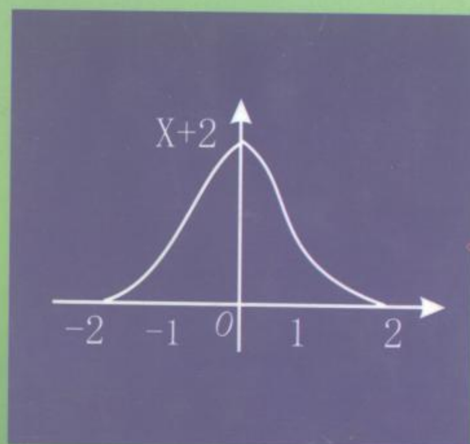
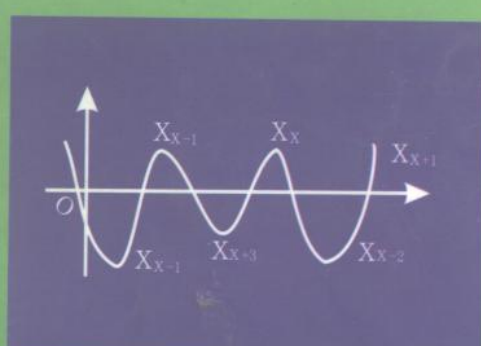
数值计算方法

林成森 编著

（下 册）





科学出版社

数值计算方法（下册）

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，主要内容包括：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

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　迭代法的基本理论

这一章，我们将继续讨论解线性方程组

$$Ax = \boldsymbol{b} \tag{1.1}$$

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 $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_{r-1}$，按某规则逐次生成一个无穷向量序列

$$\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_{r-1}, \boldsymbol{x}_r, \cdots, \boldsymbol{x}_k, \cdots, \tag{1.2}$$

并使极限

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}^*$$

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

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{f}_k(\boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{x}_{k-2}, \cdots, \boldsymbol{x}_{k-r}),\ k = r, r+1, \cdots, \tag{1.3}$$

其中 r 为某一个正整数，$\boldsymbol{f}_k(\boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{x}_{k-2}, \cdots, \boldsymbol{x}_{k-r})$为 $\boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{x}_{k-2}, \cdots, \boldsymbol{x}_{k-r}$的一个(向量值)函数(参见第九章§1节)．给定初始近似向量 $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_{r-1}$，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 $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_{r-1}$，由迭代法(1.3)生成的向量序列$\{\boldsymbol{x}_k\}$都收敛于方程组(1.1)的解 $\boldsymbol{x}^*$，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

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_k$$

为迭代法(1.3)的第 k 步的**误差向量**．若迭代法收敛，则称 $\boldsymbol{x}_k$ 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

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_{k-1} + H_k(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k-1}),\ k = 1, 2, \cdots, \tag{1.4}$$

其中$\{H_k\}$为 n 阶矩阵序列．由(1.4)式

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_k &= \boldsymbol{x}_{k-1} - H_kA\boldsymbol{x}_{k-1} + H_k\boldsymbol{b}\\ &= (I - H_kA)\boldsymbol{x}_{k-1} + H_k\boldsymbol{b}.\end{aligned}$$

记

$$G_k = I - H_k A \tag{1.5}$$

以及

$$\boldsymbol{g}_k = H_k \boldsymbol{b},$$

那么,迭代公式(1.4)还可写成

$$\boldsymbol{x}_k = G_k \boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{g}_k. \tag{1.6}$$

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

$$\boldsymbol{x} = G_k \boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}_k,\ k = 1,2,\cdots$$

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 $\boldsymbol{x}^*$ 是方程组(1.1)的解,则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_k &= G_k \boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{g}_k \\ &= \boldsymbol{x}^* - G_k \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{g}_k + G_k \boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{g}_k \\ &= \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{x}_{k-1} - G_k(\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_{k-1}) \\ &= \boldsymbol{x}_{k-1} + (I - G_k)A^{-1}A(\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_{k-1}) \\ &= \boldsymbol{x}_{k-1} + (I - G_k)A^{-1}(A\boldsymbol{x}^* - A\boldsymbol{x}_{k-1}) \\ &= \boldsymbol{x}_{k-1} + H_k(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k-1}).\end{aligned}$$

