对方程组 $F(x)=0$ 迭代法求解的基本步骤为

1. 构造原方程组的等价形式 $F(x)=0 \Leftrightarrow x=\Phi(x)$.
2. 写出迭代格式 $x^{(k+1)}=\Phi(x^{(k)})$，并取合适的初值 $x^{(0)}$.
3. 若极限 $x^*=\lim_{k\to+\infty} x^{(k)}$ 存在，则 x^* 为方程的解. 在计算上，一般迭代至 $\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\|<\varepsilon$ 时停止.

若极限 $x^*=\lim_{k\to+\infty} x^{(k)}$ 不存在，则失败. 需考虑采用另外的迭代格式 Φ 或初值 $x^{(0)}$.

设线性方程组 $Ax=b \Leftrightarrow x=Gx+g$ (等价形式)

构造相应的迭代向量序列. $x^{(k+1)}=Gx^{(k)}+g$. G 称为迭代矩阵

向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛 $\Leftrightarrow G^k\to 0 \Leftrightarrow \rho(G)<1$ (充要条件)

注：收敛与初值的选取无关

因 $\rho(G)\le\|G\|$ 若存在范数 $\|G\|_p<1$ 则收敛. 反之不然 通常采用 1. ∞ 范数来粗略估计收敛性

一. Jacobi 迭代

设待解方程组为：

$$\begin{cases} a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n=b_1 \\ a_{21}x_1+\cdots+a_{2n}x_n=b_2 \\ \qquad\vdots \\ a_{n1}x_1+\cdots+a_{nn}x_n=b_n \end{cases}$$

假定 A 的对角元 a_{ii} 全不为0，分别由第 i 个方程解出 x_i 得：

$$\begin{cases} x_1=-\frac{1}{a_{11}}(a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n-b_1) \\ x_2=-\frac{1}{a_{22}}(a_{21}x_1+a_{23}x_3+\cdots+a_{2n}x_n-b_2) \\ \vdots \\ x_n=-\frac{1}{a_{nn}}(a_{n1}x_1+\cdots+a_{n\,n-1}x_{n-1}-b_n) \end{cases}$$

它是原方程的一个等价方程 (写成向量形式 $x=Gx+g$).

Jacobi迭代格式(**分量形式**)

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

即称为：Jacobi迭代，也称简单迭代.

将 A 表示为 $A=D+L+U$，其中 $D=\mathrm{diag}\{a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn}\}$,

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

则Jacobi迭代格式写成向量形式即为：

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

$$\Longleftrightarrow x^{(k+1)}=(I-Q^{-1}A)x^{(k)}+Q^{-1}b,\quad Q=D$$

故Jacobi迭代矩阵为：$G=-D^{-1}(L+U)=I-D^{-1}A$

例： 用Jacobi方法解下列方程组

$$\begin{cases} 2x_1-x_2-x_3=-5 \\ x_1+5x_2-x_3=8 \\ x_1+x_2+10x_3=11 \end{cases}$$

解：方程对应的Jacobi迭代格式分量形式为：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)}= & & 0.5x_2^{(k)}+0.5x_3^{(k)}-2.5 \\ x_2^{(k+1)}=-0.2x_1^{(k)}+ & & 0.2x_3^{(k)}+1.6 \\ x_3^{(k+1)}=-0.1x_1^{(k)}-0.1x_2^{(k)} & & +1.1 \end{cases}$$

$$\Longleftrightarrow \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ x_3^{(k+1)} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & 0.5 & 0.5 \\ -0.2 & 0 & 0.2 \\ -0.1 & -0.1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} -2.5 \\ 1.6 \\ 1.1 \end{pmatrix}$$

由 $\|G\|_1=0.7\Rightarrow\rho(G)\le\|G\|_1=0.7<1$，知Jacobi迭代收敛. 取初始值 $x^{(0)}=(1,1,1)^T$，计算结果由下表所示.

