

6 解线性代数方程组的迭代法

Iterative Methods of Linear System of Equations

王家兵

jbwang@scut.edu.cn

- 解线性代数方程组 $AX = b$ 的直接法大多数计算过程均需对系数矩阵进行分解，一般不能保持 A 的稀疏性
 - 实际问题中，特别是偏微分方程数值求解，常会遇到大型稀疏矩阵
- 高斯消去法、 LU 分解法的乘除法次数为 $\frac{1}{3}n^3 + O(n^2)$ ， LDL^T 分解法的乘除法次数为 $\frac{1}{6}n^3 + O(n^2)$ ，当 n 较大时，计算量相当大.
- 迭代法能充分利用系数矩阵的稀疏性，当 n 较大时，能有效控制计算量.

□ Jacobi雅可比迭代

■ 设有方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$AX = b$$

其中 A 是 $n \times n$ 系数矩阵，非奇异； X, b 是 n 维向量

- 将第 k 个方程的 $a_{kk}x_k$ 项保留在左端，其余项移到右端，然后两边再除以 a_{kk} ($k = 2, 3, \dots, n$).

■ 方程组 $AX = b$ 变成下列等价方程组:

$$\begin{cases} x_1 = & b_{12}x_2 + b_{13}x_3 + \cdots & + b_{1n}x_n + g_1 \\ x_2 = b_{21}x_1 & + b_{23}x_3 + \cdots & + b_{2n}x_n + g_2 \\ & \vdots & \\ x_n = b_{n1}x_1 + b_{n2}x_2 + b_{n3}x_3 + \cdots + b_{n,n-1}x_{(n-1)} & & + g_n \end{cases}$$

其中

$$\begin{cases} b_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{ii}} \quad (i \neq j) \\ b_{ii} = 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \\ g_i = \frac{b_i}{a_{ii}} \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \end{cases}$$

□ 若令

$$B = \begin{bmatrix} 0 & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & 0 & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad g = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_n \end{bmatrix}$$

$$B = D^{-1}(D - A) = I - D^{-1}A$$

$$g = D^{-1}b$$

$$X = BX + g$$

□ 形成雅可比Jacobi迭代公式

$$X^{(k+1)} = BX^{(k)} + g$$

□ 取初始向量 $X^{(0)} \in R^n$, 产生一个向量序列 $X^{(0)}, X^{(1)}, \dots, X^{(k)}, \dots$, 若收敛于 X^* , 则 X^* 一定是方程组 $AX = b$ 的解.

□ Jacobi迭代算法

① 输入 A, b , 初始向量 Y , 容许误差 ϵ , 容许最大迭代次数 M

② 令 $k = 1$

③ 形成迭代矩阵 B (存放在 A 中)

□ 对 $i = 1, 2, \dots, n$ 循环

■ 若 $|a_{ii}| < \epsilon$, 则打印“求解失败”, 停机; 否则

■ $T = a_{ii}$

■ 对 $j = 1, 2, \dots, n$ 计算

$$a_{ij} = -\frac{a_{ij}}{T}, a_{ii} = 0, g_i = \frac{b_i}{T}$$

④ 迭代:

□ 对 $i = 1, 2, \dots, n$ 计算

$$x_i = g_i + \sum_{j \neq i} a_{ij} y_j$$

⑤ 若 $\|X - Y\| < \epsilon$, 输出 X, k , 停机; 否则

⑥ 若 $k < M$, 则 $k = k + 1$, 将 X 赋值给 Y , 转④; 否则
输出求解失败信息, 停机

□ Seidel迭代法

■ 设有雅可比迭代法

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{g}$$

■ 将迭代矩阵 $\mathbf{B} = (b_{ij})_{n \times n}$ 分解为 $\mathbf{B} = \mathbf{L} + \mathbf{U}$, 其中

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ b_{21} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0 & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ 0 & & \cdots & b_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

