第六章 线性方程组的迭代解法

§1 基本迭代法

§2 范数及方程组的形态和条件数

§3 迭代的收敛性分析

§1 基本迭代法

- **Jacobi 迭代算法**
- **Gauss-Seidel 迭代算法**
- **SOR 迭代算法**

Jacobi 迭代

考虑线性方程组

$$\boxed{Ax = b}$$

其中 $A=(a_{ij})_{n\times n}$ 非奇异，且对角线元素全不为 0。

- 将 A 分裂成 $A = D - L - U$， 其中

$$D = \mathrm{diag}(a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn})$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

Jacobi 迭代

令 $M = D$，$N = L + U$，可得 雅可比 (Jacobi) 迭代方法

$$\boxed{x^{(k+1)} = D^{-1}(L+U)x^{(k)} + D^{-1}b} \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

- 迭代矩阵记为： $\boxed{J = D^{-1}(L+U)}$
- 分量形式：

$$\boxed{x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j \right) \Big/ a_{ii}}$$

$i = 1, 2, \ldots, n$，$k = 0, 1, 2, \ldots$

Gauss-Seidel 迭代

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}\right)/a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = \left(b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}\right)/a_{22} \\ \qquad \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \left(b_n - a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)}\right)/a_{nn} \end{cases}$$

- 在计算 $x_i^{(k+1)}$ 时，如果用 $x_1^{(k+1)},\cdots,x_{i-1}^{(k+1)}$ 代替 $x_1^{(k)},\cdots,x_{i-1}^{(k)}$，则可能会得到更好的收敛效果。

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}\right)/a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = \left(b_2 - \boxed{a_{21}x_1^{(k+1)}} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}\right)/a_{22} \\ \qquad \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \left(b_n - \boxed{a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}}\right)/a_{nn} \end{cases}$$

Gauss-Seidel 迭代

写成矩阵形式:

$$x^{(k+1)} = D^{-1}\left(b + Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)}\right)$$

可得

$$\boxed{x^{(k+1)} = (D-L)^{-1}Ux^{(k)} + (D-L)^{-1}b}$$

$k = 0, 1, 2, \ldots$

此迭代方法称为 高斯-塞德尔 (Gauss-Seidel) 迭代法

- 迭代矩阵记为: $\boxed{G = (D-L)^{-1}U}$

SOR 迭代

在 G-S 迭代中

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - a_{i1}x_1^{(k+1)} - \cdots - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} - \cdots - a_{i,n}x_n^{(k)}\right) \Big/ a_{ii}$$

$$= x_i^{(k)} + \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right) \Big/ a_{ii}$$

- 为了得到更好的收敛效果，可在修正项前乘以一个 **松弛因子** ω，于是可得迭代格式

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right) \Big/ a_{ii}$$

SOR 迭代

写成矩阵形式:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega D^{-1}\left(b + Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)} - Dx^{(k)}\right)$$

可得

$$\boxed{x^{(k+1)} = \left(D-\omega L\right)^{-1}\left[(1-\omega)D+\omega U\right]x^{(k)} + \omega\left(D-\omega L\right)^{-1}b}$$

—— **SOR (Successive Over-Relaxation) 迭代方法**

- **迭代矩阵记为：** $\boxed{L_\omega = \left(D-\omega L\right)^{-1}\left[(1-\omega)D+U\right]}$

- **SOR 的优点：通过选取合适的 ω，可获得更快的收敛速度**
- **SOR 的缺点：最优参数 ω 的选取比较困难**

- Jacobi 迭代

$$M = D, \quad N = L + U$$

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(L+U)x^{(k)} + D^{-1}b$$

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \Big/ a_{ii}$$

- G-S 迭代

$$M = D - L, \quad N = U$$

$$x^{(k+1)} = (D-L)^{-1} U x^{(k)} + (D-L)^{-1} b$$

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \Big/ a_{ii}$$

- SOR 迭代

$$M = \frac{1}{\omega}(D - \omega L), \quad N = \frac{1}{\omega}\left[(1-\omega)D + \omega U\right]$$

$$x^{(k+1)} = (D-\omega L)^{-1}\left[(1-\omega)D + \omega U\right] x^{(k)} + \omega (D - \omega L)^{-1} b$$

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \Big/ a_{ii}$$

举例

例： 分别用 Jacobi、G-S、SOR 迭代解线性方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 8 \\ -5 \end{bmatrix}$$

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

取初始向量 $x^{(0)} = (0, 0, 0)$，迭代过程中小数点后保留 4 位。

解：

Jacobi 迭代：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(1 + x_2^{(k)}\right)/2 \\ x_2^{(k+1)} = \left(8 + x_1^{(k)} + x_3^{(k)}\right)/3 \\ x_3^{(k+1)} = \left(-5 + x_2^{(k)}\right)/2 \end{cases}$$

