第三章 解线性方程组的迭代法

考虑线性方程组

$$Ax = b \qquad (1.1)$$

其中A为非奇异矩阵。当 A为低阶稠密矩阵时，消去法是非常有效的方法。

但当 A 为阶数较大，零元素较多的大型稀疏矩阵时，例如求某些偏微分方程数值解所产生的线性方程组，这时利用迭代法求解则更为合适。

求解 $A\vec{x}=\vec{b}$

➢总的思路:

将 $A\vec{x}=\vec{b}$ 等价改写为 $\vec{x}=B\vec{x}+\vec{f}$ 形式，建立迭代 $\vec{x}^{(k+1)}=B\vec{x}^{(k)}+\vec{f}$ 。从初值 $\vec{x}^{(0)}$ 出发，得到序列 $\{\vec{x}^{(k)}\}$ 。

➢优点: 计算精度可控，特别适用于求解系数为大型稀疏矩阵的方程组。

研究内容:

- 如何建立迭代格式?
- 收敛速度?
- 向量序列的收敛条件?
- 误差估计?

内容如下：

1. 基本迭代法
   - Jacobi迭代法
   - Gauss-Seidel 迭代法
   - SOR迭代法
   - SSOR迭代法

2. 范数及方程组的性态、条件数（5.4）

3. 收敛性分析

4. 共轭梯度法(系数矩阵为对称正定阵)

Jacobi迭代法

先看一个例子

例：求解方程组

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

解：我们分别从上面的三个方程中分离出 x_1, x_2, x_3

$$\begin{aligned} x_1 &= 0.1x_2 + 0.2x_3 + 0.72 \\ x_2 &= 0.1x_1 + 0.2x_3 + 0.83 \\ x_3 &= 0.2x_1 + 0.2x_2 + 0.84 \end{aligned}$$

据此可建立迭代公式：

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

设迭代初值 $x_1^{(0)}=x_2^{(0)}=x_3^{(0)}=0$ 下表记录了迭代结果，当迭代次数k增大时，迭代值$x_1^{(k)},x_2^{(k)},x_3^{(k)}$会越来越逼近方程组的精确解 $x_1^*=1.1, x_2^*=1.2, x_3^*=1.3$

这个简单的例子告诉我们，解线性方程组的迭代法，其基本思想是将联立方程组的求解归结为重复计算一组彼此独立的线性表达式，这就使问题得到了简化。

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0.00000	0.00000	0.00000
1	0.72000	0.83000	0.84000
2	0.97100	1.07000	1.15000
3	1.05700	1.15710	1.24820
4	1.08535	1.18534	1.28282
5	1.09510	1.19510	1.29414
6	1.09834	1.19834	1.29504
7	1.09944	1.19981	1.29934
8	1.09981	1.19941	1.29978
9	1.09994	1.19994	1.29992

Jacobi迭代分量形式:

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

$a_{ii} \neq 0$

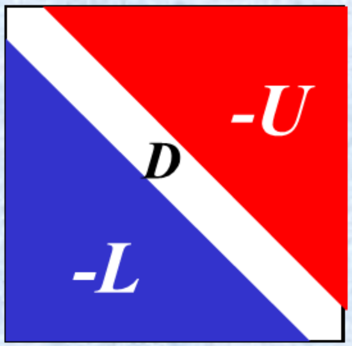
$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{1}{a_{11}}\left(-a_{12}x_2 - \ldots - a_{1n}x_n + b_1\right) \\ x_2 = \dfrac{1}{a_{22}}\left(-a_{21}x_1 - \ldots - a_{2n}x_n + b_2\right) \\ \ldots \quad \ldots \quad \ldots \quad \ldots \\ x_n = \dfrac{1}{a_{nn}}\left(-a_{n1}x_1 - \ldots - a_{nn-1}x_{n-1} + b_n\right) \end{cases}$$

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

$$i = 1,2,\cdots,n$$

Jacobi迭代的矩阵形式

写成矩阵形式:

$A =$ 

$$A\vec{x} = \vec{b} \quad \Leftrightarrow \quad (D\text{-}L\text{-}U)\vec{x} = \vec{b}$$

$$\Leftrightarrow \quad D\vec{x} = (L+U)\vec{x} + \vec{b}$$

$$\Leftrightarrow \quad \vec{x} = \underbrace{D^{-1}(L+U)}_{B}\vec{x} + \underbrace{D^{-1}\vec{b}}_{\vec{f}}$$

