FDU 数值算法 3. 大型稀疏线性方程组的迭代解法

本文根据邵老师授课内容整理而成，并参考了以下教材:

- 数值线性代数 (第二版, 徐树方, 高立, 张平文) 第 4 章
- Applied Numerical Linear Algebra (J. Demmel) Chapter 6
- 应用数值线性代数 (J. Demmel) 第 6 章

欢迎批评指正!

3.0 Introduction

求解线性方程组 $Ax = b$ 的直接方法大多数都需要对系数矩阵 A 进行分解，
因而一般不能保持 A 的稀疏性.

> 考虑以下例子:
>
> $$\begin{bmatrix} * & * & * & * \\ * & * & & \\ * & & * & \\ * & & & * \end{bmatrix}$$
>
> 一步 Gauss 消元，这种类型的稀疏矩阵就变成稠密矩阵了.
> 不过也不是不能解决，我们可以将其行列重排为:
>
> $$\begin{bmatrix} * & & & * \\ & * & & * \\ & & * & * \\ * & * & * & * \end{bmatrix}$$
>
> 这样 Gauss 消元就能保持稀疏性了.

但在实际应用中，我们常常会遇到大型稀疏线性方程组的求解问题.
目前发展起来的求解稀疏线性方程组的方法主要有两类:

- 一类是稀疏直接法.
  它是直接法与某些稀疏矩阵技巧结合的产物，
  充分利用了给定线性方程组的系数矩阵的零元素的分布特点 (即矩阵的结构)，
  采用灵活的主元选取策略，使得分解出的矩阵因子尽可能地保持原有的稀疏性.
  本课程不涉及这类方法.
- 另一类是迭代法，即按照某种规则构造向量序列 $\{x^{(k)}\}$，使其极限 $x^\star$ 是方程组 $Ax = b$ 的精确解.
  我们将主要关注以下问题:
  - 如何构造迭代序列 $\{x^{(k)}\}$?
  - 构造的迭代序列是否收敛? 在什么情况下收敛?
  - 若迭代序列收敛，则收敛的速度如何?
  - 由于实际计算总是有限次的，故我们要讨论近似解的误差估计和迭代过程的中断处理等问题.

3.0.1 存储

维度超过百万级别的矩阵就称为大型矩阵.
稀疏矩阵一般按坐标方式 (COO format) 存储: (i, j, value) (并且按列存储，因为列向量比行向量更常用)
以如下矩阵为例:

$$A = \begin{bmatrix} * & & & \\ & * & * & \\ & & * & \\ * & & & * \end{bmatrix}$$

其存储如下:

$(m,n,\mathrm{nnz})=(4,4,6)$
$(i,j,\mathrm{value})=(0,0,*)$
$(i,j,\mathrm{value})=(3,0,*)$
$(i,j,\mathrm{value})=(1,1,*)$
$(i,j,\mathrm{value})=(1,2,*)$
$(i,j,\mathrm{value})=(2,2,*)$
$(i,j,\mathrm{value})=(3,3,*)$

其中 nnz 代表 number of non-zero elements，即非零元素的个数.
但实际应用中是可以存储零元素的，因为要完全不存储零元素也是有代价的: 我们需要将零元素识别出来.
存储复杂度为 $O(\mathrm{nnz}+1)$

从上述存储格式衍生出 CSC (Compressed Sparse Column) 格式，它包含以下三个数组:

1. `values[]`: 长度为 nnz，存储矩阵中的所有非零元素
2. `row_indices[]`: 长度为 nnz，存储与 `values[]` 中对应的每个非零元素所在的行索引
3. `col_ptr[]`: 长度为 $n+1$，存储每列的起始位置.
   最后一个元素指向 `values[]` 中最后一个非零元素的后一个位置.
   (这有助于通过两个指针值相减得到对应列的非零元素个数)

若稀疏矩阵 A 按 CSC 格式存储，则我们很容易开发出 $(A,x)\mapsto Ax$ 和 $(A,x)\mapsto A^{\mathrm{T}}x$ 的程序.
但其效率很糟糕，因为间接寻址是低效的.

其中 $(A,x)\mapsto Ax$ 操作是最重要的.
根据 Cayley-Hamilton 定理可知 A^{-1} 可以表示为 A 的 $n-1$ 次多项式 $p(A)=\sum_{i=0}^{n-1}c_iA^i$
因此 $x=A^{-1}b$ 可以写成 $x=p(A)b=\sum_{i=0}^{n-1}c_iA^ib$

> 任意复方阵都满足其特征方程.
> **(Cayley-Hamilton 定理, Matrix Analysis 定理 $2.4.3.2$)**
> 设 $p_A(t):=\det(tI_n-A)$ 是 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 的特征多项式，则我们有 $p_A(A)=0_{n\times n}$ 成立.
>
> - **(Matrix Analysis 推论 $2.4.3.4$)**
>   设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 非奇异
>   记其特征多项式 $p_A(t)=\det(tI-A)=t^n+c_{n-1}t^{n-1}+\cdots+c_1t+c_0$
>   根据 Cayley-Hamilton 定理我们有 $p_A(A)=A^n+c_{n-1}A^{n-1}+\cdots+c_1A+c_0I_n=0_{n\times n}$
>   则 $A^{-1}=-\frac{1}{c_0}(A^{n-1}+c_{n-1}A^{n-2}+\cdots+c_2A+c_1)$

考虑如下稀疏矩阵:

$$A=\begin{bmatrix}0&1&&&\\1&0&1&&\\&\ddots&\ddots&\ddots&\\&&1&0&1\\&&&1&0\end{bmatrix}_{n\times n}$$

根据高等线性代数 Homework 07 Problem 04 的结果可知其特征值和单位特征向量为:

$$\lambda_k=2\cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\quad x^{(k)}=\sqrt{\frac{2}{n+1}}\begin{bmatrix}\sin\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\\\sin\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right)\\\vdots\\\sin\left(\frac{(n-1)k\pi}{n+1}\right)\\\sin\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right)\end{bmatrix}\quad(k=1,\dots,n)$$

显然 A 的谱分解 $A=U\Lambda U^{\mathrm{H}}$ 中特征矩阵 $U\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是稠密矩阵.
因此直接对 A 求谱分解是不可行的.
但我们可以进行幂法迭代，收敛出前几个特征值和特征向量 (Google 通过这种方法计算最大的特征值)
(实际应用中我们可以有其他方法)

常用的稀疏矩阵资源网站:

- Matrix Market
- SuiteSparse Matrix Collection (by Tim Devis)

3.0.2 一维 Poisson 方程

考虑一维 Poisson 方程:

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}u(x) = f(x) \quad (0 < x < 1)$$

其中初值为 $u(0) = u(1) = 0$ (即 Dirichlet 边界条件)
我们使用有限差分去逼近上述方程:

$$\begin{aligned} h &:= \frac{1}{n+1} \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}u(x)\Big|_{x=(i-0.5)h} &\approx \frac{u_i - u_{i-1}}{h} \quad (i = 1, \dots, n) \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}u(x)\Big|_{x=(i+0.5)h} &\approx \frac{u_{i+1} - u_i}{h} \quad (i = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

将上述近似式相减并除以 h 便得到中心差分近似:

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}u(x)\Big|_{x=x_i} = \frac{2u_i - u_{i-1} - u_{i+1}}{h^2} + O\left(h^2 \cdot \left\|\frac{\mathrm{d}^4}{\mathrm{d}x^4}u(x)\right\|_\infty\right) \quad (i = 1, \dots, n)$$

为求解上述方程，我们丢弃截断误差，将其改写为:

$$\begin{gathered} -u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1} = h^2 f_i \quad (i = 1, \dots, n) \\ \Leftrightarrow \\ T_n u = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = h^2 \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} = h^2 f \end{gathered}$$

(应用数值线性代数, 引理 6.1)
对称正定三对角阵 T_n 的特征值和单位特征向量为:

$$\lambda_k = 2\left(1 - \cos\left(\frac{k}{n+1}\pi\right)\right) \quad x^{(k)} = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \begin{bmatrix} \sin\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \\ \sin\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right) \\ \vdots \\ \sin\left(\frac{(n-1)k\pi}{n+1}\right) \\ \sin\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right) \end{bmatrix} \quad (k = 1, \dots, n)$$

以 $n = 21$ 的情况为例:

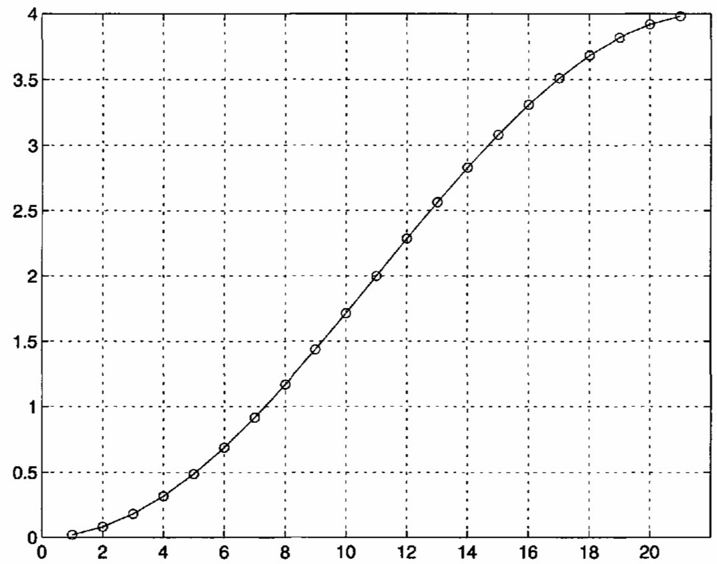


Fig. 6.1. *Eigenvalues of* T_{21}.

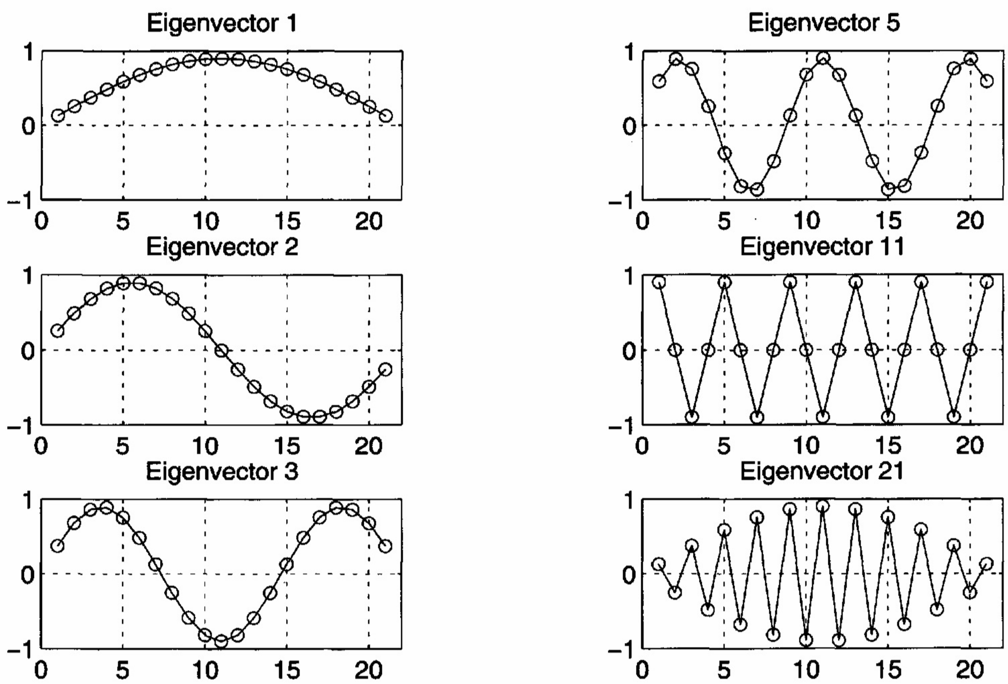


Fig. 6.2. *Eigenvectors of* T_{21}.

(应用数值线性代数, 习题 6.2)
T_n 的 Cholesky 分解和 LU 分解具有简单形式:

- T_n 的 Cholesky 分解 $T_n := L_n L_n^{\mathrm{T}}$ 中的 L_n 是下双对角阵:

$$
\begin{aligned}
L_n(i,i) &= \sqrt{\frac{i+1}{i}} \quad (i = 1, \dots, n) \\
L_n(i+1,i) &= \sqrt{\frac{i}{i+1}} \quad (i = 1, \dots, n-1)
\end{aligned}
$$

- T_n 的 Gauss 消去法的结果 $T_n := L_n U_n$ 中的 L_n 是单位下双对角阵，而 U_n 是上双对角阵:

$$
\begin{array}{rl}
L_n(i,i) = 1 & (i = 1, \dots, n) \\
L_n(i+1,i) = -\dfrac{i}{i+1} & (i = 1, \dots, n-1) \\
\hline
U_n(i,i) = \dfrac{i+1}{i} & (i = 1, \dots, n) \\
U_n(i,i+1) = -1 & (i = 1, \dots, n-1)
\end{array}
$$

3.0.3 二维 Poisson 方程

现在转向二维 Poisson 方程:

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,y)-\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,y)=f(x,y)\quad(0<x,y<1)$$

其中初值为 $\begin{cases}u(x,0)=u(x,1)=0 & (\forall\, 0\le x\le 1)\\ u(0,y)=u(1,y)=0 & (\forall\, 0\le y\le 1)\end{cases}$ (即 Dirichlet 边界条件)

结合一维 Poisson 方程的结论，我们可以使用有限差分去逼近上述方程: **(存疑: 似乎反了)**

$$\begin{aligned}h&:=\frac{1}{n+1}\\ -\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,y)\Big|_{x=x_i,y=y_j}&\approx\frac{2u_{ij}-u_{i-1,j}-u_{i+1,j}}{h^2}\quad(i,j=1,\ldots,n)\\ -\frac{\partial^2}{\partial y^2}u(x,y)\Big|_{x=x_i,y=y_j}&\approx\frac{2u_{ij}-u_{i,j-1}-u_{i,j+1}}{h^2}\quad(i,j=1,\ldots,n)\end{aligned}$$

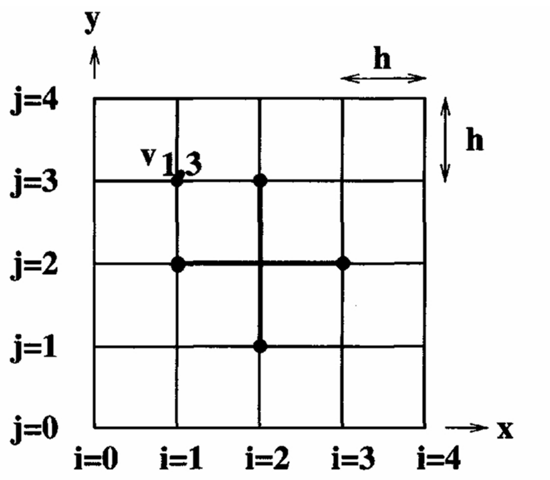
将上述近似相加得到:

$$-\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,y)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}u(x,y)\right\}\Big|_{x=x_i,y=y_j}\approx\frac{4u_{ij}-u_{i-1,j}-u_{i+1,j}-u_{i,j-1}-u_{i,j+1}}{h^2}$$

