要求

1 了解数值计算方法一般**概念**

2 了解**误差的来源与分类**、数据误差的影响

3 舍入误差对数值计算的影响

4 **计算中应注意的原则**

要求

1. 熟练掌握高斯消去法及选列主元技术
2. 掌握三角分解法
3. 掌握向量范数与矩阵范数、方程组的条件数，了解舍入误差对解的影响

高斯消去法首先是将方程组进行消元运算，将其化为一个等价的同解的上三角方程组，这个过程称为消元过程. 然后通过求解上三角方程组得到原方程组的解，后一过程称为回代过程.

例2.1　用高斯消去法求解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, \\ 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3, \\ -x_1 - 3x_2 \qquad = 2. \end{cases}$$

解　消元过程：

第1步　保留第1个方程不动，将第2、3个方程中x_1前的系数消为零.为此，第2、3个方程分别减去第1个方程的2、-1倍，得

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + x_3 &= 0, \\ -2x_2 + x_3 &= 3, \\ -x_2 + x_3 &= 2. \end{aligned}$$

第2步　保留第1、2个方程不动，将第3个方程中x_2前的系数消为零．第3个方程减去第2个方程的$\frac{1}{2}$倍，则得与原方程同解的上三角方程组：

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + x_3 &= 0, \\ -2x_2 + x_3 &= 3, \\ \frac{1}{2}x_3 &= \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

回代过程:
求解以上上三角方程组．从第3个方程组求得$x_3 = 1$，代入第2个方程可得$x_2 = -1$，再将x_2, x_3代入第1个方程组得$x_1 = 1$.

例 用列主元素高斯消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, \\ 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3, \\ -x_1 - 3x_2 \quad = 2. \end{cases}$$

解 消元过程

第1步

在系数矩阵A的第1列元素中选取绝对值最大的元$a_{21} = 2$,交换第1个方程与第2个方程的位置，得

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3, & (1) \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 0, & (2) \\ -x_1 - 3x_2 \quad = 2. & (3) \end{cases}$$

进行第1步消元，方程(2)−方程(1) $\times \frac{1}{2}$, 方程(3)−方程(1) $\times \left(-\frac{1}{2}\right)$, 得

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3, & (1') \\ x_2 - \frac{1}{2}x_3 = -\frac{3}{2}, & (2') \\ -2x_2 + \frac{3}{2}x_3 = \frac{7}{2}. & (3') \end{cases}$$

第2步

在第1步消元后的矩阵$A^{(1)}$的元素$a_{22}^{(1)}=1$，$a_{32}^{(1)}=-2$ 中选取绝对值最大的元$a_{32}^{(1)}=-2$作为主元素，交换第2个方程与第3个方程的位置，得

$$\begin{cases} 2x_1+2x_2+3x_3=3, & (1'') \\ -2x_2+\frac{3}{2}x_3=\frac{7}{2}, & (2'') \\ x_2-\frac{1}{2}x_3=-\frac{3}{2}. & (3'') \end{cases}$$

进行第2步消元，

方程$(3'')-$方程$(2'')\times(-\frac{1}{2})$，得

$$\begin{cases} 2x_1+2x_2+3x_3=3, \\ -2x_2+\frac{3}{2}x_3=\frac{7}{2}, \\ \frac{1}{4}x_3=\frac{1}{4}. \end{cases}$$

由回代过程求得原方程组的解$x=(1,-1,1)^T$.

例 分解矩阵$A=LU$, 其中

$$A=\begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 4 \\ -2 & 2 & -3 & 1 \\ 0 & -3 & 13 & -7 \\ 4 & 1 & -7 & 23 \end{pmatrix}.$$

解 按计算公式得

$$A=LU=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \end{pmatrix}.$$

矩阵的LU分解

例 2.4 用$A=LU$分解求解线性方程组$Ax=b$, 其中

$$A=\begin{pmatrix} 9 & 18 & 9 & -27 \\ 18 & 45 & 0 & -45 \\ 9 & 0 & 126 & 9 \\ -27 & -45 & 9 & 135 \end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 16 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

解 将向量b作为$\bar{A}$的第5列，按紧凑格式计算，得

9	18	9	-27	1
2	9	-18	9	0
1	-2	81	54	15
-3	1	$\frac{2}{3}$	9	1

从$Ux=y$，解得$x=(\frac{1}{9},\frac{1}{9},\frac{1}{9},\frac{1}{9})^T$.

例 用平方根法求解方程组

$$\bar{A}=\begin{pmatrix} 9 & 18 & 9 & -27 & 1 \\ 18 & 45 & 0 & -45 & 2 \\ 9 & 0 & 126 & 9 & 16 \\ -27 & -45 & 9 & 135 & 8 \end{pmatrix}$$

解 $A=GG^T$, 其中

$$G=\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 3 & 0 & 0 \\ 3 & -6 & 9 & 0 \\ -9 & 3 & 6 & 3 \end{pmatrix},\ y=\begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ 0 \\ \frac{5}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

因此,

$$\begin{cases} Gy=b \Longrightarrow y=(\frac{1}{3},0,\frac{5}{3},\frac{1}{3})^T. \\ G^Tx=y \Longrightarrow x=(\frac{1}{9},\frac{1}{9},\frac{1}{9},\frac{1}{9})^T. \end{cases}$$

例 2.6 用追赶法求解线性方程组$Ax=d$. 其中

$$A=\begin{pmatrix}1&2&0&0&0\\2&3&1&0&0\\0&-3&4&2&0\\0&0&4&7&1\\0&0&0&-5&6\end{pmatrix},\quad d=\begin{pmatrix}5\\9\\2\\19\\-4\end{pmatrix}.$$

解 追赶法求解方程组有

$$L=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0\\2&1&0&0&0\\0&3&1&0&0\\0&0&4&1&0\\0&0&0&5&1\end{pmatrix},U=\begin{pmatrix}1&2&0&0&0\\0&-1&1&0&0\\0&0&1&2&0\\0&0&0&-1&1\\0&0&0&0&1\end{pmatrix},y=\begin{pmatrix}5\\-1\\5\\-1\\1\end{pmatrix}.$$

从 $Ly=d$ 解得 $y=(5,-1,5,-1,1)^T$, 从 $Ux=y$ 解得 $x=(1,2,1,2,1)^T$.

例 2.7 计算矩阵$A=\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$的三种范数.

解

$$\|A\|_1 = \max\{4,6\} = 6, \quad \|A\|_\infty = \max\{3,7\} = 7.$$

以下求$\|A\|_2$.

$$A^TA = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 10 \\ 10 & 20 \end{pmatrix},$$

$$|\lambda I - A^TA| = \begin{vmatrix} \lambda-10 & -10 \\ -10 & \lambda-20 \end{vmatrix} = \lambda^2 - 30\lambda + 100 = 0.$$

解特征方程，得$\lambda = 15 \pm 5\sqrt{5}$. 所以，$\lambda_{\max}(A^TA) = 15+5\sqrt{5}$.
故$\|A\|_2 = \sqrt{15+5\sqrt{5}}$.

矩阵的条件数刻画了方程组的性态，**条件数大的矩阵称为“病态”矩阵，相应的方程组称为“病态”方程组；条件数小的矩阵称为“良态”矩阵，相应的方程组称为“良态”方程组.**

例2.9 设有线性方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & 10^5 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10^5 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

则
$$A^{-1} = \frac{1}{10^5 - 1} \begin{pmatrix} -1 & 10^5 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\|A\|_\infty = 10^5 + 1, \quad \|A^{-1}\|_\infty = \frac{10^5 + 1}{10^5 - 1}, \quad \mathrm{Cond}_\infty(A) > 10^5 \gg 1.$$

例2.10 n 阶Hilbert阵，随着矩阵H_n阶数n的增高，H_n的条件数急剧增大，此时方程组$H_n x = b$是严重的病态方程组.
三阶Hilbert方程组为例说明其病态性.

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{11}{6} \\ \frac{13}{12} \\ \frac{47}{60} \end{pmatrix},$$

$$H_3^{-1} = \begin{pmatrix} 9 & -36 & 30 \\ -36 & 192 & -180 \\ 30 & -180 & 180 \end{pmatrix}.$$

$$\|H_3\|_\infty = \frac{11}{6}, \quad \|H_3^{-1}\|_\infty = 408, \quad \mathrm{Cond}_\infty(H_3) = \|H_3\|_\infty \|H_3^{-1}\|_\infty = 748$$

若将方程组中的分数舍入到两位小数后求解，则求得的近似解为$\tilde{x} = (-6.22\,, 38.25\,, -33.65)^T$，与真解$x = (1, 1, 1)^T$ 相差甚远.
$\mathrm{Cond}_\infty(H_6) = 2.9 \times 10^7$, $\mathrm{Cond}_\infty(H_7) = 9.85 \times 10^8$

例2.11 用吉文斯变换作矩阵

$$A=\begin{pmatrix}3&5&5\\0&3&4\\4&0&5\end{pmatrix}$$

的QR分解.