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

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

Gauss – Seidel迭代法

Jacobi迭代的计算一般按$x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_n^{(k+1)}$的次序进行，注意到计算$x_i^{(k+1)}$时，$x_1^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$已经算好，而Jacobi迭代法并不利用这些最新的近似值计算，而仍用$x_1^{(k)}, \cdots, x_{i-1}^{(k)}$，这启发我们对Jacobi迭代进行修改。

例　对前面所举例子，作修正得

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = 0.1x_2^{(k)} + 0.2x_3^{(k)} + .72 \\ x_2^{(k+1)} = 0.1x_1^{(k+1)} + 0.2x_3^{(k)} + 0.83 \\ x_3^{(k+1)} = 0.2x_1^{(k+1)} + 0.2x_2^{(k+1)} + 0.84 \end{cases}$$

仍取初值 $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = x_3^{(0)} = 0$，按上式的计算结果见下表，与前面的表的计算结果比较，本公式的效果明显比前面的要好。

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0.00000	0.00000	0.00000
1	0.72000	0.90200	1.16400
2	1.04308	1.16719	1.28205
3	1.09313	1.19947	1.29972
4	1.09913	1.19947	1.29972
5	1.09989	1.19993	1.29996
6	1.09999	1.19999	1.30000

上例还说明高斯-塞德尔迭代法比雅可比迭代法收敛要快。但该结论需 A 满足一定条件时才是对的。

这种充分利用新值建立起来的公式称作高斯-塞德尔（Gauss-Seidel）公式

Gauss-Seidel迭代分量形式

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}}(-a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - a_{14}x_4^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)} + b_1)$$

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}}(\boxed{-a_{21}x_1^{(k+1)}} - a_{23}x_3^{(k)} - a_{24}x_4^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)} + b_2)$$

$$x_3^{(k+1)} = \frac{1}{a_{33}}(\boxed{-a_{31}x_1^{(k+1)} - a_{32}x_2^{(k+1)}} - a_{34}x_4^{(k)} - \cdots - a_{3n}x_n^{(k)} + b_3)$$

$$\cdots \quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots$$

$$x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}}(\boxed{-a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - a_{n3}x_3^{(k+1)} - \cdots - a_{nn-1}x_{n-1}^{(k+1)}} + b_n)$$

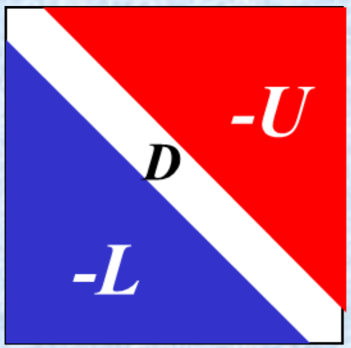
$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)})$$

$$i = 1,2,\cdots,n$$

Guass-Seidel迭代的矩阵形式

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

$$i = 1,2,\cdots,n$$

$A =$ 

$$D\vec{x}^{(k+1)} = \left(\vec{b} + L\vec{x}^{(k+1)} + U\vec{x}^{(k)}\right)$$

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

松弛法(SOR迭代法)

换个角度看Gauss - Seidel 方法:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_i^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}]$$

$$= x_i^{(k)} + \frac{r_i^{(k+1)}}{a_{ii}}$$ 其中 $r_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j\geq i} a_{ij} x_j^{(k)}$

相当于在 $x_i^{(k)}$的基础上加个余项生成 $x_i^{(k+1)}$。

下面令$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega \dfrac{r_i^{(k+1)}}{a_{ii}}$，希望通过选取合适的 ω 来加速收敛，这就是松弛法 。

$0 < \omega < 1$	低松弛法
$\omega = 1$	Gauss - Seidel 法
$\omega > 1$	(渐次)超松弛法

写成矩阵形式

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}^{(0)} & \text{（初始向量）} \\ \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{L}_{\omega}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}, & \boldsymbol{k} = 0, 1, 2, \cdots \end{cases} \quad (2.10)$$

