Numerical Computing Methods
数值计算方法

LI, Xiao Peng
李晓鹏

(Email: x.p.li@szu.edu.cn)

Shenzhen University

4 Dec. 2023

逐次逼近法

逐次逼近法

1. **基本概念**
2. 线性方程组的迭代法
3. 非线性方程的迭代法

基本概念

逐次逼近法也称为迭代法，它是对所求问题建立一种规则，将所求问题转化为利用初值或已求出的元素计算后继元素，从而形成一个序列。该法在数值计算上有着广泛地应用。

由于逐次逼近法设计两个元素得逼近问题，所以，首先应明确非实数之间得距离以及极限过程得收敛性概念。

我们已知：

- 一维空间，距离原点的距离： $|x|$;
- 二维空间，距离原点的距离： $\sqrt{x^2+y^2}$;
- 三维空间，距离原点的距离： $\sqrt{x^2+y^2+z^2}$;

有必要给出一种实用更广泛、应用更灵活且又具有普通长度所具有的特征的“度量”概念。

向量与矩阵的范数

定义: 设 $\mathbb{R}$ 是一个数域, V 是一个线性空间。若 V 中的任一元素 x 都对应一个实数 $N(x)$, 即 $N(x)$ 是 V 上的实值函数, 且满足如下条件

(1) $N(x) \geq 0$, 当且仅当 $x = \theta$ (零元素) 时 $N(x) = 0$; （正定性）

(2) $N(\alpha x) = |\alpha| N(x), x \in \mathbb{R}$ (齐次性)

(3) $N(x+y) \leq N(x) + N(y) \quad , x, y \in V$ (三角不等式)

则称 $N(x)$ 是 V 上的一个范数, 记为 $\|x\|$, 即 $N(x) = \|x\|$ 表示 x 的范数。

若在 V 中具有“乘法” 运算, 则可增加一个条件:
对任意 $x, y \in V$, 则 $x \cdot y \in V$ 时，满足如下条件

$$\|x \cdot y\| \leq \|x\| \|y\|$$

向量范数

设 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^T\in\mathbb{R}^n$, 常用的四种范数定义如下:
1. 向量的 ℓ_2-范数, 也称欧氏范数, 记为

$$\|\boldsymbol{x}\|_2=<\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}>^{1/2}=\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)^{1/2}$$

或

$$\|\boldsymbol{x}\|_2=\left(\sum_{i=1}^{n}\bar{x}_i x_i\right)^{1/2}\qquad \boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$$

其中，$\bar{x}_i$ 是 x_i 的共轭复数。

若 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^T\in\mathbb{R}^n$， $\boldsymbol{y}=[y_1,y_2,\cdots,y_n]^T\in\mathbb{R}^n$, 则

$$\boldsymbol{x}^T\cdot\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}^T\cdot\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}y_i x_i$$

向量范数

2. 向量的 ∞-范数, 也称最大范数, 记为

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max_{1\le i\le n} |x_i| = \max_{1\le i\le n} \{|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_n|\}$$

3. 向量的 ℓ_1-范数, 记为

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

4. 向量的 ℓ_p-范数, 记为

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

上述四种常用的实值函数都满足正定性、齐次性和三角不等式。

矩阵的范数

如无特殊说明，线性空间为 $V=\mathbb{R}^{n\times n}$。 V 中存在矩阵乘积运算，因此定义矩阵范数应满足

$$\|\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}\|\leq\|\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{B}\|$$

定义：设 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，且 $\|\boldsymbol{x}\|_v$ 是一种向量范数，则

$$\|\boldsymbol{A}\|_v=\max_{x\neq 0}\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_v}{\|\boldsymbol{x}\|_v}=\max_{\|\boldsymbol{x}\|_v=1}\|\boldsymbol{A}x\|_v$$

称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的算子范数。

显然算子范数满足：$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_v\leq\|\boldsymbol{A}\|_v\|\boldsymbol{x}\|_v$

注意： 矩阵的算子范数是矩阵范数，但是反之不一定成立。

矩阵的范数

矩阵算子范数的常用三种形式:

设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$

1. 矩阵的行范数: 绝对值最大的行和

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\infty}=\max_{1\leq i\leq n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

