第4章 逐次逼近法

求解线性方程组的迭代解法

4.1 解线性方程组的迭代法

前面已经介绍了用直接法求解线性方程组：

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \qquad （4\text{-}1）$$

其中 $\boldsymbol{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}, \boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^{n}, \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^{n}$

在用直接法求解的过程中，我们发现系数矩阵$\boldsymbol{A}$在不断变动，如果$\boldsymbol{A}$的阶数较大时，占用计算机的内存就很大，而且程序较复杂，对程序设计的技巧要求也较高。

因此，我们希望找到一种在求解过程中相关的矩阵不变，且程序设计又不复杂的求解方法，这种方法就是迭代法。

使用迭代法求解（4-1）时, 首先要将它变形, 变成如下形状的等价方程组:

（4-1） $$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{Bx} + \boldsymbol{f}$$ （4-2）

其中 $\boldsymbol{B} \in \mathbf{R}^{n\times n}, \boldsymbol{f} \in \mathbf{R}^{n}, \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^{n}$

即（4-1）的解是（4-2）的解，反之，(4-2)的解也是（4-1）的解。用不同的方法构造（4-2）就可得到不同的迭代法。（4-2）中的矩阵$\boldsymbol{B}$称为迭代矩阵。

如果已导出（4-1）的等价方程组(4-2)后，计算(4-1)式的解就转化为求向量序列的极限。

若选取向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 代入 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{f}$ 的右端。

$$\boldsymbol{x}^{(3)}=\boldsymbol{B}\,\boldsymbol{x}^{(2)}+\boldsymbol{f}$$

$$\vdots$$

其一般形式为:

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{f}\qquad(k=0,1,2,\cdots)\qquad\text{（4-3）}$$

如此迭代下去得到一串向量序列:

$$\boldsymbol{x}^{[0]},\quad \boldsymbol{x}^{[1]},\quad \boldsymbol{x}^{[2]},\ \cdots,\quad \boldsymbol{x}^{[k]},\ \cdots$$

通常称使用（4-3）式求解的方法为迭代法，也称迭代过程或迭代格式。

如果对任意 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，都有当 $\boldsymbol{k}\to\infty$时，$\boldsymbol{x}^{(k)}\to\boldsymbol{x}^{*}$。

其中 $\boldsymbol{x}^{(k)}=\left(\boldsymbol{x}_1^{(k)},\boldsymbol{x}_2^{(k)},\cdots,\boldsymbol{x}_n^{(k)}\right)^T$，$\boldsymbol{x}^{*}=\left(\boldsymbol{x}_1^{*},\boldsymbol{x}_2^{*},\cdots,\boldsymbol{x}_n^{*}\right)^T$

也可写成

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{x}^{*} \quad \text{即} \quad \lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}_i^{(k)}=\boldsymbol{x}_i^{*},\qquad i=1,2,\cdots,n$$

则称该迭代法收敛，否则称迭代法发散。 由

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{f}$$

所以收敛迭代法的极限向量x^*， 满足

$$\boldsymbol{x}^{*}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{*}+\boldsymbol{f}$$

即为方程组（**4-2**）的解，从而也是（**4-1**）的解。

因此，使用迭代法求解就是求向量序列 $\boldsymbol{x}^{(0)},\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(2)},\cdots$ 的极限向量 x^*。

4.1.1 简单迭代法

简单迭代法也称基本迭代法, 有些迭代法可以通过对基本迭代法的加速或变形而得到。设线性方程组的一般形式为

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

其中矩阵$A=(a_{ij})_{n\times n}$为非奇异, 且$a_{ii}\neq 0$ $(i=1, 2, \cdots, n)$。

对上式移项和变形后可得等价的方程组:

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{11}}\left(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)} \right) \\
\quad\vdots \\
x_i^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{ii}}\left(b_i - a_{i1}x_1^{(k)} - \cdots - a_{ii-1}x_{i-1}^{(k)} - a_{ii+1}x_{i+1}^{(k)} - \cdots - a_{in}x_n^{(k)} \right) \\
\quad\vdots \\
x_n^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{nn}}\left(b_n - a_{n1}x_1^{(k)} - \cdots - a_{nn-1}x_{n-1}^{(k)} \right)
\end{cases}
\tag{4-4}
$$