其中

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{\omega}\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{\omega}\boldsymbol{L})^{-1}((1 - \boldsymbol{\omega})\boldsymbol{D} + \boldsymbol{\omega}\boldsymbol{U}) = \boldsymbol{L}_{\omega},$$

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{\omega}\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}.$$

SSOR 迭代的基本思想

在 SOR 迭代过程中，新向量的分量计算依次从第 1 个到第 n 个逐个进行，这个次序也可以倒过来，即

$$x_i^{(m)}=x_i^{(m-1)}+\frac{\omega}{a_{ii}}\Big(b_i-\sum_{j=1}^{i}a_{ij}x_j^{(m-1)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^{(m)}\Big),\quad (i=n,n-1,\cdots,2,1)$$

如果两种次序的 SOR 迭代过程交替使用，就可以得到 SSOR 迭代公式.

算法 3.4 SSOR 迭代法.

选定初值 $x^{(0)}$，对 $m=1,2,\cdots$，计算

$$\begin{cases} x_i^{(m-\frac{1}{2})}=x_i^{(m-1)}+\dfrac{\omega}{a_{ii}}\Big(b_i-\sum\limits_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{(m-\frac{1}{2})}-\sum\limits_{j=i}^{n}a_{ij}x_j^{(m-1)}\Big), & (i=1,2,\cdots,n-1,n), \\ x_i^{(m)}=x_i^{(m-\frac{1}{2})}+\dfrac{\omega}{a_{ii}}\Big(b_i-\sum\limits_{j=1}^{i}a_{ij}x_j^{(m-\frac{1}{2})}-\sum\limits_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^{(m)}\Big), & (i=n,n-1,\cdots,2,1). \end{cases}$$

由上式及采用矩阵 A 的分裂记号式(3-3)，可以得到

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}^{(m-\frac{1}{2})}=\boldsymbol{x}^{(m-1)}+\omega D^{-1}\big[\boldsymbol{b}+L\boldsymbol{x}^{(m-\frac{1}{2})}+(U-D)\boldsymbol{x}^{(m-1)}\big], \\ \boldsymbol{x}^{(m)}=\boldsymbol{x}^{(m-\frac{1}{2})}+\omega D^{-1}\big[\boldsymbol{b}+(L-D)\boldsymbol{x}^{(m-\frac{1}{2})}+U\boldsymbol{x}^{(m)}\big]. \end{cases}$$

从上面的第一式解出 $x^{(m-\frac{1}{2})}$ 后再化简，可得

$$x^{(m)}=\left(\frac{D}{\omega}-U\right)^{-1}D\left(\frac{D}{\omega}-L\right)^{-1}\left(\frac{\omega-1}{\omega}D-L\right)D^{-1}\left(\frac{\omega-1}{\omega}D-U\right)x^{(m-1)}$$

$$+\omega(2-\omega)(I-\omega D^{-1}L)^{-1}(I-\omega D^{-1}U)^{-1}D^{-1}b.$$

注： 以上几种方法都存在收敛性问题，为了更好地解释收敛性，我们定义了一些概念。

第二节 范数及方程组的性态、条件数

定义（向量的范数） 如果向量 $x \in \mathbf{R}^n$（或 $\mathbf{C}^n$）的某个实值函数 $N(x) = \|x\|$，满足条件：

1. $\|x\| \geq 0$，$\|x\| = 0$ 当且仅当 $x = 0$；（正定条件）

2. $\|\alpha \mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|$，$\forall \alpha \in \mathbf{R}$(或 $\alpha \in \mathbf{C}$)；（齐次条件）

3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.（三角不等式）　　　　（4.1）

则称 $N(x)$ 是 $\mathbf{R}^n$（或 $\mathbf{C}^n$）上的一个向量范数（模）。

几种常用的向量范数:

1. 向量的 ∞-范数(最大范数): $\|x\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n}|x_i|$;

2. 向量的1-范数: $\|x\|_1 = \sum\limits_{i=1}^{n}|x_i|$;

3. 向量的2-范数: $\|x\|_2 = (x,x)^{\frac{1}{2}} = (\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}}$;

4. 向量的 p-范数: $\|x\|_p = (\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i|^p)^{1/p}$,

其中 $p\in[1,\infty)$。

定理（向量范数的等价性）设 $\|x\|_s, \|x\|_t$ 为 $\mathbf{R}^n$上向量的任意两种范数，则存在常数 $c_1, c_2 > 0$，使得对一切 $x \in \mathbf{R}^n$ 有 $c_1\|x\|_s \le \|x\|_t \le c_2\|x\|_s$.

