

高等数值分析  
Advanced Numerical Analysis

Dait

# 目 录

<b>第一章 数学基础知识</b>	<b>1</b>
1.1 线性空间 . . . . .	1
1.1.1 线性空间 . . . . .	1
1.1.2 线性空间的基和维度 . . . . .	1
1.2 范数 . . . . .	2
1.2.1 度量空间 . . . . .	2
1.2.2 赋范空间与范数 . . . . .	3
1.2.3 范数的等价性 . . . . .	5
1.3 内积 . . . . .	5
1.4 矩阵空间 . . . . .	8
1.4.1 矩阵范数 . . . . .	8
1.4.2 算子范数 . . . . .	9
1.4.3 扰动定理 . . . . .	12
<b>第二章 函数插值和重构</b>	<b>13</b>
2.1 一维多项式插值 . . . . .	13
2.1.1 Lagrange 插值 . . . . .	13
2.1.2 Lagrange 插值的收敛性 . . . . .	15
2.1.3 Newton 插值公式 . . . . .	16
2.1.4 Hermite 插值 . . . . .	17
2.2 分段插值 . . . . .	18
2.2.1 分段线性插值 . . . . .	18
2.2.2 分段三次 Hermite 插值 . . . . .	19
2.3 Fourier 插值 . . . . .	20
<b>第三章 函数逼近</b>	<b>21</b>
3.1 最佳平方逼近 . . . . .	21
3.1.1 法方程 . . . . .	21
3.1.2 正交多项式 . . . . .	22
3.2 最小二乘法 . . . . .	23
3.3 最佳一致逼近 . . . . .	24

<b>第四章 数值积分</b>	<b>26</b>
4.1 Newton-Cotes 公式	27
4.1.1 闭型 Newton-Cotes 公式	27
4.1.2 开型 Newton-Cotes 公式	28
4.1.3 积分法的一致稳定性	28
4.2 复合求积公式	29
4.3 Romberg 求积方法	30
4.3.1 Euler-Maclaurin 求积公式	30
4.3.2 Richardson 外推方法	31
4.3.3 Romberg 求积方法	31
4.4 Gauss 求积公式	32
<b>第五章 线性方程组的直接解法</b>	<b>34</b>
5.1 矩阵操作	34
5.2 Gauss 消元法	38
5.2.1 Gauss 消元法	38
5.2.2 LU 分解	39
5.2.3 Cholesky 分解	42
5.2.4 Thomas 方法	42
5.3 稳定性分析	43
<b>第六章 线性方程组的迭代解法</b>	<b>47</b>
6.1 迭代法基本概念	47
6.1.1 向量序列和矩阵序列的极限	47
6.1.2 迭代公式的构造	48
6.2 (单步) 定常线性迭代	50
6.2.1 Richardson 迭代法	50
6.2.2 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法	51
6.2.3 超松弛迭代法	52
6.3 非线性迭代方法	54
6.3.1 子空间方法	55
6.3.2 最速下降法	55
6.3.3 共轭梯度法	56
6.3.4 共轭梯度法的预处理	59
<b>第七章 非线性方程和方程组的数值解法</b>	<b>60</b>
7.1 非线性方程的不动点迭代法	60
7.1.1 迭代法的收敛性	60
7.1.2 Newton 法	62
7.1.3 割线法	63
7.1.4 Aitken 加速方法	64
7.1.5 Steffensen 迭代法	65

7.2 非线性方程组的不动点迭代法 . . . . .	66
-----------------------------	----

# 第一章 数学基础知识

## 1.1 线性空间

### 1.1.1 线性空间

#### 定义 1.1.1: 线性空间

给定一个数域  $\mathbb{F}$  (本笔记只涉及实数域  $\mathbb{R}$  和复数域  $\mathbb{C}$ ) 和一个集合  $V$ , 定义加法  $+: V \times V \rightarrow V$  满足:

- 结合律:  $(a + b) + c = a + (b + c)$ ,
- 零元:  $a + 0 = a$ ,
- 逆元:  $a + (-a) = 0$ ,
- 交换律:  $a + b = b + a$ ;

数乘  $\cdot: \mathbb{F} \times V \rightarrow V$  满足:

- 单位元:  $1a = a$ ,
- 结合律:  $(\lambda\mu)a = \lambda(\mu a)$ ,
- 分配率 1:  $(\lambda + \mu)a = \lambda a + \mu a$ ,
- 分配率 2:  $\lambda(a + b) = \lambda a + \lambda b$ .

则称  $V$  在  $\mathbb{F}$  上构成一个线性空间 (linear space).

#### 例 1.1.1: 线性空间的例子

- $\mathcal{C}^n[a, b]$ : 全体在  $[a, b]$  上  $n$  次导数连续 (continuous) 的函数构成的集合.
- $\mathcal{P}_n = \{a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n \mid a_i \in \mathbb{F}\}$ :  $n$  次多项式函数空间.

### 1.1.2 线性空间的基和维度

#### 定义 1.1.2: 线性无关

设  $V$  是线性空间, 给定其中  $n$  个元素  $x_1, \dots, x_n \in V$ , 若

$$a_1x_1 + \cdots + a_nx_n = 0, \iff a_1 = \cdots = a_n = 0, \quad (1.1)$$

则称  $x_1, \dots, x_n$  线性无关 (linear independent). 反之, 称为线性相关.

**例 1.1.2: 线性无关的例子**

- $\mathcal{P}_n$  中  $\{1, x, \dots, x^n\}$  是线性无关的;
- 所有  $[-\pi, \pi]$  上的周期函数构成的函数空间是线性空间, 其中

$$\{1, \cos x, \sin x, \dots, \cos nx, \sin nx\}$$

线性无关.

**定义 1.1.3: 线性空间的基和维度**

给定线性空间  $V$  中的一组元素  $\{x_1, \dots, x_n\}$ , 若  $\forall x \in V$  都可以被唯一表示为其线性组合

$$x = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n, \quad (1.2)$$

则称  $\{x_1, \dots, x_n\}$  构成一组基 (base), 且  $V$  的维度  $\dim(V) = n$ .

**定理 1.1.1**

线性空间的维度与基的选取没有关系.

**例 1.1.3: 典型线性空间的维度**

- $\dim(\mathcal{P}_n) = n$ ;
- $\dim(\mathcal{C}[a, b]) = +\infty$ .

## 1.2 范数

### 1.2.1 度量空间

**定义 1.2.1: 度量空间**

给定集合  $M$ , 若映射  $d: M \times M \rightarrow \mathbb{R}$  满足:  $\forall x, y \in M$

- 正定性:  $d(x, y) \geq 0$ , 且  $d(x, y) = 0 \iff x = y$ ;
- 交换性:  $d(x, y) = d(y, x)$ ;
- 三角不等式:  $d(x, y) + d(y, z) \geq d(x, z)$ .

则称  $M$  是一个度量空间 (metric space) 或距离空间,  $d$  为度量函数或距离函数.

**定义 1.2.2: Cauchy 序列**

对于序列  $\{x_n\}$ , 若  $\forall \varepsilon > 0, \exists N \in \mathbb{N}$  满足:

$$d(x_m, x_n) < \varepsilon, \quad \forall m, n > N, \quad (1.3)$$

则称  $\{x_n\}$  为 Cauchy 序列 (Cauchy sequence).

**定义 1.2.3: 度量空间的完备性**

若  $\forall$  Cauchy 序列  $\{x_n\} \subset M$ ,  $\exists x \in M$  满足:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, x) = 0, \iff \lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x,$$

则称度量空间  $M$  是完备的 (complete).

注. 不严谨地说, 完备性要求所有收敛的序列都会收敛到  $M$  中.

**例 1.2.1: 实数公理**

实数集  $\mathbb{R}$  中的度量函数  $d(a, b) = |a - b|$  是完备的.

注. 有理数域  $\mathbb{Q}$  中的度量函数  $d(a, b) = |a - b|$  不是完备的, 比如

$$x_0 = 1, \quad x_{n+1} = \frac{x_n}{2} + \frac{1}{x_n} \rightarrow \sqrt{2} \notin \mathbb{Q}.$$

**定理 1.2.1: 完备化定理**

若  $(M, d)$  是一个度量空间, 则存在唯一等距同构的完备化空间.

证明. 构造性证明: 令  $\tilde{M}$  是  $M$  中所有 Cauchy 序列  $\{x_n\}$  的集合. 在  $\tilde{M}$  中定义等价关系:

$$\{x_n\} \sim \{y_n\} \iff \lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, y_n) = 0.$$

令  $[\{x_n\}] = \{\{y_n\} \in \tilde{M} \mid \{x_n\} \sim \{y_n\}\}$  表示  $\{x_n\}$  的等价类,  $\hat{M} = \{[\{x_n\}] \mid \{x_n\} \in \tilde{M}\}$  是  $M$  中所有 Cauchy 序列的等价类构成的集合. 定义  $\hat{M}$  上的度量为

$$\hat{d}([\{x_n\}], [\{y_n\}]) := \lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, y_n),$$

可证  $(\hat{M}, \hat{d})$  是完备的度量空间. 且存在等距嵌入

$$i : M \rightarrow \hat{M}, \quad x \mapsto [\{x, x, \dots\}].$$

即  $i$  是映射到对应常数序列的等价类. □

**1.2.2 赋范空间与范数****定义 1.2.4: 赋范空间与范数**

给定数域  $\mathbb{F}$  上的线性空间  $V$ , 若映射  $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}$  满足:  $\forall a, b \in V, \lambda \in \mathbb{F}$

- 正定性:  $\|a\| \geq 0$ , 且  $\|a\| = 0 \iff a = 0$ ;
- 齐次性:  $\|\lambda a\| = |\lambda| \|a\|$ ;
- 三角不等式:  $\|a + b\| \leq \|a\| + \|b\|$ .

则称  $(V, \|\cdot\|)$  构成一个赋范空间 (normed space),  $\|\cdot\|$  是  $V$  的范数 (norm).

推论. 显然, 赋范空间也是度量空间, 只需定义

$$d(a, b) = \|a - b\|,$$

注. 赋范空间不一定是完备的, 完备的赋范空间也称为 Banach 空间.

### 例 1.2.2: $\mathbb{R}^n$ 的 $p$ -范数

向量  $x = (x_1, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{F}^n$  的  $p$ -范数为

$$\|x\|_p = \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad (1.4)$$

特别地,  $\|x\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \|x\|_p = \max_i |x_i|$ .

证明. 记  $k = \arg \max_i |x_i|$ ,  $\forall p > 0$

$$|x_k|^p \leq \sum_{i=1}^n |x_i|^p \leq n |x_k|^p,$$

两边开  $p$  次方, 并  $p \rightarrow \infty$ , 即得  $\|x\|_\infty = |x_k|$ . □

二维位置向量  $r = (x, y) \in \mathbb{R}^2$ , 方程  $\|r\|_p = 1$  在直角坐标中的图像为

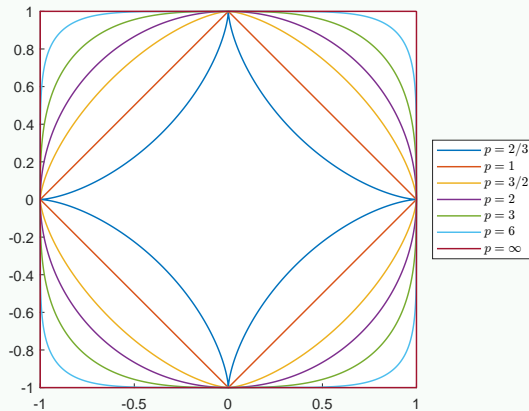


图 1.1: 不同的  $p$ -范数

特别地,  $p = 2/3$  的曲线叫星形线 (astroid).

### 例 1.2.3: $C[a, b]$ 的 $p$ -范数

函数  $f \in C[a, b]$  的  $p$ -范数为

$$\|f\|_p = \left( \int_a^b |f(x)|^p dx \right)^{1/p}, \quad (1.5)$$

当  $1 < p < \infty$  时,  $\|\cdot\|_p$  是不完备的: 连续函数 Cauchy 序列可以按范数收敛于一个不连续的函数. 但  $\|\cdot\|_\infty$  是完备的.



### 1.2.3 范数的等价性

#### 定义 1.2.5: 范数的等价性

给定线性空间  $S$  上的两个范数  $\|\cdot\|_\alpha, \|\cdot\|_\beta$ , 若  $\exists C_1, C_2 > 0$  满足:

$$C_1 \|x\|_\alpha \leq \|x\|_\beta \leq C_2 \|x\|_\alpha,$$

则称  $\|\cdot\|_\alpha, \|\cdot\|_\beta$  等价 (equivalent).

**推论.** 向量的  $p$ -范数都是等价的, 因为由 Hölder 不等式,  $p < q$  时

$$\|x\|_q \leq \|x\|_p \leq n^{1/p-1/q} \|x\|_p. \quad (1.6)$$

#### 定理 1.2.2

有限维线性空间中, 任意两个范数都是等价的.

## 1.3 内积

#### 定义 1.3.1: 内积

给定线性空间  $S$ , 内积 (inner product) 是一个映射  $\langle \cdot, \cdot \rangle : S \times S \rightarrow \mathbb{F}$ , 满足:

- 正定性:  $\langle x, x \rangle \geq 0$ , 且  $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0$ ;
- 交换共轭:  $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$ ;
- 对第一个变量线性:  $\langle ax + by, z \rangle = a \langle x, z \rangle + b \langle y, z \rangle$ .

若  $\langle x, y \rangle = 0$ , 则称  $x, y$  是正交的 (orthogonal).

**注.** 对第二个变量不一定线性, 会出现复共轭:

$$\langle x, ay + bz \rangle = \bar{a} \langle x, y \rangle + \bar{b} \langle x, z \rangle.$$

除非内积的值域  $\mathbb{F} \subset \mathbb{R}$ , 此时内积满足对称性:  $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$ .

**推论.** 根据内积可以自然定义出一个范数, 称为内积诱导的范数:

$$\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}, \quad (1.7)$$

因此内积空间也是赋范空间, 完备的内积空间称为 Hilbert 空间.

#### 例 1.3.1: 内积实例

- $\mathbb{C}^n$  中的标准内积为

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i,$$

标准内积诱导出来的范数就是 2-范数.

- $\mathcal{C}[a, b]$  的一个内积为

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) \overline{g(x)} dx.$$

### 定义 1.3.2: Gram 矩阵

给定一组向量  $x_1, \dots, x_n$ , Gram 矩阵的第  $i, j$  个元素由内积  $\langle x_i, x_j \rangle$  给出:

$$G := \begin{bmatrix} \langle x_1, x_1 \rangle & \cdots & \langle x_1, x_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle x_n, x_1 \rangle & \cdots & \langle x_n, x_n \rangle \end{bmatrix}. \quad (1.8)$$

由于内积交换共轭  $\langle x_i, x_j \rangle = \overline{\langle x_j, x_i \rangle}$ , Gram 矩阵是 Hermite 的:  $G^\dagger = G$ .

### 定理 1.3.1: 内积空间线性无关的判定

给定内积空间  $S$ ,  $x_1, \dots, x_n \in S$  是线性无关的  $\iff$  Gram 矩阵可逆.

证明. 设  $a = (a_1, \dots, a_n)$  满足  $aG = 0$ , 则  $\forall k = 1, \dots, n$

$$(aG)_k = a_1 \langle x_1, x_k \rangle + \cdots + a_n \langle x_n, x_k \rangle = \langle a_1 x_1 + \cdots, a_n x_n, x_k \rangle = 0,$$

特别地,

$$\langle a_1 x_1 + \cdots + a_n x_n, a_1 x_1 + \cdots + a_n x_n \rangle = 0, \iff a_1 x_1 + \cdots, a_n x_n = 0,$$

则  $G$  可逆  $\iff N(G^\top) = \{0\} \iff a$  只有零解. □

### 例 1.3.2

给定内积空间  $S$  的一组基  $\{x_1, \dots, x_n\}$ , 则  $\forall x \in S$  均可以写成

$$x = a_1 x_1 + \cdots + a_n x_n,$$

下面计算  $a_1, \dots, a_n$ . 两边分别与  $x_i$  做内积:

$$\langle x, x_i \rangle = a_1 \langle x_1, x_i \rangle + \cdots + a_n \langle x_n, x_i \rangle,$$

即

$$[\langle x, x_1 \rangle \cdots \langle x, x_n \rangle] = [a_1 \cdots a_n] G,$$

若基是正交的, 即  $\forall i \neq j, \langle x_i, x_j \rangle = 0$ , 则

$$a_i = \frac{\langle x, x_i \rangle}{\langle x_i, x_i \rangle}.$$

**定理 1.3.2: Schmidt 正交化**

设  $x_1, \dots, x_n$  是一组线性无关的基, 为得到一组正交基, 定义

$$y_i = x_i - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\langle x_i, y_j \rangle}{\langle y_j, y_j \rangle} y_j. \quad (1.9)$$

则  $y_1, \dots, y_n$  是正交的.

**定义 1.3.3: 带权内积**

设  $\rho \in C(a, b)$  是一个几乎处处为正<sup>1</sup>的函数, 且

$$\int_a^b \rho(x) dx < +\infty,$$

定义内积

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)\rho(x) dx. \quad (1.10)$$

<sup>1</sup>即  $\{x | \rho(x) \leq 0\}$  的 Lebesgue 测度为 0.

**定义 1.3.4: 正交多项式**

已知  $\{1, x, \dots, x^n\}$  是线性无关的. 考虑  $C[a, b]$  上的带权内积, Schmidt 正交化得到一组多项式函数

$$\psi_0(x), \psi_1(x), \dots, \psi_n(x),$$

显然,  $\deg(\psi_i) = i$ .

**例 1.3.3: Legendre 多项式**

权函数  $\rho = 1$ , 区间  $[-1, 1]$ , 得到 Legendre 多项式

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n. \quad (1.11)$$

- 内积

$$\langle P_n, P_m \rangle = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}. \quad (1.12)$$

- 递归关系

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x). \quad (1.13)$$

- 奇偶性

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x). \quad (1.14)$$

## 例 1.3.4: Chebyshev 多项式

权函数  $\rho(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ , 区间  $[-1, 1]$ , 得到 Chebyshev 多项式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x). \quad (1.15)$$

- 内积

$$\langle T_n, T_n \rangle = \begin{cases} \pi, & n = 0 \\ \pi/2, & n \geq 1 \end{cases} \quad (1.16)$$

- 递推关系

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x). \quad (1.17)$$

- 奇偶性

$$T_n(-x) = (-1)^n T_n(x); \quad (1.18)$$

- $T_n$  的  $n$  个实单根为  $\cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right)$ ,  $(n+1)$  个极值点为  $\cos\left(\frac{k}{n}\pi\right)$
- 当  $|x| \geq 1$  时,

$$T_n(x) = \frac{1}{2} \left[ \left( x + \sqrt{x^2 - 1} \right)^k + \left( x - \sqrt{x^2 - 1} \right)^k \right]. \quad (1.19)$$

## 1.4 矩阵空间

## 1.4.1 矩阵范数

## 定义 1.4.1: 矩阵范数

矩阵空间上的范数  $\|\cdot\| : \mathbb{F}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$  若满足

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|, \quad (1.20)$$

则  $\|\cdot\|$  称为矩阵范数 (matrix norm).

## 例 1.4.1: Frobenius 范数

定义 Frobenius 范数

$$\|A\|_F := \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |A_{ij}|^2}. \quad (1.21)$$

是一个矩阵范数.