其中

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

在一阶线性迭代公式(1.6)中,取 $G_k = G, \boldsymbol{g}_k = \boldsymbol{g}(k=1,2,\cdots)$ 得到迭代公式

$$\boldsymbol{x}_k = G\boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{g},\ k = 1,2,\cdots. \tag{1.8}$$

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 $\boldsymbol{x}^*$,显然,$\boldsymbol{x}^*$ 是与(1.8)相应的方程组

$$\boldsymbol{x} = G\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g},$$

即

$$(I - G)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{g} \tag{1.9}$$

的解. 自然,我们也希望 $\boldsymbol{x}^*$ 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

$$A = Q - R, \tag{1.10}$$

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

$$Q\boldsymbol{x} = R\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}$$

或

$$\boldsymbol{x} = Q^{-1}R\boldsymbol{x} + Q^{-1}\boldsymbol{b}.$$

令

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

则得方程组

$$x = Gx + g.$$

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

$$x_k = Gx_{k-1} + g$$

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

$$T_k = (I - H_kA)(I - H_{k-1}A)\cdots(I - H_1A),\ k = 1,2,\cdots \tag{1.12}$$

收敛于零矩阵．

证明 设 x^* 是方程组(1.1)的解．由迭代公式(1.4)，我们有

$$\begin{aligned} e^{(k)} &= x^* - x_k \\ &= x^* - x_{k-1} - H_k(Ax^* - Ax_{k-1}) \\ &= (I - H_kA)(x^* - x_{k-1}) \\ &= (I - H_kA)(I - H_{k-1}A)\cdots(I - H_1A)(x^* - x_0), \end{aligned}$$

因而，据(1.12)式有

$$e^{(k)} = T_k(x^* - x_0) = T_ke^{(0)}. \tag{1.13}$$

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 $e^{(0)}$ 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

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

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 $\{x_k\}$ 的极限 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

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

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

$$e^{(k)} = G^ke^{(0)}. \tag{1.14}$$

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

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

$\| G^k \|$ 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

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

则只要

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

或

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

从而迭代次数 k 应满足不等式

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

这样,所需要的最小迭代次数与量

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

成正比. 我们称这个量为平均收敛速度,记作 $R_k(G)$,即

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

可以证明(参见[10]p. 87—88)

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

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

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

再引进量

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

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

$$\| x_k - x^* \| \leqslant \frac{\| G \|^k}{1 - \| G \|} \| x_1 - x_0 \|, \tag{1.19}$$

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,

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

于是

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

$$= \sum_{i=k}^{\infty} G(\boldsymbol{x}_{i-1} - \boldsymbol{x}_i)$$

$$= \sum_{i=k}^{\infty} G^i(\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_1)$$

$$= (\sum_{i=k}^{\infty} G^i)(\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_1).$$

再据第三章§4 定理 10,便有

$$\| \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^* \| \leqslant \| \sum_{i=k}^{\infty} G^i \| \ \| \boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_1 \|$$

$$\leqslant \frac{\| G \|^k}{1 - \| G \|} \| \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0 \| .$$

§2　Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法

2.1　Jacobi 迭代法

设线性方程组

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

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

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

其中 $D=\mathrm{diag}(a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn})$. 于是方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 可写成

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

或

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

令

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

则(2.1)式可写成

$$\boldsymbol{x} = B\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}. \tag{2.3}$$

这样,我们便得到一阶线性定常迭代公式

$$\boldsymbol{x}_k = B\boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{g}, \quad k = 1,2,\cdots. \tag{2.4}$$

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

记 $\boldsymbol{x}_k=[x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}]^T$,由于

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

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

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

因此,易从(2.4)式推得 Jacobi 迭代法计算 $\boldsymbol{x}_k$ 的各分量的公式为

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ \neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k-1)}), \qquad \begin{aligned} i &= 1,2,\cdots,n, \\ k &= 1,2,\cdots. \end{aligned} \tag{2.6}$$

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

$$x_1^{(k)} = \frac{1}{10}(9 + x_2^{(k-1)}),$$

$$x_2^{(k)} = \frac{1}{10}(7 + x_1^{(k-1)} + 2x_3^{(k-1)}),$$

$$x_3^{(k)} = \frac{1}{10}(6 + 4x_2^{(k-1)}).$$

从初始向量 $\boldsymbol{x}_0 = [0,0,0]^T$ 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 $\boldsymbol{x}^* = [1,1,1]^T$. 因此

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

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

输入 方程组的阶数 n;A 的元素 $a_{ij}(i,j=1,\cdots n)$;$\boldsymbol{b}$ 的分量 $b_i(i=1,\cdots,n)$;初始向量 $\boldsymbol{x}_0$ 的分量 $x0_i(i=1,\cdots,n)$;误差容限 TOL;最大迭代次数 m.