定理说明：如果在一种范数意义下，向量序列是收敛的，则在任何一种范数意义下该向量序列均收敛。

向量序列的收敛性定义:

定义　设 $\{x^{(k)}\}$ 为 $\mathbf{R}^n$ 中一向量序列，$\mathbf{x}^* \in \mathbf{R}^n$，记

$$x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})^{\mathrm{T}}, \quad x^* = (x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)^{\mathrm{T}}$$

如果 $\lim\limits_{k\to\infty} x_i^{(k)} = x_i^* (i = 1, 2, \cdots, n)$，则称 $x^{(k)}$ 收敛于向量 x^*，

记为 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*$.

矩阵的范数

定义 (矩阵的范数) 如果矩阵 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 的某个非负的实值函数 $N(A)=\|A\|$，满足条件

1. $\|A\| \geq 0$, $\|x\|=0 \Leftrightarrow x=0$; （正定条件）
2. $\|\alpha A\|=|\alpha|\cdot\|A\|$, $\forall \alpha \in \mathbf{R}$; （齐次条件） （4.3）
3. $\|A+B\| \leq \|A\|+\|B\|$; （三角不等式）
4. $\|AB\| \leq \|A\|\cdot\|B\|$.

则称 $N(A)$ 是 $\mathbf{R}^{n\times n}$ 上的一个矩阵范数（模）。

由于在大多数与估计有关的问题中，矩阵和向量会同时参与讨论，所以希望引进一种矩阵的范数，它和向量范数相联系而且和向量范数相容。

所谓向量与矩阵范数相容，即对任何向量$\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$及$\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}$都成立

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|\leq\|\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{x}\| \tag{4.4}$$

常用的范数的定义：

定理 设 $x \in \mathbf{R}^n$，$A \in \mathbf{R}^{n\times n}$，则

1. $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$；（称为 A 的行范数）

2. $\|A\|_1 = \max\limits_{1\le j\le n} \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ij}|$；（称为 A 的列范数）

3. $\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A})}$；（称为 A 的2-范数）

其中 $\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}}A)$ 表示 $A^{\mathrm{T}}A$ 的最大特征值。

4. $F(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum\limits_{i,j=1}^{n} a_{i,j}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$

矩阵的谱半径的定义:

定义 设 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 的特征值为 $\lambda_i (i = 1, 2, \cdots, n)$，称

$$\rho(A) = \max_{1\le i\le n} |\lambda_i|$$

为 A 的**谱半径**。

矩阵的条件数:

考虑线性方程组

$$\boldsymbol{A}\mathbf{x}=\boldsymbol{b}$$

其中设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，$\boldsymbol{x}$ 为方程组的精确解。

实际中 $\boldsymbol{A}$ (或 $\boldsymbol{b}$) 的元素多是测量或者计算得到的，因此会带有某些观测误差或舍入误差。从而我们处理的实际矩阵是 $\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}$(或 $\boldsymbol{b}+\delta\boldsymbol{b}$) 。

下面我们将研究数据 $\boldsymbol{A}$ (或 $\boldsymbol{b}$) 的微小误差对解的影响。

例 设有方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} \tag{5.1}$$

记为$Ax = b$，它的精确解为$x = (2,0)^T$.

现在考虑常数项的微小变化对方程组解的影响，即考察方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2.0001 \end{pmatrix} \tag{5.2}$$

也可表示为$A(x + \delta x) = b + \delta b$，其中$\delta b = (0, 0.0001)^T$.

不难求得方程组（5.2）的解为 $y = x + \delta x = (1,1)^{\mathrm{T}}$.

