

数值分析

第六章：线性方程组迭代法

张亚楠¹

苏州大学数学科学学院

April 2, 2020

¹Email: ynzhang@suda.edu.cn

1. 迭代法预备知识
2. 引例和迭代法一般原理
3. Jacobi迭代
4. Gauss-Seidel 迭代
5. Successive Over Relax (SOR)
6. 共轭梯度法 CG

$$Ax = b$$

- ❶ A进行三角分解之后 $A = LU$, 解方程的工作量是 $O(n^2)$.
- ❷ 迭代法的目标是降低计算复杂度到 $O(n)$.
- ❸ 迭代法适用于大型稀疏矩阵, 迭代一次的工作量与矩阵的稀疏程度有关

偏微分方程的差分方法和有限元方法产生的代数方程, 其系数矩阵都是稀疏的; 例如椭圆算子的标准五点差分格式, 系数矩阵的每行只有5个非零元素, 迭代一次需要 $5n$ 次乘法。若 n 很大且迭代收敛较快时, 迭代法的运算量只有 $O(n)$

记 x^* 是

$$Ax = b$$

的精确解

Remark 1.1

- ① 直接法的目标是找到 x^* 本身
- ② 迭代法的目标是找到 x^* 的有效近似解，例如

$$\|x - x^*\| < \tau = 10^{-6}$$

则 x 即是所求。只要满足容许的误差 τ 即可

如何得到近似解 x ? 从方程组出发构造迭代格式，迭代格式产生向量序列 x^k ,

$$x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(k)}, \dots$$

向量序列收敛即可！！

回顾向量范数

设 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$, 内积空间诱导范数一般称之为2范数。更一般的, 可以定义p范数

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T; \quad \|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{j=1}^n |x_j|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leq p < +\infty$$

本课程常用三种范数

- 1-范数, $p = 1$,

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j|$$

- 2-范数, $p = 2$,

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{j=1}^n |x_j|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

- ∞ -范数, $p \rightarrow \infty$

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}\|_p = \lim_{p \rightarrow \infty} \left(\sum_{j=1}^n |x_j|^p \right)^{\frac{1}{p}} = \max_{1 \leq j \leq n} |x_j|$$

符号 $\|\cdot\|$ 可以看作是一个映射，值域是 $[0, +\infty)$ ，满足

- (1) 正定性 $\|\mathbf{x}\| \geq 0$ 且 等号成立当且仅当 \mathbf{x} 是零元
- (2) 齐次性 $\|\alpha \mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|$, $\forall \alpha \in \mathbb{C}$
- (3) 三角形不等式 $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$

Tips: 范数用来衡量一个向量的大小，长度，类似于实数或复数的绝对值；运算结果是一个非负数。

从映射的角度看, n 维向量的范数又是一个 n 元函数; 可以证明该函数(此时称之为范数)对每一个自变量(此时称之为向量的分量)均是连续的. 即

$$\left\| \begin{bmatrix} | \\ x_k + \varepsilon \\ | \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} | \\ x_k \\ | \end{bmatrix} \right\| \rightarrow 0 \quad \text{as} \quad \varepsilon \rightarrow 0$$

由此, 可以证明如下重要结论

Theorem 1

\mathbf{R}^n 空间中任意两个范数 均是等价的. 即存在正数 c , 对任意的 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$, 有

$$\frac{1}{c} \|\mathbf{x}\|_{\diamond} \leq \|\mathbf{x}\|_{\heartsuit} \leq c \|\mathbf{x}\|_{\diamond}$$

注: \mathbf{R}^n 是有限维空间, 完备的线性赋范空间(Banach); 更多信息可参考: 泛函分析!

如要说明一个向量序列收敛, 则只需要在其中一个范数下证明收敛即可。

Definition 2

设 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 是 \mathbf{R}^n 中的向量序列, $\mathbf{x}^* \in \mathbf{R}^n$, 若对每一个向量分量, 都有

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_j^{(k)} = x_j^*, \quad 1 \leq j \leq n$$

则称序列 $\mathbf{x}^{(k)}$ 收敛到 \mathbf{x}^* , 记为

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*$$

Theorem 3

\mathbf{R}^n 中序列收敛等价于以任何一种范数收敛

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^* \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| = 0$$

Tips: 判断向量序列的收敛性可用数列(误差序列范数)是否趋于零考量!!

需求:

在误差分析中, 矩阵范数大多时候与向量范数会同时出现, 因此希望二者之间有一定的联系和统一性。例如: F范数符合范数定义, 但不好用!!