解 第1步变换 为将第1列中的元素$a_{31}=4$消为零，取

$c=\frac{3}{5}$， $s=\frac{4}{5}$. 构造

$$P_{13}=\begin{pmatrix}\frac{3}{5}&0&\frac{4}{5}\\0&1&0\\-\frac{4}{5}&0&\frac{3}{5}\end{pmatrix}=P_1,$$

$$A^{(1)}=P_1A=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3&0&4\\0&5&0\\-4&0&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3&5&5\\0&3&4\\4&0&5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5&3&7\\0&3&4\\0&-4&-1\end{pmatrix}.$$

第2步变换　为将矩阵$A^{(1)}$中第2列中的元素$a_{32}^{(1)}=-4$消为零,针对子阵

$$\begin{pmatrix} 3 & 4 \\ -4 & -1 \end{pmatrix},$$

构造2阶吉文斯矩阵

$$\tilde{P}_{12}=\begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix},$$

取

$$P_2=\begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & \tilde{P}_{12} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ 0 & \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -4 \\ 0 & 4 & 3 \end{pmatrix},$$

则 $A^{(2)} = P_2 A^{(1)} = P_2 P_1 A$

$$= \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -4 \\ 0 & 4 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & 3 & 7 \\ 0 & 3 & 4 \\ 0 & -4 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 3 & 7 \\ 0 & 5 & \frac{16}{5} \\ 0 & 0 & \frac{13}{5} \end{pmatrix} = R.$$

令 $P = P_2 P_1$ ，则

$$P = \frac{1}{25}\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -4 \\ 0 & 4 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 4 \\ 0 & 5 & 0 \\ -4 & 0 & 3 \end{pmatrix} = \frac{1}{25}\begin{pmatrix} 15 & 0 & 20 \\ 16 & 15 & -12 \\ -12 & 20 & 9 \end{pmatrix},$$

则有

$$Q = P^T = \frac{1}{25}\begin{pmatrix} 15 & 16 & -12 \\ 0 & 15 & 20 \\ 20 & -12 & 9 \end{pmatrix}, R = \begin{pmatrix} 5 & 3 & 7 \\ 0 & 5 & \frac{16}{5} \\ 0 & 0 & \frac{13}{5} \end{pmatrix}, A = QR.$$

例 $x=(3,1,5,1)^T$,用Householder变换使得$Hx=\alpha e_1(\alpha>0)$
解　这里$\alpha>0$，故$\sigma=\mathrm{sign}(x_1)\|x\|_2=6$，由于$x_1=3>0$，取

$$u=x-\sigma e_1=(-3,1,5,1)^T,\qquad \beta=\frac{2}{\|u\|_2^2}=\frac{1}{18}$$

所以

$$H=I-\beta uu^T=\begin{pmatrix} 1/2 & 1/6 & 5/6 & 1/6 \\ 1/6 & 17/18 & -5/18 & -1/18 \\ 5/6 & -5/18 & -7/18 & -5/18 \\ 1/6 & -1/18 & -5/18 & 17/18 \end{pmatrix}$$

且

$$Hx=6e_1$$

例2.12 用豪斯霍尔德变换作矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 3 & 14 & 9 \\ 6 & 43 & 3 \\ 6 & 22 & 15 \end{pmatrix}$$

的QR分解.

解 第1步变换

取 $x=a_1=(3,6,6)^T, e_1=(1,0,0)^T$，则 $\sigma_1=\|a_1\|_2=9$,

$u_1=(a_1-\sigma_1 e_1)/\|a_1-\sigma_1 e_1\|=1/\sqrt{3}(-1,1,1)^T$,

$$H_1=I_3-2u_1u_1^T=\frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & -2 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix},$$

$$A^{(1)} = H_1 A = \begin{pmatrix} 9 & 48 & 15 \\ 0 & 9 & -3 \\ 0 & -12 & 9 \end{pmatrix}.$$

第2步变换 对于子阵

$$\begin{pmatrix} 9 & -3 \\ -12 & 9 \end{pmatrix},$$

取 $x = \tilde{a}_2^{(1)} = (9, -12)^T, \quad e_1^{(1)} = (1, 0)^T$, 则

$\sigma_2 = \|\tilde{a}_2^{(1)}\|_2 = 15$

$w_2 = \tilde{a}_2^{(1)} - \sigma_2 e_1^{(1)} = -6(1, 2)^T, \quad \beta_2 == 1/90, .$

$$\tilde{H}_2 = I_2 - 2u_2 u_2^T = I_2 - \beta_2 w_2 w_2^T = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 & -4 \\ -4 & -3 \end{pmatrix},$$

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & \tilde{H}_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -4 \\ 0 & -4 & -3 \end{pmatrix},$$

$$A^{(2)} = H_2 A^{(1)} = \begin{pmatrix} 9 & 48 & 15 \\ 0 & 15 & -9 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}.$$

$$H = H_2 H_1 = \frac{1}{15}\begin{pmatrix} 5 & 10 & 10 \\ -2 & 11 & -10 \\ -14 & 2 & 5 \end{pmatrix}.$$

则有

$$Q = H^T = \frac{1}{15}\begin{pmatrix} 5 & -2 & -14 \\ 10 & 11 & 2 \\ 10 & -10 & 5 \end{pmatrix}, \quad R = A^{(2)}, \quad A = QR.$$

要求

1. 迭代法思想及其收敛性
2. 熟练掌握三种基本迭代法
3. 掌握共轭梯度法
4. 了解Krylov子空间迭代法

迭代法利用了方程组的稀疏性, 具有存贮量小、算法简单、收敛速度快等特点.
迭代法是将原线性方程组$Ax = b$做某种等价变形, 由此构造迭代格式, 给定初始点$x^{(0)}$, 由迭代格式产生的迭代序列$\{x^{(k)}\}$ 逐次逼近方程组的精确解x^*.

例3.1 给定初始点$x^{(0)} = (0,0,0)^T$, 用雅可比迭代法求解

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 - 2x_3 = 72, \\ -x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 83, \\ -x_1 - x_2 + 5x_3 = 42. \end{cases}$$

解 雅可比迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (72 + x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)})/10, \\ x_2^{(k+1)} = (83 + x_1^{(k)} + 2x_3^{(k)})/10, \\ x_3^{(k+1)} = (42 + x_1^{(k)} + x_2^{(k)})/5. \end{cases}$$

k	$x_2^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0.000 0	0.000 0	0.000 0
1	7.200 0	8.300 0	8.400 0
2	9.710 0	10.700 0	11.500 0
8	10.998 1	11.994 1	12.997 8
9	10.999 4	11.999 4	12.999 2

例3.2 用高斯-赛德尔迭代法求解例3.1中的方程组.

解 高斯-赛德尔迭代格式为

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (72 + x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)})/10, \\ x_2^{(k+1)} = (83 + x_1^{(k+1)} + 2x_3^{(k)})/10, \\ x_3^{(k+1)} = (42 + x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)})/5. \end{cases}$$

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0.000 0	0.000 0	0.000 0
1	7.200 0	9.020 0	11.644 0
4	10.991 3	11.994 7	12.997 2
5	10.998 9	11.999 3	12.999 6

该题用高斯-赛德尔迭代法的收敛速度快于雅可比迭代法. 对于有些方程组高斯-赛德尔迭代法比雅可比迭代法收敛的快, 但也有高斯-赛德尔迭代法比雅可比迭代法收敛的慢, 甚至还有雅可比迭代法收敛, 但高斯-赛德尔迭代法发散的情况.