2. 矩阵的列范数: 绝对值最大的列和

$$\|\boldsymbol{A}\|_{1}=\max_{1\leq j\leq n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$

3. 矩阵的 ℓ_2-范数:

$$\|\boldsymbol{A}\|_{2}=\sqrt{\lambda_{\max}\left(\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A}\right)}$$

其中，λ_{max} $\left(\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A}\right)$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A}$ 的绝对值最大的特征值。

矩阵的范数

定义： 对于给定的向量范数 $\|\cdot\|_v$ 与矩阵范数 $\|\cdot\|_u$, 若对任何 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, x \in \mathbb{R}^n$, 都有

$$\|\boldsymbol{Ax}\|_v \leq \|\boldsymbol{A}\|_u \cdot \|\boldsymbol{x}\|_v$$

则称所给向量范数 $\|\cdot\|_v$ 与矩阵范数 $\|\cdot\|_u$ 相容。

4. 矩阵的 Frobenius-范数:

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{1/2}$$

[-] 简称为 $\boldsymbol{A}$ 的 F-范数。

可以验证: F-范数满足范数定义中的 4 个条件，但是 F-范数不是算子范数。

例题

例：设

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

求 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty$、$\|\boldsymbol{A}\|_1$、$\|\boldsymbol{A}\|_2$ 和 $\|\boldsymbol{A}\|_F$.

例题

例：设

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

求 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty$、$\|\boldsymbol{A}\|_1$、$\|\boldsymbol{A}\|_2$ 和 $\|\boldsymbol{A}\|_F$.

解

$$\|\boldsymbol{A}\|_1=\max\{(1+1+0),(2+2+1),(0+1+1)\}=5$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_\infty=\max\{(1+2+0),(1+2+1),(0+1+1)\}=4$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_F=(1+4+1+4+1+1+1)^{1/2}=\sqrt{13}\approx 3.6056$$

例题

例：设

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&2&0\\-1&2&-1\\0&1&1\end{bmatrix}$$

求 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty$、$\|\boldsymbol{A}\|_1$、$\|\boldsymbol{A}\|_2$ 和 $\|\boldsymbol{A}\|_F$.

解

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2&0&1\\0&9&-1\\1&-1&2\end{bmatrix}$$

$$\det\left(\lambda I-\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\right)=\begin{vmatrix}\lambda-2&0&-1\\0&\lambda-9&1\\-1&1&\lambda-2\end{vmatrix}=\lambda^3-13\lambda^2+38\lambda-25=0$$

解得 $\lambda_1=9.1428,\lambda_2=2.9211,\lambda_3=0.9361$。

因此

$$\|\boldsymbol{A}\|_2=\sqrt{9.1428}\approx 3.0237$$

矩阵的范数

定义 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的特征值为 $\lambda_i(i=1,2,\cdots,n)$, 称

$$\rho(\boldsymbol{A}) = \max_{1\le i\le n} |\lambda_i|$$

为 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径。注: 对一切范数 $\|\cdot\|$, 都有

$$\rho(\boldsymbol{A}) \le \|\boldsymbol{A}\|$$

定理 如果 $\|\boldsymbol{A}\| < 1$, 则 $\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵, 且

$$\left\|(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{-1}\right\| \le \frac{1}{1-\|\boldsymbol{A}\|}$$

其中, $\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵, $\|\cdot\|$ 为矩阵的算子范数。

误差分析介绍

第一章中曾提到数值问题的性态会对问题的计算精度产生很大影响，但是如何判断数值问题的性态只是作了定性的描述，没有给出定量的判别方法。在此，我们以求解线性方程组为例，介绍如何度量方程组性态。

定义： 如果线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 中, $\boldsymbol{A}$ 或 $\boldsymbol{b}$ 的元素的微小变化就会引起方程组解的巨大变化, 则称该方程组为“病态” 方程组, $\boldsymbol{A}$ 为“病态” 矩阵; 否则成该方程组为“良态” 方程组, $\boldsymbol{A}$ 为“良态” 矩阵。

在 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 中, 设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵, $\boldsymbol{x}$ 为精确解。若 $\boldsymbol{b}$ 有误差 $\delta\boldsymbol{b}$, 则引起解变化, 设为 $\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x}$, 即