其中截断误差仍然是 $O(h^2)$ 级别的.
于是我们得到一组具有 n 个未知量 u_{ij} $(1\le i,j\le n)$ 的 n^2 维线性方程组:

$$4u_{ij}-u_{i-1,j}-u_{i+1,j}-u_{i,j-1}-u_{i,j+1}=h^2f_{ij}\quad(1\le i,j\le n)$$

其对应的十字称为 Poisson 方程的**五点型板** (stencil)，如图所示:



上述方程组具有如下紧凑形式:

$$\begin{gathered}4u_{ij}-u_{i-1,j}-u_{i+1,j}-u_{i,j-1}-u_{i,j+1}=h^2f_{ij}\quad(1\le i,j\le n)\\ u_{i,0}=u_{i,n+1}=u_{0,j}=u_{n+1,j}=0\ \ (i,j=1,\ldots,n)\\ \Updownarrow\\ T_nU+UT_n=h^2F\end{gathered}$$

$$T_n=\begin{bmatrix}2&-1&&\\-1&\ddots&\ddots&\\&\ddots&\ddots&-1\\&&-1&2\end{bmatrix}\qquad U=\begin{bmatrix}u_{1,1}&u_{1,2}&\cdots&u_{1,n}\\u_{2,1}&u_{2,2}&\cdots&u_{2,n}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\u_{n,1}&u_{n,2}&\cdots&u_{n,n}\end{bmatrix}\qquad F=\begin{bmatrix}f_{1,1}&f_{1,2}&\cdots&f_{1,n}\\f_{2,1}&f_{2,2}&\cdots&f_{2,n}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\f_{n,1}&f_{n,2}&\cdots&f_{n,n}\end{bmatrix}$$

$$\begin{gathered}\Updownarrow\\ T_{n\times n}\mathrm{vec}(U)=h^2\mathrm{vec}(F)\\ \text{where } T_{n\times n}:=(I_n\otimes T_n+T_n\otimes I_n)=\begin{bmatrix}T_n&&&\\&\ddots&&\\&&\ddots&\\&&&T_n\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}2I_n&-I_n&&\\-I_n&\ddots&\ddots&\\&\ddots&\ddots&-I_n\\&&-I_n&2I_n\end{bmatrix}\end{gathered}$$

> 以 $n=3$ 的情况为例:
>
> $$T_{n\times n}\mathrm{vec}(U)=\left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 4 & -1 & & -1 & & & & & \\ -1 & 4 & -1 & & -1 & & & & \\ & -1 & 4 & & & -1 & & & \\ \hline -1 & & & 4 & -1 & & -1 & & \\ & -1 & & -1 & 4 & -1 & & -1 & \\ & & -1 & & -1 & 4 & & & -1 \\ \hline & & & -1 & & & 4 & -1 & \\ & & & & -1 & & -1 & 4 & -1 \\ & & & & & -1 & & -1 & 4 \end{array}\right]\begin{bmatrix} u_{1,1}\\ u_{2,1}\\ u_{3,1}\\ u_{1,2}\\ u_{2,2}\\ u_{3,2}\\ u_{1,3}\\ u_{2,3}\\ u_{3,3}\end{bmatrix}=h^2\begin{bmatrix} f_{1,1}\\ f_{2,1}\\ f_{3,1}\\ f_{1,2}\\ f_{2,2}\\ f_{3,2}\\ f_{1,3}\\ f_{2,3}\\ f_{3,3}\end{bmatrix}=h^2\mathrm{vec}(F)$$

> **(存疑)** 当边界条件不是 Dirichlet 边界条件时，我们只需在等式右端引入一个边界条件矩阵 B 即可:
> (参考 Homework 13 Problem 3)
>
> $$\begin{gathered} 4u_{ij}-u_{i-1,j}-u_{i+1,j}-u_{i,j-1}-u_{i,j+1}=h^2 f_{ij}\quad(1\le i,j\le n)\\ \Updownarrow\\ T_nU+UT_n=h^2F+B \end{gathered}$$
>
> $$T_n=\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1\\ & & -1 & 2\end{bmatrix}\quad U=\begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,n}\\ u_{2,1} & u_{2,2} & \cdots & u_{2,n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ u_{n,1} & u_{n,2} & \cdots & u_{n,n}\end{bmatrix}\quad F=\begin{bmatrix} f_{1,1} & f_{1,2} & \cdots & f_{1,n}\\ f_{2,1} & f_{2,2} & \cdots & f_{2,n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ f_{n,1} & f_{n,2} & \cdots & f_{n,n}\end{bmatrix}$$
>
> $$B=\begin{bmatrix} u_{1,0}+u_{0,1} & u_{0,2} & \cdots & u_{0,n-1} & u_{0,n}+u_{1,n+1}\\ u_{2,0} & 0 & \cdots & 0 & u_{2,n+1}\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots\\ u_{n-1,0} & 0 & \cdots & 0 & u_{n-1,n+1}\\ u_{n,0}+u_{n+1,1} & u_{n+1,2} & \cdots & u_{n+1,n-1} & u_{n+1,n}+u_{n,n+1}\end{bmatrix}$$
>
> $$\begin{gathered}\Updownarrow\\ T_{n\times n}\mathrm{vec}(U)=h^2\mathrm{vec}(F)+\mathrm{vec}(B)\end{gathered}$$
>
> $$\text{where } T_{n\times n}:=(I_n\otimes T_n+T_n\otimes I_n)=\begin{bmatrix} T_n & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & T_n\end{bmatrix}+\begin{bmatrix} 2I_n & -I_n & & \\ -I_n & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I_n\\ & & -I_n & 2I_n\end{bmatrix}$$

系数矩阵 $T_{n\times n}:=(I_n\otimes T_n+T_n\otimes I_n)$ 是 n^2 阶方阵，它具有以下性质:

- 若 U 中顶点排列次序发生改变，则 $T_{n\times n}$ 的性状也会发生改变，但可以证明 $T_{n\times n}$ 的特征值仍旧不变.
- $T_{n\times n}$ 是块三对角阵，若不看分块的话，共有五条对角线上有非零元素 (因此 $T_{n\times n}$ 是稀疏的)
- $T_{n\times n}$ 是不可约对角占优的.
- $T_{n\times n}$ 是对称正定的.

回忆起对称正定三对角阵 T_n 的特征值和单位特征向量为:

$$\lambda_k=2\left(1-\cos\left(\frac{k}{n+1}\pi\right)\right)\quad x^{(k)}=\sqrt{\frac{2}{n+1}}\begin{bmatrix}\sin\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\\ \sin\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right)\\ \vdots\\ \sin\left(\frac{(n-1)k\pi}{n+1}\right)\\ \sin\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right)\end{bmatrix}\quad(k=1,\dots,n)$$

因此 $T_{n\times n}:=(I_n\otimes T_n+T_n\otimes I_n)$ 的特征值为 $\lambda_{p,q}=1\cdot\lambda_p+\lambda_q\cdot 1=2(2-\cos\frac{p\pi}{n}-\cos\frac{q\pi}{n})$
对应的单位特征向量为 $z^{(p,q)}=\mathrm{vec}(x^{(p)}(x^{(q)})^{\mathrm{T}})$
即矩阵 $x^{(p)}(x^{(q)})^{\mathrm{T}}$ 按列 "拉直" 得到的 n^2 维向量:

$$z^{(p,q)} = \mathrm{vec}(x^{(p)}(x^{(q)})^{\mathrm{T}}) = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \begin{bmatrix} \sin\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) x^{(p)} \\ \sin\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right) x^{(p)} \\ \vdots \\ \sin\left(\frac{(n-1)k\pi}{n+1}\right) x^{(p)} \\ \sin\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right) x^{(p)} \end{bmatrix}$$

以 $n = 10$ 为例:

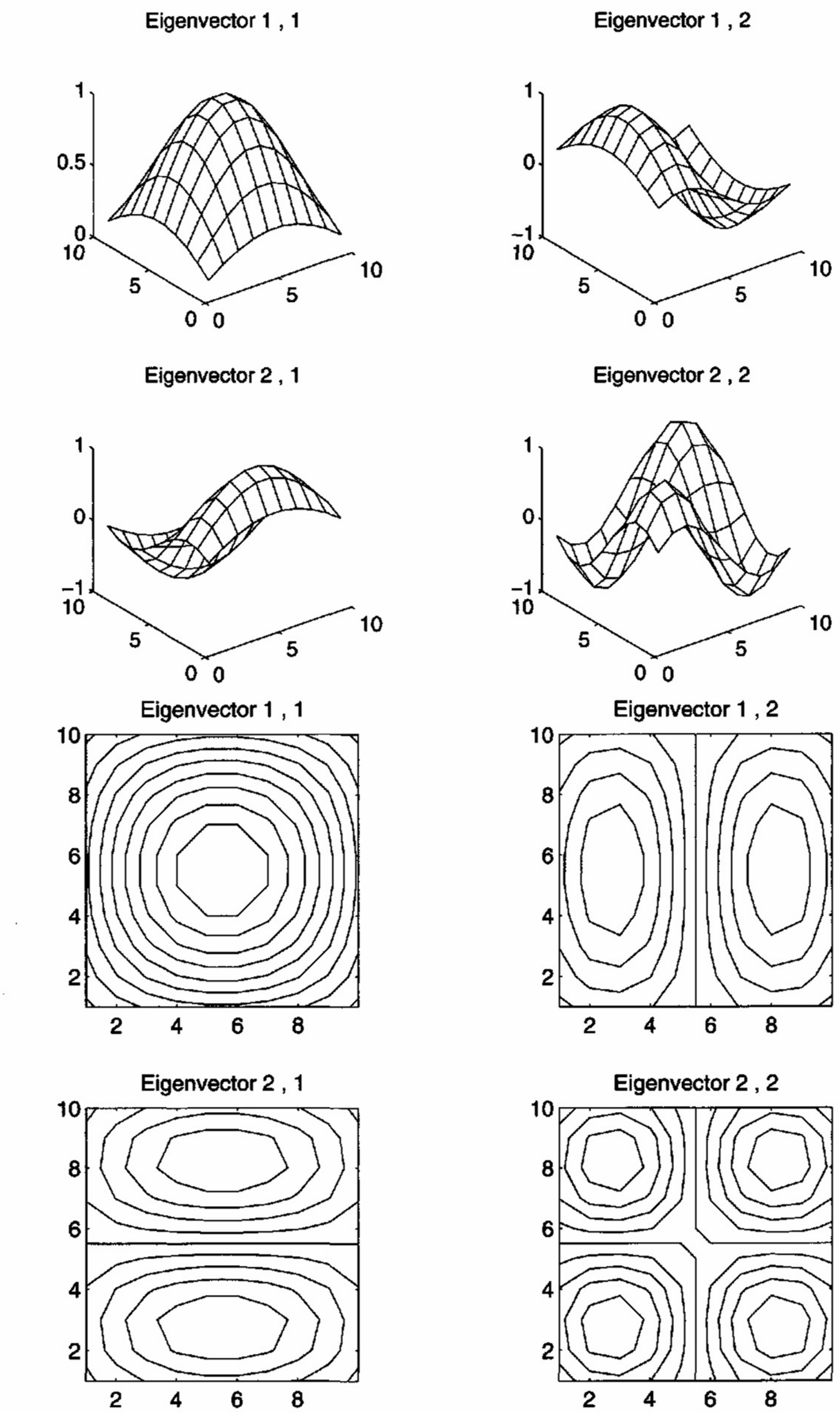


Fig. 6.3. *Three-dimensional and contour plots of first four eigenvectors of the* 10*-by-*10 *Poisson equation.*

(二维 Poisson 方程 Jacobi 法单步, 应用数值线性代数, 算法 6.2)

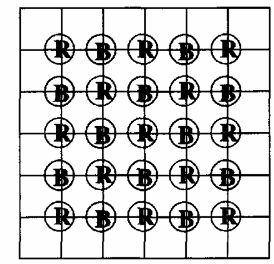
$$
\begin{aligned}
&\text{for } i = 1:n \\
&\quad \text{for } j = 1:n \\
&\quad\quad u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)} + h^2 f_{ij}) \\
&\quad \text{end} \\
&\text{end}
\end{aligned}
$$

注意到所有的新值 $u_{i,j}^{(k+1)}$ 都可以彼此独立的计算.
因此当 $u_{i,j}^{(k+1)}$ 被存放在一个 $n+2$ 阶矩阵 U 中 (这个矩阵补全了边界值) 时，
我们可以只用一条 Matlab 语句来实现上述算法.

```
U(2:n+1, 2:n+1) = 0.25 * (U(1:n,2:n+1) + U(3:n+2,2:n+1) + U(2:n+1,1:n) + U(2:n+1,3:n+2) + h^2 * F);
```

其中 $h = \frac{1}{n+1}$，而 $f_{i,j}$ 的值存储在 n 阶矩阵 F 中.
(具体实现参见 Homework 11 Problem 05)

红黑序:
(红节点的坐标之和为偶数，黑节点的坐标之和为奇数)
我们首先使用来自黑节点的旧数据更新所有的红节点，
再使用来自红节点的新数据更新所有的黑节点.



于是得到如下算法:
(二维 Poisson 方程红黑序 Gauss-Seidel 法单步, 应用数值线性代数, 算法 6.4)

$$
\begin{aligned}
&\text{for all nodes } (i,j) \text{ that are red (i.e. } i+j \text{ is even)} \\
&\quad u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)} + h^2 f_{ij}) \\
&\text{end} \\
&\text{for all nodes } (i,j) \text{ that are black (i.e. } i+j \text{ is odd)} \\
&\quad u^{(k+1)_{i,j}} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j}^{(k+1)} + u_{i+1,j}^{(k+1)} + u_{i,j-1}^{(k+1)} + u_{i,j+1}^{(k+1)} + h^2 f_{ij}) \\
&\text{end}
\end{aligned}
$$

求解二维 Poisson 问题 Gauss-Seidel 迭代更快，其每步迭代的效果相当于 Jacobi 迭代的两步.
对于大多数经典问题来说，都是 Gauss-Seidel 迭代更快.
(具体实现参见 Homework 11 Problem 05)

3.1 单步线性定常迭代法

在众多迭代法中，最简单最基本的就是单步线性定常迭代法.
给定 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，我们可将其拆分为:

$$A = M - N$$

其中 M 非奇异 (我们希望 $M \approx A$ 且容易求逆)

> 例如使用 Toepliz 分解:
>
> $$A := H + K = \frac{A + A^{\rm H}}{2} + \frac{A - A^{\rm H}}{2}$$
>
> 我们记:
>
> $$\begin{aligned} M &:= H + \alpha I \\ N &:= -K + \alpha I \\ A &:= M - N \end{aligned}$$

> 其中 $\alpha > 0$ 为一个常数，以保证 $M = H + \alpha I$ 可逆 (但它可能不容易求逆)

于是我们有:

$$
\begin{aligned}
Ax = (M-N)x = b \\
\Updownarrow \\
Mx = b + Nx \\
\Updownarrow \\
x = M^{-1}Nx + M^{-1}b
\end{aligned}
$$

我们可以据此写出单步线性定常迭代法的通用格式:

$$
\begin{aligned}
x^{(k+1)} = M^{-1}Nx^{(k)} + M^{-1}b \\
\Updownarrow \\
x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + c \, (\text{where} \begin{cases} B = M^{-1}N \\ c = M^{-1}b \end{cases})
\end{aligned}
$$

我们首先从最简单的 Jacobi 迭代法讲起.