可将（**4-4**）写成统一的迭代公式, 即

$$
x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} \right) \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{4-5}
$$

也可写成

$$
x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} \right) (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{4-6}
$$

迭代法（**4-5**）或（**4-6**）称为**Jacobi迭代法**。

例1 将线性方程组

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 12 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \Longrightarrow x_1^{(k+1)} = \frac{1}{8}\left(3x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)} + 20\right) \\ \Longrightarrow x_2^{(k+1)} = \frac{1}{11}\left(-4x_1^{(k)} + x_3^{(k)} + 33\right) \\ \Longrightarrow x_3^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left(-2x_1^{(k)} - x_2^{(k)} + 12\right) \end{array}$$

解：写成**Jacobi**迭代格式（**4-5**）：**终止条件为：**$\left\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right\| \le 10^{-5}$ 。

取初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (0,0,0)^T$，代入计算得

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\right) \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \qquad \text{（3-5）}$$

$$x_1^{(1)} = \frac{20}{8}, \quad x_1^{(2)} = \frac{1}{8}(20 + 3\times 3 - 2\times 3) \approx 2.875, \quad \cdots, \quad x_1^{(10)} \approx 3.00032$$

$$x_2^{(1)} = \frac{33}{11} = 3, \quad x_2^{(2)} = \frac{1}{11}\left(33 + 4\times\frac{20}{8} + 3\right) \approx 2.3636, \cdots, x_2^{(10)} \approx 1.999838$$

$$x_3^{(1)} = \frac{12}{4} = 3, \quad x_3^{(2)} = \frac{1}{4}\left(12 - 2\times\frac{20}{8} - 3\right) \approx 1, \quad \cdots, \quad x_3^{(10)} \approx 0.999881$$

精确解为：$x^* = (3, 2, 1)^T$ 。

注意在Jacobi迭代过程中，对已经算出来的信息未加充分利用，如在计算$x_2^{(k+1)}$时$x_1^{(k+1)}$已经算出。计算$x_i^{(k+1)}$时，$x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$也已经算出。一般说来，收敛的迭代法后计算出的值$x_j^{(k+1)}$应比前一步的计算值$x_j^{(k)}$要精确些。

故对Jacobi迭代法（4-5）可作如下改进：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{8}(20 + 3x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{11}(33 - 4\ x_1^{(k)} + x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \dfrac{1}{4}(12 - 2\ x_1^{(k)} - x_2^{(k)}\ ) \end{cases}
\qquad
\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{8}\left(20 + 3x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}\right) \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{11}\left(33 - 4\qquad + x_3^{(k)}\right) \\ x_3^{(k+1)} = \dfrac{1}{4}\left(12 - 2\qquad - \qquad\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{8}(20 + 3x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{11}(33 - 4\ x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \dfrac{1}{4}(12 - 2\ x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)}\ ) \end{cases}$$

仍取初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (0,0,0)^T$

终止条件为：$\left\| \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)} \right\| \le 10^{-5}$

$$x_1^{(1)} = \frac{20}{8} = 2.5,\quad \cdots,\quad x_1^{(5)} \approx 2.999843,$$

$$x_2^{(1)} = 3 - 0.363636 \times 2.5 \approx 2.0909091,\quad \cdots,\quad x_2^{(5)} \approx 2.000072,$$

$$x_3^{(1)} = 3 - 0.5 \times 2.5 - 0.25 \times 2.0909091 \approx 1.768939,\quad \cdots,\quad x_3^{(5)} \approx 1.000061。$$

结论，对于求解此方程组而言，改进后的迭代法比**Jacobi**迭代法效率高。

将计算公式写成如下的分量形式, 即

$$\begin{cases} x_i^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\right) \quad i = 1, 2, \cdots, n \\ k = 0, 1, 2, \cdots; \end{cases} \tag{4-9}$$

称为**Gauss-Seidel**迭代法。

Jacobi迭代法的分量形式的计算公式:

$$\begin{cases} x_i^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum\limits_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}\right) \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \\ k = 0, 1, 2, \cdots; \end{cases}$$

给出求解方程组 $\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}$ 的**J**和**G-S**迭代法。