迭代可得：

$$x^{(1)} = (0.5000, 2.6667, -2.5000)^T$$

$$\vdots$$

$$x^{(21)} = (2.0000, 3.0000, -1.0000)^T$$

举例

G-S 迭代:

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \left(1 + x_2^{(k)}\right)\Big/2 \\
x_2^{(k+1)} = \left(8 + x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)}\right)\Big/3 \\
x_3^{(k+1)} = \left(-5 + x_2^{(k+1)}\right)\Big/2
\end{cases}
$$

迭代可得:

$$x^{(1)} = (\ 0.5000,\ 2.8333,\ -1.0833\ )^T$$

$$\vdots$$

$$x^{(9)} = (\ 2.0000,\ 3.0000,\ -1.0000\ )^T$$

举例

SOR 迭代：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} + \omega\left(1 - 2x_1^{(k)} + x_2^{(k)}\right)/2 \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} + \omega\left(8 + x_1^{(k+1)} - 3x_2^{(k)} + x_3^{(k)}\right)/3 \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} + \omega\left(-5 + x_2^{(k+1)} - 2x_3^{(k)}\right)/2 \end{cases}$$

取 $\omega = 1.1$，迭代可得

$$x^{(1)} = (\ 0.5500,\ 3.1350,\ -1.0257\ )^T$$

$$\vdots$$

$$x^{(7)} = (\ 2.0000,\ 3.0000,\ -1.0000\ )^T$$

如何确定 SOR 迭代中的最优松弛因子是一件**很困难**的事

病态矩阵

考虑线性方程组 $Ax=b$，如果 A 或 b 的微小变化会导致解的巨大变化，则称此线性方程组是病态的，并称矩阵 A 是病态的，反之则是良态的。

例：
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

矩阵的条件数

定义：设 A 非奇异，则称

$$\mathrm{Cond}(A)=\left\|A^{-1}\right\|\left\|A\right\|$$

为 A 的条件数。

定理：考虑线性方程组 $Ax=b$，设 A 是精确的，b 有微小的变化 δb，此时的解为 $x+\delta x$，则

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}\le\left\|A^{-1}\right\|\left\|A\right\|\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

证明：板书

§ 2 范数及方程组的形态和条件数

定理： 考虑线性方程组 $Ax=b$，设 b 是精确的，A 有微小的变化 δA，此时的解为 $x+\delta x$，则

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\|A^{-1}\|\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}{1-\|A^{-1}\|\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}$$

证明：板书

- 当 δA 充分小时，不等式右端约为 $\|A^{-1}\|\|A\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}$

§2 范数及方程组的形态和条件数

- 条件数与范数有关，常用的有无穷范数和2-范数

$$\mathrm{Cond}(A)_\infty = \left\|A^{-1}\right\|_\infty \left\|A\right\|_\infty$$

$$\mathrm{Cond}(A)_2 = \left\|A^{-1}\right\|_2 \left\|A\right\|_2$$

- $\mathrm{Cond}(A)_2$ 称为谱条件数，当 A 对称时有

$$\mathrm{Cond}(A)_2 = \frac{\max\limits_{1\le i\le n}|\lambda_i|}{\min\limits_{1\le i\le n}|\lambda_i|}$$

条件数的性质

(1) $\mathrm{Cond}(A) \geq 1$

(2) $\mathrm{Cond}(\alpha A) = \mathrm{Cond}(A)$，其中 α 为任意非零实数

(3) 若 R 是正交矩阵，则 $\mathrm{Cond}(R)_2 = 1$

(4) 若 R 是正交矩阵，则对任意非奇异矩阵 A，有

$$\mathrm{Cond}(AR)_2 = \mathrm{Cond}(RA)_2 = \mathrm{Cond}(A)_2$$

举例

例： $A=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.0001\end{bmatrix}$ 计算 $\mathrm{Cond}(A)_\infty$ 和 $\mathrm{Cond}(A)_2$

解： $A^{-1}=\begin{bmatrix}10001 & -10000\\ -10000 & 10000\end{bmatrix}$

⇒ $\mathrm{Cond}(A)_\infty=\|A^{-1}\|_\infty\,\|A\|_\infty \approx 4\times 10^4$

A 对称，且 $\lambda(A)=\dfrac{2.0001\pm\sqrt{2.0001^2-0.0004}}{2}>0$

⇒ $\mathrm{Cond}(A)_2=\lambda_{max}/\lambda_{min}\approx 4\times 10^4$

举例

例： 计算 $\mathrm{Cond}(H_k)_\infty$ 其中 H 为 Hilbert 矩阵

解： $k=1$ 时， $\mathrm{Cond}(H_1)_\infty=1$

$k=2$ 时， $H_2=\begin{bmatrix}1 & 1/2\\ 1/2 & 1/3\end{bmatrix}$, $H_2^{-1}=\begin{bmatrix}4 & -6\\ -6 & 12\end{bmatrix}$