■ Seidel迭代公式

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{L}\mathbf{X}^{(k+1)} + \mathbf{U}\mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{g} \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

$$x_i^{(k+1)} = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n b_{ij}x_j^{(k)} + g_i \quad (i = 1, \dots, n)$$

□ Seidel迭代算法

① 输入 A, b , 初始向量 Y , 容许误差 ϵ , 容许最大迭代次数 M

② 令 $k = 1$, $x_i = y_i$

③ 形成迭代矩阵 B (存放在 A 中)

□ 对 $i = 1, 2, \dots, n$ 循环

■ 若 $|a_{ii}| < \epsilon$, 则打印“求解失败”, 停机; 否则

■ $T = a_{ii}$

■ 对 $j = 1, 2, \dots, n$ 计算

$$a_{ij} = -\frac{a_{ij}}{T}, a_{ii} = 0, g_i = \frac{b_i}{T}$$

④ 迭代:

□ 对 $i = 1, 2, \dots, n$ 计算

$$x_i = g_i + \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j$$

⑤ 若 $\|X - Y\| < \epsilon$, 输出 X, k , 停机; 否则

⑥ 若 $k < M$, 则 $k = k + 1$, 将 X 赋值给 Y , 转④; 否则
输出求解失败信息, 停机

□ 松弛法 (SOR迭代)

- 可以看作是Seidel迭代法的加速, Seidel迭代法是松弛法的特例

- 松弛法公式

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = (1 - \omega)\mathbf{X}^{(k)} + \omega(\mathbf{L}\mathbf{X}^{(k+1)} + \mathbf{U}\mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{g}) \quad (k = 0, 1, \dots)$$

其中 ω 称为松弛因子, $\omega > 1$ 称超松弛; $\omega < 1$ 称低松弛

□ 松弛迭代算法

① 输入 A, b , 初始向量 Y , 松弛因子 ω , 容许误差 ϵ , 容许最大迭代次数 M

② 令 $k = 1$, $x_i = y_i$

③ 形成迭代矩阵 B (存放在 A 中)

□ 对 $i = 1, 2, \dots, n$ 循环

■ 若 $|a_{ii}| < \epsilon$, 则打印“求解失败”, 停机; 否则

■ $T = a_{ii}$

■ 对 $j = 1, 2, \dots, n$ 计算

$$a_{ii} = -\omega \times \frac{a_{ij}}{T}, a_{ii} = 1 - \omega, g_i = \omega \times \frac{b_i}{T}$$

④ 迭代:

□ 对 $i = 1, 2, \dots, n$ 计算

$$x_i = g_i + \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j$$

⑤ 若 $\|X - Y\| < \epsilon$, 输出 X, k , 停机; 否则

⑥ 若 $k < M$, 则 $k = k + 1$, 将 X 赋值给 Y , 转④; 否则
输出求解失败信息, 停机

例：用Jacobi迭代法解方程组

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 - 2x_3 = 7.2 \\ -x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 8.3 \\ -x_1 - x_2 + 5x_3 = 4.2 \end{cases}$$

答：Jacobi迭代公式如下

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = 0.1x_2^{(k)} + 0.2x_3^{(k)} + 0.72 \\ x_2^{(k+1)} = 0.1x_1^{(k)} + 0.2x_3^{(k)} + 0.83 \\ x_3^{(k+1)} = 0.2x_1^{(k)} + 0.2x_2^{(k)} + 0.84 \end{cases}$$

取 $\mathbf{x}^{(0)} = (0,0,0)^T$ ：迭代收敛

例：用Jacobi迭代法解方程组

$$\begin{cases} x_1 - 10x_2 + 20x_3 = 11 \\ -10x_1 + x_2 - 5x_3 = -14 \\ 5x_1 - x_2 - x_3 = 3 \end{cases}$$

答：Jacobi迭代公式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = 10x_2^{(k)} - 20x_3^{(k)} + 11 \\ x_2^{(k+1)} = 10x_1^{(k)} + 5x_3^{(k)} - 14 \\ x_3^{(k+1)} = 5x_1^{(k)} - x_2^{(k)} - 3 \end{cases}$$