Definition 4

任给一个向量 $x \in \mathbf{R}^n$, 矩阵 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 以及范数 $\|x\|_{\spadesuit}$ (如: $\spadesuit = 1, 2, \infty$), 可以按照如下方式定义一个从属于 \spadesuit 范数的关于矩阵 A 的算子范数

$$\|A\|_{\spadesuit} = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_{\spadesuit}}{\|x\|_{\spadesuit}}$$

矩阵范数满足范数的定义, 同时还具有如下性质

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|; \quad \|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$$

Example 5

证明:

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$$

提示:

$$\|AB\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|ABx\|}{\|x\|} = \|AB * y\|, \quad \text{某个特殊的单位向量} \|y\| = 1$$

进而

$$\|AB * y\| \leq \|A\| * \|B * y\| \leq \|A\| \cdot \|B\| \cdot \|y\| = \|A\| \|B\|$$

常用的三种范数 公式

- $\|A\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$
- $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$
- $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T * A)}$ λ_{\max} 指最大特征值

Definition 6

设 $A = (a_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 若存在 $\lambda \in \mathbf{C}$ 和非零向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbf{R}^n$, 使得

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

则称 λ 为 A 的特征值, \mathbf{x} 为特征向量, A 的全体特征值称为 A 的谱, 记 $\rho(A) = \max_{1 \leq j \leq n} |\lambda_j|$ 为 A 的谱半径。

最常用范数

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T * A)} \quad \lambda_{\max} \text{指最大特征值}$$

对称矩阵的2范数就是其最大(绝对值)特征值：谱半径！！

注意到 $A * A^T$ 与 $A^T * A$ 有相同的特征值

- ① 矩阵的2范数即是最大奇异值 singular value !
- ② 矩阵 A 与其转置 A^T 有相同的2范数
- ③ 对称矩阵的奇异值就是特征值！！

思考：

满足 $P^T * P = I$ 的正交矩阵 P 的2范数是多少？

根据定义检验即可。

两个结论:

- 对任意一个矩阵算子范数, 有

$$\rho(A) \leq \|A\|$$

当A是对称矩阵且取2范数时, 等号成立。

- $\forall \epsilon > 0$, 存在一个矩阵算子范数 $\|\cdot\|_\diamond$, 使得

$$\|A\|_\diamond \leq \rho(A) + \epsilon$$

一句话: 数值上, 谱半径可认为是算子范数!!

Example 7

例7: p166

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -3 & 4 \end{bmatrix}$$

计算1, 2, 无穷范数

解答:

$$\|A\|_\infty = 7, \|A\|_1 = 6, \|A\|_2 = 5.465, \rho(A) = 5.3723$$

李庆扬教材 p167 例

Example 8

计算目标

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

实际计算时右端项存在小的扰动误差，例如

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

万分之一的右端项扰动得到百分之百的误差？ WHY？

右端项有一微小的扰动，所得结果千差万别。这种现象称之为“病态”；矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix}$$

称为病态(ill-condition)矩阵

思考：

为什么右端项(输入)小的扰动，解(输出)的扰动这么大？

考查:

右端项扰动如何传递给解?

考虑 $Ax = b$; 如果右端项有微小扰动 δb , 则实际求解问题为

$$A(x + \delta x) = b + \delta b \quad \rightarrow \quad A\underline{\delta x} = \delta b$$

分析解 x 的相对误差

$$\frac{\delta x}{x} = ? \quad \text{or} \quad \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} = ?$$

$$\delta x = A^{-1} * \delta b \Rightarrow \underline{\|\delta x\| \leq \|A^{-1}\| * \|\delta b\|}$$

$$Ax = b \Rightarrow \|Ax\| = \|b\| \Rightarrow \|A\| * \|x\| \geq \|b\| \Rightarrow \underline{\frac{1}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|}}$$

可得如下关系

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \underline{\|A\| * \|A^{-1}\|} \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

条件数：右端项相对误差放大的倍数！！

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A\| * \|A^{-1}\|}{\|b\|} \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

右端项扰动所带来的解的扰动完全体现于条件数

$$\boxed{cond(A) = \|A^{-1}\| * \|A\|}$$

不同的范数对应不同的条件数

- 任意条件数均大于1

$$\text{cond}(A) = \|A^{-1}\| * \|A\| \geq \|A^{-1}A\| = 1$$

- 任意常数 $c \neq 0$

$$\text{cond}(cA) = \text{cond}(A)$$

Hint: 以上两条性质按照定义检验即可

- 无穷条件数

$$\text{cond}(A)_{\infty} = \|A^{-1}\|_{\infty} * \|A\|_{\infty}$$

- 谱(2)条件数(最大和最小奇异值比值)

$$\text{cond}(A)_2 = \|A^{-1}\|_2 * \|A\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}} = \frac{|\sigma_1|}{|\sigma_n|}$$

当A为对称矩阵时，奇异值即是特征值

$$\text{cond}(A)_2 = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}$$

- 当R为正交矩阵时，

$$\text{cond}(R)_2 = 1; \quad \text{cond}(RA)_2 = \text{cond}(AR)_2 = \text{cond}(A)_2$$

证明第三条性质

$$R * R^T = I \Leftrightarrow R^{-1} = R^T \rightarrow \text{cond}(R) = \|R\|_2 * \|R^T\|_2 = \|R\|_2^2 = 1$$

$$\text{cond}(RA) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}((RA)^T * RA)}{\lambda_{\min}((RA)^T * RA)}} = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}}$$

以最为常用的谱条件数为例

$$\text{cond}(A)_2 = \|A^{-1}\|_2 * \|A\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}} = \frac{|\sigma_1|}{|\sigma_n|}$$

计算很困难！！

- 矩阵A的特征值，奇异值的计算难度 远远大于解 $Ax = b$
- 实际计算时，除非特别必要，一般不计算条件数！！
- 仅为了解方程，又想知道条件数大小，咋办？—— 猜！