例　线性方程组

$$\left\{\begin{array}{l} x_1 - 2x_2 = 5 \\ -3x_1 + x_2 = 5 \end{array}\right. \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} x_1 = 2x_2 + 5 \\ x_2 = 3x_1 + 5 \end{array}\right. \Rightarrow B = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$|\lambda I - B| = \lambda^2 - 6 = 0, \lambda = \pm\sqrt{6}, \rho(B) > 1,$$

发散

例

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g, B = \begin{pmatrix} 0.9 & 0 \\ 0.3 & 0.8 \end{pmatrix}, \rho(B) = 0.9 < 1$$

可以判定迭代收敛，but

$$\|B\|_1 = 1.2 > 1, \quad \|B\|_2 = 1.043 > 1, \quad \|B\|_\infty = 1.1 > 1,$$

不能判定迭代发散

例 讨论求解方程组$Ax=b$的三种迭代法的收敛性.

$$(1)\quad A=\begin{pmatrix}1 & -1 & 2\\ -1 & 3 & 0\\ 2 & 0 & 7\end{pmatrix},\qquad (2)\quad A=\begin{pmatrix}1 & 1/2 & 1/2\\ 1/2 & 1 & 1/2\\ 1/2 & 1/2 & 1\end{pmatrix}.$$

解 （1） A是对称矩阵，其顺序主子式分别为

$$\Delta_1=1>0,\quad \Delta_2=\begin{vmatrix}1 & -1\\ -1 & 3\end{vmatrix}=2>0,\quad \Delta_3=|A|=2>0.$$

$$2D-A=\begin{pmatrix}1 & 1 & -2\\ 1 & 3 & 0\\ -2 & 0 & 7\end{pmatrix}.$$ 各阶顺序主子式与矩阵A的相同，所以A, $2D-A$也是对称正定矩阵，故三种迭代法收敛.

（2）A是对称正定矩阵，但$|2D-A|=0$，即$2D-A$不正定，所以，高斯-赛德尔迭代法和$0<\omega<2$的超松弛迭代法收敛．雅可比迭代法发散.

例 设线性方程组$Ax=b$ 的系数矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 1 & a \\ a & 1 \end{pmatrix}.$$

若要雅可比迭代法、高斯-赛德尔迭代法收敛，请给出数a的取值范围.

解 对于雅可比迭代法考察其迭代矩阵

$$B=\begin{pmatrix} 0 & -a \\ -a & 0 \end{pmatrix}$$

$det(\lambda I-B)=\lambda^2-a^2=0$. 当$\rho(B)=|a|<1$，时，雅可比迭代法收敛.

对于高斯-赛德尔迭代法，

$$B=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ a & 1 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 0 & -a \\ 0 & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & -a \\ 0 & a^2 \end{pmatrix}$$

$det(\lambda I-B)=\lambda(\lambda-a^2)=0$.得$\rho(B)=a^2<1$，即$|a|<1$时，高斯-赛德尔迭代法收敛.

例 方程组$\begin{cases} 3x_1 - 10x_2 = 7 \\ 9x_1 - 4x_2 = 5 \end{cases}$，写出两种收敛格式，说明为什么收敛

解 选主元得$\begin{cases} 9x_1 - 4x_2 = 5 \\ 3x_1 - 10x_2 = 7 \end{cases}$，$A = \begin{pmatrix} 9 & -4 \\ 3 & -10 \end{pmatrix}$严格对角占优，所以，$0 < \omega \le 1$的超松弛迭代法收敛．雅可比迭代法收敛．

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{9}(5 + 4x_2^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{10}(-7 + 3x_1^{(k)}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{\omega}{9}(5 + 4x_2^{(k)}) + (1-\omega)x_1^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{\omega}{10}(-7 + 3x_1^{(k+1)}) + (1-\omega)x_2^{(k)} \end{cases}$$

例3.5 求n元二次函数$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$的梯度（其中$A$是$n$阶对称正定矩阵）.

解 设$A=(a_{ij})_{n\times n}$，$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$，$b=(b_1,b_2,\cdots,b_n)^T$，于是

$$f(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_ix_j-\sum_{i=1}^{n}b_ix_i.$$

由A是对称矩阵知$a_{jk}=a_{kj}$, 对$f(x)$关于x_k求偏导数得

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_k}=\frac{1}{2}\Big(\sum_{j=1}^{n}a_{kj}x_j+\sum_{i=1}^{n}a_{ik}x_i\Big)-b_k=\sum_{j=1}^{n}a_{kj}x_j-b_k,\quad k=1,2,\cdots,n.$$

由此则得

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \cdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{n} a_{1j}x_j \\ \sum_{j=1}^{n} a_{2j}x_j \\ \cdots \\ \sum_{j=1}^{n} a_{nj}x_j \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_n \end{pmatrix} = Ax - b.$$

例3.6 给定初始点$x^{(0)}=(0,0,0)^T$，用共轭梯度法求解

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

解 取$d^{(0)}=r^{(0)}=b-Ax^{(0)}=b=(3,1,3)^T$.

则$\|r^{(0)}\|_2^2=19,\quad d^{(0)T}Ad^{(0)}=55.$

故，$\alpha_0=\frac{\|r^{(0)}\|_2^2}{d^{(0)T}Ad^{(0)}}=\frac{19}{55},\quad x^{(1)}=x^{(0)}+\alpha_0 d^{(0)}=\frac{19}{55}(3,1,3)^T.$

又，$r^{(1)}=b-Ax^{(1)}=\frac{6}{55}(-1,6,-1)^T,\quad \|r^{(1)}\|_2^2=38\times\frac{6^2}{55^2},$

$\beta_0=\frac{\|r^{(1)}\|_2^2}{\|r^{(0)}\|_2^2}=\frac{72}{55^2},\quad d^{(1)}=r^{(1)}+\beta_0 d^{(0)}=\frac{6\times 19}{55^2}(-1,18,-1)^T.$

$d^{(1)T}Ad^{(1)}=\frac{(6\times 19)^2\times 6}{55^3},\quad \alpha_1=\frac{\|r^{(1)}\|_2^2}{d^{(1)T}Ad^{(1)}}=\frac{55}{57}.$

$x^{(2)}=x^{(1)}+\alpha_1 d^{(1)}=(1,1,1)^T,\quad r^{(2)}=b-Ax^{(2)}=(0,0,0)^T.$

迭代两次求得了方程组的解$x^*=x^{(2)}=(1,1,1)^T$.

有些函数，其表达式比较复杂，或者不知其确切表达式，只知道函数在区间$[a, b]$上一些点$x_i (i = 0, 1, \cdots, n)$处的函数值$y_i = f(x_i)$ $(i = 0, 1, \cdots, n)$，这些函数在实际中难以使用．本章针对这类函数，构造$f(x)$的简单近似表达式$p(x)$，**函数逼近．**
多项式是最简单的函数，容易计算，**函数的多项式逼近．**

要求

1. 掌握拉格朗日插值多项式
2. 掌握差商的定义、牛顿插值多项式
3. 熟练掌握分段低次插值多项式
4. 学习三次样条插值函数

例 给定数据如下，求其三次拉格朗日插值多项式，函数在$\frac{1}{2}$的插值及截断误差估计式.

x_i	-2	-1	0	1
y_i	3	1	1	6

解

$$
\begin{aligned}
L_3(x) &= y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + y_2 l_2(x) + y_3 l_3(x) \\
&= 3\frac{(x+1)(x-0)(x-1)}{(-2+1)(-2-0)(-2-1)} + 1\frac{(x+2)(x-0)(x-1)}{(-1+2)(-1-0)(-1-1)} \\
&+1\frac{(x+2)(x+1)(x-1)}{(0+2)(0+1)(0-1)} + 6\frac{(x+2)(x+1)(x-0)}{(1+2)(1+1)(1-0)} \\
&= \frac{1}{2}x^3 + \frac{5}{2}x^2 + 2x + 1
\end{aligned}
$$

$$f(\frac{1}{2}) \approx L_3(\frac{1}{2}) = \frac{43}{16}$$

截断误差$R_3(x) = f(x) - L_3(x) = \frac{f^4(\xi)}{4!}(x+2)(x+1)x(x-1)$

牛顿插值多项式截断误差的实用估计法

例 给定数据如下，求其Newton插值多项式及截断误差估计式.

x_i	-1	1	2	5
y_i	-7	7	-4	35

解 先列差商表

x_i	$f(x_i)$	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
-1	$\underline{-7}$			
1	7	$\underline{7}$		
2	-4	-11	$\underline{-6}$	
5	35	13	6	$\underline{2}$

$$
\begin{aligned}
N_3(x) &= -7 + 7(x+1) - 6(x+1)(x-1) + 2(x+1)(x-1)(x-2) \\
&= 2x^3 - 10x^2 + 5x + 10 \ .
\end{aligned}
$$

截断误差：$R_3(x) = f[-1, 1, 2, 5, x](x+1)(x-1)(x-2)(x-5)$.