3.1.1 Jacobi 迭代法

给定 $\begin{cases} A \in \mathbb{R}^{n\times n} \\ b \in \mathbb{R}^n \end{cases}$ 考虑非奇异线性方程组 $Ax = b$
我们将非奇异矩阵 $A = [a_{ij}]$ 分解为:

$$
A = D - L - U
$$

$$
D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}
$$

假设 D 非奇异，即 A 的对角元均非零，则 $Ax = b$ 可以改写为:

$$
\begin{aligned}
Ax = (D-L-U)x = b \\
\Updownarrow \\
x = D^{-1}(L+U)x + D^{-1}b \\
\Updownarrow \\
x = Bx + c \;\; \text{where } \begin{cases} B = D^{-1}(L+U) \\ c = D^{-1}b \end{cases}
\end{aligned}
$$

给定初始向量 $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)})^{\mathrm{T}}$
我们将 $x^{(0)}$ 带入 $x = Bx + c$ 的右侧，得到 $x^{(1)} = Bx^{(0)} + c$
再将 $x^{(1)}$ 带入 $x = Bx + c$ 的右侧，又可得到 $x^{(2)} = Bx^{(1)} + c$
以此类推，我们有 $x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c \;\; (k = 1, 2, \ldots)$
这就是 **Jacobi 迭代法**，其中 B 为迭代矩阵，c 为常数项.

Jacobi 迭代法中，$x^{(k)}$ 的所有分量都由 $x^{(k-1)}$ 确定，因此先计算哪个分量都一样.

3.1.2 Gauss-Seidel 迭代法

现在假设不按 Jacobi 迭代格式.
记:

$$
B = \begin{bmatrix} b_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ b_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} a_{11}^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & a_{nn}^{-1} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} l_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ l_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ u_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \right)
$$

于是 $b_k^{\mathrm{T}} = a_{kk}^{-1}(l_k^{\mathrm{T}} + u_k^{\mathrm{T}}) \;\; (k = 1, \ldots, n)$
回顾之前的记号:

$$A = D - L - U$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \qquad L = \begin{bmatrix} l_1^{\mathrm{T}} \\ l_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ l_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} u_1^{\mathrm{T}} \\ u_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ u_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

- 计算第 1 个分量:

$$\begin{aligned} x_1^{(k)} &= b_1^{\mathrm{T}} x^{(k-1)} + c_1 \\ &= a_{11}^{-1} (l_1^{\mathrm{T}} + u_1^{\mathrm{T}}) x^{(k-1)} + c_1 \\ &= a_{11}^{-1} u_1^{\mathrm{T}} x^{(k-1)} + c_1 \quad (\text{note that } l_1 = 0_n) \\ &= a_{11}^{-1} (l_1^{\mathrm{T}} x^{(k)} + u_1^{\mathrm{T}} x^{(k-1)}) + c_1 \end{aligned}$$

- 在计算第 2 个分量 $x_2^{(k)}$ 时，第 1 个分量 $x_1^{(k)}$ 已经算出，于是我们可用 $x_1^{(k)}$ 代替 $x_1^{(k-1)}$

$$\begin{aligned} x_2^{(k)} &= b_2^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{bmatrix} + c_2 \\ &= a_{22}^{-1} (l_2^{\mathrm{T}} + u_2^{\mathrm{T}}) \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{bmatrix} + c_2 \\ &= a_{22}^{-1} ([-a_{21}, 0, 0, \ldots, 0] + [0, 0, -a_{23}, \ldots, -a_{2n}]) \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{bmatrix} + c_2 \\ &= a_{22}^{-1} \left([-a_{21}, 0, 0, \ldots, 0] \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{bmatrix} + [0, 0, -a_{23}, \ldots, -a_{2n}] \begin{bmatrix} x_1^{(k-1)} \\ x_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{bmatrix} \right) + c_2 \\ &= a_{22}^{-1} (l_2^{\mathrm{T}} x^{(k)} + u_2^{\mathrm{T}} x^{(k-1)}) + c_2 \end{aligned}$$

- 以此类推，在计算第 m 个分量 $x_l^{(k)}$ 时，第 1 个分量至第 $m-1$ 个分量 $x_1^{(k)}, \ldots, x_{m-1}^{(k)}$ 已经算出，于是我们可用 $x_1^{(k)}, \ldots, x_{m-1}^{(k)}$ 代替 $x_1^{(k-1)}, \ldots, x_{m-1}^{(k-1)}$

$$
\begin{aligned}
x_m^{(k)} &= b_m^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_{m-1}^{(k)} \\ x_m^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{bmatrix} + c_m \\
&= a_{mm}^{-1}(l_m^{\mathrm{T}} + u_m^{\mathrm{T}}) \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_{m-1}^{(k)} \\ x_m^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{bmatrix} + c_m \\
&= a_{mm}^{-1}([-a_{m1}, \dots, -a_{m,m-1}, 0, 0, \dots, 0] + [0, \dots, 0, 0, -a_{m,m+1}, \dots, -a_{m,n}]) \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_{m-1}^{(k)} \\ x_m^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{bmatrix} + c_m \\
&= a_{mm}^{-1} \left([-a_{m1}, \dots, -a_{m,m-1}, 0, 0, \dots, 0] \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_{m-1}^{(k)} \\ x_m^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{bmatrix} + [0, \dots, 0, 0, -a_{m,m+1}, \dots, -a_{m,n}] \begin{bmatrix} x_1^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_{m-1}^{(k-1)} \\ x_m^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{bmatrix} \right) + c_m \\
&= a_{mm}^{-1}(l_m^{\mathrm{T}} x^{(k)} + u_m^{\mathrm{T}} x^{(k-1)}) + c_m
\end{aligned}
$$

综上所述，我们得到:

$$
\begin{cases}
x_1^{(k)} = a_{11}^{-1}(l_1^{\mathrm{T}} x^{(k)} + u_1^{\mathrm{T}} x^{(k-1)}) + c_1 \\
\quad\vdots \\
x_n^{(k)} = a_{nn}^{-1}(l_n^{\mathrm{T}} x^{(k)} + u_n^{\mathrm{T}} x^{(k-1)}) + c_n
\end{cases}
$$

$$\Updownarrow$$

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

由于我们假设 D 非奇异 (对角元均非零)，故 $D - L$ 也是非奇异的.
因此上式可改写为 $x^{(k)} = (D-L)^{-1}Ux^{(k-1)} + (D-L)^{-1}b \ \ (k = 1, 2, \dots)$
这就是 **Gauss-Seidel 迭代法**.
我们称 $(D-L)^{-1}U$ 为 G-S 迭代法的迭代矩阵，而 $(D-L)^{-1}b$ 为常数项.

3.1.3 单步线性定常迭代法

考虑非奇异线性方程组 $Ax = b$，假设 A 的对角元均非零.
回顾之前的记号:

$$A = D - L - U$$

$$
D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \qquad
L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \qquad
U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}
$$

对比 Jacobi 迭代格式和 Gauss-Seidel 迭代格式 $\begin{cases} x^{(k)} = D^{-1}(L+U)x^{(k-1)} + D^{-1}b \\ x^{(k)} = (D-L)^{-1}Ux^{(k-1)} + (D-L)^{-1}b \end{cases}$
我们发现它们有一个共同点:
新近似解 $x^{(k)}$ 是已知近似解 $x^{(k-1)}$ 的线性函数，且仅与 $x^{(k-1)}$ 有关，与其他已知近似解无关.
即它们可以抽象成 $x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c$ 的形式，
对于 Jacobi 迭代法有 $\begin{cases} B = D^{-1}(L+U) \\ c = D^{-1}b \end{cases}$，对于 Gauss-Seidel 迭代法有 $\begin{cases} B = (D-L)^{-1}U \\ c = (D-L)^{-1}b \end{cases}$

我们称形如 $x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c$ 的迭代法为**单步线性定常迭代法**.
若对于任意初始向量 $x^{(0)}$，该迭代格式产生的向量序列 $\{x^{(k)}\}$ 都有极限，则称该迭代法收敛;
否则我们称它是发散的.

- 若迭代法收敛，并记其极限为 $x^\star$，
  则对 $x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c$ 两侧同时取极限，即得到 $x^\star = Bx^\star + c$
  表明 $x^\star$ 恰为方程组 $x = Bx + c$ 的解.
  对于充分大的 k，$x^{(k)}$ 便可作为 $x = Bx + c$ 的近似解.
- 进一步，若方程组 $x = Bx + c$ 和原方程组 $Ax = b$ 等价，
  即存在非奇异矩阵 $G \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 使得 $\begin{cases} A = G(I_n - B) \\ b = Gc \end{cases}$ (此时称迭代法与 $Ax = b$ **相容**)，
  则迭代法的极限 $x^\star$ 也是非奇异线性方程组 $Ax = b$ 的唯一解.
  此时，对于充分大的 k，$x^{(k)}$ 便可作为 $Ax = b$ 的近似解.

从实用角度来讲，我们只对相容的收敛迭代法感兴趣.
显然对于任意一个满足 "A 对角元均非零" 的非奇异线性方程组 $Ax = b$，
Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法都与之相容.
但它们的收敛条件是什么呢?

3.2 收敛性理论

3.2.1 收敛的充要条件

设 $x^\star$ 是非奇异线性方程组 $Ax = b$ 的精确解.
考虑与 $Ax = b$ 相容的单步线性定常迭代法 $x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c$ 产生的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$
若该迭代法收敛，则其极限 $x^\star$ 满足 $x^\star = Bx^\star + c$

定义 $x^{(k)}$ 误差向量为 $e^{(k)} = x^{(k)} - x^\star$
联立 $\begin{cases} x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c \\ x^\star = Bx^\star + c \\ e^{(k)} = x^{(k)} - x^\star \\ e^{(k-1)} = x^{(k-1)} - x^\star \end{cases}$ 可得 $e^{(k)} = B \cdot e^{(k-1)} \ \ (k = 1, 2, \ldots)$
于是我们有 $e^{(k)} = B^k e^{(0)} \ \ (k = 1, 2, \ldots)$
因此 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^\star$ (即 $\lim\limits_{k\to\infty} e^{(k)} = 0_n$) 的充要条件是 $\lim\limits_{k\to\infty} B^k = O_{n\times n}$

- **(数值线性代数, 引理** $4.2.1$**)**
  单步线性定常迭代法 $x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c$ 收敛的充要条件是 $\lim\limits_{k\to\infty} B^k = 0_{n\times n}$
- 定义 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 的谱半径为 $\rho(A) := \max\limits_{1\leq i\leq n} |\lambda_i(A)|$
  (数值线性代数, 定理 $2.1.7$**)**
  对于任意 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，当且仅当 $\rho(A) < 1$ 时 $\lim\limits_{k\to\infty} A^k = 0_{n\times n}$
  也就是说，当且仅当 $\rho(A) < 1$ 时 Neumann 级数 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} A^k$ 收敛 (且收敛到 $(I - A)^{-1}$)
- 结合上述两个定理，我们有:
  (数值线性代数, 定理 $4.2.1$**)**
  单步线性定常迭代法 $x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c$ 收敛的充要条件是 $\rho(B) < 1$
  这表明迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 的收敛性仅取决于迭代矩阵 B 的谱半径，
  而与初始向量 $\{x^{(0)}\}$ 的选取和常数项 c 无关.

考虑一个满足 "A 对角元均非零" 的非奇异线性方程组 $Ax = b$
回顾之前的记号:

$$A = D - L - U$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

Jacobi 迭代矩阵 $D^{-1}(L+U)$ 和 Gauss-Seidel 迭代矩阵 $(D-L)^{-1}U$ 的谱半径之间并无直接联系.
因此，有时 Jacobi 迭代法收敛而 Gauss-Seidel 迭代法发散，
有时 Gauss-Seidel 迭代法收敛而 Jacobi 迭代法发散，有时它们都收敛，有时它们都发散.

- 考虑以下方阵:

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

此时我们有:

$$D = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & \\ -1 & 0 & \\ -2 & -2 & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ & 0 & -1 \\ & & 0 \end{bmatrix}$$

Jacobi 迭代矩阵为:

$$B_{\text{Jacobi}} := D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -2 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -2 & 0 \end{bmatrix}$$

其特征多项式为 λ^3，特征值为 $0,0,0$，谱半径 $\rho(B_{\text{Jacobi}}) = 0 < 1$
因此 Jacobi 迭代法收敛.

Gauss-Seidel 迭代矩阵为:

$$B_{\text{G-S}} := (D-L)^{-1}U = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 1 & 1 & \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ & 0 & -1 \\ & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ -1 & 1 & \\ & -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ & 0 & -1 \\ & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ & 2 & -3 \\ & & 2 \end{bmatrix}$$

其特征多项式为 $\lambda(\lambda-2)^2$，特征值为 $0,2,2$，谱半径 $\rho(B_{\text{G-S}}) = 2 \geq 1$
因此 Gauss-Seidel 迭代发散.

- 考虑以下方阵:

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

此时我们有:

$$D = \begin{bmatrix} 2 & & \\ & 1 & \\ & & -2 \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & \\ -1 & 0 & \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ & 0 & -1 \\ & & 0 \end{bmatrix}$$

Jacobi 迭代矩阵为:

$$B_{\text{Jacobi}} := D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} 2 & & \\ & 1 & \\ & & -2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -1 & 0 & -1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

其特征多项式为 $\lambda(\lambda^2 + \frac{5}{4})$，特征值为 $0, \pm\frac{\sqrt{5}}{2}i$，谱半径 $\rho(B_{\text{Jacobi}}) := \frac{\sqrt{5}}{2} \geq 1$
因此 Jacobi 迭代法发散.

Gauss-Seidel 迭代矩阵为:

$$B_{\text{G-S}} := (D-L)^{-1}U = \begin{bmatrix} 2 & & \\ 1 & 1 & \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ & 0 & -1 \\ & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ & 0 & -1 \\ & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ & & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

其特征多项式为 $\lambda(\lambda+\frac{1}{2})^2$，特征值为 $0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$，谱半径 $\rho(B_{\text{G-S}})=\frac{1}{2}<1$
因此 Gauss-Seidel 迭代收敛.