当矩阵的行列式绝对值接近0的时候，A的条件数可能很大，例

如李庆扬p171 例9 Hilbert矩阵条件数；或者A的元素间数量级相差很大，且无规则，A可能病态。

给定 A 矩阵，如果需要多次解方程，对精度要求高，且有计划做预处理，可以按照如下步骤估计其条件数

- ① 给一个随机列向量 y ，并计算 $b = A * y$
- ② 求解 $Ax = b$ ，得到 x ，看 $x - y$ 的大小

注意上述过程需要解一次方程，如果目标仅仅是为了解一次方程而且对精度要求不高，上述过程无意义。

precondition

$$Ax = b \Leftrightarrow PAx = Pb, \text{ \& } \text{cond}(PA) \ll \text{cond}(A)$$

P要足够简单且容易得到！！难！！

理论上最好的P， $PA = I$ ，实际上不可取，因为不能求逆，不能求逆！！

1. 迭代法预备知识
2. 引例和迭代法一般原理
3. Jacobi迭代
4. Gauss-Seidel 迭代
5. Successive Over Relax (SOR)
6. 共轭梯度法 CG

Example 9

求解线性方程组 $Ax = b$

$$\begin{cases} 2x + 4y - 2z &= 2 \\ 4x + 9y - 3z &= 8 \\ -2x - 3y + 7z &= 10 \end{cases}$$

改写为

$$\begin{cases} 2x &= 2 - (4y - 2z) \\ 9y &= 8 - (4x - 3z) \\ 7z &= 10 - (-2x - 3y) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x &= [2 - (4y - 2z)] / 2 \\ y &= [8 - (4x - 3z)] / 9 \\ z &= [10 - (-2x - 3y)] / 7 \end{cases}$$

方程组 $Ax = b$ 改写成等价形式

$$x = Bx + f$$

将 $Ax = b$ 改写成等价形式 $x = Bx + f$, 构造迭代格式

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = B\boldsymbol{x}^{(k)} + f, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

给定初值 $\boldsymbol{x}^{(0)}$, 反复作用上式可得到一个向量序列

$$\boldsymbol{x}^{(0)}, \boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{x}^{(n)} \dots$$

思考:

若随着迭代次数增加, 向量序列不再变化了(收敛!!), 是否得到了目标解?

Definition 10

对上述产生的向量序列, 若

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$$

则称迭代法收敛, 且 \boldsymbol{x}^* 即是方程组的解, 否则称为发散.

明确几个问题

- ① $Ax = b \Leftrightarrow x = Bx + f$ 等价形式一定有, 例如: $x = x - c * (b - Ax)$
- ② 等价形式 \rightarrow 迭代格式一定有; 但未必都收敛!!
- ③ 迭代序列 $x^{(k)}$ 何时收敛? 前文的引例就不收敛

问题

$x^{(k+1)} = B * x^{(k)} + f$ 何时收敛?

记 x^* 是精确解, 引进误差向量

$$\epsilon^{(k)} = x^{(k)} - x^*$$

可知 迭代序列是否收敛等价于

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \epsilon^{(k)} = \vec{0}$$

注意到 x^* 满足

$$x^* = B * x^* + f$$

上式与迭代格式

$$x^{(k+1)} = B * x^{(k)} + f$$

对应相减, 即得

$$\epsilon^{(k+1)} = B \epsilon^{(k)} = \dots = B^{k+1} \epsilon^{(0)}$$

观察上式, $\epsilon^{(0)}$ 是初始误差, 一般不为零;

$\epsilon^{(k+1)}$ 是否收敛于 0 向量, 完全取决于迭代矩阵 B

问题:

什么样的 B ? 对任意初值成立

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \epsilon^{(k+1)} = \lim_{k \rightarrow \infty} B^{k+1} \epsilon^{(0)} = 0$$

或者

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\epsilon^{(k+1)}\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \|B^{k+1} \epsilon^{(0)}\| = 0$$

分析:

$$\|B^{k+1} \epsilon^{(0)}\| \leq \|B^{k+1}\| * \|\epsilon^{(0)}\| \leq \|B\|^{k+1} * \|\epsilon^{(0)}\|$$

结论:

若存在某种矩阵范数使得 $\|B\| < 1$, 则迭代收敛.

说明: 存在不代表一定找得到

利用矩阵范数和谱半径之间的关系

- 对任意矩阵算子范数

$$\rho(B) \leq \|B\|$$

- $\forall \epsilon > 0$, 存在一个矩阵算子范数 $\|\cdot\|_\diamond$, 使得

$$\|B\|_\diamond \leq \rho(B) + \epsilon$$

结论

数值上看, 最小的矩阵算子范数就是谱半径!! 因而迭代是否收敛取决于迭代矩阵的谱半径是否小于1!!

Theorem 11

设 $B \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 则下面命题等价

- 迭代格式

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = B\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

对任意初值均收敛.