埃尔米特插值多项式

例4．3　已知函数$y = f(x)$的函数值、导数值如下表所示，求其插值多项式及其误差项．

x_i	-1	0	1
$f(x_i)$	0	-4	-2
$f'(x_i)$		0	5
$f''(x_i)$		6	

解　由4.3.6式知

$$f[0,0] = f'(0), f[0,0,0] = f''(0)/2! = 3, f[1,1] = f'(1) = 5\ .$$

x_i	$f(x_i)$	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}]$	...	...
-1	$\underline{0}$					
0	-4	$\underline{-4}$				
0	-4	0	$\underline{4}$			
0	-4	0	3	$\underline{-1}$		
1	-2	2	2	-1	$\underline{0}$	
1	-2	5	3	1	2	$\underline{1}$

所以，

$$H_5(x) = 0 - 4(x+1) + 4(x+1)x - (x+1)x^2$$
$$+0(x+1)x^3 + (x+1)x^3(x-1)$$
$$= x^5 - 2x^3 + 3x^2 - 4.$$
$$R_3(x) = f[-1,0,0,0,1,1,x](x+1)x^3(x-1)^2.$$

或者，$R_3(x) = \frac{1}{6!} f^{(6)}(\xi)(x+1)x^3(x-1)^2$.

例4.3 已知函数$y=f(x)$的数值如下:

x_i	-3	-1	0	3	4
y_i	7	11	26	56	29

求它的自然三次样条插值函数$S(x)$.

解 由$h_i=x_i-x_{i-1}$得$h_1=2,\ h_2=1,\ h_3=3,\ h_4=1.$

由$\mu_i=\frac{h_i}{h_i+h_{i+1}},\ \lambda_i=1-\mu_i\quad(i=1,2,3)$, 得

$$\mu_1=\frac{2}{3},\ \mu_2=\frac{1}{4},\ \mu_3=\frac{3}{4},$$
$$\lambda_1=\frac{1}{3},\ \lambda_2=\frac{3}{4},\ \lambda_3=\frac{1}{4}.$$

由$d_i=6f[x_{i-1},x_i,x_{i+1}]\ (i=1,2,3)$, 得$d_1=26, d_2=-\frac{15}{2}, d_3=-\frac{111}{2}.$

对于自然三次样条函数，$M_0 = M_4 = 0$. 所以三弯矩方程组为

$$\begin{cases} 2M_1 + \frac{1}{3}M_2 = 26, \\ \frac{1}{4}M_1 + 2M_2 + \frac{3}{4}M_3 = -\frac{15}{2}, \\ \frac{3}{4}M_2 + 2M_3 = -\frac{111}{2}. \end{cases}$$

从以上方程组解得$M_1 = 12$，$M_2 = 6$，$M_3 = -30$. 将M_i代入$S(x)$的表达式，得

$$S(x) = \begin{cases} x^3 + 9x^2 + 25x + 28, & -3 \le x \le -1, \\ -x^3 + 3x^2 + 19x + 26, & -1 \le x \le 0, \\ -2x^3 + 3x^2 + 19x + 26, & 0 \le x \le 3, \\ 5x^3 - 60x^2 + 208x - 163, & 3 \le x \le 4. \end{cases}$$

4-13 已知函数$y = f(x)$在若干点处的函数值如下表所示:

x_i	0	1	2	3	4
y_i	-8	-7	0	19	56

求满足以下端点条件的三次样条插值函数.

（1）$S'(0) = 0, \quad S'(4) = 48$;

解: (1)显然$h_i = 1, i = 1, 2, 3, 4.$

$$\mu_i = \frac{h_i}{h_i + h_{i+1}} = \frac{1}{2}, \lambda_i = 1 - \mu_i = \frac{1}{2}, i = 1, 2, 3.$$

$$d_0 = \frac{6}{h_1}(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - y_0') = 6(-7 - (-8) - 0) = 6.$$

$$d_4 = \frac{6}{h_4}(y_4' - \frac{y_4 - y_3}{h_4}) = 6[48 - (56 - 19)] = 66.$$

$$d_i = \frac{6}{h_i + h_{i+1}}\left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}\right) = 3(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}), i = 1$$

三弯矩方程组为

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ M_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 18 \\ 36 \\ 54 \\ 66 \end{pmatrix}$$

解之，得:

$$M_0 = 0, \quad M_1 = 6, \quad M_2 = 12, \quad M_3 = 18, \quad M_4 = 24.$$

$$S(x) = \begin{cases} x^3 - 8(1-x) - 8x = x^3 - 8, 0 \le x \le 1; \\ (2-x)^3 + 2(x-1)^3 - 8(2-x) - 2(x-1) = x^3 - 8, 1 \le x \le 2; \\ 2(3-x)^3 + 3(x-2)^3 - 2(3-x) + 16(x-2) = x^3 - 8, 2 \le x \le 3; \\ 3(4-x)^3 + 4(x-3)^3 + 16(4-x) + 52(x-3) = x^3 - 8, 3 \le x \le 4 \end{cases}$$

要求

1. 了解函数的内积、范数的概念，及常用的正交多项式
2. 掌握正规方程组的得出、最小二乘拟合，最优平方逼近
3. 掌握最优一致逼近概念，最优一致逼近多项式构造方法
4. 了解近似最优一致逼近多项式的构造方法

例5.4 求函数$f(x)=e^x$在区间$[0,1]$上的最优逼近二次多项式.

解法1 设$p_2(x)=c_0+c_1x+c_2x^2$,

则$\phi_0(x)=1,\phi_1(x)=x,\phi_2(x)=x^2$.

$$(\phi_k,\phi_j)=\int_0^1 x^{k+j}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{k+j+1},$$

$$(\phi_0,f)=\int_0^1 e^x\,\mathrm{d}x=e-1,(\phi_1,f)=\int_0^1 xe^x\,\mathrm{d}x=1,(\phi_2,f)=e-2.$$

由正规方程组(5.2.9′)有

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} e-1 \\ 1 \\ e-2 \end{pmatrix}.$$

解之, 得 $c_0\approx 1.012\,99$, $c_1\approx 0.851\,14$, $c_2\approx 0.839\,17$. 从而,
$p_2(x)=1.012\,99+0.851\,14x+0.839\,17x^2$.

解法2 利用三项递推关系构造正交多项式. 取

$$g_0(x) = 1$$

$$\beta_0 = (xg_0, g_0) = \int_0^1 x\,\mathrm{d}x = \tfrac{1}{2}, \quad \gamma_0 = (g_0, g_0) = \int_0^1 \mathrm{d}x = 1, \quad \text{故}$$

$$g_1(x) = x - \beta_0/\gamma_0 = x - \frac{1}{2}.$$

$$\beta_1 = (xg_1, g_1) = \int_0^1 x(x-\frac{1}{2})^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{24},$$

$$\gamma_1 = (g_1, g_1) = \int_0^1 (x-\frac{1}{2})^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{12},$$

$$b_1 = \beta_1/\gamma_1 = 1/2, \quad c_1 = \gamma_1/\gamma_0 = 1/12.$$

$$g_2(x) = (x - b_1)g_1(x) - c_1 g_0(x) = (x-\frac{1}{2})^2 - \frac{1}{12}.$$

$$(g_2, g_2) = \int_0^1 \left((x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{12}\right)^2 \mathrm{d}x = \frac{1}{180},$$

$$(g_0, f) = \int_0^1 e^x \, \mathrm{d}x = e - 1,$$

$$(g_1, f) = \int_0^1 (x - \frac{1}{2}) e^x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{2}(3 - e),$$

$$(g_2, f) = \int_0^1 \left((x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{12}\right) e^x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{6}(7e - 19).$$

$$\begin{aligned} p(t) &= \frac{(g_0, f)}{(g_0, g_0)} g_0(x) + \frac{(g_1, f)}{(g_1, g_1)} g_1(x) + \frac{(g_2, f)}{(g_2, g_2)} g_2(x) \\ &= e - 1 + (18 - 6e)(x - \frac{1}{2}) + 30(7e - 19)\left((x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{12}\right) \\ &\approx 1.0129\,913\,1 + 0.851\,125\,07x + 0.839\,183\,97x^2. \end{aligned}$$

解法3 取勒让德正交多项式作为基函数，先做变换$x=\frac{t+1}{2}$，$-1\le t\le 1$，则$f(t)=e^{\frac{t+1}{2}}$.前三个勒让德正交多项式为

$$p_0(t)=1,\quad p_1(t)=t,\quad p_2(t)=\frac{1}{2}(3t^2-1).$$

则$f(t)$的最优平方逼近函数 $p(x)=c_0p_0(t)+c_1p_1(t)+c_2p_2(t)$.对于勒让德正交多项式 $(p_k,p_k)=2/(2k+1),\quad k=0,1,2.$ 而

$$(p_0,f)=\int_{-1}^{1}e^{\frac{t+1}{2}}\,\mathrm{d}t=2(e-1),\quad (p_1,f)=\int_{-1}^{1}te^{\frac{t+1}{2}}\,\mathrm{d}t=6-2e,$$

$$(p_2,f)=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}(3t^2-1)e^{\frac{t+1}{2}}\,\mathrm{d}t=14e-38.$$

从而得

$$c_0 = \frac{(p_0, f)}{(p_0, p_0)} \approx 1.718\,282, \;\; c_1 = \frac{(p_1, f)}{(p_1, p_1)} \approx 0.845\,155,$$

$$c_2 = \frac{(p_2, f)}{(p_2, p_2)} \approx 0.139\,864.$$

故 $\quad p(t) = 1.718\,282 + 0.845\,155t + 0.069\,932(3t^2 - 1).$

再将$t = 2x - 1$代入上式, 则得$f(x)$的最优平方逼近函数

$$p(x) = 1.012\,991 + 0.851\,126x + 0.839\,184x^2.$$

例5.1 给定数据如下表:

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
y_i	1.000 0	1.284 0	1.648 7	2.1170	2.718 3

求最小二乘拟合二次多项式.