3.2.2 误差估计

设 $x^\star$ 是非奇异线性方程组 $Ax=b$ 的精确解.
考虑与 $Ax=b$ 相容的单步线性定常迭代法 $x^{(k)}=Bx^{(k-1)}+c$ 产生的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$

(数值线性代数, 定理 $4.2.2$)
若迭代矩阵 B 的范数 $\|B\|=q<1$ (根据**谱半径定理**，这保证了 $\rho(B)\leq\|B\|<1$，因而迭代法收敛)，
则误差向量的范数 $\|e^{(k)}\|=\|x^{(k)}-x^\star\|\leq\frac{q^k}{1-q}\|x^{(1)}-x^{(0)}\|$

- 在实际计算中，定理中的相容范数 $\|\cdot\|$ 通常选用 $\|\cdot\|_1$ 或 $\|\cdot\|_\infty$ (因为它们容易计算)
- **证明:** 根据之前的结论，我们有 $e^{(k)}=B^ke^{(0)}$
  两边取范数，即有 $\|e^{(k)}\|=\|B^ke^{(0)}\|\leq\|B\|^k\cdot\|e^{(0)}\|=q^k\|e^{(0)}\|$
  下面估计 $\|e^{(0)}\|$:
  $$\begin{aligned}\|e^{(0)}\|&=\|x^{(0)}-x^\star\|\\&=\|x^{(0)}-x^{(1)}+x^{(1)}-x^\star\|\\&\leq\|x^{(0)}-x^{(1)}\|+\|x^{(1)}-x^\star\|\\&=\|x^{(0)}-x^{(1)}\|+\|Be^{(0)}\|\quad(\text{note that }\|x^{(1)}-x^\star\|=\|e^{(1)}\|=\|Be^{(0)}\|\leq\|B\|\|e^{(0)}\|=q\|e^{(0)}\|)\\&\leq\|x^{(1)}-x^{(0)}\|+q\|e^{(0)}\|\end{aligned}$$
  于是有 $\|e^{(0)}\|\leq\frac{1}{1-q}\|x^{(1)}-x^{(0)}\|$
  因此 $\|e^{(k)}\|\leq q^k\|e^{(0)}\|\leq\frac{q^k}{1-q}\|x^{(1)}-x^{(0)}\|$，命题得证.

上述定理给出的误差估计往往偏高，在实际计算时用它控制迭代次数的效果并不好.
所以给出下面的定理:
(数值线性代数, 定理 $4.2.3$)
若迭代矩阵 B 的范数 $\|B\|=q<1$ (根据**谱半径定理**，这保证了 $\rho(B)\leq\|B\|<1$，因而迭代法收敛)，
则误差向量的范数 $\|e^{(k)}\|=\|x^{(k)}-x^\star\|\leq\frac{q}{1-q}\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\|$

- **证明:**
  $$\begin{aligned}\|e^{(k)}\|&=\|Be^{(k-1)}\|\\&\leq\|B\|\|e^{(k-1)}\|\\&=q\|e^{(k-1)}\|\\&=q\|x^{(k-1)}-x^\star\|\\&\leq q(\|x^{(k-1)}-x^{(k)}\|+\|x^{(k)}-x^\star\|)\\&=q\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\|+q\|e^{(k)}\|\end{aligned}$$
  于是有 $\|e^{(k)}\|\leq\frac{q}{1-q}\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\|$，命题得证.
- 上述定理表明: 在 $\|B\|=q<1$ 的前提条件下，
  当相邻两次的迭代解 $x^{(k-1)}$ 和 $x^{(k)}$ 很接近时，$x^{(k)}$ 与精确解 $x^{(k)}$ 也很接近.
  在实际计算中，这个误差估计用来控制迭代次数 (构造终止条件) 是非常方便的.

3.2.3 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法的收敛性

考虑一个满足 "A 对角元均非零" 的非奇异线性方程组 $Ax=b$
回顾之前的记号:

$$A=D-L-U$$

$$D=\begin{bmatrix}a_{11}&&&\\&a_{22}&&\\&&\ddots&\\&&&a_{nn}\end{bmatrix}\quad L=\begin{bmatrix}0&&&\\-a_{21}&0&&\\\vdots&\ddots&\ddots&\\-a_{n1}&\cdots&-a_{n,n-1}&0\end{bmatrix}\quad U=\begin{bmatrix}0&-a_{12}&\cdots&-a_{1n}\\&0&\ddots&\vdots\\&&\ddots&-a_{n-1,n}\\&&&0\end{bmatrix}$$

Jacobi 迭代矩阵 $D^{-1}(L+U)$ 和 Gauss-Seidel 迭代矩阵 $(D-L)^{-1}U$ 的谱半径之间并无直接联系，
但是它们的范数之间有一些联系.
考虑到 Jacobi 迭代矩阵 $D^{-1}(L+U)$ 要比 Gauss-Seidel 迭代矩阵 $(D-L)^{-1}U$ 更容易计算，
我们可以利用 Jacobi 迭代矩阵构造 Gauss-Seidel 迭代法的收敛条件，从而规避更复杂的计算.

对于 Jacobi 迭代法记 $\begin{cases} B^{(1)} = D^{-1}(L+U) \\ c^{(1)} = D^{-1}b \end{cases}$，对于 Gauss-Seidel 迭代法记 $\begin{cases} B^{(2)} = (D-L)^{-1}U \\ c^{(2)} = (D-L)^{-1}b \end{cases}$

(数值线性代数, 定理 $4.2.4$)
若 $\|B^{(1)}\|_\infty < 1$ (这保证了 Jacobi 迭代法收敛)，
则 $\|B^{(2)}\|_\infty < 1$ (这说明了 Gauss-Seidel 迭代法也收敛)，
且 Gauss-Seidel 迭代法的误差向量的范数 $\|e^{(k)}\|_\infty = \|x^{(k)} - x^\star\|_\infty \le \frac{\mu^k}{1-\mu}\|x^{(1)} - x^{(0)}\|_\infty$
其中 $\mu = \max_{1\le i\le n}\left\{\frac{\sum_{j=i-1}^n |b_{ij}^{(1)}|}{1-\sum_{j=1}^{i-1}|b_{ij}^{(1)}|}\right\} \le \|B^{(1)}\|_\infty < 1$

(数值线性代数, 定理 $4.2.5$)
若 $\|B^{(1)}\|_1 < 1$ (这保证了 Jacobi 迭代法收敛)，
则 $\rho(B^{(2)}) < 1$ (这说明了 Gauss-Seidel 迭代法也收敛)，
且 Gauss-Seidel 迭代法的误差向量的范数 $\|e^{(k)}\|_1 = \|x^{(k)} - x^\star\|_1 \le \frac{\mu^k}{(1-\mu)(1-s)}\|x^{(1)} - x^{(0)}\|_1$
其中:

$$\mu = \max_{1\le j\le n}\left\{\frac{\sum_{i=1}^{j-1}|b_{ij}^{(1)}|}{1-\sum_{i=j+1}^n |b_{ij}^{(1)}|}\right\} \le \|B^{(1)}\|_1 < 1$$
$$s = \max_{1\le j\le n}\left\{\sum_{i=j+1}^n |b_{ij}^{(1)}|\right\}$$

考虑一个满足 "A 对角元均非零" 的非奇异线性方程组 $Ax=b$
若系数矩阵 A 还满足某些性质，我们还能推出一些更好的结论.
回顾之前的记号:

$$A = D - L - U$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

(数值线性代数, 定理 $4.2.6$)
若 A 是对称矩阵，且对角元均为正数 (即 $a_{ii} > 0 \ (i=1,\dots,n)$)，
则当且仅当 A 和 $2D-A$ 都正定时 Jacobi 迭代法收敛.

- **证明:** 记 Jacobi 迭代矩阵为 $B = D^{-1}(L+U) = D^{-1}(D-A) = I - D^{-1}A$
  由于 A 对角元均为正数，故 $D = \operatorname{diag}(a_{11},\dots,a_{nn})$ 是一个正定的对角阵.
  我们可以定义 $D^{\frac{1}{2}} := \operatorname{diag}(\sqrt{a_{11}},\dots,\sqrt{a_{nn}})$
  于是有 $B = I - D^{-1}A = D^{-\frac{1}{2}}(I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{\frac{1}{2}}$
  可以推出 $\begin{cases} I - B = D^{-\frac{1}{2}}(D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{\frac{1}{2}} \\ I + B = D^{-\frac{1}{2}}(2I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{\frac{1}{2}} \end{cases}$

  因为 A 是对称阵，所以 B 也是对称阵 (因此 B 的特征值均为实数)
  我们知道 Jacobi 迭代法收敛，当且仅当迭代矩阵 B 的谱半径 $\rho(B) < 1$，
  也就等价于 $|\lambda_i(B)| < 1 \ (i=1,\dots,n)$，
  即等价于 $-1 < \lambda_i(B) < 1 \ (i=1,\dots,n)$ (注意到 B 的特征值均为实数)，
  即等价于 $I-B$ 和 $I+B$ 均正定，
  即等价于 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 和 $2I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 均正定 (相似变换不改变特征值)，
  即等价于 A 和 $2I-A$ 均正定 (合同变换不改变正定性).
  命题得证.

(数值线性代数, 定理 $4.2.7$)
若 A 对称正定，则 Gauss-Seidel 迭代法收敛.
或者更一般地，Hermite 正定矩阵 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 的 Gauss-Seidel 迭代法一定收敛.

- 对于对称正定线性系统，Jacobi 迭代法并不一定收敛 (参见 Homework 11 Problem 02)
  从这个意义来说，Gauss-Seidel 迭代法要优于 Jacobi 迭代法

- **邵老师提供的证明:**
  考虑 Hermite 正定线性方程组 $Ax = b$
  回顾之前的记号:

$$A = D - L - U$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

  A 的 Hermite 性保证了 $U = L^{\mathrm{H}}$
  于是 $B = (D-L)^{-1}U = (D-L)^{-1}L^{\mathrm{H}}$
  对于 B 的任意特征对 (λ, x)，我们都有:

$$\begin{aligned} Bx = (D-L)^{-1}L^{\mathrm{H}}x = x\lambda \\ \Updownarrow \\ L^{\mathrm{H}}x = (D-L)x\lambda \end{aligned}$$

  左乘 x^{H} 即得:

$$\begin{aligned} x^{\mathrm{H}}L^{\mathrm{H}}x = x^{\mathrm{H}}Dx\lambda - x^{\mathrm{H}}Lx\lambda \\ \Updownarrow \\ \bar{\beta} = \alpha\lambda - \beta\lambda \text{ where } \begin{cases} \alpha = x^{\mathrm{H}}Dx \\ \beta = x^{\mathrm{H}}Lx \end{cases} \end{aligned}$$

  因此我们有:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\bar{\beta}}{\alpha - \beta} \\ &= \frac{\mathrm{Re}(\beta) - i \cdot \mathrm{Im}(\beta)}{\alpha - \mathrm{Re}(\beta) - i \cdot \mathrm{Im}(\beta)} \end{aligned}$$

  注意到 A 是 Hermite 正定阵，因此对角阵 D 的对角元均为正实数.
  于是我们有 $\alpha = x^{\mathrm{H}}Dx > 0$
  此外我们有:

$$\begin{aligned} 0 &< x^{\mathrm{H}}Ax \\ &= x^{\mathrm{H}}(D - L - L^{\mathrm{H}})x \\ &= x^{\mathrm{H}}Dx - x^{\mathrm{H}}Lx - x^{\mathrm{H}}L^{\mathrm{H}}x \\ &= \alpha - \beta - \bar{\beta} \\ &= \alpha - 2\mathrm{Re}(\beta) \end{aligned}$$

  要证明 $|\lambda| < 1$，只需证明 $(\mathrm{Re}(\beta))^2 < (\alpha - \mathrm{Re}(\beta))^2 = \alpha^2 - 2\alpha\mathrm{Re}(\beta) + (\mathrm{Re}(\beta))^2$
  即只需证明 $\alpha(\alpha - 2\mathrm{Re}(\beta)) > 0$
  而这根据前面 $\alpha > 0$ 和 $\alpha - 2\mathrm{Re}(\beta) > 0$ 的结论可知是成立的.
  因此 Gauss-Seidel 迭代格式的系数矩阵 $B = (D-L)^{-1}L^{\mathrm{H}}$ 的任意特征值 λ 都满足 $|\lambda| < 1$
  这说明 $\rho(B) < 1$，因此 Gauss-Seidel 迭代法收敛.

从上述两个定理可以看到，对 Jacobi迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法收敛性的判别，
已经从对迭代矩阵 B 性质的研究转到对系数矩阵 A 性质的研究上来了，这是一个很大的进展.
然而矩阵正定性的判别并不很直观，所以要把对判别条件的研究再深入一步.
为此我们引进两个定义:

- **(严格对角占优性)**
  设 $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$
  若对任意 $1 \le i \le n$，都有 $|a_{ii}| \ge \sum_{j \ne i}^{n} |a_{ij}|$，且至少对一个 i 有严格不等号成立，则称 A 是**弱严格对角占优的**.
  若对任意 $1 \le i \le n$，都有 $|a_{ii}| > \sum_{j \ne i}^{n} |a_{ij}|$，则称 A 是**严格对角占优的**.

- **(不可约性)**
  设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$
  若存在排列方阵 $P\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 使得 $\begin{cases}PAP^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}A_{11}&\\A_{12}&A_{22}\end{bmatrix}\\A_{11}\in\mathbb{R}^{r\times r}\\A_{22}\in\mathbb{R}^{(n-r)\times(n-r)}\end{cases}$，则称 A 是**可约的**.
  否则称 A 是**不可约的**.
  若 A 可约，则可将 $Ax=b$ 化为 $PAP^{\mathrm{T}}Px=Pb$
  记 $\begin{cases}Px=y\\Pb=c\end{cases}$，即有:
  $$(PAP^{\mathrm{T}})Px=\begin{bmatrix}A_{11}&\\A_{12}&A_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\y_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}c_1\\c_2\end{bmatrix}=Pb$$
  利用前代法的思想，我们可以先求解 r 阶方程组 $A_{11}y_1=c_1$ 得到 y_1
  再代入 $A_{12}y_1+A_{22}y_2=c_2$ 解得 y_2.
  这样就将求解一个高阶方程组的问题转化为求解两个低阶方程组.
  等价定义:
  设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$
  若存在 $\{1,\dots,n\}$ 的两个非空子集 S_1,S_2 使得 $\begin{cases}S_1\cup S_2=\{1,\dots,n\}\\S_1\cap S_2=\emptyset\\a_{ij}=0\ \ (\forall\, i\in S_1,j\in S_2)\end{cases}$
  则称 A 是可约的; 否则称 A 不可约.
- 设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$
  若 A 不可约，且是弱严格对角占优的，则称 A **不可约对角占优**.
  例如三对角阵 $T=\begin{bmatrix}2&-1&&\\-1&2&-1&\\&-1&2&-1\\&&-1&2\end{bmatrix}$ 就是不可约对角占优的.

(数值线性代数, 定理 $4.2.8$)
设 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$
若矩阵 A 严格对角占优，或不可约对角占优，则 A 非奇异.

- **证明:**
  设 A **严格对角占优**.
  (反证法) 假设 A 非奇异，则 $Ax=0_n$ 有非零解 x.
  不妨设 $|x_i|=\|x\|_\infty=1$ (即 x 分量的最大模长是 1，对应下标为 i)，则有:
  $$\begin{aligned}|a_{ii}|&=|a_{ii}x_i|\\&=|0-\sum_{j\neq i}^n a_{ij}x_j|\\&=|\sum_{j\neq i}^n a_{ij}x_j|\\&\leq\sum_{j\neq i}^n|a_{ij}||x_j|\\&\leq\sum_{j\neq i}^n|a_{ij}|\cdot 1\\&=\sum_{j\neq i}^n|a_{ij}|\end{aligned}$$
  这与严格对角占优性 $|a_{ii}|>\sum_{j\neq i}^n|a_{ij}|\ (i=1,\dots,n)$ 矛盾，因而 A 非奇异.
  设 A **不可约对角占优**.
  (反证法) 假设 A 非奇异，则 $Ax=0_n$ 有非零解 x (不妨设满足 $\|x\|_\infty=1$, 即分量最大模长为 1).
  定义 $\begin{cases}S_1:=\{i:|x_i|=1\}\\S_2:=\{1,\dots,n\}\backslash S_1=\{i:|x_i|<1\}\end{cases}$ (显然满足 $\begin{cases}S_1\cup S_2=\{1,\dots,n\}\\S_1\cap S_2=\emptyset\end{cases}$)

- 显然 S_1 不是空集.
  而 S_2 也不是空集，这是因为:
  假设 S_2 为空集，即 x 的所有分量的模长都为 1.
  则对于任意 $i = 1, \dots, n$，都有:

$$\begin{aligned}|a_{ii}| &= |a_{ii}x_i| \\ &= |0 - \sum_{j\neq i}^n a_{ij}x_j| \\ &= |\sum_{j\neq i}^n a_{ij}x_j| \\ &\leq \sum_{j\neq i}^n |a_{ij}||x_j| \\ &= \sum_{j\neq i}^n |a_{ij}| \cdot 1 \\ &= \sum_{j\neq i}^n |a_{ij}|\end{aligned}$$

  即没有一个 i 使得 $|a_{ii}| \geq \sum_{j\neq i}^n |a_{ij}|$ 严格成立，这与 A 弱严格对角占优矛盾，因而 S_2 不是空集.