- $\rho(B) < 1$
- 存在某种范数满足 $\|B\| < 1$
- 对任意矩阵范数

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|B^k\| = 0$$

即 B^k 收敛到零矩阵, i.e.,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (B^k)_{ij} = 0, \quad 1 \leq i, j \leq n$$

如果找到某种范数满足 $\|B\|_{\diamond} = q < 1$, 则由迭代格式

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(k+1)} = B * \boldsymbol{\epsilon}^{(k)}$$

可得(忽略下标)

$$\|\boldsymbol{\epsilon}^{(k+1)}\| = \|B * \boldsymbol{\epsilon}^{(k)}\| \leq \|B\| * \|\boldsymbol{\epsilon}^{(k)}\| \rightarrow$$

$$\|\boldsymbol{\epsilon}^{(k+1)}\| \leq \|B\|^{k+1} * \|\boldsymbol{\epsilon}^{(0)}\| = q^{k+1} \|\boldsymbol{\epsilon}^{(0)}\|$$

$$\|\boldsymbol{\epsilon}^{(k+1)} - \boldsymbol{\epsilon}^{(k)}\| = \|B\boldsymbol{\epsilon}^{(k)} - \boldsymbol{\epsilon}^{(k)}\| \geq \|\boldsymbol{\epsilon}^{(k)}\| - q * \|\boldsymbol{\epsilon}^{(k)}\|$$

即

$$\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\| = \|\boldsymbol{\epsilon}^{(k+1)} - \boldsymbol{\epsilon}^{(k)}\| \geq (1 - q) * \|\boldsymbol{\epsilon}^{(k)}\|$$

上式第一个等号: $\boldsymbol{\epsilon}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*$

由

$$\begin{aligned}\|\epsilon^{(k+1)}\| &\leq q^{k+1} \|\epsilon^{(0)}\| \\ \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| &\geq (1 - q) * \|\epsilon^{(k)}\|\end{aligned}$$

可得

Theorem 12

如果存在迭代矩阵的某种范数满足 $\|B\| = q < 1$, 则有如下估计

- 先验估计 $\|x^* - x^{(k)}\| \leq q^k \|x^* - x^{(0)}\|$
- 后验估计(第一个小于号) $\|x^* - x^{(k)}\| \leq \frac{q}{1-q} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|$

Remark 2.1

上述估计式并不常用, WHY? 实际应用时多用 残差、(残量、residual) 来判断数值解的精度

$$r_k = b - Ax^{(k)} = Ax^* - Ax^{(k)} = A * (x^* - x^{(k)}) = A * \epsilon^{(k)}$$

1. 迭代法预备知识
2. 引例和迭代法一般原理
3. Jacobi迭代
4. Gauss-Seidel 迭代
5. Successive Over Relax (SOR)
6. 共轭梯度法 CG

问题：

给定 $Ax = b$, 如何选取迭代矩阵 B , 且满足收敛性条件?

不容易!!

$$Ax - b = 0 \Leftrightarrow x = x - C * (Ax - b)$$

即

$$x = (I - CA)x + Cb$$

得到迭代格式

$$x^{(k+1)} = (I - CA)x^{(k)} + Cb, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

观察上式, 迭代矩阵即为 $B = I - CA$, 由前文收敛性分析可知, 若存在某种范数 使得 $\|I - CA\| = q < 1$, 则迭代格式收敛. 此时也可称 C 为 A 的广义逆矩阵. $q = 0$ 时, 有 $CA = I$

NOTICE:

矩阵求逆比解方程组的工作量要大很多, 线性方程组数值解必须 关心时效问题; 因此, A 的广义逆 C 必须快速求解, 不可使用 $C = A^{-1}$.

$$\mathbf{x} = (I - CA)\mathbf{x} + C\mathbf{b}$$

考虑特殊情况, A 的对角线元素数量级比该行其它元素都大. 形式上 $A \approx D = \text{diag}(A)$, 即

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = D$$

则 $C = D^{-1}$, 进而迭代矩阵

$$B = I - CA = I - D^{-1} * A$$

此时构造迭代格式, 称之为Jacobi迭代!!

将系数矩阵写成如下形式 $A = D + L + U$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn-1} & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1n} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

其中D是对角矩阵, L是下三角部分, U是上三角部分. 则

$$B = D^{-1} * D - D^{-1} * (D + L + U) = -D^{-1} * (L + U)$$

于是Jacobi迭代格式 $x = \underline{B} x + \underline{f}$ 为

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

或者(计算时用) 求解对角方程

$$Dx^{(k+1)} = \left(b - (L + U) * x^{(k)} \right)$$

Example 13

计算每步迭代的乘除法次数

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

matlab可快速计算矩阵乘法，应用时需要注意计算效率，不可随意取逆(包括 D^{-1})。

矩阵形式简洁，求和形式如下

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

则

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j < i} a_{ij} * x_j^{(k)} - \sum_{j > i} a_{ij} * x_j^{(k)} \right], \quad i = 1, 2, \dots, n$$

若A是稠密矩阵，则每迭代一步需要 n^2 次乘法。

观察Jacobi迭代格式发现，若按照 $i = 1, 2, \dots, n$ 顺序计算，当计算第 $(k+1)$ 步迭代所对应的第 i 个分量 $x_i^{(k+1)}$ 时，已经计算出 $x_j^{(k+1)}$ ($j < i$)。为何不用呢？

1. 迭代法预备知识
2. 引例和迭代法一般原理
3. Jacobi迭代
4. Gauss-Seidel 迭代
5. Successive Over Relax (SOR)
6. 共轭梯度法 CG

Jacobi迭代格式

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j<i} a_{ij} * x_j^{(k)} - \sum_{j>i} a_{ij} * x_j^{(k)} \right], \quad i = 1, 2, \dots, n$$

及时利用已更新分量，可得Gauss-Seidel迭代

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j<i} a_{ij} * x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} * x_j^{(k)} \right], \quad i = 1, 2, \dots, n$$

比较可知，Gauss-Seidel迭代和Jacobi迭代计算复杂度几乎一样；但是直观上GS效率优于Jacobi.