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\|X^{(k)}-X^{(k-1)}\|_\infty$
0	1	1	1	
1	-1.5	1.6	0.9	0.6
2	-1.25	2.08	1.09	0.48
3	-0.915	2.068	1.017	0.355
4	-0.9575	1.9864	0.9847	0.0425
5	-1.01445	1.98844	0.99711	0.05695
6	-1.00722	2.00231	1.0026	0.00723
7	-0.997543	2.00197	1.00049	0.009677

原方程组的精确解是 $x=(-1,2,1)^T$.

- Jacobi 迭代的收敛条件

定理：若A满足下列条件之一，则Jacobi迭代收敛.

① $A \equiv (a_{ij})$ 为严格行对角占优阵，即 $|a_{ii}| > \sum\limits_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$

② $A \equiv (a_{ij})$ 为严格列对角占优阵，即 $|a_{jj}| > \sum\limits_{i=1, i\neq j}^{n} |a_{ij}|$

二. Gauss - Seidel 迭代

在Jacobi迭代中，使用最新算出的分量值

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{11}}(a_{12}x_2^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)} - b_1) \\ x_2^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{22}}(a_{21}x_1^{(k+1)} + a_{23}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)} - b_2) \\ x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{33}}(a_{31}x_1^{(k+1)} + a_{32}x_2^{(k+1)} + a_{34}x_4^{(k)} + \cdots + a_{3,n}x_n^{(k)} - b_3) \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{nn}}(a_{n1}x_1^{(k+1)} + a_{n2}x_2^{(k+1)} \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)} - b_n) \end{cases}$$

即：Gauss−Seidel迭代. 仍记 $A = D + L + U$.

Gauss−Seidel迭代写成向量形式为：

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

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

$$\Longleftrightarrow x^{(k+1)} = (I - Q^{-1}A)x^{(k)} + Q^{-1}b, \quad Q = D + L$$

$$\Longleftrightarrow Qx^{(k+1)} = -Ux^{(k)} + b, \quad Q = D + L$$

故Gauss−Seidel迭代矩阵为

$$G = -(D+L)^{-1}U = I - Q^{-1}A$$

例：用Gauss-Seidel迭代法解方程组 $Ax = b$,其中

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 8 & 0 \\ -1 & 0 & 9 \\ 9 & -1 & -1 \end{pmatrix}, \; b = \begin{pmatrix} 7 \\ 8 \\ 7 \end{pmatrix}. \text{取初值} x^{(0)} = (0,0,0)^T$$

解：A的对角元 $a_{22} = 0$，需做一下预处理（作2次行交换）：

$$(A, b) \longrightarrow \begin{pmatrix} 9 & -1 & -1 & 7 \\ -1 & 8 & 0 & 7 \\ -1 & 0 & 9 & 8 \end{pmatrix}, \quad \text{i.e.,} \begin{cases} 9x_1 - x_2 - x_3 = 7 \\ -x_1 + 8x_2 = 7 \\ -x_1 + 9x_3 = 8 \end{cases}$$

先求Jacobi迭代格式，由

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{9}(x_2 + x_3 + 7) \\ x_2 = \frac{1}{8}(x_1 + 7) \\ x_3 = \frac{1}{9}(x_1 + 8) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{9}(x_2^{(k)} + x_3^{(k)} + 7) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{8}(x_1^{(k)} + 7) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{9}(x_1^{(k)} + 8) \end{cases}$$

故Gauss-Seidel迭代格式为：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{9}(x_2^{(k)} + x_3^{(k)} + 7) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{8}(x_1^{(k+1)} + 7) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{9}(x_1^{(k+1)} + 8) \end{cases}$$

迭代$k = 4$步后即得到解：

$$x^{(1)} = (0.7778, 0.9722, 0.9753)'$$
$$x^{(2)} = (0.9942, 0.9993, 0.9994)'$$
$$x^{(3)} = (0.9999, 0.9999, 0.9999)'$$
$$x^{(4)} = (1.0000, 1.0000, 1.0000)'$$

- Gauss - Seidel 迭代收敛条件

Gauss-Seidel迭代格式收敛的充要条件是G的谱半径$\rho(G) < 1$，下面是一些Gauss-Seidel迭代收敛的充分条件.

定理：若矩阵A满足下列条件之一，则Gauss-Seidel迭代收敛.

