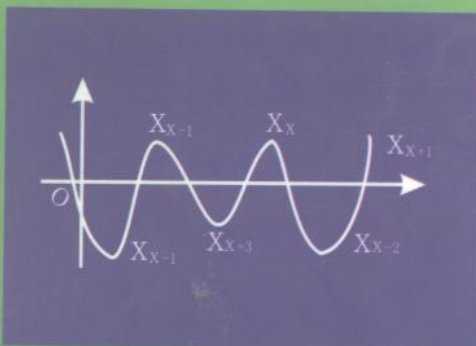
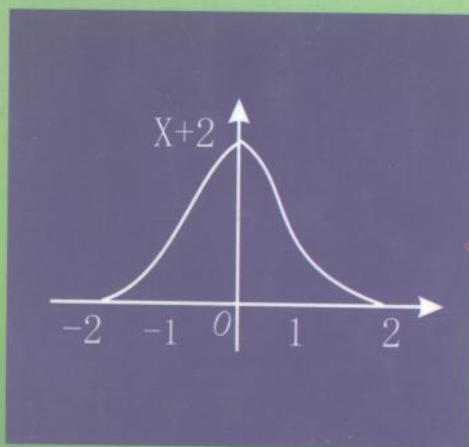


数值计算方法
(下册)

数值计算方法

林成森 编著

(下册)



02/1

科学出版社

数值计算方法

(下册)

林成森 编著

科学出版社

1998

内 容 简 介

本书详细地介绍了计算机中常用的数值计算方法,主要包括:解线性方程组的迭代法、线性最小二乘问题、矩阵特征值问题、解非线性方程组的数值方法、常微分方程初值和边值问题的数值解法、函数逼近。本书每章末均附有丰富、实用的习题。本书在南京大学数学系和计算机科学系作为教材。

本书可作为高校数学系、计算机系教材;也可供工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法 下册/林成森编著。-北京:科学出版社,1998

ISBN 7-03-006190-X

I. 数… II. 林… III. 数值计算-计算方法 IV. 0241

中国版本图书馆CIP数据核字(97)第17467号

3P20/17

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

北京双青印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1998年3月第一版 开本:787×1092 1/16

1998年3月第一次印刷 印张:18 1/2

印数:1—3 600 字数:427 000

定价:29.60元

目 录

第六章 解线性方程组的迭代法	1
§ 1 迭代法的基本理论	1
§ 2 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法	5
2.1 Jacobi 迭代法	5
2.2 Gauss-Seidel 迭代法	8
§ 3 逐次超松弛迭代法 (SOR 方法)	12
3.1 SOR 方法	12
3.2 SOR 方法的收敛性	15
3.3 相容次序、性质 A 和最佳松弛因子	16
3.4 SOR 方法的收敛速度	28
§ 4 Chebyshev 半迭代法	29
4.1 半迭代法	29
4.2 Chebyshev 半迭代法	31
§ 5 共轭斜量法	36
5.1 一般的共轭方向法	36
5.2 共轭斜量法	40
§ 6 条件预优方法	50
§ 7 迭代改善方法	54
习题	56
第七章 线性最小二乘问题	60
§ 1 线性方程组的最小二乘解	60
§ 2 广义逆矩阵	64
§ 3 直交分解	66
3.1 Gram-Schmidt 直交化方法	66
3.2 直交分解和线性方程组的最小二乘解	70
3.3 Householder 变换	74
3.4 列主元 QR 方法	80
§ 4 奇异值分解	81
§ 5 数据拟合	83
§ 6 线性最小二乘问题	87
§ 7 Chebyshev 多项式在数据拟合中的应用	90
习题	95

