数值分析

1.误差分析基础

1.1误差的来源

$$\text{误差来源}\begin{cases}\text{计算前}\begin{cases}\text{模型误差：例如，忽略了摩擦、空气阻力等}\\\text{数据误差：常数或测量值产生的误差}\end{cases}\\\text{计算中}\begin{cases}\text{截断误差}(\text{例如，计算}\sin(x)\text{时取其泰勒展开的前几项})\\\text{舍入误差：计算时表示的数的位数有限}\end{cases}\end{cases}$$

1.2误差及其分类

1. **误差与有效数字**
   - **绝对误差**$e(\hat{x}) = \hat{x} - x$
   - **相对误差**$e_r(\hat{x}) = \frac{\hat{x}-x}{x}$
   - **误差绝对值上限**$\epsilon(\hat{x})$
   - **误差限**$\epsilon_r(\hat{x}) = \frac{\epsilon(\hat{x})}{\hat{x}}$
   - **有效数字**：从左至右**第一个非零数字**开始的所有数字

   Theorem 1.2：设对x保留p位有效数字后得到的近似值$\hat{x}$，则$\hat{x}$的相对误差$|e_r(\hat{x})| \le \frac{5}{d_0} \times 10^{-p}$，其中$d_0$为$x$的第一位有效数字。

   Theorem 1.3：设x的第一位有效数字为d_0，若近似值$\hat{x}$的相对误差满足$|e_r(\hat{x})| \le \frac{5}{d_0+1} \times 10^{-p}$，则$\hat{x}$的**前$p$位有效数字**与$x$的相同，或**保留$p$位有效数字**后$\hat{x}$和$x$的结果相等。

   Proof：设$x = \pm 10^m \times (d_0 + \frac{d_1}{10} + \cdots + \frac{d_{p-1}}{10^{p-1}} + \frac{d_p}{10^p} + \cdots)$

   有$|x| < 10^m(d_0+1)$

   进而有$|e(\hat{x})| = |e_r(\hat{x})| \cdot |x| \le 10^m \times \frac{5}{10^p}$

   也即，$\hat{x}$与x的差的首位有效数字在d_p所在的数位上，且$\in(-5,5)$。若x与$\hat{x}$的第p位有效数字均为d_{p-1}，则原定理得证；否则，二者一定恰好相差1，从而保留p位有效数字后$\hat{x}$和x的结果相等。

   > *Theorem 1*和*Theorem 2*讨论的是**有效数字位数**与**相对误差限**的关系。

   > *Theorem 2*中的两种结论，可视为是**保留p位有效数字后正确**的两个含义。

   将*Theorem 1.3*特殊化，可以得到*Theorem 1.4*

   Theorem 1.4：若相对误差$\le \frac{1}{2} \times 10^{-p}$，则**保留$p$位有效数字后近似值是正确的。**

2. **数据传递误差与计算误差**

$$\text{误差} = \hat{f}(\hat{x}) - f(x) = \underbrace{[\hat{f}(\hat{x}) - f(\hat{x})]}_{\text{计算误差}} + \underbrace{[f(\hat{x}) - f(x)]}_{\text{数据传递误差}}$$

   > 数据传递误差：输入的误差传递到结果而产生的误差

3. **截断误差与舍入误差**

   包括两部分，分别为**数值方法近似**以及**有限精度运算。**

   例：用差商计算一阶导数

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

截断误差$e_T = hf''(\xi)/2$，则$\epsilon_T = Mh/2$，其中M是$|f''(\xi)|$上界。

设计算$f(x)$的误差限为ϵ，则$\epsilon_R = 2\epsilon/h$。

从而$\epsilon_{tot} = \epsilon_T + \epsilon_R = \frac{Mh}{2} + \frac{2\epsilon}{h}$。

1.3问题的敏感性

敏感性：输入数据扰动对问题解的影响程度，分为**不敏感（良态）**和**敏感（病态）**。

- **条件数**

$$cond = \left|\frac{[f(\hat{x}) - f(x)]/f(x)}{(\hat{x} - x)/x}\right| \approx \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right|$$

- **绝对条件数**

$$cond_A = \left|\frac{f(\hat{x}) - f(x)}{\hat{x} - x}\right|$$

可通过多元Taylor展开取线性项的方式来估计数据传递误差限

$$\epsilon(\hat{y}) = |y - \hat{y}| \approx \sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_i}(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_n)\right|(x_i - \hat{x}_i) = \sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_i}(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_n)\right|\epsilon(\hat{x}_i)$$

注意：**一个问题的敏感性与使用的求解算法无关**。这是因为，求解算法影响的是$\hat{f}(\hat{x})$，而非$f(\hat{x})$，这与一个问题本身无关。

1.4算法的稳定性

考虑两个方面，**精度位数**对结果的影响，以及**误差放大**。

1. **结果对计算过程中的扰动不敏感的算法更稳定。**
2. 对包含一系列计算步的过程，若**中间步结果的相对误差不放大或放大不严重**，则该过程对应的算法**更稳定。**

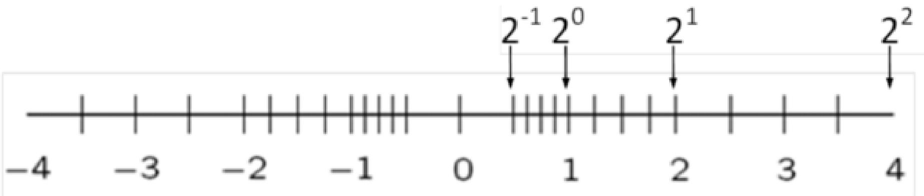
如果一个算法包含很多步，从输入量开始"**向前**"做舍入误差分析很难，因此通常采用**向后误差分析**，也即，求$\hat{x}$满足$f(\hat{x}) = \hat{y}$，则$\Delta x = \hat{x} - x$称为**向后误差**。**向后误差的大小反映了算法过程的稳定性。**