Jacobi迭代法:

$$x_1^{(k+1)} = 1 - 2x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)}$$

$$x_2^{(k+1)} = 1 - x_1^{(k)} - x_3^{(k)}$$

$$x_3^{(k+1)} = 1 - 2x_1^{(k)} - 2x_2^{(k)}$$

Gauss-Seidel迭代法:

$$x_1^{(k+1)} = 1 - 2x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)}$$

$$x_2^{(k+1)} = 1 - x_1^{(k+1)} - x_3^{(k)}$$

$$x_3^{(k+1)} = 1 - 2x_1^{(k+1)} - 2x_2^{(k+1)}$$

迭代法的收敛性

我们要考虑如下问题：

① 如何判断迭代过程是否收敛呢？

② 迭代格式收敛的充要条件、充分条件是什么？

③ 决定迭代收敛速度的因素是什么？

设某种迭代格式为

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

且该线性方程组的精确解为 $\boldsymbol{x}^*$，则

$$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{f}$$

两式相减，得

$$x^{(k+1)}-x^{*}=Bx^{(k)}-Bx^{*}=B\left(x^{(k)}-x^{*}\right)=\cdots=B^{k+1}\left(x^{(0)}-x^{*}\right)$$

令 $\varepsilon^{(k)}=x^{(k)}-x^{*}$，则

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

故当 $\lim\limits_{k\to\infty}\varepsilon^{(k+1)}=0$ 时， $\lim\limits_{k\to\infty}\varepsilon^{(k+1)}=\lim\limits_{k\to\infty}\left(B^{k+1}\varepsilon^{(0)}\right)=0$

而 $\varepsilon^{(0)}=x^{(0)}-x^{*}$ 是一个非零的常向量，因此只有

$$\lim_{k\to\infty}B^{k+1}=O_{n\times n}\quad\text{（零矩阵）}$$

定理 4.1 $\lim_{k\to\infty}\varepsilon^{(k)}=0$ （即 $x_i^{(k)}\to x_i^*,\ i=1,2,\cdots,n$）

的充分而且必要条件是 $\lim_{k\to\infty}B^k=O_{n\times n} \Leftrightarrow \rho(B)<1$ 。

定理 4.2 迭代法

$$x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+f \tag{4-12}$$

对任意$x^{(0)}$和f均收敛的充要条件为：

定理 4.3(充分条件) 若 $\|B\|<1$, 则迭代法收敛，

且有

$$\|x^{(k)}-x^*\|\le\frac{\|B\|}{1-\|B\|}\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\| \tag{4-13}$$

证 **由于** $\rho(x) \leqslant \| B \| < 1$，**根据定理**4.2**知，迭代法（4-12）**收敛。因为

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = Bx^{(k)} - Bx^{(k-1)} = B\left(x^{(k)} - x^{(k-1)}\right)$$

而且

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

所以

$$\| x^{(k)} - x^{*} \| \leq \| x^{(k+1)} - x^{(k)} \| + \left\| x^{(k+1)} - x^{*} \right\|$$

$$\leq \| B \| \| x^{(k)} - x^{(k-1)} \| + \| B \| \left\| x^{(k)} - x^{*} \right\|$$

移项后得到

$$\left(1 - \| B \|\right) \| x^{(k)} - x^{*} \| \leq \| B \| \| x^{(k)} - x^{(k-1)} \|$$

即

$$\| x^{(k)} - x^{*} \| \leq \frac{\| B \|}{1 - \| B \|} \| x^{(k)} - x^{(k-1)} \|$$

若设

$$
\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1i} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
a_{i1} & \cdots & a_{ii-1} & a_{ii} & \cdots & a_{in} \\
\vdots & & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & \cdots & a_{ni-1} & \cdots & a_{nn-1} & a_{nn}
\end{pmatrix}
$$

记

$$
\boldsymbol{D}=\begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix}
$$

$$
\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix} 0 & & & & & 0 \\ -a_{21} & 0 & & & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & & & \\ -a_{j1} & \cdots & -a_{jj-1} & 0 & & \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{nj-1} & \cdots & -a_{nn-1} & 0 \end{pmatrix}
\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1j} & \cdots & -a_{1n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & 0 & -a_{j-1j} & \cdots & -a_{j-1n} \\ & & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & & 0 & -a_{n-1n} \\ 0 & & & & & 0 \end{pmatrix}
$$