解 **解法1** 设所求的最小二乘拟合多项式 $p_2(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2$, 则根据法方程组有

$$\begin{pmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.562\,5 \\ 1.875 & 1.562\,5 & 1.382\,8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8.768\,0 \\ 5.451\,4 \\ 4.401\,5 \end{pmatrix}.$$

从该方程组解得 $c_0 = 1.005\,1$, $c_1 = 0.864\,7$, $c_2 = 0.843\,2$. 所以, 最小二乘二次拟合多项式 $p_2(x) = 1.005\,1 + 0.864\,7x + 0.843\,2x^2$.

解法2 利用三项递推关系构造正交多项式. 取

$g_0(x)=1,\quad g_1(x)=x-\beta_0/\gamma_0,\quad g_2(x)=(x-b_1)g_1(x)-c_1g_0(x).$

$$\gamma_0=(g_0,g_0)=(1,1)=\sum_{i=1}^{5}1=5,$$

$$\beta_0=(xg_0,g_0)=(x,1)=\sum_{i=1}^{5}x_i=2.5,$$

$\beta_0/\gamma_0=1/2.$

故 $g_1(x)=x-\frac{1}{2}$. 又 $\gamma_1=(g_1,g_1)=\sum_{i=1}^{5}(x_i-\frac{1}{2})^2=\frac{5}{8}$,

$\beta_1=(xg_1,g_1)=\sum_{i=1}^{5}x_i(x_i-\frac{1}{2})^2=\frac{5}{16}$, $b_1=\beta_1/\gamma_1=1/2$,

$c_1=\gamma_1/\gamma_0=1/8$. 所以, $g_2(x)=(x-\frac{1}{2})^2-\frac{1}{8}$.

最优平方逼近函数

$$p_2(x) = \frac{(g_0, f)}{(g_0, g_0)} g_0(x) + \frac{(g_1, f)}{(g_1, g_1)} g_1(x) + \frac{(g_2, f)}{(g_2, g_2)} g_2(x)$$

$$(g_2, g_2) = \sum_{i=1}^{5} \left((x_i - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}\right)^2 = \frac{7}{128},$$

$$(g_0, f) = \sum_{i=1}^{5} y_i = 8.768\,0,$$

$$(g_1, f) = \sum_{i=1}^{5} (x_i - \frac{1}{2}) y_i = 1.067\,4,$$

$$(g_2, f) = \sum_{i=1}^{5} \left((x_i - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}\right) y_i = 0.046\,137\,5$$

$$p_2(x) = 1.753\,6 + 1.707\,84(x - \frac{1}{2}) + 0.843\,657\,142\left((x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}\right).$$

例5.2 给定数据如下表:

x_i	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
y_i	2.000 00	2.202 54	2.407 15	2.615 92	2.830 96	3.054 48	3.2

求形如$p(x)=c_0+c_1e^x+c_2e^{-x}$的最小二乘拟合函数.

解 取$\phi_0(x)=1$, $\phi_1(x)=e^x$, $\phi_2(x)=e^{-x}$. 则正规方程组(5.2.9′) 为

$$\begin{pmatrix} 7 & 9.639\,10 & 5.290\,05 \\ 9.639\,10 & 13.799\,29 & 7 \\ 5.290\,05 & 7 & 4.156\,27 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18.399\,81 \\ 26.157\,20 \\ 13.456\,86 \end{pmatrix}.$$

解之, 得

$$c_0=1.986\,14,\ c_1=1.017\,57,\ c_2=-1.002\,06.$$

例5.5 求函数$y=\arctan x$在区间$[0,1]$上的最优一致逼近一次多项式.

解 设$p_1(x)=c_0+c_1x$, 由于$f''(x)=-2x(1+x^2)^{-2}<0$, $0<x\le 1$, 故取偏差点$\tilde{x}_0=0, \tilde{x}_2=1$，由方程组(5.3.2)有

$$\left\{\begin{array}{ll} -c_0=\mu, & arctan\tilde{x}_1-c_0-c_1\tilde{x}_1=-\mu, \\ \frac{\pi}{4}-c_0-c_1=\mu, & \frac{1}{1+\tilde{x}_1^2}-c_1=0. \end{array}\right.$$

解之, 得 $c_1=\pi/4\approx 0.785\,4$, $\tilde{x}_1=\sqrt{1/c_1-1}$, $c_0=(arctan\tilde{x}_1-c_1\tilde{x}_1)/2\approx 0.035\,6$, $\mu\approx -0.035\,6$.

得函数$y=arctanx$在区间$[0,1]$上的最优一致逼近一次多项式

$$arctanx\approx p_1(x)=0.035\,6+0.785\,4x.$$

最大误差$E=-\mu=0.035\,6$.

例5.6 利用切比雪夫插值多项式求$y = \arctan x$在区间$[0,1]$上的近似最优一致逼近一次多项式.

解 作变量替换, 令$x = (t+1)/2$, 先关于t做插值多项式, $T_2(t)$的零点$t_i = cos\frac{2i+1}{4}\pi$, $i = 0, 1$. 即

$$x_0 = \frac{t_0+1}{2} = \frac{2+\sqrt{2}}{4}, \quad x_1 = \frac{t_1+1}{2} = \frac{2-\sqrt{2}}{4}.$$

利用牛顿插值多项式则

$$\begin{aligned} y = arctanx \approx N_1(x) &= y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) \\ &= arctan\frac{2+\sqrt{2}}{4} + \frac{arctan\frac{2-\sqrt{2}}{4} - arctan\frac{2+\sqrt{2}}{4}}{\frac{2-\sqrt{2}}{4} - \frac{2+\sqrt{2}}{4}}(x - \frac{2+\sqrt{2}}{4}) \\ &\approx 0.029\,197 + 0.793\,572x \ . \end{aligned}$$

例5.7 利用截断切比雪夫级数法求$y = \arctan x$在区间$[0,1]$上的近似最优一致逼近一次多项式.

解 令$x = \frac{t+1}{2}$, 则$y = \arctan \frac{t+1}{2}$, $-1 \le t \le 1$.

按切比雪夫级数系数计算公式

$$c_0 = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} arctan(\frac{cos\theta + 1}{2})\,\mathrm{d}\theta \approx 0.427\,078\,586\,4,$$

$$c_1 = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} arctan(\frac{cos\theta + 1}{2}) cos\theta\,\mathrm{d}\theta \approx 0.394\,736\,453\,9.$$

所以,

$$\begin{aligned}\arctan x &\approx c_0 T_0(t) + c_1 T_1(t) = c_0 + c_1 t = c_0 + c_1(2x-1)\\ &\approx 0.032\,342\,132\,5 + 0.789\,472\,907\,8x.\end{aligned}$$

例5.8 利用缩短幂级数法求$y = arctanx$在区间$[0,1]$上的近似最优一致逼近一次多项式.

解 令$x = \frac{1}{2}(t+1)$, 则$y = arctan\frac{t+1}{2}$, $-1 \le t \le 1$.

而, $\arctan\frac{t+1}{2} \approx p_2(t) = arctan\frac{1}{2} + \frac{2}{5}t - \frac{2}{25}t^2$.