由于 A 不可约，故必定存在 $\begin{cases} i \in S_1 \\ k \in S_2 \end{cases}$ 使得 $a_{ik} \neq 0$，于是有:
(注意到 $|x_i| = 1$ 和 $|x_k| < 1$)

$$\begin{aligned}|a_{ii}| &= |a_{ii}x_i| \\ &= |0 - \sum_{j\neq i}^n a_{ij}x_j| \\ &= |\sum_{j\neq i}^n a_{ij}x_j| \\ &\leq |\sum_{j\in S_1\setminus\{i\}} a_{ij}x_j| + |\sum_{j\in S_2\setminus\{k\}} a_{ij}x_j| + |a_{ik}x_k| \\ &\leq \sum_{j\in S_1\setminus\{i\}} |a_{ij}||x_j| + \sum_{j\in S_2\setminus\{k\}} |a_{ij}||x_j| + |a_{ik}||x_k| \\ &< \sum_{j\in S_1\setminus\{i\}} |a_{ij}| \cdot 1 + \sum_{j\in S_2\setminus\{k\}} |a_{ij}| \cdot 1 + |a_{ik}| \cdot 1 \quad (\text{note that the strict inequality stems from } \begin{cases} |a_{ik}| > 0 \\ |x_k| < 1 \end{cases}) \\ &= \sum_{j\neq i}^n |a_{ij}|\end{aligned}$$

这与 A 弱严格对角占优矛盾，因而 A 非奇异.

(数值线性代数, 推论 $4.2.1$)
设 $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称阵 (即 $A^{\mathrm{T}} = A$)，且对角元均为正数.
若 A 严格对角占优或不可约对角占优，则 A 正定.

- **证明:** 对于任意 $\lambda \leq 0$，考虑矩阵 $A - \lambda I$
  显然 $A - \lambda I$ 也是严格对角占优或不可约对角占优的，因此 $A - \lambda I$ 总是非奇异的.
  表明 A 的特征值均大于 0，即 A 正定.
- **"对角元均为正数"** 的条件是有必要的,
  因为严格对角占优或不可约对角占优只能保证对角元均非零，即 $|a_{ii}| > 0 \ (i = 1, \dots, n)$

考虑非奇异线性方程组 $Ax = b$
回顾之前的记号:

$$A = D - L - U$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

(数值线性代数, 定理 $4.2.9$)
若 A 严格对角占优或不可约对角占优，则 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法都收敛.

- **(应用数值线性代数, 定理 6.2)**
  若 A 严格对角占优，则 $\|B_{\text{G-S}}\|_\infty \leq \|B_{\text{Jacobi}}\|_\infty < 1$
  表明此时 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法都收敛，
  且对于最差问题来说，Gauss-Seidel 单步迭代的效果至少不比 Jacobi 单步迭代的效果差.
  (对于 A 严格列对角占优，即 A^{T} 严格对角占优的情况，我们有类似的结论)
- **(应用数值线性代数, 定理 6.3)**
  若 A 不可约对角占优，则 $\rho(B_{\text{G-S}}) \leq \rho(B_{\text{Jacobi}}) < 1$
  表明此时 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法都收敛，
  且 Gauss-Seidel 单步迭代的效果要比 Jacobi 单步迭代的效果更好.
- 尽管上述结果表明在一定条件下 Gauss-Seidel 迭代法要优于 Jacobi 迭代法，
  但此结论对于一般的情况并不一定成立.

证明:
"A 严格对角占优或不可约对角占优" 的条件保证了 A 的对角元均非零，
因而 D 和 $D-L$ 都是可逆矩阵.

- 首先考虑 Jacobi 迭代法，记 $\begin{cases} B = D^{-1}(L+U) \\ c = D^{-1}b \end{cases}$
  (反证法) 假设 Jacobi 迭代法发散，即 $\rho(B) \geq 1$，即存在 B 的某个特征值 λ 满足 $|\lambda| \geq 1$
  于是 $A + (\lambda-1)D = \lambda D - L - U$ 也是严格对角占优或不可约对角占优的，
  因此 $\lambda D - L - U$ 非奇异.
  由 $\lambda I - B = \lambda I - D^{-1}(L+U) = D^{-1}(\lambda D - L - U)$ 可知 $\lambda I - B$ 也是非奇异的.
  这与 "λ 是 B 的特征值" 矛盾，因而 Jacobi 迭代法收敛.
- 其次考虑 Gauss-Seidel 迭代法，记 $\begin{cases} B = (D-L)^{-1}U \\ c = (D-L)^{-1}b \end{cases}$
  (反证法) 假设 Gauss-Seidel 迭代法发散，即 $\rho(B) \geq 1$，即存在 B 的某个特征值 λ 满足 $|\lambda| \geq 1$
  于是 $A + (\lambda-1)(D-L) = \lambda D - \lambda L - U$ 也是严格对角占优或不可约对角占优的，
  因此 $\lambda D - L - U$ 非奇异.
  由 $\lambda I - B = \lambda I - (D-L)^{-1}U = (D-L)^{-1}(\lambda D - \lambda L - U)$ 可知 $\lambda I - B$ 也是非奇异的.
  这与 "λ 是 B 的特征值" 矛盾，因而 Gauss-Seidel 迭代法收敛.

命题得证.

3.3 收敛速度

现在给出单步线性定常迭代法收敛速度的定量刻画.

3.3.1 基本定义

设 $x^\star$ 是非奇异线性方程组 $Ax=b$ 的精确解.
考虑与 $Ax=b$ 相容的单步线性定常迭代法 $x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c$ 产生的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$

若该迭代法收敛，则其极限 $x^\star$ 满足 $x^\star = Bx^\star + c$
定义 $x^{(k)}$ 误差向量为 $e^{(k)} = x^{(k)} - x^\star$
联立 $\begin{cases} x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c \\ x^\star = Bx^\star + c \\ e^{(k)} = x^{(k)} - x^\star \\ e^{(k-1)} = x^{(k-1)} - x^\star \end{cases}$ 可得 $e^{(k)} = B \cdot e^{(k-1)} \;\; (k=1,2,\ldots)$
于是我们有 $e^{(k)} = B^k e^{(0)} \;\; (k=1,2,\ldots)$
因此 $\|e^{(k)}\| \leq \|B^k\|\|e^{(0)}\| \;\; (k=1,2,\ldots)$

初始误差 $\|e^{(0)}\|$ 通常是未知的，因此通常用 $\|B^k\|$ 来刻画收敛速度.
我们定义 k 次迭代的**平均收敛速度** $R_k := R_k(B) = -\frac{1}{k}\log\left(\|B^k\|\right)$

- 注意，若迭代法收敛，则 $\lim\limits_{k\to\infty} \|B^k\| \to 0$
  因此当 k 充分大时，总有 $R_k > 0$
  我们记 $\mu = (\frac{\|e^{(k)}\|}{\|e^{(0)}\|}) \approx \|B^k\|^{\frac{1}{k}} = e^{-R_k}$ 为**误差范数在 k 次迭代中的平均缩减因子**.
- 一般情况下，$R_k(B)$ 既依赖于 k 又依赖于 B，因此计算起来很复杂.
  但如果 B 是对称矩阵 (或 Hermite 阵, 或正规矩阵)，则有 $\|B^k\|_2 = (\rho(B))^k$

因此 $R_k(B)=-\frac{1}{k}\log\left(\|B^k\|_2\right)=-\frac{1}{k}\cdot k\log\left(\rho(B)\right)=-\log\left(\rho(B)\right)$
此时 $R_k(B)$ 仅依赖于 B，不依赖于 k.

设有两个迭代法，对应的迭代矩阵分别为 $B^{(1)}$ 和 $B^{(2)}$.
若 $R_k(B^{(1)})>R_k(B^{(2)})>0$，
则我们称前 k 次迭代中 $B^{(1)}$ 对应的迭代法比 $B^{(2)}$ 对应的迭代法收敛速度慢.

但可能对于某些 k 有 $R_k(B^{(1)})>R_k(B^{(2)})$，而对另一些 k 有 $R_k(B^{(1)})<R_k(B^{(2)})$
因此为了刻画整个迭代过程的收敛速度，
我们自然考虑定义**渐近收敛速度** $R_\infty(B):=\lim\limits_{k\to\infty}R_k(B)=-\lim\limits_{k\to\infty}\frac{1}{k}\log\left(\|B^k\|\right)=-\lim\limits_{k\to\infty}\log\left(\|B^k\|^{\frac{1}{k}}\right)$

(数值线性代数, 定理 $4.3.1$**)**
给定 $\begin{cases}A\in\mathbb{R}^{n\times n}\\ b\in\mathbb{R}^n\end{cases}$ (设 A 非奇异)
考虑与 $Ax=b$ 相容的单步线性定常迭代法 $x^{(k)}=Bx^{(k-1)}+c$
我们有 $R_\infty(B)=-\log\left(\rho(B)\right)$ 成立.

- **证明:** 只需证明 $\lim\limits_{k\to\infty}\|B^k\|^{\frac{1}{k}}=\rho(B)$ 即可.

  一方面，因为 $(\rho(B))^k=\rho(B^k)\leq\|B^k\|\ \ (k=1,2,\ldots)$，所以 $\rho(B)\leq\|B^k\|^{\frac{1}{k}}\ \ (k=1,2,\ldots)$
  另一方面，对于任意 $\varepsilon>0$，考虑矩阵 $B_\varepsilon=\frac{1}{\rho(B)+\varepsilon}B$
  显然有 $\rho(B_\varepsilon)<1$，于是有 $\lim\limits_{k\to\infty}B_\varepsilon^k=O_{n\times n}$ 成立
  因此存在正整数 K 使得对于任意 $k\geq K$ 都有 $\|B_\varepsilon^k\|\leq 1$ 成立，
  即有 $\|B^k\|\leq(\rho(B)+\varepsilon)^k$ 成立，即有 $\|B^k\|^{\frac{1}{k}}\leq\rho(B)+\varepsilon$ 成立.
  综上所述，对于任意 $\varepsilon>0$ 和足够大的 k 都有 $\rho(B)\leq\|B^k\|^{\frac{1}{k}}\leq\rho(B)+\varepsilon$ 成立.
  因此 $\lim\limits_{k\to\infty}\|B^k\|^{\frac{1}{k}}=\rho(B)$，命题得证.

3.3.2 二维 Poisson 方程的求解

二维 Poisson 方程离散化得到的方程:

$$
\begin{gathered}
h=\frac{1}{n+1}\\
4u_{ij}-u_{i-1,j}-u_{i+1,j}-u_{i,j-1}-u_{i,j+1}=h^2f_{ij}\quad(1\leq i,j\leq n)\\
\Updownarrow\\
T_nU+UT_n=h^2F\\
T_n=\begin{bmatrix}2&-1&&\\-1&\ddots&\ddots&\\&\ddots&\ddots&-1\\&&-1&2\end{bmatrix}\qquad
U=\begin{bmatrix}u_{1,1}&u_{1,2}&\cdots&u_{1,n}\\u_{2,1}&u_{2,2}&\cdots&u_{2,n}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\u_{n,1}&u_{n,2}&\cdots&u_{n,n}\end{bmatrix}\qquad
F=\begin{bmatrix}f_{1,1}&f_{1,2}&\cdots&f_{1,n}\\f_{2,1}&f_{2,2}&\cdots&f_{2,n}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\f_{n,1}&f_{n,2}&\cdots&f_{n,n}\end{bmatrix}\\
\Updownarrow\\
T_{n\times n}\text{vec}(U)=h^2\text{vec}(F)\\
\text{where }T_{n\times n}:=(I_n\otimes T_n+T_n\otimes I_n)=\begin{bmatrix}T_n&&&\\&\ddots&&\\&&\ddots&\\&&&T_n\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}2I_n&-I_n&&\\-I_n&\ddots&\ddots&\\&\ddots&\ddots&-I_n\\&&-I_n&2I_n\end{bmatrix}
\end{gathered}
$$

记 $A:=T_{n\times n}=D-L-U$ (注意其中 $D=4I$)
Jacobi 迭代法计算模型问题的迭代矩阵和常数项为:

$$
\begin{cases}B=D^{-1}(L+U)=D^{-1}(D-A)=I-D^{-1}A=I-(\frac{1}{4}I)A=I-\frac{1}{4}A\\ c=D^{-1}b=(\frac{1}{4}I)h^2f=\frac{h^2}{4}f\end{cases}
$$

考虑 $I-\frac{1}{4}A$ 的结构:

$$I_{n^2}-\frac{1}{4}A=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}2I_n-T_n & I_n & & & \\ I_n & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & I_n \\ & & I_n & 2I_n-T_n\end{bmatrix}$$

$$\text{where } T_n=\begin{bmatrix}2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2\end{bmatrix}\qquad 2I_n-T_n=\begin{bmatrix}0 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & 0\end{bmatrix}$$

于是其迭代格式 $u^{(k)}=Bu^{(k-1)}+c$ 可表示为:

$$u^{(k)}=Bu^{(k-1)}+c=(I-\frac{1}{4}A)u^{(k-1)}+\frac{h^2}{4}f$$

$$\Updownarrow$$

$$u_{ij}^{(k)}=\frac{1}{4}(u_{i-1,j}^{(k-1)}+u_{i,j-1}^{(k-1)}+u_{i+1,j}^{(k-1)}+u_{i,j+1}^{(k-1)})+\frac{h^2}{4}f_{ij}\quad(i,j=1,\dots,n)$$

其中边界值 $u_{i,0}=u_{i,n+1}=u_{0,j}=u_{n+1,j}=0\ \ (i,j=1,\dots,n)$ 在迭代过程中不改变.
总之，我们有迭代公式:

$$\begin{cases}u_{ij}^{(k)}=\frac{1}{4}(u_{i-1,j}^{(k-1)}+u_{i,j-1}^{(k-1)}+u_{i+1,j}^{(k-1)}+u_{i,j+1}^{(k-1)})+\frac{h^2}{4}f_{ij} \\ u_{i,0}^{(k)}=u_{i,n+1}^{(k)}=u_{0,j}^{(k)}=u_{n+1,j}^{(k)}=0\end{cases}\quad(i,j=1,\dots,n)$$