第八章 矩阵特征值问题	99
§ 1 乘幂法	99
1.1 乘幂法	99
1.2 乘幂法的加速	106
1.3 求模数次大诸特征值的降阶法	108
1.4 逆迭代法 (反乘幂法)	111
§ 2 计算实对称矩阵特征值的同时迭代法	114
§ 3 计算实对称矩阵特征值的 Jacobi 方法	116
3.1 Givens 平面旋转矩阵	117
3.2 Jacobi 方法及其收敛性	118
3.3 实用的 Jacobi 方法及其计算步骤	119
§ 4 Givens-Householder 方法	121
4.1 实对称矩阵的三对角化	121
4.2 计算实对称三对角矩阵特征值的二分法	132
§ 5 QR 方法	136
5.1 基本的 QR 方法	136
5.2 带原点平移的 QR 方法	139
§ 6 广义特征值问题	141
6.1 问题 $Ax = \lambda Bx$ 的特征值	142
6.2 问题 $ABx = \lambda x$ 的特征值	143
6.3 问题 $Ax = \lambda Bx$ 和 $ABx = \lambda x$ 的特征向量	144
习题	144
第九章 解非线性方程组的数值方法	146
§ 1 多变元微积分	146
1.1 Gateaux 导数	146
1.2 Frechet 导数	149
1.3 高阶导数	151
1.4 Riemann 积分	153
§ 2 不动点迭代	156
§ 3 Newton 法	160
3.1 Newton 法	160
3.2 修正 Newton 法	165
§ 4 割线法	166
§ 5 拟 Newton 法	171
5.1 Broyden 方法	171
5.2 DFP 方法和 BFS 方法	175
§ 6 下降算法	176
习题	178

第十章 常微分方程初值问题的数值解法	181
§ 1 引言	181
§ 2 离散变量法和离散误差	182
§ 3 单步法	186
3.1 Euler 方法	186
3.2 改进的 Euler 方法	190
3.3 Runge-Kutta 方法	193
3.4 自适应 Runge-Kutta 方法	201
3.5 Richardson 外推法	205
§ 4 单步法的相容性、收敛性和稳定性	206
4.1 相容性	206
4.2 收敛性	207
4.3 稳定性	210
§ 5 多步法	213
5.1 线性多步法	213
5.2 Adams 方法	214
5.3 预测-校正方法	219
5.4 Hamming 方法	223
5.5 稳式公式的迭代解法	227
§ 6 差分方程简介	228
6.1 线性差分方程	229
6.2 常系数线性差分方程	233
§ 7 线性多步法的相容性、收敛性和数值稳定性	237
7.1 相容性	237
7.2 收敛性	238
7.3 稳定性	239
7.4 绝对稳定性	244
§ 8 常微分方程组和高阶微分方程的数值解法	247
8.1 微分方程组	247
8.2 高阶微分方程	250
习题	252
第十一章 常微分方程边值问题的数值解法	258
§ 1 差分方法	258
1.1 解线性微分方程第一边值问题的差分方法	259
1.2 解线性微分方程第二、第三边值问题的差分方法	263
1.3 非线性问题	265
§ 2 打靶法	267
习题	270

第十二章 函数逼近	272
§ 1 函数逼近问题	272
§ 2 最佳一致逼近	274
§ 3 最佳平方逼近	280
习题	286
参考文献	288

第六章 解线性方程组的迭代法

§ 1 迭代法的基本理论

这一章,我们将继续讨论解线性方程组

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

的数值方法,此处 $A=[a_{ij}]$ 是 n 阶非奇异矩阵. 通常,将线性方程组(1.1)的数值解法分为两类:一类是如第三章介绍的直接法;另一类是迭代法,它是一种极限方法,即对任意给定的初始近似向量 x_0, x_1, \dots, x_{r-1} ,按某规则逐次生成一个无穷向量序列

$$x_0, x_1, \dots, x_{r-1}, x_r, \dots, x_k, \dots, \quad (1.2)$$

并使极限

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$$

为方程组(1.1)的解.

直接法和迭代法各有优缺点. 直接法的计算工作量较小,但需要较大的存贮量,并且程序复杂. 一般来说,它适用于方程组的系数矩阵阶数不太高的问题. 以后我们将看到,迭代法需要的存贮量较小,程序较简单,但计算工作量有时较大. 它适用于某些高阶问题.

解线性方程组(1.1)的迭代法的一般迭代公式可写成

$$x_k = f_k(x_{k-1}, x_{k-2}, \dots, x_{k-r}), \quad k = r, r+1, \dots, \quad (1.3)$$

其中 r 为某一个正整数, $f_k(x_{k-1}, x_{k-2}, \dots, x_{k-r})$ 为 $x_{k-1}, x_{k-2}, \dots, x_{k-r}$ 的一个(向量值)函数(参见第九章 § 1 节). 给定初始近似向量 x_0, x_1, \dots, x_{r-1} , 据公式(1.3)便可逐次生成向量序列(1.2).

