信息与计算科学丛书——43

矩阵计算

蒋尔雄 著

科学出版社
www.sciencep.com

信息与计算科学丛书　43

矩阵计算

蒋尔雄　著

科学出版社
北　京

内 容 简 介

本书系统介绍了线性代数方程组求解和矩阵特征值问题中一些重要的计算方法以及 Jacobi 矩阵的重要性质和它的特征值反问题. 线性代数方程组求解方面的内容包括：共轭斜量法、SYMMLQ 方法、极小残量法、GMRES 法、对称化方法、QMR 法、CGS 法、BICGSTAB 法、HSS 法以及 SSS 算法等；矩阵特征值问题方面的内容包括：QL 方法、Rayleigh 商迭代法、分合法、Lanczos 方法、QR 方法、子空间迭代法、Arnoldi 法、Jacobi-Davidson 方法以及 QZ 算法等; Jacobi 矩阵方面的内容包括：极值性质、推广的根的隔离定理、Paige 公式以及它与 Gauss 型求积公式的关系等；在 Jacobi 矩阵特征值反问题方面介绍了三个基本问题：(k) 问题、双倍维问题和周期 Jacobi 阵问题.

本书内容丰富、理论分析细致、富于启发性, 可作为计算数学和应用数学的研究生教材使用, 也可供有兴趣从事矩阵计算研究的科技工作者阅读参考.

图书在版编目(CIP)数据

矩阵计算 / 蒋尔雄著. —北京：科学出版社, 2008
(信息与计算科学丛书; 43)
ISBN 978-7-03-023180-2

I. 矩…　II. 蒋…　III. 矩阵-计算方法　IV. O241.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 158360 号

责任编辑：范庆奎　房　阳 / 责任校对：陈玉凤
责任印制：赵德静 / 封面设计：王　浩

科学出版社出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

铭浩彩色印装有限公司印刷

科学出版社发行　各地新华书店经销

*

2008 年 10 月第　一　版　开本：B5(720×1000)
2008 年 10 月第一次印刷　印张：23
印数：1—3 000　字数：437 000

定价：68.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈路通〉)

《信息与计算科学丛书》序

20 世纪 70 年代末，由已故著名数学家冯康先生任主编、科学出版社出版了一套《计算方法丛书》，至今已逾 30 多册. 这套丛书以介绍计算数学的前沿方向和科研成果为主旨，学术水平高、社会影响大，对计算数学的发展、学术交流及人才培养起到了重要的作用.

1998 年教育部进行学科调整，将计算数学及其应用软件、信息科学、运筹控制等专业合并，定名为"信息与计算科学专业". 为适应新形势下学科发展的需要，科学出版社将《计算方法丛书》更名为《信息与计算科学丛书》，组建了新的编委会，并于 2004 年 9 月在北京召开了第一次会议，讨论并确定了丛书的宗旨、定位及方向等问题.

新的《信息与计算科学丛书》的宗旨是面向高等学校信息与计算科学专业的高年级学生、研究生以及从事这一行业的科技工作者，针对当前的学科前沿、介绍国内外优秀的科研成果. 强调科学性、系统性及学科交叉性，体现新的研究方向. 内容力求深入浅出，简明扼要.

原《计算方法丛书》的编委和编辑人员以及多位数学家曾为丛书的出版做了大量工作，在学术界赢得了很好的声誉，在此表示衷心的感谢. 我们诚挚地希望大家一如既往地关心和支持新丛书的出版，以期为信息与计算科学在新世纪的发展起到积极的推动作用.