迭代矩阵 $B=I-\frac{1}{4}A$ 的特征值为:

$$\begin{aligned}\lambda_{p,q}(B)&=1-\frac{1}{4}\lambda_{p,q}(A)\\&=1-\frac{1}{4}\cdot 2\left(2-\cos\left(\frac{p\pi}{n+1}\right)-\cos\left(\frac{q\pi}{n+1}\right)\right)\\&=\frac{1}{2}\left(\cos\left(\frac{p\pi}{n+1}\right)+\cos\left(\frac{q\pi}{n+1}\right)\right)\end{aligned}$$

因此谱半径为:

$$\begin{aligned}\rho(B)&=\max_{1\le p,q\le n}|\lambda_{p,q}(B)|\\&=\max_{1\le p,q\le n}\left|\frac{1}{2}\left(\cos\left(\frac{p\pi}{n+1}\right)+\cos\left(\frac{q\pi}{n+1}\right)\right)\right|\\&=\frac{1}{2}\left\{\max_{1\le p\le n}\left|\cos\left(\frac{p\pi}{n+1}\right)\right|+\max_{1\le q\le n}\left|\cos\left(\frac{q\pi}{n+1}\right)\right|\right\}\\&=\frac{1}{2}\left(\cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right)+\cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right)\right)\\&=\cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right)\\&=\cos(h\pi)\quad(\text{note that } h=\frac{1}{n+1})\end{aligned}$$

因此 Jacobi 迭代法求解模型问题的渐近收敛速度为:

$$\begin{aligned}R_\infty(B)&=-\log(\rho(B))\\&=-\log(\cos(h\pi))\\&=-\log\left(\sqrt{1-(\sin(h\pi))^2}\right)\\&=-\frac{1}{2}\log(1-(\sin(h\pi))^2)\\&\sim-\frac{1}{2}\cdot-(\sin(h\pi))^2\\&\sim-\frac{1}{2}\cdot-(h\pi)^2\\&=\frac{1}{2}\pi^2h^2\quad(h\to 0)\end{aligned}$$

Gauss-Seidel 迭代法的迭代格式为:

$$u^{(k)} = (D-L)^{-1}Uu^{(k-1)} + (D-L)^{-1}b$$
$$\Leftrightarrow$$
$$u^{(k)} = D^{-1}Lu^{(k)} + D^{-1}Uu^{(k-1)} + D^{-1}b$$

我们计算得:

$$D^{-1}L = (\frac{1}{4}I)L = \frac{1}{4}L = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} L_n & & & \\ I_n & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & I_n & L_n \end{bmatrix} \text{ where } L_n = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ 1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 \end{bmatrix}$$
$$D^{-1}U = (\frac{1}{4}I)U = \frac{1}{4}U = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} U_n & I_n & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & I_n \\ & & & U_n \end{bmatrix} \text{ where } U_n = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$
$$D^{-1}b = (\frac{1}{4}I)b = \frac{1}{4}b = \frac{h^2}{4}f$$

因此 $u^{(k)} = D^{-1}Lu^{(k)} + D^{-1}Uu^{(k-1)} + D^{-1}b$ 可表示为:

$$u_{ij}^{(k)} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)} + u_{i+1,j}^{(k-1)} + u_{i,j+1}^{(k-1)}) + \frac{h^2}{4}f_{ij} \quad (i,j=1,\dots,n)$$

于是迭代矩阵 $B^{(2)} = (D-L)^{-1}U$ 的特征值 λ 满足:

$$\begin{cases} \lambda\xi_{i,j} = \frac{1}{4}(\lambda\xi_{i-1,j} + \lambda\xi_{i,j-1} + \xi_{i+1,j} + \xi_{i,j+1}) \\ \xi_{i,0} = \xi_{i,n+1} = \xi_{0,j} = \xi_{n+1,j} = 0 \end{cases}$$

设 $\lambda \neq 0$，作变换 $\xi_{i,j} = \lambda^{\frac{i+j}{2}}v_{i,j}$ 可得:

$$\begin{aligned} \lambda\xi_{i,j} &= \lambda \cdot \lambda^{\frac{i+j}{2}}v_{i,j} \\ &= \lambda^{1+\frac{i+j}{2}}v_{i,j} \\ &= \frac{1}{4}(\lambda\xi_{i-1,j} + \lambda\xi_{i,j-1} + \xi_{i+1,j} + \xi_{i,j+1}) \\ &= \frac{1}{4}(\lambda \cdot \lambda^{\frac{i-1+j}{2}}v_{i-1,j} + \lambda \cdot \lambda^{\frac{i+j-1}{2}}v_{i,j-1} + \lambda^{\frac{i+1+j}{2}}v_{i+1,j} + \lambda^{\frac{i+j+1}{2}}v_{i,j+1}) \\ &= \frac{1}{4}\lambda^{\frac{i+j+1}{2}}(v_{i-1,j} + v_{i,j-1} + v_{i+1,j} + v_{i,j+1}) \end{aligned}$$

于是有:

$$\lambda^{1+\frac{i+j}{2}}v_{i,j} = \frac{1}{4}\lambda^{\frac{i+j+1}{2}}(v_{i-1,j} + v_{i,j-1} + v_{i+1,j} + v_{i,j+1})$$
$$\Updownarrow$$
$$\lambda^{\frac{1}{2}}v_{i,j} = \frac{1}{4}(v_{i-1,j} + v_{i,j-1} + v_{i+1,j} + v_{i,j+1})$$

> 回忆起 Jacobi 迭代法应用到二维 Poisson 问题得到的迭代公式:
>
> $$\begin{cases} u_{ij}^{(k)} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j}^{(k-1)} + u_{i,j-1}^{(k-1)} + u_{i+1,j}^{(k-1)} + u_{i,j+1}^{(k-1)}) + \frac{h^2}{4}f_{ij} \\ u_{i,0}^{(k)} = u_{i,n+1}^{(k)} = u_{0,j}^{(k)} = u_{n+1,j}^{(k)} = 0 \end{cases} \quad (i,j=1,\dots,n)$$
>
> 我们知道迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 的特征值 μ 满足:
>
> $$\begin{cases} \mu v_{i,j} = \frac{1}{4}(v_{i-1,j} + v_{i,j-1} + v_{i+1,j} + v_{i,j+1}) \\ v_{i,0} = v_{i,n+1} = v_{0,j} = v_{n+1,j} = 0 \end{cases} \quad (i,j=1,\dots,n)$$

对比发现，$\lambda \neq 0$ 是 Gauss-Seidel 迭代矩阵 $B^{(2)} = (D-L)^{-1}U$ 的非零特征值,
当且仅当 $\mu = \lambda^{\frac{1}{2}}$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 的非零特征值.

回忆起 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 的谱半径 $\rho(B^{(1)}) = \cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right) = \cos(h\pi)$
因此 Gauss-Seidel 迭代法求解模型问题的渐近收敛速度为:

$$
\begin{aligned}
R_\infty(B^{(2)}) &= -\log\left(\rho(B^{(2)})\right) \\
&= -\log\left(\rho^2(B^{(1)})\right) \\
&= -2\log\left(\rho(B^{(1)})\right) \\
&= -2\log\left(\cos\left(h\pi\right)\right) \\
&\sim 2\cdot\frac{1}{2}\pi^2h^2 \\
&= \pi^2h^2 \quad (h\to 0)
\end{aligned}
$$

这说明 Gauss-Seidel 迭代法求解模型问题的渐近收敛速度是 Jacobi 迭代法的两倍.

3.4 超松弛迭代法

超松弛迭代法是 Gauss-Seidel 迭代法的引申和推广，也可看作 Gauss-Seidel 迭代法的加速.

3.4.1 迭代格式

考虑一个满足 "A 对角元均非零" 的非奇异线性方程组 $Ax=b$
回顾之前的记号:

$$
A = D - L - U
$$

$$
D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad
L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad
U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}
$$

Gauss-Seidel 迭代法的迭代格式为:

$$
\begin{gathered}
x^{(k)} = (D-L)^{-1}Ux^{(k-1)} + (D-L)^{-1}b \\
\Updownarrow \\
x^{(k)} = D^{-1}Lx^{(k)} + D^{-1}Ux^{(k-1)} + D^{-1}b
\end{gathered}
$$

现令修正项 $\Delta x^{(k-1)} = x^{(k)} - x^{(k-1)}$，则我们有:

$$
\begin{aligned}
\Delta x^{(k-1)} &= x^{(k)} - x^{(k-1)} \\
&= (D^{-1}Lx^{(k)} + D^{-1}Ux^{(k-1)} + D^{-1}b) - x^{(k-1)}
\end{aligned}
$$

若我们在修正项 $\Delta x^{(k-1)}$ 的前面加上一个系数 $\omega > 0$，便得到**松弛迭代法**的迭代格式:

$$
\begin{aligned}
x^{(k)} &= x^{(k-1)} + \omega\Delta x^{(k-1)} \\
&= x^{(k-1)} + \omega[(D^{-1}Lx^{(k)} + D^{-1}Ux^{(k-1)} + D^{-1}b) - x^{(k-1)}] \\
&= (1-\omega)x^{(k-1)} + \omega(D^{-1}Lx^{(k)} + D^{-1}Ux^{(k-1)} + D^{-1}b)
\end{aligned}
$$

我们称 ω 为**松弛因子**:

- 当 $\omega > 1$ 时，称为**超松弛迭代法** (简称为 SOR 迭代法)
- 当 $\omega = 1$ 时，就是 **Gauss-Seidel 迭代法**
- 当 $\omega < 1$ 时，称为**低松弛迭代法**

显然 $I - \omega D^{-1}L$ 是下三角阵，且对角元均非零 (前提条件是 A 对角元均非零)，因此它是可逆的.
于是我们可以改写**松弛迭代法**的迭代格式:

$$
\begin{gathered}
x^{(k)} = (1-\omega)x^{(k-1)} + \omega(D^{-1}Lx^{(k)} + D^{-1}Ux^{(k-1)} + D^{-1}b) \\
\Updownarrow \\
x^{(k)} = (I-\omega D^{-1}L)^{-1}[(D^{-1}U + (1-\omega)I)x^{(k-1)} + \omega D^{-1}b] = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]x^{(k-1)} + \omega(D-\omega L)^{-1}b \\
\Updownarrow \\
x^{(k)} = B_\omega x^{(k-1)} + c_\omega \text{ where } \begin{cases} B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U] \\ c_\omega = \omega(D-\omega L)^{-1}b \end{cases}
\end{gathered}
$$

3.4.2 收敛性分析

现在我们研究超松弛迭代法的收敛性判别和松弛因子 ω 的选取范围.
回顾之前的记号:

$$A = D - L - U$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

$$x^{(k)} = B_\omega x^{(k-1)} + c_\omega \text{ where } \begin{cases} B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U] \\ c_\omega = \omega(D-\omega L)^{-1} b \end{cases}$$

(超松弛迭代法收敛的必要条件, 数值线性代数, 定理 $4.4.2$)
超松弛迭代法收敛的必要条件是 $0 < \omega < 2$

- **证明:**
  设超松弛迭代法收敛，即等价于 $\rho(B_\omega) < 1$
  设 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ 是 B_ω 的 n 个特征值，则我们必须有:

$$\begin{aligned} |\det(B_w)| &= |\det\{(D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]\}| \\ &= |\det\{(I-\omega D^{-1}L)^{-1}[(1-\omega)I + \omega D^{-1}U]\}| \\ &= |\det\{(I-\omega D^{-1}L)^{-1}\}||\det\{(1-\omega)I + \omega D^{-1}U\}| \\ &= |1^n| \cdot |(1-\omega)^n| \\ &= |(1-\omega)^n| \\ &= |\lambda_1 \cdots \lambda_n| \\ &= |\lambda_1| \cdots |\lambda_n| \\ &< 1^n \\ &= 1 \end{aligned}$$

  根据 $|(1-\omega)^n| < 1$ 可知 $|1-\omega| < 1$，即有 $0 < \omega < 2$，命题得证.

(超松弛迭代法收敛的充分条件, 数值线性代数, 定理 $4.4.3$)
若系数矩阵 A 严格对角占优或不可约对角占优，且松弛因子 $\omega \in (0,1)$，则超松弛迭代法收敛.

- **证明:**
  "A 严格对角占优或不可约对角占优" 的条件保证了 A 的对角元均非零，
  于是下三角阵 $D - \omega L$ 的对角元也均非零，因而是可逆的.
  考虑超松弛迭代法 $\begin{cases} B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U] \\ c_\omega = \omega(D-\omega L)^{-1} b \end{cases}$
  (反证法) 假设超松弛迭代法发散，即 $\rho(B_\omega) \geq 1$，即存在 B_ω 的某个特征值 λ 满足 $|\lambda| \geq 1$
  于是 $\omega A + (\lambda - 1)(D - \omega L) = (\omega + \lambda - 1)D - \omega\lambda L - \omega U$ 也是严格对角占优或不可约对角占优的，
  因此 $(\omega + \lambda - 1)D - \omega\lambda L - \omega U$ 非奇异.
  由 $\lambda I - B_\omega = \lambda I - (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U] = (D-\omega L)^{-1}[(\omega+\lambda-1)D - \omega\lambda L - \omega U]$
  可知 $\lambda I - B_\omega$ 也是非奇异的.
  这与 "λ 是 B_ω 的特征值" 矛盾，因而超松弛迭代法收敛.

(正定情形下超松弛迭代法收敛的充要条件, 数值线性代数, 定理 $4.4.4$)
若系数矩阵 A 对称正定，则当且仅当松弛因子 $\omega \in (0,2)$ 时超松弛迭代法收敛.

- **证明:**
  由于系数矩阵 A 对称，故 $U = L^{\mathrm{T}}$
  设 λ 是 B_ω 的任一特征值 (不一定是实数)，x 是对应的特征向量，则有:

$$\begin{gathered} B_\omega x = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]x = \lambda x \\ \Updownarrow \\ [(1-\omega)D + \omega L^{\mathrm{T}}]x = \lambda(D-\omega L)x \\ \Updownarrow \\ x^{\mathrm{H}}[(1-\omega)D + \omega L^{\mathrm{T}}]x = \lambda x^{\mathrm{H}}(D-\omega L)x \end{gathered}$$

  记 $\begin{cases} \gamma = x^{\mathrm{H}} D x \\ \alpha + i\beta = x^{\mathrm{H}} L x \ \Rightarrow \ x^{\mathrm{H}} L^{\mathrm{T}} x = \alpha - i\beta \end{cases}$ 则我们有:

$$
\begin{gathered}
(1-\omega)\gamma+\omega(\alpha-i\beta)=\lambda[\gamma-\omega(\alpha+i\beta)] \\
\Updownarrow \\
(1-\omega)\gamma+\omega\alpha-i\omega\beta=\lambda(\gamma-\omega\alpha-i\omega\beta)
\end{gathered}
$$

两边取模可得:

$$
|\lambda|^2=\frac{[(1-\omega)\gamma+\omega\alpha]^2+(\omega\beta)^2}{(\gamma-\omega\alpha)^2+(\omega\beta)^2}
$$

分子减分母可知:

$$
\begin{aligned}
&\{[(1-\omega)\gamma+\omega\alpha]^2+(\omega\beta)^2\}-\{(\gamma-\omega\alpha)^2+(\omega\beta)^2\} \\
&=[(1-\omega)\gamma+\omega\alpha]^2-(\gamma-\omega\alpha)^2 \\
&=[(1-\omega)\gamma+\omega\alpha-(\gamma-\omega\alpha)]\cdot[(1-\omega)\gamma+\omega\alpha+(\gamma-\omega\alpha)] \\
&=(2\omega\alpha-\omega\gamma)(2-\omega)\gamma \\
&=\gamma(\gamma-2\alpha)\omega(\omega-2)
\end{aligned}
$$

由于 A 正定，故我们有 (注意到 x 作为 B_ω 的特征向量，一定不是零向量):

$$
\begin{cases}
\delta=x^{\mathrm{H}}Dx>0 \\
\delta-2\alpha=\delta-(\alpha+i\beta)-(\alpha-i\beta)=x^{\mathrm{H}}Dx-x^{\mathrm{H}}Lx-x^{\mathrm{H}}L^{\mathrm{T}}x=x^{\mathrm{H}}(D-L-U)x=x^{\mathrm{H}}Ax>0
\end{cases}
$$

因此 $|\lambda|^2<1$ (即 $|\lambda|<1$) 当且仅当 $\omega(\omega-2)<0$，即 $\omega\in(0,2)$
根据 λ 是 B_ω 的任意特征值可知，$\rho(B_\omega)<1$ 当且仅当 $\omega\in(0,2)$
这表明超松弛迭代法收敛当且仅当 $\omega\in(0,2)$，命题得证.