我们称(1.3)为 r 阶迭代公式或 r 阶迭代法.

若对任意给定的一组初始近似向量 x_0, x_1, \dots, x_{r-1} , 由迭代法(1.3)生成的向量序列 $\{x_k\}$ 都收敛于方程组(1.1)的解 x^* , 则说该迭代法收敛, 否则, 说该迭代法不收敛或发散. 我们称向量

$$e^{(k)} = x^* - x_k$$

为迭代法(1.3)的第 k 步的误差向量. 若迭代法收敛, 则称 x_k 为第 k 步迭代得到的方程组(1.1)的近似解.

一阶线性迭代法的一般迭代公式可写成

$$x_k = x_{k-1} + H_k(b - Ax_{k-1}), \quad k = 1, 2, \dots, \quad (1.4)$$

其中 $\{H_k\}$ 为 n 阶矩阵序列. 由(1.4)式

$$\begin{aligned} x_k &= x_{k-1} - H_k A x_{k-1} + H_k b \\ &= (I - H_k A) x_{k-1} + H_k b. \end{aligned}$$

记

$$G_k = I - H_k A \quad (1.5)$$

以及

$$g_k = H_k b,$$

那么,迭代公式(1.4)还可写成

$$x_k = G_k x_{k-1} + g_k. \quad (1.6)$$

反之,若方程组(1.1)的解是与迭代公式(1.6)相应的方程组集

$$x = G_k x + g_k, \quad k = 1, 2, \dots$$

的每一个方程组的解,则迭代公式(1.6)也可以写成(1.4)式的形式.事实上,设 x^* 是方程组(1.1)的解,则

$$\begin{aligned} x_k &= G_k x_{k-1} + g_k \\ &= x^* - G_k x^* - g_k + G_k x_{k-1} + g_k \\ &= x^* - x_{k-1} + x_{k-1} - G_k (x^* - x_{k-1}) \\ &= x_{k-1} + (I - G_k) A^{-1} A (x^* - x_{k-1}) \\ &= x_{k-1} + (I - G_k) A^{-1} (A x^* - A x_{k-1}) \\ &= x_{k-1} + H_k (b - A x_{k-1}), \end{aligned}$$

其中

$$H_k = (I - G_k) A^{-1}. \quad (1.7)$$

在一阶线性迭代公式(1.6)中,取 $G_k = G, g_k = g (k=1, 2, \dots)$ 得到迭代公式

$$x_k = G x_{k-1} + g, \quad k = 1, 2, \dots. \quad (1.8)$$

我们称(1.8)式为一阶线性定常迭代法,称 G 为该迭代法的迭代矩阵.

假定由一阶线性定常迭代公式(1.8)生成的向量序列 $\{x_k\}$ 有极限 x^* ,显然, x^* 是与(1.8)相应的方程组

$$x = Gx + g,$$

即

$$(I - G)x = g \quad (1.9)$$

的解.自然,我们也希望 x^* 是方程组(1.1)的解.若方程组(1.1)与方程组(1.9)同解,则说迭代法(1.8)与方程组(1.1)是完全相容的.

我们可以按下面方式来构造与方程组(1.1)完全相容的一阶线性定常迭代法的迭代公式.将矩阵 A 分裂成矩阵 Q 和 R 之差

$$A = Q - R, \quad (1.10)$$

其中矩阵 Q 为非奇异的.我们称 Q 为分裂矩阵.于是,方程组(1.1)便可表示成

$$Qx = Rx + b$$

或

$$x = Q^{-1}Rx + Q^{-1}b.$$

令

$$G = Q^{-1}R = I - Q^{-1}A, \quad g = Q^{-1}b, \quad (1.11)$$

则得方程组

$$\mathbf{x} = G\mathbf{x} + \mathbf{g}.$$

这个方程组显然与方程组(1.1)同解. 因此, 这样构造的一阶线性定常迭代法

$$\mathbf{x}_k = G\mathbf{x}_{k-1} + \mathbf{g}$$

与方程组(1.1)是完全相容的.