1. 取 $\mathbf{X}^{(0)} = (0,0,0)^T$ ：迭代发散
2. 取 $\mathbf{X}^{(0)} = (1,1,1)^T$ ：迭代收敛

定理：设 A 是任意 $n \times n$ 矩阵，由 A 的各次幂组成的矩阵序列

$$I, A, A^2, \dots, A^k, \dots$$

收敛于零，即 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^k = 0$ 的充要条件是 $\rho(A) < 1$

定理：对任何初始向量 $X^{(0)}$ 和常数项 f ，迭代公式 $X^{(k+1)} = MX^{(k)} + f$ ($k = 0, 1, \dots$)

产生的向量序列 $\{X^{(k)}\}$ 收敛的充要条件是迭代矩阵的谱半径 $\rho(M) < 1$

- **必要性**：若 $\{X^{(k)}\}$ 收敛到 X^* ，则有 $X^* = MX^* + f$ 。令 $\varepsilon_k = X^{(k)} - X^*$ 。则 $\varepsilon_k = X^{(k)} - X^* = MX^{(k-1)} + f - (MX^* + f) = M(X^{(k-1)} - X^*) = \dots = M^k \varepsilon_0$ ，因对任意初始向量 ε_0 ， $\varepsilon_k \rightarrow 0$ ，故有 $\lim M^k \rightarrow 0$ ，故 $\rho(M) < 1$ 。
- **充分性**：若 $\rho(M) < 1$ ，则1不是M的特征值且 $I - M$ 非奇异，方程组 $(I - M)X = f$ 有唯一解，记为 X^* ，我们仍有 $X^* = MX^* + f$ ，则递推式 $\varepsilon_k = M^k \varepsilon_0$ 仍成立。因 $\lim M^k \rightarrow 0$ ，所以对任意初始向量 ε_0 ， $\lim \varepsilon_k \rightarrow 0$ ，即 $\lim X^{(k)} \rightarrow X^*$ 。

定理： 若迭代矩阵 M 的范数 $\|M\| = q < 1$ ，则迭代公式 $X^{(k+1)} = MX^{(k)} + f$ 对任何初始向量 $X^{(0)}$ 一定收敛，且

$$\begin{aligned}\|X^{(k)} - X^*\| &\leq \frac{q}{1-q} \|X^{(k)} - X^{(k-1)}\| \\ &\leq \frac{q^k}{1-q} \|X^{(1)} - X^{(0)}\|\end{aligned}$$

观察：

$$\begin{aligned}X^{(k+1)} - X^{(k)} \\ X^{(k)} - X^* = X^{(k)} - X^{(k+1)} + X^{(k+1)} - X^*\end{aligned}$$

- 设有如下矩阵 A , a_{ij} 表示城市 j 的人口每年迁移到城市 i 的百分比

	北京	上海	广州	深圳
北京	0.95	0.005	0.005	0.0001
上海	0.02	0.99	0.01	0.0005
广州	0.02	0.004	0.98	0.0004
深圳	0.01	0.001	0.005	0.999

- 给定初始城市人口分布 $[2000, 2000, 1500, 1500]^T$, 问十年后人口如何变化?
- 人口会永远变下去吗?

□ 一年后:

北京	1917.65
上海	2035.75
广州	1518.6
深圳	1528

□ 2年后

北京	1839.69205
上海	2069.6955
广州	1535.3352
深圳	1555.27725

- 当矩阵 A 满足如下属性: (1) 每列之和为1; (2) A 对应的图强连通, 则存在向量 P 使得

$$P = AP$$

- 1是 A 的特征值, 且为 A 的谱半径。
- 上述方程是一个矩阵特征值问题, 其解对应于特征值为1的特征向量。

□ 迭代矩阵谱半径与系数矩阵 A 的关系

1. Jacobi迭代

■ Jacobi迭代矩阵 $\mathbf{B} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{D} - \mathbf{A})$

$$|\lambda \mathbf{I} - \mathbf{B}| = 0$$

$$|\lambda \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{D} - \mathbf{A})| = 0$$

$$|\mathbf{D}^{-1}| \cdot |\lambda \mathbf{D} - (\mathbf{D} - \mathbf{A})| = 0$$

$$|\lambda \mathbf{D} - (\mathbf{D} - \mathbf{A})| = 0$$

$$\begin{vmatrix} \lambda a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nn} \end{vmatrix} = 0$$