3.4.3 最佳松弛因子

要研究收敛速度在 ω 为何值时最快，我们考虑特征值问题:

$$
\begin{gathered}
B_\omega x=(D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega U]x=\lambda x \\
\Updownarrow \\
[(\lambda+\omega-1)D-\lambda\omega L-\omega U]x=0_n
\end{gathered}
$$

设 $\lambda_1,\dots,\lambda_n$ 是 B_ω 的 n 个特征值，则我们有:

$$
\begin{aligned}
\det(B_w)&=\det\{(D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega U]\} \\
&=\det\{(I-\omega D^{-1}L)^{-1}[(1-\omega)I+\omega D^{-1}U]\} \\
&=\det\{(I-\omega D^{-1}L)^{-1}\}\det\{(1-\omega)I+\omega D^{-1}U \\
&=1^n\cdot(1-\omega)^n \\
&=(1-\omega)^n
\end{aligned}
$$

因此当 $\omega\neq 1$ 时，B_ω 无零特征值.

二维 Poisson 方程离散化得到的方程:

$$h = \frac{1}{n+1}$$

$$4u_{ij} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1} = h^2 f_{ij} \quad (1 \le i,j \le n)$$

$$\Updownarrow$$

$$T_n U + U T_n = h^2 F$$

$$T_n = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,n} \\ u_{2,1} & u_{2,2} & \cdots & u_{2,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_{n,1} & u_{n,2} & \cdots & u_{n,n} \end{bmatrix} \qquad F = \begin{bmatrix} f_{1,1} & f_{1,2} & \cdots & f_{1,n} \\ f_{2,1} & f_{2,2} & \cdots & f_{2,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_{n,1} & f_{n,2} & \cdots & f_{n,n} \end{bmatrix}$$

$$\Updownarrow$$

$$T_{n\times n}\text{vec}(U) = h^2 \text{vec}(F)$$

$$\text{where } T_{n\times n} := (I_n \otimes T_n + T_n \otimes I_n) = \begin{bmatrix} T_n & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & T_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2I_n & -I_n & & \\ -I_n & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I_n \\ & & -I_n & 2I_n \end{bmatrix}$$

记 $A := T_{n\times n} = D - L - U$ (注意其中 $D = 4I$)
在自然次序排列下，$[(\lambda+\omega-1)D - \lambda\omega L - \omega U]x = 0_n$ 可写成:

$$\begin{cases} (\lambda+\omega-1)u_{ij} - \frac{\omega}{4}(\lambda u_{i-1,j} + \lambda u_{i,j-1} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1}) = 0 \\ u_{i,0} = u_{i,n+1} = u_{0,j} = u_{n+1,j} = 0 \end{cases} \quad (i,j = 1,\dots,n)$$

下面分两步讨论:

第一步: 找出 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 与 $B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]$ 特征值之间的关系.

假设 $\omega \neq 1$ (这保证了 B_ω 没有零特征值) **(存疑: λ 一定是正实数吗?)**
对 B_ω 的特征值 λ 作变换 $u_{i,j} = (\pm\lambda^{\frac{1}{2}})^{i+j} v_{i,j}$ 可得:

$$\begin{aligned}(\lambda+\omega-1)u_{i,j} &= (\lambda+\omega-1)\cdot(\pm\lambda^{\frac{1}{2}})^{i+j} v_{i,j} \\ &= \frac{\omega}{4}(\lambda u_{i-1,j} + \lambda u_{i,j-1} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1}) \\ &= \frac{\omega}{4}[\lambda\cdot(\pm\lambda^{\frac{1}{2}})^{i-1+j} v_{i-1,j} + \lambda\cdot(\pm\lambda^{\frac{1}{2}})^{i+j-1} v_{i,j-1} + (\pm\lambda^{\frac{1}{2}})^{i+1+j} v_{i+1,j} + (\pm\lambda^{\frac{1}{2}})^{i+j+1} v_{i,j+1}] \\ &= \frac{\omega}{4}(\pm\lambda^{\frac{1}{2}})^{i+j+1}[v_{i-1,j} + v_{i,j-1} + v_{i+1,j} + v_{i,j+1}]\end{aligned}$$

因此有:

$$\begin{cases} \mu v_{i,j} = \frac{1}{4}[v_{i-1,j} + v_{i,j-1} + v_{i+1,j} + v_{i,j+1}] \\ v_{i,0} = v_{i,n+1} = v_{0,j} = v_{n+1,j} = 0 \end{cases} \quad (i,j = 1,\dots,n) \quad \text{where } \mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$$

> 回忆起 Jacobi 迭代法应用到二维 Poisson 问题得到的迭代公式:
>
> $$\begin{cases} u_{ij}^{(k)} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j}^{(k-1)} + u_{i,j-1}^{(k-1)} + u_{i+1,j}^{(k-1)} + u_{i,j+1}^{(k-1)}) + \frac{h^2}{4} f_{ij} \\ u_{i,0}^{(k)} = u_{i,n+1}^{(k)} = u_{0,j}^{(k)} = u_{n+1,j}^{(k)} = 0 \end{cases} \quad (i,j = 1,\dots,n)$$
>
> 我们知道迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 的特征值 μ 满足:
>
> $$\begin{cases} \mu v_{i,j} = \frac{1}{4}(v_{i-1,j} + v_{i,j-1} + v_{i+1,j} + v_{i,j+1}) \\ v_{i,0} = v_{i,n+1} = v_{0,j} = v_{n+1,j} = 0 \end{cases} \quad (i,j = 1,\dots,n)$$

对比发现，在 $\omega \neq 1$ 的前提条件下，
λ 是松弛迭代矩阵 $B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]$ 的特征值，
当且仅当 $\mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 的特征值.

- 实际上，前面关于 $\omega \neq 1$ 的限制是可以去掉的:
  我们可以将 $\omega = 1$ 的情况视作 $\omega \to 1$ 的极限情况，
  此时 $\mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$ 退化成 $\mu = \pm\lambda^{\frac{1}{2}}$
  可知 $B^{(1)}$ 的每对特征值 $\pm\mu_i$，都对应 $B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]$ 的特征值 0 和 μ_i^2

因此对于任意 $\omega \in (0,2)$，我们都有:
λ 是松弛迭代矩阵 $B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega U]$ 的特征值,
当且仅当 $\mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 的特征值.

因此松弛迭代矩阵 B_ω 的特征值完全由松弛因子 ω 和 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的特征值 μ 确定.

第二步: 确定谱半径 $\rho(B_\omega)$ 随 ω 变化的情况

设 $0 \le \mu < 1$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的一个特征值，$\omega \in (0,2)$
则由 $\mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$ (即二次方程 $\lambda+\omega-1 = \pm\mu\omega\lambda^{\frac{1}{2}}$) 可得松弛迭代矩阵 B_ω 的两个特征值分别为:

$$\lambda_+(\omega,\mu) = [\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2$$

$$\lambda_-(\omega,\mu) = [\frac{\mu\omega}{2} - \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2$$

记这两个特征值模长的最大值为 $M(\omega,\mu) := \max\{|\lambda_+(\omega,\mu)|, |\lambda_-(\omega,\mu)|\}$

记二次方程 $\lambda+\omega-1 = \pm\mu\omega\lambda^{\frac{1}{2}}$ 的判别式为 $\Delta = (\mu\omega)^2 - 4(\omega-1)$
判别式 Δ 在 $(0,2)$ 的唯一零点是 $\omega_\mu = \frac{2}{1+\sqrt{1-\mu^2}} \in (0,2)$

- 当 $0 < \omega < \omega_\mu$ 时 $\Delta > 0$，从而有 $\lambda_+(\omega,\mu) > \lambda_-(\omega,\mu) > 0$
- 当 $\omega = \omega_\mu$ 时 $\Delta = 0$，从而有 $\lambda_+(\omega,\mu) = \lambda_-(\omega,\mu) > 0$
- 当 $\omega_\mu < \omega < 2$ 时 $\Delta < 0$，故 $\lambda_+(\omega,\mu)$ 和 $\lambda_-(\omega,\mu)$ 为一对共轭复数，且 $|\lambda_+(\omega,\mu)| = |\lambda_-(\omega,\mu)| = \omega - 1$

综上所述 $M(\omega,\mu) = \max\{|\lambda_+(\omega,\mu)|, |\lambda_-(\omega,\mu)|\} = \begin{cases} \lambda_+(\omega,\mu) & 0 < \omega \le \omega_\mu \\ \omega - 1 & \omega_\mu < \omega < 2 \end{cases}$

固定 $0 \le \mu < 1$，令 ω 从 0 变到 2，考虑 $M(\omega,\mu)$ 的变化情况:

- 首先我们有 $M(\omega,\mu) < 1$，这是因为:
  - 当 $0 < \omega \le \omega_\mu$ 时，我们有:

$$\begin{aligned} M(\omega,\mu) &= \lambda_+(\omega,\mu) \\ &= [\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2 \\ &\le [\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 + 1 - 0}]^2 \\ &< [\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 + 1 - \mu\omega}]^2 \\ &= [\frac{\mu\omega}{2} + (1 - \frac{\mu\omega}{2})]^2 \\ &= 1 \end{aligned}$$

  - 当 $\omega_\mu < \omega < 2$ 时，我们有 $M(\omega,\mu) = \omega - 1 < 2 - 1 = 1$
- 其次，当 $0 < \omega \le \omega_\mu$ 时，我们有:

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(\omega,\mu)}{\partial\omega} &= \frac{\partial}{\partial\omega}\{[\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2\} \\ &= 2[\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}] \cdot [\frac{\mu}{2} + \frac{\frac{1}{2}\omega\mu^2 - 1}{2\sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}}] \\ &= M(\omega,\mu)^{\frac{1}{2}} \frac{\mu M(\omega,\mu)^{\frac{1}{2}} - 1}{\sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}} \\ &< 0 \end{aligned}$$

  于是当 $\omega \to \omega_\mu - 0$ 时，我们有 (注意到 ω_μ 是方程 $(\mu\omega)^2 - 4(\omega-1) = 0$ 的解):

$$M(\omega,\mu) = [\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2 \to (\frac{\mu\omega_\mu}{2})^2 = \omega_\mu - 1 = \frac{1-\sqrt{1-\mu^2}}{1+\sqrt{1-\mu^2}}$$

$$\frac{\partial M(\omega,\mu)}{\partial\omega} = M(\omega,\mu)^{\frac{1}{2}} \frac{\mu M(\omega,\mu)^{\frac{1}{2}} - 1}{\sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}} \to \frac{\text{Negative Value}}{0} = -\infty$$

而当 $\omega_\mu < \omega < 2$ 时，$M(\omega,\mu) = \omega - 1$ 关于 ω 严格单调递增.

综上所述，对于固定的 $0 \le \mu < 1$，
$M(\omega,\mu)$ 关于 ω 在 $(0,\omega_\mu)$ 上严格单调递减，在 $(\omega_\mu, 2)$ 上严格单调递增，因此在 ω_μ 处达到极小值 $\omega_\mu - 1 = \frac{1-\sqrt{1-\mu^2}}{1+\sqrt{1-\mu^2}}$

固定 $\omega \in (0,2)$，考虑 $M(\omega,\mu)$ 随 $0 \le \mu < 1$ 的变化情况:
可以证明，若 $0 < \mu_1 < \mu_2 < 1$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的两个特征值，则有 $M(\omega,\mu_1) \le M(\omega,\mu_2)$
即 $M(\omega,\mu)$ 关于 μ 是单调递增的.

- 首先 $\omega_\mu = \frac{2}{1+\sqrt{1-\mu^2}} \in (0,2)$ 关于 $0 \le \mu < 1$ 严格单调递增，因此 $\omega_{\mu_1} < \omega_{\mu_2}$
- 当 $\omega_{\mu_2} \le \omega < 2$ 时，我们有 $\begin{cases} M(\omega,\mu_1) = \omega - 1 \\ M(\omega,\mu_2) = \omega - 1 \end{cases} \Rightarrow M(\omega,\mu_1) = M(\omega,\mu_2) = \omega - 1$
- 当 $0 < \omega \le \omega_{\mu_1}$ 时，我们有 $\begin{cases} M(\omega,\mu_1) = [\frac{\mu_1\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu_1\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2 \\ M(\omega,\mu_2) = [\frac{\mu_2\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu_2\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2 \end{cases}$

$$\begin{aligned} M(\omega,\mu_2) - M(\omega,\mu_1) &= [M(\omega,\mu_2)^{\frac{1}{2}} + M(\omega,\mu_1)^{\frac{1}{2}}] \cdot [M(\omega,\mu_2)^{\frac{1}{2}} - M(\omega,\mu_1)^{\frac{1}{2}}] \\ &= [M(\omega,\mu_2)^{\frac{1}{2}} + M(\omega,\mu_1)^{\frac{1}{2}}] \cdot [\frac{\mu_2\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu_2\omega}{2})^2 - (\omega-1)} - \frac{\mu_1\omega}{2} - \sqrt{(\frac{\mu_1\omega}{2})^2 - (\omega-1)}] \\ &= [M(\omega,\mu_2)^{\frac{1}{2}} + M(\omega,\mu_1)^{\frac{1}{2}}] \cdot [\frac{\omega(\mu_2-\mu_1)}{2} + \frac{\frac{\omega^2}{4}(\mu_2^2-\mu_1^2)}{\sqrt{(\frac{\mu_2\omega}{2})^2 - (\omega-1)} + \sqrt{(\frac{\mu_1\omega}{2})^2 - (\omega-1)}}] \\ &> 0 \end{aligned}$$

- 当 $\omega_{\mu_1} < \omega \le \omega_{\mu_2}$ 时，我们有 $\begin{cases} M(\omega,\mu_1) = \omega - 1 \\ M(\omega,\mu_2) = [\frac{\mu_2\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu_2\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2 \end{cases}$

$$\begin{aligned} M(\omega,\mu_2) &\ge \omega_{\mu_2} - 1 \qquad (\text{Note that } \inf_{0<\omega<2} M(\omega,\mu_2) = \omega_{\mu_2} - 1) \\ &\ge \omega - 1 \\ &= M(\omega,\mu_1) \end{aligned}$$

综上所述，对于固定的 $0 < \omega < 2$，$M(\omega,\mu)$ 关于 $0 \le \mu < 1$ 是单调递增的.

