol{r}_0$. 即 α_0 满足

$$[\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}+\alpha_0\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0]=0,$$

$$\alpha_0=-\frac{[\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{r}_0]}{[\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0]}=-\frac{(\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{r}_0,\ \boldsymbol{r}_0)} \tag{6}$$

时,可使余量 $|\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{r}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}|$ 最小.

这种由正交性导出极值性的办法是有普遍意义的.

定理 1.1 R^n 上定义的任意一种内积 $((\cdot,\ \cdot))$, $\boldsymbol{y}$ 是 R^n 中的任意一个向量, $\boldsymbol{f}_1$、$\boldsymbol{f}_2$、…、$\boldsymbol{f}_k$ 是 R^n 中 k 个线性无关的向量,则 k 个常数 α_1^0、α_2^0、…、α_k^0 使

$$((\boldsymbol{y}+\alpha_1^0\boldsymbol{f}_1+\cdots+\alpha_k^0\boldsymbol{f}_k,\ \boldsymbol{y}+\alpha_1^0\boldsymbol{f}_1+\cdots+\alpha_k^0\boldsymbol{f}_k))$$
$$<((\boldsymbol{y}+\alpha_1\boldsymbol{f}_1+\cdots+\alpha_k\boldsymbol{f}_k,\ \boldsymbol{y}+\alpha_1\boldsymbol{f}_1+\cdots+\alpha_k\boldsymbol{f}_k)), \tag{7}$$

对任意实数 α_1、α_2、…、α_k 只要 $(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_k)\neq(\alpha_1^0,\alpha_2^0,\cdots,\alpha_k^0)$, 成立的充分必要条件是: α_1^0、α_2^0、…、$\alpha_k^{(0)}$ 满足

$$((\boldsymbol{y}+\alpha_1^0\boldsymbol{f}_1+\cdots+\alpha_k^0\boldsymbol{f}_k,\ \boldsymbol{f}_i))=0,\quad i=1、2、\cdots、k. \tag{8}$$

证明 若(8)成立,记 $\alpha_i=\alpha_i^0+\Delta\alpha_i$, 则

$$\begin{aligned}
&\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{i=1}^k\alpha_i\boldsymbol{f}_i,\ \boldsymbol{y}+\sum_{i=1}^k\alpha_i\boldsymbol{f}_i\right)\right)\\
&=\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{i=1}^k\alpha_i^0\boldsymbol{f}_i+\sum_{i=1}^k\Delta\alpha_i\boldsymbol{f}_i,\ \boldsymbol{y}+\sum_{i=1}^k\alpha_i^0\boldsymbol{f}_i+\sum_{i=1}^k\Delta\alpha_i\boldsymbol{f}_i\right)\right)\\
&=\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{i=1}^k\alpha_i^0\boldsymbol{f}_i,\ \boldsymbol{y}+\sum_{i=1}^k\alpha_i^0\boldsymbol{f}_i\right)\right)\\
&\quad+2\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{i=1}^k\alpha_k^0\boldsymbol{f}_i,\ \sum_{i=1}^k\Delta\alpha_i\boldsymbol{f}_i\right)\right)\\
&\quad+\left(\left(\sum_{i=1}^k\Delta\alpha_i\boldsymbol{f}_i,\ \sum_{i=1}^k\Delta\alpha_i\boldsymbol{f}_i\right)\right)
\end{aligned}$$

中间项 $\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum\alpha_i^0\boldsymbol{f}_i,\ \sum_{i=1}^k\Delta\alpha_i\boldsymbol{f}_i\right)\right)$ 为 0, 而第 3 项因为 $\boldsymbol{f}_1$、$\boldsymbol{f}_2$、…、$\boldsymbol{f}_k$ 线性无关,除非所有 $\Delta\alpha_i(i=1、2、\cdots、k)$ 为 0, 否则总是正的, 因此(7)成立.