在 § 2 和 § 3 中, 我们将介绍一些基本的一阶线性定常迭代法: Jacobi 迭代法, Gauss-Seidel 迭代法和逐次超松弛迭代法.

关于一阶线性迭代法, 我们有下面的收敛性定理.

定理 1 迭代法(1.4)收敛的充分必要条件为矩阵序列

$$T_k = (I - H_k A)(I - H_{k-1} A) \cdots (I - H_1 A), \quad k = 1, 2, \cdots \quad (1.12)$$

收敛于零矩阵.

证明 设 \mathbf{x}^* 是方程组(1.1)的解. 由迭代公式(1.4), 我们有

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^{(k)} &= \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k \\ &= \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k-1} - H_k(A\mathbf{x}^* - A\mathbf{x}_{k-1}) \\ &= (I - H_k A)(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k-1}) \\ &= (I - H_k A)(I - H_{k-1} A) \cdots (I - H_1 A)(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0), \end{aligned}$$

因而, 据(1.12)式有

$$\mathbf{e}^{(k)} = T_k(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0) = T_k \mathbf{e}^{(0)}. \quad (1.13)$$

迭代法收敛的充分必要条件为误差向量序列对任意的初始误差向量 $\mathbf{e}^{(0)}$ 都收敛于 $\mathbf{0}$. 于是我们便得到迭代法(1.4)收敛的充分必要条件为

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T_k = O.$$

在实践中, 常常用到一阶线性定常迭代法. 下面我们讨论这类迭代法的收敛性.

我们总是希望由一阶线性定常迭代公式(1.8)构造的向量序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ 的极限 \mathbf{x}^* 是方程组(1.1)的解. 因此, 今后总假定所讨论的一阶线性定常迭代法(1.8)与方程组(1.1)是完全相容的.

据定理 1 和(1.5)式, 我们立即得到

定理 2 与方程组(1.1)完全相容的迭代法(1.8)收敛的充分必要条件为

$$\lim_{k \rightarrow \infty} G^k = O.$$

由定理 2 和第三章 § 4 定理 8, 立即得到

定理 3 与方程组(1.1)完全相容的迭代法(1.8)收敛的充分必要条件为迭代矩阵 G 的谱半径小于 1, 即

$$\rho(G) < 1.$$

由定理 3 和第三章 § 4 定理 3, 立即得到

定理 4 若 $\|G\| < 1$, 则迭代法(1.8)收敛.

现在, 我们来讨论一阶线性定常迭代法(1.8)的收敛速度问题. 据(1.13), (1.12)和(1.5)式知, 误差向量满足

$$\mathbf{e}^{(k)} = G^k \mathbf{e}^{(0)}. \quad (1.14)$$

由(1.14)式两边取范数(所取矩阵范数必须与向量范数相容),便有

$$\|e^{(k)}\| \leq \|G^k\| \|e^{(0)}\|.$$

$\|G^k\|$ 的大小决定误差向量收敛于零向量的速度. 若要求 $\|e^{(k)}\|$ 减小为 $\|e^{(0)}\|$ 的 ξ 倍 ($\xi < 1$), 即要求

$$\|e^{(k)}\| \leq \xi \|e^{(0)}\|,$$

则只要

$$\|G^k\| \leq \xi,$$

或

$$(\|G\| \frac{1}{k})^k \leq \xi,$$

从而迭代次数 k 应满足不等式

$$k \geq (-\frac{1}{k} \ln \|G\|)^{-1} \ln \xi^{-1}.$$

这样, 所需要的最小迭代次数与量

$$-\frac{1}{k} \ln \|G\|$$

成正比. 我们称这个量为平均收敛速度, 记作 $R_k(G)$, 即

$$R_k(G) = -\frac{1}{k} \ln \|G^k\|. \quad (1.15)$$

可以证明(参见[10]p. 87-88)

$$R(G) = \lim_{k \rightarrow \infty} R_k(G) = -\ln \rho(G), \quad (1.16)$$

其中 $\rho(G)$ 为 G 的谱半径. 我们称 $R(G)$ 为渐近收敛速度. 这样, 我们可以粗略地说, 为使误差向量 $e^{(k)}$ 的范数减小为 $\|e^{(0)}\|$ 的 ξ 倍, 只要

$$k \geq [-\ln \rho(G)]^{-1} \ln \xi^{-1} = \frac{-\ln \xi}{R(G)}. \quad (1.17)$$