思考：

根据简单迭代推导公式

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + C(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}) = (I - CA)\boldsymbol{x} + C\boldsymbol{b}$$

GS迭代的广义逆 C 是什么？

GS迭代格式：用包含对角线的下三角矩阵近似A

GS迭代的矩阵形式

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

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

即

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

若记G为系数矩阵A的下三角矩阵(连同对角线), 上式即为

$$x^{(k+1)} = -G^{-1}Ux^{(k)} + G^{-1}b = G^{-1}(G - A)x^{(k)} + G^{-1}b$$

也即是此时取A的广义逆C为下三角矩阵G的逆.

NOTICE:

上式仅仅用于分析和书写, 不用于实际计算。因为按照下三角矩阵求逆和乘法的计算量是 $O(n^3)$ 。而按照表达式顺序计算时工作量与Jacobi一致。

Jacobi

$$Dx^{(k+1)} = \left(b - (L + U) * x^{(k)} \right)$$

Gauss-Seidel

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

结论:

- ① 计算复杂度一样 都是 n^2
- ② 计算效果GS更优, 符合理论: 下三角比对角线包含了矩阵的更多信息

想一想: Jacobi迭代为什么没有淘汰, 仅仅是教学需要? 和GS比起来Jacobi 一无是处?
没有任何优势? No!!

验证迭代矩阵的谱半径是否小于1比较麻烦，有兴趣的读者自己试试看。这里给出一般结论：

- 严格对角占优

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

此时Jacobi, Gauss-Seidel均收敛.

- A对称正定, 则Gauss-Seidel收敛
- A以及(2D-A)均对称正定, Jacobi收敛

1. 迭代法预备知识
2. 引例和迭代法一般原理
3. Jacobi迭代
4. Gauss-Seidel 迭代
5. Successive Over Relax (SOR)
6. 共轭梯度法 CG

回忆几个名词：刘辉割圆术的松弛技术，Romberg 积分，Richardson 外推；共同特点：加权平均。

SOR：GS的加权平均

已知第 k 步迭代值 $x^{(k)}$

- 1 利用GS迭代计算得到中间值 $\overline{x^{(k+1)}}$
- 2 取两步迭代的平均值

$$x^{(k+1)} = (1 - w)x^{(k)} + w\overline{x^{(k+1)}} = x^{(k)} + w\left(\overline{x^{(k+1)}} - x^{(k)}\right)$$

需要指出的是：不像梯形公式有具体的收敛阶表达式，可以精确选取 松弛因子 w ；若对系数矩阵和迭代矩阵没有足够的分析，好的 w 只能靠经验和反复试验得到。

$$A = D + L + U$$

SOR迭代的矩阵形式如下:

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

简单推导可得:

$$\begin{aligned} Dx^{(k+1)} &= (1 - w)Dx^{(k)} + w(b - Lx^{(k+1)} - Ux^{(k)}) \\ \Rightarrow (D + wL)x^{(k+1)} &= \left[(1 - w)D - wU \right] x^{(k)} + wb \\ \Rightarrow \underbrace{x^{(k+1)} = (D + wL)^{-1} \left[(1 - w)D - wU \right] x^{(k)}}_{\text{波浪线部分}} &+ \underline{\underline{w(D + wL)^{-1}b}} \end{aligned}$$

波浪线部分为迭代矩阵B, 此时系数矩阵A的广义逆

$$C = w(D + wL)^{-1}$$

w 取值介于(0,2) 之间, 以1为界, 分别称为低松弛和超松弛

1. 分别利用Jacobi, Gauss-Seidel, SOR迭代法 计算 $Ax = b$, $n = 15$; 并画出向量 x 的图像

$$\begin{bmatrix} \frac{5}{2} & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & \frac{5}{2} & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & \frac{5}{2} \end{bmatrix}_{n \times n} * \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}_{n \times 1}$$

依次给出代码

- ❶ Jacobi 迭代
- ❷ Gauss-Seidel 迭代
- ❸ 以GS为代码基础，利用加权平均写 SOR

1. 迭代法预备知识
2. 引例和迭代法一般原理
3. Jacobi迭代
4. Gauss-Seidel 迭代
5. Successive Over Relax (SOR)
6. 共轭梯度法 CG

Example 14

已知 A 对称正定, 求 n 元二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b, \quad x \in \mathbf{R}^n$$

的极小值

多元函数极值的为驻点, 先计算梯度(导数)

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_{kj} x_k x_j - \sum_{j=1}^n x_j b_j$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_l} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n a_{kl} x_k + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n a_{lj} x_j - b_l = \sum_{k=1}^n a_{kl} x_k - b_l$$

$$\rightarrow \boxed{\nabla f = \text{grad } f = Ax - b}$$

- 1 $Ax - b = 0$ 的解是多元函数驻点

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b$$

- 2 由于 A 正定, 则二次函数 $f(x)$ 的极小值点必存在且为驻点

$$f(x^*) = \min f(x) \quad \Leftrightarrow \quad \nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0$$

结论和新问题

- 1 线性方程组 $Ax = b$, 转化为多元函数的极小值问题
- 2 如何找到这个极小值?
- 3 任给一点, 函数 $f(x)$ 在该点的负梯度方向下降最快!