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

因此

$$\boldsymbol{A}\delta\boldsymbol{x}=\delta\boldsymbol{b}\Rightarrow\delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{b}$$

取范数, 得

$$\|\delta\boldsymbol{x}\|=\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{b}\right\|\leq\left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|\|\delta\boldsymbol{b}\|$$

误差分析介绍

因

$$\|\boldsymbol{b}\| = \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\| \le \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{x}\| \Rightarrow \frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|} \le \frac{\|\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$$

所以

$$\frac{\|\delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \le \|\boldsymbol{A}\| \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\| \frac{\|\delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$$

即常数项产生的相对误差，可能将解的相对误差放大 $\|A\|\|A^{-1}\|$ 倍。

类似分析，若 $\boldsymbol{A}$ 有误差 $\delta\boldsymbol{A}$，所得解 $\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x}$，则

$$\frac{\|\delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \le \frac{\|\boldsymbol{A}\| \cdot \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\| \frac{\|\delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}}{1 - \|\boldsymbol{A}\| \cdot \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\| \frac{\|\delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}}$$

大体上，系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 产生的相对误差，将解的相对误差有可能放大 $\|\boldsymbol{A}\| \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|$ 倍。

$\|\boldsymbol{A}\| \left\|\boldsymbol{A}^{-1}\right\|$ 刻画了线性方程组中原始数据变化对解的影响，即刻画了方程组的性态。

误差分析介绍

定义: 设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵, $\|\cdot\|$ 为矩阵的算子范数, 则称

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|$$

为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数。

当 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 很大时, $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 是“病态” 的;
当 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 很小时, $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 是“良态” 的。

$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 的下限是多少?

误差分析介绍

定义: 设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵, $\|\cdot\|$ 为矩阵的算子范数, 则称

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|$$

为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数。

当 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 很大时, $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 是“病态” 的;
当 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 很小时, $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 是“良态” 的。

$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 的下限是多少?

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\| \geq \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}\| = \|\boldsymbol{I}\| = 1$$

误差分析介绍

直观判断 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 性态的方法:

- 用主元消去法求解时出现小主元;
- 某些行 (列) 几乎线性相关;
- 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素间数量级相差很大, 且无规律;
- 当 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\overline{\boldsymbol{x}}$ 的 $\|\boldsymbol{r}\|$ 很小时, $\bar{\boldsymbol{x}}$ 作为解精度仍不够;

出现上述情况之一, 方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 可能 “病态”。

对于“病态”方程组的求解，常用的方法和措施：

- 提高原始数据和运算的精度。
- 用适当方法改善原始模型的性态，例如降低矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数。

逐次逼近法

线性方程组的迭代法

由第二章可知, 利用直接法可解线性方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{6.1}$$

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

问题: 直接法中, 系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 在不断变化, $\boldsymbol{A}$ 的阶数高, 则占用内存就大; 且程序较复杂, 程序设计的技巧也较高.

迭代法的思路利用迭代法求解 (6.1), 先将它变形为如下等价方程组:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{f} \tag{6.2}$$

其中, $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 被称为迭代矩阵。

注: 利用不同的方法构造 (6.2) 可得到不同的迭代法。

线性方程组的迭代法

迭代过程:
取初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 代入 (6.2), 得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{(1)} &= \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{f} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} &= \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(1)} + \boldsymbol{f} \\ \boldsymbol{x}^{(3)} &= \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(2)} + \boldsymbol{f} \\ &\vdots\end{aligned}$$

一般形式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}, \quad (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{6.3}$$

称上述求解的方法为求解线性方程的迭代法, 或迭代过程或迭代格式。

线性方程组的迭代法

迭代收敛:
当 $k \to \infty$ 时, 若由 (6.3) 所得到的序列 $\boldsymbol{x}^{(k)} \to \boldsymbol{x}^*$, 即

$$x_i^{(k)} \to x_i^*, \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

其中, $\boldsymbol{x}^{(k)} = \left(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)}\right)^T, \boldsymbol{x}^* = (x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)^T$, 或写成

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^* \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty} x_i^{(k)} = x_i^* \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