再引进量

$$RR(G) = [-\ln \rho(G)]^{-1}, \quad (1.18)$$

称它为迭代法(1.8)的收敛速度倒数. 据(1.18)式知, 为使 $\|e^{(k)}\|$ 减小为 $\|e^{(0)}\|$ 的 ξ 倍, 所需的最小迭代次数近似地和收敛速度倒数成正比.

应用一阶线性定常迭代法(1.8)计算得方程组(1.1)的近似解, 有下面的误差估计式.

定理 5 若 $\|G\| < 1$, 则按迭代法(1.8)计算得方程(1.1)的近似解 x_k 满足不等式

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{\|G\|^k}{1 - \|G\|} \|x_1 - x_0\|, \quad (1.19)$$

其中 x^* 是方程组(1.1)的(准确)解(这里假设矩阵范数与所使用的向量范数相容).

证明 由于 $\|G\| < 1$, 据定理 4 知,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*.$$

于是

$$x_k - x^* = \sum_{i=k}^{\infty} (x_i - x_{i+1})$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=k}^{\infty} G(x_{i-1} - x_i) \\
&= \sum_{i=k}^{\infty} G^i(x_0 - x_1) \\
&= \left(\sum_{i=k}^{\infty} G^i \right) (x_0 - x_1).
\end{aligned}$$

再据第三章 § 4 定理 10, 便有

$$\begin{aligned}
\|x_k - x^*\| &\leq \left\| \sum_{i=k}^{\infty} G^i \right\| \|x_0 - x_1\| \\
&\leq \frac{\|G\|^k}{1 - \|G\|} \|x_1 - x_0\|.
\end{aligned}$$

§ 2 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法

2.1 Jacobi 迭代法

设线性方程组

$$Ax = b$$

的系数矩阵 $A = [a_{ij}]_{n \times n}$ 非奇异, 且其主对角元素 $a_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$. 将矩阵 A 分裂成

$$A = D - (D - A),$$

其中 $D = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn})$. 于是方程组 $Ax = b$ 可写成

$$Dx = (D - A)x + b$$

或

$$x = (I - D^{-1}A)x + D^{-1}b. \quad (2.1)$$

令

$$B = I - D^{-1}A, \quad g = D^{-1}b, \quad (2.2)$$

则(2.1)式可写成

$$x = Bx + g. \quad (2.3)$$

这样, 我们便得到一阶线性定常迭代公式

$$x_k = Bx_{k-1} + g, \quad k = 1, 2, \dots. \quad (2.4)$$

我们称(2.4)为 **Jacobi 迭代法**, 它与方程组 $Ax = b$ 是完全相容的. B 是 Jacobi 迭代法的迭代矩阵.

记 $x_k = [x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}]^T$, 由于

$$B = \begin{bmatrix}
0 & b_{12} & b_{13} & \cdots & b_{1,n-1} & b_{1n} \\
b_{21} & 0 & b_{23} & \cdots & b_{2,n-1} & b_{2n} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
b_{n-1,1} & b_{n-1,2} & b_{n-1,3} & \cdots & 0 & b_{n-1,n} \\
b_{n,1} & b_{n,2} & b_{n,3} & \cdots & b_{n,n-1} & 0
\end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1,n-1}}{a_{11}} & -\frac{a_{1,n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{2,3}}{a_{22}} & \cdots & -\frac{a_{2,n-1}}{a_{22}} & -\frac{a_{2,n}}{a_{22}} \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\frac{a_{n-1,1}}{a_{n-1,n-1}} & -\frac{a_{n-1,2}}{a_{n-1,n-1}} & -\frac{a_{n-1,3}}{a_{n-1,n-1}} & \cdots & 0 & -\frac{a_{n-1,n}}{a_{n-1,n-1}} \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}} & \cdots & -\frac{a_{n,n-1}}{a_{nn}} & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{g} &= [g_1, g_2, \dots, g_n]^T \\ &= \left[\frac{b_1}{a_{11}}, \frac{b_2}{a_{22}}, \dots, \frac{b_n}{a_{nn}} \right]^T, \end{aligned}$$