则

$$
\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U}
$$

线性方程组：$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$　　等价方程组：$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{f}$

将系数矩阵分解为：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U}$

$$(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$$

① $$\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}$$

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

迭代公式：$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}_J\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{f}_J \qquad k=0,1,2,\cdots$

其中迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_J=\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})$ 和 $\boldsymbol{f}_J=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$

此即为**Jacobi**迭代法的矩阵表示。

再注意到，$\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}=\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}$，从而 $\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}$

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

观察Jacobi迭代法

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

迭代矩阵

则其矩阵形式的迭代公式为：

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_i^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & -\frac{a_{1j}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ -\frac{a_{i1}}{a_{ii}} & \cdots & 0 & \cdots & -\frac{a_{in}}{a_{ii}} \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \cdots & -\frac{a_{nj}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_i^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \vdots \\ \frac{b_i}{a_{ii}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}$$

注意：

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \cdots & -\frac{a_{1i}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ -\frac{a_{i1}}{a_{ii}} & \cdots & 0 & \cdots & -\frac{a_{in}}{a_{ii}} \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \cdots & -\frac{a_{ni}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{B}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & \\ & \frac{1}{a_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{D}^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \cdots & -a_{1i} & \cdots & -a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ -a_{i1} & \cdots & 0 & \cdots & -a_{in} \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{ni} & \cdots & 0 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}}$$

$$\boldsymbol{f} \quad \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \vdots \\ \frac{b_i}{a_{ii}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \frac{1}{a_{ii}} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{D}^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_i \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{b}}$$

*由系数矩阵*A*得到Jacobi法的迭代矩阵的方法*

$$
B_J = \begin{pmatrix}
0 & \cdots & -\frac{a_{1i}}{\;} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{\;} \\
\vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots \\
-\frac{a_{i1}}{\;} & \cdots & 0 & \cdots & -\frac{a_{in}}{\;} \\
\vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
-\frac{a_{n1}}{\;} & \cdots & -\frac{a_{ni}}{\;} & \cdots & 0
\end{pmatrix} = I - D^{-1}A
$$

线性方程组：$Ax = b$ 等价方程组：$x = Bx + f$

将系数矩阵分解为：$A = D - L - U$

$$(D - L - U)x = b$$

---

② $$(D - L)x = Ux + b$$

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

迭代公式：$x^{(k+1)} = B_{G-S}x^{(k)} + f_{G\text{-}S} \quad k = 0, 1, 2, \cdots$

其中迭代矩阵 $B_{G\text{-}S} = (D - L)^{-1}U$

和

$$f_{G\text{-}S} = (D - L)^{-1}b$$

此即为**Gauss-Seidel**迭代法的矩阵表示。

将**Gauss-Seidel**公式改写成

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + b_i \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

从而可写成矩阵形式为

$$\overset{\boldsymbol{D}}{\begin{pmatrix} a_{11} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & a_{ii} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & a_{nn} \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_i^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \overset{\boldsymbol{L}}{\begin{pmatrix} 0 & & & & \\ \vdots & \ddots & & & \\ -a_{i1} & \cdots & 0 & & \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{ni} & \cdots & 0 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_i^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix}$$

$$+ \underset{\boldsymbol{U}}{\begin{pmatrix} 0 & \cdots & -a_{1i} & \cdots & -a_{1n} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & 0 & \cdots & -a_{in} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & 0 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_i^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} + \overset{\boldsymbol{b}}{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}}$$

从而有

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

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

整理后可得

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

取 $\boldsymbol{B}_{G-S} = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}$ $\qquad \boldsymbol{f}_{G-S} = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$

即 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}_{G-S}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}_{G-S} \quad (k = 0, 1, \cdots)$ （**4-10**）

Gauss-Seidel迭代法。

例5 $A=\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ **Jacobi**法和**G-S**法求解是否收敛。

解： 由，

$$B_J=D^{-1}\left(L+U\right)=\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -1 & 0 & -1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