1.5计算机浮点数系统

1.5.1浮点数的表示

$$fl(x) = \pm(d_0 + \frac{d_1}{2} + \frac{d_2}{2^2} + \cdots + \frac{d_{p-1}}{2^{p-1}}) \times 2^E$$

其中，$\beta = 2$称为**基数**，E称为**指数**，其具有**上限值**U和**下限值**L，p称为**精度位数**。**规范化**的规则要求$d_0 = 1$。这样表示出来的浮点数为有限个，且**非均匀**地分布在实数轴上。



例: 一个简单浮点数系统, p=3, L= -1, U=1 (5个bit)

如上图所示，每两个2的幂次之间均恰好有4个浮点数值（2^{p-1}，第1位尾数始终为1）。其中，$\epsilon_{mach}=2^{-p}$称为**机器精度**，其也可以理解为**1与右边相邻的浮点数间隔的一半**。**下溢值**$=2^{L}$，**上溢值**$=(2-2^{-(p-1)})\times 2^{U}$。

Theorem 1.5：**设实数x在浮点数系统中的表示为浮点数$fl(x)$，则有$\left|\frac{fl(x)-x}{x}\right|\leq\epsilon_{mach}$。**

将*Theorem 1.2*拓展到二进制即得。由此定理也可以进一步理解**机器精度**的定义。

Theorem 1.6：$x_1,x_2\in\mathcal{R}$，**若**$\left|\frac{x_2}{x_1}\right|\leq\frac{1}{2}\epsilon_{mach}$，**则$x_2$的值对浮点运算$x_1+x_2$的结果毫无影响。**

不妨设$x_1=(d_0+\frac{d_1}{2}+\frac{d_2}{2^2}+\cdots+\frac{d_{p-1}}{2^{p-1}})\times 2^{E}$，则$|x_1|<2\times 2^{E}$，进而有$|x_2|<\epsilon_{mach}\times 2^{E}$。而$d_0+\frac{d_1}{2}+\frac{d_2}{2^2}+\cdots+\frac{d_{p-1}}{2^{p-1}}$是一个位于$(1,2)$之间的数，因此其加上一个小于$\epsilon_{mach}$的数并不会造成其值的改变。

*Theorem 1.6*也被称为"**大数吃掉小数**"的现象。用类似的方法，可以得到如果$\left|\frac{x_2}{x_1}\right|>\epsilon_{mach}$，则一定"**不吃小数**"。

1.5.2抵消现象

两个**符号相同、值相近**的p位数相减使结果的有效数字**远少于p位**，称为**抵消**。

结果的有效数字位数的减少，意味着**相对误差的放大**，其往往会影响后续计算的准确度。因此，**抵消现象是发生信息丢失、误差变大的信号。**

> 减小舍入误差的建议：
>
> 1. 提高精度，采用双精度浮点数
> 2. 避免中间结果出现上溢、下溢
> 3. 避免"大数吃掉小数"
> 4. 避免符号相同的两相近数相减
> 5. 简化步骤，减少运算次数

2.非线性方程求根

2.1引言

非线性方程求根：求非线性方程$f(x)=0$在区间$[a,b]$上的实数解。

对于该问题的敏感性，求出绝对条件数$\left|\frac{\Delta x}{\Delta y}\right|\approx\left|\frac{1}{f'(x^*)}\right|$，其中$x^*$对应$f(x)=0$的解。由此可知，$|f'(x^*)|$越小，该问题越敏感。特别地，对于多重根，$f'(x^*)=0$，此时问题很敏感。

2.2二分法

Theorem 2.1：**若$f(x)\in C[a,b]$，且$f(a)f(b)<0$，则区间(a,b)内至少有一个实根。**

通过逐次将**有根区间一分为二**，可以得到区间序列$\{(a_k,b_k)\}$，近似解$x_k=\frac{a_k+b_k}{2}$，且有误差$|x_k-x^*|<(b_k-a_k)/2=(b_0-a_0)/2^{k+1}$。由此，**可以估计要达到某个误差限时需要的二分次数。**

> 需要注意的是，浮点运算下，二分法的结果准确度有一个极限（也即当区间的两个端点为**相邻的两个浮点数**，计算其中点时不会再得到新的区间），最小的有根区间的长度为$2^{E}\cdot 2\cdot\epsilon_{mach}$，其中$E$为准确解$x^*$的浮点数指数。

二分法运算简单，算法比较稳定，总能收敛，但是其收敛速度较慢，且无法处理**没有有根区间**的情况。

2.3不动点迭代法

首先将$f(x)=0$转化为$x=g(x)$，从而转而求$g(x)$的不动点，其可以通过迭代法：

$$\begin{cases} \text{给定}x_0 \\ x_{k+1}=g(x_k) \end{cases}$$

若序列$\{x_k\}$收敛到x^*，则x^*就是原方程的解。

Theorem 2.3（**全局收敛的充分条件**）：$g(x)\in C[a,b]$，若

1. $\forall x\in[a,b]$，有$a\le g(x)\le b$
2. $\exists L\in(0,1),\forall x_1,x_2\in[a,b]$，有$|g(x_1)-g(x_2)|\le L|x_1-x_2|$

则$g(x)$在$[a,b]$上存在不动点，且唯一。

实际上，根据条件1，考察区间端点处的取值即可保证$g(x)$存在不动点。对于唯一性，假设存在两个不动点$x_1^*<x_2^*$，有$\frac{g(x_1^*)-g(x_2^*)}{x_1^*-x_2^*}=1$。这即与条件2矛盾。

Theorem 2.4：若$g(x)$满足*Theorem 2.3*中的两个条件，则$\forall x_0\in[a,b]$，不动点迭代法$x_{k+1}=g(x_k)$都收敛到不动点x^*，且满足$|x_k-x^*|\le\frac{L_k}{1-L}|x_1-x_0|$。