① A为严格(行或列)对角占优阵. (参见第3版定理5.3)

② A为实对称正定阵.（参见第3版104页，定理5.4)

例：分别使用Jacobi迭代与Gauss-seidel迭代法求解$Ax = b$，其中

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

讨论两种迭代的收敛性.

解：Jacobi迭代矩阵为：

$$G = I - D^{-1}A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -1 & 0 & -1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

其特征多项式为$|\lambda I - G| = \lambda^3 + \frac{5}{4}\lambda = 0 \Longrightarrow \lambda_1 = 0, \lambda_{2,3} = \pm\frac{\sqrt{5}}{2}i$

由于$\rho(G) = \frac{\sqrt{5}}{2} > 1$，知Jacobi迭代不收敛.

若使用Gauss−Siedel迭代法，则迭代矩阵为：

$$G = -(D+L)^{-1}U = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

可得其特征值为

$$\lambda_1 = 0, \lambda_{2,3} = -\frac{1}{2}$$

由 $\rho(G) = \frac{1}{2} < 1$，故Gauss-Seidel 迭代收敛.

三. 松弛(SOR)迭代

Gauss-seidel迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{11}}(a_{12}x_2^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)} - b_1) \\ x_2^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{22}}(a_{21}x_1^{(k+1)} + a_{23}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)} - b_2) \\ x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{33}}(a_{31}x_1^{(k+1)} + a_{32}x_2^{(k+1)} + a_{34}x_4^{(k)} + \cdots + a_{3,n}x_n^{(k)} - b_3) \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{nn}}(a_{n1}x_1^{(k+1)} + a_{n2}x_2^{(k+1)} \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)} - b_n) \end{cases}$$

可以写成

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{1}{a_{11}}(a_{11}x_1^{(k)} + a_{12}x_2^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)} - b_1) \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{1}{a_{22}}(a_{21}x_1^{(k+1)} + a_{22}x_2^{(k)} + a_{23}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)} - b_2) \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - \frac{1}{a_{33}}(a_{31}x_1^{(k+1)} + a_{32}x_2^{(k+1)} + a_{33}x_3^{(k)} + \cdots + a_{3,n}x_n^{(k)} - b_3) \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = x_n^{(k)} - \frac{1}{a_{nn}}(a_{n1}x_1^{(k+1)} + a_{n2}x_2^{(k+1)} \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)} + a_{nn}x_n^{(k)} - b_n) \end{cases}$$

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

则Gauss-Seidel迭代法可写成：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{1}{a_{11}}r_1^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{1}{a_{22}}r_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = x_n^{(k)} - \frac{1}{a_{nn}}r_n^{(k)} \end{cases}$$

设 $r^{(k)} = (r_1^{(k)}, \cdots, r_n^{(k)})$。 由$x^{(k)}$得到$x^{(k+1)}$的过程， 可以认为是 将$x^{(k)}$加上修正量$-D^{-1}\, r^{(k)}$而得到$x^{(k+1)}$, i.e.,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - D^{-1}\, r^{(k)}.$$

故，在 Gauss-Seidel 迭代的基础上，引进松弛因子 ω ， 即得到松弛(SOR)迭代：

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \omega D^{-1}\, r^{(k)} \quad \Longleftrightarrow$$

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{\omega}{a_{11}}(a_{11}x_1^{(k)} + a_{12}x_2^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)} - b_1) \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{\omega}{a_{22}}(a_{21}x_1^{(k+1)} + a_{22}x_2^{(k)} + a_{23}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)} - b_2) \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - \frac{\omega}{a_{33}}(a_{31}x_1^{(k+1)} + a_{32}x_2^{(k+1)} + a_{33}x_3^{(k)} + \cdots + a_{3,n}x_n^{(k)} - b_3) \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = x_n^{(k)} - \frac{\omega}{a_{nn}}(a_{n1}x_1^{(k+1)} + a_{n2}x_2^{(k+1)} \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)} + a_{nn}x_n^{(k)} - b_n) \end{cases}$$

称为因子为ω的松弛(SOR)迭代， $\omega = 1$时的松弛迭代即为Gauss-Seidel迭代.