则称迭代法收敛, 否则迭代法发散。

若迭代法收敛, 则由 (6.3) 得

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

即 $\boldsymbol{x}^*$ 为方程组 (6.2) 的解, 从而也是 (6.1) 的解。

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

简单迭代法

简单迭代法又称为基本迭代法。可以有多种形式的推广。

设线性方程组的一般形式为

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

简单迭代法

设矩阵 $A = (a_{ij})_{n\times n}$ 为非奇异, 且 $a_{ii} \neq 0$, 则

$$
\begin{cases}
x_1 = \dfrac{1}{a_{11}} \left[b_1 - \displaystyle\sum_{j=2}^{n} a_{1j} x_j \right] \\
x_2 = \dfrac{1}{a_{22}} \left[b_2 - \displaystyle\sum_{j=1, j\neq 2}^{n} a_{2j} x_j \right] \\
\quad \vdots \\
x_i = \dfrac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \displaystyle\sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij} x_j \right] \\
\quad \vdots \\
x_n = \dfrac{1}{a_{nn}} \left[b_n - \displaystyle\sum_{j=1}^{n-1} a_{nj} x_j \right]
\end{cases}
$$

简单迭代法

即

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

$$(k = 0, 1, 2, \cdots, i = 1, 2, \cdots, n)$$

上式等价为

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

$$(k = 0, 1, 2, \cdots, i = 1, 2, \cdots, n)$$

即

$$\begin{cases} x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \Delta x_i, \\ \Delta x_i = \dfrac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \displaystyle\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right], \\ \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots, i = 1, 2, \cdots, n) \end{cases}$$

上述迭代法被称为 Jacobi 迭代法

简单迭代法

设

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

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} 0 & & & & & 0 \\ -a_{21} & 0 & & & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & & & \\ -a_{j1} & & -a_{jj-1} & 0 & & \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{nj-1} & \cdots & -a_{nn-1} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1j} & \cdots & -a_{1n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & 0 & -a_{j-1,j} & \cdots & -a_{j-1,n} \\ & & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & & 0 & -a_{n-1,n} \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}$$

简单迭代法

则

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= \boldsymbol{D} - \boldsymbol{L} - \boldsymbol{U} \\ \boldsymbol{D}\boldsymbol{x} &= (\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{x} &= \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \end{aligned}$$

令

$$\begin{aligned} \boldsymbol{B}_J &= \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}), \\ \boldsymbol{f} &= \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \end{aligned}$$

得 (6.1) 的等价方程组为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}_J\boldsymbol{x} + \boldsymbol{f}$$

迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}_J\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}, \quad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

例题

例：用 Jacobi 迭代格式解线性方程组

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 12 \end{cases}$$

例题

例：用 Jacobi 迭代格式解线性方程组

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 12 \end{cases}$$

解: 其矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}^{(k+1)} = \begin{bmatrix} 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 1/11 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 3 & -2 \\ -4 & 0 & 1 \\ -2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}^{(k)} + \begin{bmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0.375 & -0.25 \\ -0.363636 & 0 & 0.090909 \\ -0.5 & -0.25 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}^{(k)} + \begin{bmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix}$$

例题

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

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + (2.5,3,3)^T = (2.5,3,3)^T$$

$$\boldsymbol{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0.375 & -0.25 \\ -0.363636 & 0 & 0.090909 \\ -0.5 & -0.25 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.875 \\ 2.363 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{x}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 & 0.375 & -0.25 \\ -0.363636 & 0 & 0.090909 \\ -0.5 & -0.25 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2.875 \\ 2.363 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2.5 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.136 \\ 2.045 \\ 0.972 \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

$$\boldsymbol{x}^{(10)} = (3.000032, 1.999838, 0.999881)^T$$

Gauss-Seidel迭代法

我们已知

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

对上述方程进行一下改进，得

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

令

$$\boldsymbol{B}_G = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}; \boldsymbol{f}_G = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

得到 Gauss–Seidel 迭代法, 简称 G–S 法

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

元素形式：

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right],$$
$$(k=0,1,2,\cdots,i=1,2,\cdots,n)$$