考察误差序列$|x_k-x^*|=|g(x_{k-1})-g(x^*)|\le L|x_{k-1}-x^*|\le\cdots\le L^k|x_0-x^*|$，从而有$\lim_{k\to\infty}|x_k-x^*|=\lim_{k\to\infty}L^k|x_0-x^*|=0$，也即$\lim_{k\to\infty}x_k=x^*$。

> 注：说明全局收敛时，条件2常替换为$\forall x\in[a,b],|g'(x)|<1$，且$g(x)\in C^1[a,b]$。
>
> 这是因为，首先闭区间上的有界连续函数存在最值$|g'_{max}|<1$，又根据中值定理，有
>
> $$|g(x_1)-g(x_2)|=|g'(\xi)(x_1-x_2)|\le|g'_{max}||x_1-x_2|=L|x_1-x_2|$$

Theorem 2.6（**局部收敛的充分条件**）：设x^*是$g(x)$的不动点，若$|g'(x^*)|<1$，且$g'(x)$在x^*的某领域上连续，则迭代法$x_{k+1}=g(x_k)$局部收敛。

存在x^*的某个领域$D,s.t.\forall x\in D,|g'(x)|\le L<1$，从而由*Theorem 2.4*可知算法在$D$上全局收敛，进而在原定义域上局部收敛。

> 反过来，若$|g'(x^*)|>1$，则解在靠近x^*时，误差有放大的趋势。

稳定性与收敛阶

假设**迭代解序列**$\{x_0,x_1,\cdots,x_k,\cdots\}$收敛。若误差$e(k)=x_k-x^*$满足$\lim_{k\to\infty}\frac{|e(x_{k+1})|}{|e(x_k)|^p}=c,\ (c\ne0)$，则称$p$阶收敛，或收敛阶为$p$。

显然，由于$c\ne0$，因此对于任意一个收敛的迭代法，数值p是唯一的。$p=1$时称为线性阶收敛，$p>1$时称为超线性收敛。

Theorem 2.7：迭代法$x_{k+1}=g(x_k)$，若$g^{(p)}(x)$在不动点x^*附近**连续**，整数$p\ge2$，则该方法在x^*的邻域上p阶收敛**当且仅当**以下条件成立：

$$g'(x^*)=g''(x^*)=\cdots=g^{(p-1)}(x^*)=0,\ g^{(p)}(x^*)\ne0$$

> 推论：$g'(x)=0\Leftrightarrow$ 至少2阶局部收敛。

Proof. 先证明充分性，$e(x_{k+1})=g(x_k)-g(x^*)$，在x^*处做Taylor展开，有：

$$
\begin{aligned}
e(x_{k+1}) =& g(x_k) - g(x^*) \\
=& g'(x^*)(x_k - x^*) + \frac{g''(x^*)}{2}(x_k - x^*)^2 + \cdots \\
& + \frac{g^{(p-1)}(x^*)}{(p-1)!}(x_k - x^*)^{p-1} + \frac{g^{(p)}(\xi_k)}{p!}(x_k - x^*)^p \\
=& \frac{g^{(p)}(\xi_k)}{p!}(x_k - x^*)^p
\end{aligned}
$$

因此，

$$
\lim_{k\to\infty} \frac{|e(x_{k+1})|}{|e(x_k)|^p} = \lim_{k\to\infty} \frac{|g^{(p)}(\xi_k)|}{p!} = \frac{g^p(x^*)}{p!} \neq 0
$$

从而该方法p阶收敛，充分性得证。

对于必要性，假设x^*处直到$g(x)$的q（$q \neq p$）阶导数才不为0，如上论述得到该方法q阶收敛，而这与收敛阶的唯一性矛盾，从而必要性得证。

2.4牛顿法

> 优点：
>
> 1. **减少不动点迭代法构造的盲目性**
> 2. **较好的收敛性**（收敛阶）

其原理为**用切线近似曲线**，令切线方程$P(x) = f(x_k) + (x - x_k)f'(x) = 0$，得到：

$$
x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad f'(x) \neq 0
$$

其本质上也为不动点迭代法，对应$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$。特别地，$g'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$，因此对于**单根**$x^*$，有$g(x^*) = 0$，从而该方法至少**2阶收敛**（一般也就是2阶收敛）。由此可得如下定理：

Theorem 2.9：设x^*是方程$f(x) = 0$的单根，且$f(x)$在x^*附近有连续的二阶导数，则**牛顿法至少局部二阶收敛**。

牛顿法一般局部收敛，对于初值比较敏感，且对$f(x)$的连续性要求高。

2.5迭代法的判停准则

- **残差判据**：$|f(x_k)| \leq \epsilon_1$。注意残差小不意味着$x_k - x^*$也小
- **误差判据**：$|x_k - x_{k-1}| \leq \epsilon_2$。同样，这也不意味着$x_k - x^*$很小
- **相对误差判据**：$|x_k - x_{k-1}| \leq \epsilon_3 |x_k|$

2.6割线法

为了避免牛顿法中（可能无法进行的）**导数计算**，使用**割线**进行近似。

$$
P(x) = f(x_k) + \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}(x - x_k)
$$

得到

$$
x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1})
$$

Theorem 2.10（**割线法的收敛阶**）：若$f(x)$在根x^*某领域内二阶连续可导且$f'(x) \neq 0$，则当x_0, x_1充分接近x^*时，割线法按$p \approx 1.618$阶收敛（超线性）。

2.7抛物线法

$$x_k, x_{k-1}, x_{k-2} \xrightarrow{\text{二次多项式近似}f(x)} x_{k+1}$$

特别地，这里的二次多项式中**将x看成y的二次函数**，这样其与x轴能有一个交点，也即x_{k+1}。此方法也称为**逆二次插值法**，局部收敛阶$p \approx 1.839$。

2.8实用求根技术

- **牛顿下山法**

  为防止牛顿迭代法过程发散，采用一种**阻尼牛顿法**，加入一系列**比例因子**$\lambda_i \in (0,1]$：

  $$x_{k+1} = x_k - \lambda_i \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