石钟慈

2005 年 7 月

前　言

矩阵计算是科学和工程计算的基础, 很多科学和工程的计算题都是通过矩阵计算来获得所要求的数值结果. 线性代数方程组求解和矩阵特征值问题求解是矩阵计算中最基本的课题, 很多重要的实际问题可直接或间接地归结为求解线性代数方程组, 如油藏数值模拟、大地测量、投入产出、结构强度计算等; 归结为矩阵特征值问题的有结构振动、量子化学、电路网络、动力系统稳定性、化学反应、宏观经济平衡等. 例如, 通过油藏数值模拟给采油打井作指导, 要解大量的大规模线性代数方程组. 石油部门已提出要解上百万个未知量的线性代数方程组, 也对算法提出了新的挑战. 在矩阵特征值问题方面, 为了预防地震破坏, 建筑物要有固有频率分析报告, 美国加州法律规定, 每个新设计的建筑, 若高于 50 英尺, 都要提供建筑物的固有频率分析报告, 防止与地震波共振. 这样, 很多建筑公司自己或请人计算建筑物的固有频率也促进了矩阵特征值问题计算的研究. 量子化学领域也是矩阵特征值问题的重要源头, 这里产生矩阵阶数上百万的矩阵特征值问题, 如果要在制造新材料中发挥作用, 矩阵的阶数还会更大. 这样的问题即使求出一个特征值也是十分困难的, 这对大规模矩阵特征值问题的算法提出了新的挑战.

需求和挑战促使新方法、新理论、新想法不断出现, 积累了大量材料. 本书在线性代数方程组求解和矩阵特征值问题求解的算法方面, 从浩瀚的材料中挑选一些, 作了比较系统的介绍, 使读者能深入到问题前沿. 在介绍算法和它的有关理论时, 着力将难懂的内容通俗化, 注意提出问题并讲解解决问题的想法, 以便对读者有所启发.

矩阵计算问题看似简单, 但要获得好的数值结果并不容易. 20 世纪 90 年代, 我和学生参加油藏数值模拟项目的计算, 同时承担这项计算的还有其他几个单位, 但最后只有我们算出所要求的结果, 其他单位都没有算出结果. 他们虽然也知道各种算法, 但计算结果并不理想. 另有一个例子, 有个单位计算一座建筑的梁承重后的位移, 向下为正, 但他们算出来的结果有些地方是负的, 肯定错了. 经过仔细检查, 他们认为所列方程、算法、程序都没有错, 问题出在哪里? 他们向我咨询, 经过分析, 发现问题出在所导出的线性代数方程组非常病态, 计算以残量模小来控制, 按他们的算法所采用数的位数来看, 残量模虽已足够小, 但近似解离正确解还很远. 我建议他们用双倍位数进行计算, 他们回去后按此进行, 果然获得了有用的数据. 这两个例子说明, 要解决好矩阵计算问题需要有丰富的矩阵计算知识.

我从 1978 年开始招收硕士研究生, 1984 年开始招收博士研究生, 先后培养 21

名博士生获得博士学位. 本书是我整理了历年来给研究生上课的材料并结合自己的研究成果而写成的, 要求读者有大学本科数值代数的基础.

鉴于矩阵计算的重要性, 国际上从 20 世纪 60 年代开始, 每 3 年举行一次规模很大的会议, 称为 Householder 会议, 以交流科研成果. 从 1971 年开始, 又设立一个奖项, 称为 Householder 奖, 奖给 3 年来在矩阵计算及其相关领域中国际上最优秀的博士论文. 我的博士生徐洪国有幸在 1993 年获此殊荣.

总结培养研究生的经验, 我写此书的目的是希望在培养矩阵计算人才上发挥点作用. 矩阵计算内容丰富, 日新月异, 有些新的好算法、好理论, 我可能不知道, 有些重要内容, 如奇异值、广义奇异值分解、最小二乘法, 由于篇幅有限也没有在本书中出现, 对这方面内容感兴趣的读者可以参考魏木生教授的专著《广义最小二乘问题理论和计算》.

本书出版获得中国科学院科学出版基金的资助, 在此表示诚挚的感谢! 最后感谢吴笑千博士、徐映红博士和博士生谭福平将本书的手稿转成电子版, 也感谢我的妻子景玉斌女士提供后勤保障, 使我能完成本书的写作.

由于本人学问有限, 书中疏漏缺点在所难免, 敬请读者批评指正.

蒋尔雄

2008 年 5 月 25 日于上海

目　录

第 1 章　系数矩阵对称正定情况下线性方程组求解的 Krylov 子空间方法

在实际问题中常常要求解线性方程组, 它的系数矩阵是对称正定的. 譬如由最小二乘法产生的方程组, 由势能极小原理导出的线性方程组, 由自共轭正定算子的偏微分方程离散化得到的线性方程组, 它们的系数矩阵常是对称正定的.