因此,易从(2.4)式推得 Jacobi 迭代法计算 x_k 的各分量的公式为

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k-1)} \right), \quad \begin{matrix} i = 1, 2, \dots, n, \\ k = 1, 2, \dots. \end{matrix} \quad (2.6)$$

例 1 应用 Jacobi 迭代法解方程组

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 = 9, \\ -x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 7, \\ -4x_2 + 10x_3 = 6. \end{cases}$$

对此方程组, Jacobi 迭代法的迭代公式为

$$\begin{aligned} x_1^{(k)} &= \frac{1}{10} (9 + x_2^{(k-1)}), \\ x_2^{(k)} &= \frac{1}{10} (7 + x_1^{(k-1)} + 2x_3^{(k-1)}), \\ x_3^{(k)} &= \frac{1}{10} (6 + 4x_2^{(k-1)}). \end{aligned}$$

从初始向量 $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 0]^T$ 出发, 迭代 6 次得到结果如下:

k	0	1	2	3	4	5	6
$x_1^{(k)}$	0	0.9	0.97	0.991	0.9973	0.99919	0.999757
$x_2^{(k)}$	0	0.7	0.91	0.973	0.9919	0.99757	0.999271
$x_3^{(k)}$	0	0.6	0.88	0.964	0.9892	0.99676	0.999028

该方程组的准确解为 $\mathbf{x}^* = [1, 1, 1]^T$. 因此

$$\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_6\|_{\infty} = 9.72 \times 10^{-4}.$$

算法 6.1 应用 Jacobi 迭代法解线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

输入 方程组的阶数 n ; A 的元素 a_{ij} ($i, j = 1, \dots, n$); \mathbf{b} 的分量 b_i ($i = 1, \dots, n$); 初始向量 \mathbf{x}_0 的分量 x_{0i} ($i = 1, \dots, n$); 误差容限 TOL ; 最大迭代次数 m .

输出 近似解 $x = [x_1, \dots, x_n]^T$ 或迭代次数超过 m 的信息.

step 1 对 $k=1, \dots, m$ 做 step 2-4.

step 2 对 $i=1, \dots, n$

$$x_i \leftarrow (b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_{0j}) / a_{ii}.$$

step 3 若 $\|x - x_0\| < TOL$, 则输出 (x_1, \dots, x_n) ; 停机.

step 4 对 $i=1, \dots, n$

$$x_{0i} \leftarrow x_i.$$

step 5 输出 ('Maximum number of iterations exceeded');

停机.

在第 3 步中的迭代终止准则, 可用

$$\frac{\|x - x_0\|}{\|x\|} < TOL.$$

所用的向量范数可以是任何一种简便的范数, 最常用的是 L_∞ 范数.

现在讨论 Jacobi 迭代法的收敛性.

由 § 1 定理 3, 立即得到

定理 1 Jacobi 迭代法收敛的充分必要条件为

$$\rho(B) < 1.$$

定理 1 中的条件 $\rho(B) < 1$ 很难检验, 但由 § 1 定理 4, 我们有

定理 2 Jacobi 迭代法收敛的充分条件为

$$\|B\| < 1.$$

这样, 下面的任一条件都是 Jacobi 迭代法的充分条件:

$$(1) \quad \|B\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1;$$

$$(2) \quad \|B\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1;$$

$$(3) \quad \|B\|_F = \left(\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right|^2 \right)^{\frac{1}{2}} < 1.$$

Jacobi 迭代法的渐近收敛速度为

$$R(B) = -\ln \rho(I - D^{-1}A).$$

就例 1, 由于

$$\|B\|_\infty = \max \left\{ \frac{1}{10}, \frac{3}{10}, \frac{4}{10} \right\} = \frac{2}{5} < 1,$$

因此 Jacobi 迭代法收敛.