例题

例：将下面线性方程组写成G-S迭代格式，并求解

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 12 \end{cases}$$

例题

例：将下面线性方程组写成G-S迭代格式，并求解

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 12 \end{cases}$$

解

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = 2.5 + 0.375x_2^{(k)} - 0.25x_3^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} = 3 - 0.363636x_1^{(k+1)} + 0.090909x_3^{(k)} \\ x_3^{(k+1)} = 3 - 0.5x_1^{(k+1)} - 0.25x_2^{(k+1)} \end{cases}$$

取初始向量 $x^{(0)} = [0, 0, 0]^T$ 代入上式，得

$$x^{(1)} = [2.5, 2.090909, 1.768939]^T$$

$$\vdots$$

$$x^{(5)} = [2.999843, 2.000072, 1.000061]^T$$

迭代法的收敛性

设某种迭代格式

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

且该方程组的精确解为 $\boldsymbol{x}^*$, 则

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

因此

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)} &= \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\right) \\ &= \boldsymbol{B}\varepsilon^{(k)} = \boldsymbol{B}^2\varepsilon^{(k-1)} = \cdots = \boldsymbol{B}^{k+1}\varepsilon^{(0)} \end{aligned}$$

其中, $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} = x^{(0)} - x^*$ 是一个非零的不变向量。

于是当 $k \to +\infty$, $\boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)} \to \mathbf{0}$ 时，有

$$\begin{aligned} \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B}^{k+1}\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} &= \mathbf{0} \\ \Rightarrow \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B}^{k} &= \mathbf{0} \end{aligned}$$

迭代法的收敛性

定理 2: 迭代法 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}$ 对任意 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{f}$ 均收敛的充分必要条件为

$$\rho(\boldsymbol{B}) < 1$$

由于 $\rho(\boldsymbol{B}) \leq \|\boldsymbol{B}\|$, 得

定理 3: 若 $\|\boldsymbol{B}\| < 1$, 则迭代法 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}$ 收敛。

定理 4: 若 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 中的 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$ 为按行严格对角占优, 则 Jacobi 法和 G-S 法均收敛。

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

例题

如何处理下面方程组，确保在使用 G-S 法时，解收敛。

$$\begin{cases} 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 12 \end{cases}$$

非线性方程的迭代法

问题: 设非线性方程

$$f(\boldsymbol{x}) = 0$$

求一数 $\bar{\boldsymbol{x}}$, 使 $f(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$, 称 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 为上述方程的根。

例如:

$$\begin{cases} xy - z = 1 \\ xyz + y^2 = 2 \\ e^x + z = 3 \end{cases}$$

当前流行得深度神经网络 (Deep Neural Networks) 几乎都是非线性方程。

非线性方程的迭代法

假设: 函数 $f(x)$ 是连续的, 它在坐标系 Oxy 中的图象为连续曲线。

- 若在区间 $[a, b]$ 上只有一个根, 称 $[a, b]$ 为单根区间;
- 若在区间 $[a, b]$ 上有多个根, 称为多根区间;

统称为有根区间。

实际问题中，大多是多跟问题。

简单迭代法

先将方程 $f(\boldsymbol{x})=0$ 化为一个与它同解的方程

$$\boldsymbol{x}=\varphi(\boldsymbol{x})$$

即 $f(\bar{\boldsymbol{x}})=0$ 充分必要条件是 $\bar{\boldsymbol{x}}=\varphi(\bar{\boldsymbol{x}})$

然后, 任取一个初始值 $\boldsymbol{x}_0$, 进行如下迭代

$$\boldsymbol{x}_1=\varphi\left(\boldsymbol{x}_0\right), \boldsymbol{x}_2=\varphi\left(\boldsymbol{x}_1\right), \cdots, \boldsymbol{x}_{k+1}=\varphi\left(\boldsymbol{x}_k\right), \cdots$$

即迭代公式为

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\varphi\left(\boldsymbol{x}_k\right), \quad(k=0,1,2, \cdots)$$

称上述过程为求解非线性方程的简单迭代法, 或迭代法或迭代过程或迭代格式, $\varphi(\boldsymbol{x})$ 称为迭代函数, $\boldsymbol{x}_k$ 称为第 k 步的迭代值或简单迭代值。

迭代收敛

如果由迭代法产生的数列收敛，即当 $k \to \infty$ 时，$\boldsymbol{x}_k \to \bar{\boldsymbol{x}}$，则称迭代法收敛；否则称发散。