本章主要介绍共轭斜量法 (conjugate gradient method), 它是解系数矩阵为对称正定的线性方程组的一种方法, 它产生于 20 世纪 50 年代初期, 参见文献 [1]. 经过几十年的考验, 现在它被公认为是一种好方法, 可详阅文献 [2]~[4]. 本章从最佳逼近的观点来介绍共轭斜量法. 为了深入了解共轭斜量法, 这里先介绍斜量法和多步斜量法, 然后介绍共轭斜量法的三项递推算法, 最后介绍一下近年来产生的并引起广泛注意的不完全分解、预处理和共轭斜量法.

1.1　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

$$Ax=b \tag{1.1.1}$$

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

式 (1.1.1) 的求解问题等价于下列泛函的求极小问题:

$$f(x)=(Ax,x)-2(b,x)$$

或

$$f(x)=x^{\mathrm{T}}Ax-2b^{\mathrm{T}}x, \tag{1.1.2}$$

即使式 (1.1.2) 达到极小的向量 $\widetilde{x}$ 为式 (1.1.1) 的解, 反之, 式 (1.1.1) 的解是使式 (1.1.2) 达到极小的向量. 实际上, 因为 A 正定, 故 A^{-1} 存在, 记 $\widetilde{x}=A^{-1}b$, 它是式 (1.1.1) 的解, 由

$$\begin{aligned}f(x)&=(Ax,x)-2(b,x)=(Ax,x)-2(A\widetilde{x},x)\\&=(A(x-\widetilde{x}),(x-\widetilde{x}))-(A\widetilde{x},\widetilde{x})\\&\geqslant-(A\widetilde{x},\widetilde{x})=f(\widetilde{x})\end{aligned}$$

且因为 A 是正定的, 故只有当 $x-\widetilde{x}=0$ 时, 才能使上式中的“$\geqslant$”成为等号, 否则是“$>$”号. 这就证明了式 (1.1.1) 的求解问题等价于式 (1.1.2) 的极小问题.

式 (1.1.2) 的求极小问题等价于

$$F_1(x)=(A(x-\widetilde{x}),(x-\widetilde{x})) \tag{1.1.3}$$

或

$$F_1(x)=(A^{-1}(Ax-b),(Ax-b)) \tag{1.1.4}$$

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

式 (1.1.3) 或式 (1.1.4) 与式 (1.1.2) 的主要差别在于式 (1.1.2) 表示式中没有未知量, 因此给定一个 x, 可以算出 $F(x)$, 而式 (1.1.3)、式 (1.1.4) 都有未知量出现, 当不知道 $\widetilde{x}$ 或 A^{-1} 时, 给定一个 x, 算不出 $F_1(x)$. 但当不需要计算泛函值时, 用 $F_1(x)$ 更加直观.

一种求式 (1.1.1) 解的想法是先取一个初始向量 x_0, 按某种规则求出一个向量 x_1, 使得 $F_1(x_1)<F_1(x_0)$, 然后再从 x_1, 按上述规则求出一个向量 x_2, 使得 $F_1(x_2)<F_1(x_1)$, 依此类推, 得到一个向量序列 $x_0,x_1,x_2,\cdots$, 并且希望这个序列能收敛到解 $\widetilde{x}$. 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 $\widetilde{x}$, 收敛速度如何, 都依赖于按什么样的规则从 x_i 确定 x_{i+1}.

斜量法就是一种具体实现这种想法的方法. 它的规则是: 从 x_0, 有 $Ax_0-b=r_0$, 如果 $r_0=0$, 那么 x_0 即为式 (1.1.1) 的解; 如果 $r_0\neq 0$, 那么令 $x=x_0+\alpha r_0$, 当 α 变动时, 表示一条过 x_0 的直线, 它的方向跟 r_0 相同. 在这条直线上找一点 $x_1=x_0+\alpha_0 r_0$,

$$F_1(x_1)\leqslant F_1(x_0+\alpha r_0), \tag{1.1.5}$$

也即在这条直线上, x_1 使 $F_1(x)$ 达到极小.