可以看到，只是原方程组（6.1）的常数项 b 的第2个分量有了 $\dfrac{1}{10000}$ 的微小变化，就导致方程组的解有很大的变化。这样的方程组称为病态方程组。

定义7 如果矩阵 A 或常数项 b 的微小变化，引起方程组 $Ax = b$ 解的巨大变化，则称此方程组为“病态”方程组，矩阵 A 称为“病态”矩阵(相对于方程组而言)否则分别称为“良态”方程组与“良态”矩阵。

下面我们来找出方程组的“病态”性与什么量有关？

设有方程组

$$Ax = b \tag{5.3}$$

其中 A 为非奇异阵，x 为（5.3）的准确解。

设 A 是精确的，b 有误差 δb，解为 $x+\delta x$，则利用

$$Ax=b, \qquad A(x+\delta x)=b+\delta b$$

有

$$\delta x = A^{-1}\delta b$$

从而

$$\|\delta x\| \le \|A^{-1}\|\cdot\|\delta b\| \tag{5.4}$$

又由 $Ax=b$，并设 $b\ne 0$，则有

$$\|b\| \le \|A\|\cdot\|x\| \Rightarrow \frac{1}{\|x\|} \le \frac{\|A\|}{\|b\|} \tag{5.5}$$

于是由（5.4）及（5.5），可得如下结论

定理 设 A 是非奇异阵，且

$$Ax = b \neq 0, \quad A(x + \delta x) = b + \delta b$$

则

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

说明常数项 b 的相对误差在解中可能放大 $\|A^{-1}\| \cdot \|A\|$ 倍。

2）如果方程组(3-11)中 A 有一小扰动 δA，则解 x 产生一个扰动 δx，即

$$(A+\delta A)(x+\delta x)=b.$$

于是

$$\delta x=-A^{-1}\,\delta A\,(x+\delta x),$$

从而

$$\|\delta x\|\leqslant\|A^{-1}\|\,\|\delta A\|\,\|x+\delta x\|$$

所以

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x+\delta x\|}\leqslant\|A\|\,\|A^{-1}\|\,\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \tag{3-15}$$

说明系数矩阵A的范数的相对误差在解中可能放大$||A||\,||A^{-1}||$倍.

3）如果方程组(3-11)中 A 和 b 都有小扰动时，则 x 的扰动满足

$$(A+\delta A)(x+\delta \boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}+\delta \boldsymbol{b}$$

于是

$$(A+\delta A)\delta \boldsymbol{x}=\delta \boldsymbol{b}-\delta A \boldsymbol{x}$$

即

$$\delta \boldsymbol{x}+A^{-1}\delta A\,\delta \boldsymbol{x}=A^{-1}\delta \boldsymbol{b}-A^{-1}\delta A\boldsymbol{x}$$

从而

$$\|\delta \boldsymbol{x}\|-\|A^{-1}\|\|\delta A\|\|\delta \boldsymbol{x}\|\leqslant\|A^{-1}\|\|\delta \boldsymbol{b}\|+\|A^{-1}\|\|\delta A\|\|\boldsymbol{x}\|$$

两边除以 $\|\boldsymbol{x}\|$，并考虑式(3-13)，得到

$$(1-\|A^{-1}\|\|\delta A\|)\frac{\|\delta \boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\leqslant\frac{\|A^{-1}\|\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}+\|A^{-1}\|\|\delta A\|$$

$$=\|A\|\|A^{-1}\|\left(\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|A\|\cdot\|x\|}+\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}\right)$$

$$\leqslant\|A\|\|A^{-1}\|\left(\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}+\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}\right)$$

当 $\|A^{-1}\|\|\delta A\|<1$ 时，由上式可以推出

$$\frac{\|\delta \boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\leqslant\frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1-\|A\|\|A^{-1}\|\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\left(\frac{\|\delta \boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}+\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}\right)\tag{3-16}$$

说明系数矩阵A的范数的相对误差以及常数向量b的相对误差在解中也有可能被放大。

通过以上的分析可知，$||A||||A^{-1}||$的值对估计解的相对误差有着重要的意义。

因此，$\|A^{-1}\|\cdot\|A\|$即是与方程组的“病态”性有关的量.它反映了方程组对原始数据变化的灵敏程度，刻画了方程组的“病态”程度。于是给出如下定义

定义8 设 A 为非奇异阵，称 $\mathrm{cond}(A)_v = \|A^{-1}\|_v \|A\|_v, (v = 1, 2, \infty)$ 为矩阵 A 的**条件数**。