对于 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的任意给定的特征值 μ，我们都可绘制一条 $M(\omega,\mu)$ 关于 ω 的曲线.
它关于 ω 在 $(0,\omega_\mu)$ 上严格单调递减，在 $(\omega_\mu,2)$ 上严格单调递增，因此在 ω_μ 处达到极小值 $\omega_\mu - 1 = \frac{1-\sqrt{1-\mu^2}}{1+\sqrt{1-\mu^2}}$

而对于确定的 ω，$M(\omega,\mu)$ 又是 μ 的增函数，
因此 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的较大特征值对应的曲线在较小特征值对应的曲线的上方.
于是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 取到谱半径 $\rho(B^{(1)})$ 的特征值 $\mu_{\max}$ 对应的是最上方的曲线，同时也对应着 $\rho(B_\omega)$
如图所示:

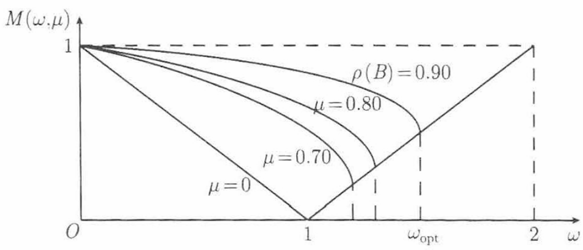


图 4.3

根据最上方的曲线 $\rho(B_\omega) = \max\limits_{0\le\mu<1} M(\omega,\mu) = M(\omega,\mu_{\max})$，我们得到结论:

- 当 $0 < \omega \le \omega_{\text{opt}} = \omega_{\mu_{\max}} = \frac{2}{1+\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}$ 时 $\rho(B_\omega) = [\frac{\mu_{\max}\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu_{\max}\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2$ 严格单调递减
- 当 $\omega_{\text{opt}} < \omega < 2$ 时 $\rho(B_\omega) = \omega - 1$ 严格单调递增

因此 $\rho(B_\omega)$ 在 ω_{opt} 处取到极小值 $\omega_{\text{opt}} - 1 = \frac{1-\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}{1+\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}$
我们称 $\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1+\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}$ 为**最佳松弛因子**
对应的**最佳松弛迭代矩阵**记为 $B_{\omega_{\text{opt}}} = (D - \omega_{\text{opt}}L)^{-1}[(1-\omega_{\text{opt}})D + \omega_{\text{opt}}U]$
(由于 $\omega_{\text{opt}} > 1$，故对应的松弛迭代是**超松弛迭代**)

在实际计算中，我们有时无法确定 Jacobi 迭代矩阵的谱半径 $\rho(B^{(1)})$，因此最佳松弛因子 ω_{opt} 也无法确定.
此时如何求近似的 ω_{opt} 呢?
我们通常选取不同的松弛因子 $\omega \in (0,2)$，
然后用相同的初始向量 $x^{(0)}$ 进行试算，迭代相同次数 (得到 $x^{(k_0)}$)，比较残差向量的范数 $\|b - Ax^{(k_0)}\|$
最后选取使残差向量范数最小的 ω 作为松弛因子.

另外，根据松弛迭代矩阵 B_ω 的谱范数 $\rho(B_\omega)$ 随 ω 变化的曲线来看，
当我们不能得到准确的最佳松弛因子时，宁可取得稍大一些，因为 ω_{opt} 左侧的曲线比右侧更加陡峭.

3.4.4 渐近收敛速度

最佳松弛因子 ω_{opt} 对应的 (超) 松弛迭代法的渐近收敛速度为:
(回忆起 Jacobi 迭代矩阵的谱半径 $\rho(B^{(1)}) = \cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right) = \cos(h\pi)$)

$$\begin{aligned}
R_\infty(B_{\omega_{\text{opt}}}) &= -\log\left(\rho(B_{\omega_{\text{opt}}})\right) \\
&= -\log\left(\frac{1-\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}{1+\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}\right) \\
&= -\log\left(\frac{1-\sqrt{1-(\cos(h\pi))^2}}{1+\sqrt{1-(\cos(h\pi))^2}}\right) \\
&= -\log\left(\frac{1-\sin(h\pi)}{1+\sin(h\pi)}\right) \\
&= -\log(1-\sin(h\pi)) + \log(1+\sin(h\pi)) \\
&\sim -(-\sin(h\pi)) + \sin(h\pi) \\
&\sim -(-h\pi) + h\pi \\
&= 2h\pi \quad (h \to 0)
\end{aligned}$$

回忆起 $\begin{cases} R_\infty(B^{(1)}) = R_\infty(D^{-1}(L+U)) = \frac{1}{2}\pi^2 h^2 \\ R_\infty(B^{(2)}) = R_\infty((D-L)^{-1}U) = \pi^2 h^2 \end{cases} \quad (h \to 0)$
可以看出，使用最佳松弛因子的超松弛迭代法的收敛速度比 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法快得多.

3.4.5 超松弛理论的推广

前面的讨论都基于二维 Poisson 问题，事实上我们可以将其推广到更一般的情形.

(数值线性代数, 定理 $4.4.5$**)**
设线性方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵 A 具有块三对角形式:

$$A = \begin{bmatrix} D_1 & K_1 & & & \\ H_1 & D_2 & K_2 & & \\ & H_2 & D_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & K_{m-1} \\ & & & H_{m-1} & D_m \end{bmatrix}$$

其中 $D_i \ (i = 1, \dots, m)$ 是非奇异的对角阵.
我们记:

$$A = D - L - U$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \qquad L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

设 $\begin{cases} B^{(1)} = D^{-1}(L+U) \\ B^{(2)} = (D-L)^{-1}U \\ B_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U] \end{cases}$ 分别为 Jacobi 迭代法、Gauss-Seidel 迭代法和超松弛迭代法的迭代矩阵.

若 $B^{(1)}$ 的特征值均为实数，则我们有:

- **Jacobi 迭代矩阵和超松弛迭代矩阵的特征值之间的关系:**
  若 $\mu \neq 0$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的特征值,
  则由 $\mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$ (即二次方程 $\lambda+\omega-1 = \pm\mu\omega\lambda^{\frac{1}{2}}$) 可得松弛迭代矩阵 B_ω 的两个特征值分别为:

$$\lambda_+(\omega,\mu) = [\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2$$
$$\lambda_-(\omega,\mu) = [\frac{\mu\omega}{2} - \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2$$

  反过来，若 $\lambda \neq 0$ 是超松弛迭代迭代 B_ω 的特征值,
  则 $\mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的两个特征值.
  (因此若 $\mu \neq 0$ 是 $B^{(1)}$ 的特征值，则 $-\mu$ 也是 $B^{(1)}$ 的特征值)
  特殊地，当 $\omega = 1$ 时，我们得到 Jacobi 迭代矩阵和 Gauss-Seidel 迭代矩阵的特征值之间的关系:
  $\lambda \neq 0$ 是 Gauss-Seidel 迭代矩阵 $B^{(2)} = (D-L)^{-1}U$ 的非零特征值,
  当且仅当 $\mu = \lambda^{\frac{1}{2}}$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 的非零特征值.
  因此谱半径具有关系: $\rho(B^{(2)}) = (\rho(B^{(1)}))^2$
  渐近收敛速度 $R_\infty(B^{(2)}) = -\log\left(\rho(B^{(2)})\right) = -2\log\left(\rho(B^{(1)})\right) = 2R_\infty(B^{(1)})$
- **最佳松弛因子的相关陈述:**
  若 Jacobi 迭代矩阵的谱半径 $\rho(B^{(1)}) < 1$ 且松弛因子 $0 < \omega < 2$,
  则超松弛迭代法收敛，且最佳松弛因子为 $\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1+\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}$
  对应的谱半径 $\rho(B_{\omega_{\text{opt}}}) = \omega_{\text{opt}} - 1 = \frac{1-\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}{1+\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}$
  当 $\rho(B^{(1)})$ 从下方趋近于 1 时，我们有渐近收敛速度 $R_\infty(B_{\omega_{\text{opt}}}) \sim 2\sqrt{2R_\infty(B^{(1)})}$

上述定理要求线性方程组的系数矩阵是块三对角阵，且对角块为非奇异对角阵.
但是 "对角块为非奇异对角阵" 的要求太苛刻了.
回忆起二维 Poisson 问题中，系数矩阵 A 的对角块为 $T_n + 2I_n$ 是三对角阵，而不是对角阵.

$$T_n + 2I_n = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

然而我们成功对它建立了超松弛理论.
实际上，超松弛理论可以适用于一类更广泛的矩阵.
为此，我们引入相容性的概念.

(具有相容次序的矩阵)
设 A 是 n 阶方阵.
我们称 A 是**具有相容次序的矩阵**,
如果存在 $\{1,\dots,n\}$ 的一个划分 $S_1,\dots,S_m$ 使得每个非零非对角元 $a_{ij} \neq 0$ $(i \neq j)$ 的下标 i,j 满足:
若 $i \in S_k$，则 $j \in \begin{cases} S_{k-1} & j < i \\ S_{k+1} & j > i \end{cases}$ (其中 $k = 1,\dots,m$)

- 以二维 Poisson 问题的系数矩阵 $A = T_{n\times n}$ 为例，取 $n = 3$ 的情况.

$$A = \left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 4 & -1 & & -1 & & & & & \\ -1 & 4 & -1 & & -1 & & & & \\ & -1 & 4 & & & -1 & & & \\ \hline -1 & & & 4 & -1 & & -1 & & \\ & -1 & & -1 & 4 & -1 & & -1 & \\ & & -1 & & -1 & 4 & & & -1 \\ \hline & & & -1 & & & 4 & -1 & \\ & & & & -1 & & -1 & 4 & -1 \\ & & & & & -1 & & -1 & 4 \end{array}\right]$$

  我们取集合 $\{1,\dots,9\}$ 的划分为:

$$S_1 = \{1\} \quad S_2 = \{2,4\} \quad S_3 = \{3,5,7\} \quad S_4 = \{6,8\} \quad S_5 = \{9\}$$

可以验证这个划分是满足定义的，也就是说上述矩阵具有相容性次序.

对于具有相容性次序且对角元非零的矩阵，亦可建立超松弛理论.
这是因为它可以按照 "相容性次序" 定义中的 $\{1,\dots,n\}$ 的划分 $S_1,\dots,S_m$
重排得到**数值线性代数 定理** $4.4.5$ 中描述的对角块均为非奇异对角阵的块三对角阵.

(数值线性代数, 定理 $4.4.6$**)**
设线性方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵 A 具有相容性次序，且对角元均不为零.
设 $\begin{cases} B^{(1)} = D^{-1}(L+U) \\ B^{(2)} = (D-L)^{-1}U \\ B_{\omega} = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega U] \end{cases}$ 分别为 Jacobi 迭代法、Gauss-Seidel 迭代法和超松弛迭代法的迭代矩阵.
若 $B^{(1)}$ 的特征值均为实数，则我们有:

- **Jacobi 迭代矩阵和超松弛迭代矩阵的特征值之间的关系:**
  若 $\mu\neq 0$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的特征值，
  则由 $\mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$ (即二次方程 $\lambda+\omega-1 = \pm\mu\omega\lambda^{\frac{1}{2}}$) 可得松弛迭代矩阵 B_{ω} 的两个特征值分别为:
$$\lambda_{+}(\omega,\mu) = [\frac{\mu\omega}{2} + \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2$$
$$\lambda_{-}(\omega,\mu) = [\frac{\mu\omega}{2} - \sqrt{(\frac{\mu\omega}{2})^2 - (\omega-1)}]^2$$
  反过来，若 $\lambda\neq 0$ 是超松弛迭代迭代 B_{ω} 的特征值，
  则 $\mu = \pm\frac{\lambda+\omega-1}{\omega\lambda^{\frac{1}{2}}}$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)}$ 的两个特征值.
  (因此若 $\mu\neq 0$ 是 $B^{(1)}$ 的特征值，则 $-\mu$ 也是 $B^{(1)}$ 的特征值)

  特殊地，当 $\omega=1$ 时，我们得到 Jacobi 迭代矩阵和 Gauss-Seidel 迭代矩阵的特征值之间的关系:
  $\lambda\neq 0$ 是 Gauss-Seidel 迭代矩阵 $B^{(2)} = (D-L)^{-1}U$ 的非零特征值，
  当且仅当 $\mu = \lambda^{\frac{1}{2}}$ 是 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U)$ 的非零特征值.

  因此谱半径具有关系: $\rho(B^{(2)}) = (\rho(B^{(1)}))^2$
  渐近收敛速度 $R_{\infty}(B^{(2)}) = -\log\left(\rho(B^{(2)})\right) = -2\log\left(\rho(B^{(1)})\right) = 2R_{\infty}(B^{(1)})$
- **最佳松弛因子的相关陈述:**
  若 Jacobi 迭代矩阵的谱半径 $\rho(B^{(1)}) < 1$ 且松弛因子 $0<\omega<2$，
  则超松弛迭代法收敛，且最佳松弛因子为 $\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1+\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}$
  对应的谱半径 $\rho(B_{\omega_{\text{opt}}}) = \omega_{\text{opt}} - 1 = \frac{1-\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}{1+\sqrt{1-(\rho(B^{(1)}))^2}}$
  当 $\rho(B^{(1)})$ 从下方趋近于 1 时，我们有渐近收敛速度 $R_{\infty}(B_{\omega_{\text{opt}}}) \sim 2\sqrt{2R_{\infty}(B^{(1)})}$

最后我们给出如下定理:
(数值线性代数, 定理 $4.4.7$**)**
若线性方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵 A 对称正定，且具有相容性次序，
则 Jacobi 迭代矩阵 $B^{(1)} = D^{-1}(L+U) = I - D^{-1}A$ 的特征值均为实数，且谱半径 $\rho(B^{(1)}) < 1$

- 回顾之前的记号:
$$A = D - L - U$$
$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$
- **证明:**
  因为 A 为正定阵，所以 $D = \operatorname{diag}(a_{11},\dots,a_{nn})$ 为正定对角阵
  于是 $B^{(1)} = I - D^{-1}A = D^{-\frac{1}{2}}(I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{\frac{1}{2}}$
  表明 $B^{(1)}$ 与对称阵 $I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 相似，因而 $B^{(1)}$ 的特征值均为实数.

  > **(数值线性代数, 定理** $4.2.7$**)**
  > 若 A 对称正定，则 Gauss-Seidel 迭代法收敛.

我们知道 Gauss-Seidel 迭代法收敛
因此 Gauss-Seidel 迭代矩阵 $B^{(2)} = (D-L)^{-1}U$ 的谱半径 $\rho(B^{(2)}) < 1$
而根据**数值线性代数 定理** $4.4.6$ 的结论，我们有 $\rho(B^{(1)}) = \sqrt{\rho(B^{(2)})} < 1$
表明 Jacobi 迭代法也收敛，命题得证.

The End