令，

$$\det\left(\lambda I-B_J\right)=\begin{vmatrix} \lambda & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -1 & \lambda & -1 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \lambda \end{vmatrix}=\lambda^3+\frac{5}{4}\lambda=0$$

得，$\lambda_1=0$，$\lambda_{2,3}=\pm i\frac{\sqrt{5}}{2}$，$\rho(B_J)=\frac{\sqrt{5}}{2}>1$。从而，**J**迭代法发散。

由

$$B_G=(D-L)^{-1}U=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & & \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & -1\\ & 0 & -2\\ & & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ & & 0\end{pmatrix}$$

则

$$\det\left(\lambda I-B_{G-S}\right)=\begin{vmatrix}\lambda & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ & \lambda+\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ & & \lambda\end{vmatrix}=\lambda^2\left(\lambda+\frac{1}{2}\right)=0$$

得 $\rho(B_{G\text{-}S})=\frac{1}{2}<1$，从而，**G-S**迭代法收敛。

提示： G-S为 $B_G=(D-L)^{-1}U$, 则B_G的特征值 λ 满足:

$$\det\left(\lambda I-(D-L)^{-1}U\right)=\det\left[(D-L)^{-1}\left[\lambda(D-L)-U\right]\right]$$

$$=\det(D-L)^{-1}\det\left[\lambda(D-L)-U\right]=0$$

因为 $\det(D-L)^{-1}\neq 0$，故必有 $\det\left[\lambda\boxed{(D-L)-U}\right]=0$

记 $C=\lambda(D-L)-U=\begin{pmatrix}\lambda a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & & \lambda a_{nn}\end{pmatrix}$

则在理论上只需求 $\det\left(C\left(\lambda\right)\right)=0$ 得到G-S迭代矩阵的特征值 λ 。

例6　设线性方程组$Ax=b$, 其中 $A=\begin{pmatrix}3 & 0 & -2\\ 0 & 2 & 1\\ -2 & 1 & 2\end{pmatrix}$

问使用**Jacobi**法和**G-S**法求解是否收敛。

（1）**Jacobi**迭代法的迭代矩阵为:

$$\boldsymbol{B}_J=\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})=\begin{pmatrix}0 & 0 & \frac{2}{3}\\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\\ 1 & -\frac{1}{2} & 0\end{pmatrix},$$

则

$$\det\left(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_J\right)=\begin{vmatrix}\lambda & 0 & -\frac{2}{3}\\ 0 & \lambda & 1\\ -1 & \frac{1}{2} & \lambda\end{vmatrix}=\lambda^3-\frac{2}{3}\lambda-\frac{1}{4}\lambda=\lambda\left(\lambda^2-\frac{11}{12}\right)=0$$

得　$\rho(\boldsymbol{B}_J)=\sqrt{\frac{11}{12}}=0.9574<1$，故**Jacobi**迭代法收敛。

（2）设**G-S**迭代法的迭代矩阵$\boldsymbol{B}_G$的特征值为 λ，由

$$\det\left(\lambda\left(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}\right)-\boldsymbol{U}\right)=\begin{vmatrix}3\lambda & 0 & -2\\ 0 & 2\lambda & 1\\ -2\lambda & \lambda & 2\lambda\end{vmatrix}=12\lambda^3-8\lambda^2-3\lambda^2$$

$$=\lambda^2\left(12\lambda-11\right)=0$$

得

$$\rho\left(\boldsymbol{B}_{G\text{-}S}\right)=\frac{11}{12}=0.9167<1$$，故**G-S**迭代法收敛。

定义：$\mathbf{R}(\boldsymbol{B})=-\ln\left(\rho(\boldsymbol{B})\right)$ 称为迭代法的渐进收敛速度。

即

$$\mathbf{R}(\boldsymbol{B}_J)=-\ln\left(\rho(\boldsymbol{B}_J)\right)=-\ln\left(0.9754\right)\approx 0.043534$$

$$\mathbf{R}(\boldsymbol{B}_{G\text{-}S})=-\ln\left(\rho(\boldsymbol{B}_{G\text{-}S})\right)=-\ln\left(0.9167\right)\approx 0.086975$$