将松弛迭代格式写成向量形式, 可得：

$$\begin{aligned} (D+\omega L)x^{(k+1)} &= \Big[(1-\omega)D - \omega U\Big]x^{(k)} + \omega b \quad \Longleftrightarrow \\ x^{(k+1)} &= (D+\omega L)^{-1}\Big((1-\omega)D - \omega U\Big)x^{(k)} + \omega(D+\omega L)^{-1}b \\ &\triangleq S_\omega x^{(k)} + f = (I - Q^{-1}A)x^{(k)} + Q^{-1}b \end{aligned}$$

故松弛因子为ω的松弛迭代矩阵为(这里 $Q = \frac{1}{\omega}D + L$ 即分裂矩阵)

$$S_\omega = (D+\omega L)^{-1}\Big((1-\omega)D - \omega U\Big) = I - Q^{-1}A$$

定理： 1. 松弛(SOR)迭代收敛$\Longrightarrow 0 < \omega < 2$.
2. 若A为对称正定矩阵，则$0 < \omega < 2$时松弛迭代收敛.

1. 通常，把$0 < \omega < 1$的迭代称为亚松弛迭代，$1 < \omega < 2$的迭代称为超松弛迭代，$\omega = 1$的迭代为Gauss-Seidel迭代.

2. 松弛迭代方法收敛的快慢与松弛因子ω的选择有密切关系. 但是如何选取最佳松弛因子ω使得$\rho(S_\omega)$ 达到最小，是 一个尚未解决的问题. 实际上可采用试算的方法来确定较好的松弛因子. 经验上可取$1.4 < \omega < 1.6$.

例： 用松弛(SOR)方法解下列方程组 (设ω为松弛因子)

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 - x_3 = -5 \\ x_1 + 5x_2 - x_3 = 8 \\ x_1 + x_2 + 10x_3 = 11 \end{cases}$$

回顾：与该方程组对应的Jacobi迭代格式（分量形式）为：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{2}(x_2^{(k)} + x_3^{(k)} - 5) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{5}(-x_1^{(k)} + x_3^{(k)} + 8) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{10}(-x_1^{(k)} - x_2^{(k)} + 11) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \text{Gauss-Seidel 格式：} \begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{2}(x_2^{(k)} + x_3^{(k)} - 5) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{5}(-x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)} + 8) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{10}(-x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)} + 11) \end{cases}$$

$$\Longleftrightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{1}{2}(2x_1^{(k)} - x_2^{(k)} - x_3^{(k)} + 5) \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{1}{5}(x_1^{(k+1)} + 5x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - 8) \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - \frac{1}{10}(x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)} + 10x_3^{(k)} - 11) \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \text{松弛迭代格式:} \begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{\omega}{2}(2x_1^{(k)} - x_2^{(k)} - x_3^{(k)} + 5) \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{\omega}{5}(x_1^{(k+1)} + 5x_2^{(k)} - x_3^{(k)} - 8) \\ x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - \frac{\omega}{10}(x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)} + 10x_3^{(k)} - 11) \end{cases}$$

迭代方法小结

- 等价形式（假设分裂矩阵Q非奇异，即 $|Q| \neq 0$)

$$Ax = b \Longleftrightarrow Qx = (Q - A)x + b \Longleftrightarrow x = (I - Q^{-1}A)x + Q^{-1}b$$

- 迭代公式

$$Qx^{(k+1)} = (Q - A)x^{(k)} + b \Longleftrightarrow x^{(k+1)} = (I - Q^{-1}A)x^{(k)} + Q^{-1}b$$

Let $A = D + L + U$ and assume $0 < \omega < 2$.

迭代方法	分裂矩阵 Q	迭代矩阵 $G = I - Q^{-1}A$
Jacobi	D	$I - D^{-1}A$
Gauss-Seidel	$D + L$	$-(D + L)^{-1}U$
SOR(松弛迭代)	$\frac{1}{\omega}D + L$	$(D + \omega L)^{-1}\Big((1 - \omega)D - \omega U\Big)$

. Jacobi迭代 $\xRightarrow{\text{使用最新分量}}$ Gauss-Seidel迭代 $\xRightarrow{\text{引进松弛因子 }\omega}$ 松弛迭代