显然，收敛时有

$$f(\bar{\boldsymbol{x}}) \equiv 0$$

证明？

迭代收敛

如果由迭代法产生的数列收敛，即当 $k \to \infty$ 时，$\boldsymbol{x}_k \to \bar{\boldsymbol{x}}$，则称迭代法收敛；否则称发散。

显然，收敛时有

$$f(\bar{\boldsymbol{x}}) \equiv 0$$

证明？

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \varphi(\bar{\boldsymbol{x}}) \Leftrightarrow f(\bar{\boldsymbol{x}}) \equiv 0$$

迭代函数的构造方法很多，例如，

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - f(\boldsymbol{x}) = \varphi(\boldsymbol{x})$$
$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - k(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x}) = \varphi(\boldsymbol{x}), k(\boldsymbol{x}) \neq 0$$

例题

例：用迭代法求 $f(x) = 2x^3 - x - 1 = 0$ 的根

例题

例：用迭代法求 $f(x) = 2x^3 - x - 1 = 0$ 的根

解: 用以下两种方法:
1) 化方程为等价方程

$$x = \sqrt[3]{\frac{x+1}{2}} = \varphi(x)$$

取初始值 $x_0 = 0$, 则迭代值为

$$\begin{aligned}
x_1 &= \sqrt[3]{\frac{1}{2}} = \sqrt[3]{0.5} \approx 0.79 \\
x_2 &= \sqrt[3]{\frac{x_1+1}{2}} = \sqrt[3]{\frac{1+0.79}{2}} = \sqrt[3]{0.895} \approx 0.964 \\
x_3 &= \sqrt[3]{\frac{x_2+1}{2}} = \sqrt[3]{\frac{1+0.964}{2}} = \sqrt[3]{0.982} \approx 0.994 \\
&\vdots
\end{aligned}$$

显然, 当 $k \to \infty$ 时, $x_k \to 1$, 且 $f(1) = 0$

例题

2) 化方程为等价方程

$$x = 2x^3 - 1 = \varphi(x)$$

取初始值 $x_0 = 0$, 则迭代值为

$$\begin{aligned} x_1 &= 2 \times 0 - 1 = -1 \\ x_2 &= 2 \times (-1)^3 - 1 = -3 \\ x_3 &= 2 \times (-3)^3 - 1 = -55, \cdots \end{aligned}$$

显然, 当 $k \to \infty$ 时, $x_k \to -\infty$ 。故迭代法发散。

由上例可以看出, 迭代法的收敛与发散, 与迭代函数的构造有关。

迭代法收敛的条件

定理 设迭代函数 $\varphi(x)$ 满足

- 当 $x \in [a, b]$ 时, $a \leq \varphi(x) \leq b$
- 存在实数 $0 < L < 1$, 对任意 $x \in [a, b]$, 都有

$$|\varphi'(x)| \leq L$$

则 $x = \varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 内存在唯一根 $\bar{x}$, 并且对任意初始值 $x_0 \in [a, b]$, 迭代法

$$x_{k+1} = \varphi\left(x_k\right), \quad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

收敛于 $\bar{x}$, 且满足

$$|x_k - \bar{x}| \leq \frac{L}{1 - L} |x_k - x_{k-1}|$$

$$|x_k - \bar{x}| \leq \frac{L^k}{1 - L} |x_1 - x_0|$$

$L \to 0$ or $L \to 1$ 收敛快?

迭代法收敛的速度

收敛的阶: 设迭代序列 $x_k \to \bar{x}, k \to \infty$

定义：若存在实数 $p \geq 1$ 和 $c > 0$ 满足

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p} = \lim_{k\to\infty} \frac{|x_{k+1} - \bar{x}|}{|x_k - \bar{x}|^p} = c$$

则称迭代法为 p 阶收敛。

- 当 $p = 1$ 时称为线性收敛;
- 当 $p > 1$ 时称为超线性收敛;
- 当 $p = 2$ 时称为平方收敛。

Newton迭代法及其变形

构造迭代函数是迭代法中很关键的一步, Newton迭代法是按照如下方式构造:
对一切非线性方程 $f(\boldsymbol{x}) = 0$, 总可构造如下函数:

$$\boldsymbol{x} = \varphi(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} - k(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x}), \quad k(\boldsymbol{x}) \neq 0$$