故可知**G-S**迭代法收敛得快。

若记 ε 为终止迭代的精度，则有迭代步数： $k \ge \dfrac{-\ln\varepsilon}{\mathbf{R}(\boldsymbol{B})}$

如取 $\varepsilon = 5\times 10^{-6}$，则

$$k \ge \frac{-\ln\varepsilon}{\mathbf{R}(\boldsymbol{B}_J)} = \frac{12.206073}{0.043534} \approx 281 \quad \text{取} \quad k = 282$$

$$k \ge \frac{-\ln\varepsilon}{\mathbf{R}(\boldsymbol{B}_{G\text{-}S})} = \frac{12.206073}{0.086975} \approx 141 \quad \text{取} \quad k = 142$$

练习1　设线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}，其中 \quad \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

问使用**Jacobi**法和**G-S**法求解是否收敛。

（1）求**Jacobi**迭代法的迭代矩阵

$$\boldsymbol{B}_J=\boldsymbol{D}^{-1}\left(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}\right)=\begin{pmatrix}0 & -2 & 2\\ -1 & 0 & -1\\ -2 & -2 & 0\end{pmatrix}$$

则

$$\det\left(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_J\right)=\begin{vmatrix}\lambda & 2 & -2\\ 1 & \lambda & 1\\ 2 & 2 & \lambda\end{vmatrix}=\lambda^3=0$$

即 $\rho\left(\boldsymbol{B}\right)=0<1$, 故**Jacobi**迭代法收敛。

（2）求**G-S**迭代法的迭代矩阵$\boldsymbol{B}_G$，由

$$\det\left(\lambda\left(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}\right)-\boldsymbol{U}\right)=\begin{vmatrix}\lambda & 2 & -2\\ \lambda & \lambda & 1\\ 2\lambda & 2\lambda & \lambda\end{vmatrix}$$

$$=\lambda^3-4\lambda^2+4\lambda=\lambda(\lambda-2)^2=0$$

进一步得 $\rho(\boldsymbol{B}_G)=2>1$，故**G-S**迭代法发散。

在理论上，若迭代矩阵的谱半径 $\rho(\boldsymbol{B})=0$，那么迭代法可在有限步内的到精确解。

事实上, 若 $\rho(\boldsymbol{B})=0$，则可知其特征多项式

$$\psi(\lambda)=\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B})=\lambda^n$$

由**Hamilton-Caylay**定理

$$\psi(\boldsymbol{B})=\boldsymbol{B}^n=\boldsymbol{0}$$

则

$$\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{B}^k\left(\boldsymbol{x}^{(0)}-\boldsymbol{x}^*\right)=\boldsymbol{B}^n\left(\boldsymbol{x}^{(0)}-\boldsymbol{x}^*\right)=\boldsymbol{0}$$

对于某些特殊的方程组，从方程组本身就可判定其收敛性。不必求迭代矩阵的特征值或范数。

定义4.1 如果矩阵$A=(a_{ij})_{n\times n}$的元素满足不等式

$$|a_{ii}|\geq\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n}|a_{ij}| \qquad (i=1,2,\cdots,n) \qquad (4\text{-}14)$$

则称矩阵A为对角占优阵，如果（4–14）中严格不等式成立，称矩阵A为严格对角占优阵。

$$\begin{pmatrix}5&-2&2\\-1&2&-1\\-2&-2&6\end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix}4&-1&0\\-1&4&-1\\0&-1&4\end{pmatrix}$$

对角占优矩阵 严格对角占优矩阵

可以证明严格对角占优阵A为非奇异矩阵，即

$$\det(A)\neq 0$$

证1 反证法，若A为奇异矩阵，即存在非零向量$\boldsymbol{x}$, 满足

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$$

其中 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_1, \cdots, x_n)^T$, 设 $|x_k| = \max_j |x_j|$，则有

$$\sum_{j=1}^{n} a_{kj} x_j = 0$$

$$|a_{kk} x_k| = \left| -\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} a_{kj} x_j \right| \leq \sum_{j\neq i}^{n} |a_{kj} x_j|$$