由公式(5.3.6)知

$$p_1(t) = p_2(t) - (-\frac{2}{25}) \times \frac{1}{2}T_2(t) = p_2(t) + \frac{1}{25}(2t^2 - 1) = arctan\frac{1}{2} + \frac{2}{5}t - \frac{1}{25}.$$

所以,

$$\arctan x \approx p_1(x) = arctan\frac{1}{2} - \frac{1}{25} + \frac{2}{5}(2x-1) \approx 0.0236476 + 0.8x.$$

解法2 由解法1和表5.1知

$$
\begin{aligned}
\arctan\frac{t+1}{2} \approx p_2(t) &= \arctan\frac{1}{2}+\frac{2}{5}t-\frac{2}{25}t^2\\
&= \arctan\frac{1}{2}\times T_0+\frac{2}{5}T_1-\frac{2}{25}\times\frac{T_0+T_2}{2}\\
&= (\arctan\frac{1}{2}-\frac{1}{25})T_0+\frac{2}{5}T_1-\frac{1}{25}T_2.
\end{aligned}
$$

由(5.3.8)式知

$$
\begin{aligned}
p_1(t) &= (\arctan\frac{1}{2}-\frac{1}{25})T_0+\frac{2}{5}T_1\\
&= (\arctan\frac{1}{2}-\frac{1}{25})+\frac{2}{5}t.
\end{aligned}
$$

所以， $\arctan x \approx p_1(x) = \arctan\frac{1}{2}-\frac{1}{25}+\frac{2}{5}(2x-1).$

例5.9 利用缩短幂级数法求函数$f(x)=e^x$在区间$[-1,1]$上的近似最优一致逼近多项式，使得误差不超过0.005.

解 e^x在$x=0$处的泰勒展开式为

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + R_n(x),$$

其中误差项$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1} = \frac{e^\xi}{(n+1)!}x^{n+1}$，$\xi$介于0与$x$之间.

显然，

$$\max_{-1\le x\le 1}|R_n(x)| \le \frac{e}{(n+1)!}.$$

当$n=4$时，$\max\limits_{-1\le x\le 1}|R_4(x)| \le \frac{e}{5!} \approx 0.022\,652\,348 > 0.005.$

当$n=5$时，$\max\limits_{-1\le x\le 1}|R_5(x)| \le \frac{e}{6!} \approx 0.003\,775\,391.$

缩短幂级数法

$$
\begin{aligned}
p_5(x) &= 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} \\
&= 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \frac{x^5}{120} = T_0 + T_1 + \frac{1}{2}\frac{T_0 + T_2}{2} \\
&+ \frac{1}{6}\frac{3T_1 + T_3}{4} + \frac{1}{24}\frac{3T_0 + 4T_2 + T_4}{8} + \frac{1}{120}\frac{10T_1 + 5T_3 + T_5}{16} \\
&= \frac{81}{64}T_0 + \frac{217}{192}T_1 + \frac{13}{48}T_2 + \frac{17}{384}T_3 + \frac{1}{192}T_4 + \frac{1}{1\,920}T_5.
\end{aligned}
$$

由于$\frac{e}{6!} + \frac{T_5}{1920} < 0.003\,78 + 0.000\,53 = 0.004\,31 < 0.005$. 所以

$$
\begin{aligned}
e^x \approx P_4(x) &= \frac{81}{64}T_0 + \frac{217}{192}T_1 + \frac{13}{48}T_2 + \frac{17}{384}T_3 + \frac{1}{192}T_4 \\
&= \frac{81}{64} + \frac{217}{192}x + \frac{13}{48}(2x^2 - 1) + \frac{17}{384}(4x^3 - 3x) + \frac{1}{192}(8x^4 - 8x^2 + \\
&= 1 + \frac{383}{384}x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{17}{96}x^3 + \frac{1}{24}x^4.
\end{aligned}
$$

要求

1. 熟练掌握基本的数值积分公式-梯形求积公式、辛普生求积公式和柯特斯求积公式.
2. 掌握三种复化求积公式、变步长积分法、龙贝格积分法
3. 学会待定系数法，了解高斯型求积公式
4. 熟练掌握插值型数值微分公式，了解另外三种类型的数值微分法：待定系数法、外推求导法和利用三次样条插值函数的求导法

例 6.1 利用复化梯形求积公式计算积分

$$I[f]=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\,\mathrm{d}x$$

使误差不超过$\frac{1}{2}\times 10^{-3}$. 取相同的步长$h$, 用复化辛普生计算, 给出结果和截断误差限.

解 由$f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1 \cos tx\,\mathrm{d}t$ 知

$$f^{(k)}(x)=\int_0^1 \frac{d^k(\cos tx)}{\mathrm{d}x^k}\,\mathrm{d}t=\int_0^1 t^k\cos(tx+\frac{k\pi}{2})\,\mathrm{d}t.$$

$$\max_{0\le x\le 1}|f^{(k)}(x)|\le\int_0^1 t^k|\cos(tx+\frac{k\pi}{2})|\,\mathrm{d}t\le\int_0^1 t^k\,\mathrm{d}t=\frac{1}{k+1}.$$

由复化梯形求积公式的截断误差知, 要求选取h满足

$$|R_{T_n}[f]|=\frac{1}{12}h^2|f''(\eta)|\le\frac{h^2}{12}\times\frac{1}{3}\le\frac{1}{2}\times 10^{-3}\Rightarrow h^2\le 18\times 10^{-3}.$$

取$h=\frac{1}{8}=0.125$ 即满足要求. 而
$n=\frac{b-a}{n}=\frac{1}{h}=8$. $x_i=0.125\times i$, $i=0,1,2,\cdots,8$.

$$I[f]\approx T_8=\frac{1}{16}\left[f(0)+2\sum_{i=1}^{7}f(\frac{i}{8})+f(1)\right]=0.945\,690\,9.$$

其中定义$f(0)=1$.

取同样步长$h=0.125$, 则$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}=(i-\frac{1}{2})h=0.125(i-0.5)$,

$$I[f]\approx S_8=\frac{1}{48}\left[f(0)+2\sum_{i=1}^{7}f(\frac{i}{8})+4\sum_{i=1}^{8}f(\frac{i}{8}-\frac{1}{16})+f(1)\right]=0.946\,083\,3.$$

截断误差限

$$\left|R_{S_8}[f]\right|\le\frac{1}{2\,880}\times\left(\frac{1}{8}\right)^4\times\frac{1}{5}\approx 0.17\times 10^{-7}.$$

例6.3 确定求积公式

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(-h) + A_1 f(0) + A_2 f(h),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 取 $f(x) = 1, x, x^2$, 令 $R[x^k] = 0$ $(k = 0, 1, 2)$, 得方程组

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 4h, \\ -A_0 h + A_2 h = 0, \\ A_0 h^2 + A_2 h^2 = \frac{16}{3} h^3. \end{cases}$$

解之, 得 $A_0 = A_2 = 8h/3, \quad A_1 = -4h/3.$

令 $f(x) = x^3$, 显然, $R[x^3] = 0$. 再令 $f(x) = x^4$, 则

$$I[x^4] = \int_{-2h}^{2h} x^4\,\mathrm{d}x = \frac{64h^5}{5}, \quad Q[x^4] = \frac{4h}{3}[2(-h)^4 + 2(h)^4] = \frac{16h^5}{3}.$$

$R[x^4] = I[x^4] - Q[x^4] = \frac{112}{15} h^5 \neq 0$, 故其代数精度 $m = 3$.

例6.4 确定求积公式

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(h) + A_2 f'(0),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 令 $R[x^k] = 0 \ (k = 0, 1, 2)$, 得方程组

$$A_0 + A_1 = h, \quad A_1 h + A_2 = h^2/2, \quad A_1 h^2 = h^3/3.$$

解之, 得$A_0 = 2h/3, \quad A_1 = h/3, \quad A_2 = h^2/6.$
令 $f(x) = x^3$, 则 $I[x^3] = \int_0^h x^3\,\mathrm{d}x = h^4/4$,
$Q[x^3] = \frac{h}{6}[4f(0) + 2f(h) + hf'(0)] = \frac{h^4}{3}$, $R[x^3] = -\frac{h^3}{12} \neq 0$. 故该求积公式的代数精度$m = 2$.

例6.5 利用广义佩亚诺定理确定例6.3、例6.4中数值积分公式的截断误差.

解 例6.3中$m=3$,

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{8h}{3}f(-h) - \frac{4h}{3}f(0) + \frac{8h}{3}f(h),$$

取$e(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-h)^2(x+h)^2$, 则

$$\begin{aligned} R[f] &= R[e] = I[e] - Q[e] \\ &= \int_{-2h}^{2h} \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-h)^2(x+h)^2\,\mathrm{d}x - \frac{4h}{3}[2e(-h) - e(0) + 2e(h)] \\ &= \frac{23h^5 f^{(4)}(\eta_1)}{90} + \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{18} = \frac{14}{45}h^5 f^{(4)}(\eta), \quad -2h \le \eta \le 2h. \end{aligned}$$

例6.4中 $m=2$,

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2h/3f(0)+h/3f(h)+h^2/6f'(0),$$

选取 $\tilde{x}_0=\tilde{x}_1=0,\ \tilde{x}_2=h$, 则

$$e(x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}x^2(x-h).$$

$$\begin{aligned}
R[f] &= R[e]=I[e]-Q[e]\\
&= \int_0^h \frac{f'''(\xi)}{3!}x^2(x-h)\,\mathrm{d}x-\frac{h}{6}[4e(0)+2e(h)+he'(0)]\\
&= \frac{1}{6}f'''(\eta)\int_0^h x^2(x-h)\,\mathrm{d}x=-\frac{(b-a)^4}{72}f'''(\eta),\ a\le\eta\le b.
\end{aligned}$$

例6.6 利用广义佩亚诺定理确定辛普生求积公式的截断误差.