现在来看 α_0 是什么. 因为

$$\begin{aligned}F_1(x_0+\alpha r_0)&=(A(x_0+\alpha r_0-\widetilde{x}),(x_0+\alpha r_0-\widetilde{x}))\\&=(A(x_0-\widetilde{x}),(x_0-\widetilde{x}))+2\alpha(A(x_0-\widetilde{x}),r_0)+\alpha^2(Ar_0,r_0),\end{aligned}$$

有

$$\frac{\partial F_1(x_0+\alpha r_0)}{\partial\alpha}=2(A(x_0-\widetilde{x}),r_0)+2\alpha(Ar_0,r_0),$$

$$\frac{\partial^2 F_1}{\partial\alpha^2}=2(Ar_0,r_0)>0.$$

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

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= -(A(x_0-\widetilde{x}), r_0)/(Ar_0, r_0)\\ &= -(r_0, r_0)/(Ar_0, r_0),\end{aligned}$$

从而 $x_1 = x_0 - [(r_0, r_0)/(Ar_0, r_0)]r_0$, 而

$$\begin{aligned}F_1(x_1) = &(A(x_0-\widetilde{x}), (x_0-\widetilde{x}))\\ &-2[(r_0, r_0)/(Ar_0, r_0)](r_0, r_0)\\ &+[(r_0, r_0)/(Ar_0, r_0)]^2(Ar_0, r_0)\\ =&F_1(x_0) - (r_0, r_0)^2/(Ar_0, r_0) < F_1(x_0).\end{aligned}$$

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 $\mathbb{R}^n$ 引进一种新的内积: $[x, y] = (Ax, y)$, 因为 A 是对称正定的, 因此它满足内积的条件[5], 从而有一种新的范数 $|x| = \sqrt{(Ax, x)} = \sqrt{[x, x]}$. 于是

$$\begin{aligned}F_1(x) &= |x-\widetilde{x}|^2,\\ F_1(x_0+\alpha r_0) &= |x-\widetilde{x}+\alpha r_0|^2.\end{aligned}$$

求 x_1 的问题相当于向量 $x_0-\widetilde{x}$ 减去 r_0 的某一倍数后, 使余量最小. 自然 α_0 使得 $x-\widetilde{x}+\alpha r_0$ 正交于 r_0, 即 α_0 满足

$$[x-\widetilde{x}+\alpha_0 r_0, r_0] = 0,$$

$$\alpha_0 = -\frac{[x_0-\widetilde{x}, r_0]}{[r_0, r_0]} = -\frac{(r_0, r_0)}{(Ar_0, r_0)} \tag{1.1.6}$$

时, 可使余量 $|x+\alpha_0 r_0-\widetilde{x}|$ 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 1.1.1 $\mathbb{R}^n$ 上定义的任意一种内积 $((\cdot,\cdot))$, y 是 $\mathbb{R}^n$ 中的任意一个向量, $f_1, f_2, \cdots, f_k$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中 k 个线性无关的向量, 则 k 个常数 $\alpha_1^0, \alpha_2^0, \cdots, \alpha_k^0$ 使

$$\begin{aligned}&((y+\alpha_1^0 f_1+\cdots+\alpha_k^0 f_k, y+\alpha_1^0 f_1+\cdots+\alpha_k^0 f_k))\\ &<((y+\alpha_1 f_1+\cdots+\alpha_k f_k, y+\alpha_1 f_1+\cdots+\alpha_k f_k))\end{aligned} \tag{1.1.7}$$

对任意实数 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k$ 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: $\alpha_1^0, \alpha_2^0, \cdots, \alpha_k^0$ 满足

$$((y+\alpha_1^0 f_1+\cdots+\alpha_k^0 f_k, f_i)) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, k. \tag{1.1.8}$$

证明　若式 (1.1.8) 成立, 记 $\alpha_i = \alpha_i^0 + \Delta\alpha_i$, 则

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

中间项 $\left(\left(y+\sum_{i=1}^{k}\alpha_i^0 f_i,\ \sum_{i=1}^{k}\Delta\alpha_i f_i\right)\right)$ 为 0, 而第 3 项因为 $f_1, f_2, \cdots, f_k$ 线性无关, 除非所有 $\Delta\alpha_i (i=1,2,\cdots,k)$ 为 0, 否则总是正的, 因此式 (1.1.7) 成立.