证明. 由 Cauchy-Schwarz 不等式

$$\begin{aligned}\|AB\|_F &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left| \sum_{k=1}^n A_{ik} B_{kj} \right|^2} \leq \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left( \sum_{k=1}^n |A_{ik}|^2 \sum_{k=1}^n |B_{kj}|^2 \right)} \\ &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n |A_{ik}|^2 \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n |B_{kj}|^2} = \|A\|_F \|B\|_F. \quad \square\end{aligned}$$

注意到

$$\operatorname{tr}(A^\dagger A) = \sum_{i=1}^n (A^\dagger A)_{ii} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij}^\dagger A_{ji} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |A_{ji}|^2.$$

故

$$\|A\|_F = \sqrt{\operatorname{tr}(A^\dagger A)} = \sqrt{\operatorname{tr}(AA^\dagger)}. \quad (1.22)$$

#### 定义 1.4.2: 矩阵范数与向量范数的相容

给定矩阵范数  $\|\cdot\|_M$  和向量范数  $\|\cdot\|_V$ , 若  $\forall A \in \mathbb{F}^{n \times n}, x \in \mathbb{F}^n$

$$\|Ax\|_V \leq \|A\|_M \|x\|_V, \quad (1.23)$$

则称他们是相容的. 在不引起混淆的情况下, 可以略去下标.

#### 定理 1.4.1

Frobenius 范数与向量 2 - 范数相容.

证明.

$$\|Ax\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left| \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j \right|^2} \leq \sqrt{\sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n |A_{ij}|^2 \sum_{j=1}^n |x_j|^2 \right)} = \|A\|_F \|x\|_2. \quad \square$$

### 1.4.2 算子范数

#### 定义 1.4.3: 算子范数

定义矩阵的算子范数 (operate norm)

$$N : \mathbb{F}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}, \quad A \mapsto \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}. \quad (1.24)$$

称算子范数是该向量范数诱导出来的矩阵范数.

注. 注意  $N(I) = 1$ . 故 Frobenius 范数不是算子范数.

## 定理 1.4.2

$N(\cdot)$  是一个矩阵范数, 并与向量范数相容.

证明. 易得  $\forall x \neq 0, \|Ax\| \leq N(A) \|x\|$ .

$$N(AB) = \sup_{x \neq 0} \frac{\|ABx\|}{\|x\|} \leq \sup_{x \neq 0} \frac{N(A) \|Bx\|}{\|x\|} = N(A)N(B). \quad \square$$

## 定义 1.4.4: 谱半径

矩阵  $A$  全体特征值的集合称为  $A$  的谱 (spectrum), 记作  $\sigma(A)$ , 特征值模的最大值称为谱半径, 记作  $\rho(A)$ .

注. 对于一般的矩阵  $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$ , 有  $\sigma(A^\dagger A) \cup \{0\} = \sigma(AA^\dagger) \cup \{0\}$ , 即非 0 特征值相同, 其元素称为  $A$  的奇异值 (singular value).

## 例 1.4.2

设  $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ , 则  $p$ -向量范数诱导出来的矩阵范数为:

$$\|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}|, \quad (1.25a)$$

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |A_{ij}|, \quad (1.25b)$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^\dagger A)}, \quad (1.25c)$$

证明. 先证明 (1.25b), 将  $A$  写作列向量的形式  $(A_1, \dots, A_n)$ , 令  $k = \arg \max_j \|A_j\|_1$ ,

则  $\forall x \in \mathbb{F}^n$  且  $\|x\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j| = 1$ , 有

$$\|Ax\|_1 = \left\| \sum_{j=1}^n A_j x_j \right\|_1 \leq \sum_{j=1}^n |x_j| \|A_j\|_1 \leq \|A_k\|_1 \sum_{j=1}^n |x_j| = \|A_k\|_1 \|x\|_1 = \|A_k\|_1,$$

特别地, 取  $x = e_k$  可使等号成立, 故

$$\|A\|_1 = \sup_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1 = \|A_k\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |A_{ij}|;$$

然后证明 (1.25a), 令  $k = \arg \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}|$ ,  $\forall x \in \mathbb{F}^n$  且  $\|x\|_\infty = \max_j |x_j| = 1$ , 有

$$\|Ax\|_\infty = \max_i \left| \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j \right| \leq \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}| |x_j| \leq \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}| \max_j |x_j| = \sum_{j=1}^n |A_{kj}|.$$

特别地, 取  $x_j = \text{sgn}(A_{kj})$  可使等号成立, 故

$$\|A\|_\infty = \sup_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |A_{ij}|;$$

最后证明 (1.25c), 由 2 - 范数的性质:

$$\|A\|_2^2 = \sup_{\|x\|_2=1} \langle Ax, Ax \rangle = \sup_{\|x\|_2=1} \langle A^\dagger Ax, x \rangle = \rho(A^\dagger A). \quad \square$$

#### 定理 1.4.3: 谱半径小于矩阵范数

谱半径  $\rho(A)$  和矩阵范数的关系:

$$\rho(A) \leq \|A\|. \quad (1.26)$$

证明. 考虑  $A$  的一个特征值  $\lambda$  和特征向量  $x$ , 则

$$|\lambda| \|xx'\| = \|Axx'\| \leq \|A\| \|xx'\|.$$

于是  $\|A\| \geq |\lambda|$ .  $\square$

#### 定理 1.4.4

给定  $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ ,  $\epsilon > 0$ , 存在算子范数  $\|\cdot\|$  满足:

$$\|A\| \leq \rho(A) + \epsilon. \quad (1.27)$$

引理. 若  $\|\cdot\|_\alpha$  是  $\mathbb{F}^n$  中的向量范数,  $P \in \mathbb{F}^{n \times n}$  非奇异, 则

$$\|\cdot\|_{P,\alpha} : x \mapsto \|Px\|_\alpha,$$

构成另一个向量范数, 诱导的算子范数为

$$\|A\|_{P,\alpha} = \|PAP^{-1}\|_\alpha.$$

证明. 令  $P$  将  $A$  相似变换为 Jordan 型, 即

$$PAP^{-1} = J = \text{diag}(J_1, \dots, J_r), \quad J_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}$$

令  $D_\epsilon = \text{diag}(1, \epsilon, \dots, \epsilon^{n-1})$ , 则

$$\hat{J} = D_\epsilon^{-1} J D_\epsilon = \text{diag}(\hat{J}_1, \dots, \hat{J}_r), \quad \hat{J}_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & \epsilon & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \epsilon \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}$$

则

$$\|A\|_{D_\epsilon^{-1}P,\infty} = \|D_\epsilon^{-1}PAP^{-1}D_\epsilon\|_\infty = \|\hat{J}\|_\infty \leq \rho(A) + \epsilon. \quad \square$$

注. 对任意满足  $|\lambda| = \rho(A)$  的特征值  $\lambda$ , 对应 Jordan 块是对角的, 则存在一个算子范数满足

$$\|A\| = \rho(A).$$

## 1.4.3 扰动定理

一个矩阵不可逆的概率是很低的,<sup>1</sup>那如何度量矩阵的奇异性?

## 定理 1.4.5: 扰动定理

给定扰动  $B$ , 若  $\|B\| < 1$ , 则  $I + B$  可逆且

$$\|(I + B)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|}. \quad (1.28)$$

证明. 若  $I + B$  不可逆, 则  $\rho(B) \geq 1 > \|B\|$  矛盾. 记  $D := (I + B)^{-1}$ , 则

$$(I + B)D = I, \iff D = I - BD, \implies \|D\| \leq 1 + \|B\| \|D\|. \quad \square$$

## 定理 1.4.6: 扰动定理 · 二

给定  $A, C$ , 若  $A$  非奇异且

$$\|C - A\| \leq \|A^{-1}\|^{-1},$$

则  $C$  也非奇异, 且

$$\|C^{-1}\| \leq \frac{1}{\|A^{-1}\|^{-1} - \|C - A\|}. \quad (1.29)$$

证明. 令  $B = I - A^{-1}C$  即可.  $\square$

---

<sup>1</sup>因为多了一个  $\det(A) = 0$  的限制条件.



## 第二章 函数插值和重构

**基本问题** 已知关于某函数  $f$  的一组信息，如何重构  $f$ ? 事实上，由于信息缺失，无法准确重构。

### 定义 2.0.1: 重构

给定函数空间  $X$  上的一组线性无关泛函  $\phi_1, \dots, \phi_n$ ,  $f \in X$  且  $\phi_i(f)$  已知，希望确定  $f^* \in Y \subset X$  满足：

$$\phi_i(f^*) = \phi_i(f), \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.1)$$

$Y$  称为插值空间或重构空间， $\{\phi_i\}$  为信息泛函。

### 例 2.0.1: 采样空间的选择

- 多项式函数空间

$$\mathcal{P}_n = \{a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n\},$$

- 样条函数 (spline) 空间：分段多项式函数；
- 三角多项式函数空间

$$\mathcal{Y}_n = \{a_0 + a_1 \cos x + b_1 \sin x + \dots + a_n \cos nx + b_n \sin nx\}.$$

## 2.1 一维多项式插值

### 2.1.1 Lagrange 插值

#### 定义 2.1.1: Lagrange 插值

插值空间  $Y$  由  $n+1$  个参数  $a_0, \dots, a_n$  标定，即

$$y = y(x; a_0, \dots, a_n).$$

给定一组插值节点 (采样点)  $x_i$  和采样值  $f_i = f(x_i)$ ，希望确定参数满足

$$y(x_i) = f(x_i), \quad \forall i \in I. \quad (2.2)$$

**定理 2.1.1: 多项式插值定理**

给定  $n+1$  个不同插值点  $x_0, \dots, x_n$ , 存在唯一的多项式函数  $p_n \in \mathcal{P}_n$  满足插值条件.

证明. 存在性: 采取直接构造的方法. 定义插值基函数  $\ell_i \in \mathcal{P}_n$ :

$$\ell_i(x) := \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}. \quad (2.3)$$

易验证,  $\ell_i$  满足:

$$\ell_i(x_j) = \delta_{ij}. \quad (2.4)$$

故插值多项式为

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x). \quad (2.5)$$

唯一性: 若还存在  $q_n \in \mathcal{P}_n$  满足插值条件, 则  $p_n - q_n \in \mathcal{P}_n$  且有  $x_0, \dots, x_n$  共  $n+1$  个零点, 故  $p_n - q_n \equiv 0$ .  $\square$

**定义 2.1.2: 余项**

定义插值函数  $p_n(x)$  与被插值函数  $f(x)$  之间的差为余项 (remainder)

$$R_n(x) := f(x) - p_n(x). \quad (2.6)$$

**定理 2.1.2: 中值定理与余项**

若  $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$ , 则  $\forall x \in [a, b], \exists \xi(x) \in (a, b)$  使得

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i). \quad (2.7)$$

证明. 当  $x = x_i$  时,  $R_n(x_i) = 0$  显然成立; 给定  $x \in [a, b]$  且  $x \neq x_i$ , 定义

$$g(t) := R_n(t) - \frac{\prod_{i=0}^n (t - x_i)}{\prod_{i=0}^n (x - x_i)} R_n(x),$$

则  $g \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$  且在  $[a, b]$  上有  $x_0, \dots, x_n, x$  共  $n+2$  个零点, 在其划分的  $n+1$  个区间中应用 Rolle 定理: 对应存在  $\xi_1^{(1)}, \dots, \xi_{n+1}^{(1)}$  使得

$$g'(\xi_i^{(1)}) = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n+1,$$

继续对  $\xi_0^{(1)}, \dots, \xi_{n+1}^{(1)}$  划分的  $n$  个区间上应用 Rolle 定理, 直到  $g^{(n+1)}(\xi_0^{(n+1)}) = 0$ :

$$g^{(n+1)}(\xi_0^{(n+1)}) = f^{(n+1)}(\xi_0^{(n+1)}) - \frac{(n+1)!}{\prod_{i=0}^n (x - x_i)} R_n(x) = 0.$$

取  $\xi = \xi_0^{(n+1)}$  即证.  $\square$

**推论.** 若  $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$ ,  $h = \max(x_{i+1} - x_i)$  则

$$\|R_n\|_\infty \leq \frac{h^{n+1}}{4(n+1)} \|f^{(n+1)}\|_\infty. \quad (2.8)$$

## 2.1.2 Lagrange 插值的收敛性

当什么条件下,  $n \rightarrow \infty$ , 误差  $\|R_n\|_\infty \rightarrow 0$ ?

**定理 2.1.3: Lagrange 插值收敛性的一个充分条件**

若被插值函数的任意阶导数一致有界, 则误差收敛到 0.

## 例 2.1.1

给定  $f(x) = \sin x$ ,  $x \in [0, \pi]$ , 由于  $\forall x \in [0, \pi]$

$$|f^{(n+1)}(x)| \leq 1, \quad \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right| \leq \pi^{n+1},$$

故

$$|R_n(x)| \leq \frac{\pi^{n+1}}{(n+1)!} \rightarrow 0,$$

说明 Lagrange 插值多项式  $p_n$  在  $[0, \pi]$  上一致收敛到  $f$ .

## 例 2.1.2: Runge 现象

Runge 函数  $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$  在  $[-1, 1]$  上等距插值.

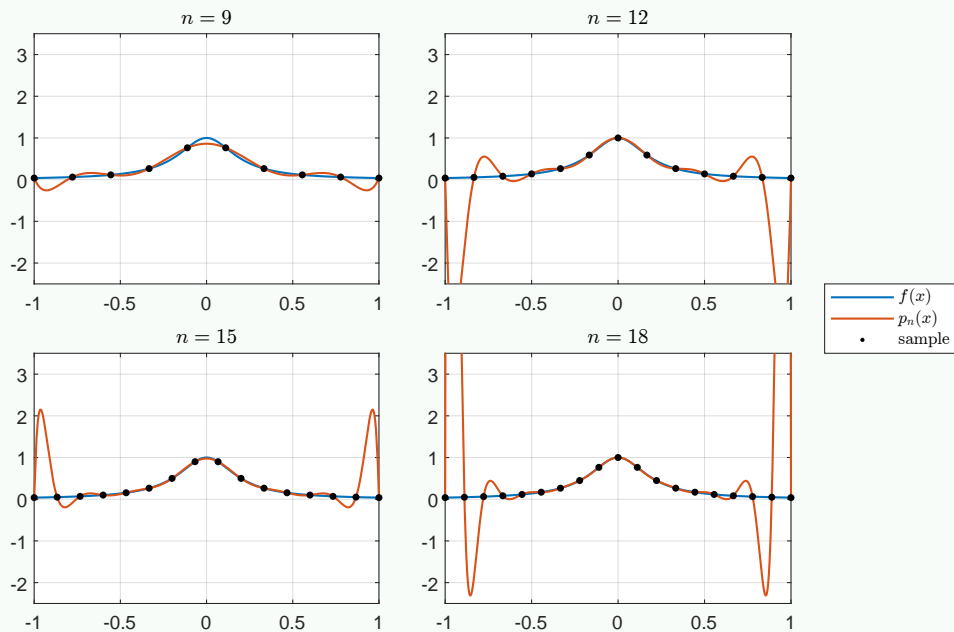


图 2.1: 等距插值 Runge 现象

显然  $f(x)$  在  $\mathbb{R}$  上是解析的, 但在  $\mathbb{C}$  上存在奇点  $\pm i/5$ .

改用  $n+1$  阶 Chebyshev 多项式零点

$$\cos\left(\frac{\pi}{2(n+1)}\right), \cos\left(\frac{3\pi}{2(n+1)}\right), \dots, \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2(n+1)}\right),$$

作为插值节点, 可以消去 Runge 现象.

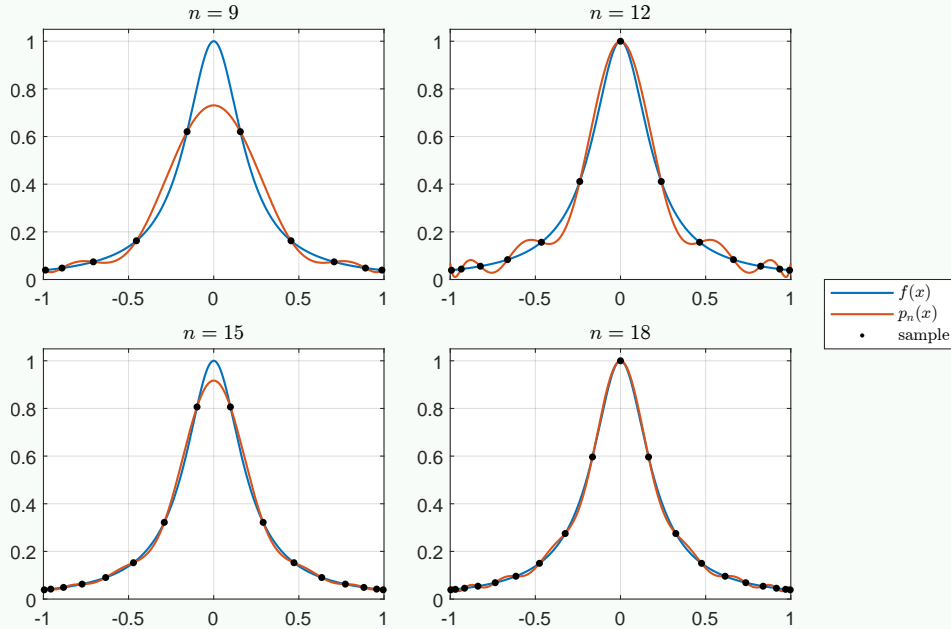


图 2.2: Chebyshev 多项式零点插值

### 2.1.3 Newton 插值公式

#### 定义 2.1.3: 均差

定义  $f$  在节点集  $i_0, i_1, \dots, i_k$  上的  $k$  阶均差 (divided differences) 递归地定义为:

$$f[x_{i_0}, \dots, x_{i_k}] := \frac{f[x_{i_1}, \dots, x_{i_k}] - f[x_{i_0}, \dots, x_{i_{k-1}}]}{x_{i_k} - x_{i_0}}. \quad (2.9)$$

特别地,  $f$  在  $x_i$  上的零阶均差  $f[x_i] := f(x_i)$ .

**推论.**  $k$  阶均差  $f[x_0, \dots, x_k]$  是  $f(x_0), \dots, f(x_k)$  的线性组合:

$$f[x_0, \dots, x_k] = \sum_{i=0}^k \frac{f(x_i)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}. \quad (2.10)$$

因此, 均差对于节点是对称的, 即任意改变节点的顺序, 均差的值不变.

#### 定理 2.1.4: Newton 插值公式

利用均差迭代得到  $n$  次 Newton 插值多项式:

$$p_n(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}). \quad (2.11)$$

其余项为

$$R_n(x) = f[x, x_0, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_n). \quad (2.12)$$

对均差形式的余项应用定理 2.1.2 得到:

**定理 2.1.5: 中值定理与均差**

如果  $f \in C[a, b]$ ,  $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ , 则  $\exists \xi \in I(x_0, \dots, x_n)$ ,

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}. \quad (2.13)$$

**推论.** 特别地,  $n$  阶均差:

$$f[\underbrace{x, \dots, x}_{n+1}] = \frac{f^{(n)}(x)}{n!} \quad (2.14)$$

**推论.** 均差的导数:

$$\frac{d}{dx} f[x_0, \dots, x_n, x] = f[x_0, \dots, x_n, x, x]. \quad (2.15)$$

**定理 2.1.6: Neville 算法**

给定插值节点  $x_0, \dots, x_n$ , 定义  $p_{i,j} \in \mathcal{P}^{j-i}$  为满足节点  $x_i, \dots, x_j$  插值条件的多项式插值函数, 则递归地, 有  $p_{i,i}(x) \equiv f(x_i)$ ,

$$p_{i,j}(x) = \frac{(x - x_i)p_{i+1,j}(x) + (x_j - x)p_{i,j-1}(x)}{x_j - x_i}, \quad (2.16)$$

### 2.1.4 Hermite 插值

现推广 Lagrange 插值的概念: 除了要求插值函数在节点上相等外, 还要求在节点上的导数值相等.

**定义 2.1.4: Hermite 插值问题**

给定插值节点  $x_0 < x_1 < \dots < x_m$  及插值条件

$$(x_i, f^{(k)}(x_i)), \quad i = 0, 1, \dots, m, \quad k = 0, 1, \dots, n_i - 1$$

确定次数为  $n = \sum_{i=0}^m n_i - 1$  的多项式函数  $p \in \mathcal{P}_n$  满足插值条件.

**定理 2.1.7**

Hermite 插值问题的解存在且唯一.