当 A 的条件数相对较大，即 $\mathrm{cond}(A) >> 1$时，称 $Ax = b$ 是“病态”的,称 A 是“病态”矩阵，或者说 A是坏条件的。反之则分别称为“良态”的和好条件的。

方程组病态性质是方程组本身的特性。A 的条件数愈大，方程组的病态程度愈严重，也就愈难用一般的计算方法求得比较准确的解。

常用的条件数有：

（1）$\mathrm{cond}(A)_\infty = \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty$；

（2）A 的谱条件数

$$\mathrm{cond}(A)_2 = \|A^{-1}\|_2 \|A\|_2 = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}}A)}{\lambda_{\min}(A^{\mathrm{T}}A)}}.$$

条件数的性质:

1. 对任何非奇异矩阵 A，都有 $\mathrm{cond}(A)_v \geq 1$ 。

因为

$$\mathrm{cond}(A)_v = \left\|A^{-1}\right\|_v \left\|A\right\|_v \geq \left\|A^{-1}A\right\|_v = 1;$$

2. 设 A 为非奇异阵且 $c \neq 0$（常数），则

$$\mathrm{cond}(cA)_v = \mathrm{cond}(A)_v;$$

3. 如果 A 为正交矩阵，则 $\mathrm{cond}(A)_2 = 1$ ；

如果 A 为非奇异矩阵，R 为正交矩阵，则

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

例 已知希尔伯特（Hilbert）矩阵

$$H_n=\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix}$$

计算 H_3的条件数。

解

$$H_3=\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{pmatrix}, \quad H_3^{-1}=\begin{pmatrix} 9 & -36 & 30 \\ -36 & 192 & -180 \\ 30 & -180 & 180 \end{pmatrix}.$$

（1）计算 H_3 条件数 $\mathrm{cond}(H_3)_\infty$

$$\|H_3\|_\infty = 11/6, \quad \|H_3^{-1}\|_\infty = 408,$$

所以 $\mathrm{cond}(H_3)_\infty = 748.$

同样可计算

$$\mathrm{cond}(H_6)_\infty = 2.9\times10^7, \quad \mathrm{cond}(\mathrm{H}_7)_\infty = 9.85\times10^8.$$

当 n 愈大时，H_n 矩阵病态愈严重。

第三节 收敛性分析

引理 3.2 矩阵 $A \in R^{n \times n}$，则下列三个条件等价：

1）对任意的 $z \in R^n$ 成立：$\lim\limits_{m \to \infty} A^m z = 0$；

2）$\lim\limits_{m \to \infty} A^m = 0$；

3）A 的谱半径 $\rho(A) < 1$.

证明 （留作习题）.

引理 3.3 如果矩阵 $A \in R^{n \times n}$ 的谱半径 $\rho(A) < 1$，则 $(I - A)$ 为非奇异矩阵 .

证 若 $(I - A)$ 为奇异矩阵，则

$$\det(I - A) = 0,$$

于是，矩阵 A 有一个特征值为 1，与 $\rho(A) < 1$ 矛盾，所以，$(I - A)$ 为非奇异矩阵 .

一般迭代法的基本收敛结果:

定理 3.1 给定迭代格式

$$x^{(m)}=Bx^{(m-1)}+f, \tag{3-19}$$

则对任意的 $x^{(0)}\in R^n$,有下列的收敛性结果:

1) 迭代格式(3-19)收敛的充要条件为谱半径 $\rho(B)<1$,

2) 迭代格式(3-19)收敛的充分条件为范数 $\|B\|<1$.

证 1) 若迭代格式(3-19)收敛,不妨设收敛于 $x^*\in R^n$,于是

$$x^*=Bx^*+f.$$

把上式与式(3-19)相减,得到

$$x^{*}-x^{(m)}=B(x^{*}-x^{(m-1)})=\cdots=B^{m}(x^{*}-x^{(0)})$$

在上式中令 $m\to\infty$，于是有

$$0=\lim_{m\to\infty}(x^{*}-x^{(m)})=\lim_{m\to\infty}B^{m}(x^{*}-x^{(m)}).$$

再由引理 3.2 及$(x^{*}-x^{(0)})$的任意性，即得 $\rho(B)<1$.