反之若式 (1.1.7) 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,

$$\begin{aligned}
&\left(\left(y+\sum_{l=1}^{k}\alpha_l f_l, y+\sum_{l=1}^{k}\alpha_l f_l\right)\right)\\
=&\left(\left(y+\sum_{l=1}^{k}\alpha_l^0 f_l, y+\sum_{l=1}^{k}\alpha_l^0 f_l\right)\right)\\
&+2\Delta\alpha_i\left(\left(y+\sum_{l=1}^{k}\alpha_l^0 f_l, f_i\right)\right)+(\Delta\alpha_i)^2\,((f_i, f_i)),
\end{aligned}$$

由式 (1.1.7) 知 $\Delta\alpha_i = 0$ 使上式达到极小, 故必须 $\Delta\alpha_i$ 的系数

$$\left(\left(y+\sum_{l=1}^{k}\alpha_l^0 f_l, f_i\right)\right) = 0,$$

否则因为 $((f_i, f_i)) > 0$, 取

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

将使该式达到极小, 跟假设式 (1.1.7) 成立矛盾.

因为所取的 i 是任意的, 因此式 (1.1.8) 成立. 定理证毕.

再回到方程式 (1.1.1) 的求解问题上来. 求得了 $x_1 = x_0 + \alpha_0 r_0$ 后, 可以构造出 $r_1 = Ax_1 - b = r_0 + \alpha_0 A r_0$, 于是可以在直线 $x = x_1 + \alpha r_1$ 上求一点 $x_2 = x_1 + \alpha_1 r_1$ 使得 $F_1(x_1 + \alpha_1 r_1) < F_1(x_1 + \alpha r_1)$, 对任意 $\alpha \neq \alpha_1$ 的实数成立, 这样的

$$\alpha_1 = -(r_1, r_1)/(Ar_1, r_1),$$

依此类推, 有计算程式:

给定 x_0,

$$\begin{cases} r_k = Ax_k - b, \\ \alpha_k = -(r_k, r_k)/(Ar_k, r_k), \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k r_k, \quad k = 0, 1, 2, \cdots. \end{cases} \tag{1.1.9}$$

从式 (1.1.9) 构造出序列 x_k 的方法就称为斜量法, 因为极小是在 r_k 的方向上取的, 而

$$r_k = \frac{1}{2} \operatorname{grad} F_1(x)|_{x=x_k},$$

因此称为斜量法.

斜量又称梯度 (gradient), 它的几何意义是使 $F_1(x)$ 在某点邻近变化最快的方向, 因此从 $F_1(x_0 + \alpha r_0)$ 求极小, 希望比在其他方向上求 $F_1(x_0 + \alpha p)$ 极小, 使得 $F_1(x)$ 下降得更快一点.

下面定理回答了从式 (1.1.9) 导出的序列 x_k 的收敛性问题.

定理 1.1.2 设 A 的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$,

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

则

$$\|x_k - \widetilde{x}\| \leqslant \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}} \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1} \right)^k \|x_0 - \widetilde{x}\|. \tag{1.1.10}$$

为了证明式 (1.1.10) 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 y_i, 并且 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 是一组标准正交向量组.

引理 1.1.1 在定理 1.1.2 的假设下, 成立下列不等式:

$$\lambda_1(x, x) \leqslant (Ax, x) \leqslant \lambda_n(x, x).$$

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

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

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

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

故 $\lambda_1(x,x)\leqslant(Ax,x)\leqslant\lambda_n(x,x)$. 证毕.

引理 1.1.2　设 $\varphi(\lambda)$ 是一个 λ 的多项式, 则

$$[\varphi(A)x,\varphi(A)x]\leqslant\max\varphi(\lambda_i)^2[x,x].$$

证明　令 $x=\sum_{j=1}^{n}\beta_j y_j$,

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

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

证毕.