证明. 定义拓展均差:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] := \int_0^{t_0} \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_{n-1}} f^{(n)}(t_n(x_n - x_{n-1}) + \cdots + t_1(x_1 - x_0) + t_0 x_0) dt_n \cdots dt_2 dt_1. \quad (2.17)$$

有递推式:

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{f[x_0, \dots, x_{n-2}, x_n] - f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_{n-1}}. \quad (2.18)$$

即证.  $\square$

### 例 2.1.3: 均差表

给定  $f(a), f'(a), f(b), f'(b)$ , 则插值函数

$$p_3(x) = f(a) + f[a, a](x - a) + f[a, a, b](x - a)^2 + f[a, a, b, b](x - a)^2(x - b).$$

计算到  $f[a, a, b, b]$ , 给出均差表:

0	1	2	3
$f(a)$	$f[a, a] = f'(a)$	$f[a, a, b] = \frac{f[a, b] - f[a, a]}{b - a}$	$f[a, a, b, b] = \cdots$
$f(a)$	$f[a, b] = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$	$f[a, b, b] = \frac{f[b, b] - f[a, b]}{b - a}$	
$f(b)$	$f[b, b] = f'(b)$		

## 2.2 分段插值

### 2.2.1 分段线性插值

#### 定义 2.2.1: 分段线性插值

给定节点  $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$  及  $f(x_i)$ , 求插值函数  $\varphi$  满足:

- $\varphi \in \mathcal{C}[a, b]$  是连续函数;
- $[x_i, x_{i+1}]$  上  $\varphi \in \mathcal{P}_1$  是线性函数;
- $\varphi(x_i) = f(x_i)$ .

满足前两个性质的函数组成插值空间  $\Phi$ , 且  $\dim(\Phi) = n + 1$ .

#### 定理 2.2.1

分段线性插值函数是存在且唯一的.

证明. 定义插值基函数

$$I_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}, & x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.19)$$

则

$$\varphi(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) I_i(x). \quad (2.20)$$

□

### 定理 2.2.2: 误差收敛性

定义  $h := \max_i (x_i - x_{i-1})$ ,

- 如果  $f \in \mathcal{C}[a, b]$ , 则  $\lim_{h \rightarrow 0} \|f - \varphi\|_\infty = 0$ ;
- 如果  $f \in \mathcal{C}^1[a, b]$ , 则  $\|f - \varphi\|_\infty \leq 2h \|f'\|_\infty$ ;
- 如果  $f \in \mathcal{C}^2[a, b]$ , 则  $\|f - \varphi\|_\infty \leq h^2/8 \cdot \|f''\|_\infty$ .

### 2.2.2 分段三次 Hermite 插值

#### 定义 2.2.2: 分段三次 Hermite 插值

给定节点  $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$  及  $f(x_i), f'(x_i)$ , 求插值函数  $\varphi$  满足:

- $\varphi \in \mathcal{C}^1[a, b]$  连续可导 (即  $\varphi'$  也连续);
- $[x_i, x_{i+1}]$  上  $\varphi \in \mathcal{P}_3$  是三次多项式函数;
- $\varphi(x_i) = f(x_i), \varphi'(x_i) = f'(x_i)$ .

满足前两个性质的函数组成插值空间  $\Phi$ , 且  $\dim(\Phi) = 2n + 2$ .

定义插值基函数, 在  $[x_i, x_{i+1}]$  上

$$\alpha_i(x) = \left(1 + 2 \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right) \left(\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right)^2, \quad (2.21a)$$

$$\alpha_{i+1}(x) = \left(1 + 2 \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right) \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)^2, \quad (2.21b)$$

$$\beta_i(x) = (x - x_i) \left(\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right)^2, \quad (2.21c)$$

$$\beta_{i+1}(x) = (x - x_{i+1}) \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}\right)^2, \quad (2.21d)$$

满足

$$\alpha_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad \alpha'_i(x_j) = 0, \quad (2.22a)$$

$$\beta_i(x_j) = 0, \quad \beta'_i(x_j) = \delta_{ij}. \quad (2.22b)$$

则

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \alpha_i(x) + f'(x) \beta_i(x). \quad (2.23)$$

## 2.3 Fourier 插值

### 定义 2.3.1: Fourier 级数

周期函数展开成 Fourier 级数

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)]. \quad (2.24)$$

其中

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos(nx) dx, \quad (2.25a)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin(nx) dx. \quad (2.25b)$$

如果  $f \in \mathcal{C}^M$ , 则  $a_n = \mathcal{O}(n^{-M})$ ,  $b_n = \mathcal{O}(n^{-M})$ , 且

$$\left\| f(x) - \left[ \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^N [a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)] \right] \right\|_{\infty} = \mathcal{O}(N^{-M}).$$

### 定义 2.3.2: 三角多项式插值

给定周期为  $2\pi$  的函数  $f$  在节点  $x_i = 2\pi i/N$  的值, 希望重构函数  $\psi$  满足  $\psi(x_i) = f(x_i)$ .

寻找相多项式

$$p(x) = \beta_0 + \beta_1 e^{ix} + \cdots + \beta_{N-1} e^{i(N-1)x}. \quad (2.26)$$

### 定理 2.3.1: Fourier 插值

存在唯一的相多项式满足 Lagrange 插值条件且

$$\beta_j = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) \omega^{-kj}, \quad \omega = e^{2\pi i/N}. \quad (2.27)$$

对应三角多项式为

$$A_j = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k) \cos\left(\frac{2\pi kj}{N}\right), \quad (2.28a)$$

$$B_j = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k) \sin\left(\frac{2\pi kj}{N}\right), \quad (2.28b)$$



## 第三章 函数逼近

### 定义 3.0.1: 函数逼近

给定函数  $f \in C[a, b]$  和子集  $\Phi \subset C[a, b]$  (如多项式函数), 寻找最佳逼近:

$$\varphi^* = \arg \min_{\varphi \in \Phi} \|f - \varphi\|. \quad (3.1)$$

注.

- $\Phi$  一般是简单函数集合, 如多项式函数. 但  $\Phi$  未必是线性空间.
- $f \notin \Phi$ , 且关于  $f$  的信息可能有误差;
- 近似程度的度量: 平方 (squares) 逼近  $\|\cdot\|_2$  和一致 (uniform) 逼近  $\|\cdot\|_\infty$ .

### 3.1 最佳平方逼近

#### 3.1.1 法方程

最佳平方逼近中,  $\|\cdot\|_2$  是由  $C[a, b]$  的某个内积  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  诱导出的范数:

$$\|f\|_2 := \sqrt{\langle f, f \rangle}.$$

给定  $\Phi$  的一组基  $\varphi_0, \dots, \varphi_n$ , 则

$$\varphi = \sum_{i=0}^n a_i \varphi_i,$$

实函数情况, 简单计算得到

$$\|f - \varphi\|_2^2 = \sum_{i,j=0}^n \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_i a_j - 2 \sum_{i=0}^n \langle \varphi_i, f \rangle a_i + \langle f, f \rangle.$$

是一个关于  $a_0, \dots, a_n$  的二次函数, 故 Hess 矩阵

$$\nabla^2 \|f - \varphi\|_2^2 = 2 \begin{bmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_0, \varphi_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_n, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_n \rangle \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

为对称正定矩阵, 因而  $\|f - \varphi\|_2^2$  有最小值. 由

$$\frac{\partial}{\partial a_i} \|f - \varphi\|_2^2 = 2 \left[ \sum_{j=0}^n \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_j - \langle \varphi_i, f \rangle \right] = 0,$$

得到

## 定理 3.1.1: 法方程

$$\begin{bmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_0, \varphi_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_n, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \varphi_0, f \rangle \\ \vdots \\ \langle \varphi_n, f \rangle \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

注. 最佳平方逼近  $\varphi^*$  满足  $f - \varphi^* \perp \Phi$ , 有

$$\|f\|_2^2 = \|\varphi^*\|_2^2 + \|f - \varphi^*\|_2^2. \quad (3.4)$$

## 例 3.1.1

给定  $\Phi = \text{span}(1, x^2)$ , 求  $f = x$  在  $[0, 1]$  上的最佳平方逼近.

$$\begin{bmatrix} \langle 1, 1 \rangle & \langle 1, x^2 \rangle \\ \langle x^2, 1 \rangle & \langle x^2, x^2 \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle 1, x \rangle \\ \langle x^2, x \rangle \end{bmatrix}$$

解得  $\varphi^*(x) = a + bx^2$  的系数

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1/3 \\ 1/3 & 1/5 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/16 \\ 15/16 \end{bmatrix}.$$

## 3.1.2 正交多项式

## 定义 3.1.1: Hilbert 矩阵

考虑  $f \in C[0, 1]$  在  $\mathcal{P}_n$  上的最佳平方逼近,  $1, x, \dots, x^n$  作为基, 法方程的系数矩阵为 Hilbert 矩阵

$$H_n := \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1) \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

这个矩阵是严重病态的.

注. 解决方法: 将  $\mathcal{P}_n$  的基改进为正交基  $\varphi_0, \dots, \varphi_n$ , 即

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \|\varphi_i\|_2^2 \delta_{ij},$$

则系数矩阵是对角的,

$$\varphi^* = \sum_{i=0}^n \frac{\langle f, \varphi_i \rangle}{\|\varphi_i\|_2^2} \varphi_i. \quad (3.6)$$

**定义 3.1.2: 广义 Fourier 级数**

给定  $C[a, b]$  上的一组正交归一函数  $\varphi_0, \varphi_1, \dots$ ,  $f$  在  $\Phi_n := \text{span}(\varphi_0, \dots, \varphi_n)$  中的最佳平方逼近为

$$f_n = \sum_{i=0}^n a_i \varphi_i, \quad a_i := \langle f, \varphi_i \rangle,$$

由于

$$\sum_{i=0}^n |a_i|^2 = \|f_n\|_2^2 \leq \|f\|_2^2, \implies \sum_{i=0}^{\infty} |a_i|^2 < \infty,$$

故  $f_\infty$  收敛且  $f_\infty \in \overline{\langle C[a, b], \|\cdot\|_2 \rangle}$ , 称为广义 Fourier 级数.

注. 若  $\|\cdot\|_2$  是权系数  $\rho$  的内积  $\langle \cdot, \cdot \rangle_\rho$  诱导的范数, 则

$$\overline{\langle C[a, b], \|\cdot\|_2 \rangle} = \mathcal{L}_\rho^2[a, b] \quad (3.7)$$

**定理 3.1.2**

给定有界闭区间  $[a, b]$ , 若  $f \in C[a, b]$  在  $\mathcal{P}_n$  上的最佳平方逼近为  $f_n$ , 则

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f - f_n\|_2 = 0. \quad (3.8)$$

这说明多项式函数是完备的.

**定理 3.1.3: Legendre 多项式作最佳平方逼近**

若内积为  $[-1, 1]$  上的  $\rho \equiv 1$  内积, 若  $f \in C^2[-1, 1]$ , 则  $\forall \epsilon > 0$ ,  $\exists N > 0$  使得  $\forall n \geq N$

$$\|f - f_n\|_\infty \leq \frac{\epsilon}{\sqrt{n}}. \quad (3.9)$$

**定理 3.1.4: 零平方误差最小**

在所有首项系数为 1 的  $n$  次多项式中, Legendre 多项式  $P_n(x)$  在  $[-1, 1]$  与 0 的平方误差最小.

证明.  $\forall f \in \mathcal{P}_n$  且首项系数为 1, 有

$$f = P_n + a_{n-1}P_{n-1} + \dots + a_0P_0,$$

则

$$\|f\|_2^2 = \|P_n\|_2^2 + |a_{n-1}|^2 \|P_{n-1}\|_2^2 + \dots + |a_0|^2 \|P_0\|_2^2 \geq \|P_n\|_2^2. \quad \square$$

## 3.2 最小二乘法

给定  $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$

**定义 3.2.1: Haar 条件**

$\forall \varphi_i \in \Phi$  且  $\varphi_i \neq 0$  在  $x_0, \dots, x_m$  上不同时为 0, 则称  $\Phi$  满足 Haar 条件.

**例 3.2.1**

若  $m \geq n$ , 则  $\mathcal{P}_n$  在  $x_0, \dots, x_m$  上满足 Haar 条件.

**3.3 最佳一致逼近**

考虑用多项式函数进行最佳一致逼近:

$$\varphi^* = \arg \inf_{\varphi \in \mathcal{P}_n} \|f - \varphi\|_{\infty}. \quad (3.10)$$

**定义 3.3.1**

称  $\|f - p_n\|_{\infty}$  为  $p_n$  关于  $f$  的偏差. 若  $\exists x$  使得

$$f(x) - p_n(x) = \pm \|f - p_n\|_{\infty}. \quad (3.11)$$

则称  $x$  为  $p_n$  关于  $f$  的正 (负) 偏差点.

**定理 3.3.1: 最佳一致逼近的存在性**

$\mathcal{P}_n$  关于  $f \in C[a, b]$  的最小偏差可以达到.

证明. 记  $\varphi(f, p_n) = \|f - p_n\|_{\infty}$ , 则  $\varphi(f, \cdot)$  是关于  $p_n$  系数  $a_0, \dots, a_n$  的连续函数, 且  $\varphi(0; p_n)$  在单位球面  $a_0^2 + \dots + a_n^2 = 1$  上达到正最小值  $\mu$ .

$$\|f - p_n\|_{\infty} \geq \|p_n\|_{\infty} - \|f\|_{\infty} \geq \mu \sqrt{\sum_{i=0}^n a_i^2} - \|f\|_{\infty}.$$

当

$$\sum_{i=0}^n a_i^2 \geq \frac{4}{\mu^2} \|f\|_{\infty}^2$$

时,  $\|f - p_n\|_{\infty} \geq \|f\|_{\infty}$ , 故最佳一致逼近存在.  $\square$

**引理.** 最佳一致逼近多项式  $p_n^*$  关于  $f$  的正负偏差点同时存在.

**定义 3.3.2: Chebyshev 交错点**

若  $x_1, \dots, x_m$  是  $p_n$  关于  $f$  的偏差点且轮流为正负, 则称其为一组 Chebyshev 交错点.

**定理 3.3.2**

$p_n^*$  是  $f$  的最佳一致逼近多项式  $\iff$  存在  $n+2$  个 Chebyshev 交错点.

**推论.** 最佳一致逼近多项式是一个 Lagrange 插值多项式, 其插值点在  $(a, b)$  内.

**定理 3.3.3: 最佳一致逼近的唯一性**

最佳一致逼近多项式是唯一的.

**定理 3.3.4: 零偏差最小**

在所有首项系数为 1 的  $n$  次多项式中, Chebyshev 多项式  $T_n(x)$  在  $[-1, 1]$  与 0 的偏差最小.

**例 3.3.1: 最佳一次一致逼近多项式的求法**

给定  $f \in C^2[a, b]$  且  $f''(x) \neq 0$ , 求  $f$  的最佳一次一致逼近多项式  $g = a_0 + a_1x$ .  
由  $f''$  恒正或恒负可知  $f - g$  在  $(a, b)$  上的极值点是唯一的, 记作  $x^*$ ,

$$f'(x^*) - g'(x^*) = 0,$$

且  $\{a, x^*, b\}$  是一组 Chebyshev 交错点, 故

$$f(a) - g(a) = -[f(x^*) - g(x^*)] = f(b) - g(b)$$

可确定  $a_1, x^*, a_0$ :

$$\begin{cases} a_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}, \\ x^* = f'^{-1}(a_0), \\ a_0 = \frac{1}{2}[f(a) + f(x^*) - a_1(a + x^*)] \end{cases}$$

## 第四章 数值积分

给定函数  $f \in \mathcal{C}[a, b]$  和权函数  $\rho(x)$ ，计算积分

$$I(f) \equiv \int_a^b f(x)\rho(x) dx, \quad (4.1)$$

但很多情况下，我们只知道关于  $f$  的部分信息，不能用 Newton-Leibniz 公式。因此我们希望构造一种不依赖于  $f$  具体表达式的近似积分方法。

### 定义 4.0.1: 数值积分

给定系列积分节点  $x_0, \dots, x_n$ ，数值积分  $\tilde{I}(f)$  一般具有如下形式：

$$\tilde{I}(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k). \quad (4.2)$$

其中  $A_k$  称为求积系数。积分方法  $\tilde{I}$  的误差为

$$E(f) := I(f) - \tilde{I}(f). \quad (4.3)$$

给定一种积分方法  $\tilde{I}$ ，如何评价其优劣？

### 定义 4.0.2: 代数精确度

给定积分法  $\tilde{I}$ ，若  $\forall f \in \mathcal{P}_n$  均有  $E(f) = 0$ ；但  $\exists f \in \mathcal{P}_{n+1}$  使得  $E(f) \neq 0$ ，则  $\tilde{I}$  的代数精确度为  $n$ 。

### 定义 4.0.3: 插值型求积公式

给定系列插值节点  $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ ，由式 (2.5)，函数  $f$  的  $n$  次插值多项式为

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x) \approx f(x),$$

选定

$$I_n(f) \equiv I(p_n) = \sum_{i=0}^n I(\ell_i) f(x_i) \equiv \sum_{i=0}^n A_i^{(n)} f(x_i), \quad (4.4)$$

其中  $A_k^{(n)}$  与  $f$  无关，称为求积系数。

## 4.1 Newton-Cotes 公式

考虑  $\rho \equiv 1$  的情形.

### 4.1.1 闭型 Newton-Cotes 公式

**定理 4.1.1:** (闭型) Newton-Cotes 公式

取等距节点  $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ , 节点间距  $h := (b - a)/n$ , 有

$$I_n(f) = (b - a) \sum_{k=0}^n C_k^{(n)} f(x_k), \quad (4.5)$$

其中  $C_k^{(n)}$  称为求积 Cotes 系数, 由式 (2.3)

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \frac{1}{n} \int_0^n \prod_{j \neq k} (t - j) dt. \quad (4.6)$$

注. Cotes 系数不但与  $f$  无关, 也与积分区间  $[a, b]$  无关. 且  $C_k^{(n)} = C_{n-k}^{(n)}$ .

**例 4.1.1:** 前几个 Cotes 系数

$n$	$C_k^{(n)}$				
1	1	1	/2		
2	1	4	1	/6	
3	1	3	3	1	/8
4	7	32	12	12	7 /90

**例 4.1.2:**  $n = 1$ : 梯形公式

$n = 1$  时, 只有  $a, b$  两个求积节点, 得到梯形公式 (trapezoidal)

$$I_1(f) = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]. \quad (4.7)$$

若  $f \in C^2[a, b]$ , 则  $\exists \xi \in [a, b]$ , 积分误差

$$E_1(f) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi). \quad (4.8)$$

梯形公式的代数精确度为 1.

**例 4.1.3:  $n = 2$ : Simpson 公式**

$n = 2$  时, 有  $a, x_1 = (a + b)/2, b$  三个求积节点, 得到 Simpson 公式:

$$I_2(f) = \frac{b-a}{6} \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]. \quad (4.9)$$

若  $f \in C^4[a, b]$ , 则  $\exists \xi \in [a, b]$ , 积分误差

$$E_2(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi). \quad (4.10)$$

Simpson 公式的代数精确度为 3.

注.  $n = 3$  时称为 Simpson 3/8 公式

$$E_3(f) = -\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi),$$

$n = 4$  时称为 Boole 公式或 Cotes 公式

$$E_4(f) = -\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi).$$

**定理 4.1.2: Newton-Cotes 公式的代数精确度**

当  $n$  为奇数时, 代数精确度为  $n + 1$ ; 当  $n$  为偶数时, 代数精确度为  $n$ .

**4.1.2 开型 Newton-Cotes 公式****定理 4.1.3: 开型 Newton-Cotes 公式**

取等距节点  $a = x_{-1} < x_0 < \dots < x_n < x_{n+1} = b$ , 以  $x_0, \dots, x_n$  为插值节点.