反之若(7)成立，取

$$(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k)=(\alpha_1^0, \cdots, \alpha_{i-1}^0, \alpha_i^0+\Delta\alpha_i, \alpha_{i+1}^0, \cdots, \alpha_k^0),$$

于是

$$\begin{aligned}&\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{l=1}^k \alpha_l \boldsymbol{f}_l, \boldsymbol{y}+\sum_{l=1}^k \alpha_l \boldsymbol{f}_l\right)\right)\\ &\quad=\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{l=1}^k \alpha_l^0 \boldsymbol{f}_l, \boldsymbol{y}+\sum_{l=1}^k \alpha_l^0 \boldsymbol{f}_l\right)\right)\\ &\qquad+2\Delta\alpha_i\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{l=1}^k \alpha_l^0 \boldsymbol{f}_l, \boldsymbol{f}_i\right)\right)+(\Delta\alpha_i)^2((\boldsymbol{f}_i, \boldsymbol{f}_i)),\end{aligned}$$

由(7)知 $\Delta\alpha_i=0$ 使上式达到极小，故必须 $2\Delta\alpha_i$ 的系数

$$\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{l=1}^k \alpha_l^0 \boldsymbol{f}_l, \boldsymbol{f}_i\right)\right)=0,$$

否则因为 $((\boldsymbol{f}_i, \boldsymbol{f}_i))>0$，取

$$\Delta\alpha_i=-\left(\left(\boldsymbol{y}+\sum_{l=1}^k \alpha_l^0 \boldsymbol{f}_k, \boldsymbol{f}_i\right)\right)\Big/((\boldsymbol{f}_i, \boldsymbol{f}_i))\neq 0,$$

将使该式达到极小，跟假设(7)成立矛盾.

因为所取的 i 是任意的，因此(8)成立. 定理证毕.

再回到方程(1)的求解问题上来. 求得了 $\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{r}_0$ 后，可以构造出 $\boldsymbol{r}_1=A\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{r}_0+\alpha_0 A\boldsymbol{r}_0$，于是可以在直线 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1+\alpha\boldsymbol{r}_1$ 上求一点 $\boldsymbol{x}_2=\boldsymbol{x}_1+\alpha_1\boldsymbol{r}_1$ 使得

$$F_1(\boldsymbol{x}_1+\alpha_1\boldsymbol{r}_1)<F_1(\boldsymbol{x}_1+\alpha\boldsymbol{r}_1),$$

对任意 $\alpha\neq\alpha_1$ 的实数成立. 这样的

$$\alpha_1=-(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1)/(A\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1),$$

依此类推，有计算程式：

给定 $\boldsymbol{x}_0$，

$$\begin{cases}\boldsymbol{r}_k=A\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{b},\\ \alpha_k=-(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)/(A\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k),\\ \boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k+\alpha_k\boldsymbol{r}_k, \quad k=0, 1, 2, \cdots,\end{cases}\tag{9}$$

从(9)构造出序列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 的方法就称为斜量法，因为极小是在 $\boldsymbol{r}_k$ 的方向上取的，而

$$\boldsymbol{r}_k=\frac{1}{2}\operatorname{grad}F_1(\boldsymbol{x})\Big|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_k},$$

因此称为斜量法.

斜量又称梯度(gradient)，它的几何意义是使 $F_1(\boldsymbol{x})$ 在某点邻近变化最快的方向，因此从 $F_1(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0)$ 求极小，希望比其他方向 $\boldsymbol{p}$ 上求 $F_1(x_0+\alpha\boldsymbol{p})$ 极小，使得 $F_1(\boldsymbol{x})$ 下降得更快一点.

下面定理回答了从(9)导出的序列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 的收敛性问题.

定理 1.2 设 A 的特征值为 λ_1、λ_2、…、λ_n,

$$\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n,$$

则

$$\|\boldsymbol{x}_k-\tilde{\boldsymbol{x}}\|\leqslant\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^k\|\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}\|. \tag{10}$$

为了证明(10)式成立，先要证明两个引理. 设矩阵 A 的特征值 λ_i 对应的单位特征向量为 $\boldsymbol{y}_i$，并且 $\boldsymbol{y}_1$、$\boldsymbol{y}_2$、…、$\boldsymbol{y}_n$ 是一组标准正交向量组.

引理 1.1 在定理 1.2 的假设下，成立下列不等式

$$\lambda_1(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})\leqslant(A\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})\leqslant\lambda_n(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}).$$

证明 令 $\boldsymbol{x}=\sum_{j=1}^{n}\beta_j\boldsymbol{y}_j$，于是

$$(A\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})=\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\beta_j^2,$$

$$\lambda_1(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})=\sum_{j=1}^{n}\lambda_1\beta_j^2,$$

$$\lambda_n(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})=\sum_{j=1}^{n}\lambda_n\beta_j^2,$$

故 $\lambda_1(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})\leqslant(A\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})\leqslant\lambda_n(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x})$. 证毕.