  其中，λ_i的值应当从1开始递减。其具体的取值实际上要**根据经验。**

- **通用求根算法zeroin**

  将**二分法**与**割线法/抛物线法**结合，得到稳定快速的求根方法。

  步骤：

  1. 输入有根区间$[a,b]$
  2. 用b表示最优解，与a构成有根区间，而c为次优解（上一步得到的解）
  3. 迭代，每步中不断调整a,b,c，直到$|f(b)|$足够小，或$|a-b|$足够小
     - 调整a,b,c：
       1. 若$f(a)$的正负号与$f(b)$相同，则将c的值赋给a
       2. 若$|f(a)| < |f(b)|$，则对调a和b的值，然后将a的值赋给c

       也即：**始终保证b是最优解，c是次优解，$[a,b]$为有根区间。**
     - **执行何种算法**
       1. 若$c \neq a$，则利用a,b,c以及它们的函数值做**逆二次插值法**的一步迭代，否则执行**割线法**
       2. 若逆二次插值法/割线法得到的近似解足够满意（也即，相邻解之差的缩小程度足够大，在有根区间之内），则用它更新b，否则执行一步**二分法**来更新b的值；再将改变之前b的值赋给c。

       > 这样，按照逆二次插值、割线法、二分法的优先顺序生成下一步解，可以保证较快的收敛速度。

2.9非线性方程组求解

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \Longleftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$$

定义多元向量函数$\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$的**雅可比矩阵**$\mathbf{J}_{\mathbf{g}}(\mathbf{x})$为$n$阶方阵，元素值为$\{\mathbf{J}_{\mathbf{g}}(\mathbf{x})\}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{g}_i(x)}{\partial x_j}$。

Theorem 2.10：不动点迭代法$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$，设$\mathbf{x}^*$为准确解，若雅可比矩阵$\mathbf{J}_{\mathbf{g}}(\mathbf{x}^*)$的特征值$\lambda$满足$|\lambda| < 1$，则该迭代法**局部收敛。**

牛顿迭代法：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \Longrightarrow \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - [\mathbf{J}_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}_k)]^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$$

3.线性方程组的直接解法

线性方程组的解法分为**直接解法**与**迭代解法**。

3.1基本概念

- **向量的范数**：记为$||\cdot||$

  向量的范数具有**正定性、正齐次性、三角不等式。**

  对于数域$\mathbb{K}$上的线性空间S，若定义了范数，则称为**赋范线性空间。**

  $p-$**范数**：$\mathbf{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^T$，$||\mathbf{x}||_p=(\sum_{i=1}^n|x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$，$p>1$。

  内积范数：针对**内积**$\langle x,y\rangle$，定义范数$||\mathbf{x}||=\sqrt{\langle\mathbf{x},\mathbf{x}\rangle}$。

  三种常用范数：

  1. **1-范数**：$||\mathbf{x}||_1=\sum_{i=1}^n|x_i|$，也被称为**曼哈顿范数**
  2. **2-范数**：$||\mathbf{x}||_2=\sqrt{\sum_{i=1}^n|x_i|^2}$，也被称为**欧式范数/内积范数**
  3. $\infty-$**范数**：$||\mathbf{x}||_\infty=\max_{1\le i\le n}|x_i|$，也被称为**"最大"范数**

  Theorem 3.6：存在$f\in C^1$，使得$||\mathbf{x}||=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$。

  Theorem 3.7（**不同范数的等价性**）：$c_1||\mathbf{x}||_s\le||\mathbf{x}||_t\le c_2||\mathbf{x}||_s$，其中$c_1,c_2>0$为与$\mathbf{x}$无关的常数。

  根据*Theorem 3.7*，**在某种范数下成立的一些结论在其他范数下也成立。**

  Theorem 3.8：$\lim_{k\to\infty}\mathbf{x}^{(k)}=\mathbf{x}^*\Leftrightarrow\lim_{k\to\infty}||\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^*||$

  > 根据*Theorem 3.7*，为证明*Theorem 3.8*，只需说明其对于$\infty-$范数成立即可。而这是显然的。

- **矩阵的范数**

  对$\mathbb{R}^{n\times n}$空间的**矩阵范数**，需要增加一些条件：

  1. 增加对矩阵乘法的要求：$||\mathbf{AB}||\le||\mathbf{A}||\cdot||\mathbf{B}||$
  2. **相容性条件**：$||\mathbf{Ax}||\le||\mathbf{A}||\cdot||\mathbf{x}||$

  根据某种向量范数$||\mathbf{x}||_v$，定义矩阵的**算子范数**（也称为**向量诱导范数**）：

$$||\mathbf{A}||_v=\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{Ax}||_v}{||\mathbf{x}||_v},\quad x\in\mathbb{R}^n,A\in\mathbb{R}^{n\times n}$$

  直观理解，也即$\mathbf{Ax}$对向量$\mathbf{x}$的最大拉伸倍数（也可能<1）。对于$||\mathbf{x}||_v=1$，$\mathbf{x}$的端点轨迹为二维空间中的单位圆，而$\mathbf{Ax}$向量端点的轨迹为**椭圆**，$||\mathbf{A}||_v$就是这个椭圆**半长轴**的长度。矩阵范数的相容性条件显然成立，对矩阵乘法要求的证明如下：

$$\begin{aligned}||\mathbf{AB}||_v&=\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{ABx}||_v}{||\mathbf{x}||_v}=\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}(\frac{||\mathbf{ABx}||_v}{||\mathbf{Bx}||_v}\cdot\frac{||\mathbf{Bx}||_v}{||\mathbf{x}||_v})\\&\le\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{A(Bx)}||_v}{||\mathbf{Bx}||_v}\cdot\max_{\mathbf{x}\neq0}\frac{||\mathbf{Bx}||_v}{||\mathbf{x}||_v}\\&\le\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{Ax}||_v}{||\mathbf{x}||_v}\cdot\max_{\mathbf{x}\neq0}\frac{||\mathbf{Bx}||_v}{||\mathbf{x}||_v}\\&=||\mathbf{A}||\cdot||\mathbf{B}||\end{aligned}$$