**例 4.1.4:  $n = 0$ : 中点公式**

$n = 0$  的开型 Newton-Cotes 公式称为中点公式:

$$I_0 = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right). \quad (4.11)$$

若  $f \in C^2[a, b]$ , 则  $\exists \xi \in [a, b]$ , 积分误差

$$E_0(f) = \frac{h^3}{3} f''(\xi). \quad (4.12)$$

注. 一般来说, 闭型 Newton-Cotes 公式的结果比相应的开型 Newton-Cotes 公式的结果要好.

**4.1.3 积分法的一致稳定性**

由于积分节点  $f(x_i)$  可能存在误差, 需要考虑随着渐进参数  $n$  的增大, 积分法的稳定性.



## 定义 4.1.1: 一致稳定

对于线性积分方法  $\tilde{I}_n$ , 若  $\forall n \in \mathbb{N}$ ,  $\exists M > 0$  使得

$$\sum_{k=0}^n |A_k^{(n)}| < M, \quad (4.13)$$

则称  $\tilde{I}_n$  是一致稳定的.

推论. 若  $\|f - g\|_\infty \leq \delta$ , 且  $\tilde{I}_n$  一致稳定, 则

$$|\tilde{I}_n(f) - \tilde{I}_n(g)| = |\tilde{I}_n(f - g)| \leq \sum_{k=0}^n |A_k^{(n)}| \|f - g\|_\infty \leq M\delta.$$

## 定理 4.1.4: 一致稳定的判定

若  $\forall n, k$  均有  $A_k^{(n)} > 0$  且  $\tilde{I}_n$  的代数精确度至少为 0, 则  $\tilde{I}_n$  一致稳定.

注.  $n \geq 8$  时, Newton-Catos 积分法存在  $A_k^{(n)} < 0$ , 故不是一致稳定的.

## 4.2 复合求积公式

对于一些函数  $f$  来说, 低阶 Newton-Catos 公式很不准确, 而高阶又存在数值不稳定问题. 为此需要新的求积方法, 一种思路是利用积分运算关于测度的可加性, 将积分区间分成若干小的区间进行分片求积.

## 定义 4.2.1: 复合求积公式

将积分区间  $[a, b]$  划分成若干子区间, 再在每个子区间上采用低阶 Newton-Catos 公式.

## 例 4.2.1: 复合梯形公式

取节点  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ , 子区间为  $[x_k, x_{k+1}]$ , 区间间隔  $h_k = x_{k+1} - x_k$ , 对每个子区间套用梯形积分公式 (4.7), 得到复合梯形公式为:

$$\begin{aligned} T_n(f) &= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h_k}{2} [f(x_k) + f(x_{k+1})] \\ &= \frac{h_0}{2} f(x_0) + \frac{h_0 + h_1}{2} f(x_1) + \dots + \frac{h_{n-2} + h_{n-1}}{2} f(x_{n-1}) + \frac{h_{n-1}}{2} f(x_n). \end{aligned} \quad (4.14)$$

由式 (4.8) 和中值定理知,  $\exists \xi_k \in [x_k, x_{k+1}], \eta \in [a, b]$  使得

$$E_n(f) = -\frac{1}{12} \sum_{k=0}^{n-1} h_k^3 f''(\xi_k) = -\frac{1}{12} \sum_{k=0}^{n-1} h_k^3 f''(\eta), \quad (4.15)$$

当等距均分时,  $h_0 = h_1 = \dots = h_{n-1} = h = (b - a)/n$ , 有

$$E_n(f) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta). \quad (4.16)$$

**例 4.2.2: 复合中点公式**

对每个子区间套用中点积分公式 (4.11), 得到复合中点公式为:

$$H_n(f) = \sum_{k=0}^{n-1} h_k f(x_{k+1/2}), \quad x_{k+1/2} := \frac{x_k + x_{k+1}}{2}. \quad (4.17)$$

**推论.** 考虑每个子区间上增加一个节点  $x_{k+1/2}$ , 得到递推公式:

$$T_{2n}(f) = \frac{T_n(f) + H_n(f)}{2}. \quad (4.18)$$

**例 4.2.3: 复合 Simpson 公式**

对每个子区间套用 Simpson 积分公式 (4.9), 得到复合 Simpson 公式为:

$$S_{2n}(f) = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h_k}{6} [f(x_k) + 4f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})]. \quad (4.19)$$

若最大区间长度  $h := \max_k h_k$ , 则  $\exists \eta \in [a, b]$  使得

$$|E_{2n}(f)| \leq \frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta). \quad (4.20)$$

**注.** 复合梯形公式、复合中点公式、复合 Simpson 公式都是一致稳定的.

**推论.** 递推关系:

$$S_{2n}(f) = \frac{T_n(f) + 2H_n(f)}{3} = \frac{4T_{2n}(f) - T_n(f)}{3}. \quad (4.21)$$

## 4.3 Romberg 求积方法

### 4.3.1 Euler-Maclaurin 求积公式

**定义 4.3.1: Bernoulli 多项式**

Bernoulli 多项式递归定义:  $B_0(x) = 1$ ,

$$B_k(x) = k \int_0^x B_{k-1}(t) dt - k \int_0^1 \int_0^x B_{k-1}(t) dt dx \quad (4.22)$$

Bernoulli 数  $B_k := B_k(0)$ .

**例 4.3.1: 前几个 Bernoulli 多项式**

$$\begin{aligned} B_1(x) &= x - \frac{1}{2}, & B_2(x) &= x^2 - x + \frac{1}{6}, \\ B_3(x) &= x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x, & B_4(x) &= x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30}, \\ B_5(x) &= x^5 - \frac{5}{2}x^4 + \frac{5}{3}x^3 - \frac{1}{6}x, & B_6(x) &= x^6 - 3x^5 + \frac{5}{2}x^4 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{42}. \end{aligned}$$

**定理 4.3.1: Euler-Maclaurin 求积公式**

若  $f \in C^{2m+2}[a, b]$ , 则有

$$I(f) = T_n(f) + \sum_{\ell=1}^m \frac{B_{2\ell}}{(2\ell)!} [f^{(2\ell-1)}(a) - f^{(2\ell-1)}(b)] h^{2\ell} + r_{m+1}, \quad (4.23)$$

其中  $T_n$  是复合梯形公式,

$$r_{m+1} = -\frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} (b-a) f^{(2m+2)}(\eta) h^{2m+2}, \quad \exists \eta \in (a, b). \quad (4.24)$$

**4.3.2 Richardson 外推方法**

由 Euler-Maclaurin 求积公式, 考虑复合梯形公式关于  $h < 1$  的渐进级数

$$T_n(f) = I(f) + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \cdots + \tau_m h^{2m} + \mathcal{O}(h^{2m+2}).$$

当区间无限小时,  $h \rightarrow 0$ ,  $T_n(f) \rightarrow I(f)$  是准确积分. 为了得到  $I(f)$  的一个近似, 考虑

$$h_i = \frac{b-a}{n_i}, \quad i = 0, 1, \dots$$

且  $n_0 < n_1 < \cdots < n_m < \cdots$ , 记关于  $h^2$  的插值多项式  $p_{i,j} \in \mathcal{P}^{j-i}$  满足插值条件:

$$p_{i,j}(h_i) = T_{n_i}(f), \quad p_{i,j}(h_{i+1}) = T_{n_{i+1}}(f), \quad \dots, \quad p_{i,j}(h_j) = T_{n_j}(f),$$

由 Neville 算法 (2.16), 有递推关系:  $p_{i,i}(h) = T_{n_i}(f)$ ,

$$p_{i,j}(h) = \frac{(h^2 - h_i^2)p_{i+1,j}(h) + (h_j^2 - h^2)p_{i,j-1}(h)}{h_j^2 - h_i^2},$$

**定理 4.3.2: Richardson 外推方法**

将外推值  $p_{0,i}(0)$  作为  $I(f)$  的一个近似, 记  $T_{i,j} := p_{i,j}(0)$ , 有递推关系

$$T_{i,j} = T_{i+1,j} + \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j-1}}{n_j^2/n_i^2 - 1}. \quad (4.25)$$

**4.3.3 Romberg 求积方法****定理 4.3.3: Romberg 求积方法**

对区间  $[a, b]$  进行  $n_k = 2^k$  等分 ( $k = 0, 1, \dots$ ), 利用复合梯形公式计算  $T_1^k$ , 再递推

$$T_{i+1}^k = \frac{4^i T_i^{k+1} - T_i^k}{4^i - 1}. \quad (4.26)$$

直到  $T_{i+1}^0$  满足精度要求.

特别地,  $T_1^0$  为梯形公式,  $T_2^k$  为复合 Simpson 公式.

## 4.4 Gauss 求积公式

考虑一般的带权积分  $\rho \neq 1$ .

### 定理 4.4.1

给定插值节点  $x_0, \dots, x_n$ ,  $\ell_0, \dots, \ell_n$  是插值基函数, 则当且仅当

$$A_k^{(n)} = I(\ell_k) = \int_a^b \ell_k(x) \rho(x) dx$$

时  $I_n(\cdot)$  的代数精确度至少为  $n$ .

证明. 充分性:  $\forall f \in \mathcal{P}_n$ , 有

$$f(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \ell_k(x),$$

于是

$$I(f) = \sum_{k=0}^n f(x_k) I(\ell_k) = \sum_{k=0}^n A_k^{(n)} f(x_k) = I_n(f);$$

必要性: 若  $\forall f \in \mathcal{P}_n$  均有  $I(f) = I_n(f)$ , 则

$$I(f) - I_n(f) = \sum_{k=0}^n [I(\ell_k) - A_k^{(n)}] f(x_k) = 0,$$

特别地, 取  $f(x) = 1, x, \dots, x^n$ , 得到一个 Vandermonde 矩阵, 从而  $A_k^{(n)} = I(\ell_k)$ . □

### 定理 4.4.2

$n+1$  个求积节点的求积公式  $I_n(\cdot)$  代数精确度不超过  $2n+1$ .

证明. 给定节点  $x_0, \dots, x_n$  定义

$$\omega_{n+1}(x) := \prod_{k=0}^n (x - x_k),$$

则  $I(\omega_{n+1}^2) > 0 = I_n(\omega_{n+1}^2)$ , 说明代数精确度  $< 2n+2$ . □

如何达到最大可能代数精确度 由 (2.7), 余项

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x).$$

故积分误差为

$$E_n(f) = \frac{1}{(n+1)!} I(f^{(n+1)}(\xi(x)) \omega_{n+1}(x)).$$

若  $I_n$  具有  $2n+1$  次代数精确度, 即  $\forall f \in \mathcal{P}_{2n+1}$  均有  $E_n(f) = 0$ , 由于  $f^{(n+1)} \in \mathcal{P}_n$ , 故

$$\omega_{n+1} \perp \mathcal{P}_n. \quad (4.27)$$

即  $\omega_{n+1}$  为  $[a, b]$  上权  $\rho$  的  $n+1$  次正交多项式, 这可以通过选取节点得到.

## 定理 4.4.3: Gauss 求积公式

取  $[a, b]$  上权  $\rho$  的  $n+1$  次正交多项式的根  $x_0, \dots, x_n$  作为求积节点, 则

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^n I(\ell_k) f(x_k),$$

具有  $2n+1$  阶代数精确度, 称为 Gauss 公式, 节点称为 Gauss 点.

## 定理 4.4.4

Gauss 求积公式是一致稳定的.

证明. 略

□

## 第五章 线性方程组的直接解法

求解线性代数方程组就相当于求解矩阵式  $Ax = b$ :

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}. \quad (5.1)$$

因此有必要了解一些对矩阵的操作.

### 5.1 矩阵操作

#### 定义 5.1.1: 稀疏矩阵

如果一个矩阵绝大多数元素是 0, 则称其是稀疏的 (sparse).

#### 定义 5.1.2: 秩一矩阵

若一个矩阵可以表示成  $A = uv^\dagger$ , 则其秩为一.

#### 定理 5.1.1: 奇异值分解

根据奇异值分解, 可以将矩阵表示成秩一矩阵的线性组合:

$$A = U\Sigma V^\dagger = \sum_i \sigma_i u_i v_i^\dagger, \quad (5.2)$$

其中  $U, V$  为幺正矩阵.

#### 定理 5.1.2: 矩阵的 Hierarchical 表示

考虑分块矩阵

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

$A$  一般不是稀疏的, 但非对角元  $A_{12}, A_{22}$  是稀疏的, 则  $Ax$  可以分块地写成:

$$Ax = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 \end{bmatrix},$$

对  $A_{11}x, A_{22}x_2$  递归处理.

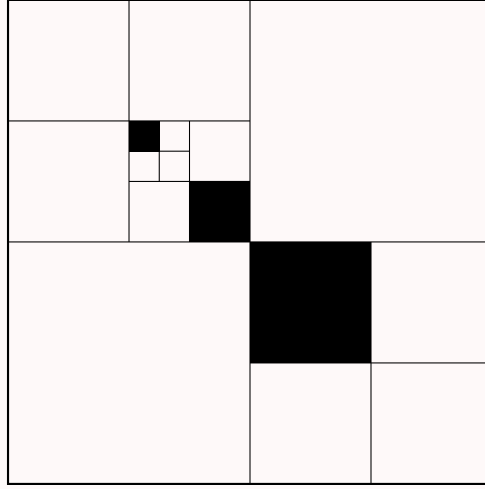


图 5.1: Hierarchical 算法示意图，白块表示稀疏部分

## 定理 5.1.3: 矩阵乘法的 Strassen 算法

对矩阵乘法  $C = AB$  分块得：

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix},$$

定义

$$M_1 = (A_{11} + A_{22})(B_{11} + B_{22}), \quad (5.3a)$$

$$M_2 = (A_{21} + A_{22})B_{11}, \quad (5.3b)$$

$$M_3 = A_{11}(B_{12} - B_{22}), \quad (5.3c)$$

$$M_4 = A_{22}(B_{21} - B_{11}), \quad (5.3d)$$

$$M_5 = (A_{11} + A_{12})B_{22}, \quad (5.3e)$$

$$M_6 = (A_{21} - A_{11})(B_{11} + B_{12}), \quad (5.3f)$$

$$M_7 = (A_{12} - A_{22})(B_{21} + B_{22}), \quad (5.3g)$$

则

$$C_{11} = M_1 + M_4 - M_5 + M_7, \quad (5.4a)$$

$$C_{12} = M_3 + M_5, \quad (5.4b)$$

$$C_{21} = M_2 + M_4, \quad (5.4c)$$

$$C_{22} = M_1 - M_2 + M_3 + M_6. \quad (5.4d)$$

Strassen 算法将分块矩阵的乘法从直接法的 8 次降低到了 7 次，由此分而治之，矩阵乘法的时间复杂度便从  $\mathcal{O}(n^3)$  降低到了  $\mathcal{O}(n^{\log_2 7}) = \mathcal{O}(n^{2.807})$ .

## 定义 5.1.3: 离散 Fourier 变换

式 (2.27) 中定义了一个线性变换, 称为离散 Fourier 变换 (discrete Fourier transform, DFT)

$$X_n = \sum_{m=0}^{N-1} x_m \omega^{mn},$$

其中  $\omega := e^{-i2\pi/N}$  是  $N$  次单位根, 对应的变换矩阵为

$$F = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \cdots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & (\omega^2)^2 & \cdots & (\omega^2)^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{N-1} & (\omega^{N-1})^2 & \cdots & (\omega^{N-1})^{N-1} \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

事实上  $F$  上只有  $n$  个不同的元素. 其逆变换为

$$F^{-1} = \frac{1}{N} \bar{F}. \quad (5.6)$$

## 定理 5.1.4: Cooley-Tukey 快速 Fourier 变换

以基 2 (radix-2) 的情形为例, 即  $N = 2^M$ . 将  $X_n$  的求和分成偶数项  $E_n$  和奇数项  $O_n$

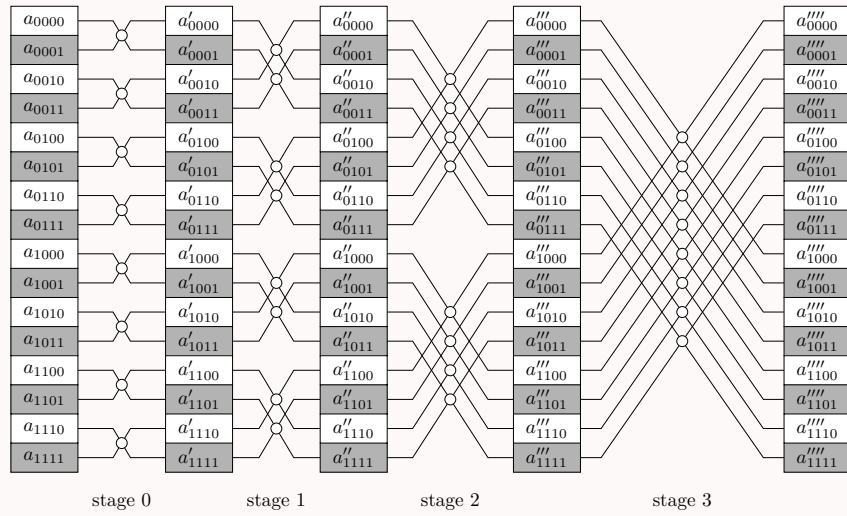
$$\begin{aligned} X_n &= \sum_{k=0}^{N/2-1} x_{2k} \omega^{2kn} + \sum_{k=0}^{N/2-1} x_{2k+1} \omega^{(2k+1)n} \\ &= \sum_{k=0}^{N/2-1} x_{2k} \omega^{2kn} + \omega^n \sum_{k=0}^{N/2-1} x_{2k+1} \omega^{2kn} =: E_n + \omega^n O_n, \end{aligned}$$

由于  $\omega^N = 1$ , 注意到

$$\begin{aligned} X_{n+N/2} &= \sum_{k=0}^{N/2-1} x_{2k} \omega^{2k(n+N/2)} + \sum_{k=0}^{N/2-1} x_{2k+1} \omega^{(2k+1)(n+N/2)} \\ &= \sum_{k=0}^{N/2-1} x_{2k} \omega^{2kn} - \omega^n \sum_{k=0}^{N/2-1} x_{2k+1} \omega^{2kn} = E_n - \omega^n O_n, \end{aligned}$$

由此便将  $N$  个  $X_n$  求和 ( $N^2$ ) 转化成了  $N/2$  个  $E_n, O_n$  求和 ( $N^2/2$ ). 采用分而治之的算法思想, 可以将 DFT 的时间复杂度从矩阵向量乘法的  $\mathcal{O}(N^2)$  优化到  $\mathcal{O}(N \log N)$ , 这称为快速 Fourier 变换 (fast Fourier transform, FFT).



图 5.2: FFT 算法示意图 ( $N = 2^3 = 8$ )

对于非基 2 的情形,  $\omega^k$  的周期不是基 2 的, 做处理:

$$X_n = \sum_{m=0}^{N-1} x_m \omega^{-mn} = \sum_{m=0}^N x_m \omega^{[(m-n)^2 - m^2 - n^2]/2}.$$

定义  $\nu_k := \omega^{k^2/2}$ , 记  $Y_n := \nu_n X_n$ ,  $z_m := \nu_m^{-1} x_m$ , 则有卷积形式:

$$Y_n = \sum_{m=0}^{N-1} z_m \nu_{m-n}.$$

可以用 0 将  $z_m, \nu_m$  延拓, 使其周期是一个比  $N$  大的基 2 数  $N'$ . 再在两端做 DFT:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N'-1} Y_n \omega_{N'}^{nk} &= \sum_{n=0}^{N'-1} \sum_{m=0}^{N'-1} z_m \nu_{m-n} \omega_{N'}^{nk} \\ &= \sum_{m=0}^{N'-1} z_m \omega_{N'}^{mk} \sum_{n=0}^{N'-1} \nu_{m-n} \omega_{N'}^{(n-m)k} = \sum_{m=0}^{N'-1} z_m \omega_{N'}^{mk} \sum_{m=0}^{N'-1} \nu_m \omega_{N'}^{mk} \end{aligned}$$

因此通过对  $z_m, \nu_m$  做两次 DFT、一次向量分量积、一次逆 DFT 便可得到  $Y_n$ .