想象自己在一个环绕的山腰, 准备出发到山底! ?

想象自己在一个环绕的山腰，准备出发到山底？

- 1 找好下降方向 \rightarrow 负梯度方向
- 2 沿着选定方向直走
- 3 走到选定方向的最低点，停下来，拐弯（找新的下降方向）

翻译成数学语言

- 1 给定任意初值 x_0 , (人当前所在位置), 计算残量 $r_0 = b - Ax_0$. (最陡的下降方向)
- 2 沿着选定的方向 P 前进，例如 $P = r_0$ 方向

$x_1 = x_0 + \alpha * P$, 怎样选择合适的 α

$\alpha = ?$ (沿着负梯度方向走多远?) 当前方向 P 的最低点！满足

$$\left. \frac{df}{d\alpha} \right|_{x_1} = \nabla f \Big|_{x=x_1} \cdot P = (r_1, P) = (b - Ax_1, P) = 0$$

$$\rightarrow (b - Ax_0 - \alpha AP, P) = (r_0 - \alpha AP, P) = 0 \rightarrow \alpha = \frac{(r_0, P)}{(AP, P)}$$

- 3 repeat (环视一周，找好新的前进方向，走到底)

A-(1) 给定任意初值 x_0 , 计算residual $r_0 = b - Ax_0$.

A-(2) 选择 $P = r_0$ 为前进方向, 计算

$$\alpha = \frac{(r_0, r_0)}{(Ar_0, r_0)} \quad \text{update} \quad x_1 = x_0 + \alpha r_0$$

A-(3) repeat

思考:

上述方法下山是否是最优选择?

局部最优, 非全局最优!

最速下降法算法

A-(1) 给定任意初值 x_0 , 计算residual $r_0 = b - Ax_0$.

A-(2) 选择 $P = r_0$ 为前进方向, 计算

$$\alpha = \frac{(r_0, r_0)}{(Ar_0, r_0)}$$

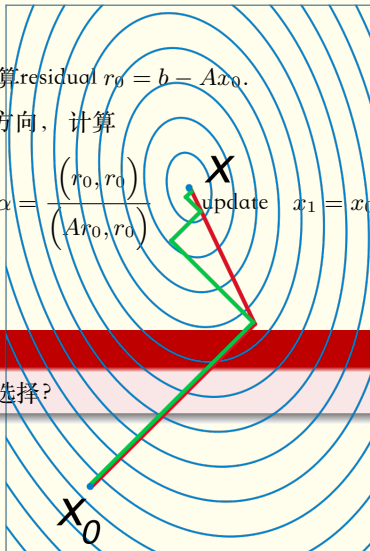
update $x_1 = x_0 + \alpha r_0$

A-(3) repeat

思考:

上述方法下山是否是最优选择?

局部最优, 非全局最优!



Definition 15

A对称正定, u, v 是 n 维向量, 则可定义 A-内积

$$(u, v)_A = (Au, v) = v^T Au = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_{jk} u_j v_k$$

若 $(v, u)_A = 0$, 则该 A 内积对应的角度正交, 此时称为 A 共轭。简言之, A-共轭即是 A 内积下正交!!

Theorem 16

给定一组非零向量

$$p_1, p_2, \dots, p_k, \quad p_j \in \mathbf{R}^n, \text{ \& } k \leq n$$

若

$$(p_i, p_j)_A = 0, \quad i \neq j$$

则

$$\sum_{l=1}^k \alpha_l p_l = 0 \Rightarrow \alpha_l = 0$$

即 p 彼此线性无关。

对上式依次与 p_i 做 A 内积即得结论。

如何理解 $Ax = b$ 的解存在唯一?

$$\begin{bmatrix} | & | & \cdots & | \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ | & | & \cdots & | \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} | \\ b \\ | \end{bmatrix}$$

- ① 矩阵列满秩, 列向量可以选做一组基向量

$$\text{span}\{a_1, a_2, \dots, a_n\} = \mathbf{R}^n$$

- ② 解方程等价于: 寻找一组坐标 x_1, \dots, x_n 使得 b 可以由列向量线性表示!!

$$b = x_1 * a_1 + x_2 * a_2 + \dots + x_n * a_n$$

若 A 是正交矩阵或者列向量 a_k 彼此正交, 则容易计算出系数 x_k

$$x_k = (a_k, b), \quad k = 1 \rightarrow n$$

思考:

已知 正交基很有效! 如果有一组 A 共轭的向量组选做一组基, x_k 是不是也容易计算? ?