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

step 1 对 $k=1,\cdots,m$ 做 step2−4.

step 2 对 $i=1,\cdots,n$

$$x_i \leftarrow (b_i - \sum_{\substack{j=1\\ \neq i}}^{n} a_{ij} x0_j)/a_{ii}.$$

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

step 4 对 $i=1,\cdots,n$

$$x0_i \leftarrow x_i.$$

step 5 输出('Maximun 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) $$\| B \|_1 = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{\substack{i=1\\ \neq j}}^{n} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1;$$

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

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

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

$$\| x_k - x^* \| \leqslant \frac{\| B \|^k}{1 - \| B \|} \| x_1 - x_0 \|, \tag{2.7}$$

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 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的系数矩阵 $A=[a_{ij}]_{n\times n}$的主对角元 $a_{ii}\neq 0$，$i=1,\cdots,n$. 将 A 分裂成

$$A = D(I-L) - DU, \tag{2.8}$$

其中

$$D = \operatorname{diag}(a_{11},\cdots,a_{nn}),$$

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

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

注意，由(2.5)式，显然有

$$B = L + U. \tag{2.9}$$

于是，方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 可写成

$$D(I-L)\boldsymbol{x} = DU\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}. \tag{2.10}$$

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

$$\boldsymbol{x} = (I-L)^{-1}U\boldsymbol{x} + (I-L)^{-1}D^{-1}\boldsymbol{b}. \tag{2.11}$$

由(2.11)构造一阶线性定常迭代公式

$$\boldsymbol{x}_k = (I-L)^{-1}U\boldsymbol{x}_{k-1} + (I-L)^{-1}D^{-1}\boldsymbol{b}, \tag{2.12}$$

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

$$\boldsymbol{x}_k = L\boldsymbol{x}_k + U\boldsymbol{x}_{k-1} + D^{-1}\boldsymbol{b}. \tag{2.13}$$

从而，容易得到 Gauss-Seidel 迭代法计算 $\boldsymbol{x}_k$ 的分量的公式

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

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

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，$x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_{i-1}^{(k)}$已经计算好，但计算 $x_i^{(k)}$ 时仍然用 $x_1^{(k-1)}$，

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

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

$$x_1^{(k)} = \frac{1}{10}(9 + x_2^{(k-1)}),$$

$$x_2^{(k)} = \frac{1}{10}(7 + x_1^{(k)} + 2x_3^{(k-1)}),$$

$$x_3^{(k)} = \frac{1}{10}(6 + 4x_2^{(k)}).$$

从初始向量 $\boldsymbol{x}_0=[0,0,0]^T$ 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

$$\| \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_4 \|_\infty = 1.70 \times 10^{-4},$$

其中 $\boldsymbol{x}^*=[1,1,1]^T$ 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 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$.

输入 方程组的阶数 n;A 的元素 $a_{ij}(i,j=1,\cdots,n)$;右端项 $b_i(i=1,\cdots,n)$;初始向量 $\boldsymbol{x}_0$ 的分量 $x0_i(i=1,\cdots,n)$;误差容限 TOL;最大迭代次数 m.

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

step 1 对 $k=1,\cdots,m$ 做 step2－4.

step 2 对 $i=1,\cdots,n$

$$x_i \leftarrow (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x0_j)/a_{ii}.$$

step 3 若 $\| \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0 \| < TOL$,则输出$(x_1,\cdots,x_n)$;停机.

step 4 对 $i=1,\cdots,n$

$$x0_i \leftarrow x_i.$$

step5 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

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

则 Gauss-Seidel 迭代法收敛．且若记

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

则

$$\mu \leqslant \| B \|_\infty < 1, \tag{2.17}$$

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

证明 首先证明(2.17)式．对一切 $i(i=1,\cdots,n)$有

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

于是

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

即

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

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 $\max\limits_{1\leqslant j\leqslant n} |x_j^{(k)} - x_j^*| = |x_p^{(k)} - x_p^*|$，其中 x_j^* 是 x^* 的第 j 个分量($j=1,\cdots,n$)，则

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

从而

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