#### 定理 5.1.5: 周期 Toeplitz 变换

$n$  阶矩阵  $A$  若满足  $a_{ij} = c_{i-j}$  且序列  $c_k$  周期为  $n$ , 则  $A$  称为周期 Toeplitz 矩阵, 且

$$A = F^{-1} \Lambda F, \quad (5.7)$$

其中  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_0, \dots, \lambda_{n-1})$  且

$$\lambda_i = \sum_{j=0}^{n-1} c_j \omega^{-ij}. \quad (5.8)$$

注.  $n$  阶矩阵  $A$  若满足  $a_{ij} = c_{i-j}$ , 则该矩阵可以扩展成  $2n$  阶的周期 Toeplitz 矩阵.

$$\begin{bmatrix} A & * \\ * & * \end{bmatrix}$$

## 5.2 Gauss 消元法

### 5.2.1 Gauss 消元法

如何求解  $n$  元线性方程组? Cramer 法则? 时间复杂度  $\mathcal{O}(n \cdot (n+1)!)$  这是不可接受的.

#### 定理 5.2.1: Gauss 消元法

线性方程组形如

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

如果  $a_{11}^{(1)} \neq 0$ , 可将第一行的  $-a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$  倍加到第  $i$  行 ( $i = 2, 3, \dots, n$ ), 得到一个等价方程组

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

如果  $a_{22}^{(2)} \neq 0$ , 便可以此类推……最终得到一个等价的上三角线性方程组:

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

便不难从下至上地解得:  $x_n = b_n^{(n)}/a_{nn}^{(n)}$ ,

$$x_i = \left( b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)}x_j \right) / a_{ii}^{(i)}, \quad i = n-1, \dots, 2, 1. \quad (5.9)$$

Gauss 消元法的复杂度为  $\mathcal{O}(n^3)$ .

注. 从上面的算法过程中可见, 一旦第  $k$  步  $a_{kk}^{(k)} = 0$ , (顺序) Gauss 消元法就不能继续进行下去. 但是当第  $k+1, \dots, n$  行中存在  $a_{ik}^{(k)} \neq 0$ , 就可以交换  $k, i$  行, 从而使算法继续.

此外, 即使  $a_{kk}^{(k)} \neq 0$  但  $|a_{kk}^{(k)}| \ll 1$ , 也会出现大数除小数导致精度下降的问题.

**定理 5.2.2: 列主元方法**

在第  $k$  步消去之前, 找到绝对值最大的主元 (pivot):

$$i_k = \arg \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|, \quad (5.10)$$

然后交换第  $k, i_k$  行.

**5.2.2 LU 分解**

下面我们从矩阵角度考察 Gauss 消元法.

**定义 5.2.1: 初等矩阵**

给定 (实) 向量  $u, v$  和标量  $\sigma$ , 形如

$$E = I - \sigma uv^\top \quad (5.11)$$

的称为 (实) 初等矩阵 (elementary matrix).

**推论.** 初等矩阵的逆也是同类型的初等矩阵:

$$(I - \sigma uv^\top)^{-1} = I - \frac{\sigma}{\sigma v^\top u - 1} uv^\top. \quad (5.12)$$

**例 5.2.1**

- 初等排列矩阵:

$$P_{ij} = I - (e_i - e_j)(e_i - e_j)^\top = I - e_{ii} - e_{jj} + e_{ij} + e_{ji}.$$

左乘初等排列矩阵即互换第  $i, j$  行, 右乘即互换第  $i, j$  列;

- 倍加矩阵:

$$I + \alpha e_i e_j^\top = I + \alpha e_{ij},$$

左乘即将第  $i$  行的  $\alpha$  倍加到第  $j$  行上.

**定义 5.2.2: 初等单位下三角矩阵**

形如

$$L_i = I + \ell_i e_i^\top = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & \ell_{i+1,i} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & \ell_{ni} & & & 1 \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

称为第  $i$  列的初等单位下三角矩阵. 其中向量  $\ell_i$  的前  $i$  个分量为 0.

推论. 初等单位下三角矩阵的逆也是初等单位下三角矩阵

$$(I + \ell_i e_i^\top)^{-1} = I - \ell_i e_i^\top. \quad (5.14)$$

推论. 对角元均为 1 的下三角矩阵称为单位下三角矩阵, 可以写成

$$L = L_1 L_2 \cdots L_{n-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \ell_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

### 定理 5.2.3: 矩阵的 LU 分解

根据 Gauss 消元法的过程, 记

$$A^{(k)} := \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}, \quad b^{(k)} := \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{bmatrix}, \quad \ell_k := -\frac{1}{a_{kk}^{(k)}} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_{k+1,k}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{nk}^{(k)} \end{bmatrix}.$$

相应的初等单位下三角矩阵为  $L_k = I + \ell_k e_k^\top$ . 增广矩阵有递推关系:

$$[A^{(k+1)} \quad b^{(k+1)}] = L_k [A^{(k)} \quad b^{(k)}], \quad (5.15)$$

即

$$A^{(n)} = L_{n-1} \cdots L_1 A^{(1)}, \iff A^{(1)} = L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} A^{(n)},$$

则  $L = L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1}$  为单位下三角矩阵,  $U = A^{(n)}$  为上三角矩阵, 这样就将  $A^{(1)}$  分解成了下上三角矩阵的乘积.

注. 根据 Gauss 消元法的过程可见, LU 分解的前提是  $a_{11}^{(1)}, \dots, a_{nn}^{(n)}$  均不为 0.

### 定理 5.2.4: 三角分解定理

给定矩阵  $A$ , 若其顺序主子式

$$\Delta_i := \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix}, \quad i = 1, \dots, n \quad (5.16)$$

均不为 0, 则存在唯一的单位下三角矩阵  $L$  和上三角矩阵  $U$  使得  $A = LU$ .

证明. 通过数学归纳法, 可证明:  $a_{11}^{(1)}, \dots, a_{ii}^{(i)} \neq 0 \iff \Delta_1, \dots, \Delta_i \neq 0$ , 此时

$$\Delta_i = a_{11}^{(1)} \cdots a_{ii}^{(i)}, \quad (5.17)$$

若存在  $L_1, U_1$  和  $L_2, U_2$  使得

$$A = L_1 U_1 = L_2 U_2,$$

两边左乘  $L_1^{-1}$ , 右乘  $U_2^{-1}$  得到:

$$U_1 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2,$$

此式左边为上三角矩阵, 右边为单位下三角矩阵, 故只能是单位矩阵  $I$ , 即  $U_1 = U_2, L_1 = L_2$ .  $\square$

### 例 5.2.2: LU 分解的例子

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 4 & 3 & 1 & \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & & 2 & 2 \\ & & & 2 \end{bmatrix}.$$

注.  $L$  有  $n(n-1)/2$  个变量,  $U$  有  $n(n+1)/2$  个变量, 可以直接由  $A$  确定  $L, U$ .

### 定理 5.2.5: 直接 LU 分解法 (Doolittle 分解法)

写成分块矩阵的形式:

$$L^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & \\ \ell_{n-k+1} & L^{(k-1)} \end{bmatrix}, \quad U^{(k)} = \begin{bmatrix} u_{u-k+1, u-k+1} & u_{u-k+1}^\top \\ & U^{(k-1)} \end{bmatrix},$$

则

$$A^{(k)} = L^{(k)} U^{(k)} = \begin{bmatrix} u_{u-k+1, u-k+1} & u_{u-k+1}^\top \\ u_{u-k+1, u-k+1} \ell_{n-k+1} & A^{(k-1)} + \ell_{n-k+1} u_{u-k+1}^\top \end{bmatrix}.$$

由此可确定  $u, \ell$ , 同时  $A^{(k)}$  的阶数减 1.

注. 三角分解定理 5.2.4 给出了 LU 分解的条件. 而对于一般的可逆矩阵, 也可以通过换行实现 LU 分解.

### 定理 5.2.6: 一般三角分解定理

若  $A$  可逆, 则存在排列矩阵  $P$ 、单位下三角矩阵  $L$  和上三角矩阵  $U$  使得

$$PA = LU. \quad (5.18)$$

证明. 考虑列主元方法的 Gauss 消元法, 第  $k$  步交换  $k, i_k$  行, 则

$$A^{(k+1)} = L_k I_{ki_k} A^{(k)},$$

即

$$A^{(n)} = L_{n-1} I_{n-1, i_{n-1}} \cdots L_1 I_{1, i_1} A^{(1)}, \iff A^{(1)} = I_{1, i_1} L_1^{-1} \cdots I_{n-1, i_{n-1}} L_{n-1}^{-1} A^{(n)},$$

定义

$$P_k = I_{n-1, i_{n-1}} \cdots I_{ki_k},$$

则  $P_k^\top P_{k+1} = I_{k i_k}$ , 进而

$$P_1 A^{(1)} = P_2 L_1^{-1} P_2^\top P_3 L_2^{-1} \cdots P_{n-1} L_{n-1}^{-1} A^{(n)},$$

易得  $P_{k+1} e_k = e_k$ , 故

$$L'_k := P_{k+1} L_k^{-1} P_{k+1}^\top = P_{k+1} (I - \ell_k e_k^\top) P_{k+1}^\top = I - P_{k+1} \ell_k e_k^\top,$$

仍然是第  $k$  列的初等单位上三角矩阵, 令  $P = P_1$ ,  $L = L'_1 \cdots L'_{n-2} L_{n-1}$ ,  $U = A^{(n)}$  即得.  $\square$

### 5.2.3 Cholesky 分解

下面再看对称矩阵的三角分解.

#### 定理 5.2.7: Cholesky 分解

若  $A$  实对称正定, 则存在唯一的对角元素为正的下三角矩阵  $L$  使得

$$A = LL^\top. \quad (5.19)$$

证明. 采用加边 Cholesky 分解法: 写成分块矩阵的形式

$$L_i = \begin{bmatrix} L_{i-1} & \\ \ell_{i-1}^\top & \ell_{ii} \end{bmatrix}, \quad A_i = \begin{bmatrix} A_{i-1} & a_{i-1} \\ a_{i-1}^\top & a_{ii} \end{bmatrix}$$

满足  $A_i = L_i L_i^\top$ , 可得

$$\ell_{i-1} = L_{i-1}^{-1} a_{i-1}, \quad (5.20a)$$

$$\ell_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \ell_{i-1}^\top \ell_{i-1}}. \quad (5.20b)$$

从  $\ell_{11} = \sqrt{a_{11}}$  出发便可迭代得到整个  $L$ .  $\square$

注. 这种算法特别适合稀疏矩阵.

### 5.2.4 Thomas 方法

考虑线性方程组

$$\begin{cases} b_1 x_1 + c_1 x_2 = d_1, \\ a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i, \quad i = 2, \dots, n-1 \\ a_n x_{n-1} + b_n x_n = d_n \end{cases}$$

系数矩阵为三对角矩阵:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_n & b_n & \\ & & & & \end{bmatrix}.$$

## 定理 5.2.8: Thomas 方法

容易验证有如下三角分解形式:

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \ell_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ell_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & \\ & u_2 & \ddots & \\ & & \ddots & c_{n-1} \\ & & & u_n \end{bmatrix},$$

可直接乘开得到  $u_1 = b_1$

$$\ell_i = \frac{a_i}{u_{i-1}}, \quad u_i = b_i - \ell_i c_{i-1}. \quad (5.21)$$

## 5.3 稳定性分析

在用直接法求解  $Ax = b$  的过程中, 由于舍入误差的存在, 必然会导致结果产生误差. 因而有必要对可能产生的误差作一估计.

## 例 5.3.1: 数据的微小变化导致解的巨大变化

方程组

$$\begin{bmatrix} 10 & 7 & 8 & 7 \\ 7 & 5 & 6 & 5 \\ 8 & 6 & 10 & 9 \\ 7 & 5 & 9 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 32 \\ 23 \\ 33 \\ 31 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

对向量  $b$  数据做微小的修改

$$\begin{bmatrix} 10 & 7 & 8 & 7 \\ 7 & 5 & 6 & 5 \\ 8 & 6 & 10 & 9 \\ 7 & 5 & 9 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \\ x'_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 32.1 \\ 22.9 \\ 33.1 \\ 30.9 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \\ x'_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.2 \\ -12.6 \\ 4.5 \\ -1.1 \end{bmatrix}.$$

对系数矩阵  $A$  数据做微小的修改

$$\begin{bmatrix} 10 & 7 & 8.1 & 7.2 \\ 7.08 & 5.04 & 6 & 5 \\ 8 & 5.98 & 9.89 & 9 \\ 6.99 & 4.99 & 9 & 9.98 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x''_1 \\ x''_2 \\ x''_3 \\ x''_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 32 \\ 23 \\ 33 \\ 31 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x''_1 \\ x''_2 \\ x''_3 \\ x''_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -81 \\ 137 \\ -34 \\ 22 \end{bmatrix}.$$

可见数据的微小变化会导致解的巨大变化, 这是因为系数矩阵的条件数  $\text{cond}(A) = 32825/11$  很大.

**定义 5.3.1: 条件数**

给定诱导的矩阵范数  $\|\cdot\|$ , 可逆矩阵  $A$  的条件数 (condition number) 为

$$\text{cond}(A) \equiv \|A\| \|A^{-1}\|. \quad (5.22)$$

**推论.** 条件数的性质:

- $\text{cond}(A) \geq 1$ ;
- $\text{cond}(A^{-1}) = \text{cond}(A)$ ;
- $\text{cond}(cA) = \text{cond}(A)$ ;
- 若  $U$  为正交矩阵, 则  $\text{cond}_2(U) = 1$ , 且

$$\text{cond}_2(A) = \text{cond}_2(AU) = \text{cond}_2(UA); \quad (5.23)$$

- 若  $\lambda_1, \lambda_n$  是  $A$  模最大与最小的特征值, 则

$$\text{cond}(A) \geq \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_n|}, \quad (5.24)$$

若  $A$  对称, 则  $\text{cond}_2(A) = |\lambda_1| / |\lambda_n|$ ;

- 由范数的等价性, 可知条件数的等价性:

$$\frac{1}{n} \text{cond}_2(A) \leq \text{cond}_1(A) \leq n \text{cond}_2(A), \quad (5.25a)$$

$$\frac{1}{n} \text{cond}_\infty(A) \leq \text{cond}_2(A) \leq n \text{cond}_\infty(A), \quad (5.25b)$$

$$\frac{1}{n^2} \text{cond}_1(A) \leq \text{cond}_\infty(A) \leq n^2 \text{cond}_1(A). \quad (5.25c)$$

**定理 5.3.1: 解的扰动定理**

给定可逆矩阵  $A$  和微小扰动  $\Delta A$ , 满足

$$\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} < \frac{1}{\text{cond}(A)},$$

则  $(A + \Delta A)$  也可逆, 考察线性方程组  $Ax = b$  及其扰动方程组

$$(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b + \Delta b,$$

则有

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \|A^{-1}\| \|\Delta A\|} \left( \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right). \quad (5.26)$$

**证明.** 由扰动定理定理 1.4.6 知  $(A + \Delta A)$  可逆且

$$\|(A + \Delta A)^{-1}\| \leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\| \|\Delta A\|}. \quad (5.27)$$

由

$$\begin{aligned} \Delta x &= (A + \Delta A)^{-1}(b + \Delta b) - x \\ &= (A + \Delta A)^{-1}(b + \Delta b - (A + \Delta A)x) \\ &= (A + \Delta A)^{-1}(\Delta b - \Delta Ax), \end{aligned}$$



两边取范数

$$\begin{aligned}\|\Delta x\| &\leq \|(A + \Delta A)^{-1}\| (\|\Delta b\| + \|\Delta A\| \|x\|) \\ &\leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\| \|\Delta A\|} \left( \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \|A\| \|x\| + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \|A\| \|x\| \right).\end{aligned}\quad \square$$

注. 因此条件数可以看成扰动方程组相对误差的放大倍数.

**定理 5.3.2: 矩阵相对奇异性的度量**

若  $A$  可逆, 定义所有使得  $(A + \Delta A)$  不可逆的  $\Delta A$  构成集合  $S$ , 则

$$\min_{\Delta A \in S} \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2} = \frac{1}{\text{cond}_2(A)}, \quad (5.28)$$

证明. 当  $\|A^{-1}\| \|\Delta A\| < 1$  时,  $(A + \Delta A)$  可逆, 故

$$\min_{\Delta A \in S} \|\Delta A\|_2 \geq \frac{1}{\|A^{-1}\|_2}.$$

由  $\|\cdot\|_2$  的定义,  $\exists x$  且  $\|x\|_2 = 1$  使得  $\|A^{-1}x\|_2 = \|A^{-1}\|_2$ , 令  $y = A^{-1}x/\|A^{-1}\|_2$ , 并取

$$\Delta A = -\frac{xy^\top}{\|A^{-1}\|_2},$$

则  $\|y\|_2 = 1$  且

$$(A + \Delta A)y = \frac{x}{\|A^{-1}\|_2} - \frac{xy^\top y}{\|A^{-1}\|_2} = 0,$$

故  $(A + \Delta A)$  不可逆, 又

$$\|\Delta A\|_2 = \max_{\|z\|_2=1} \|\Delta A z\|_2 = \frac{\|x\|_2}{\|A^{-1}\|_2} \max_{\|z\|_2=1} |y^\top z| = \frac{1}{\|A^{-1}\|_2}. \quad \square$$

注. 因此可逆矩阵到最接近的奇异矩阵的相对距离在 2 - 范数意义下就是 2 - 条件数的倒数. 当条件数很大时, 矩阵与奇异矩阵的相对距离很小, 称为病态 (ill conditioned).

**定理 5.3.3: 近似解的相对误差**

若  $x, x'$  分别是方程组  $Ax = b$  的精确解和近似解,  $x'$  的剩余  $r = b - Ax'$ , 则

$$\frac{1}{\text{cond}(A)} \frac{\|r\|}{\|b\|} \leq \frac{\|x' - x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|b\|}. \quad (5.29)$$

证明. 由  $A(x' - x) = -r$  和  $\|A\| \|x\| \geq \|b\|$  可得

$$\|r\| \leq \|A\| \|x' - x\| = \frac{\text{cond}(A)}{\|A^{-1}\|} \|x' - x\|,$$

两边除  $\|b\|$ , 由  $x = A^{-1}b$  可得

$$\frac{\|r\|}{\|b\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|x' - x\|}{\|A^{-1}\| \|b\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|x' - x\|}{\|x\|};$$

另一方面, 由  $x' - x = -A^{-1}r$  可得

$$\|x' - x\| = \|A^{-1}r\| \leq \|A^{-1}\| \|r\| = \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|A\|}.$$

两边同除  $\|x\|$ , 由  $Ax = b$  可得

$$\frac{\|x' - x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|A\| \|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|b\|}.$$

综上, 两边不等式均得证.  $\square$

注. 这说明当方程组病态时, 即使剩余  $\|r\|$  比较小, 解的相对误差仍可能很大.

### 例 5.3.2: Hilbert 矩阵

Hilbert 矩阵

$$H_n := \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1) \end{bmatrix}$$

的条件数增长很快:

$$\text{cond}_2(H_n) = \mathcal{O}\left(\frac{(1+\sqrt{2})^{4n}}{\sqrt{n}}\right).$$

### 定理 5.3.4: 条件数与数值精度

用直接法解方程组  $Ax = b$ ,  $A, b$  的元素有效位数为  $s$  而  $\text{cond}(A)$  的数量级为  $t$ , 则求得  $x$  分量有效位数约为  $s - t$ .

**病态方程组的解法** 除采用更高精度的运算外, 另一个更有效的方法是对原方程进行预处理:

$$Ax = b, \iff PAQ(Q^{-1}x) = Pb,$$

从而降低系数矩阵的条件数:  $\text{cond}(PAQ) \ll \text{cond}(A)$ . 一般  $P, Q$  可选择为三角矩阵或对角矩阵.