即

$$|a_{kk}||x_k| \leq \sum_{j\neq k} |a_{kj}||x_k|$$

与A为严格对角占优阵矛盾。

证明2：因为A为严格对角占优阵，所以

$$\boldsymbol{D} = \mathbf{diag}(a_{11}, a_{22}, \cdots, a_{\mathrm{nn}})$$

非奇异。 注意

$$\boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{nn}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

则 $\|\boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\limits_i \sum\limits_{j \neq i} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right|$， 因为$A$为严格对角占优阵，即

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

所以 $\frac{1}{|a_{ii}|}\sum\limits_{j \neq i} |a_{ij}| < 1 \quad (i = 1,2,\cdots,n)$ 即

$$\|\boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}\|_\infty = \max_i \sum_{j \neq i} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| < 1$$

同时根据定理4.3 **Jacobi**迭代法收敛。

由定理**1.8**可知， $\boldsymbol{I} - (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}$ 非奇异，故A非奇异。

定理4.4（充分性条件）若线性方程组

$$Ax = b$$

中的A为严格对角占优阵，则**Jacobi**法和**Gauss-Seidel** 法均收敛。

（2）**G-S**迭代矩阵为 $\boldsymbol{B}_G=(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}$, 则$\boldsymbol{B}_G$的特征值 λ 满足:

$$\det[\lambda(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})-\boldsymbol{U}]=0$$

其中

$$\boldsymbol{C}=\lambda(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})-\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix} \lambda a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nn} \end{pmatrix}$$

现在$\boldsymbol{B}_G$的特征值证明 | λ | <1。用反证法，假设 | λ | ≥1,

又由于$\boldsymbol{A}$为严格对角占优阵, 则应有 $(i=1,2,\cdots,n)$

$$|\lambda||a_{ii}|>|\lambda|\sum_{j\neq i}|a_{ij}| = \sum_{j\neq i}|\lambda||a_{ij}| \geq \sum_{j=1}^{i-1}|\lambda||a_{ij}|+\sum_{j=i+1}^{n}|a_{ij}||\lambda|$$

即矩阵 $\boldsymbol{C}$ 为严格对角占优阵, 故 $\det(\boldsymbol{C})\neq \boldsymbol{O}$，与C奇异矛盾, 则必有 $|\lambda|<1$。则 $\boldsymbol{B}_G$ 的所有特征值的绝对值均小于1, 即 $\rho(\boldsymbol{B}_G)<1$。

根据定理3.2，**G-S**迭代法收敛。

例3，设 $$\begin{cases} 4x_1 - x_2 = 1 \\ -x_1 + 4x_2 - x_3 = 4 \\ -x_2 + 4x_3 = -3 \end{cases}$$

考察J和G-S迭代法的敛散性。

解： 由于系数矩阵 $A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$ 严格对角占优，

故J和G-S迭代法的收敛。

THE END

Carl Jacobi 雅各比 （1804.12.10—1851.2.18）

Jacobi出生在德国 一个犹太家庭，卒于柏林 。

他对数学主要的贡献是在椭圆函数及椭圆积分上，并把这些理论应用在数论上而得到很好的结果。

Jacobi很具有数学天份。他从欧拉及**Lagrange** 的著作中学习代数及微积分，并被吸引到数论的领域。他处理代数问题的手腕只有**Euler**可以相提并论。

年轻的时候，**Jacobi** 有许多发现都跟**Gauss**的结果重迭。 **Gauss**很看重**Jacobi**，**1849**年**45**岁的时候，除了**Gauss**之外，**Jacobi** 已经是欧洲最有名的数学家了。

1834年**Jacobi**证明：如果一个单变量单值函数有两个周期，则其比值为虚数。

Jacobi在一阶偏微分方程的研究中做出了许多工作，并把他们应用到了微分动态方程中。他还研究了函数的判定，发现了函数判定的**Jacobi**行列式（**Jacobian**）**.**他证明：如果n个自变量为n个的函数是相关的，那么其**Jacobian**恒为**0**，如果是独立的，那么**Jacobian**不恒为**0**。

他在数学物理上也有建树，在量子力学中他的 **Hamilton-Jacobi**方程扮演了一个革命性的角色。

1851年**1**月 **Jacobi**感染了流感，后来又感染了天花病毒。几天后的**1851**年**2**月**18**日，**Jacobi**因天花而死去。享年**47**岁！