  常用的矩阵范数：

  1. **1-范数**：$||\mathbf{A}||_1=\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^n|a_{ij}|$（竖列元素绝对值之和的最大值）
  2. ∞**-范数**：$||\mathbf{A}||_\infty=\max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^n|a_{ij}|$
  3. **2-范数**：$||\mathbf{A}||_2=\sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})}$，其中，$\lambda_{\max}$表示取矩阵的**最大特征值。**

4. **Frobenius范数**：$||\mathbf{A}||_F=\sqrt{\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n a_{ij}^2}=\sqrt{tr(\mathbf{A}^T\mathbf{A})}$

3.2问题的敏感性

$$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}\Longrightarrow\mathbf{A}(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x})=\mathbf{b}+\Delta\mathbf{b}$$

条件数$\text{cond}=\frac{||\Delta\mathbf{x}||/||\mathbf{x}||}{||\Delta\mathbf{b}||/||\mathbf{b}||}\leq||\mathbf{A}||\cdot||\mathbf{A}^{-1}||$

> 这是因为，$\Delta\mathbf{x}=\mathbf{A}^{-1}\Delta\mathbf{b}$，从而有$||\Delta\mathbf{x}||\leq||\mathbf{A}^{-1}||\cdot||\Delta\mathbf{b}||$，同理有$||\mathbf{b}||\leq||\mathbf{A}||\cdot||\mathbf{x}||$。

上式也被称为矩阵的条件数。设$\mathbf{A}$为**非奇异矩阵**，则定义矩阵$\mathbf{A}$的条件数$\text{cond}(\mathbf{A})=||\mathbf{A}||\cdot||\mathbf{A}^{-1}||$
。

矩阵的条件数是**反映线性方程组求解问题的敏感性的条件数的上界**。如果矩阵条件数大，则问题很**病态**，此时称该矩阵为**病态矩阵**；反之则称问题为**良态**。

Theorem 3.11：在任一算子范数下，有：

$$\text{cond}(\mathbf{A})=\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{Ax}||}{||\mathbf{x}||}/\min_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{Ax}||}{||\mathbf{x}||}$$

这是因为，$||\mathbf{A}^{-1}||=\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}||}{||\mathbf{x}||}=\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{x}||}{||\mathbf{Ax}||}=\frac{1}{\min_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{Ax}||}{||\mathbf{x}||}}$。这体现出$\text{cond}(\mathbf{A})$的几何意义，也即**对单位圆的扭曲程度**，同时也说明$\text{cond}(\mathbf{A})\geq 1$。此外，定义$\text{cond}(\text{奇异矩阵})=+\infty$
。

Theorem 3.12：矩阵条件数具有如下性质：

1. $\text{cond}(\mathbf{A})\geq 1$，$\text{cond}(\mathbf{A}^{-1})=\text{cond}(\mathbf{A})$，
   $\text{cond}(c\mathbf{A})=\text{cond}(\mathbf{A}),\ \forall c\neq 0$
2. $\text{cond}(\mathbf{I})=1$
3. $\mathbf{D}$为对角阵，则在p-范数意义下，$\text{cond}(\mathbf{D})=\frac{\max_i|d_{ii}|}{\min_i|d_{ii}|}$。
4. 采用2-范数，$\text{cond}(\mathbf{A})=\sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^\mathbf{T}A)}{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^\mathbf{T}A)}}$
5. $\mathbf{Q}$为正交矩阵，则有
   $\text{cond}(\mathbf{Q})_2=1$
   $\text{cond}(\mathbf{QA})_2=\text{cond}(\mathbf{AQ})_2=\text{cond}(\mathbf{A})_2$

   > 对于正交阵$\mathbf{Q}$，有$||\mathbf{Qa}||=||\mathbf{a}||$
   > $\text{cond}(\mathbf{QA})_2=\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{QAx}||}{||x||}=\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}}\frac{||\mathbf{Ax}||}{||\mathbf{x}||}=\text{cond}(\mathbf{A})_2$

3.3矩阵的LU分解

高斯消去法：用初等变换将$\mathbf{A}$变为单位阵，用于算**逆矩阵**。

Theorem 3.14：对方程$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$，其中$\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，若执行高斯消去过程中的主元
$a_{kk}^{(k)}\neq 0,(k=1,2,\cdots,n-1)\Longleftrightarrow$系数矩阵$\mathbf{A}$**存在唯一**的**LU分解**。

唯一性的证明：假设$\mathbf{A}=\mathbf{L_1U_1}=\mathbf{L_2U_2}$，其中$\mathbf{L_1},\mathbf{L_2}$为单位下三角阵（非奇异）。若$\mathbf{A}$非奇异，则$\mathbf{U_1}$也非奇异，从而有$\mathbf{L_1L_2^{-1}}=\mathbf{U_2U_1^{-1}}=I\Longrightarrow\mathbf{L_1}=\mathbf{L_2},\mathbf{U_1}=\mathbf{U_2}$，矛盾。若$\mathbf{A}$奇异，则$\mathbf{U}(n,n)=0$，从而有

$$\begin{bmatrix}\mathbf{L_1'} & \mathbf{0}\\ \alpha_1^T & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{U_1'} & \beta_1\\ \mathbf{0}^T & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{L_2'} & \mathbf{0}\\ \alpha_2^T & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{U_2'} & \beta_2\\ \mathbf{0}^T & 0\end{bmatrix}$$

进而有$\mathbf{L_1'U_1'} = \mathbf{L_2'U_2'} \Longrightarrow \mathbf{L_1'} = \mathbf{L_2'}, \mathbf{U_1'} = \mathbf{U_2}' \Longrightarrow \mathbf{L_1} = \mathbf{L_2}, \mathbf{U_1} = \mathbf{U_2}$，矛盾。