引理 1.2 设 $\varphi(\lambda)$ 是一个 λ 的多项式，则

$$[\varphi(A)\boldsymbol{x},\ \varphi(A)\boldsymbol{x}] \leqslant \max_i \varphi(\lambda_i)^2 [\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}].$$

证明 令 $\boldsymbol{x}=\sum_{j=1}^{n}\beta_j\boldsymbol{y}_j$，

$$\varphi(A)\boldsymbol{x}=\sum_{j=1}^{n}\varphi(\lambda_j)\beta_j\boldsymbol{y}_j,$$

$$[\varphi(A)\boldsymbol{x},\ \varphi(A)\boldsymbol{x}]=\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\varphi(\lambda_j)^2\beta_j^2$$

$$\leqslant \max_i \varphi(\lambda_i)^2\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\beta_j^2=\max_i \varphi(\lambda_i)^2[\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}].$$ 证毕.

现在来证明定理 1.2. 若 $\boldsymbol{r}_0=0$, (10)式自然成立，假设 $\boldsymbol{r}_0\neq 0$, 由 $F_1(\boldsymbol{x}_1)\leqslant F_1(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0)$ 知

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{x}_1-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_1-\tilde{\boldsymbol{x}}] &\leqslant [\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{r}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}]\\ &=[(I+\alpha A)(\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}),\ (I+\alpha A)(\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}})],\end{aligned}$$

对于多项式 $1+\alpha\lambda$, 应用引理 1.2, 得到

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{x}_1-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_1-\tilde{\boldsymbol{x}}] &\leqslant \max_i(1+\alpha\lambda_i)^2[\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}]\\ &\leqslant \max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}(1+\alpha\lambda)^2[\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}],\end{aligned}$$

这一不等式对任何实数 α 都成立的，因此对特别选取的 $\alpha=-\dfrac{2}{\lambda_1+\lambda_n}$, 也成立不等式

$$\begin{aligned}&[\boldsymbol{x}_1-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_1-\tilde{\boldsymbol{x}}]\\ &\quad\leqslant \max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}\left(1-\frac{2\lambda}{\lambda_1+\lambda_n}\right)^2[\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}],\end{aligned}$$

但
$$\max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}\left(1-\frac{2\lambda}{\lambda_1+\lambda_n}\right)^2=\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^2,$$

所以

$$[\boldsymbol{x}_1-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_1-\tilde{\boldsymbol{x}}]\leqslant\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^2[\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}],$$

这样的关系，对于 $\boldsymbol{x}_k$、$\boldsymbol{x}_{k-1}$ 之间也可以同样证明成立的，即

$$[\boldsymbol{x}_k-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_k-\tilde{\boldsymbol{x}}]\leqslant\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^2[\boldsymbol{x}_{k-1}-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_{k-1}-\tilde{\boldsymbol{x}}],$$

而 k 又是任意自然数，故

$$[\boldsymbol{x}_k-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_k-\tilde{\boldsymbol{x}}]\leqslant\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^{2k}[\boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}_0-\tilde{\boldsymbol{x}}],$$

再利用引理1.1就可获得估计式(10). 证毕.

在证明中取 $\alpha=-\dfrac{2}{\lambda_1+\lambda_n}$，它是下列极大极小问题的解，

$$\min_{\alpha}\max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}|1+\alpha\lambda|$$

即对任何实数 α 有

$$\max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}\left|1-\frac{2}{\lambda_1+\lambda_n}\lambda\right|\leqslant\max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}|1+\alpha\lambda|, \tag{11}$$

等式只有在 $\alpha=-2/(\lambda_1+\lambda_n)$ 时达到，这可从图1知道. 由(11)式可知取 $\alpha=-2/(\lambda_1+\lambda_n)$ 可以得到比较小的误差估计，因此在证明中取这一个值.

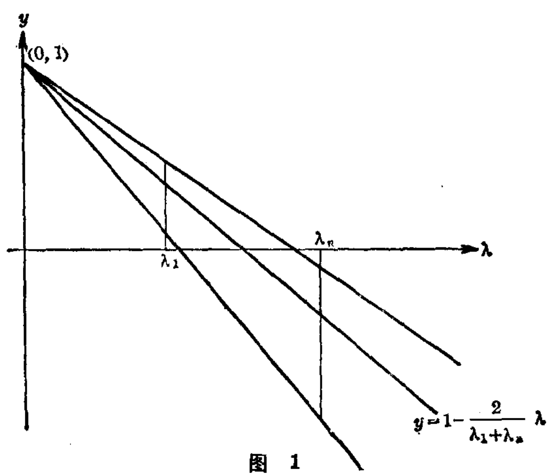

图 1