据 § 1 定理 5, 若 $\|B\| < 1$, 则 Jacobi 迭代法有误差估计式

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|x_1 - x_0\|, \quad (2.7)$$

其中 x^* 是方程组 $Ax=b$ 的准确解.

2.2 Gauss-Seidel 迭代法

我们仍然假设方程组 $Ax=b$ 的系数矩阵 $A=[a_{ij}]_{n \times n}$ 的主对角元 $a_{ii} \neq 0, i=1, \dots, n$. 将 A 分裂成

$$A = D(I - L) - DU, \quad (2.8)$$

其中

$$D = \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn}),$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}} & \cdots & -\frac{a_{n,n-1}}{a_{nn}} & 0 \end{bmatrix},$$

$$U = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1,n-1}}{a_{11}} & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ 0 & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \cdots & -\frac{a_{2,n-1}}{a_{22}} & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{a_{n-1,n}}{a_{n-1,n-1}} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

注意,由(2.5)式,显然有

$$B = L + U. \quad (2.9)$$

于是,方程组 $Ax=b$ 可写成

$$D(I - L)x = DUx + b. \quad (2.10)$$

由于 D 和 $I-L$ 都是非奇异的,因此可用 $(I-L)^{-1}D^{-1}$ 左乘(2.10)式两端,得

$$x = (I - L)^{-1}Ux + (I - L)^{-1}D^{-1}b. \quad (2.11)$$

由(2.11)构造一阶线性定常迭代公式

$$x_k = (I - L)^{-1}Ux_{k-1} + (I - L)^{-1}D^{-1}b, \quad (2.12)$$

它与方程组 $Ax=b$ 完全相容. 我们称(2.12)为 **Gauss-Seidel 迭代法**. (2.12)式还可以写成

$$x_k = Lx_k + Ux_{k-1} + D^{-1}b. \quad (2.13)$$

从而,容易得到 Gauss-Seidel 迭代法计算 x_k 的分量的公式

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k-1)} \right), \quad (2.14)$$

$$i = 1, 2, \dots, n, k = 1, 2, \dots.$$

Gauss-Seidel 迭代法是 Jacobi 迭代法的修正. 从 Jacobi 迭代法(2.6)我们看到,在迭代过程的第 k 步中,计算 $x_i^{(k)}$ 之前, $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ 已经计算好,但计算 $x_i^{(k)}$ 时仍然用 $x_i^{(k-1)}$,

$x_2^{(k-1)}, \dots, x_{i-1}^{(k-1)}$. 在 Gauss-Seidel 迭代法 (2.14) 中, 计算 $x_i^{(k)}$ 时则改用 $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ 分别代替 $x_1^{(k-1)}, x_2^{(k-1)}, \dots, x_{i-1}^{(k-1)}$.

例 2 我们应用 Gauss-Seidel 迭代法解例 1 的方程组, 其迭代公式为

$$\begin{aligned} x_1^{(k)} &= \frac{1}{10}(9 + x_2^{(k-1)}), \\ x_2^{(k)} &= \frac{1}{10}(7 + x_1^{(k)} + 2x_3^{(k-1)}), \\ x_3^{(k)} &= \frac{1}{10}(6 + 4x_2^{(k)}). \end{aligned}$$

从初始向量 $x_0 = [0, 0, 0]^T$ 迭代四次得到结果如下:

k	0	1	2	3	4
$x_1^{(k)}$	0	0.900	0.97900	0.9981100	0.999829900
$x_2^{(k)}$	0	0.790	0.98110	0.9982990	0.999846910
$x_3^{(k)}$	0	0.916	0.99244	0.9993196	0.999938764

于是有

$$\|x^* - x_4\|_{\infty} = 1.70 \times 10^{-4},$$

其中 $x^* = [1, 1, 1]^T$ 是该方程组的准确解.

对于这个例子, Gauss-Seidel 迭代法比 Jacobi 迭代法收敛得快. 欲使近似解向量的每个分量都精确到小数后第三位, Jacobi 迭代法需要迭代六次, 而 Gauss-Seidel 迭代法则只需四次.

算法 6.2 应用 Gauss-Seidel 迭代法解线性方程组 $Ax = b$.