给定 \mathbf{R}^n 空间中一组彼此A共轭的向量组（可作为一组基）

$$P_1, P_2, \dots, P_n$$

则目标向量 $x = A^{-1}b$ 可由表示成这组基的线性组合

$$x = \sum_{j=1}^n \alpha_j P_j \rightarrow Ax = b = \sum_{j=1}^n \alpha_j AP_j \rightarrow P_k^T b = \alpha_k P_k^T AP_k$$

即：

$$\alpha_k = \frac{(P_k, b)}{(P_k, P_k)_A} = \frac{P_k^T b}{P_k^T AP_k}$$

如果给定了一组共轭向量组 P_k ，则可按照上式求出对于系数 α_k

主要任务：

如何有效的给出一组A共轭向量组 P_k ??

CG方法 !!

CG方法即可以顺序给出A共轭向量组

$$P_0, P_1, \dots, P_k, \dots$$

则得到精确解

$$\mathbf{x} = \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j P_j, \quad \alpha_k = \frac{P_k^T b}{P_k^T A P_k}$$

WHY Iteration ?

$$\begin{cases} x^{(0)} = \mathbf{0} \quad \text{Or other initial guess} \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k P_k = \alpha_0 P_0 + \alpha_1 P_1 + \dots + \alpha_k P_k \end{cases}$$

P 是比最速下降法的 r_k 更有效的前进方向！！不必要 $k = n$, 精度满足要求即可！！

理论上是直接法求精确解，实用上是迭代法近似解！一般 $k \ll n$, 也是子空间方法！！

Example 17

设 $y_0, y_1, \dots, y_k \in \mathbf{R}^n$ 是一组线性无关的向量, 尝试构造一组A-共轭的向量组

$$P_0, P_1, \dots, P_k,$$

满足

$$\text{span}\{y_0, y_1, \dots, y_k\} = \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_k\}$$

Gram-Schmidt

$$\begin{cases} P_0 = y_0 \\ P_j = y_j - \sum_{l=0}^{j-1} \frac{(AP_l, y_j)}{(AP_l, P_l)} P_l, \quad j \geq 1 \end{cases}$$

若只有两个向量, 则

$$P_1 = y_1 - \beta P_0, \quad \beta = \frac{(AP_0, y_1)}{(AP_0, P_0)}$$

为了书写方便, \mathbf{x}_k 代表第k步的迭代向量, 不指向量的第k个分量

算法

- 1 给定初值 $\mathbf{x}_k = \mathbf{0}$ (若无其它有效信息, 初值取零向量); 计算残差 (residual)

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$$

- 2 取 $P_0 = \mathbf{r}_0$, 计算

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \alpha_0 P_0, \quad \alpha_0 = \frac{(\mathbf{r}_0, P_0)}{(AP_0, P_0)}$$

- 3 由 \mathbf{x}_1 得到新的残量 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_1$. 以 \mathbf{r}_1 为基础, 对 P_0 做A投影, 得到新的前进方向 P_1

$$P_1 = \mathbf{r}_1 - \beta_1 P_0, \quad \beta_1 = \frac{(AP_0, \mathbf{r}_1)}{(AP_0, P_0)}$$

- 4 repeat

$$\boxed{\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k P_k} \rightarrow \boxed{\mathbf{r}_{k+1} \rightarrow P_{k+1}} \rightarrow \boxed{\mathbf{x}_{k+2}}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} r_0 = b - Ax_0, \quad P_0 = r_0 \\ \boxed{x_{k+1} = x_k + \alpha_k P_k} \rightarrow \boxed{r_{k+1} \rightarrow P_{k+1}} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} r_0, r_1, \dots, r_n \\ P_0, P_1, \dots, P_n \end{array} \right.$$

Theorem 18

上述算法产生的向量序列 r_j , P_j 满足

$$r_l \perp \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{l-1}\} \quad (1)$$

$$P_l \perp^A \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_{l-1}\} \quad (2)$$

$$\text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{l-1}\} = \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_{l-1}\} = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{l-1}r_0\} \quad (3)$$

思考:

若 $l = n$, 由上定理知残差序列

$$r_0, r_1, \dots, r_n$$

彼此正交! (n+1)组n维向量彼此正交, 说明什么?

中间必有零向量! 即CG方法不超过n步迭代必能得到精确解!

Theorem 19

$$r_l \perp \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{l-1}\} \quad (4)$$

$$P_l \perp^\Delta \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_{l-1}\} \quad (5)$$

$$\text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{l-1}\} = \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_{l-1}\} = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{l-1}r_0\} \quad (6)$$

归纳法证明。给定初值为0向量, $P_0 = r_0 = b$. 记号 \perp^Δ 表示A共轭。证明过程会用到以下等式

$$r_{k+1} = r_k - \alpha A P_k \quad \Leftarrow x_{k+1} = x_k + \alpha P_k \quad (7)$$

$$(r_{k+1}, P_k) = 0 \quad \Leftarrow \frac{df}{d\alpha} = 0 \quad (8)$$

$$P_k = r_k - \beta P_{k-1} \quad \Leftarrow P_{k+1} \perp^\Delta P_k \quad (9)$$