LU分解的用途：

- **单个方程求解**：

  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{x} = (\mathbf{LU})^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{U^{-1}L^{-1}}b$。

  1. 首先求解**单位下三角型方程组**$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$
  2. 再求解**上三角型方程组**$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$
- **右端项变化的问题**：

  $\mathbf{Ax_i} = \mathbf{b_i}$，只需对每个右端项执行上述两步，而不需要重复计算LU分解。

3.4选主元技术与稳定性

Theorem 3.15：对矩阵$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，高斯消去过程中**不出现零主元**的**充要条件**是，$\mathbf{A}$的前$n-1$个顺序主子式均不为零，即$\det(A_k) \neq 0, (k = 1, 2, \cdots, n-1)$。

> 需要注意的是，如果高斯消去过程中**不出现零主元**，则**LU分解存在且唯一**，但反过来，LU分解存在不能说明**高斯消去过程一定没有零主元**。例如，矩阵$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$就有无穷多个LU分解，但是高斯消去过程存在零主元。不过，**LU分解存在且唯一**与**高斯消去过程中不出现零主元**等价。
>
> 并且，LU分解的存在性与唯一性与$\mathbf{A}$是否奇异无关。**对奇异矩阵$\mathbf{A}$也可能完成消去、LU分解**，例如$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$（关键在于LU分解不要求最后一个主元非零），而**非奇异矩阵也不一定有LU分解**（可能需要先进行一些初等行变换）。

通过**选主元技术**，可以解决主元为零的问题，同时，通过将同一列中的最大元素换做主元，还可以**减小数值误差**，从而增强算法稳定性。

部分主元的LU分解：

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$$

其中，$\mathbf{P} = \mathbf{P_{n-1}P_{n-2}} \cdots \mathbf{P_1}$称为**排列阵**，其为单位阵$\mathbf{I}$重排的结果。

> 数值更稳定的**全选主元**：选取未消去子矩阵中的最大元素，通过**行**、**列**交换到主元位置。
>
> $$\mathbf{PAQ} = \mathbf{LU}$$

算法的稳定性：

高斯消去法主要受**舍入误差**的影响。通过**向后误差分析**，我们可以得到其误差的一个上界。设方程$\mathbf{Ax} = b$的数值解为$\hat{\mathbf{x}}$，且$(\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A})\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b}$，有

$$\frac{||\Delta\mathbf{A}||_\infty}{||\mathbf{A}||_\infty} \lesssim n\rho\epsilon_{mach}$$

其中，ρ为增长因子，表示$\mathbf{A}^{(k)}$（第k步高斯消去法后得到的矩阵）与$\mathbf{A}$最大元素之比。对于部分选主元方法，有$\rho \leq 2^{n-1}$，但实际往往远小于这个上界；对于不选主元的方法，ρ可能任意大。

3.5对称正定矩阵的*Cholesky*分解

> 正定矩阵：**所有顺序主子式的行列式均为正**；半正定矩阵：**所有顺序主子式的行列式均非负**

对于对称矩阵$\mathbf{A}$，有

$$\mathbf{A} = \mathbf{LDU_0} = \mathbf{A}^T = \mathbf{U_0^T D L^T}$$

从而若高斯消去不中断，LU分解唯一，有$\mathbf{L} = \mathbf{U_0^T}$。

对于**对称正定矩阵**$\mathbf{A}$，其LU分解一定存在且唯一，故$\mathbf{A}=\mathbf{LDL^T}$唯一存在，且$\mathbf{D}=\mathbf{L^{-1}AL^T}$也为对称正定矩阵，其对角元均大于零。故有：

$$\mathbf{A}=\mathbf{LD^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}L^T}=\mathbf{L_1L_1^T}$$

此称为***Cholesky*分解**，由于其分解为一组对称阵的乘积，存储量可以节省一半。

***Cholesky*分解算法（平方根法）**

与直接LU分解的思想类似。

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

考虑对应位置元素相等，有（**原地存$\mathbf{L}$的结果**）

$$a_{jj}=\sqrt{a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}a_{jk}^2} \quad j=1,2,\cdots,n$$

$$a_{ij}=(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}a_{ik}a_{jk})/a_{jj} \quad i=j+1,\cdots,n$$

算法的稳定性：

考虑**增长因子**

$$\rho=\frac{\max\{|U^T(i,j)|\}}{\max\{|a_{ij}|\}}=\frac{\max\{|l_{ij}l_{jj}|\}}{\max\{|a_{ij}|\}}\le\frac{\max\{l_{ij}^2\}}{\max\{a_{ii}\}}\le 1$$

注：由上平方根算法，可知**$\mathbf{A}$的对角元是$\mathbf{L}$一行元素的平方和。**

3.6带状矩阵解法与稀疏矩阵简介

3.6.1带状矩阵

矩阵$\mathbf{A}=(a_{ij})_{n\times n}$，若$\forall i,j$，$|i-j|>\beta$时都有$a_{ij}=0$，且$\exists k,a_{k,k-\beta}\ne 0$或$a_{k,k+\beta}\ne 0$，则称$\mathbf{A}$为**半带宽**为$\beta$的**带状矩阵**。对于带状矩阵，其LU分解中，$\mathbf{L}$、$\mathbf{U}$矩阵的**非零元**依然分布在**原始带宽范围内**。

> 注意，对于带状矩阵的LU分解，其$\mathbf{A^{-1},L^{-1},U^{-1}}$均稠密，因此应避免再计算逆矩阵。

按行对角占优矩阵：$|a_{ii}|\ge\sum_{j=1,j\ne i}^{n}|a_{ij}|$，$i=1,2,\cdots,n$，且至少有一个大于号成立。（若均为严格大于，则称为**严格对角占优矩阵**）。