定理： Jacobi迭代收敛的充要条件是上述行列式的所有根的绝对值小于1.

2. Seidel迭代

■ Seidel迭代矩阵: $B = (I - L)^{-1}U$

$$|\lambda I - B| = 0$$

$$|\lambda I - (I - L)^{-1}U| = 0$$

$$|\lambda(I - L)^{-1}(I - L) - (I - L)^{-1}U| = 0$$

$$|\lambda(I - L) - U| = 0, |\lambda D - \lambda DL - DU| = 0$$

$$\begin{vmatrix} \lambda a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nn} \end{vmatrix} = 0$$

定理: Seidel迭代收敛的充要条件是上述行列式的所有根

$\lambda_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 的绝对值小于1.

3. 松弛迭代 (SOR迭代)

■ 松弛迭代矩阵: $\mathbf{B}_w = (\mathbf{I} - \omega \mathbf{L})^{-1}[(1 - \omega)\mathbf{I} + \omega \mathbf{U}]$

$$|\lambda \mathbf{I} - (\mathbf{I} - \omega \mathbf{L})^{-1}[(1 - \omega)\mathbf{I} + \omega \mathbf{U}]| = 0$$

$$|\lambda(\mathbf{I} - \omega \mathbf{L}) - [(1 - \omega)\mathbf{I} + \omega \mathbf{U}]| = 0$$

$$|\lambda \mathbf{D} - \omega \lambda \mathbf{D} \mathbf{L} - [(1 - \omega)\mathbf{D} + \omega \mathbf{D} \mathbf{U}]| = 0$$

$$\begin{vmatrix} (\lambda + \omega - 1)a_{11} & \omega a_{12} & \cdots & \omega a_{1n} \\ \omega \lambda a_{21} & (\lambda + \omega - 1)a_{22} & \cdots & \omega a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \omega \lambda a_{n1} & \omega \lambda a_{n2} & \cdots & (\lambda + \omega - 1)a_{nn} \end{vmatrix} = 0$$

定理: 松弛迭代收敛的充要条件是上述行列式的所有根

$\lambda_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 的绝对值小于1.

定义： 如果矩阵 A 不能通过行交换和相应的列交换变成

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$$

其中 A_{11}, A_{22} 为方阵，则称 A 为不可约。

定义： 若矩阵 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 满足

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

且至少有一个 i 值使上式中不等式严格成立，则称矩阵 A 具有对角优势（**弱对角占优**）；若所有的 i 值对上式中不等式严格成立，则称矩阵 A 具有**强对角占优**。

定理：若 A 是强对角占优，或者 A 弱对角占优且不可约，则 $\det A \neq 0$.

定理 A 矩阵不可约的充要条件是 A 矩阵对应的邻接图是一个强连通图。

定理：若 A 是强对角占优，或者 A 弱对角占优且不可约，则

1. Jacobi迭代、Seidel迭代一定收敛
2. 若松弛因子 ω 满足 $0 < \omega \leq 1$ ，则松弛迭代一定收敛.

- 雅可比。若不收敛，则存在一个 λ_0 , $|\lambda_0| \geq 1$ 。

$$\begin{vmatrix} \lambda a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nn} \end{vmatrix} = 0$$

- 因为 $|\lambda_0| |a_{ii}| \geq |a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$, 即上式中的矩阵与A一样强对角占优, 故 $\det A \neq 0$), 矛盾。
- 赛德尔类似。