现在来证明定理 1.1.2. 若 $r_0=0$, 式 (1.1.10) 自然成立, 假设 $r_0\neq0$, 由 $F_1(x_1)\leqslant F_1(x_0+\alpha r_0)$ 知

$$\begin{aligned}[x_1-\widetilde{x},x_1-\widetilde{x}]&\leqslant[x_0+\alpha r_0-\widetilde{x},x_0+\alpha r_0-\widetilde{x}]\\&=[(I+\alpha A)(x_0-\widetilde{x}),(I+\alpha A)(x_0-\widetilde{x})],\end{aligned}$$

对于多项式 $1+\alpha\lambda$, 应用引理 1.1.2, 得到

$$\begin{aligned}[x_1-\widetilde{x},x_1-\widetilde{x}]&\leqslant\max_i(1+\alpha\lambda_i)^2[x_0-\widetilde{x},x_0-\widetilde{x}]\\&\leqslant\max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}(1+\alpha\lambda)^2[x_0-\widetilde{x},x_0-\widetilde{x}],\end{aligned}$$

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

$$[x_1-\widetilde{x},x_1-\widetilde{x}]\leqslant\max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}\left(1-\frac{2\lambda}{\lambda_1+\lambda_n}\right)^2[x_0-\widetilde{x},x_0-\widetilde{x}],$$

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

$$[x_1-\widetilde{x},x_1-\widetilde{x}]\leqslant\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^2[x_0-\widetilde{x},x_0-\widetilde{x}].$$

这样的关系对于 x_k,x_{k-1} 之间也可以同样证明成立, 即

$$[x_k-\widetilde{x},x_k-\widetilde{x}]\leqslant\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^2[x_{k-1}-\widetilde{x},x_{k-1}-\widetilde{x}],$$

而 k 又是任意自然数, 故

$$[x_k-\widetilde{x},x_k-\widetilde{x}]\leqslant\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^{2k}[x_0-\widetilde{x},x_0-\widetilde{x}],$$

再利用引理 1.1.1 就可获得估计式 (1.1.10). 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

$$\max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}\left|1-\frac{2}{\lambda_1+\lambda_n}\lambda\right|\leqslant\max_{\lambda_1\leqslant\lambda\leqslant\lambda_n}|1+\alpha\lambda|,\tag{1.1.11}$$

等式只有在 $\alpha=-2/(\lambda_1+\lambda_n)$ 时成立, 这可从图 1.1 知道, 由式 (1.1.11) 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.

因为 $0<\dfrac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}<1$, 从定理 1.1.2 知斜量法所得的序列 x_k 是收敛的.

称 $p=\|A\|\|A^{-1}\|$ 为系数矩阵 A 的条件数. 当 A 是对称正定时, $p=\lambda_n/\lambda_1$, 因此 $\dfrac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}=\dfrac{p-1}{p+1}$, 从而可知当 p 很大时 $\dfrac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}$ 接近于 1. 说明矩阵 A 的条件数很大时 (此时称矩阵 A 是病态的), 式 (1.1.10) 右端收敛于 0 是很慢的, 实际计算的经验也是这样, 此时 x_k 收敛于 $\widetilde{x}$ 的速度也很慢.

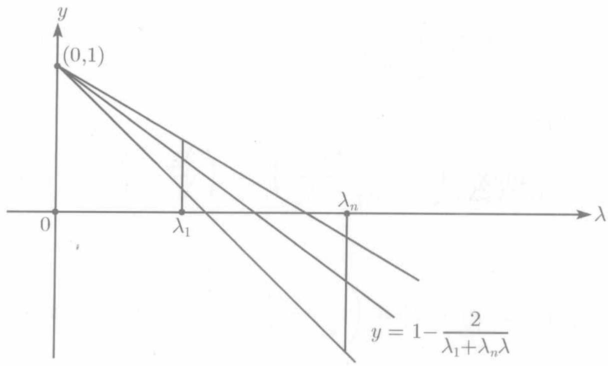

图 1.1

为了对系数矩阵 A 的条件数有个数量的概念, 用差分方法求解正方形 $0 \leqslant x, y \leqslant 1$ 上的 Poisson 方程第一类边值问题为例, 若差分步长为 $h = 1/m$, 则系数矩阵为 $(m-1)^2$ 阶, 这个离散化问题称为模型问题, 它的系数矩阵的 $(m-1)^2$ 个特征值为

$$\lambda_{p,q} = 1 - \frac{1}{2}(\cos p\pi h + \cos q\pi h), \quad p, q = 1, 2, \cdots, m-1,$$