### 例 5.3.3: 预处理例子

方程组

$$\begin{bmatrix} 10 & 10^5 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10^5 \\ 2 \end{bmatrix} \implies \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{9999} \begin{bmatrix} 10000 \\ 9998 \end{bmatrix}.$$

系数矩阵的条件数  $\text{cond}_2(A) = 100010$  很大, 左乘  $D = \text{diag}(10^{-5}, 1)$  平衡:

$$\begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix},$$

系数矩阵的条件数  $\text{cond}_2(DA) = 940/359$  得到了有效降低.

## 第六章 线性方程组的迭代解法

### 定义 6.0.1: 线性方程组的迭代解法

构造一个向量序列, 使其尽快收敛到线性方程组  $Ax = b$  的解.

### 6.1 迭代法基本概念

#### 6.1.1 向量序列和矩阵序列的极限

##### 定义 6.1.1: 向量序列的极限

给定赋范空间  $(\mathbb{F}^n, \|\cdot\|)$  以及一组向量序列  $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$ , 若  $\exists x \in \mathbb{F}^n$  使得

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \|x^{(i)} - x\| = 0, \iff \lim_{i \rightarrow \infty} x^{(i)} = x. \quad (6.1)$$

则称  $x^{(i)}$  收敛于  $x$ .

注. 由于有限维线性空间中所有范数都是等价的, 向量序列的收敛性不依赖于范数的选择.

##### 定理 6.1.1: 向量序列的收敛性判定

向量序列收敛等价于其各分量序列收敛:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x^{(i)} = x, \iff \lim_{i \rightarrow \infty} x_j^{(i)} = x_j, \quad \forall j = 1, \dots, n. \quad (6.2)$$

证明. 选取无穷范数:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \|x^{(i)} - x\|_{\infty} = 0, \iff \lim_{i \rightarrow \infty} \max_j |x_j^{(i)} - x_j| = 0, \iff \lim_{i \rightarrow \infty} |x_j^{(i)} - x_j| = 0, \quad \forall j. \quad \square$$

注. 类似地, 我们可以定义矩阵序列的收敛性.

##### 定理 6.1.2: 收敛到零矩阵

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = O \iff \forall x \in \mathbb{F}^n \text{ 均有 } \lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)}x = 0.$$

证明. 必要性: 对于任一矩阵的从属范数,

$$\|A^{(k)}x\| \leq \|A^{(k)}\| \|x\| \rightarrow 0;$$

充分性：其矩阵各分量

$$|a_{ij}^{(k)}| = |e_i^T A^{(k)} e_j| \leq \|A^{(k)} e_j\|_\infty \rightarrow 0.$$

□

### 定理 6.1.3: 矩阵幂序列的收敛性

给定  $B \in \mathbb{F}^{n \times n}$ ，下面三个命题等价：

1.  $\lim_{k \rightarrow \infty} B^k = O$ ;
2.  $\rho(B) < 1$ ;
3. 存在一个矩阵范数  $\|\cdot\|$  使得  $\|B\| < 1$ .

证明. (1)  $\Rightarrow$  (2): 采取反证法, 若  $\lambda$  为  $B$  的特征值且  $|\lambda| \geq 1$  其对应特征向量为  $x$ , 则

$$\|B^k x\| = |\lambda|^k \|x\| \not\rightarrow 0;$$

(2)  $\Rightarrow$  (3): 由  $\rho(B) < 1$ , 给定  $\epsilon = \frac{1 - \rho(B)}{2} > 0$ , 由定理 1.4.4, 存在一个矩阵范数使得  $\|B\| \leq \rho(B) + \epsilon < 1$ ;

(3)  $\Rightarrow$  (1): 由  $\|B^k\| \leq \|B\|^k \rightarrow 0$  即得. □

### 定理 6.1.4: 矩阵幂的矩阵范数与谱半径

给定  $B \in \mathbb{F}^{n \times n}$  和任一矩阵范数  $\|\cdot\|$ , 均有

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|B^k\|^{1/k} = \rho(B). \quad (6.3)$$

证明. 采用夹逼定理. 一方面, 由定理 1.4.3,

$$\rho(B) = \rho(B^k)^{1/k} \leq \|B^k\|^{1/k};$$

另一方面,  $\forall \epsilon > 0$ , 记

$$B_\epsilon = \frac{B}{\rho(B) + \epsilon},$$

则  $\rho(B_\epsilon) < 1$ , 由定理 6.1.3,  $\lim_{k \rightarrow \infty} B_\epsilon^k = O$ , 即  $\exists N = N(\epsilon) > 0$  使得  $\forall k > N$ ,

$$\|B_\epsilon^k\| = \frac{\|B^k\|}{(\rho(B) + \epsilon)^k} < 1, \iff \|B^k\|^{1/k} < \rho(B) + \epsilon, \iff \lim_{k \rightarrow \infty} \|B^k\|^{1/k} \leq \rho(B).$$

综上, 极限相等. □

## 6.1.2 迭代公式的构造

### 定理 6.1.5: 线性定常迭代

若线性方程  $Ax = b$  与方程  $x = Bx + f$  同解, 则可以构造一个定常 (stationary) 的迭代公式:

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f, \quad (6.4)$$

其中  $B$  称为迭代矩阵. 若  $x^{(k)}$  收敛, 则收敛值  $x^*$  就是方程的解.

**定理 6.1.6: 迭代法的收敛性分析**

迭代法  $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$  收敛与以下命题等价:

1.  $\lim_{k \rightarrow \infty} B^k = O$ ;
2.  $\rho(B) < 1$ ;
3. 存在一种矩阵范数  $\|\cdot\|$  使得  $\|B\| < 1$ .

证明. 记误差向量  $e^{(k)} := x^{(k)} - x^*$ , 则  $e^{(k+1)} = Be^{(k)}$ . 迭代法收敛意味着  $\forall e^{(0)} \in \mathbb{F}^n$  均有

$$\lim_{k \rightarrow \infty} e^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} B^k e^{(0)} = 0,$$

由定理 6.1.2,  $\lim_{k \rightarrow \infty} B^k = O$ , 由定理 6.1.3 知三个命题等价. □

**定理 6.1.7: 迭代法的误差分析**

若迭代法收敛, 第  $k$  次迭代的误差满足

$$\|e^{(k)}\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|. \quad (6.5)$$

证明. 由  $e^{(k)} = Be^{(k-1)} = B(e^{(k-1)} - e^{(k)}) + Be^{(k)}$ , 故

$$\|e^{(k)}\| \leq \|B(e^{(k-1)} - e^{(k)})\| + \|Be^{(k)}\| \leq \|B\| (\|e^{(k-1)} - e^{(k)}\| + \|e^{(k)}\|),$$

移项即得第一个不等号; 又  $e^{(k)} - e^{(k-1)} = B(e^{(k-1)} - e^{(k-2)})$  可得

$$\|e^{(k)} - e^{(k-1)}\| \leq \|B\| \|e^{(k-1)} - e^{(k-2)}\|,$$

反复迭代即得第二个不等号. □

**定理 6.1.8: 迭代法的收敛速度**

若给定  $\epsilon > 0$ , 希望

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

则要求迭代次数

$$k \geq \frac{-\ln \epsilon}{-\ln \|B^k\|^{1/k}}. \quad (6.6)$$

证明. 按矩阵从属范数的定义

$$\|B^k\| = \max_{e^{(0)} \neq 0} \frac{\|B^k e^{(0)}\|}{\|e^{(0)}\|} = \max_{e^{(0)} \neq 0} \frac{\|e^{(k)}\|}{\|e^{(0)}\|}.$$

因此只需  $\|B^k\| \leq \epsilon$  即可. □

注. 式 (6.6) 并不好处理, 可以用近似:

$$k \approx \frac{-\ln \epsilon}{-\ln \rho(B)}.$$

**定义 6.1.2: 平均收敛率**

迭代法的平均收敛率为

$$R_k(B) := -\ln \|B^k\|^{1/k}. \quad (6.7)$$

其渐进收敛率  $R(B) := R_\infty(B) = -\ln \rho(B)$ .

**6.2 (单步) 定常线性迭代****6.2.1 Richardson 迭代法****例 6.2.1: Richardson 迭代法**

最简单的情形  $x = (I - A)x + b$ , 称为 Richardson 迭代:

$$x^{(k+1)} = (I - A)x^{(k)} + b, \quad (6.8)$$

收敛条件为  $\rho(I - A) < 1$ . 定义残差  $r^{(k)} := b - Ax^{(k)}$ , 则有递推关系:

$$r^{(k+1)} = (I - A)r^{(k)},$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + r^{(k)},$$

继而

$$x^{(k)} = x^{(0)} + r^{(0)} + \cdots + r^{(k-1)} = x_0 + \sum_{i=0}^{k-1} (I - A)^i r^{(0)}.$$

**定义 6.2.1: Krylov 子空间**

给定非零向量  $v$  和非零方阵  $A$ , 定义

$$\mathcal{K}_n(v) := \text{span}(v, Av, \dots, A^{n-1}v),$$

称为 Krylov 子空间.

**推论.** 显然

$$\mathcal{K}_1(v) \subset \mathcal{K}_2(v) \subset \cdots \subset \mathcal{K}_n(v) \subset \cdots$$

最大维度  $\sup_{n \rightarrow \infty} \dim \mathcal{K}_n(v)$  称为  $v$  关于  $A$  的度.

**定义 6.2.2: 预处理矩阵**

若  $M$  可逆且  $M^{-1}$  是  $A^{-1}$  的一个较好的近似, 对  $M^{-1}Ax = M^{-1}b$  使用 Richardson 迭代:

$$x^{(k+1)} = (I - M^{-1}A)x^{(k)} + M^{-1}b = x^{(k)} + M^{-1}r^{(k)}, \quad (6.9)$$

矩阵  $M$  称为预处理矩阵 (preconditioning matrix).

注. 预处理矩阵的选择依据: 方便计算、好近似.

### 6.2.2 Jacobi 迭代法和 Gauss-Seidel 迭代法

将  $A$  拆解为  $A = D + L + U$  的形式, 其中  $D$  是对角部分,  $L$  是严格下三角部分,  $U$  是严格上三角部分.<sup>1</sup>

#### 例 6.2.2: Jacobi 迭代法

预处理矩阵  $M = D$ , 迭代矩阵  $B_J = -D^{-1}(L + U)$ , 迭代的分量形式为:

$$x_{i+1}^{(k)} = \frac{1}{a_{kk}} \left( b_k - \sum_{j \neq k} a_{kj} x_i^{(j)} \right). \quad (6.10)$$

#### 例 6.2.3: Gauss-Seidel 迭代法

预处理矩阵  $M = D + L$ , 迭代矩阵  $B_G = -(D + L)^{-1}U$ , 迭代的分量形式为:

$$x_{i+1}^{(k)} = \frac{1}{a_{kk}} \left( b_k - \sum_{j=1}^{k-1} a_{kj} x_{i+1}^{(j)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj} x_i^{(j)} \right). \quad (6.11)$$

注. Jacobi 法和 G-S 法收敛  $\iff \rho(B_J) < 1$  和  $\rho(B_G) < 1$ . 另外, 有时容易验证矩阵  $A$  满足收敛的充分条件.

#### 定理 6.2.1: Jacobi 法和 G-S 法收敛的充分条件: 对角占优

若  $A$  严格对角占优或不可约弱对角占优, 则 Jacobi 法和 G-S 法收敛.

证明. 对于 Jacobi 法, 若  $B_J$  有特征值  $\lambda$  且  $|\lambda| \geq 1$ , 则

$$\det(\lambda I - B_J) = 0, \implies \det(D + \lambda^{-1}(L + U)) = 0,$$

若  $A$  严格对角占优 (或不可约弱对角占优), 则  $D + \lambda^{-1}(L + U)$  也为严格对角占优 (或不可约弱对角占优), 矛盾! 故  $\rho(B_J) < 1$ , Jacobi 法收敛.

对于 G-S 法, 设  $B_G$  有特征值  $\lambda$  且  $|\lambda| \geq 1$ , 则

$$\det(\lambda I - B_G) = 0, \implies \det(D + L + \lambda^{-1}U) = 0,$$

若  $A$  严格对角占优 (或不可约弱对角占优), 则  $D + L + \lambda^{-1}U$  也为严格对角占优 (或不可约弱对角占优), 矛盾! 故  $\rho(B_G) < 1$ , G-S 法收敛.  $\square$

#### 定理 6.2.2: 对称矩阵的 Jacobi 法和 G-S 法收敛的充要条件

若  $A$  对称且对角元均为正, 则 Jacobi 法和 G-S 法收敛  $\iff D \pm (L + U)$  均正定.

<sup>1</sup>本节对  $L, U$  的定义与教材上的定义相差一个负号.

## 6.2.3 超松弛迭代法

## 例 6.2.4: 逐次超松弛迭代

预处理矩阵  $M = D/\omega + L$ , 迭代矩阵  $L_\omega = (D + \omega L)^{-1}[(1 - \omega)D - \omega U]$ ,

$$x_{i+1}^{(k)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{kk}} \left( b_k - \sum_{j=1}^{k-1} a_{kj}x_{i+1}^{(j)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}x_i^{(j)} \right). \quad (6.12)$$

称为逐次超松弛迭代法 (successive overrelaxation, SOR), 其中  $\omega$  称为松弛因子.

定理 6.2.3:  $\rho(L_\omega)$  与  $\omega$  的关系

若  $A$  可逆且对角元非 0, 则

$$\rho(L_\omega) \geq |1 - \omega|. \quad (6.13)$$

证明. 设  $L_\omega$  的特征值是  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ , 由于  $L_\omega = (D + \omega L)^{-1}[(1 - \omega)D - \omega U]$  可以写成下三角矩阵和上三角矩阵的乘积:

$$\lambda_1 \cdots \lambda_n = \det(L_\omega) = \det(D^{-1}) \det((1 - \omega)D) = (1 - \omega)^n,$$

故

$$\rho(L_\omega) = \max_i |\lambda_i| \geq |\lambda_1 \cdots \lambda_n|^{1/n} = |1 - \omega|. \quad \square$$

推论. SOR 收敛的必要条件是  $0 < \omega < 2$ .

## 定理 6.2.4: 对称正定矩阵的 SOR 收敛的充要条件

若  $A$  对称正定, 则  $0 < \omega < 2 \iff$  SOR 收敛.

证明. 只需证明充分性. 设  $\lambda$  和  $x$  是  $L_\omega$  的任意一个特征值和对应的特征向量, 则

$$[(1 - \omega)D - \omega U]x = \lambda(D + \omega L)x,$$

上式两边与  $x$  内积得到

$$\lambda = \frac{(1 - \omega) \langle Dx, x \rangle - \omega \langle Ux, x \rangle}{\langle Dx, x \rangle + \omega \langle Lx, x \rangle},$$

由  $A$  正定,  $D$  也正定, 记  $\langle Dx, x \rangle =: p > 0$ ,  $\langle Lx, x \rangle = a + ib$ , 由  $A$  对称,  $L^\top = U$ ,

$$\langle Ux, x \rangle = \langle L^\top x, x \rangle = \langle x, Lx \rangle = \overline{\langle Lx, x \rangle} = a - ib,$$

可将  $\lambda$  用  $\omega, p, a, b$  表示出来, 继而

$$|\lambda|^2 - 1 = \frac{[(1 - \omega)p - \omega a]^2 + \omega^2 b^2}{(p + \omega a)^2 + \omega^2 b^2} - 1 = -\frac{p\omega(2 - \omega)(p + 2a)}{(p + \omega a)^2 + \omega^2 b^2}$$

由  $A$  正定,

$$\langle Ax, x \rangle = \langle Dx, x \rangle + \langle Lx, x \rangle + \langle Ux, x \rangle = p + 2a > 0,$$

又  $2 - \omega > 0$ , 故  $|\lambda|^2 < 1$ , 从而  $\rho(L_\omega) < 1$ , SOR 收敛.  $\square$



最佳松弛因子 希望选取最优的  $\omega$  使得迭代矩阵谱半径最小:

$$\omega^* = \arg \min_{\omega} \rho(L_{\omega}). \quad (6.14)$$

**定理 6.2.5: 最佳松弛因子**

若  $A$  为对称正定的 (分块) 三对角矩阵, 则  $\rho(B_G) = \rho(B_J)^2 < 1$  且 SOR 的最佳松弛因子为

$$\omega^* = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(B_G)}}. \quad (6.15)$$

且  $\rho(L_{\omega^*}) = \omega^* - 1$ .

注. 对于对称正定三对角矩阵, G-S 法收敛速度是 Jacobi 法的两倍, SOR 的收敛速度最快.

**例 6.2.5: Poisson 方程的五点差分格式**

讨论二元函数  $u = u(x, y)$  满足

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y),$$

边界条件  $u|_{\partial\Omega} = 0$ . 采用差分法, 在均匀网格点  $(x_i, y_i)$  附近作 Taylor 展开:

$$u_{i\pm 1, j} = u_{ij} \pm h \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{ij} + \frac{h^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{ij} \pm \frac{h^3}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_{ij} + \mathcal{O}(h^4).$$

可得

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{ij} = \frac{u_{i+1, j} + u_{i-1, j} - 2u_{ij}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

同理可得  $\partial^2 u / \partial^2 y$ . 代入原 Poisson 方程得到

$$u_{i+1, j} + u_{i-1, j} + u_{i, j+1} + u_{i, j-1} - 4u_{ij} = h^2 f_{ij}. \quad (6.16)$$

若网格是  $m \times n$  的, 则可以写成线性方程组  $Ax = b$  的形式, 其中

$$x = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}, \quad u_i = \begin{bmatrix} u_{1i} \\ \vdots \\ u_{mi} \end{bmatrix}; \quad b = -h^2 \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}, \quad f_i = \begin{bmatrix} f_{1i} \\ \vdots \\ f_{mi} \end{bmatrix};$$

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & -I & & \\ -I & A_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I \\ & & -I & A_n \end{bmatrix}, \quad A_i = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & 4 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

其中  $A$  是  $mn$  阶方阵,  $A_i$  是  $m$  阶方阵. 故  $A$  是分块三对角正定矩阵,  $B_J$  的  $mn$  个特征值为

$$\lambda_{ij} = \frac{\cos(i\pi h) + \cos(j\pi h)}{2}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n.$$

谱半径  $\rho(B_J) = \cos(\pi h)$ , 则  $\rho(B_G) = \cos^2(\pi h)$

$$\omega^* = \frac{2}{1 + \sin(\pi h)},$$

因此, Jacobi 法和 SOR 的收敛速度分别为

$$R(B_J) = -\ln(\cos(\pi h)) = \frac{\pi^2}{2}h^2 + \frac{\pi^4}{12}h^4 + \mathcal{O}(h^6),$$

$$R(L_{\omega^*}) = -2\ln(\cos(\pi h)) + 2\ln(1 + \sin(\pi h)) = 2\pi h + \frac{\pi^3}{3}h^3 + \mathcal{O}(h^5).$$

可见 Jacobi 法和 SOR 的收敛速度差了一个数量级.

## 6.3 非线性迭代方法

### 定义 6.3.1: 算子

Hilbert 空间  $V$  中的可逆对称算子  $A: V \rightarrow V$  满足:  $\forall x, y \in V$ ,

- $\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle$ ;
- $\langle Ax, x \rangle \geq 0$  且  $\langle Ax, x \rangle = 0 \iff x = 0$ .

可定义范数  $\|x\|_A := \sqrt{\langle Ax, x \rangle}$ .