Theorem 3.20：**按列严格对角占优阵**，列主元LU分解不需要交换行。

3.6.2稀疏矩阵

- **三元组**（COO）：值、行下表、列下标
- **压缩稀疏行**（CSR）：值、（按行顺序存储的）列下标的列表、每行开头在列表中的位置

  CSR是为了解决COO中连续存储的元素有相同的行（列）编号的问题
- **压缩稀疏列**（CSC）
- **若干个一维数组**：针对带状矩阵，每个数组存储一条带

- **分块压缩稀疏行**：针对分块矩阵

在进行稀疏矩阵有关的计算时，不存储零元素，**只需遍历所有非零元。**而对稀疏矩阵做高斯消去时，填入的元素可能会造成稀疏矩阵存储结构的变化。

4.线性方程组的迭代解法

对于大规模**稀疏矩阵**，直接解法中的**填入**操作导致了巨大的计算时间、空间开销。因此在追求计算速度、允许一定准确度损失时可以采用**迭代解法**（**一阶定常迭代法**）。

$$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}\xrightarrow{\mathbf{A}=\mathbf{M}-\mathbf{N}}\mathbf{Mx}-\mathbf{Nx}=\mathbf{b}\Longrightarrow\mathbf{x}=\mathbf{M}^{-1}\mathbf{Nx}+\mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{Bx}^{(k)}+\mathbf{f}$$

4.1雅可比迭代法

分量依次迭代，令$\mathbf{A}=\mathbf{D}-(\mathbf{D}-\mathbf{A})$，其中$\mathbf{D}$为对角阵（对角元素即为$\mathbf{A}$的对角元素）。

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} &= & -\frac{1}{a_{11}}(& & a_{12}x_2^{(k)} & +a_{13}x_3^{(k)} &)+\frac{b_1}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} &= & -\frac{1}{a_{22}}(& a_{21}x_1^{(k)}+ & & +a_{23}x_3^{(k)} &)+\frac{b_2}{a_{22}} \\ x_3^{(k+1)} &= & -\frac{1}{a_{33}}(& a_{31}x_1^{(k)}+ & a_{32}x_2^{(k)} & &)+\frac{b_3}{a_{33}} \end{cases}$$

有：

$$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{D}-\mathbf{A})\mathbf{x}^{(k)}+\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$$

其中

$$\mathbf{D}=\begin{bmatrix} a_{11} & & \\ & a_{22} & \\ & & a_{33} \end{bmatrix}$$

判停准则：

1. $||\mathbf{b}-\mathbf{Ax}^{(k)}||\leq\epsilon_1$
2. $||\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(k-1)}||\leq\epsilon_2$

考虑一阶定长迭代法的误差$\mathbf{e}^{(k)}$，有$\mathbf{e}^{(k)}=\mathbf{Be}^{(k-1)}=\cdots=\mathbf{B}^{(k)}\mathbf{e}^{(0)}$，由于$\mathbf{e}^{(0)}\neq 0$，因此**一阶定长迭代法收敛**$\Leftrightarrow\lim_{k\to\infty}\mathbf{B}^k=\mathbf{0}$。

定义矩阵的**谱半径**$\rho(\mathbf{A})=\max_{1\leq i\leq n}|\lambda_i|$，其中$\lambda_i$为$\mathbf{A}$的**特征值**。

Theorem 4.4：若矩阵$\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，则$\rho(\mathbf{A})\leq||\mathbf{A}||$；若$\mathbf{A}$为**实对称矩阵**，则$||\mathbf{A}||_2=\rho(\mathbf{A})$。

> 由范数的定义即知$\rho(\mathbf{A})\leq||\mathbf{A}||$
>
> 对于实对称矩阵，$||\mathbf{A}||_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^TA)}=\sqrt{\lambda_{\max}(X\Sigma^2X^{-1})}=|\lambda_{\max}\mathbf{A}|=\rho(\mathbf{A})$

Theorem 4.5：设$\mathbf{B}=(b_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$，则$\lim_{k\to\infty}\mathbf{B}^k=\mathbf{0}\Leftrightarrow\rho(\mathbf{B})<1$。

> 利用相似标准型$\mathbf{B}=\mathbf{X\Sigma X}^{-1}$即得。

Theorem 4.6：设$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{Bx}^{(k)}+\mathbf{f}$，且$\mathbf{I}-\mathbf{B}$**非奇异**（保证**解唯一**），则对**任意**初始$\mathbf{x}^{(0)}$迭代法收敛$\Longleftrightarrow\rho(\mathbf{B})<1$，并且，收敛值$\mathbf{x}^{(*)}$是方程$\mathbf{x}=\mathbf{Bx}+\mathbf{f}$的**唯一解**。

实际上，根据*Theorem 4.4*，若在某种范数下$||\mathbf{B}||_t < 1$，则**收敛**（充分条件）。且若收敛，则有$\lim_{k\to\infty}\frac{||\mathbf{e}^{(k+1)}||}{||\mathbf{e}^{(k)}||} = \lambda_{\max} = \rho(B)$。这是因为，根据**特征值分解**，可设$\mathbf{e}^{(k)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{u}_i$，其中$\mathbf{u}_i$为$\mathbf{B}$的特征向量，则$\mathbf{e}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{e}^{(k)} = \sum_{i=1}^n \lambda_i \alpha_i \mathbf{u}_i$。从而$\lim_{k\to\infty}\frac{||\mathbf{e}^{(k+1)}||}{||\mathbf{e}^{(k)}||} = \lambda_{\max}$。

由此，考虑误差衰减10倍需要的迭代次数$\rho(\mathbf{B})^k \le \frac{1}{10} \implies k \ge -\frac{1}{\log_{10}\rho(\mathbf{B})}$，定义其倒数为**收敛速度**$R = -\log_{10}\rho(\mathbf{B})$。$R$的意义即为**一步迭代取得的十进制精度位数**，迭代$\frac{1}{R}$步后即可实现十进制精度位加一。