反之，若 $\rho(B)<1$，则由引理 3.3 知，$(I-B)$为非奇异矩阵，从而$(I-B)^{-1}f$ 存在，不妨设为 x'，即 $x'=(I-B)^{-1}$，于是

$$x'=Bx'+f$$

把上式与式(3-19)相减，得到

$$x^{(m)}-x'=B(x^{(m-1)}-x')=\cdots=B^{(m)}(x^{(0)}-x').$$

由假设条件 $\rho(B)<1$ 及引理 3.2，可以推出

$$\lim_{m\to\infty}(x^{(m)}-x')=\lim_{m\to\infty}B^{m}(x^{(0)}-x')=0,$$

即迭代格式(3-19)收敛.

2)设 λ 为 B 的任一特征值,$0\neq z\in R^n$ 为其对应的特征向量,即

$$Bz=\lambda z.$$

于是

$$|\lambda|=\frac{\|Bz\|}{\|z\|}\leqslant\sup_{y\in R^n}\frac{\|By\|}{\|y\|}=\|B\|<1.$$

从而 $\rho(B)<1$,由 1)知迭代格式(3-19)收敛. ■

例　考察用Jacobi方法解方程组

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 6x_1 + 3x_2 + 12x_3 = 36 \end{cases}$$

的收敛性。

解 Jacobi迭代矩阵为

$$B_J = -\begin{bmatrix} 0 & -\frac{3}{8} & \frac{2}{8} \\ \frac{4}{11} & 0 & -\frac{1}{11} \\ \frac{6}{12} & \frac{3}{12} & 0 \end{bmatrix}$$

因 $\|B_J\|_\infty = \max\{\frac{5}{8}, \frac{5}{11}, \frac{9}{12}\} < 1$ 故其Jacobi 迭代收敛。

定义 3.5 如果矩阵 $A=\{\alpha_{ij}\}_{n\times n}\in R^{n\times n}$中的元素满足

1) $$|\alpha_{ii}|>\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|\alpha_{ij}|,\quad (i=1,2,\cdots,n)$$

$$\text{(或}\quad |\alpha_{jj}|>\sum_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{n}|\alpha_{ij}|,\quad (j=1,2,\cdots,n))$$

则称 A 为按行(或按列)严格对角占优;

2) $$|\alpha_{ii}|\geqslant\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|\alpha_{ij}|,\quad (i=1,2,\cdots,n)$$

$$\text{(或}\quad |\alpha_{jj}|\geqslant\sum_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{n}|\alpha_{ij}|,\quad (j=1,2,\cdots,n))$$

且上式至少有一个不等式是严格成立,则称 A 为按行(或按列)弱对角占优.

3) 如果对矩阵 A,有

$$P^{\mathrm{T}}AP=\begin{bmatrix}A_{11} & A_{12}\\ 0 & A_{22}\end{bmatrix},\qquad (3\text{-}18)$$

其中,A_{11}为 r 阶方阵,A_{22}为 $n-r$ 阶方阵($1\leqslant r\leqslant n$),则称 A 为可约矩阵;否则,如果不存在使得式(3-18)成立的置换阵 P,则称 A 为不可约矩阵.

特殊情形下的收敛判断（了解即可,不要求证明）

定理 3.2 用 Jacobi 迭代或 Guass-Seidel 迭代计算线性代数方程组 $Ax=b$,有下列的收敛性结果:

1）若 A 为按行(或按列)严格对角占优矩阵,或者 A 为按行(或按列)弱对角占优且不可约矩阵,则 Jacobi 迭代和 Gauss-Seidel 迭代收敛;

2）若 A 对称正定,则 Gauss-Seidel 迭代收敛;

3）若 A 对称正定,则 Jacobi 迭代收敛的充要条件为矩阵 $(2D-A)$ 也对称正定.

定理 3.4 对线性代数方程组 $Ax=b$,

1）若 A 为对称正定矩阵,则当 $0<\omega<2$ 时,SOR 迭代收敛;

2）若 A 为按行(或按列)严格对角占优矩阵,则当 $0<\omega\leqslant 1$ 时,SOR 迭代收敛.

定理 3.5 对线性代数方程组 $Ax=b$,若 A 为对称正定矩阵,则当 $0<\omega<2$ 时,SSOR 迭代收敛.

这些均可由定理3.1进行推理证明。