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx Q[f] = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f(\tfrac{a+b}{2}) + f(b)\right].$$

解 可以验证辛普生求积公式的代数精度$m=3$, 取

$$e(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b).$$

则由广义佩亚诺定理

$$R[f] = R[e] = I[e] - Q[e] = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$

$$-\frac{b-a}{6}[e(a) + 4e(\frac{a+b}{2}) + e(b)] = -\frac{(b-a)^5}{2\,880}f^{(4)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

例6.7 确定以下高斯型求积公式及其误差项.

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1).$$

解 这是$n=1$的高斯型求积公式, 其代数精度$m=2n+1=3$. 所以求积公式对$f(x)=1,x,x^2,x^3$ 准确成立, 由此得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2, \\ x_0 A_0 + x_1 A_1 = 0, \\ x_0^2 A_0 + x_1^2 A_1 = 2/3, \\ x_0^3 A_0 + x_1^3 A_1 = 0. \end{cases}$$

解之, 得 $x_0=-\sqrt{3}/3$, $x_1=\sqrt{3}/3$, $A_0=A_1=1$. 所求高斯型求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f(-\sqrt{3}/3) + f(\sqrt{3}/3).$$

与数值积分法中的待定系数法类似，也可用待定系数法导出数值微分公式

例6.9 确定如下数值微分公式

$$f''(x_0) \approx c_0 f(x_0) + c_1 f'(x_0) + c_2 f(x_1),$$

使其具有尽可能高的代数精度，并给出截断误差表示式.

解 为了便于计算，令$x_0 = 0$, $x_1 = h$, 则截断误差

$$R[f] = f''(0) - c_0 f(0) - c_1 f'(0) - c_2 f(h).$$

分别取$f = 1, x, x^2$, 令$R[f] = 0$, 则得方程组

$$-c_0 - c_2 = 0,$$

$$-c_1 - c_2 h = 0,$$

$$2 - c_2 h^2 = 0.$$

待定系数法

解之，得 $c_0=-2/h^2, c_1=-2/h, c_2=2/h^2$. 从而，

$$f''(x_0)\approx\frac{2}{h^2}[-f(x_0)-hf'(x_0)+f(x_1)],$$

其中$h=x_1-x_0$.

由于$R[x^3]=-c_2h^3=-2h\neq 0$. 所以，代数精度$m=2$.根据广义佩亚诺定理取

$$e(x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)^2(x-x_1),$$

则$R[f]=R[e]=e''(x_0)-\frac{2}{h^2}[-e(x_0)-he'(x_0)+e(x_1)]=e''(x_0)=-\frac{h}{3}f'''(\xi)$.

要求

1. 熟练掌握求解非线性方程的几种基本迭代法：二分法、简单迭代法、牛顿法、弦割法
2. 迭代法的收敛性
3. 掌握求解非线性方程组的几种迭代法：简单迭代法、牛顿法
4. 了解求解非线性方程组的弦割法、Broyden法

例7.1 用简单迭代法求区间(2,3)内方程$x^3-2x-5=0$的根.

解法1 原方程变为$x^3=2x+5$，得$x=\sqrt[3]{2x+5}$，作迭代格式

$$x_{k+1}=\sqrt[3]{2x_k+5},\quad k=0,1,2,\cdots$$

取初始点$x_0=2.5$，按上式迭代得

$$x_1=2.154\,434\,690,\quad x_2=2.103\,612\,029,\quad x_3=2.095\,927\,410,$$
$$x_{10}=2.094\,551\,484,\quad x_{11}=2.094\,551\,482=x_{12}$$

解法2 两边同加$2x^3+5$, 再同除$3x^2-2$得同解方程$x=(2x^3+5)/(3x^2-2)$, 作迭代格式

$$x_{k+1}=(2x_k^3+5)/(3x_k^2-2),\quad k=0,1,2,\cdots$$

取初始点$x_0=2.5$，按上式迭代得$x_1=2.164\,179\,104$, $x_2=2.097\,135\,356$, $x_3=2.094\,555\,232$, $x_4=2.094\,551\,482=x_5$.

解法3 $x = (x^3 - 5)/2$, 作迭代格式

$$x_{k+1} = (x_k^3 - 5)/2, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

取初始点$x_0 = 2.5$，按上式迭代得 $x_1 = 5.312\,5$,
$x_2 = 72.466\,430\,66$, $x_3 = 190\,272.011\,8$, $x_4 = 3.444\,250\,536 \times 10^{16}$,
$x_5 = 2.042\,933\,398 \times 10^{46}$，计算$x_6$时溢出.

从以上三种解法可见，迭代点列是否收敛以及收敛的快慢，同迭代函数$\phi(x)$的选取有关.

几何意义： α是$y = x$与$y = \phi(x)$交点的横坐标。
折线法。 $|\phi'(x)| < 1$时收敛。

例 用迭代法求区间(0,1)(or (2,3))内方程$e^x-4x=0$的根.

解: $f(x)=0$在区间[0,1]等价形式$x=\frac{1}{4}e^x$.

记$\varphi(x)=\frac{1}{4}e^x$, $\varphi'(x)=\frac{1}{4}e^x$.

当$x\in(0,1)$,

$$\varphi(x)\in[\varphi(0),\varphi(1)]\subset[0,1]$$

$$\varphi'(x)\le\varphi'(1)=\frac{1}{4}e\le 1$$

故迭代$x_{k+1}=\frac{1}{4}e^{x_k}$对任意$x_0\in[0,1]$均收敛。

取$x_0=0.5$,得$x_1=0.4122, x_2=0.3775,\cdots,x_5=0.3583$.

(当$x\in(2,3)$,$f(x)=0$等价形式$x=\ln(4x)$, $\cdots$)

例 用迭代法求方程$x^2-3=0$的根$x=\sqrt{3}$.

解：

1. $x_{k+1}=x_k^2+x_k-3$, $\varphi'(x)=2x+1$, $\varphi'(\sqrt{3})=2\sqrt{3}+1>1$, 发散
2. $x_{k+1}=\frac{3}{x_k}$, $\varphi'(x)=-\frac{3}{x^2}$, $\varphi'(\sqrt{3})=-1$, 2, 1.5, 2, 1.5,… 震荡
3. $x_{k+1}=x_k-\frac{1}{4}(x_k^2-3)$, $\varphi'(x)=1-\frac{1}{2}x$,
   $\varphi'(\sqrt{3})=1-\frac{\sqrt{3}}{2}<1$, 收敛
4. $x_{k+1}=x_k-\frac{x_k^2-3}{2x_k}=\frac{1}{2}(x_k+\frac{2}{x_k})$, $\varphi'(x)=\frac{1}{2}(1-\frac{3}{x^2})$,
   $\varphi'(\sqrt{3})=0$, 二阶收敛。

例 证明迭代格式$x_{k+1}=\frac{x_k(x_k^2+3a)}{3x_k^2+a}$是计算$x^*=\sqrt{a}$的三阶方法.