作为方程 $f(\boldsymbol{x}) = 0$ 求解的迭代函数。因

$$\varphi'(\boldsymbol{x}) = 1 - k'(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x}) - k(\boldsymbol{x})f'(\boldsymbol{x})$$

且 $|\varphi'(\boldsymbol{x})|$ 在根 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 附近越小, 其局部收敛速度就越快, 故令

$$\varphi'(\bar{\boldsymbol{x}}) = 1 - k'(\bar{\boldsymbol{x}})f(\bar{\boldsymbol{x}}) - k(\bar{\boldsymbol{x}})f'(\bar{\boldsymbol{x}}) = 1 - k(\bar{\boldsymbol{x}})f'(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$$

若 $f'(\bar{\boldsymbol{x}}) \neq 0$ (即 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 不是 $f(\boldsymbol{x}) = 0$ 的重根), 则

$$k(\bar{\boldsymbol{x}}) = 1/f'(\bar{\boldsymbol{x}})$$

因此, 可取 $k(\boldsymbol{x}) = 1/f'(\boldsymbol{x})$ 代入$\varphi(\boldsymbol{x})$, 得

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - \frac{f(\boldsymbol{x})}{f'(\boldsymbol{x})}$$

Newton迭代法

定理: 设方程 $f(\boldsymbol{x})=0$ 的根为 $\bar{\boldsymbol{x}}$, 且 $f'(\bar{\boldsymbol{x}})\neq 0$, 则迭代法

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k-\frac{f\left(\boldsymbol{x}_k\right)}{f'\left(\boldsymbol{x}_k\right)}, \quad (k=0,1,2,\cdots)$$

至少是平方收敛, 称为 Newton 迭代法。

由于在 Newton 迭代法中, 需要利用导数 $f'(\boldsymbol{x})$, 有时不方便。若利用近似等式

$$f'\left(\boldsymbol{x}_k\right)\approx\frac{f\left(\boldsymbol{x}_k\right)-f\left(\boldsymbol{x}_{k-1}\right)}{\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1}}$$

得

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k-\frac{f\left(\boldsymbol{x}_k\right)}{f\left(\boldsymbol{x}_k\right)-f\left(\boldsymbol{x}_{k-1}\right)}\left(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1}\right), \quad (k=0,1,2,\cdots)$$

称为弦截法。

例题

例：用 Newton 法和弦截法分别计算方程

$$x^3 - x - 1 = 0$$

在 $x = 1.5$ 附近的根 $\bar{\boldsymbol{x}}$。

例题

例：用 Newton 法和弦截法分别计算方程

$$x^3 - x - 1 = 0$$

在 $x = 1.5$ 附近的根 $\bar{\boldsymbol{x}}$。

解:（1）使用Newton法, 取 $x_0 = 1.5$, 迭代公式:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^3 - x_k - 1}{3x_k^2 - 1}$$

因此

$$x_1 = x_0 - \frac{x_0^3 - x_0 - 1}{3x_0^2 - 1} = 1.5 - \frac{1.5^3 - 1.5 - 1}{3 \times 1.5^2 - 1} \approx 1.34783$$

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1^3 - x_1 - 1}{3x_1^2 - 1} \approx 1.32520$$

$$x_3 = x_2 - \frac{x_2^3 - x_2 - 1}{3x_2^2 - 1} \approx 1.32472$$

$$x_4 = x_3 - \frac{x_3^3 - x_3 - 1}{3x_3^2 - 1} \approx 1.32472$$

例题

（2）使用弦截法, 取 $x_0 = 1.5, x_1 = 1.4$, 迭代公式

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1}) \\ &= x_k - \frac{x_k^3 - x_k - 1}{x_k^2 + x_{k-1}x_k + x_{k-1}^2 - 1} \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 - \frac{x_1^3 - x_1 - 1}{x_1^2 + x_0x_1 + x_0^2 - 1} \approx 1.33522 \\ x_3 &= x_2 - \frac{x_2^3 - x_2 - 1}{x_2^2 + x_1x_2 + x_1^2 - 1} \approx 1.32541 \end{aligned}$$