### 例 6.3.1

$\mathbb{R}^n$  中的内积和  $n$  阶对称正定矩阵  $M$  一一对应:

$$\langle x, y \rangle_M = \langle Mx, y \rangle.$$

### 定理 6.3.1: Ritz 变分问题

考虑算子方程

$$Ax = b, \tag{6.17}$$

考虑  $\varphi: V \rightarrow \mathbb{R}$

$$\varphi(x) := \frac{1}{2} \|x\|_A^2 - \langle b, x \rangle. \tag{6.18}$$

若算子  $A$  对称正定, 则

$$Ax^* = b \iff x^* = \arg \min_{x \in V} \varphi(x). \tag{6.19}$$

证明. 由  $b = Ax^*$ ,  $\varphi(x^*) = -\|x^*\|_A^2/2$ .  $\forall x \in V$

$$\varphi(x) - \varphi(x^*) = \frac{1}{2} (\|x\|_A^2 - 2\langle Ax^*, x \rangle + \|x^*\|_A^2) = \frac{1}{2} \|x - x^*\|_A^2.$$

故  $\varphi(x) \geq \varphi(x^*)$  且  $\varphi(x) = \varphi(x^*) \iff x = x^*$ . □

因此, 迭代法的选择策略为: 给定  $x^{(k)}$ , 确定  $x^{(k+1)}$  使得

$$\varphi(x^{(k+1)}) < \varphi(x^{(k)}).$$

## 6.3.1 子空间方法

## 定理 6.3.2: 子空间搜索

设  $x + \Phi$  是一个仿射 (affine) 平面, 则

$$y^* = \arg \min_{y \in \Phi} \varphi(x + y) \iff b - A(x + y^*) \perp \Phi.$$

证明. 由于

$$\varphi(x + y) - \varphi(x^*) = \frac{1}{2} \|x + y - x^*\|_A^2$$

故对于  $y^*$  应有

$$\forall y \in \Phi, \langle x^* - (x + y^*), y \rangle_A = 0 \iff x^* - (x + y^*) \perp_A \Phi. \quad \square$$

## 定理 6.3.3: 一维极小搜索方法

给定  $x^{(k)}$  和搜索方向  $p^{(k)} \neq 0$ , 考虑一维极小值问题

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha \in \mathbb{R}} \varphi(x^{(k)} + \alpha p^{(k)}) = \frac{\langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle}{\|p^{(k)}\|_A^2}. \quad (6.20)$$

并使

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \quad (6.21)$$

若  $\alpha_k \neq 0$ , 则  $\varphi(x^{(k+1)}) < \varphi(x^{(k)})$ , 且  $r^{(k+1)} \perp p^{(k)}$ .

证明. 残差  $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ , 则

$$\frac{d}{d\alpha} \varphi(x^{(k)} + \alpha p^{(k)}) = -\langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle + \alpha \|p^{(k)}\|_A^2 = 0. \quad \square$$

## 6.3.2 最速下降法

## 定理 6.3.4: 最速下降法

搜索方向选择  $\varphi$  在  $x^{(k)}$  处下降最快的方向:  $p^{(k)} = r^{(k)}$ , 称为最速下降法 (steepest descent method):

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}, \quad (6.22a)$$

$$\alpha_k = \frac{\|r^{(k)}\|^2}{\|r^{(k)}\|_A^2}, \quad (6.22b)$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)}. \quad (6.22c)$$

则  $\varphi(x^{(k)})$  单调下降且有界  $\varphi(x^*)$ , 极限  $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*$ .

推论. 相邻两次搜索方向是正交的:  $\langle r^{(k+1)}, r^{(k)} \rangle = 0$ , 且

$$r^{(k+1)} = (I - \alpha_k A)r^{(k)}.$$

**定理 6.3.5: 最速下降法的误差收敛性**

记误差  $e^{(k)} := x^{(k)} - x^*$ , 则误差的  $A$ -范数满足

$$\|e^{(k)}\|_A \leq \left( \frac{\text{cond}_2(A) - 1}{\text{cond}_2(A) + 1} \right)^k \|e^{(0)}\|_A. \quad (6.23)$$

引理.  $\forall x \neq 0$ ,

$$\frac{\|x\|_A^2 \|x\|_{A^{-1}}^2}{\|x\|^4} \leq \frac{(\text{cond}_2(A) + 1)^2}{4 \text{cond}_2(A)}. \quad (6.24)$$

证明. 设  $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$  分别是对称正定算子  $A$  的最大最小特征值. 则  $\forall \lambda_i$  为  $A$  的特征值, 满足

$$\frac{1}{\lambda_i} \leq \frac{1}{\lambda_{\min}} + \frac{1}{\lambda_{\max}} - \frac{\lambda_i}{\lambda_{\min} \lambda_{\max}}.$$

则  $\forall x$  且  $\|x\| = 1$ ,

$$\begin{aligned} \frac{\|x\|_A^2 \|x\|_{A^{-1}}^2}{\|x\|^4} &= \frac{\langle Ax, x \rangle \langle A^{-1}x, x \rangle}{\langle x, x \rangle^2} = \sum_i \lambda_i x_i^2 \sum_i \frac{1}{\lambda_i} x_i^2 \\ &\leq \sum_i \lambda_i x_i^2 \left( \frac{1}{\lambda_{\min}} + \frac{1}{\lambda_{\max}} - \frac{1}{\lambda_{\min} \lambda_{\max}} \sum_i \lambda_i x_i^2 \right) \leq \frac{(\lambda_{\max} + \lambda_{\min})^2}{4 \lambda_{\max} \lambda_{\min}}. \end{aligned}$$

由  $A$  对称,  $\text{cond}_2(A) = |\lambda_{\max}| / |\lambda_{\min}|$ , 由  $A$  正定,  $\lambda_{\min} > 0$ . □

证明. 由  $Ae^{(k)} = -r^{(k)}$ , 有  $\langle e^{(k)}, r^{(k)} \rangle_A = -\|r^{(k)}\|^2$ ,  $\|e^{(k)}\|_A = \|r^{(k)}\|_{A^{-1}}$ , 故

$$\begin{aligned} \|e^{(k+1)}\|_A^2 &= \|e^{(k)} + \alpha_k r^{(k)}\|_A^2 = \|e^{(k)}\|_A^2 + \alpha_k^2 \|r^{(k)}\|_A^2 + 2\alpha_k \langle e^{(k)}, r^{(k)} \rangle_A \\ &= \|e^{(k)}\|_A^2 + \alpha_k^2 \|r^{(k)}\|_A^2 - 2\alpha_k \|r^{(k)}\|^2 = \|e^{(k)}\|_A^2 - \frac{\|r^{(k)}\|^4}{\|r^{(k)}\|_A^2} \\ &= \|e^{(k)}\|_A^2 \left( 1 - \frac{\|r^{(k)}\|^4}{\|r^{(k)}\|_A^2 \|r^{(k)}\|_{A^{-1}}^2} \right) \leq \|e^{(k)}\|_A^2 \left( 1 - \frac{4 \text{cond}_2(A)}{(\text{cond}_2(A) + 1)^2} \right) \\ &= \|e^{(k)}\|_A^2 \left( \frac{\text{cond}_2(A) - 1}{\text{cond}_2(A) + 1} \right)^2. \end{aligned}$$

迭代即可得到. □

注. 虽然最速下降法总是收敛的, 但当  $A$  病态时,  $\text{cond}_2(A) \gg 1$ , 收敛速度非常慢; 当  $\|r^{(k)}\|$  很小时, 计算不稳定.

**6.3.3 共轭梯度法**

仍然考虑对称正定矩阵  $A$  和一维极小搜索, 但不再沿着正交的  $r^{(0)}, r^{(1)}, \dots$ , 寻找另一组  $p^{(0)}, p^{(1)}, \dots$  对于第  $k$  次搜索:

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha} \varphi(x^{(k)} + \alpha p^{(k)}), \implies x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)},$$

由于

$$x^{(k+1)} = x^{(0)} + \alpha_0 p^{(0)} + \dots + \alpha_k p^{(k)}.$$

我们希望  $p^{(k)}$  的选取能使得确定  $\alpha_k$  后,  $x^{(k+1)}$  是  $x^{(0)} + \text{span}(p^{(0)}, \dots, p^{(k)})$  中最优的, 即一维极小搜索的结果与  $(k+1)$  维搜索结果相同:

$$(\alpha_0, \dots, \alpha_k) = \arg \min_{(\alpha_0, \dots, \alpha_k)} \varphi(x^{(0)} + \alpha_0 p^{(0)} + \dots + \alpha_k p^{(k)}).$$

### 定义 6.3.2: $A$ - 正交向量组

若向量组  $p_1, \dots, p_n, \dots$  满足  $\forall i \neq j$  均有

$$\langle p_i, p_j \rangle_A = 0, \iff p_i \perp_A p_j. \quad (6.25)$$

则称为  $A$  - 正交向量组, 也称  $A$  - 共轭向量组.

**推论.** 给定一个线性无关的向量组, 可按照 Gram-Schmidt 正交化得到对应的  $A$  - 正交向量组.

### 定理 6.3.6: 多维子空间搜索问题

记  $y \in \text{span}(p^{(0)}, \dots, p^{(k-1)})$ ,  $x = x^{(0)} + y + \alpha p^{(k)}$ ,

$$\varphi(x) = \varphi(x^{(0)} + y) + \alpha \langle y, p^{(k)} \rangle_A - \alpha \langle r^{(0)}, p^{(k)} \rangle + \frac{\alpha^2}{2} \|p^{(k)}\|_A^2.$$

上式出现了交叉项  $\langle y, p^{(k)} \rangle_A$ , 为了简化问题, 自然可考虑使交叉项  $\langle y, p^{(k)} \rangle_A = 0$ , 这要求  $p^{(k)}$  与  $\text{span}(p^{(0)}, \dots, p^{(k-1)})$  是  $A$  - 正交的.

由此便分解成了两个极小问题:

$$\min_x \varphi(x) = \min_y \varphi(x^{(0)} + y) + \min_{\alpha} \left[ -\alpha \langle r^{(0)}, p^{(k)} \rangle + \frac{\alpha^2}{2} \|p^{(k)}\|_A^2 \right]$$

前者满足  $x^{(0)} + y^* = x^{(k)}$ , 后者得到

$$\alpha_k = \frac{\langle r^{(0)}, p^{(k)} \rangle}{\|p^{(k)}\|_A^2} = \frac{\langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle}{\|p^{(k)}\|_A^2}. \quad (6.26)$$

由于  $\langle r^{(0)}, p^{(k)} \rangle = \langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle$ , 故形式其实与 (6.20) 相同. 并且有

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)}. \quad (6.27)$$

**推论.** 由子空间搜索定理 6.3.2,  $r^{(k)} \perp \text{span}(p^{(0)}, \dots, p^{(k-1)})$ .

**注.** 与  $p^{(0)}, \dots, p^{(k-1)}$   $A$  - 正交的  $p^{(k)}$  取法并不唯一.

**共轭梯度法** 当  $r^{(k)} \neq 0$  时,  $p^{(0)}, \dots, p^{(k-1)}, r^{(k)}$  线性无关, 可通过 Gram-Schmidt 正交化得到  $p^{(k)}$ :

$$p^{(k)} = r^{(k)} - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{\langle r^{(k)}, p^{(i)} \rangle_A}{\|p^{(i)}\|_A^2} p^{(i)}, \quad (*)$$

**定理 6.3.7**

$$r^{(k)} \perp_A \text{span}(p^{(0)}, \dots, p^{(k-2)}).$$

证明.  $r^{(k)} \perp \text{span}(p^{(0)}, \dots, p^{(k-1)}) = \text{span}(r^{(0)}, \dots, r^{(k-1)})$ , 由式 (6.27)

$$Ap^{(i)} = \frac{r^{(i+1)} - r^{(i)}}{\alpha_i} \perp r^{(k)}, \quad i = 0, \dots, k-2. \quad \square$$

推论.  $p^{(k)}$  为  $r^{(k)}$  和  $p^{(k-1)}$  的线性组合, 式 (\*) 变为

$$p^{(k)} = r^{(k)} - \frac{\langle r^{(k)}, p^{(k-1)} \rangle_A}{\|p^{(k-1)}\|_A^2} p^{(k-1)} =: r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)}.$$

可以简化系数  $\beta_k$  的计算:

$$\beta_k = -\frac{\langle r^{(k+1)}, p^{(k)} \rangle_A}{\|p^{(k)}\|_A^2} = \frac{\|r^{(k+1)}\|^2}{\alpha_k \|p^{(k)}\|_A^2} = \frac{\|r^{(k+1)}\|^2}{\|r^{(k)}\|^2}.$$

**定理 6.3.8: 共轭梯度法**

共轭梯度法 (conjugate gradient method):  $p^{(0)} = r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ ,

$$\alpha_k = \frac{\|r^{(k)}\|^2}{\|p^{(k)}\|_A^2}, \quad (6.28a)$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \quad (6.28b)$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)}; \quad (6.28c)$$

$$\beta_k = \frac{\|r^{(k+1)}\|^2}{\|r^{(k)}\|^2}, \quad (6.28d)$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}. \quad (6.28e)$$

若  $r^{(k)} = 0$ , 则  $x^{(k)} = x^*$ , 计算终止.

推论. 由于  $r^{(0)}, \dots, r^{(k)}$  两两正交, 理论上最多  $n = \dim(V)$  步可以得到精确解.

**定理 6.3.9: 梯度下降法的误差收敛性**

误差  $e^{(k)} := x^{(k)} - x^*$  的  $A$ -范数满足

$$\|e^{(k)}\|_A \leq 2 \left( \frac{\sqrt{\text{cond}_2(A)} - 1}{\sqrt{\text{cond}_2(A)} + 1} \right)^k \|e^{(0)}\|_A. \quad (6.29)$$

其中  $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$  分别是对称正定算子  $A$  的最大最小特征值.

证明. 记  $\alpha = \lambda_{\min}/\lambda_{\max}$ , 取

$$p_k^*(x) = T_k \left( \frac{2x - (1 + \alpha)}{1 - \alpha} \right) / T_k \left( -\frac{1 + \alpha}{1 - \alpha} \right),$$

其中  $T_k$  是 Chebyshev 多项式, 由于  $|t| \geq 1$  时,

$$T_k(t) = \frac{1}{2} \left[ \left( t + \sqrt{t^2 - 1} \right)^k + \left( t - \sqrt{t^2 - 1} \right)^k \right] \approx \frac{1}{2} \left( |t| + \sqrt{t^2 - 1} \right)^k.$$

则  $\forall x \in (\alpha, 1)$ ,

$$\|p_k^*\|_\infty = 1 / T_k \left( -\frac{1+\alpha}{1-\alpha} \right) \leq 2 \left( \frac{1+\alpha}{1-\alpha} - \sqrt{\left( \frac{1+\alpha}{1-\alpha} \right)^2 - 1} \right)^k = 2 \left( \frac{1-\sqrt{\alpha}}{1+\sqrt{\alpha}} \right)^k. \quad \square$$

### 6.3.4 共轭梯度法的预处理

从误差估计 (6.29) 可以看出, 共轭梯度法的收敛速度强烈依赖于  $A$  的条件数, 当  $A$  病态时收敛得很慢. 为了改善收敛速度, 可以先进行预处理 (preconditioning), 降低矩阵的条件数.

#### 定理 6.3.10: 预处理的共轭梯度算法

给定预处理矩阵  $M$  且对称正定,

$$Ax = b \iff M^{-1}Ax = M^{-1}b,$$

对预处理后的方程应用共轭梯度算法:  $p^{(0)} = M^{-1}r^{(0)}$ ,

$$\alpha_k = \frac{\|r^{(k)}\|_{M^{-1}}^2}{\|p^{(k)}\|_A^2}, \quad (6.30a)$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \quad (6.30b)$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)}; \quad (6.30c)$$

$$\beta_k = \frac{\|r^{(k+1)}\|_{M^{-1}}^2}{\|r^{(k)}\|_{M^{-1}}^2}, \quad (6.30d)$$

$$p^{(k+1)} = M^{-1}r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}. \quad (6.30e)$$

当  $r^{(k)} = 0$  时计算终止.

**推论.** 其误差仍满足式 (6.29), 但条件数改善为  $\text{cond}_2(M^{-1}A)$ .

**注.** 预处理矩阵的选择依据: 方便计算、好近似.

- 代数方法: 分解  $A = M + N$ , 其中  $M = LL^\top$  对称正定、 $L$  尽可能稀疏, 而  $N$  尽可能小, 称为  $A$  的不完全 Cholesky 分解.

比如取为对角部分  $M = D$ , 在  $A$  的对角元素相差较大时收敛速度会大大提高.

- 分析方法: 谱等价,  $\forall x$

$$c_1 \|x\|_A^2 \leq \|x\|_M^2 \leq c_2 \|x\|_A^2,$$

则  $\rho(M^{-1}A) \in [c_2^{-1}, c_1^{-1}]$ .

## 第七章 非线性方程和方程组的数值解法

### 定义 7.0.1: 非线性方程 (组)

给定 (非线性) 光滑 (smooth) 映射  $f: \Omega \rightarrow \mathbb{F}^n$ , 其中  $\Omega \subset \mathbb{F}^n$ , 寻找  $x \in \Omega$  满足方程  $f(x) = 0$ , 称  $x$  是方程的根 (root).

### 例 7.0.1: 非线性方程的例子

- 代数方程:  $p \in \mathcal{P}_n \subset \mathcal{C}^\infty(\mathbb{C})$

$$p(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n = 0,$$

- 超越方程: 如  $3x^2 - e^x = 0$ .

## 7.1 非线性方程的不动点迭代法

迭代法是求解非线性代数方程的重要方法. 其技术路线是将  $f(x) = 0$  的根转化为求解  $\varphi(x, \dots, x)$  的不动点 (fixed point). 再利用不动点迭代:

$$x_{i+1} = \varphi(x_i, x_{i-1}, \dots, x_{i-m}), \quad (7.1)$$

特别地,  $x_{i+1} = \varphi(x_i)$  称为单步方法.

### 7.1.1 迭代法的收敛性

#### 定理 7.1.1: 压缩映像原理

若连续函数  $\varphi \in \mathcal{C}[a, b]$  满足:

- 像集  $\varphi([a, b]) \subset [a, b]$ ;
- Lipschitz 条件:  $\exists L < 1$ , 使得  $\forall x_1, x_2 \in [a, b]$  均有

$$|\varphi(x_2) - \varphi(x_1)| \leq L |x_2 - x_1|.$$

则  $\forall x_0 \in [a, b]$ , 迭代序列  $x_{i+1} = \varphi(x_i)$  收敛到唯一的不动点  $x^*$ . 且

$$|x_k - x^*| \leq \frac{1}{1-L} \min\{|x_{k+1} - x_k|, L|x_k - x_{k-1}|, \dots, L^k|x_1 - x_0|\}. \quad (7.2)$$



证明. 不动点的存在性可由  $\psi(x) = \varphi(x) - x$  的介值定理可得, 唯一性由反证法得到.

对于不等式, 由迭代方程  $x_{i+1} = \varphi(x_i)$ , 可得

$$|x_i - x_{i+1}| = |\varphi(x_{i-1}) - \varphi(x_i)| \leq L |x_{i-1} - x_i|,$$

对  $x_i - x_{i+p}$  进行裂项可得,

$$|x_i - x_{i+p}| \leq |x_i - x_{i+1}| + \cdots + |x_{i+p-1} - x_{i+p}| \leq (1 + L + \cdots + L^{p-1}) |x_i - x_{i+1}|.$$

令  $p \rightarrow \infty$ , 则  $x_{i+p} = x^*$ , 即得.  $\square$

**推论.** 对于连续函数  $\varphi \in C^1[a, b]$ , 将 Lipschitz 条件换为  $\|\varphi'\|_\infty \leq L < 1$ , 同样可得  $\varphi$  在  $[a, b]$  上存在唯一不动点.

**注.** 定理 7.1.1 给出了  $\varphi$  在区间  $[a, b]$  上的全局收敛性. 但很多情况下全局收敛性并不容易检验. 由此引出  $x^*$  邻域上的局部收敛性概念.

#### 定义 7.1.1: 局部收敛性

若  $x^*$  是  $\varphi$  的不动点, 且存在  $x^*$  的邻域  $U$ , 使得  $\forall x^{(0)} \in U$ , 迭代序列  $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}) \in U$  且  $x^{(k)} \rightarrow x^*$ , 则称  $x^*$  是局部收敛的 (local convergence),  $U$  为其局部收敛域.