证明： 记$\varphi(x)=\frac{x(x^2+3a)}{3x^2+a}$, 则$\varphi(\sqrt{a})=\frac{\sqrt{a}(\sqrt{a})^2+3a)}{3(\sqrt{a})^2+a}=\sqrt{a}$,

$$(3x^2+a)\varphi(x)=x^3+3ax$$

上式求导得

$$(3x^2+a)\varphi`(x)+6x\varphi(x)=3x^2+3a,$$

$$(3a+a)\varphi`(\sqrt{a})+6\sqrt{a}\varphi(\sqrt{a})=3a+3a\Rightarrow\varphi`(\sqrt{a})=0$$

分别求二阶、三阶导得

$$(3x^2+a)\varphi``(x)+2(3x^2+a)`\varphi`(x)+6\varphi(x)=6x,\Rightarrow\varphi``(\sqrt{a})=0$$

$$(3x^2+a)\varphi```(x)+3(3x^2+a)`\varphi``(x)+3(3x^2+a)``\varphi`(x)=6,\Rightarrow\varphi```(\sqrt{a})=\frac{3}{2\ldots}$$

例7.2 解方程组

$$\begin{cases} 4x_1 - x_2 + 0.1e^{x_1} = 1, \\ -x_1 + 4x_2 + x_1^2/8 = 0. \end{cases}$$

解 用简单迭代法作迭代格式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left(1 + x_2^{(k)} - 0.1e^{x_1^{(k)}}\right), \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left(x_1^{(k)} - \frac{1}{8}(x_1^{(k)})^2\right). \end{cases} \qquad k = 0, 1, 2, \cdots$$

高斯-赛德尔迭代格式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left(1 + x_2^{(k)} - 0.1e^{x_1^{(k)}}\right), \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left(x_1^{(k+1)} - \frac{1}{8}(x_1^{(k+1)})^2\right). \end{cases} \qquad k = 0, 1, 2, \cdots$$

取$\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0)^T$，得P230

例7.4 用牛顿法解$\begin{cases} 4x_1 - x_2 + 0.1e^{x_1} = 1, \\ -x_1 + 4x_2 + x_1^2/8 = 0. \end{cases}$.

解　牛顿迭代格式为

$$\begin{pmatrix} 4 + 0.1e^{x_1^{(k)}} & -1 \\ -1 + 0.25x_1^{(k)} & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x}_1^{(k)} \\ \Delta \mathbf{x}_2^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4x_1^{(k)} - 0.1e^{x_1^{(k)}} + x_2^{(k)} + 1 \\ x_1^{(k)} - 0.125(x_1^{(k)})^2 - 4x_2^{(k)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} + \Delta x_1^{(k)}, \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} + \Delta x_2^{(k)}. \end{cases}$$

取$\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0)^T$，得

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)} &= (0.233\,766\,233\,8, \quad 0.058\,441\,558\,4)^T \\ \mathbf{x}^{(3)} &= (0.232\,567\,005\,1, \quad 0.056\,451\,519\,7)^T = \mathbf{x}^{(4)} \end{aligned}$$

故$\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}^{(3)}$.

例： 用布洛顿法求解如下方程组的近似解，准确到两位小数.

$$x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0, \qquad 2x_1 + x_2 - 1 = 0.$$

解： 第1步迭代

令$\mathbf{x}^{(0)} = (0.6, -0.8)^T, \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(0)}) = (0, -1.6)^T)$,

$$\mathbf{J}_f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 2x_2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad A_0 = \mathbf{J}_f(\mathbf{x}^{(0)}) = \begin{pmatrix} 1.2 & -1.6 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A_0^{-1} = \mathbf{J}_f(\mathbf{x}^{(0)})^{-1} = \frac{1}{22}\begin{pmatrix} 5 & 8 \\ -10 & 6 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - A_0^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(0)}) = \begin{pmatrix} 0.6 \\ -0.8 \end{pmatrix} - \frac{1}{22}\begin{pmatrix} 5 & 8 \\ -10 & 6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ -0.6 \end{pmatrix}$$

$$= \left(\tfrac{9}{11}, -\tfrac{7}{11}\right)^T$$

第2步迭代

$$\mathbf{s}^{(1)}=\mathbf{x}^{(1)}-\mathbf{x}^{(0)}=(\tfrac{12}{55},\tfrac{9}{55})^T,$$

$$\mathbf{y}^{(1)}=\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(1)})-\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(0)})=(\tfrac{9}{121},\tfrac{3}{5})^T$$

$$\mathbf{A}_1^{-1}:=\mathbf{A}_0^{-1}+\frac{(\mathbf{s}^{(1)}-\mathbf{A}_0^{-1}\mathbf{y}^{(1)})\,\mathbf{s}^{(1)T}\mathbf{A}_0^{-1}}{\mathbf{s}^{(1)T}\mathbf{A}_0^{-1}\mathbf{y}^{(1)}}=\frac{1}{2596}\begin{pmatrix}605 & 869\\ -1210 & 858\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(2)}:=\mathbf{x}^{(1)}-\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(1)})=(0.8008,-0.6017)^T$$

第3步迭代

$$\mathbf{s}^{(2)}=\mathbf{x}^{(2)}-\mathbf{x}^{(1)}=\cdots,$$

$$\mathbf{y}^{(2)}=\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(2)})-\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(1)})=\cdots$$

$$\mathbf{A}_2^{-1}:=\mathbf{A}_1^{-1}+\frac{(\mathbf{s}^{(k)}-\mathbf{A}_{k-1}^{-1}\mathbf{y}^{(k)})\,\mathbf{s}^{(k)T}\mathbf{A}_{k-1}^{-1}}{\mathbf{s}^{(k)T}\mathbf{A}_{k-1}^{-1}\mathbf{y}^{(k)}}=\cdots$$

$$\mathbf{x}^{(3)}:=\mathbf{x}^{(2)}-\mathbf{A}_2^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(2)})=\cdots$$

例8.1 设$A=\begin{bmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 2 & -4 & 1 \\ 1 & 1 & -6 \end{bmatrix}$，求$A$按模最大的特征值$\lambda_1$和特征向量$\xi_1$.

解 取$\mathbf{z}_0=(1,1,1)^T$. $\mathbf{y}_1:=A\mathbf{z}_0=(2,-1,-4)^T$,
$m_1:=\max\mathbf{y}_1=-4$, $\mathbf{z}_1:=\mathbf{y}_1/m_1=(-0.5,0.25,1)^T$,
$\mathbf{y}_2:=A\mathbf{z}_1=(2,-1,-6.25)^T$, $m_2:=\max\mathbf{y}_2=-6.25$,
$\mathbf{z}_2:=\mathbf{y}_2/m_2=(-0.32,0.16,1)^T$, $\cdots$
$\vdots$
$m_{90}=-6.421066614=m_{91}$,
$\mathbf{z}_{91}=(-0.04614548303,0.3749211313,1)^T$
故得$\lambda_1\approx-6.421\,066\,614$,
$\xi_1=(-0.046\,145\,483\,03,-0.374\,921\,131\,3,1)^T$.

原点位移法

乘幂法收敛快慢取决于比值$|\lambda_2/\lambda_1|$, 可选取常数p, 用$A-pI$ 代替A 作乘幂法. 适当选取p, 可使$A-pI$ 的特征值$\lambda_i - p$ 满足

$$|\frac{\lambda_2 - p}{\lambda_1 - p}| < |\frac{\lambda_2}{\lambda_1}|$$

这时的乘幂法收敛速度快, $m_k + p \to \lambda_1$, 而$\mathbf{z}_k$ 仍收敛于A的特征向量ξ_1. 这种加速收敛的方法称为**原点位移法**.

例8.2 取$p=-2$,, $\mathbf{z}_0 = (1,1,1)^T$. 按原点位移法计算例8.1可得
解 取$\mathbf{z}_0 = (1,1,1)^T$. $\mathbf{y}_1 := (A+2I)\mathbf{z}_0 = (4,1,-2)^T$,
$m_1 := \max \mathbf{y}_1 = 4$, $\mathbf{z}_1 := \mathbf{y}_1/m_1 = (1, 0.25, -0.5)^T$,
$\mathbf{y}_2 := (A+2I)\mathbf{z}_1 = (1,1,3.25)^T$, $m_1 := \max \mathbf{y}_2 = \frac{13}{4}$,
$\mathbf{z}_1 := \mathbf{y}_1/m_1 = (\frac{4}{13}, \frac{4}{13}, 1)^T$, $\cdots$

例8.3 用反幂法求例8.1矩阵近似于-6.42的特征值和特征向量

$$A+6.42I=\begin{pmatrix}1 & & \\ 0.369 & 1 & \\ 0.185 & 0.375 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}5.42 & 2 & 1\\ & 1.682 & 0.631\\ & & -0.0122\end{pmatrix}$$

$$Ry_1=e=(1,1,1)^T\Rightarrow y_1=(37.762,308.370,-820.410)$$

$$m_1=-820.410, LU=z_1\Rightarrow u=(-0.046,-0.376,1)^T$$

k	m_k	$(\mathbf{z}_k)_1$	$(\mathbf{z}_k)_2$	$(\mathbf{z}_k)_3$
1	-820.410 368 7	-0.046 028 298 46	-0.375 872 762 3	1
2	-937.834 480 8	-0.046 145 715 84	-0.374 920 570 4	1
3	-937.545 857 7	-0.046 145 482 84	-0.374 921 131 7	1

故得$\lambda_1\approx\tilde{\lambda}_1+1/m_3\approx-6.421\,066\,614$,
$\xi_1=(-0.046\,145\,482\,84,-0.374\,921\,131\,7,1)^T$.