例题

(3) 取 $x_0=0$, 使用 Newton 法计算方程的根。利用

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f\left(x_k\right)}{f'\left(x_k\right)}=x_k-\frac{x_k^3-x_k-1}{3x_k^2-1}$$

进行迭代计算, 得

$$x_1=-1, x_2=-0.5, x_3\approx 0.33, x_4\approx -1.44$$

可见结果偏离所求的根, 且可能不收敛。

因此， Newton 法收敛与否与初始值有关。

改进Newton法

在 Newton 法中，为了防止迭代发散，增加一个条件

$$|f(x_{k+1})| < |f(x_k)|$$

为了使 $|f(x_k)|$ 满足这种单调性, 引入常数 $\lambda \in (0,1]$, 迭代公式

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

称为 Newton 下山法， λ 称为下山因子。

在 Newton 下山法中, 下山因子可采用试算法, 如取

$$\lambda = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \cdots$$

改进Newton法

for $k = 1, 2 \cdots$
    $\lambda = 1$
    for $p = 1, 2, \cdots$
        $x_{k+1} = x_k - \lambda \frac{f(x_k)}{f'(x_{k-1})}$
        if $|f(x_{k+1})| < |f(x_k)|$
            break
        else
            $\lambda = \frac{\lambda}{2}$
        end
    end
    if $|f(x_k)| < \epsilon$
        break
    end
end

多根区间上的逐次逼近法

多根区间上的逐次逼近法方程 $f(x) = 0$ 在多根区间 $[a, b]$ 上分两种情况:

1. 均为单根
2. 有重根

二分法

$[a, b]$ 是 $f(x)=0$ 仅有单根的多根区间

1. 求单根区间

设 $f(x)=0$ 在 $[a, b]$ 上有 m 个根, 将 $[a, b]$ 分成 n 个小区间

$$\left[b_0, b_1\right],\left[b_1, b_2\right], \cdots,\left[b_{n-1}, b_n\right], b_0=a, b_n=b$$

计算 $f\left(b_i\right)(i=1,2, \cdots, n)$ 的值。

若 $f\left(b_i\right) f\left(b_{i+1}\right)<0$, 则 $f(x)=0$ 在 $\left[b_i, b_{i+1}\right]$ 上至少有一个根。

若这样的有根区间少于根的个数, 则将这些区间继续对分, 对分点为 $b_{i+1/2}$, 计算 $f\left(b_{i+1/2}\right)$, 再搜索有根区间, 直到有根区间的个数是 m 为止。

二分法

2. 在单根区间 $[c, d]$ 上求根

$f(c)f(d) < 0$, 将 $[c, d]$ 对分, 设对分点 $x_0 = \frac{c+d}{2}$ 计算 $f(x_0)$, 若 $f(x_0)$ 与 $f(c)$ 同号, 则令 $c_1 = x_0, d_1 = d$; 否则令 $c_1 = c, d_1 = x_0$ 。在新的有根区间 $[c_1, d_1]$ 中, 利用上述对分方法重复进行得到新的有根区间 $[c_2, d_2]$, 继续下去得有根区间 $[c_n, d_n]$, 其长度

$$d_n - c_n = \frac{d-c}{2^n} \to 0$$

因此, 当 n 足够大时, $d_n - c_n$ 可达到根的精度要求, 则

$$x_n = \frac{d_n - c_n}{2}$$

可作为根的近似值。以上求根的方法称为二分法。

几何解释?

例题

例：利用二分法求

$$f(x) = x^2 + 2x - 1 = 0$$

在 $[0, 1]$ 中的根。

例题

例：利用二分法求

$$f(x) = x^2 + 2x - 1 = 0$$

在 $[0,1]$ 中的根。

解: 因 $f(0) = -1 < 0, f(1) = 2 > 0$, 所以 $f(x)$ 在 $[0,1]$ 中有根。

下面利用二分法求根。将有根区间 $[0,1]$ 二等分, 得 $[0,0.5],[0.5,1]$ 。因

$$f(0.5) = 0.25 > 0$$

故 $f(x)$ 在 $[0,0.5]$ 中有根。

因

$$f(0.25) = -0.435 < 0$$

故 $f(x)$ 在 $[0.25,0.5]$ 中有根。

上述过程重复下去, 可得根的近似值。