故

$$\lambda_1 = 1 - \cos h\pi = 2\sin^2 \frac{h\pi}{2},$$

$$\lambda_n = 1 - \cos(m-1)h\pi = 2\sin^2 \frac{(m-1)\pi}{2m},$$

于是,

$$p = \frac{\lambda_n}{\lambda_1} \approx \frac{4}{(h\pi)^2},$$

$$h = \frac{1}{10}, \quad p \approx 39.87, \quad \frac{p-1}{p+1} = 0.95,$$

$$h = \frac{1}{50}, \quad p \approx 1000, \quad \frac{p-1}{p+1} = 0.998,$$

$$h = \frac{1}{100}, \quad p \approx 4 \times 10^3, \quad \frac{p-1}{p+1} = 0.9995.$$

当 $h = 1/10, \dfrac{p-1}{p+1} = 0.95$, 如果要

$$\left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^k \leqslant 10^{-3},$$

必须

$$k \geqslant -3/\lg 0.95 = 134.65,$$

这说明即使对于 $h=1/10$, 对 81 阶的系数矩阵, 要使

$$\|x_k-\widetilde{x}\|\leqslant 10^{-3}\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\|x_0-\widetilde{x}\|$$

也要迭代 135 次, 这就表示斜量法的收敛速度显得太慢了, 因此在目前求解线性代数方程组时, 不再采用斜量法. 不过有关斜量法的一些想法对于构造新的方法却仍然是有价值的.

1.2 多步斜量法

1.1 节所介绍的斜量法, 它从 x_0 求 x_1, 是在直线 $x_0+\alpha r_0$ 上找的. 同样可以考虑, 从 x_0 求 x_1, 在一个平面 $x_0+\alpha p+\beta q$ 上找, 也即 $x_1=x_0+\alpha_0 p+\beta_0 q$, 并且不等式

$$F_1(x_1)\leqslant F_1(x_0+\alpha p+\beta q)$$

对一切实数 α,β 成立. 利用定理 1.1.1 知道这样的 α_0,β_0 由下列方程组所确定:

$$\begin{cases}[x_0+\alpha p+\beta q-\widetilde{x},p]=0,\\ [x_0+\alpha p+\beta q-\widetilde{x},q]=0.\end{cases}$$

只要 p,q 线性无关, 上述方程唯一确定 α_0 和 β_0.

特别取 $p=r_0,q$ 为另一与 r_0 线性无关的向量时, $x_1=x_0+\alpha p+\beta q$, 有可能比斜量法中所确定的 x_1 要好, 不可能比它差.

另外在定理 1.1.2 估计斜量法的收敛速度时, 用到等式

$$x_0+\alpha r_0-\widetilde{x}=(I+\alpha A)(x_0-\widetilde{x}),$$

从而把问题归结为考虑多项式 $1+\alpha\lambda$ 在区间 $[\lambda_1,\lambda_n]$ 上的极大极小问题

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

如果仍要把在平面 $x_0+\alpha p+\beta q$ 上找 x_1 的问题归结为多项式的极大极小问题, 自然会想到取 $q=Ar_0$, 这样

$$x_0+\alpha p+\beta q=x_0+\alpha r_0+\beta Ar_0,$$

而

$$\begin{aligned}x_0+\alpha r_0+\beta Ar_0-\widetilde{x}&=x_0-\widetilde{x}+\alpha r_0+\beta Ar_0\\&=(I+\alpha A+\beta A^2)(x_0-\widetilde{x}).\end{aligned}$$