$\mathrm{Cond}(H_2)_\infty=27$

$k=3$ 时， $H_3=\begin{bmatrix}1 & 1/2 & 1/3\\ 1/2 & 1/3 & 1/4\\ 1/3 & 1/4 & 1/5\end{bmatrix}$, $H_2^{-1}=\begin{bmatrix}9 & -36 & 30\\ -36 & 192 & -180\\ 30 & -180 & 180\end{bmatrix}$

$\mathrm{Cond}(H_3)_\infty=748$

$\mathrm{Cond}(H_4)_\infty=28375$ $\mathrm{Cond}(H_{10})_\infty=3.5\times10^{13}$

§3 迭代的收敛性分析

收敛性定理

- Jacobi 迭代收敛的充要条件 $\rho(J)<1$
- G-S 迭代收敛的充要条件 $\rho(G)<1$
- SOR 迭代收敛的充要条件 $\rho(L_\omega)<1$

- Jacobi 迭代收敛的充分条件 $\|J\| <1$
- G-S 迭代收敛的充分条件 $\|G\| < 1$
- SOR 迭代收敛的充分条件 $\|L_\omega\| < 1$

对角占优矩阵

定义： 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$，若

$$|a_{ii}| \ge \sum_{j=1,\, j \ne i}^{n} |a_{ij}| \qquad (i = 1, 2, \dots, n)$$

且至少有一个不等式严格成立，则称 A 为 **弱对角占优**；若所有不等式都严格成立，则称 A 为 **严格对角占优**。

可约与不可约

定义： 设 $A\in \mathbf{R}^{n\times n}$，若存在排列矩阵 P 使得

$$P^TAP = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix},$$

$A_{11}\in R^{r\times r}$，$A_{22}\in R^{(n-r)\times(n-r)}$

$1\le r\le n-1$

则称 A 为 **可约矩阵**；否则称为 **不可约矩阵** 。

- 如果 A 是可约矩阵，则方程组 $Ax=b$ 等价于

$$\left(P^TAP\right)\underbrace{\boxed{\left(P^Tx\right)}}_{y} = \underbrace{\boxed{P^Tb}}_{f} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} A_{11}y_1 + A_{12}y_2 = f_1 \\ \qquad\qquad A_{22}y_2 = f_2 \end{cases}$$

即可以把原方程组化成两个低阶的方程组来处理。

Jacobi、G-S 收敛性

定理：若 A 严格对角占优或不可约弱对角占优，则 A 非奇异

定理：若 A 严格对角占优或不可约弱对角占优，则 Jacobi 迭代和 G-S 迭代均收敛

定理：若 A 对称，且对角线元素均大于 0，则

(1) Jacobi 迭代收敛的充要条件是 A 与 2D-A 均正定；

(2) G-S 迭代收敛的充要条件是 A 正定。

SOR 收敛性

- **SOR 收敛的必要条件**

定理： 若 SOR 迭代收敛，则 $0 < \omega < 2$。

- **SOR 收敛的充分条件**

定理： 若 A 对称正定，且 $0 < \omega < 2$，则 SOR 迭代收敛。

定理： 若 A 严格对角占优或不可弱约对角占优，且 $0 < \omega \le 1$，则 SOR 迭代收敛。

举例

例： 设 $A=\begin{bmatrix} 1 & a & a \\ a & 1 & a \\ a & a & 1 \end{bmatrix}$，给出 Jacobi 和 G-S 收敛的充要条件

解： A 对称，且对角线元素均大于 0，故

(1) Jacobi 收敛的充要条件是 A 和 2D-A 均正定

(2) G-S 收敛的充要条件是 A 正定

A 正定 $\Leftrightarrow$ $D_1=1>0, D_2=1-a^2>0, D_3=(1-a)^2(1+2a)>0$

$\Leftrightarrow$ $-0.5<a<1$

$2D\text{-}A$ 正定 $\Leftrightarrow$ $D_1=1>0, D_2=1-a^2>0, D_3=(1+a)^2(1-2a)>0$

$\Leftrightarrow$ $-0.5<a<0.5$

$\Rightarrow$

Jacobi 收敛的充要条件是：$-0.5<a<0.5$

G-S 收敛的充要条件是：-0.5<a<1

举例

解法二： Jacobi 的迭代矩阵为 $J=\begin{bmatrix} 1 & -a & -a \\ -a & 1 & -a \\ -a & -a & 1 \end{bmatrix}$

设 λ 是 J 的特征值，则由 $\det(\lambda I - J) = 0$ 可得

$$(\lambda - a)^2(\lambda + 2a) = 0$$

Jacobi 收敛的充要条件是 $\rho(J)<1 \Leftrightarrow |\lambda|<1$，

即 $-0.5<a<0.5$