① 验证 $r_1 \perp P_0$, $r_1 \perp r_0$, & $P_1 \perp^\Delta P_0$

② 归纳假设 $l \leq k$ 时, r 相互正交, P 彼此共轭,

$$\text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{l-1}\} = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{l-1}r_0\}, \quad 0 \leq l \leq k$$

③ 推导目标

$$r_{k+1} \perp r_j, \quad P_{k+1} \perp^\Delta P_j, \quad j = 0, \dots, k$$

$$\text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\} = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^k r_0\}$$

$r_{k+1} \perp r_j, \quad j = 0, \dots, k$ 的证明

已知指标 $i, j \leq k$ 时, $(r_i, r_j) = 0$; $(AP_i, P_j) = 0$, 即

$$r_l \perp \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{l-1}\}, \quad P_l \perp^A \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_{l-1}\}, \quad l \leq k$$

且

$$r_{k+1} = r_k - \alpha AP_k \quad \Leftrightarrow x_{k+1} = x_k + \alpha P_k \quad (10)$$

$$(r_{k+1}, P_k) = 0 \quad \Leftrightarrow \frac{df}{d\alpha} = 0 \quad (11)$$

$$P_k = r_k - \beta P_{k-1} \quad \Leftrightarrow P_{k+1} \perp^A P_k \quad (12)$$

① $r_{k+1} \perp r_k$:

$$(r_{k+1}, r_k) = (r_{k+1}, P_k + \beta P_{k-1}) = \beta(r_{k+1}, P_{k-1}) = \beta(r_k - \alpha AP_k, P_{k-1}) = 0$$

② $r_{k+1} \perp r_j, j \leq k-1$:

$$(r_{k+1}, r_j) = (r_k - \alpha AP_k, r_j) = -\alpha(AP_k, r_j) = -\alpha(AP_k, P_j + \beta P_{j-1}) = 0$$

以上说明(等号因为二者可相互线性表示)

$$r_{k+1} \perp \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\} = \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_k\}$$

$P_{k+1} \perp^A P_j, \quad j = 0, \dots, k$ 的证明

已知指标 $i, j \leq k$ 时, $(r_i, r_j) = 0; (AP_i, P_j) = 0$, 即

$$r_l \perp \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{l-1}\}, \quad P_l \perp^A \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_{l-1}\}, \quad l \leq k$$

且

$$r_{k+1} = r_k - \alpha AP_k \quad \Leftrightarrow x_{k+1} = x_k + \alpha P_k \quad (13)$$

$$(r_{k+1}, P_k) = 0 \quad \Leftrightarrow \frac{df}{d\alpha} = 0 \quad (14)$$

$$P_k = r_k - \beta P_{k-1} \quad \Leftrightarrow P_{k+1} \perp^A P_k \quad (15)$$

① $P_{k+1} \perp^A P_k$: P_{k+1} 是 r_{k+1} 投影得到, 自然成立, (15)

② $P_{k+1} \perp P_j, j \leq k-1$:

$$(P_{k+1}, AP_j) = (r_{k+1} - \beta P_k, AP_j) = \frac{1}{\alpha} (r_{k+1}, r_{j+1} - r_j) = 0$$

以上说明 $P_{k+1} \perp^A P_l, l \neq k$, 则

$$P_{k+1} \perp^A \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_k\} = \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\}$$

$\text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\} = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^k r_0\} := \mathcal{K}^k(r_0)$ 证明

归纳假设

$$\text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{k-1}\} = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1} r_0\}$$

且已推导和证明

$$\begin{aligned} r_{k+1} &= r_k - \alpha A P_k && \Leftarrow x_{k+1} = x_k + \alpha P_k \\ r_{k+1} &\perp \text{span}\{P_0, P_1, \dots, P_k\} = \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\} \end{aligned}$$

证明方法：两集合相互包含

① $\forall x \in \mathcal{K}^k(r_0)$, 有 $x \in \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\}$

$$x = y + z = \underbrace{y \in \mathcal{K}^{k-1}(r_0)} + c * A^k r_0 = \boxed{y} + A * (\boxed{c * A^{k-1} r_0})$$

记 $w = \boxed{c * A^{k-1} r_0}$, 只要说明 $A * w \in \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\}$ 即可。

$$w \in \mathcal{K}^{k-1}(r_0) = \text{span}\{r_0, \dots, r_{k-1}\} = \text{span}\{P_0, \dots, P_{k-1}\} \rightarrow w = \sum_{j=0}^{k-1} c_j P_j$$

$$Aw = \sum_{j=0}^{k-1} c_j A P_j \rightarrow Aw = \sum_{j=0}^k \tilde{c}_j r_j$$

② $\forall x \in \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\}$ 有 $x \in \mathcal{K}^k(r_0)$. (读者自证。)

- ❶ 概念：矩阵范数、条件数
- ❷ 迭代法基本原理
- ❸ 简单迭代（不动点迭代）：Jacobi, Gauss-Seidel, SOR
- ❹ 最速(梯度)下降法：按照负梯度方向找函数的极小点，有广泛的应用
- ❺ 共轭梯度法（CG）：
 - ❶ 理论上是直接法求精确解
 - ❷ 实用上是迭代法：多用PCG（预处理共轭梯度法）
 - ❸ 也可看作是Krylov子空间方法(20世纪十大算法之一！)