4.2高斯-赛德尔（Gauss-Seidel）迭代法

与**雅可比迭代法**类似，在求出$\mathbf{x}^{(k+1)}$的第一个分量后，即用它求第二个分量$x_2^{(k+1)}$。

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} &= & -\frac{1}{a_{11}}(& & a_{12}x_2^{(k)} & +a_{13}x_3^{(k)} &)+\frac{b_1}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} &= & -\frac{1}{a_{22}}(& a_{21}x_1^{(\mathbf{k+1})}+ & & +a_{23}x_3^{(k)} &)+\frac{b_2}{a_{22}} \\ x_3^{(k+1)} &= & -\frac{1}{a_{33}}(& a_{31}x_1^{(\mathbf{k+1})}+ & a_{32}x_2^{(\mathbf{k+1})} & &)+\frac{b_3}{a_{33}} \end{cases}$$

令$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \tilde{\mathbf{L}} - \tilde{\mathbf{U}}$，其中$\mathbf{D}$，$\tilde{\mathbf{L}}$，$\tilde{\mathbf{U}}$分别为$\mathbf{A}$的对角部分、下三角部分（取相反数）、上三角部分（取相反数）。得到迭代公式为：

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{L}^{-1}(\mathbf{L}-\mathbf{A})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b}$$

其中$\mathbf{L} = \mathbf{D} - \tilde{\mathbf{L}}$为$\mathbf{A}$的下三角阵。

若按照从n到1的顺序计算解分量，则称为**逆向G-S迭代法**；若每轮迭代时，交替从1到n、n到1计算解分量，则称为**对称G-S迭代法。**

4.3Successive Over Relaxation（SOR）迭代法

在**G-S迭代法**的基础上引入**松弛因子**ω，令：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} &= (1-\omega)x_1^{(k)} + \omega x_1^{(k+1)'} \\ x_2^{(k+1)} &= (1-\omega)x_2^{(k)} + \omega x_2^{(k+1)'} \\ x_3^{(k+1)} &= (1-\omega)x_3^{(k)} + \omega x_3^{(k+1)'} \end{cases}$$

其中$x_i^{(k+1)'}$为**G-S迭代法**计算出的$x_i^{(k+1)}$的值。当$\omega = 1$时，**SOR迭代法**就退化为**G-S迭代法。**其迭代方程为：

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (1-\omega)\mathbf{x}^{(k)} + \omega\mathbf{D}^{-1}[\tilde{\mathbf{L}}\mathbf{x}^{(k+1)} + \tilde{\mathbf{U}}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}]$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D}-\omega\tilde{\mathbf{L}})^{-1}[(1-\omega)\mathbf{D} + \omega\tilde{\mathbf{U}}]\mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{D}-\omega\tilde{\mathbf{L}})^{-1}\omega\mathbf{b}$$

4.4三种迭代法的收敛条件

设$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, n \ge 2$，若存在**排列阵**$\mathbf{P}$使得

$$\mathbf{P}^T\mathbf{A}\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}$$

其中$\mathbf{A}_{\mathbf{11}}, \mathbf{A}_{22}$均为**方阵**，则称$\mathbf{A}$为**可约矩阵**，否则为**不可约矩阵。**

Theorem 4.8：若$\mathbf{A}$为对角元> 0的对称阵，则雅可比迭代法**全局收敛**$\Leftrightarrow$ $\mathbf{A}$与$2\mathbf{D}-\mathbf{A}$都**正定。**

Theorem 4.9：考察雅可比迭代法的迭代矩阵$\mathbf{B}$，若$||\mathbf{B}||_1 < 1$或$||\mathbf{B}||_\infty < 1$，则**G-S迭代法**收敛。

Theorem 4.10 **对角占优定理**：若矩阵$\mathbf{A}$为**严格对角占优矩阵**，或**不可约的弱对角占优矩阵**，则$\mathbf{A}$**非奇异。**

Theorem 4.11：对*Theorem 4.10*中描述的$\mathbf{A}$，求解$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$的**雅可比迭代法**与**G-S迭代法**均收敛。若松弛因子$0<\omega\leq 1$，则**SOR迭代法**也收敛。

Theorem 4.12：对于**对称正定矩阵**$\mathbf{A}$，**G-S迭代法**均收敛，若$0<\omega<2$，则相应的**SOR迭代法**也收敛。

Theorem 4.13：**SOR迭代法**收敛的**必要条件**：$\omega\in(0,2)$

证明：有

$$\mathbf{B}_S=(\mathbf{D}-\omega\tilde{\mathbf{L}})^{-1}[(1-\omega)\mathbf{D}+\omega\tilde{\mathbf{U}}]$$

所以

$$\det\left(\mathbf{B}_S\right)=\det\left(\mathbf{D}-\omega\tilde{\mathbf{L}}\right)^{-1}\det\left((1-\omega)\mathbf{D}+\omega\tilde{\mathbf{U}}\right)=(1-\omega)^n$$

> 注意一个上三角阵/下三角阵的特征值即为对角线上元素的乘积。

而$\det\left(\mathbf{B}_S\right)=\prod_{i=1}^{n}\lambda_i$，因此若**SOR迭代法**收敛
$\Longrightarrow|\det\left(\mathbf{B}_\mathbf{S}\right)|<1\Longrightarrow|1-\omega|<1\Longrightarrow\omega\in(0,2)$。

4.5共轭梯度法

变分原理：将**解线性方程组**转换为**在**n**维空间中搜索极值点。**

设$\mathbf{A}$**对称正定**，则求解$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$等价于求n元二次函数$\phi(x)=\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{Ax}-\mathbf{b}^T\mathbf{x}$的**最小值点。**

> 通过求解$\frac{\partial\phi}{\partial x_i}=0,\ i=1,2,\cdots,n$，可知极小值对应的点$\mathbf{x}^*$即为$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$的解。

求解最小值可采用**最速下降法**，沿**梯度**方向进行搜索。

对于**共轭梯度法**，在当前点$\mathbf{x}^{(k)}$与梯度方向$\mathbf{r}^{(k)}$张成的平面上寻找ϕ函数的最小值。