- 松弛法。若 $\lambda \geq 1$, 且 $0 < \omega \leq 1$, 则 $\lambda + \omega - 1 \geq \omega$,
且 $\lambda(1-\omega) \geq (1-\omega) \Rightarrow \lambda + \omega - 1 \geq \omega\lambda$

$$\begin{vmatrix} (\lambda + \omega - 1)a_{11} & \omega a_{12} & \cdots & \omega a_{1n} \\ \omega\lambda a_{21} & (\lambda + \omega - 1)a_{22} & \cdots & \omega a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega\lambda a_{n1} & \omega\lambda a_{n2} & \cdots & (\lambda + \omega - 1)a_{nn} \end{vmatrix} = 0$$

- 即上式中的矩阵与A一样强对角占优, 故上式不成立。

定理： 松弛法收敛的必要条件是 $0 < \omega < 2$.

- 对于任何系数矩阵 A ，若要松弛法收敛，其松弛因子 $\omega \in (0, 2)$.
- 当松弛因子满足条件 $0 < \omega < 2$ 时，并不是对所有的系数矩阵 A 松弛法均收敛.

- 因为松弛法收敛, 故有 $\rho(\mathbf{B}_w) < 1$.

$$\mathbf{B}_w = (\mathbf{I} - \omega \mathbf{L})^{-1}[(1 - \omega)\mathbf{I} + \omega \mathbf{U}]$$

- 所以 $|\det \mathbf{B}_w| = |\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n| < 1$ 。
- 因为 $|\mathbf{I} - \omega \mathbf{L}|^{-1} = 1$, $|(1 - \omega)\mathbf{I} + \omega \mathbf{U}| = |(1 - \omega)^n|$, 所以有
- $|(1 - \omega)^n| = |\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n| < 1$, 故 $|1 - \omega| < 1$, $0 < \omega < 2$.

□ **定理：**若矩阵 A 对称正定，且有 $0 < \omega < 2$ 时，
则松弛法收敛。

6.2 迭代法收敛性理论

例：取初始向量 $\mathbf{X}^{(0)} = (1,1,1)^T$ ，用SOR法求解方程组

$$\begin{bmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 \\ 30 \\ 24 \end{bmatrix}$$

使 $|\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}| < 10^{-5}$

答：SOR法的迭代公式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (1 - \omega)x_1^{(k)} + \frac{\omega}{4}[24 - 3x_2^{(k)}] \\ x_2^{(k+1)} = (1 - \omega)x_2^{(k)} + \frac{\omega}{4}[30 - 3x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)}] \\ x_3^{(k+1)} = (1 - \omega)x_3^{(k)} + \frac{\omega}{4}[-24 + x_2^{(k+1)}] \end{cases}$$

分别取 $\omega=1.8$ （迭代了65次）， $\omega=1.22$ （迭代了11次）

定理：设

1. A 为分块三对角阵，且 $a_{ii} \neq 0$
2. Jacobi迭代的迭代矩阵 B 的特征值为实值，且 $0 < \rho(B) < 1$.

则

① 当 $0 < \omega < 2$ 时，SOR法迭代收敛

② SOR法最优松弛因子

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(B)}}$$

定义：使松弛法收敛最快的松弛因子称最优松弛因子.

- 设 $B \in R^{n \times n}$, $\rho(B) > 1$, 但 B 有一个特征值满足 $|\lambda| < 1$ 。试证明存在初始向量 $\mathbf{x}^{(0)}$, 使得简单迭代式 $\mathbf{x}^{(k+1)} = B\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) 关于此初始向量收敛。

- 设 $A \in R^{n \times n}$ ，且对称正定，其最小和最大特征值分别是 λ_1, λ_n 。试证迭代法：

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + \alpha(b - AX^{(k)})$$

- 收敛的充要条件是 $0 < \alpha < \frac{2}{\lambda_n}$ 。又问参数取何值时迭代矩阵的谱半径最小。

□ 作业：3、4题