**推论.** 若  $x^*$  为  $\varphi$  的不动点,  $\varphi$  在  $x^*$  某个邻域  $U$  上连续且  $|\varphi'(x^*)| < 1$ , 则  $x^*$  局部收敛.

#### 定义 7.1.2: 收敛阶

给定收敛序列  $x_n \rightarrow x$ , 若

$$0 < \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - x|}{|x_n - x|^p} \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - x|}{|x_n - x|^p} < +\infty, \quad (7.3)$$

则称序列  $x_n$  是  $p$  阶收敛的, 特别地,  $p = 1$  称为线性收敛,  $p = 2$  称为平方收敛; 若下极限可能为 0, 则称序列  $x_n$  是至少  $p$  阶收敛的; 若上极限为 0, 则称序列  $x_n$  是超  $p$  阶收敛的.

#### 例 7.1.1

- 调和序列  $\{1/n\}$  和等比序列  $\{a^n\}$  ( $|a| < 1$ ) 线性收敛;
- 序列  $\{e^{-n^2}\}$  超线性收敛, 但  $\forall \epsilon > 0$  都不是超  $(1 + \epsilon)$  阶收敛;
- 序列  $\{e^{-e^n}\}$  是  $e$  阶收敛的.

#### 定义 7.1.3: 收敛效率

若序列  $\{x_n\}$  通过某种算法收敛于  $x$ , 收敛阶为  $p$ , 计算每个  $x_n$  的计算量为  $\theta$  (不依赖于  $n$ ), 定义

$$EI := p^{1/\theta},$$

表示收敛效率, 即单位计算量下算法的收敛率.

**定理 7.1.2: 单步迭代法的收敛阶**

若  $\varphi$  在其不动点  $x^*$  上的一个邻域  $U$  上足够光滑, 则  $x_{i+1} = \varphi(x_i)$

在  $x^*$  处  $p$  阶局部收敛  $\iff \varphi'(x^*) = \dots = \varphi^{(p-1)}(x^*) = 0, \varphi^{(p)}(x^*) \neq 0$

证明. 在  $x^*$  上作 Taylor 展开, 对于  $x_k, \exists \xi \in U$  介于  $x_k, x^*$  之间使得

$$\varphi(x_k) = \varphi(x^*) + \varphi'(x^*)(x_k - x^*) + \dots + \frac{\varphi^{(p-1)}(x^*)}{(p-1)!}(x_k - x^*)^{p-1} + \frac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!}(x_k - x^*)^p,$$

而  $\varphi'(x^*) = \dots = \varphi^{(p-1)}(x^*) = 0$ , 故

$$\frac{x_{k+1} - x^*}{(x_k - x^*)^p} = \frac{\varphi(x_k) - \varphi(x^*)}{(x_k - x^*)^p} = \frac{\varphi^{(p)}(\xi)}{p!} \rightarrow \frac{\varphi^{(p)}(x^*)}{p!}.$$

□

**7.1.2 Newton 法****定理 7.1.3: Newton 迭代法**

若  $x_k$  是  $f(x) = 0$  根  $x^*$  的一个近似, 由 Taylor 展开,

$$f(x^*) = f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k) + \mathcal{O}((x^* - x_k)^2),$$

若  $f'(x_k) \neq 0$ , 由  $f(x^*) = 0$ , 可得

$$x^* = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} + \mathcal{O}((x^* - x_k)^2),$$

忽略二阶项, 剩余项作为  $x^*$  新的近似  $x_{k+1}$ , 可得 Newton 迭代法:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (7.4)$$

推论. 对应迭代函数

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}, \implies \varphi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2},$$

故  $\varphi'(x^*) = 0$ , Newton 迭代法是超线性收敛的.

注. Newton 法的几何解释:  $f$  在  $x_k$  处的切线

$$y = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k),$$

与  $x$  轴的交点作为  $x^*$  新的近似  $x_{k+1}$ .

**定理 7.1.4: Newton 迭代法的局部收敛性**

若根  $x^*$  处导数  $f'(x^*) \neq 0$  且  $f''$  在  $x^*$  邻域  $U$  上连续, 则 Newton 法至少二阶收敛.

证明. 由 Taylor 展开,  $\exists \xi \in U$  介于  $x^*, x_k$  之间使得

$$f(x^*) = f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2}(x^* - x_k)^2,$$

而  $f(x^*) = 0$ , 故

$$\frac{x_{k+1} - x^*}{(x_k - x^*)^2} = \frac{f''(\xi)}{2f'(x_k)} \rightarrow \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}.$$

故 Newton 法至少二阶收敛; 当  $f''(x^*) \neq 0$  时, Newton 法就是二阶收敛的.  $\square$

注. Newton 法至少二阶收敛的前提之一是  $f'(x^*) \neq 0$ , 这相当于说  $x^*$  是  $f$  的单重根.

#### 定义 7.1.4: $r$ - 重根

若

$$f(x^*) = f'(x^*) = \cdots = f^{(r-1)}(x^*) = 0, \quad f^{(r)}(x^*) \neq 0,$$

则称  $x^*$  是  $f$  的一个  $r$  - 重根 (multiple root).

推论. 若  $x^*$  是  $f$  的  $r$  - 重根, 则  $\exists \xi, \eta$  介于  $x_k, x^*$  之间使得,

$$\varphi(x_k) = x_k - \frac{f(x^*) + f'(x^*)(x_k - x^*) + \cdots + f^{(r)}(\xi)(x - x^*)^r/r!}{f'(x^*) + f''(x^*)(x_k - x^*) + \cdots + f^{(r)}(\xi)(x - x^*)^r/(r-1)!},$$

故

$$\frac{x_{k+1} - x^*}{x_k - x^*} = 1 - \frac{1}{r} \frac{f^{(r)}(\xi)}{f^{(r)}(\eta)} \rightarrow 1 - \frac{1}{r} \geq \frac{1}{2}.$$

Newton 法变为线性收敛的! 故需要对 Newton 法进行改进.

#### 定理 7.1.5: Newton 法的改进

若  $x^*$  为  $f$  的  $r$  - 重根, 则依前文推论将式 (7.4) 改进为:

$$x_{k+1} = x_k - r \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad (7.5)$$

可以验证这是平方收敛的;

易于验证,  $x^*$  是  $u(x) = f(x)/f'(x)$  的单重根. 故可对  $u(x)$  使用 Newton 法 (7.4).

### 7.1.3 割线法

下面再介绍一种多步迭代方法.

#### 定理 7.1.6: 割线法

以差商

$$f[x_k, x_{k-1}] = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$$

代替 Newton 法中的导数  $f'(x_k)$ , 即

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} f(x_k), \quad (7.6)$$

**定理 7.1.7: 割线法的收敛性**

若在根  $x^*$  的邻域  $U(x^*, \delta) = [x^* - \delta, x^* + \delta]$  上  $f'(x) \neq 0$  且  $f \in C^2(U)$ , 若

$$M = \frac{\max_{x \in U} |f''(x)|}{2 \min_{x \in U} |f'(x)|} < +\infty,$$

则给定  $x_0, x_1 \in U(x^*, \min(\delta, 1/M))$ , 割线法  $(1 + \phi)$  阶收敛到  $x^*$ .

证明. 记  $e_k = x_k - x^*$ , 则

$$e_{k+1} = e_k - \frac{f(x_k) - f(x^*)}{f[x_k, x_{k-1}]} = e_k \frac{f[x_k, x_{k-1}] - f[x_k, x^*]}{f[x_k, x_{k-1}]},$$

故  $\exists \xi, \eta \in U$  使得

$$e_{k+1} = e_k e_{k-1} \frac{f[x_k, x_{k-1}, x^*]}{f[x_k, x_{k-1}]} = e_k e_{k-1} \frac{f''(\xi)}{2f'(\eta)},$$

故

$$|e_{k+1}| \leq |e_k| |e_{k-1}| M \leq |e_k| M \min(\delta, 1/M)$$

由于  $e_k$  至少线性收敛, 故  $\forall \epsilon > 0$ ,  $\exists N > 0$  足够大使得  $\forall k > N$ , 有

$$|e_{k+1}| \stackrel{\epsilon}{\approx} |e_k| |e_{k-1}| M^*, \quad M^* = \frac{|f''(x^*)|}{2|f'(x^*)|},$$

其中  $a \stackrel{\epsilon}{\approx} b$  表示  $|a - b| < \epsilon$ . 对上式取对数得到

$$\ln(M^* |e_{k+1}|) \stackrel{\epsilon'}{\approx} \ln(M^* |e_k|) + \ln(M^* |e_{k-1}|),$$

当  $k \rightarrow \infty$  时, 上式变为等号, 符合 Fibonacci 数列递推式, 故阶数为  $1 + \phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$ .  $\square$

注. Newton 法与割线法比较:

- 割线法不用求导;
- 当  $x_k$  接近  $x^*$  时舍入误差对割线法影响较大;
- 割线法的效率  $EI_1 = 1 + \phi$ ; Newton 法的效率  $EI_2 = 2^{1/\theta}$ , 其中  $\theta$  是计算  $f'(x)$  相对差分的计算量. 当

$$\theta > \frac{1}{\log_2(1 + \phi)} > 1.44$$

时, 割线法效率更高.

**7.1.4 Aitken 加速方法**

由定理 7.1.2, 若  $|\varphi'(x^*)| \in (0, 1)$ , 则迭代收敛速度为线性的. 由于

$$x_{k+2} - x^* = \varphi'(\xi)(x_{k+1} - x^*) \stackrel{\epsilon}{\approx} \varphi'(x^*)(x_{k+1} - x^*),$$

下一项  $x_{k+1} - x^* \stackrel{\epsilon'}{\approx} \varphi'(x^*)(x_k - x^*)$ , 故可联立消掉  $\varphi'(x^*)$ , 得到:

$$x^* \stackrel{\epsilon''}{\approx} x_k - \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{x_{k+2} - 2x_{k+1} + x_k} \equiv x_k - \frac{\Delta x_k^2}{\Delta^2 x_k}. \quad (7.7)$$

其中差分  $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$ , 而  $\Delta^2 x_k = \Delta x_{k+1} - \Delta x_k$ . 和微分记号约定一样,  $\Delta x_k^2 \equiv (\Delta x_k)^2$ , 而  $\Delta(x_k^2)$  需要加括号.

**定理 7.1.8: Aitken 加速方法**

若  $\exists \lambda$  且  $|\lambda| < 1$  使

$$x_{k+1} - x^* = (\lambda + \delta_k)(x_k - x^*),$$

且  $\delta_k \rightarrow 0$ , 当  $k$  充分大时, 可定义

$$x'_k := x_k - \frac{\Delta x_k^2}{\Delta^2 x_k}, \quad (7.8)$$

并且  $x'_k$  收敛比  $x_k$  快:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x'_k - x^*}{x_k - x^*} = 0.$$

证明. 记  $e_k := x_k - x^*$ , 则

$$\Delta x_k = e_{k+1} - e_k = e_k[(\lambda - 1) + \delta_k],$$

$$\Delta^2 x_k = e_{k+2} - 2e_{k+1} + e_k = e_k[(\lambda + \delta_{k+1})(\lambda + \delta_k) - 2(\lambda + \delta_k) + 1] = e_k[(\lambda - 1)^2 + \mu_k],$$

其中  $\mu_k = \lambda(\delta_{k+1} + \delta_k) - 2\delta_k + \delta_k\delta_{k+1} \rightarrow 0$ . 当  $k$  充分大时,  $\Delta^2 x_k \neq 0$ , 故可定义  $x'_k$ , 且

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x'_k - x^*}{x_k - x^*} = \lim_{k \rightarrow \infty} 1 - \frac{[(\lambda - 1) + \delta_k]^2}{(\lambda - 1)^2 + \mu_k} = 0. \quad \square$$

注. Aitken 加速方法只需给定序列  $x_k$ , 其公式 (7.8) 与序列  $x_k$  的产生方法  $\varphi$  无关.

**7.1.5 Steffensen 迭代法****定理 7.1.9: Steffensen 迭代法**

对 Aitken 加速公式 (7.8) 利用  $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ ,  $x_{k+2} = \varphi(\varphi(x_k))$  作为新的迭代公式:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{(\varphi(x_k) - x_k)^2}{\varphi(\varphi(x_k)) - 2\varphi(x_k) + x_k} = \frac{x_k\varphi(\varphi(x_k)) - \varphi(x_k)^2}{\varphi(\varphi(x_k)) - 2\varphi(x_k) + x_k}.$$

这实际上根据  $\varphi$  定义了新的迭代函数

$$\psi(x) = \frac{x\varphi(\varphi(x)) - \varphi(x)^2}{\varphi(\varphi(x)) - 2\varphi(x) + x}. \quad (7.9)$$

若  $x^*$  是  $\psi$  的不动点, 则  $x^*$  也是  $\varphi$  的不动点;

若  $x^*$  是  $\varphi \in C^1(U)$  的不动点且  $\varphi'(x^*) \neq 1$ , 则  $x^*$  是  $\psi$  的不动点.

证明. 由  $\psi$  表达式可得

$$(x - \psi(x))(\varphi(\varphi(x)) - 2\varphi(x) + x) = (\varphi(x) - x)^2,$$

故  $\psi(x^*) = x^* \implies \varphi(x^*) = x^*$ ;

相反,  $\varphi(x^*) = x^*$  时,  $\psi(x^*)$  分子分母均为 0, L'Hôpital 法则给出

$$\psi(x^*) = \frac{\varphi(\varphi(x^*)) + x^*\varphi'(\varphi(x^*))\varphi'(x^*) - 2\varphi(x^*)\varphi'(x^*)}{\varphi'(\varphi(x^*))\varphi'(x^*) - 2\varphi'(x^*) + 1} = x^*. \quad \square$$

注. 证明中分母出现了  $\varphi'(x^*) - 1$ , 故要求  $\varphi'(x_k) \neq 1$ , 即  $x^*$  不是  $\varphi(x) - x = 0$  的重根. 但事实上  $\varphi'(x^*) = 1$  也可以证明  $\psi(x^*) = x^*$ .

**定理 7.1.10: Steffensen 迭代法的收敛阶**

若  $x_{k+1} = \varphi(x_k)$  是  $p$  阶收敛的 ( $p > 1$ ), 则  $x_{k+1} = \psi(x_k)$  是  $(2p - 1)$  阶收敛的.  
若  $p = 1$  且  $\varphi'(x^*) \neq 1$ , 则  $x_{k+1} = \psi(x_k)$  是二阶收敛的.

证明. 由下式可得:

$$\psi(x) - x^* = \frac{(x - x^*)(\varphi(\varphi(x)) - x^*) - (\varphi(x) - x^*)^2}{\varphi(\varphi(x)) - x^* - 2(\varphi(x) - x^*) + x - x^*}. \quad \square$$

注. 若  $\varphi \in C^2(U)$  且  $\varphi'(x^*) \neq 1$ , 则 Steffensen 法不但可以提高收敛速度 (至少二阶收敛), 在  $|\varphi'(x^*)| > 1$  时还可以把不收敛的方法改进为二阶收敛的方法.

但当  $p > 1$  时, Steffensen 法一般好处不大, 故其多用于改进线性收敛的情形.

## 7.2 非线性方程组的不动点迭代法

**定义 7.2.1: 向量值函数**

向量值函数是一个映射  $F: D \rightarrow \mathbb{R}^n$ , 其中  $D \subset \mathbb{R}^n$ , 其分量是多元标量函数  $f_i: D \rightarrow \mathbb{R}$ :

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_m(x_1, \dots, x_n) \end{bmatrix} \quad (7.10)$$

**定义 7.2.2: 向量值函数的连续性**

给定点  $x_0 \in D$ , 若  $\forall \epsilon > 1, \exists \delta > 0$  使得领域内  $\forall x \in B(x_0, \delta) \subset D$  均有

$$\|F(x) - F(x_0)\| < \epsilon,$$

则称  $F$  在  $x_0$  处连续.

**定义 7.2.3: 向量值函数的导数**

给定  $x \in D$  和充分小  $h$  使得  $x + h \in D$ , 若存在矩阵  $A(x) \in \mathbb{R}^{m \times n}$  满足

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\|F(x+h) - F(x) - A(x)h\|}{\|h\|} = 0, \quad (7.11)$$

则称  $F$  在  $x$  处可微,  $A(x) =: F'(x)$  称为  $F$  的导数, 事实上就是 Jacobi 矩阵:

$$F'(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (7.12)$$

**定理 7.2.1: 压缩映像原理 (向量形式)**

连续函数  $\varphi: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  满足:

- 闭性:  $D$  是闭集;
- 映内性:  $\varphi(D) \subset D$ ;
- 压缩性:  $\exists L < 1$ , 使得  $\forall x_1, x_2 \in D$ ,

$$\|\varphi(x_2) - \varphi(x_1)\| \leq L \|x_2 - x_1\|,$$

则  $\forall x_0 \in D$ , 迭代序列  $x_{k+1} = \varphi(x_k)$  收敛到  $\varphi$  唯一的不动点  $x^*$ .

注. 压缩性依赖于范数的选择. 如  $\varphi(x) = Ax$ , 其中

$$A = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.9 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}$$

在 2-范数下  $\|A\|_2 < 1$  可压缩, 但在无穷范数下  $\|A\|_\infty = 1$  不可压缩.

**定义 7.2.4: 局部收敛性 (向量形式)**

给定  $\varphi(x^*)$  的不动点, 若存在  $x^*$  的一个邻域  $S \subset D$  使得  $\forall x^{(0)} \in S, x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}) \in S$  且  $x^{(k)} \rightarrow x^*$ , 则称  $x^*$  是局部收敛的.

**定理 7.2.2**

若  $\exists L \in (0, 1)$  和某个范数  $\|\cdot\|$  使得  $\forall x \in S(x^*, \delta)$  均有

$$\|\varphi(x) - \varphi(x^*)\| \leq L \|x - x^*\|,$$

则  $x^*$  是局部收敛的.

推论. 一个充分条件: 若存在一个算子范数使得  $\|\varphi'(x^*)\| < 1$ , 则  $x^*$  是局部收敛的.

**定理 7.2.3: Newton 法 (向量形式)**

给定  $x^{(0)}$ , 计算

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - F'(x^{(k)})^{-1} F(x^{(k)}).$$

注. Newton 法的一个显著缺点是需要反复计算  $F'$ . 可借鉴割线法改进.

**定理 7.2.4: 修正的 Newton 法**

将 Jacobi 矩阵  $F'(x^{(k)})$  替换为矩阵  $A^{(k)}$ :

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - A^{(k)^{-1}} F(x^{(k)}),$$

矩阵  $A^{(k)}$  满足拟 Newton 方程:

$$A^{(k)}(x^{(k)} - x^{(k-1)}) = F(x^{(k)}) - F(x^{(k-1)}), \quad (7.13)$$

显然  $A^{(k)}$  的取法并不唯一, 可以迭代地写成

$$A^{(k+1)} = A^{(k)} + \Delta A^{(k)},$$

且  $\text{rank}(A^{(k)})$  一般为 1 或 2, 即  $A^{(k+1)}$  是  $A^{(k)}$  的一个低秩修正.

#### 定理 7.2.5: Broyden 秩 1 方法

令  $p^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$ ,  $q^{(k)} = F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)})$ , 设  $\Delta A^{(k)} = u^{(k)}v^{(k)\top}$  是秩 1 矩阵, 则

$$(A^{(k)} + u^{(k)}v^{(k)\top})p^{(k)} = q^{(k)}, \implies u^{(k)} = \frac{q^{(k)} - A^{(k)}p^{(k)}}{v^{(k)\top}p^{(k)}},$$

可令  $v^{(k)} = p^{(k)}$ , 则

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - A^{(k)-1}F(x^{(k)}), \quad (7.14a)$$

$$\Delta A^{(k)} = \frac{(q^{(k)} - A^{(k)}p^{(k)})p^{(k)\top}}{\|p^{(k)}\|^2}, \quad (7.14b)$$

$$A^{(k+1)} = A^{(k)} + \Delta A^{(k)}. \quad (7.14c)$$