输入 方程组的阶数 n ; A 的元素 $a_{ij} (i, j = 1, \dots, n)$; 右端项 $b_i (i = 1, \dots, n)$; 初始向量 x_0 的分量 $x_{0i} (i = 1, \dots, n)$; 误差容限 TOL ; 最大迭代次数 m .

输出 近似解 $x = [x_1, \dots, x_n]^T$ 或迭代次数超过 m 的信息.

step 1 对 $k = 1, \dots, m$ 做 step 2-4.

step 2 对 $i = 1, \dots, n$

$$x_i \leftarrow (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_{0j}) / a_{ii}.$$

step 3 若 $\|x - x_0\| < TOL$, 则输出 (x_1, \dots, x_n) ; 停机.

step 4 对 $i = 1, \dots, n$

$$x_{0i} \leftarrow x_i.$$

step 5 输出 ('Maximun number of iterations exceeded '); 停机.

现在, 我们来讨论 Gauss-Seidel 迭代法的收敛性和误差估计. 由 § 1 定理 3, 立即得到

定理 3 Gauss-Seidel 迭代法收敛的充分必要条件为

$$\rho((I - L)^{-1}U) < 1.$$

关于 Gauss-Seidel 迭代法收敛的充分条件, 我们有下面定理.

定理 4 若

$$\|B\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1, \quad (2.15)$$

则 Gauss-Seidel 迭代法收敛. 且若记

$$\mu = \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \left(\sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) / \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) \right\}, \quad (2.16)$$

则

$$\mu \leq \|B\|_{\infty} < 1, \quad (2.17)$$

$$\|e^{(k)}\|_{\infty} = \|x_k - x^*\| \leq \frac{\mu^k}{1 - \mu} \|x_1 - x_0\|_{\infty}. \quad (2.18)$$

证明 首先证明(2.17)式. 对一切 $i(i=1, \dots, n)$ 有

$$\sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| + \sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \leq \|B\|_{\infty} < 1,$$

于是

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| + \sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| - \left(\sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) / \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) \\ &= \left(\sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) \left(1 - \sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| - \sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) / \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

即

$$\left(\sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) / \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) \leq \sum_{j=1}^{i-1} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| + \sum_{j=i+1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right|.$$

上式两边取最大值便得到(2.17)式.

其次证明收敛性. 设 x^* 是方程组 $Ax=b$ 的解. 由(2.13), (2.2)和(2.9)式有

$$\begin{aligned} x_k - x^* &= Lx_k + Ux_{k-1} + D^{-1}b - x^* \\ &= Lx_k + Ux_{k-1} + D^{-1}Ax^* - x^* \\ &= Lx_k + Ux_{k-1} - Bx^* \\ &= L(x_k - x^*) + U(x_{k-1} - x^*). \end{aligned}$$

假设 $\max_{1 \leq j \leq n} |x_j^{(k)} - x_j^*| = |x_p^{(k)} - x_p^*|$, 其中 x_j^* 是 x^* 的第 j 个分量 ($j=1, \dots, n$), 则

$$\begin{aligned} \|x_k - x^*\|_{\infty} &= |x_p^{(k)} - x_p^*| \\ &\leq \sum_{j=1}^{p-1} \left| \frac{a_{pj}}{a_{pp}} \right| |x_j^{(k)} - x_j^*| + \sum_{j=p+1}^n \left| \frac{a_{pj}}{a_{pp}} \right| |x_j^{(k-1)} - x_j^*| \\ &\leq \sum_{j=1}^{p-1} \left| \frac{a_{pj}}{a_{pp}} \right| \|x_k - x^*\|_{\infty} + \sum_{j=p+1}^n \left| \frac{a_{pj}}{a_{pp}} \right| \|x_{k-1} - x^*\|_{\infty}, \end{aligned}$$

从而

$$\begin{aligned} \|x_k - x^*\|_{\infty} &\leq \left\{ \left(\sum_{j=p+1}^n \left| \frac{a_{pj}}{a_{pp}} \right| \right) / \left(1 - \sum_{j=1}^{p-1} \left| \frac{a_{pj}}{a_{pp}} \right| \right) \right\} \|x_{k-1} - x^*\|_{\infty} \\ &\leq \mu \|x_{k-1} - x^*\|_{\infty} \end{aligned}$$